Quantentheorie II

5.12.2023

Orts- und Impulsdarstellung

	Ortsdarstellung in 3D (*für 1D: „hoch 3“ weglassen*)	Wellenzahl- bzw. Impulsdarstellung in 3D (*für 1D: „hoch 3“ weglassen*)
Ortsbasis	$\langle\vec r\|\vec r'\rangle = \varphi_r(\vec r) = \delta(\vec r-\vec r')$ … Orthogonalität	$\langle\vec k\|\vec r\rangle = \varphi_r(\vec k) = \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^3}} e^{-i\vec k\cdot\vec r}$ $\langle\vec p\|\vec r\rangle = \varphi_r(\vec p) = \frac{1}{\sqrt{(2\pi\hbar)^3}} e^{-i\frac{\vec p}{\hbar}\vec r}$
Impulsbasis	$\langle\vec r\|\vec k\rangle = \varphi_k(\vec r) = \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^3}} e^{+i\vec k\cdot\vec r}$ $\langle\vec r\|\vec p\rangle = \varphi_p(\vec r) = \frac{1}{\sqrt{(2\pi\hbar)^3}} e^{+i\frac{\vec p}{\hbar}\vec r}$	$\left.\begin{array}{l}\langle\vec k\|\vec k'\rangle = \varphi_k(\vec k) = \delta(\vec k-\vec k')\\ \langle\vec p\|\vec p'\rangle = \varphi_p(\vec p) = \delta(\vec p-\vec p')\end{array}\right\}$ … Orthogonalität
Vollständigkeit	$\int_{-\infty}^{\infty}\|\vec r\rangle\langle\vec r'\|\,d^3r = \mathbb{1}$	$\int_{-\infty}^{\infty}\|\vec k\rangle\langle\vec k'\|\,d^3k = \int_{-\infty}^{\infty}\|\vec p\rangle\langle\vec p'\|\,d^3p = \mathbb{1}$
Ortsoperator	$\hat{\vec r} = \vec r \Longrightarrow \langle\vec r\|\hat{\vec r}\|\vec r'\rangle = \vec r\,\delta(\vec r-\vec r')$	$\hat{\vec r} = i\vec\nabla_k \Longrightarrow \langle\vec k\|\hat{\vec r}\|\vec k'\rangle = i\vec\nabla_k\,\delta(\vec k-\vec k')$ $\hat{\vec r} = i\hbar\vec\nabla_p \Longrightarrow \langle\vec p\|\hat{\vec r}\|\vec p'\rangle = i\hbar\vec\nabla_p\,\delta(\vec p-\vec p')$
Impulsoperator	$\hat{\vec p} = \frac{\hbar}{i}\vec\nabla \Longrightarrow \langle\vec r\|\hat{\vec p}\|\vec r'\rangle = \frac{\hbar}{i}\vec\nabla\,\delta(\vec r-\vec r')$	$\hat{\vec p} = \hbar\vec k \Longrightarrow \langle\vec k\|\hat{\vec p}\|\vec k'\rangle = \hbar\vec k\,\delta(\vec k-\vec k')$
Potential	$\langle\vec r\|\,\mathrm{V}(\vec r)\,\|\vec r'\rangle = \mathrm{V}(\vec r)\,\delta(\vec r-\vec r')$	$\langle\vec k\|\,\mathrm{V}(\vec r)\,\|\vec k'\rangle = \frac{1}{(2\pi)^3}\tilde{\mathrm{V}}(\vec k-\vec k') = \frac{1}{(2\pi)^3}\int_{-\infty}^{\infty} e^{i(\vec k-\vec k')\cdot\vec r}\,d^3r$
Deltafunktion	$\delta(\vec r-\vec r') = \frac{1}{(2\pi)^3}\int_{-\infty}^{\infty} e^{i\vec k\cdot(\vec r-\vec r')}\,d^3k$ $\delta(\vec r-\vec r') = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3}\int_{-\infty}^{\infty} e^{i\frac{\vec p}{\hbar}(\vec r-\vec r')}\,d^3p$	$\delta(\vec k-\vec k') = \frac{1}{(2\pi)^3}\int_{-\infty}^{\infty} e^{i(\vec k-\vec k')\cdot\vec r}\,d^3r$ $\delta(\vec p-\vec p') = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3}\int_{-\infty}^{\infty} e^{i\frac{\vec p-\vec p'}{\hbar}\cdot\vec r}\,d^3r$
Wellenfunktion	$\langle\vec r\|\psi\rangle = \psi(\vec r)$	$\langle\vec k\|\psi\rangle = \psi(\vec k)\,;\,\langle\vec p\|\psi\rangle = \psi(\vec p)$
Schrödinger-gleichung	$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\langle\vec r\|\psi\rangle = \left(-\frac{\hbar^2}{2}\vec\nabla^2 + \mathrm{V}(\vec r)\right)\langle\vec r\|\psi\rangle$	$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\langle\vec k\|\psi\rangle = \frac{\hbar^2k^2}{2m}\langle\vec k\|\psi\rangle + \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^3}}\int_{-\infty}^{\infty}\tilde{\mathrm{V}}(\vec k-\vec k')\,\langle\vec k'\|\psi\rangle\,d^3k'$
Harm. Osz. 1D	$\hat H = \frac{\hat p^2}{2m} + \frac12 m\omega^2x^2 = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac12 m\omega^2x^2$	$\hat H = \frac{\hat p^2}{2m} + \frac12 m\omega^2\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial p}\right)^2 = \frac{\hbar^2}{2m}\vec\nabla^2 - \frac12 m\omega^2\hbar^2\frac{\partial^2}{\partial p^2}$

Transformationen

$\psi(\vec k)\to\psi(\vec r)$	$\psi(\vec r) = \int_{-\infty}^{\infty}\langle\vec r\|\vec k\rangle\langle\vec k\|\psi\rangle\,d^3k = \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^3}}\int_{-\infty}^{\infty} e^{+i\vec k\cdot\vec r}\;\psi(\vec k)\,d^3k$
$\psi(\vec r)\to\psi(\vec k)$	$\psi(\vec k) = \int_{-\infty}^{\infty}\langle\vec k\|\vec r\rangle\langle\vec r\|\psi\rangle\,d^3k = \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^3}}\int_{-\infty}^{\infty} e^{-i\vec k\cdot\vec r}\;\psi(\vec r)\,d^3r$

Schrödingergleichung in Matrix-Darstellung

Sei $\hat A$ ein Operator mit diskretem Spektrum und $\{\varphi_n\}$ eine VONS von $\hat A$, so dass $\hat A|\varphi_n\rangle = a_n|\varphi_n\rangle$.

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\Psi(t)\rangle = \hat H|\Psi(t)\rangle\;\Big|\;\langle\varphi_n| \Longrightarrow i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\langle\varphi_n|\Psi(t)\rangle = \langle\varphi_n|\hat H|\Psi(t)\rangle = \sum\nolimits_m\underbrace{\langle\varphi_n|\hat H|\varphi_m\rangle}_{H_{nm}}\underbrace{\langle\varphi_m|\Psi(t)\rangle}_{\Psi_m(t)} = \sum\nolimits_m H_{nm}\,\Psi_m(t) \Longrightarrow \boxed{i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\underline{\Psi}(t) = \underline{\underline{H}}\,\underline{\Psi}(t)}$$

Trafo diskret:	$\hat A$-Darstellung mit $\hat A|\varphi_n\rangle = a_n|\varphi_n\rangle$: $\hbar\frac{\partial}{\partial t}\underline{\Psi}(t) = \underline{\underline{H}}\,\underline{\Psi}(t)$ $\hat B$-Darstellung mit $\hat B|\chi_n\rangle = b_n|\chi_n\rangle$: $\hbar\frac{\partial}{\partial t}\underline{\tilde\Psi}(t) = \underline{\underline{\tilde H}}\,\underline{\tilde\Psi}(t)$	$\underline{\tilde\Psi}(t) = \sum_m U_{nm}\,\Psi_m(t) = \underline{\underline{U}}\,\underline{\Psi}(t)$ $\underline{\underline{\tilde H}} = \underline{\underline{U}}\,\underline{\underline{H}}\,\underline{\underline{U}}^\dagger$ mit $\underline{\underline{U}}$ unitär, so dass $\underline{\underline{U}}^\dagger = \underline{\underline{U}}^{-1} \Longrightarrow \underline{\underline{U}}^\dagger\underline{\underline{U}} = \mathbb{1}$ (Norm erhalten)
Trafo kontinuierl.:	$\hat A$-Darstellung mit $\langle\vec r|\hat A|\vec r'\rangle = \vec a\,\delta(\vec r-\vec r')$ $\hat B$-Darstellung mit $\langle\vec k|\hat B|\vec k'\rangle = \vec b\,\delta(\vec k-\vec k')$	$\underline{\tilde\Psi}(\vec k,t) = \int_{-\infty}^{\infty}\underbrace{\frac{1}{\sqrt{(2\pi\hbar)^3}}e^{-i\vec k\cdot\vec r}}_{\underline{\underline{U}}}\,\underline{\Psi}(\vec r,t)\,d^3r$

Zeitentwicklung im Schrödinger-Bild: Zustandsvektoren zeitabhängig, Operatoren zeitunabhängig

Zeitentwicklungsoperator $\hat{\mathrm{U}}(t)$	$|\Psi_S(t)\rangle = \hat{\mathrm{U}}(t,t_0)|\Psi_S(t_0)\rangle\,\big|\,t_0 \overset{!}{=} 0 \Longrightarrow |\Psi_S(t)\rangle = \hat{\mathrm{U}}(t)\,|\Psi_S(0)\rangle$ … (1)	kommutiert mit H: $\left[\hat U(t)\,,\hat H\right] = 0$

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\Psi(t)\rangle = \hat H|\Psi(t)\rangle\;\Big|\;|\Psi(t)\rangle = \hat{\mathrm{U}}(t)|\Psi(0)\rangle \Longrightarrow i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\hat{\mathrm{U}}(t)\,|\Psi(0)\rangle = \hat H\,\hat{\mathrm{U}}(t)\,|\Psi(t)\rangle \Longrightarrow \frac{\partial}{\partial t}\hat{\mathrm{U}}(t)\,|\Psi(0)\rangle - \frac{1}{i\hbar}\hat H\,\hat{\mathrm{U}}(t)\,|\Psi(0)\rangle = 0\;\Big|\;:|\Psi(0)\rangle \Longrightarrow$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\hat{\mathrm{U}}(t) - \frac{\hat H}{i\hbar}\hat{\mathrm{U}}(t) = 0 \Longrightarrow \boxed{\hat{\mathrm{U}}(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat Ht} = \sum\nolimits_{k=0}^{\infty}\left(-\frac{it}{\hbar}\right)^k\frac{\hat H^k}{k!}}$$

BWGL Erwartungswerte (gilt in allen Bildern):	$\frac{d}{dt}\langle\hat q_i(t)\rangle = \frac{1}{i\hbar}\langle[\hat q_i(t)\,,\hat H]\rangle = \langle\frac{\partial}{\partial\hat p_i}\hat H\rangle\,;\;\frac{d}{dt}\hat p_i(t) = \frac{1}{i\hbar}\langle[\hat p_i(t)\,,\hat H]\rangle = \langle-\frac{\partial}{\partial\hat q_i}\hat H\rangle$
Exponent von Superposition aus Pauli-Matrizen:	$e^{\pm i\alpha\underline{\underline{(\vec n\cdot\vec\sigma)}}} = \mathbb{1}\cos(\alpha) \pm i\underline{\underline{(\vec n\cdot\vec\sigma)}}\sin(\alpha)$ mit $|\vec n|^2 = 1$; $\vec\sigma = \begin{pmatrix}\sigma_x\\ \sigma_y\\ \sigma_z\end{pmatrix}$; $\underline{\underline{(\vec n\cdot\vec\sigma)}} = n_1\sigma_x + n_2\sigma_y + n_3\sigma_z$

Zeitentwicklung im Heisenberg-Bild: Zustandsvektoren zeitunabhängig, Operatoren zeitabhängig

zeitunabhängiger Zustandsvektor $\lvert\Psi_H\rangle$ durch Umkehrung von (1)	$\lvert\Psi(0)\rangle = \hat{U}^{-1}(t)\lvert\Psi(t)\rangle = \hat{U}^\dagger(t)\lvert\Psi(t)\rangle = \lvert\Psi_H\rangle \Rightarrow \boxed{\lvert\Psi_H\rangle = \lvert\Psi_S(0)\rangle}$
zeitabhängiger Operator:	$\hat A_H(t) = \hat U^\dagger(t)\,\hat A_S\,\hat U(t) = e^{\frac{i}{\hbar}\hat H t}\hat A_S e^{-\frac{i}{\hbar}\hat H t}$ Hamilton: $\hat H_H = \hat U^\dagger \hat H_S \hat U = \hat U^\dagger \hat U \hat H_S = \hat H_S$
Bewegungsgleichung	$\frac{d}{dt}\hat A_H(t) = \frac{\partial}{\partial t}e^{\frac{i}{\hbar}\hat Ht}\hat A_S e^{-\frac{i}{\hbar}\hat Ht} + \underbrace{e^{\frac{i}{\hbar}\hat Ht}\frac{\partial}{\partial t}\hat A_S e^{-\frac{i}{\hbar}\hat Ht}}_{i.A.=0,\ (\hat A_S\ zeitunabh.)} + e^{\frac{i}{\hbar}\hat Ht}\hat A_S\frac{\partial}{\partial t}e^{-\frac{i}{\hbar}\hat Ht} = \frac{i}{\hbar}\hat H\underbrace{e^{\frac{i}{\hbar}\hat Ht}}_{\hat U^\dagger(t)}\hat A_S\underbrace{e^{-\frac{i}{\hbar}\hat Ht}}_{\hat U(t)} - \frac{i}{\hbar}\underbrace{e^{\frac{i}{\hbar}\hat Ht}}_{\hat U^\dagger(t)}\hat A_S\hat H\underbrace{e^{-\frac{i}{\hbar}\hat Ht}}_{\hat U(t)}$ $\frac{d}{dt}\hat A_H(t) = \frac{i}{\hbar}(\hat H\hat U^\dagger\hat A_S\hat U - \hat U^\dagger\hat A_S\hat U\hat H) = \frac{i}{\hbar}(\hat H\,\hat A_H(t) - \hat A_H(t)\,\hat H) = \frac{i}{\hbar}[\hat H,\hat A_H(t)] \Rightarrow \boxed{\frac{d}{dt}\hat A_H(t) = \frac{1}{i\hbar}[\hat A_H(t),\hat H]}$
Hamilton'sche BWGL	$\frac{d}{dt}\hat q_i(t) = \frac{1}{i\hbar}[\hat q_i(t),\hat H] = \frac{\partial}{\partial\hat p_i}\hat H;\ \frac{d}{dt}\hat p_i(t) = \frac{1}{i\hbar}[\hat p_i(t),\hat H] = -\frac{\partial}{\partial\hat q_i}\hat H$
BWGL Erwartungswerte	$\frac{d}{dt}\langle\hat q_i(t)\rangle = \frac{1}{i\hbar}\langle[\hat q_i(t),\hat H]\rangle = \langle\frac{\partial}{\partial\hat p_i}\hat H\rangle;\ \frac{d}{dt}\hat p_i(t) = \frac{1}{i\hbar}\langle[\hat p_i(t),\hat H]\rangle = \langle-\frac{\partial}{\partial\hat q_i}\hat H\rangle$
Ehrenfest Theorem	$\langle\frac{\partial}{\partial p}\hat H(q,p)\rangle = \frac{\partial}{\partial\langle p\rangle}\hat H(\langle q\rangle,\langle p\rangle);\ \langle\frac{\partial}{\partial q}\hat H(q,p)\rangle = \frac{\partial}{\partial\langle q\rangle}\hat H(\langle q\rangle,\langle p\rangle)$ wenn $\hat V(q)$ höchstens Potenzen vom Grad 2 hat

Zeitentwicklung im Wechselwirkungs-Bild: Zustandsvektoren und Operatoren zeitabhängig

Aufspaltung $\hat H$ in zeitunabhängiges $\hat H_0$ und zeitabh. Störung $\hat V(t)$	$\hat H = \hat H_0 + \hat V(t)$ Lösung $\hat H_0$: $\hat H_0\lvert\varphi_n\rangle = \varepsilon_n\lvert\varphi_n\rangle;\ \hat U_0(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat H_0 t}$
Intermediärer Zustandsvektor beinhaltet nur Zeitabh. von $\hat V(t)$	$\lvert\Psi_I(t)\rangle = \hat U_0^\dagger(t)\lvert\Psi_S(t)\rangle$ *(Zeitabh. durch $\hat H_0$ wird von $\hat U_0^\dagger(t)$ entfernt)*
Operator:	$\hat A_I(t) = \hat U_0^\dagger(t)\,\hat A_S\,\hat U_0(t) = e^{\frac{i}{\hbar}\hat H_0 t}\hat A_S e^{-\frac{i}{\hbar}\hat H_0 t}$
Schrödinger-gleichung im Wechsel-wirkungsbild (Herleitung)	$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\lvert\Psi_S(t)\rangle = \hat H_S\lvert\Psi_S(t)\rangle \,\big\vert\, \hat U_0^\dagger\cdot \Rightarrow \underbrace{i\hbar\hat U_0^\dagger\frac{\partial}{\partial t}\lvert\Psi_S(t)\rangle}_{LI} = \underbrace{\hat U_0^\dagger\hat H_S\lvert\Psi_S(t)\rangle}_{RE}$ $LI = i\hbar\hat U_0^\dagger\frac{\partial}{\partial t}(\hat U_0\hat U_0^\dagger\lvert\Psi_S(t)\rangle) = i\hbar\hat U_0^\dagger\frac{\partial}{\partial t}(\hat U_0\lvert\Psi_I(t)\rangle) = i\hbar\hat U_0^\dagger\left(\frac{\partial}{\partial t}\hat U_0 + \hat U_0\frac{\partial}{\partial t}\right)\lvert\Psi_I(t)\rangle = i\hbar\hat U_0^\dagger\left(\frac{1}{i\hbar}\hat H_0\hat U_0 + \hat U_0\frac{\partial}{\partial t}\right)\lvert\Psi_I(t)\rangle$ $LI = \left(i\hbar\frac{1}{i\hbar}\hat U_0^\dagger\hat U_0\hat H_0 + i\hbar\hat U_0^\dagger\hat U_0\frac{\partial}{\partial t}\right)\lvert\Psi_I(t)\rangle = \left(\hat H_0 + i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\right)\lvert\Psi_I(t)\rangle$ ... (1) $RE = \hat U_0^\dagger\hat H\hat U_0\hat U_0^\dagger\lvert\Psi_S(t)\rangle = \hat U_0^\dagger(\hat H_0 + \hat V(t))\hat U_0\lvert\Psi_I(t)\rangle = (\hat U_0^\dagger\hat H_0\hat U_0 + \hat U_0^\dagger\,\hat V(t)\,\hat U_0)\lvert\Psi_I(t)\rangle = (\hat H_0 + \hat V_I(t))\lvert\Psi_I(t)\rangle$ ... (2) $(1) = (2) \Rightarrow \left(\hat H_0 + i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\right)\lvert\Psi_I(t)\rangle = (\hat H_0 + \hat V_I(t))\lvert\Psi_I(t)\rangle \Rightarrow \boxed{i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\lvert\Psi_I(t)\rangle = \hat V_I(t)\,\lvert\Psi_I(t)\rangle}$ mit $\hat V_I(t) = \hat U_0^\dagger\,\hat V(t)\,\hat U_0$
Bewegungs-gleichung	$\hat A_I(t) = \hat U_0^\dagger\hat A_S\hat U_0 \,\big\vert\, i\hbar\frac{d}{dt} \Rightarrow i\hbar\frac{d}{dt}\hat A_I(t) = i\hbar\frac{d}{dt}(\hat U_0^\dagger\hat A_S\hat U_0) \,\big\vert\, \hat U_0 = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat H_0 t} \Rightarrow i\hbar\frac{d}{dt}\hat A_I(t) = i\hbar\frac{d}{dt}\left(e^{\frac{i}{\hbar}\hat H_0 t}\hat A_S e^{-\frac{i}{\hbar}\hat H_0 t}\right)$ $i\hbar\frac{d}{dt}\hat A_I(t) = i\hbar\left(\left(\frac{\partial}{\partial t}e^{\frac{i}{\hbar}\hat H_0 t}\right)\hat A_S e^{-\frac{i}{\hbar}\hat H_0 t} + e^{\frac{i}{\hbar}\hat H_0 t}\left(\frac{\partial}{\partial t}\hat A_S\right)e^{-\frac{i}{\hbar}\hat H_0 t} + e^{\frac{i}{\hbar}\hat H_0 t}\hat A_S\left(\frac{\partial}{\partial t}e^{-\frac{i}{\hbar}\hat H_0 t}\right)\right)$ $i\hbar\frac{d}{dt}\hat A_I(t) = i\hbar\left(\frac{i}{\hbar}\hat H_0 e^{\frac{i}{\hbar}\hat H_0 t}\hat A_S e^{-\frac{i}{\hbar}\hat H_0 t} + e^{\frac{i}{\hbar}\hat H_0 t}\frac{d}{dt}\hat A_S e^{-\frac{i}{\hbar}\hat H_0 t} - \frac{i}{\hbar}e^{\frac{i}{\hbar}\hat H_0 t}\hat A_S\hat H_0 e^{-\frac{i}{\hbar}\hat H_0 t}\right)$ $i\hbar\frac{d}{dt}\hat A_I(t) = i\hbar\left(-\frac{1}{i\hbar}\hat H_0 e^{\frac{i}{\hbar}\hat H_0 t}\hat A_S e^{-\frac{i}{\hbar}\hat H_0 t} + \frac{1}{i\hbar}e^{\frac{i}{\hbar}\hat H_0 t}\hat A_S\hat H_0 e^{-\frac{i}{\hbar}\hat H_0 t} + e^{\frac{i}{\hbar}\hat H_0 t}\frac{\partial}{\partial t}\hat A_S e^{-\frac{i}{\hbar}\hat H_0 t}\right) \,\big\vert\, e^{-\frac{i}{\hbar}\hat H_0 t} = \hat U_0$ $i\hbar\frac{d}{dt}\hat A_I(t) = \hat U_0^\dagger\hat A_S\hat H_0\hat U_0 - \hat H_0\hat U_0^\dagger\hat A_S\hat U_0 + i\hbar\hat U_0^\dagger\frac{\partial}{\partial t}\hat A_S\hat U_0 \,\big\vert\, \hat H_0\hat U_0 = \hat U_0\hat H_0$ $i\hbar\frac{d}{dt}\hat A_I(t) = \hat U_0^\dagger\hat A_S\hat U_0\hat H_0 - \hat H_0\hat U_0^\dagger\hat A_S\hat U_0 + i\hbar\hat U_0^\dagger\frac{\partial}{\partial t}\hat A_S\hat U_0 \,\big\vert\, \hat A_I = \hat U_0^\dagger\hat A_S\hat U_0$ $i\hbar\frac{d}{dt}\hat A_I(t) = \hat A_I\hat H_0 - \hat H_0\hat A_I + i\hbar\hat U_0^\dagger\frac{\partial}{\partial t}\hat A_S\hat U_0 \Rightarrow \boxed{\frac{d}{dt}\hat A_I(t) = \frac{1}{i\hbar}[\hat A_I(t),\hat H_0] + \underbrace{\hat U_0^\dagger\frac{\partial}{\partial t}\hat A_S\hat U_0}_{nur\ wenn\ \hat A_S\ zeitabh.}}$

Dichtematrix und Dichteoperator

Reiner Zustand: Intrinsische Wahr-scheinlichkeit p_n	$\langle\hat A\rangle = \langle\Psi\lvert\hat A\rvert\Psi\rangle = \sum_n\sum_m\overbrace{\langle\Psi\vert\varphi_n\rangle}^{c_n^*}\langle\varphi_n\lvert\hat A\rvert\varphi_m\rangle\overbrace{\langle\varphi_m\vert\Psi\rangle}^{c_m} = \sum_n\sum_m c_n^*\langle\varphi_n\lvert\hat A\rvert\varphi_m\rangle c_m = \sum_n\sum_m a_m\overbrace{\langle\varphi_n\vert\varphi_m\rangle}^{\delta_{nm}}c_n^* c_m$ $\langle\hat A\rangle = \sum_n\sum_m a_m\delta_{nm}c_n^* c_m \Rightarrow \boxed{\langle\hat A\rangle = \sum_n a_n c_n^* c_n = \sum_n a_n p_n}$
Dichtematrix $\underline{\underline{\rho}}$	$\langle\bar A\rangle = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^N\langle\Psi^{(i)}\lvert\hat A\rvert\Psi^{(i)}\rangle = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^N\sum_n\sum_m\overbrace{\langle\Psi^{(i)}\vert\varphi_n\rangle}^{c_n^{(i)*}}\langle\varphi_n\lvert\hat A\rvert\varphi_m\rangle\overbrace{\langle\varphi_m\vert\Psi^{(i)}\rangle}^{c_m^{(i)}} = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^N\sum_n\sum_m c_n^{(i)*}\langle\varphi_n\lvert\hat A\rvert\varphi_m\rangle c_m^{(i)}$ $\langle\bar A\rangle = \sum_n\sum_m\underbrace{\langle\varphi_n\lvert\hat A\rvert\varphi_m\rangle}_{A_{nm}}\underbrace{\frac{1}{N}\sum_{i=1}^N c_m^{(i)}c_n^{(i)*}}_{\rho_{mn}} \Rightarrow \boxed{\langle\bar A\rangle = \mathrm{Tr}\left(\underline{\underline{A}}\,\underline{\underline{\rho}}\right)}$ theoretisch: Summe über alle Teilchen: $\rho_{mn} = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^N c_m^{(i)}c_n^{(i)*}$ praktisch: Summe über alle Zust., gewichtet mit stat. Wahrsch. $\tilde p_j$: $\boxed{\rho_{mn} = \sum_i\tilde p_i c_m^{(i)}c_n^{(i)*} = \sum_i\tilde p_i\langle\varphi_m\vert\Psi^{(i)}\rangle\langle\Psi^{(i)}\vert\varphi_n\rangle}$ Diagonalelemente: ρ_{nn}... Mittlere Besetzung der Zustände $\lvert\varphi_n\rangle$ („populations"). Kohärenzelemente $\rho_{nm}; n \neq m$... beschreiben die Evolution der kohärenten Superpositionen („coherencies")
Eigenschaften	Reiner Zustand: $\rho^2 = \rho;\ \mathrm{Tr}(\rho^2) = 1$ Gemischter Zust.: $\rho^2 \neq \rho;\ \mathrm{Tr}(\rho^2) < 1$ Normierung: $\mathrm{Tr}(\rho) = 1$ selbstadjungiert (hermitesch) $\rho^\dagger = \rho; \rho_{12} = \rho_{21}^*;\ \forall\lambda_i\in\mathbb{R}$ sonstiges: positiv semidefinit $\xRightarrow{hermit}\langle\chi\lvert\rho\rvert\chi\rangle \geq 0$
Dichteoperator $\underline{\underline{\hat\rho}}$	$\boxed{\hat\rho = \sum_i\tilde p_i\lvert\Psi^{(i)}\rangle\langle\Psi^{(i)}\rvert}$ mit $\lvert\Psi^{(i)}\rangle = \sum_n c_n^{(i)}\lvert\varphi_n\rangle$ Anwendung: $\langle\varphi_m\lvert\hat\rho\rvert\varphi_n\rangle = \sum_i\tilde p_i\langle\varphi_m\vert\Psi^{(i)}\rangle\langle\Psi^{(i)}\vert\varphi_n\rangle = \tilde p_i c_m^{(i)}c_n^{(i)*}$
Wahrsch., dass Syst. in Zustand $\lvert\Psi_0\rangle$	reiner Zustand: $\boxed{\langle\hat P_0\rangle = \langle\Psi\lvert\hat P_0\rvert\Psi\rangle = \langle\Psi\vert\Psi_0\rangle\langle\Psi_0\vert\Psi\rangle = \lvert\langle\Psi_0\vert\Psi\rangle\rvert^2}$ gemischter Zustand: $\boxed{\overline{P_0} = \mathrm{Tr}(\hat P_0\rho)} = \mathrm{Tr}(\lvert\Psi_0\rangle\langle\Psi_0\rvert\rho) = \sum_i\tilde p_i\lvert\langle\Psi^{(i)}\vert\Psi_0\rangle\rvert^2$ (effektive Wahrscheinlichkeit)
Bloch-Vektor aus ρ	$s_x = 2\,\mathrm{Re}(\rho_{12});\ s_y = -2\,\mathrm{Im}(\rho_{12});\ s_y = \rho_{11} - \rho_{22}$

Kollaps nach der Messung:	reiner Zustand:	$\lvert\Psi\rangle \to \lvert\Psi'\rangle_{NN} = \lvert\Psi_0\rangle\langle\Psi_0\lvert\Psi\rangle = \hat{P}_0\lvert\Psi\rangle$ (nicht normiert) $\Longrightarrow$ $\boxed{\lvert\Psi'\rangle = \frac{\hat{P}_0\lvert\Psi\rangle}{\sqrt{\langle\Psi\lvert\hat{P}_0\hat{P}_0\lvert\Psi\rangle}} = \frac{\hat{P}_0\lvert\Psi\rangle}{\sqrt{\langle\Psi\lvert\hat{P}_0\lvert\Psi\rangle}} = \lvert\Psi_0\rangle}$
	gemischter Zust.	$\rho \to \rho'_{NN} = \sum_i \; \tilde{p}_i\hat{P}_0\lvert\Psi^{(i)}\rangle\langle\Psi^{(i)}\lvert\hat{P}_0 = \lvert\Psi_0\rangle\overline{P_0}\langle\Psi_0\rvert$ (nicht normiert) $\Longrightarrow$ $\rho' = \frac{\hat{P}_0^\dagger\rho\hat{P}_0}{\mathrm{Tr}\left(\hat{P}_0^\dagger\rho\hat{P}_0\right)} = \frac{\hat{P}_0\rho\hat{P}_0}{\mathrm{Tr}(\hat{P}_0\rho\hat{P}_0)} = \frac{\hat{P}_0\rho\hat{P}_0}{\mathrm{Tr}(\hat{P}_0\rho)} = \frac{\hat{P}_0\rho\hat{P}_0}{\overline{P_0}} \Longrightarrow \boxed{\rho' = \frac{\hat{P}_0\rho\hat{P}_0}{\mathrm{Tr}(\hat{P}_0\rho)} \text{ mit Projektor } \hat{P}_0 = \lvert\Psi_0\rangle\langle\Psi_0\rvert}$
Einfache Berechnung von $\langle\bar{A}\rangle$	(1) $\langle\bar{A}\rangle = \mathrm{Tr}\left(\underline{\underline{\hat{A}}}\underline{\underline{\rho}}\right)$ ist einfach zu berechnen, wenn $\hat{\rho} = \sum_i \; \tilde{p}_i\lvert\Psi^{(i)}\rangle\langle\Psi^{(i)}\rvert$ diagonal ist. Dies ist der Fall, wenn $\lvert\Psi^{(i)}\rangle = \lvert\varphi_n\rangle$ eine Basis ist. Dann ist $\langle\bar{A}\rangle = \mathrm{Tr}\left(\underline{\underline{\hat{A}}}\underline{\underline{\rho}}\right) = \sum_i A_{ii}\rho_{ii}$ (2) $\langle\bar{A}\rangle = \mathrm{Tr}\left(\underline{\underline{\hat{A}}}\underline{\underline{\rho}}\right)$ ist einfach zu berechnen, wenn $\hat{\rho}$ auch in der Eigenbasis von $\underline{\underline{\hat{A}}}$ diagonal ist.	
Intensität:	z.B. nach Stern-Gerlach-Apparat: $I' = \mathrm{Tr}(\rho'_{NN}) = \mathrm{Tr}\left(\hat{P}_1\rho_0\hat{P}_1\right)$	Strahlen mischen: $\hat{P}_{misch} = \hat{P}_1 + \hat{P}_2;\; \rho' = \frac{\hat{P}_{misch}\rho\hat{P}_{misch}}{\mathrm{Tr}(\hat{P}_{misch}\rho)}$

Zeitentwicklung der Dichtematrix

Schrödingerbild: $\rho(t)$ ersetzt bei gemischten Zuständen $\Psi(t)$ und ist daher im Schrödingerbild zeitabhängig.	
Zeitenwicklung:	$\rho_S(t) = \sum_i \; \tilde{p}_i\hat{U}\lvert\Psi^{(i)}(0)\rangle\langle\Psi^{(i)}(0)\rvert\hat{U}^\dagger \Longrightarrow \boxed{\rho_S(t) = \hat{U}\rho_H\hat{U}^\dagger}$ (Achtung; daher $\hat{U}^\dagger$ rechts!)
Liouville-von-Neumann-Gleichung, Schrödingerbild	$\boxed{\frac{d}{dt}\hat{\rho}_S(t) = \frac{1}{i\hbar}[\hat{H},\hat{\rho}_S(0)] = \frac{1}{i\hbar}[\hat{H},\hat{\rho}_H]}$. Beweis: SGL: $i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\lvert\Psi\rangle = \hat{H}\lvert\Psi\rangle \Longrightarrow \frac{\partial}{\partial t}\lvert\Psi\rangle = \frac{1}{i\hbar}\hat{H}\lvert\Psi\rangle$ ... (1) $\frac{d}{dt}\hat{\rho} = \frac{\partial}{\partial t}\sum_i \; p_i\lvert\Psi^{(i)}\rangle\langle\Psi^{(i)}\rvert = \sum_i \; \tilde{p}_i\left(\frac{\partial}{\partial t}\lvert\Psi^{(i)}\rangle\langle\Psi^{(i)}\rvert + \lvert\Psi^{(i)}\rangle\frac{\partial}{\partial t}\langle\Psi^{(i)}\rvert\right) \overset{(1)}{\Longrightarrow}$ $\frac{d}{dt}\hat{\rho} = \sum_i \; p_i\left(\frac{1}{i\hbar}\hat{H}\lvert\Psi^{(i)}\rangle\langle\Psi^{(i)}\rvert + \lvert\Psi^{(i)}\rangle\langle\Psi^{(i)}\rvert\left(-\frac{1}{i\hbar}\hat{H}\right)\right) = \frac{1}{i\hbar}\hat{H}\hat{\rho} - \frac{1}{i\hbar}\hat{\rho}\hat{H} = \frac{1}{i\hbar}[\hat{H},\hat{\rho}]$
Heisenbergbild: ρ_H ersetzt bei gemischten Zuständen Ψ_H und ist daher im Heisenbergbild zeitunabhängig.	
Zeitenwicklung:	$\boxed{\rho_H = \hat{\rho}_S(0)} = \sum_i \; p_i\lvert\Psi_S^{(i)}(0)\rangle\langle\Psi_S^{(i)}(0)\rvert \Longrightarrow i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\hat{\rho}_H = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\hat{\rho}_S(0) \Longrightarrow \boxed{\frac{\partial}{\partial t}\hat{\rho}_H = 0}$
Wechselwirkungsbild: $\rho_I(t)$ ersetzt $\Psi_H(t)$ und ist im Wechselwirkungsbild zeitabhängig.	
Aufspaltung $\hat{H}$ in zeitunabhängiges $\hat{H}_0$ und zeitabh. Störung $\hat{V}(t)$	$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}(t)$ | Lösung $\hat{H}_0$: $\hat{H}_0\lvert\varphi_n\rangle = \varepsilon_n\lvert\varphi_n\rangle;\; \hat{U}_0(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t}$
Intermediäre Dichtematrix beinhaltet nur Zeitabhängigkeit v. $\hat{V}(t)$	$\hat{\rho}_I(t) = \hat{U}_0^\dagger(t)\,\hat{\rho}_s(t)\,\hat{U}_0(t)$ *(Zeitabh. durch $\hat{H}_0$ wird von $\hat{U}_0^\dagger(t)$ entfernt)*
Liouville-von-Neumann-Gleichung im WW-Bild:	$\frac{d}{dt}\hat{\rho}_I(t) = \frac{d}{dt}\left(\hat{U}_0^\dagger\hat{\rho}_S\hat{U}_0\right) = \frac{d}{dt}\hat{U}_0^\dagger\hat{\rho}_S\hat{U}_0 + \hat{U}_0^\dagger\hat{\rho}_S\frac{d}{dt}\hat{U}_0 + \hat{U}_0^\dagger\frac{d}{dt}\hat{\rho}_S\hat{U}_0 \;\Big\vert\; \hat{U}_0 = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t}$ $\frac{d}{dt}\hat{\rho}_I(t) = \frac{d}{dt}e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t}\,\hat{\rho}_S e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t} + e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t}\,\hat{\rho}_S\frac{d}{dt}e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t} + e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t}\,\frac{d}{dt}\hat{\rho}_S e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t}$ $\frac{d}{dt}\hat{\rho}_I(t) = \frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t}\,\hat{\rho}_S e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t} - \frac{i}{\hbar}e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t}\,\hat{\rho}_S\hat{H}_0 e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t} + e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t}\,\frac{d}{dt}\hat{\rho}_S e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t} \;\Big\vert\; e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t} = \hat{U}_0$ $\frac{d}{dt}\hat{\rho}_I(t) = \frac{i}{\hbar}\hat{H}_0\hat{U}_0^\dagger\,\hat{\rho}_S\hat{U}_0 - \frac{i}{\hbar}\hat{U}_0^\dagger\,\hat{\rho}_S\hat{H}_0\hat{U}_0 + \hat{U}_0^\dagger\,\frac{d}{dt}\hat{\rho}_S\hat{U}_0 = -\frac{1}{i\hbar}\hat{H}_0\hat{U}_0^\dagger\,\hat{\rho}_S\hat{U}_0 + \frac{1}{i\hbar}\hat{H}_0\hat{U}_0^\dagger\,\hat{\rho}_S\hat{U}_0 + \hat{U}_0^\dagger\,\frac{d}{dt}\hat{\rho}_S\hat{U}_0 \;\Big\vert\; \cdot i\hbar$ $i\hbar\frac{d}{dt}\hat{\rho}_I(t) = -\hat{H}_0\hat{U}_0^\dagger\,\hat{\rho}_S\hat{U}_0 + \hat{H}_0\hat{U}_0^\dagger\,\hat{\rho}_S\hat{U}_0 + i\hbar\hat{U}_0^\dagger\,\frac{d}{dt}\hat{\rho}_S\hat{U}_0 \;\Big\vert\; \hat{U}_0^\dagger\,\hat{\rho}_S\hat{U}_0 = \hat{\rho}_I$ $i\hbar\frac{d}{dt}\hat{\rho}_I(t) = -\hat{H}_0\hat{\rho}_I + \hat{H}_0\hat{\rho}_I + i\hbar\hat{U}_0^\dagger\,\frac{d}{dt}\hat{\rho}_S\hat{U}_0 = -[\hat{H}_0,\hat{\rho}_I] + i\hbar\hat{U}_0^\dagger\,\frac{d}{dt}\hat{\rho}_S\hat{U}_0 \;\Big\vert\; \frac{d}{dt}\hat{\rho}_S = \frac{1}{i\hbar}[\hat{H},\hat{\rho}_S]$ $i\hbar\frac{d}{dt}\hat{\rho}_I(t) = -[\hat{H}_0,\hat{\rho}_I] + i\hbar\frac{1}{i\hbar}\hat{U}_0^\dagger\,[\hat{H},\hat{\rho}_S]\hat{U}_0 \;\Big\vert\; \hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}(t) \Longrightarrow i\hbar\frac{d}{dt}\hat{\rho}_I(t) = [\hat{H}_0,\hat{\rho}_I] + \hat{U}_0^\dagger\,[\hat{H}_0 + \hat{V}(t),\hat{\rho}_S]\hat{U}_0$ $i\hbar\frac{d}{dt}\hat{\rho}_I(t) = -[\hat{H}_0,\hat{\rho}_I] + \hat{U}_0^\dagger\,[\hat{H}_0,\hat{\rho}_S]\hat{U}_0 + \hat{U}_0^\dagger\,[\hat{V}(t),\hat{\rho}_S]\hat{U}_0 = [\hat{H}_0,\hat{\rho}_I] + \hat{U}_0^\dagger\,(\hat{H}_0\hat{\rho}_S - \hat{\rho}_S\hat{H}_0)\hat{U}_0 + \hat{U}_0^\dagger\,[\hat{V}(t),\hat{\rho}_S]\hat{U}_0$ $i\hbar\frac{d}{dt}\hat{\rho}_I(t) = -[\hat{H}_0,\hat{\rho}_I] + \hat{U}_0^\dagger\hat{H}_0\hat{\rho}_S\hat{U}_0 - \hat{U}_0^\dagger\hat{\rho}_S\hat{H}_0\hat{U}_0 + \hat{U}_0^\dagger\,[\hat{V}(t),\hat{\rho}_S]\hat{U}_0 \;\Big\vert\; \hat{U}_0^\dagger\hat{H}_0 = \hat{H}_0\hat{U}_0^\dagger;\; \hat{H}_0\hat{U}_0 = \hat{U}_0\hat{H}_0$ $i\hbar\frac{d}{dt}\hat{\rho}_I(t) = -[\hat{H}_0,\hat{\rho}_I] + \hat{H}_0\hat{U}_0^\dagger\hat{\rho}_S\hat{U}_0 - \hat{U}_0^\dagger\hat{\rho}_S\hat{U}_0\hat{H}_0 + \hat{U}_0^\dagger\,[\hat{V}(t),\hat{\rho}_S]\hat{U}_0 \;\Big\vert\; \hat{U}_0^\dagger\,\hat{\rho}_S\hat{U}_0 = \hat{\rho}_I$ $i\hbar\frac{d}{dt}\hat{\rho}_I(t) = -[\hat{H}_0,\hat{\rho}_I] + \hat{H}_0\hat{\rho}_I - \hat{\rho}_I\hat{H}_0 + \hat{U}_0^\dagger\,[\hat{V}(t),\hat{\rho}_S]\hat{U}_0 = i\hbar\frac{d}{dt}\hat{\rho}_I(t) = -[\hat{H}_0,\hat{\rho}_I] + [\hat{H}_0,\hat{\rho}_I] + \hat{U}_0^\dagger\,[\hat{V}(t),\hat{\rho}_S]\hat{U}_0$ $i\hbar\frac{d}{dt}\hat{\rho}_I(t) = \hat{U}_0^\dagger\,[\hat{\rho}_S,\hat{V}]\hat{U}_0 = \hat{U}_0^\dagger\,(\hat{V}\hat{\rho}_S - \hat{\rho}_S\hat{V})\hat{U}_0 = \hat{U}_0^\dagger\hat{V}\hat{\rho}_S\hat{U}_0 - \hat{U}_0^\dagger\hat{\rho}_S\hat{V}\hat{U}_0 = \hat{U}_0^\dagger\hat{V}\mathbb{1}\hat{\rho}_S\hat{U}_0 - \hat{U}_0^\dagger\hat{\rho}_S\mathbb{1}\hat{V}\hat{U}_0 \;\Big\vert\; \mathbb{1} = \hat{U}_0\cdot\hat{U}_0^\dagger$ $i\hbar\frac{d}{dt}\hat{\rho}_I(t) = \hat{U}_0^\dagger\hat{V}\hat{U}_0\cdot\hat{U}_0^\dagger\hat{\rho}_S\hat{U}_0 - \hat{U}_0^\dagger\hat{\rho}_S\hat{U}_0\cdot\hat{U}_0^\dagger\hat{V}\hat{U}_0 \;\Big\vert\; \hat{U}_0^\dagger\hat{V}\hat{U}_0 = V_I;\, \hat{U}_0^\dagger\,\hat{\rho}_S\hat{U}_0 = \hat{\rho}_I$ $i\hbar\frac{d}{dt}\hat{\rho}_I(t) = \hat{V}_I\hat{\rho}_I - \hat{\rho}_I\hat{V}_I = [\hat{V}_I,\hat{\rho}_I(t)] \Longrightarrow \boxed{\frac{d}{dt}\hat{\rho}_I(t) = \frac{1}{i\hbar}[\hat{V}_I,\hat{\rho}_I(t)] \text{ mit } \hat{V}_I = \hat{U}_0^\dagger\,V(t)\,\hat{U}_0}$

Noether'sches Theorem

Zu jeder kontinuierlichen Symmetrie eines physikalischen Systems gehört eine Erhaltungsgröße: Energieerhaltung ↔ Homogenität der Zeit; Impulserhaltung ↔ Homogenität der Raums; Drehimpulserhaltung ↔ Isotropie der Raums					
Symmetrie-transformation	Erhaltungsgrößen $\hat{A}$ erzeugen in der QM eine kontinuierlich Symmetrietransformation $\hat{U}_A(\alpha) = e^{i\alpha\hat{A}};\; \alpha \in \mathbb{R}$				
Zeitentw↔Energieerh.:	$\hat{U}(t) = e^{-it\hat{H}/\hbar}$	Translation ↔Impulserh.	$\hat{T}(\vec{x}) = e^{-i\vec{x}\hat{p}/\hbar}$	Rotation ↔Drehimpulserh.:	$\hat{R}_{\vec{n}}(\varphi) = e^{-i\varphi\vec{n}\cdot\hat{\vec{L}}/\hbar}$
Erhaltungsgröße $\hat{A}_H$	$\frac{d}{dt}\hat{A}_H(t) = \frac{1}{i\hbar}[\hat{A}_H(t),\hat{H}] = 0 \Longrightarrow [\hat{U}_a(\alpha),\hat{H}] = 0 \Longrightarrow \hat{H}\lvert\Psi\rangle = \hat{H}\,\hat{U}_A(\alpha)\,\lvert\Psi\rangle = \varepsilon_0\lvert\Psi\rangle$				

Rotationen

Aktive/passive Rot.:	$\hat R(\varphi)\,\Psi(\vec r)=\Psi(\underline{\underline{R}}^{-1}(\varphi)\,\vec r)$ mit $\hat R$... Rotationsoperator, aktive Rotation; $\underline{\underline{R}}^{-1}$... Rotationsmatrix, passive Rotation
Herleitung Rotationsmatrix für Rotation um z-Achse	$\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}\to\begin{pmatrix}\cos(\varphi)\\ \sin(\varphi)\end{pmatrix};\ \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}\to\begin{pmatrix}-\sin(\varphi)\\ \cos(\varphi)\end{pmatrix}\Rightarrow\underline{\underline{R}}=\begin{pmatrix}\cos(\varphi)&-\sin(\varphi)\\ \sin(\varphi)&\cos(\varphi)\end{pmatrix}\Rightarrow\underline{\underline{R}}^{-1}=\underline{\underline{R}}^{T}=\begin{pmatrix}\cos(\varphi)&\sin(\varphi)&0\\ -\sin(\varphi)&\cos(\varphi)&0\\ 0&0&1\end{pmatrix}$
Rotation von $\vec r$ um z-Achse	$\begin{pmatrix}\cos(\varphi)&\sin(\varphi)&0\\ -\sin(\varphi)&\cos(\varphi)&0\\ 0&0&1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}x\\y\\z\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}x\cos(\varphi)+y\sin(\varphi)\\ y\cos(\varphi)-x\sin(\varphi)\\ z\end{pmatrix}\Rightarrow$ $\hat R_z(\varphi)\,\Psi(\vec r)=\Psi(x\cos(\varphi)+y\sin(\varphi),y\cos(\varphi)-x\sin(\varphi),z)$
Operator $\hat R_z(\eta)$ für infinitesimale Rotation um z-Achse mit $\eta\ll 1$	$\hat R_z(\eta)\,\Psi(\vec r)=\Psi(x\cos(\eta)+y\sin(\eta),y\cos(\eta)-x\sin(\eta),z)\,\big\vert\,\cos(\eta)\approx 1;\ \sin(\eta)\approx\eta$ $\hat R_z(\eta)\,\Psi(\vec r)\approx\Psi(x+y\eta,y-x\eta,z)=\Psi(\vec r)+y\eta\frac{\partial\Psi}{\partial x}(\vec r)-y\eta\frac{\partial\Psi}{\partial y}(\vec r)=\left(1+\eta\left(y\frac{\partial}{\partial x}-x\frac{\partial}{\partial y}\right)\right)\Psi(\vec r)\Rightarrow$ $\hat R_z(\eta)\,\Psi(\vec r)=\left(1+\eta\left(y\frac{\partial}{\partial x}-x\frac{\partial}{\partial y}\right)\right)\Psi(\vec r)\Rightarrow$ $\hat R_z(\eta)=\left(1+\eta\left(y\frac{\partial}{\partial x}-x\frac{\partial}{\partial y}\right)\right)=\left(1-\eta\frac{i}{\hbar}\frac{\hbar}{i}\left(x\frac{\partial}{\partial y}-y\frac{\partial}{\partial x}\right)\right)\Big\vert\frac{\hbar}{i}\left(x\frac{\partial}{\partial y}-y\frac{\partial}{\partial x}\right)=\hat L_z$ infinitesimale Rotation um z: $\boxed{\hat R_z(\eta)=\left(1-\eta\frac{i}{\hbar}\hat L_z\right)}$ $\Rightarrow$allg. infinitesimale Rotation um $\vec u$: $\boxed{\hat R_{\vec u}(\eta)=\left(1-\eta\frac{i}{\hbar}\vec u\cdot\hat{\vec L}\right)}$
Rotation um endliche Winkel φ	$\hat R_{\vec u}(\varphi)=\lim_{n\to\infty}\left(1-\frac{\varphi}{n}\frac{i}{\hbar}\vec u\cdot\hat{\vec L}\right)^n\Big\vert\,x\stackrel{\text{def}}{=}\frac{i\varphi}{\hbar}\vec u\cdot\hat{\vec L}\Rightarrow\hat R_{\vec u}(\varphi)=\lim_{n\to\infty}\left(1-\frac{x}{n}\right)^n=e^{-x}\Rightarrow\boxed{\hat R_{\vec u}(\varphi)=e^{-i\varphi\vec u\cdot\hat{\vec L}/\hbar}}$
Beliebige Rotation	$\hat R(\alpha,\beta,\gamma)=\underbrace{\hat R_\xi(\gamma)}_{\substack{dritte\\ Drehung}}\underbrace{\hat R_\eta(\beta)}_{\substack{zweite\\ Drehung}}\underbrace{\hat R_z(\alpha)}_{\substack{erste\\ Drehung}}$ ...(1) $\hat R_\eta(\beta)=\underbrace{\hat R_z(\alpha)}_{\substack{3)\ z-Drehung\\ restaurieren}}\underbrace{\hat R_y(\beta)}_{\substack{2)\ \eta-Drehung\\ um\ y}}\underbrace{\hat R_z(-\alpha)}_{\substack{1)\ z-Drehung\\ rückgängig}}$ ...(2) $\hat R_\xi(\gamma)=\underbrace{\hat R_\eta(\beta)}_{\substack{5)\ \eta-Drehung\\ restaurieren}}\underbrace{\hat R_z(\alpha)}_{\substack{4)\ z-Drehung\\ restaurieren}}\underbrace{\hat R_z(\gamma)}_{\substack{3)\ \xi-Drehung\\ um\ z}}\underbrace{\hat R_z(-\alpha)}_{\substack{2)\ z-Drehung\\ rückgängig}}\underbrace{\hat R_\eta(-\beta)}_{\substack{1)\ \eta-Drehung\\ rückgängig}}$ ...(3) $(2)\ in\ (3)\Rightarrow\hat R_\xi(\gamma)=\hat R_z(\alpha)\,\hat R_y(\beta)\,\hat R_z(-\alpha)\cdot\hat R_z(\alpha)\,\hat R_z(\gamma)\,\hat R_z(-\alpha)\cdot\hat R_z(\alpha)\,\hat R_y(-\beta)\,\hat R_z(-\alpha)$ ...(4) $(2),(4)\ in\ (1)\Rightarrow$ $\hat R(\alpha,\beta,\gamma)=\hat R_z(\alpha)\,\hat R_y(\beta)\,\hat R_z(-\alpha)\,\hat R_z(\alpha)\,\hat R_z(\gamma)\,\hat R_z(-\alpha)\,\hat R_z(\alpha)\,\hat R_y(\beta)\,\hat R_z(-\alpha)\cdot\hat R_z(\alpha)\,\hat R_y(-\beta)\,\hat R_z(-\alpha)\cdot\hat R_z(\alpha)$ $\hat R(\alpha,\beta,\gamma)=\hat R_z(\alpha)\,\hat R_y(\beta)\cancel{\hat R_z(-\alpha)\,\hat R_z(\alpha)}\hat R_z(\gamma)\cancel{\hat R_z(-\alpha)\,\hat R_z(\alpha)}\hat R_y(\beta)\cancel{\hat R_z(-\alpha)\,\hat R_z(\alpha)}\hat R_y(-\beta)\cancel{\hat R_z(-\alpha)\,\hat R_z(\alpha)}$ $\hat R(\alpha,\beta,\gamma)=\hat R_z(\alpha)\,\hat R_y(\beta)\,\hat R_z(\gamma)\cancel{\hat R_y(\beta)\,\hat R_y(-\beta)}\Rightarrow\boxed{\hat R(\alpha,\beta,\gamma)=e^{-i\alpha\hat J_z/\hbar}e^{-i\beta\hat J_y/\hbar}e^{-i\gamma\hat J_z/\hbar}}$
Drehoperator	$\langle j,m'\vert\,\hat R(\alpha,\beta,\gamma)\,\vert j,m\rangle=\langle j,m'\vert e^{-i\alpha\hat J_z/\hbar}e^{-i\beta\hat J_y/\hbar}e^{-i\gamma\hat J_z/\hbar}\vert j,m\rangle=e^{-i\alpha m'}\langle j,m'\vert e^{-i\beta\hat J_y/\hbar}\vert j,m\rangle e^{-i\gamma m}$ $\boxed{\langle j,m'\vert\,\hat R(\alpha,\beta,\gamma)\,\vert j,m\rangle=e^{-i\alpha m'}\left\langle j,m'\right\vert\mathrm d^{(j)}_{m'm}(\beta)\left\vert j,m\right\rangle e^{-i\gamma m}}$ aktive Rotation eines Operators: $\hat R\hat A\hat R^\dagger$
Wignersche Rotationsmatrix	z.B. für Spin 1/2: $\mathrm d^{(1/2)}_{m'm}(\beta)=e^{-i\beta\hat S_y/\hbar}\,\big\vert\,\hat S_y=\frac{\hbar}{2}\sigma_y\Rightarrow\mathrm d^{(\frac12)}_{m'm}(\beta)=e^{-i\frac{\beta}{2}\sigma_y}=\mathbb 1\cos\left(\frac{\beta}{2}\right)-i\sigma_y\sin\left(\frac{\beta}{2}\right)$ $\mathrm d^{(1/2)}_{m'm}(\beta)=\begin{pmatrix}1&0\\0&1\end{pmatrix}\cos\left(\frac{\beta}{2}\right)-i\begin{pmatrix}0&-i\\i&0\end{pmatrix}\sin\left(\frac{\beta}{2}\right)=\begin{pmatrix}1&0\\0&1\end{pmatrix}\cos\left(\frac{\beta}{2}\right)+\begin{pmatrix}0&-1\\1&0\end{pmatrix}\sin\left(\frac{\beta}{2}\right)$ $\mathrm d^{(1/2)}_{m'm}(\beta)=\begin{pmatrix}\cos(\beta/2)&-\sin(\beta/2)\\ \sin(\beta/2)&\cos(\beta/2)\end{pmatrix}$ für Spin 1: $\mathrm d^{(1)}_{m'm}(\beta)=\frac{1}{2}\begin{pmatrix}1+\cos\beta&-\sqrt2\sin\beta&1-\cos\beta\\ \sqrt2\sin\beta&2\cos\beta&-\sqrt2\sin\beta\\ 1-\cos\beta&\sqrt2\sin\beta&1+\cos\beta\end{pmatrix}$

Rotation von skalaren Operatoren

Drehungsinvariant	Ein skalarer Operator $\hat S$ ist invariant gegenüber Drehungen: $\left[1-\eta\frac{i}{\hbar}\vec u\cdot\hat{\vec L},\hat S\right]=0\Rightarrow\left[\hat R(\alpha,\beta,\gamma),\hat S\right]=0$
Kommutatoren	$[\hat J^2,\hat S]=0;\ [\hat J_x,\hat S]=0;\ [\hat J_y,\hat S]=0;\ [\hat J_z,\hat S]=0;\ [\hat J_\pm,\hat S]=0$
Blockdiagonal und proportional zu $\mathbb 1$ innerhalb des jeweiligen Unterraums zu festem j	In der Basis von $\{\hat J^2,\hat J_z\}$ -repräsentiert durch die QZ $\vert\alpha jm\rangle$ (α steht für alle anderen QZ) - hat ein skalarer Operator $\hat S$ eine bzgl. j,m diagonale Matrixdarstellung und ist proportional zu $\mathbb 1$ innerhalb des jeweiligen Unterraums zu festem j. $\boxed{\langle\alpha jm\vert\hat S\vert\alpha j'm'\rangle=S_{\alpha j}\delta_{jj'}\delta_{mm'}}$ Beweis: (i) $\hat J^2\vert\alpha j'm'\rangle=j'(j'+1)\hbar^2\vert\alpha j'm'\rangle\Rightarrow\vert\alpha j'm'\rangle=\frac{1}{j'(j'+1)\hbar^2}\hat J^2\vert\alpha j'm'\rangle$ ...(1) $\langle\alpha jm\vert\hat S\vert\alpha j'm'\rangle\stackrel{(1)}{=}\frac{1}{j'(j'+1)\hbar^2}\langle\alpha jm\vert\hat S\hat J^2\vert\alpha j'm'\rangle=\frac{1}{j'(j'+1)\hbar^2}\langle\alpha jm\vert\hat J^2\hat S\vert\alpha j'm'\rangle=\frac{j(j+1)\hbar^2}{j'(j'+1)\hbar^2}\langle\alpha jm\vert\hat S\vert\alpha j'm'\rangle\Rightarrow$ $\frac{j(j+1)\hbar^2}{j'(j'+1)\hbar^2}=1\Rightarrow\boxed{j=j'}$ (ii) $\hat J_z\vert\alpha j'm'\rangle=\hbar m'\vert\alpha j'm'\rangle\Rightarrow\vert\alpha j'm'\rangle=\frac{1}{\hbar m'}\hat J_z\vert\alpha j'm'\rangle$ ...(2) $\langle\alpha jm\vert\hat S\vert\alpha jm'\rangle\stackrel{(2)}{=}\frac{1}{\hbar m'}\langle\alpha jm\vert\hat S\hat J_z\vert\alpha j'm'\rangle=\frac{1}{\hbar m'}\langle\alpha jm\vert\hat J_z\hat S\vert\alpha jm'\rangle=\frac{\hbar m}{\hbar m'}\langle\alpha jm\vert\hat S\vert\alpha jm'\rangle\Rightarrow\frac{\hbar m}{\hbar m'}=1\Rightarrow\boxed{m=m'}$ (iii) $\hat J_+\vert\alpha j(m-1)\rangle=\sqrt{(j-(m-1))(j+(m-1)+1)}\hbar\cdot\vert\alpha jm\rangle=\sqrt{(j-m+1)(j+m)}\hbar\cdot\vert\alpha jm\rangle\Rightarrow$ $\vert\alpha jm\rangle=\frac{1}{\sqrt{(j-m+1)(j+m)}\hbar}\vert\alpha j(m-1)\rangle$ ...(3) $\langle\alpha jm\vert\hat S\vert\alpha jm\rangle\stackrel{(3)}{=}\frac{1}{\sqrt{(j-m+1)(j+m)}\hbar}\langle\alpha jm\vert\hat S\hat J_+\vert\alpha j(m-1)\rangle\Rightarrow$ $\langle\alpha jm\vert\hat S\vert\alpha jm\rangle=\frac{1}{\sqrt{(j-m+1)(j+m)}\hbar}\langle\alpha jm\vert\hat J_+\hat S\vert\alpha j(m-1)\rangle=\frac{1}{\sqrt{(j-m+1)(j+m)}\hbar}\langle\hat J_+^\dagger(\alpha jm)\vert\hat S\vert\alpha j(m-1)\rangle\Rightarrow$ $\langle\alpha jm\vert\hat S\vert\alpha jm\rangle=\frac{1}{\sqrt{(j-m+1)(j+m)}\hbar}\langle\hat J_-(\alpha jm)\vert\hat S\vert\alpha j(m-1)\rangle=\frac{\sqrt{(j+m)(j-m+1)}\hbar}{\sqrt{(j-m+1)(j+m)}\hbar}\langle\alpha j(m-1)\vert\hat S\vert\alpha j(m-1)\rangle\Rightarrow$ $\boxed{\langle\alpha jm\vert\hat S\vert\alpha jm\rangle=\langle\alpha j(m-1)\vert\hat S\vert\alpha j(m-1)\rangle\cdot 1}$

Vektoroperatoren

Kommutatorregeln für Vetoroperatoren (kartesisch)	$\hat{\vec{V}}$ ist ein Vektoroperator, wenn $\boxed{[\hat{J}_i,\hat{V}_j]=i\hbar\varepsilon_{ijk}\hat{V}_k}$; z.B.: $[\hat{J}_x,\hat{V}_x]=0$; $[\hat{J}_x,\hat{V}_y]=i\hbar\hat{V}_z$; $[\hat{J}_x,\hat{V}_z]=-i\hbar\hat{V}_y$; ... wegen $\hat{J}_\pm=\hat{J}_x\pm i\hat{J}_y$ und $\hat{V}_\pm=\hat{V}_x\pm i\hat{V}_y \Longrightarrow \boxed{[\hat{J}_x,\hat{V}_\pm]=\mp\hbar\hat{V}_z;\ [\hat{J}_y,\hat{V}_\pm]=-i\hbar\hat{V}_z;\ [\hat{J}_z,\hat{V}_\pm]=i\hbar\hat{V}_y\pm\hbar\hat{V}_x=\pm\hbar\hat{V}_\pm}$ $\boxed{[\hat{J}_+,\hat{V}_+]=0;[\hat{J}_+,\hat{V}_-]=2\hbar\hat{V}_z;\ [\hat{J}_-,\hat{V}_+]=-2\hbar\hat{V}_z;\ [\hat{J}_-,\hat{V}_-]=0}$
Sphärische Komponenten	$\hat{V}_q^k=\hat{V}_q^1$ k ... Stufe des Tensors (bei Vektoroperatoren: $k=1$); $k\leftrightarrow l$ der Kugelflächenfunktion Y_l^m q ... sphärische Komponente ($-k\le q\le k$); $q\leftrightarrow m$ der Kugelflächenfunktion Y_l^m $\boxed{\hat{V}_1^1=-\frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{V}_x+i\hat{V}_y)=-\frac{1}{\sqrt{2}}\hat{V}_+;\ \hat{V}_0^1=\hat{V}_z;\ \hat{V}_{-1}^1=\frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{V}_x-i\hat{V}_y)=\frac{1}{\sqrt{2}}\hat{V}_-}$ $\boxed{[\hat{J}_z,\hat{V}_q^1]=q\hbar\hat{V}_q^1}$ $\boxed{[\hat{J}_\pm,\hat{V}_q^1]=\hbar\sqrt{2-q(q\pm1)}\hat{V}_{q\pm1}^1}$ $\boxed{[\hat{J}^2,\hat{V}_q^1]=0}$
Drehung kartesisch	Vektoroperator verhält sich unter Drehung wie ein klassischer Vektor, d.h. der Erwartungswert dreht sich „klassisch" $\lvert\alpha\rangle\to\hat{R}\lvert\alpha\rangle \Longrightarrow \langle\alpha\lvert\hat{V}_j\rvert\alpha\rangle\to\langle\alpha\lvert\hat{R}^\dagger\hat{V}_j\hat{R}\rvert\alpha\rangle=R_{ij}\langle\alpha\lvert\hat{V}_j\rvert\alpha\rangle \Longrightarrow \hat{R}^\dagger\hat{V}_j\hat{R}=R_{ij}\hat{V}_j;\ \hat{R}\hat{V}_j\hat{R}^\dagger=R_{ji}\hat{V}_j$
Drehung sphärisch	$\lvert lm\rangle=\sum_{m'=-l}^{l}\lvert lm'\rangle\langle lm'\lvert\hat{R}\rvert lm\rangle=\sum_{m'=-l}^{l}\mathrm{d}_{m'm}^{(l)}\lvert lm\rangle;\ \hat{R}\hat{V}_q^1\hat{R}^\dagger=\sum_{q'=-1}^{1}\mathrm{d}_q^{(1)}\hat{V}_{q'}^1$

Tensoroperatoren

Tensoroperatoren (sphärisch)	$\hat{T}_q^k$ k ... Stufe des Tensors; $k\leftrightarrow l$ der Kugelflächenfunktion Y_l^m q ... sphärische Komponente ($-k\le q\le k$); $q\leftrightarrow m$ der Kugelflächenfunktion Y_l^m
Kommutatoren (sphärisch)	$[\hat{J}_z,\hat{T}^k{}_q]=q\hbar\hat{T}^k{}_q;\ [\hat{J}_\pm,\hat{T}^k{}_q]=\hbar\sqrt{k(k+1)-q(q\pm1)}\hat{T}_{q\pm1}^k$ ... gilt für irreduzible Tensoren
Irreduzibel	Ein Tensor ist irreduzibel, wenn es <u>keinen</u> Unterraum gibt, der invariant gegenüber Rotationen ist. Skalare Operatoren sind irreduzibel, weil 1D. Auch Vektoroperatoren sind immer irreduzibel. Tensoren sind manchmal reduzibel. Beispiel: $T_{ij}\stackrel{\text{def}}{=}v_iw_j$ (i) $\mathrm{Tr}(T)=\sum_i T_{ii}=\sum_i v_iv_i=\vec{v}\cdot\vec{w}$... skalar, dh. irreduzibel. (ii) $\vec{v}\times\vec{w}=\begin{pmatrix}T_{23}-T_{32}\\-T_{13}+T_{31}\\T_{12}-T_{21}\end{pmatrix}$...Vektor, d.h. irreduzibel (bleibt bei Drehungen im $\vec{v}\times\vec{w}$-Unterraum) $\Longrightarrow$ (iii) Irreduzibler (spurloser, symmetrischer) Teil von T_{ij} hat 9-1-3=5 Dimensionen: $T_{ij}=\frac{1}{2}(T_{ij}+T_{ji})-\frac{1}{3}T_{kk}\delta_{ij}$
Wigner-Eckert-Theorem für irreduzible Tensoroperatoren	$\langle\alpha jm\lvert\hat{T}_q^k\rvert\alpha j'm'\rangle=\underbrace{\langle jmkq\lvert j'm'\rangle}_{\text{Clebsch-Gordon}}\cdot\underbrace{\langle\alpha j\lVert T^k\rVert\alpha j'\rangle}_{\text{verallg. reduz. Matrixelement}}$ Beispiel: $\langle\alpha jm\lvert Y_k^q\rvert\alpha j'm'\rangle=\langle jmkq\lvert j'm'\rangle\cdot\langle j\lVert Y_k\rVert j'\rangle$ mit $\langle j\lVert Y_k\rVert j'\rangle=\sqrt{\frac{(2j+1)(2k1)}{(2j'+1)}}\langle j0k0\lvert j'0\rangle$ Anwendung: $\langle\alpha jm\lvert\hat{T}_q^k\rvert\alpha j'm'\rangle=\langle jmkq\lvert j'm'\rangle\cdot\langle\alpha j\lVert T^k\rVert\alpha j'\rangle$ ... (1) j,j' auf der linken Seite steht für beliebige Drehimpulse (z.B. l oder s) m,m' auf der linken Seite steht für die zugehörigen magnetischen Drehimpulsquantenzahlen (z.B. m_l,m_l') Auf der rechten Seite wird k als zusätzlicher Drehimpuls und q als zugehörige Magnet-QZ interpretiert j,k entsprechen dann Drehimpulsen in Produktbasis; j' dem Drehimpuls in gekoppelter Basis m,q entsprechen dann der Magnet-QZ in Produktbasis; m' der Magnetquantenzahl in gekoppelter Basis $\Longrightarrow$ Es sind nur Übergänge möglich, wo $\lvert j-k\rvert\le j'\le j+k$ und $m'=m+q$. $\Longrightarrow$ Clebsch-Gordon-Tabelle: $\begin{array}{c\|c} j\times k & J\mathrel{\widehat{=}}j' \\ & M\mathrel{\widehat{=}}m' \\ \hline m_1\mathrel{\widehat{=}}m;\ m_2\mathrel{\widehat{=}}q & \langle jmkq\lvert j'm'\rangle \end{array}$ $\Longrightarrow$ Hat man $\langle\alpha jm\lvert\hat{T}_q^k\rvert\alpha j'm'\rangle$ für eine bestimmte Kombination j,m,j',m' berechnet, ergibt sich $\langle\alpha j\lVert T^k\rVert\alpha j'\rangle=\frac{\langle\alpha jm\lvert\hat{T}_q^k\rvert\alpha j'm'\rangle}{\langle jmkq\lvert j'm'\rangle}$, womit über Gleichung (1) $\langle\alpha jm\lvert\hat{T}_q^k\rvert\alpha j'm'\rangle$ auch für andere m,m' leicht berechenbar wird.

Diskrete Symmetrien

Wigner Theorem	Jede Symmetrie wirkt wie ein unitärer oder antiunitärer Operator
Unitärer Operator	Unitärer Operator für diskrete Symmetrie $\hat{U}^N=1$: $N\in\mathbb{N}_+$; $N\ge2$ — Kommutator: $[\hat{U},\hat{H}]=0$
Antiunitärer Op.	$\hat{A}$ ist antiunitär, wenn $\hat{A}$ antilinear, $\exists\hat{A}^{-1}$ und $\lVert\hat{A}\lvert\Psi\rangle\rVert=\lVert\lvert\Psi\rangle\rVert$ — antilinear: $\hat{A}(c_1\lvert\Psi_1\rangle+c_2\lvert\Psi_2\rangle)=c_1^*\hat{A}\lvert\Psi_1\rangle+c_2^*\hat{A}\lvert\Psi_2\rangle$
Paritätsoperator	$\hat{U}\stackrel{\text{def}}{=}\hat{\Pi}$, $N=2$ Wirkung: $\hat{\Pi}\lvert\vec{r}\rangle=\lvert-\vec{r}\rangle$; $\langle\vec{r}\lvert\hat{\Pi}^\dagger=\langle\vec{r}\rvert\hat{\Pi}=\langle-\vec{r}\rvert$; $\langle\vec{r}\lvert\hat{\Pi}\rvert\Psi\rangle=\langle-\vec{r}\lvert\Psi\rangle$ $\hat{\Pi}\hat{\vec{r}}\hat{\Pi}=-\hat{\vec{r}}$; $\hat{\Pi}\hat{\vec{p}}\hat{\Pi}=-\hat{\vec{p}}$; $\hat{\Pi}\hat{\vec{L}}\hat{\Pi}=(-\hat{\vec{r}})\times(-\hat{\vec{p}})=\hat{\vec{L}}$; $\hat{\Pi}\hat{\vec{E}}\hat{\Pi}=-\hat{\vec{E}}$; $\hat{\Pi}\hat{\vec{B}}\hat{\Pi}=\hat{\vec{B}}$ $\hat{\Pi}\hat{T}_q^k\hat{\Pi}=1$, wenn k gerade, sonst -1; $\hat{\Pi}\lvert nlm\rangle\hat{\Pi}=(-1)^l\lvert nlm\rangle$ $\hat{\Pi}^\dagger=\hat{\Pi}$ (hermitesch), $\hat{\Pi}^\dagger=\hat{\Pi}^{-1}$ (unitär) Eigenwerte: $\hat{\Pi}\hat{H}\lvert n\rangle=\hat{\Pi}E_n\lvert n\rangle\lvert[\hat{\Pi},\hat{H}]=0\Longrightarrow\hat{H}\hat{\Pi}\lvert n\rangle=E_n\hat{\Pi}\lvert n\rangle$. Wenn keine Entartung: $\hat{\Pi}\lvert n\rangle=\pm1\lvert n\rangle$ Parität ist Erhaltungsgröße. Ist $\lvert\Psi(0)\rangle$ Superpos. von symmetrischen Zuständen, dann bleibt $\lvert\Psi(t)\rangle$ symmetrisch
Zeitumkehr-operator	$\hat{U}\stackrel{\text{def}}{=}\hat{A}$, $N=2$ Für $V\in\mathbb{R}$: $t\to-t$ und $\hat{T}=\hat{K}$ (Komplexkonjugationsoperator); wobei $\hat{K}^{-1}=\hat{K}$ mit Spin: $t\to-t$ und $\boxed{\hat{T}=e^{-i\pi\hat{J}_y/\hbar}\hat{K}=\hat{R}_y(\pi)}$ Für Spin $\frac{1}{2}$-Teilchen: $\hat{T}=-i\sigma_y\hat{K}$; $\hat{T}^{-1}=\hat{K}(-i\sigma_y)^{-1}$ Wirkung: $\hat{T}\hat{\vec{r}}\hat{T}^{-1}=\hat{\vec{r}}$; $\hat{T}\hat{\vec{p}}\hat{T}^{-1}=-\hat{\vec{p}}$; $\hat{T}\hat{\vec{L}}\hat{T}^{-1}=\hat{\vec{r}}\times(-\hat{\vec{p}})=-\hat{\vec{L}}$; $\hat{T}\hat{\vec{E}}\hat{T}^{-1}=\hat{\vec{E}}$; $\hat{T}\hat{\vec{B}}\hat{T}^{-1}=-\hat{\vec{B}}$ Eigenschaften: $\hat{T}[\hat{x},\hat{p}]\hat{T}^{-1}=\hat{T}i\hbar\hat{T}^{-1}\Longrightarrow\hat{T}\hat{x}\hat{p}\hat{T}^{-1}-\hat{T}\hat{p}\hat{T}\hat{x}\hat{T}^{-1}=\hat{T}\hat{x}\hat{T}^{-1}\hat{p}\hat{T}^{-1}-\hat{T}\hat{p}\hat{T}^{-1}\hat{T}\hat{x}\hat{T}^{-1}=-\hat{x}\hat{p}+\hat{p}\hat{x}=\hat{T}i\hat{T}^{-1}\hbar$ $[\hat{x},\hat{p}]=-\hat{T}i\hat{T}^{-1}\hbar$ ... (1) Aber: $\hat{\Pi}[\hat{x},\hat{p}]\hat{\Pi}=\hat{\Pi}i\hbar\hat{\Pi}\Longrightarrow[\hat{x},\hat{p}]=\hat{\Pi}i\hat{\Pi}\hbar$ ... (2) (1), (2) $\Longrightarrow\boxed{\hat{T}i\hat{T}^{-1}=-i}$ ... $\hat{T}$ ist ein <u>antilinearer</u> Operator $\Longrightarrow\boxed{\hat{T}c\lvert\Psi\rangle=c^*\hat{T}\lvert\Psi\rangle}$; $\boxed{\hat{T}^2\lvert\Psi\rangle=\pm\lvert\Psi\rangle}$
Kramers Theorem	Ein System mit Zeitumkehr-Invarianz und halbzahligem Gesamtspin besitzt nur mindestens 2x entartete Eigenwerte.

Störungsrechnung, nicht entartet (Rayleigh-Schrödinger-Störungsrechnung)

Hamilton	$\hat H = \hat H_0 + \lambda\hat V$, $\hat H_0$...ungestörter Hamilton; EW-Problem $\hat H_0\lvert\phi_0\rangle=\varepsilon_0\lvert\phi_0\rangle$ gelöst; $\hat V$...Störung, $0\leq\lambda<1$...Ordnungsparameter
Voraussetzung	Energieeigenwert ε_0 zu $\lvert\phi_0\rangle$ nicht entartet. $\hat H\lvert\Psi\rangle = E\lvert\Psi\rangle$ mit E nahe ε_0, $\lvert\Psi\rangle$ nahe $\lvert\phi_0\rangle \Longrightarrow \lvert\Psi_0\rangle = \lvert\phi_0\rangle$
Entwicklung	$\boxed{E = E_0+\lambda E_1+\lambda^2 E_2+\cdots}$ mit $\boxed{E_0=\varepsilon_0}$; $\boxed{\lvert\Psi\rangle = \lvert\Psi_0\rangle+\lambda\lvert\Psi_1\rangle+\lambda^2\lvert\Psi_2\rangle+\cdots}$ mit $\boxed{\lvert\Psi_0\rangle=\lvert\phi_0\rangle}$
Einsetzen in SGL	$\hat H\lvert\Psi\rangle = E\lvert\Psi\rangle \Longrightarrow (\hat H_0+\lambda\hat V)\sum_{i=0}^{\infty}\lambda^i\lvert\Psi_i\rangle = \left(\sum_{i=0}^{\infty}\lambda^i E_i\right)\sum_{i=0}^{\infty}\lambda^i\lvert\Psi_i\rangle$ $(\hat H_0+\lambda\hat V)(\lvert\Psi_0\rangle+\lambda\lvert\Psi_1\rangle+\lambda^2\lvert\Psi_2\rangle+\cdots) = (E_0+\lambda E_1+\lambda^2E_2+\cdots)(\lvert\Psi_0\rangle+\lambda\lvert\Psi_1\rangle+\lambda^2\lvert\Psi_2\rangle+\cdots)\Big\lvert E_0=\varepsilon_0; \lvert\Psi_0\rangle=\lvert\phi_0\rangle$ $(\hat H_0+\lambda\hat V)(\lvert\phi_0\rangle+\lambda\lvert\Psi_1\rangle+\lambda^2\lvert\Psi_2\rangle+\cdots) = (\varepsilon_0+\lambda E_1+\lambda^2E_2+\cdots)(\lvert\phi_0\rangle+\lambda\lvert\Psi_1\rangle+\lambda^2\lvert\Psi_2\rangle+\cdots) \Longrightarrow$ $\hat H_0\lvert\phi_0\rangle+\lambda\hat H_0\lvert\Psi_1\rangle+\lambda^2\hat H_0\lvert\Psi_2\rangle+\lambda\hat V\lvert\phi_0\rangle+\lambda^2\hat V\lvert\Psi_1\rangle+\cdots =$ $\varepsilon_0\lvert\phi_0\rangle+\lambda\varepsilon_0\lvert\Psi_1\rangle+\lambda^2\varepsilon_0\lvert\Psi_2\rangle+\lambda E_1\lvert\Psi_0\rangle+\lambda^2E_1\lvert\Psi_1\rangle+\lambda^2E_2\lvert\phi_0\rangle+\cdots$
Koeffizientenvergleich	λ^0: $\hat H_0\lvert\phi_0\rangle = \varepsilon_0\lvert\phi_0\rangle$ λ^1: $\hat H_0\lvert\Psi_1\rangle+\hat V\lvert\phi_0\rangle = \varepsilon_0\lvert\Psi_1\rangle+E_1\lvert\phi_0\rangle \Longrightarrow \hat H_0\lvert\Psi_1\rangle-\varepsilon_0\lvert\Psi_1\rangle = E_1\lvert\phi_0\rangle-\hat V\lvert\phi_0\rangle$ ... (1) λ^2: $\hat H_0\lvert\Psi_2\rangle+\hat V\lvert\Psi_1\rangle = \varepsilon_0\lvert\Psi_2\rangle+E_1\lvert\Psi_1\rangle+E_2\lvert\phi_0\rangle \Longrightarrow \hat H_0\lvert\Psi_2\rangle-\varepsilon_0\lvert\Psi_2\rangle = E_1\lvert\Psi_1\rangle-\hat V\lvert\Psi_1\rangle+E_2\lvert\phi_0\rangle$ ... (2) ...
nullte Ordnung	$\boxed{E_0=\varepsilon_0}$ $\boxed{\lvert\Psi_0\rangle=\lvert\phi_0\rangle}$
Energiekorrektur und Wellenfunktion erste Ordnung	$\langle\phi_0\rvert(1) \Longrightarrow \underbrace{\langle\phi_0\lvert\hat H_0\rvert\Psi_1\rangle}_{\underbrace{\varepsilon_0\langle\phi_0\vert\Psi_1\rangle}_{0}} - \underbrace{\langle\phi_o\lvert\varepsilon_0\rvert\Psi_1\rangle}_{\underbrace{\varepsilon_0\langle\phi_0\vert\Psi_1\rangle}_{0}} = \underbrace{\langle\phi_o\lvert E_1\rvert\phi_o\rangle}_{\underbrace{E_1\langle\phi_o\vert\phi_0\rangle}_{1}} - \langle\phi_0\lvert\hat V\rvert\phi_0\rangle \Longrightarrow 0 = E_1-\langle\phi_0\lvert\hat V\rvert\phi_0\rangle \Longrightarrow \boxed{E_1=\langle\phi_0\lvert\hat V\rvert\phi_0\rangle}$ ... (3) $\langle\phi_n\rvert(1) \Longrightarrow \underbrace{\langle\phi_n\lvert\hat H_0\rvert\Psi_1\rangle}_{\varepsilon_n\langle\phi_n\vert\Psi_1\rangle} - \underbrace{\langle\phi_n\lvert\varepsilon_0\rvert\Psi_1\rangle}_{\varepsilon_0\langle\phi_n\vert\Psi_1\rangle} = \underbrace{\langle\phi_n\lvert E_1\rvert\phi_0\rangle}_{\underbrace{E_1\langle\phi_n\vert\phi_0\rangle}_{=0\forall n\neq0}} - \langle\phi_n\lvert\hat V\rvert\phi_0\rangle \Longrightarrow (\varepsilon_n-\varepsilon_0)\langle\phi_n\vert\Psi_1\rangle = -\langle\phi_n\lvert\hat V\rvert\phi_0\rangle \Longrightarrow$ $\langle\phi_n\vert\Psi_1\rangle = \frac{\langle\phi_n\lvert\hat V\rvert\phi_0\rangle}{\varepsilon_0-\varepsilon_n}\Big\lvert \lvert\phi_n\rangle\cdot \Longrightarrow \lvert\phi_n\rangle\langle\phi_n\vert\Psi_1\rangle = \frac{\lvert\phi_n\rangle\langle\phi_n\lvert\hat V\rvert\phi_0\rangle}{\varepsilon_0-\varepsilon_n}\Big\lvert \sum_{n=1}^{\infty} \Longrightarrow$ $\sum_{n=1}^{\infty}\lvert\phi_n\rangle\langle\phi_n\vert\Psi_1\rangle = \sum_{n=1}^{\infty}\frac{\lvert\phi_n\rangle\langle\phi_n\lvert\hat V\rvert\phi_0\rangle}{\varepsilon_0-\varepsilon_n}\Big\lvert \sum_{n=1}^{\infty}\lvert\phi_n\rangle\langle\phi_n\vert\Psi_1\rangle = \lvert\Psi_1\rangle \Longrightarrow \boxed{\lvert\Psi_1\rangle = \sum_{n=1}^{\infty}\frac{\lvert\phi_n\rangle\langle\phi_n\lvert\hat V\rvert\phi_0\rangle}{\varepsilon_0-\varepsilon_n}}$ ... (4)
Energiekorrektur zweite Ordnung	$\langle\phi_0\rvert(2) \Longrightarrow \underbrace{\langle\phi_0\lvert\hat H_0\rvert\Psi_2\rangle}_{\underbrace{\varepsilon_0\langle\phi_0\vert\Psi_2\rangle}_{0}} - \underbrace{\langle\phi_o\lvert\varepsilon_0\rvert\Psi_2\rangle}_{\underbrace{\varepsilon_0\langle\phi_0\vert\Psi_2\rangle}_{0}} = \underbrace{\langle\phi_o\lvert E_1\rvert\Psi_1\rangle}_{\underbrace{E_1\langle\phi_0\vert\Psi_1\rangle}_{0}} - \langle\phi_0\lvert\hat V\rvert\Psi_1\rangle + \underbrace{\langle\phi_o\lvert E_2\rvert\phi_0\rangle}_{\underbrace{E_2\langle\phi_0\vert\phi_0\rangle}_{1}} \Longrightarrow 0 = -\langle\phi_0\lvert\hat V\rvert\Psi_1\rangle+E_2 \Longrightarrow$ $E_2 = \langle\phi_0\lvert\hat V\rvert\Psi_1\rangle \overset{(4)}{\Longrightarrow} \boxed{E_2 = \sum_{n=1}^{\infty}\frac{\langle\phi_0\lvert\hat V\rvert\phi_n\rangle\langle\phi_n\lvert\hat V\rvert\phi_0\rangle}{\varepsilon_0-\varepsilon_n}}$

Störungsrechnung, entartet

Hamilton	$\hat H = \hat H_0+\hat V$, $\hat H_0$...ungestörter Hamilton; EW-Problem $\hat H_0\lvert\phi_n\rangle=\varepsilon_n\lvert\phi_n\rangle$ (mit mehreren ε_n) gelöst
Entartung	Wir betrachten den Unterraum $U=\{\lvert\phi_1\rangle,\lvert\phi_2\rangle,\dots,\lvert\phi_N\rangle\}$ mit N-fach entarteten Energieeigenwerten ($\varepsilon_n=\varepsilon_{n'}$) oder N-fach *fast* entarteten Energieeigenwerten ($\lvert\varepsilon_n=\varepsilon_{n'}\rvert \ll \lvert\varepsilon_n=\varepsilon_k\rvert$, wobei ε_k der nächste nicht entartete Energieeigenwert ist).
Nullte Ordnung	Ansatz: Linearkombination der (fast) entarteten Eigenzustände $\boxed{\lvert\Psi\rangle=\sum_{n=1}^{N}a_n\lvert\phi_n\rangle}$
Säkulargleichung	Einsetzen in SGL: $\hat H\lvert\Psi\rangle = E\lvert\Psi\rangle \Longrightarrow (\hat H_0+\hat V)\sum_{n=1}^{N}a_n\lvert\phi_n\rangle = E\sum_{n=1}^{N}a_n\lvert\phi_n\rangle$ $\sum_{n=1}^{N}a_n\hat H_0\lvert\phi_n\rangle+\sum_{n=1}^{N}a_n\hat V\lvert\phi_n\rangle = \sum_{n=1}^{N}a_nE\lvert\phi_n\rangle\Big\lvert\langle\phi_{n'}\rvert\cdot$ mit $\lvert\phi_{n'}\rangle\in U$ $\sum_{n=1}^{N}a_n\langle\phi_{n'}\lvert\hat H_0\rvert\phi_n\rangle+\sum_{n=1}^{N}a_n\langle\phi_{n'}\lvert\hat V\rvert\phi_n\rangle = \sum_{n=1}^{N}a_nE\langle\phi_{n'}\vert\phi_n\rangle$ $\sum_{n=1}^{N}a_n\varepsilon_n\langle\phi_{n'}\vert\phi_n\rangle+\sum_{n=1}^{N}a_n\langle\phi_{n'}\lvert\hat V\rvert\phi_n\rangle = \sum_{n=1}^{N}a_nE\langle\phi_{n'}\vert\phi_n\rangle \Longrightarrow \underline{\underline{\hat H_0}}\vec a+\underline{\underline{\hat V}}\vec a = E\mathbb{1}\vec a \Longrightarrow$ Fast entartet: $\boxed{\left(\underline{\underline{\hat H_0}}+\underline{\underline{\hat V}}\right)\vec a = E\vec a \text{ mit } \underline{\underline{\hat H_0}} = \begin{pmatrix}\varepsilon_1 & & \\ & \ddots & \\ & & \varepsilon_N\end{pmatrix}}$ Vollständig entartet: $\varepsilon_0\vec a+\underline{\underline{\hat V}}\vec a = E\vec a \Longrightarrow \boxed{\underline{\underline{\hat V}}\vec a = (E-\varepsilon_0)\vec a = E_{korr}\vec a}$ ... EW-Gleichung der entarteten Störungstheorie $\Longrightarrow$ Berechnung der Korrektur-Eigenwerte $(E-\varepsilon_0)$ mit $\boxed{\det\left(\underline{\underline{\hat V}}-\mathbb{1}(E-\varepsilon_0)\right) = \det\left(\underline{\underline{\hat V}}-\mathbb{1}E_{korr}\right) = 0}$ ... Säkulargleichung

Variationsrechnung

<table>
<tr><td>Energiefunktional</td><td>$E[\langle\phi|,|\Psi\rangle] \stackrel{\text{def}}{=} \frac{\langle\phi|\hat{H}|\Psi\rangle}{\langle\phi|\Psi\rangle}$;mit $\hat{H}$ ... linearer Operator, und $\langle\phi|, |\Psi\rangle$... variable Funktionen. Voraussetzung: $\langle\phi|\Psi\rangle \neq 0$</td></tr>
<tr><td>Herleitung der Schrödinger-gleichung mit Variations-rechnung (Freie Variation)</td><td>Wir suchen $\langle\phi|$ und $|\Psi\rangle$, so dass E stationär wird (Extremalwerte liefert) $\Longrightarrow \frac{\delta E}{\delta\langle\phi|} = 0;\ \frac{\delta E}{\delta|\Psi\rangle} = 0$ (Variationsrechnung)
D.h.: Wir variieren z.B. $\langle\phi| \to \langle\phi| + \varepsilon\langle\alpha|;\ \varepsilon \ll 1$ infinitesimal (freie Variation).
$E[\langle\phi| + \varepsilon\langle\alpha|, |\Psi\rangle] = \frac{(\langle\phi|+\varepsilon\langle\alpha|)\hat{H}|\Psi\rangle}{(\langle\phi|+\varepsilon\langle\alpha|)|\Psi\rangle} = \frac{\langle\phi|\hat{H}|\Psi\rangle+\varepsilon\langle\alpha|\hat{H}|\Psi\rangle}{\langle\phi|\Psi\rangle+\varepsilon\langle\alpha|\Psi\rangle} = \frac{\langle\phi|\hat{H}|\Psi\rangle+\varepsilon\langle\alpha|\hat{H}|\Psi\rangle}{\langle\phi|\Psi\rangle\left(1+\varepsilon\frac{\langle\alpha|\Psi\rangle}{\langle\phi|\Psi\rangle}\right)} = \frac{\langle\phi|\hat{H}|\Psi\rangle+\varepsilon\langle\alpha|\hat{H}|\Psi\rangle}{\langle\phi|\Psi\rangle} \cdot \frac{1}{1+\varepsilon\frac{\langle\alpha|\Psi\rangle}{\langle\phi|\Psi\rangle}} \Big| \frac{1}{1+x} \approx 1-x$
$E[\langle\phi| + \varepsilon\langle\alpha|, |\Psi\rangle] \approx \frac{\langle\phi|\hat{H}|\Psi\rangle+\varepsilon\langle\alpha|\hat{H}|\Psi\rangle}{\langle\phi|\Psi\rangle}\left(1-\varepsilon\frac{\langle\alpha|\Psi\rangle}{\langle\phi|\Psi\rangle}\right) \approx \frac{\langle\phi|\hat{H}|\Psi\rangle}{\langle\phi|\Psi\rangle} + \varepsilon\frac{\langle\alpha|\hat{H}|\Psi\rangle}{\langle\phi|\Psi\rangle} - \varepsilon\frac{\langle\phi|\hat{H}|\Psi\rangle}{\langle\phi|\Psi\rangle}\frac{\langle\alpha|\Psi\rangle}{\langle\phi|\Psi\rangle} - \varepsilon^2\frac{\langle\alpha|\hat{H}|\Psi\rangle}{\langle\phi|\Psi\rangle}\frac{\langle\alpha|\Psi\rangle}{\langle\phi|\Psi\rangle} \Big| \varepsilon^2 \approx 0$
$E[\langle\phi| + \varepsilon\langle\alpha|, |\Psi\rangle] \approx \frac{\langle\phi|\hat{H}|\Psi\rangle}{\langle\phi|\Psi\rangle} + \varepsilon\frac{\langle\alpha|\hat{H}|\Psi\rangle}{\langle\phi|\Psi\rangle} - \varepsilon\frac{\langle\phi|\hat{H}|\Psi\rangle}{\langle\phi|\Psi\rangle}\frac{\langle\alpha|\Psi\rangle}{\langle\phi|\Psi\rangle} \Big| \frac{\langle\phi|\hat{H}|\Psi\rangle}{\langle\phi|\Psi\rangle} \stackrel{\text{def}}{=} E[\langle\phi|,|\Psi\rangle]$
$E[\langle\phi| + \varepsilon\langle\alpha|, |\Psi\rangle] = E[\langle\phi|,|\Psi\rangle] + \varepsilon\frac{\langle\alpha|\hat{H}|\Psi\rangle}{\langle\phi|\Psi\rangle} - \varepsilon\, E[\langle\phi|,|\Psi\rangle]\frac{\langle\alpha|\Psi\rangle}{\langle\phi|\Psi\rangle}$ ... (1)
$\delta E = \frac{\partial E(\varepsilon)}{\partial\varepsilon}\Big|_{\varepsilon=0} d\varepsilon \stackrel{(1)}{=} \left(\frac{\langle\alpha|\hat{H}|\Psi\rangle}{\langle\phi|\Psi\rangle} - E[\langle\phi|,|\Psi\rangle]\frac{\langle\alpha|\Psi\rangle}{\langle\phi|\Psi\rangle}\right)d\varepsilon$ ... (2)
$\delta\langle\phi| = \frac{\partial}{\partial\varepsilon}(\langle\phi| + \varepsilon\langle\alpha|)\Big|_{\varepsilon=0} d\varepsilon = \langle\alpha|d\varepsilon$ ... (3)
$\frac{\delta E}{\delta\langle\phi|} \stackrel{(2),(3)}{=} \frac{\left(\frac{\langle\alpha|\hat{H}|\Psi\rangle}{\langle\phi|\Psi\rangle} - E[\langle\phi|,|\Psi\rangle]\frac{\langle\alpha|\Psi\rangle}{\langle\phi|\Psi\rangle}\right)d\varepsilon}{\langle\alpha|d\varepsilon} = \left(\frac{\hat{H}|\Psi\rangle}{\langle\phi|\Psi\rangle} - E[\langle\phi|,|\Psi\rangle]\frac{|\Psi\rangle}{\langle\phi|\Psi\rangle}\right) = \frac{\hat{H}|\Psi\rangle - E[\langle\phi|,|\Psi\rangle]|\Psi\rangle}{\langle\phi|\Psi\rangle} \stackrel{!}{=} 0$
$\boxed{\hat{H}|\Psi\rangle - E[\langle\phi|,|\Psi\rangle]|\Psi\rangle = 0}$</td></tr>
<tr><td>Beschränkte Variation</td><td>Annahme: Testfunktion mit variierbaren Parametern $\alpha,\beta,\gamma,\ldots$: $|\Psi_T(\vec{r},\alpha,\beta,\gamma,\ldots)\rangle$
Wir suchen α,β,γ, so dass $E(\alpha,\beta,\gamma,\ldots) = \frac{\langle\Psi_T(\vec{r},\alpha,\beta,\gamma,\ldots)|\hat{H}|\Psi_T(\vec{r},\alpha,\beta,\gamma,\ldots)\rangle}{\langle\Psi_T(\vec{r},\alpha,\beta,\gamma,\ldots)|\Psi_T(\vec{r},\alpha,\beta,\gamma,\ldots)\rangle}$ extremal (minimal) wird $\Longrightarrow \boxed{\frac{\partial E}{\partial\alpha} = \frac{\partial E}{\partial\beta} = \frac{\partial E}{\partial\gamma} = \cdots = 0}$
Funktioniert deshalb, weil wir damit im Raum der gewählten Funktionen diejenige finden, die den geringsten Energie-eigenwert hat. Würden wir diese Funktion als Superposition der exakten Eigenfunktionen anschreiben, kämen am wenigsten „angeregte" Zustände vor. $E_{min}^{var} = \langle\tilde{\Psi}_T|\hat{H}|\tilde{\Psi}_T\rangle = \sum_n \langle\tilde{\Psi}_T|n\rangle E_n\langle n|\tilde{\Psi}_T\rangle = \sum_n E_n|\langle\tilde{\Psi}_T|n\rangle|^2 \geq E_0\langle\tilde{\Psi}_T|\tilde{\Psi}_T\rangle = E_0$</td></tr>
</table>

Zeitabhängige Störungsrechnung

<table>
<tr><td>Hamilton</td><td>Für $t < 0$: $\hat{H} = \hat{H}_0$; $\hat{H}_0$...ungestörter Hamilton, nicht zeitabhängig; EW-Problem $\hat{H}_0|\phi_n\rangle = \varepsilon_n|\phi_n\rangle$ gelöst; $|\phi_n\rangle$ stationär; System nicht entartet. Zum Zeitpunkt $t = 0$ wird zeitabh. Störung $\hat{V}(t)$ eingeschaltet. Neuer Hamilton: $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}(t)$.</td></tr>
<tr><td>Aufgabe</td><td>Für $t < 0$ sei das System im Eigenzustand $|\phi_i\rangle$ (i... „initial"). Finde die zeitabh. Wahrscheinlichkeit $P_{if}(t)$, das System zum Zeitpunkt t im Eigenzustand $|\phi_f\rangle$ einer Observablen $\hat{F}$ zu finden (f...„final"). $|\phi_f\rangle$ ist nicht unbedingt EZ von $\hat{H}_0$.</td></tr>
<tr><td>Zeitentwicklung (Volterra Integral-gleichung)</td><td>Ist der Hamilton zeitabhängig, kann die Zeitentwicklung nicht durch $\hat{U}(t) = e^{-i\hat{H}(t)/\hbar}$ angegeben werden.
Schrödinger: $i\hbar\frac{d}{dt}|\Psi(t)\rangle = \hat{H}(t)|\Psi(t)\rangle \Longrightarrow \frac{d}{dt}|\Psi(t)\rangle = \frac{1}{i\hbar}\hat{H}(t)|\Psi(t)\rangle \Longrightarrow \int_0^t \frac{d}{dt}|\Psi(t')\rangle\,dt' = \frac{1}{i\hbar}\int_0^t \hat{H}(t')|\Psi(t')\rangle\,dt'$
$|\Psi(t')\rangle|_0^t = \frac{1}{i\hbar}\int_0^t \hat{H}(t')|\Psi(t')\rangle\,dt' \Longrightarrow |\Psi(t)\rangle - |\Psi(0)\rangle = \frac{1}{i\hbar}\int_0^t \hat{H}(t')|\Psi(t')\rangle\,dt'$
$|\Psi(t)\rangle = |\Psi(0)\rangle + \frac{1}{i\hbar}\int_0^t \hat{H}(t')|\Psi(t')\rangle\,dt' \Big| \Psi(t) = \hat{U}(t)|\Psi(0)\rangle$
$\hat{U}(t)|\Psi(0)\rangle = |\Psi(0)\rangle + \frac{1}{i\hbar}\int_0^t \hat{H}(t')\hat{U}(t')\,dt'|\Psi(0)\rangle \Big| :\Psi(0) \Longrightarrow \boxed{\hat{U}(t) = \mathbb{1} + \frac{1}{i\hbar}\int_0^t \hat{H}(t')\hat{U}(t')\,dt'}$ ...Volterra Integralgl.
<u>Analog im Wechselwirkungs-Bild (um triviale Zeitabhängigkeit loszuwerden):</u>
Schrödinger: $i\hbar\frac{d}{dt}|\Psi_I(t)\rangle = \hat{V}_I(t)|\Psi_I(t)\rangle \Longrightarrow \frac{d}{dt}|\Psi_I(t)\rangle = \frac{1}{i\hbar}\hat{V}_I(t)|\Psi_I(t)\rangle \Longrightarrow \int_0^t \frac{d}{dt}|\Psi_I(t')\rangle\,dt' = \frac{1}{i\hbar}\int_0^t \hat{V}_I(t')|\Psi_I(t')\rangle\,dt'$
$|\Psi_I(t')\rangle|_0^t = \frac{1}{i\hbar}\int_0^t \hat{V}_I(t')|\Psi_I(t')\rangle\,dt' \Longrightarrow |\Psi_I(t)\rangle - |\Psi_I(0)\rangle = \frac{1}{i\hbar}\int_0^t \hat{V}_I(t')|\Psi_I(t')\rangle\,dt'$
$|\Psi_I(t)\rangle = |\Psi_I(0)\rangle + \frac{1}{i\hbar}\int_0^t \hat{V}_I(t')|\Psi_I(t')\rangle\,dt'$ ... (1) $\Big| \Psi_I(t) = \hat{U}_I(t)|\Psi_I(0)\rangle$
$\hat{U}_I(t)|\Psi_I(0)\rangle = |\Psi_I(0)\rangle + \frac{1}{i\hbar}\int_0^t \hat{V}_I(t')\hat{U}(t')\,dt'|\Psi_I(0)\rangle \Big| :\Psi_I(0) \Longrightarrow \boxed{\hat{U}_I(t) = \mathbb{1} + \frac{1}{i\hbar}\int_0^t \hat{V}_I(t')\hat{U}(t')\,dt'}$ ...Volterra Integralgl.</td></tr>
<tr><td>Iterative Lösung</td><td>Nullte Ordnung: $\boxed{|\Psi_I^{[0]}(t)\rangle = |\Psi_I(0)\rangle}$ ... (2)
Erste Ordnung: (1) $\Longrightarrow |\Psi_I^{[1]}(t)\rangle = |\Psi_I(0)\rangle + \frac{1}{i\hbar}\int_0^t \hat{V}_I(t')|\Psi_I^{[0]}(t)\rangle\,dt' \stackrel{(2)}{\Longrightarrow} |\Psi_I^{[1]}(t)\rangle = |\Psi_I(0)\rangle + \frac{1}{i\hbar}\int_0^t \hat{V}_I(t')|\Psi_I(0)\rangle\,dt'$
$|\Psi_I^{[1]}(t)\rangle = |\Psi_I(0)\rangle + |\Psi_I(0)\rangle\frac{1}{i\hbar}\int_0^t \hat{V}_I(t')\,dt' \Longrightarrow \boxed{|\Psi_I^{[1]}(t)\rangle = \left(\mathbb{1} + \frac{1}{i\hbar}\int_0^t \hat{V}_I(t')\,dt'\right)|\Psi_I(0)\rangle = \hat{U}_I^{[1]}(t)|\Psi_I(0)\rangle}$ ... (3)
Zweite Ordnung: $|\Psi_I^{(2)}(t)\rangle = |\Psi_I(0)\rangle + \frac{1}{i\hbar}\int_0^t \hat{V}_I(t')|\Psi_I^{[1]}(t)\rangle\,dt' \stackrel{(3)}{\Longrightarrow}$
$|\Psi_I^{[2]}(t)\rangle = |\Psi_I(0)\rangle + \frac{1}{i\hbar}\int_0^t \hat{V}_I(t')\left(\mathbb{1} + \frac{1}{i\hbar}\int_0^{t'} \hat{V}_I(t'')\,dt''\right)|\Psi_I(0)\rangle\,dt'$
$|\Psi_I^{[2]}(t)\rangle = |\Psi_I(0)\rangle + \frac{1}{i\hbar}\int_0^t \hat{V}_I(t')\left(\mathbb{1} + \frac{1}{i\hbar}\int_0^{t'} \hat{V}_I(t'')\,dt''\right)dt'\,|\Psi_I(0)\rangle$
$|\Psi_I^{[2]}(t)\rangle = |\Psi_I(0)\rangle + \frac{1}{i\hbar}\int_0^t \left(\hat{V}_I(t') + \frac{1}{i\hbar}\hat{V}_I(t')\int_0^{t'} \hat{V}_I(t'')\,dt''\right)dt'\,|\Psi_I(0)\rangle$
$|\Psi_I^{[2]}(t)\rangle = |\Psi_I(0)\rangle + \frac{1}{i\hbar}\int_0^t \left(\hat{V}_I(t') + \frac{1}{i\hbar}\int_0^{t'} \hat{V}_I(t')\hat{V}_I(t'')\,dt''\right)dt'\,|\Psi_I(0)\rangle$
$|\Psi_I^{[2]}(t)\rangle = |\Psi_I(0)\rangle + \left(\frac{1}{i\hbar}\int_0^t \hat{V}_I(t')\,dt' + \frac{1}{(i\hbar)^2}\int_0^t\int_0^{t'} \hat{V}_I(t')\hat{V}_I(t'')\,dt''\,dt'\right)|\Psi_I(0)\rangle$
$\boxed{|\Psi_I^{[2]}(t)\rangle = \left(\mathbb{1} + \frac{1}{i\hbar}\int_0^t \hat{V}_I(t')\,dt' + \left(\frac{1}{i\hbar}\right)^2\int_0^t\int_0^{t'} \underbrace{\hat{V}_I(t')\hat{V}_I(t'')}_{vertauscht\ nicht}\,dt''\,dt'\right)|\Psi_I(0)\rangle = \hat{U}_I^{[2]}(t)|\Psi_I(0)\rangle}$ ... (4)
Exakte Lösung: $\boxed{\hat{U}_I(t) = \sum_{n=0}^{\infty}\left(\frac{1}{i\hbar}\right)^n \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 \ldots \int_0^{t_{n-1}} dt_n\, \hat{V}_I(t_1)\hat{V}_I(t_2)\ldots\hat{V}_I(t_n) = \mathcal{T}e^{\frac{1}{i\hbar}\int_0^t \hat{V}_I(t')dt'}}$ mit $\mathcal{T}$ ...Zeitordgsop.
Im Allgemeinen: $[\hat{V}_I(t)\,\hat{V}_I(t')] \neq 0$.
Nur wenn $\forall t,t'$: $[\hat{V}_I(t)\,\hat{V}_I(t')] = 0 \Longrightarrow \hat{U}_I(t) = \sum_{n=0}^{\infty}\left(\frac{1}{i\hbar}\right)^n \frac{1}{n!}\int_0^t \hat{V}_I(t')\,dt' = e^{\frac{1}{i\hbar}\int_0^t \hat{V}_I(t')dt'}$</td></tr>
</table>

Annahmen: $|\Psi_I(0)\rangle = |\phi_i\rangle$; $|\phi_i\rangle, |\phi_f\rangle$ sind EZ von H_0

Übergangsamplitude: $a_{if} = \langle\phi_f|\,\Psi_I(t)\rangle$

Übergangswahrscheinlichkeit: $P_{if} = |a_{if}|^2 = |\langle\phi_f|\,\Psi_I(t)\rangle|^2$

0. Ordnung: $P_{if}^{[0]} = |\langle\phi_f|\,\Psi_I^{[0]}(t)\rangle|^2 = |\langle\phi_f|\,\Psi_I(0)\rangle|^2 \overset{orth.}{=} 0$

Berechnung Übergangs-amplitude und Übergangs-wahrscheinlich-keit

Berechnung 1. Ordnung. Ansatz: Seien $|f_n\rangle$ die (finalen) Eigenzustände einer Observablen $\hat{F}$. Dann gilt allgemein:

$|\Psi_I(t)\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} a_{if}(t)\,|f_n\rangle \,\Big|\, \langle f_m|\cdot \Longrightarrow \langle f_m|\,\Psi_I(t)\rangle = \langle f_m|\sum_{n=0}^{\infty} a_{if}(t)\,|f_n\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} a_{if}(t)\,\langle f_m|f_n\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} a_{if}(t)\,\delta_{nm} = a_{if}(t)$

$a_{if}(t) = \langle f_m|\,\Psi_I(t)\rangle \overset{(1)}{\Rightarrow} \left\langle f_m\right|\left(|\Psi_I(0)\rangle + \frac{1}{i\hbar}\int_0^t \hat{V}_I(t')\,|\Psi_I(t')\rangle\,dt'\right)\Big\rangle = \langle f_m|\,\Psi_I(0)\rangle + \frac{1}{i\hbar}\langle f_m|\int_0^t \hat{V}_I(t')\,|\Psi_I(t')\rangle\,dt'$

$a_{if}(t) = \langle f_m|\,\Psi_I(0)\rangle + \frac{1}{i\hbar}\int_0^t \langle f_m|\,\hat{V}_I(t')\,|\Psi_I(t')\rangle\,dt' \,\Big|\,$ 1. Ordnung

$a_{if}^{[1]}(t) = \langle f_m|\,\Psi_I(0)\rangle + \frac{1}{i\hbar}\int_0^t \langle f_m|\,\hat{V}_I(t')\,|\Psi_I^{[0]}(t')\rangle\,dt' \,\Big|\, |\Psi_I^{[0]}(t')\rangle = |\Psi_I(0)\rangle$

$a_{if}^{[1]}(t) = \langle f_m|\,\Psi_I(0)\rangle + \frac{1}{i\hbar}\int_0^t \langle f_m|\,\hat{V}_I(t')\,|\Psi_I(0)\rangle\,dt' \,\Big|\, \Psi_I(0) \overset{!}{=} |\phi_i\rangle$ (gemäß Annahme)

$a_{if}^{[1]}(t) = \langle f_m|\phi_i\rangle + \frac{1}{i\hbar}\int_0^t \langle f_m|\,\hat{V}_I(t')\,|\phi_i\rangle\,dt' \,\Big|\, i \neq f \Longrightarrow \langle f_m|\phi_i\rangle = 0$

$a_{if}^{[1]}(t) = \frac{1}{i\hbar}\int_0^t \langle f_m|\,\hat{V}_I(t')\,|\phi_i\rangle\,dt' \,\Big|\, \hat{V}_I(t') = \hat{U}_0^{\dagger}(t')\,\hat{V}(t')\,\hat{U}_0(t')$

$a_{if}^{[1]}(t) = \frac{1}{i\hbar}\int_0^t \langle f_m|\,\hat{U}_0^{\dagger}(t')\,\hat{V}(t')\,\hat{U}_0(t')\,|\phi_i\rangle\,dt' = \frac{1}{i\hbar}\int_0^t \langle f_m|e^{i\varepsilon_f t/\hbar}\,\hat{V}(t')\,e^{-i\varepsilon_i t/\hbar}|\phi_i\rangle\,dt' = \frac{1}{i\hbar}\int_0^t e^{i\frac{\varepsilon_f-\varepsilon_i}{\hbar}t'}\langle f_m|\,\hat{V}(t')\,|\phi_i\rangle\,dt'$

$\boxed{a_{if}^{[1]}(t) = \frac{1}{i\hbar}\int_0^t e^{i\omega_{if}t'}\langle f_m|\,\hat{V}(t')\,|\phi_i\rangle\,dt' \;\text{ mit }\; \omega_{if} \overset{\text{def}}{=} \frac{\varepsilon_f-\varepsilon_i}{\hbar}} \Longrightarrow \boxed{P_{if}^{[1]}(t) = \frac{1}{\hbar^2}\left|\int_0^t e^{i\omega_{if}t'}\langle f_m|\,\hat{V}(t')\,|\phi_i\rangle\,dt'\right|^2}$

Goldene Fermi-Regel (Wentzel)

Übergangs-amplitude

Störung ist zeitunabhängig während der Wirkungszeit

$a_{if}^{[1]}(t) = \frac{1}{i\hbar}\int_0^t e^{i\omega_{if}t'}\langle f_m|\hat{V}|\phi_i\rangle\,dt' = \frac{1}{i\hbar}\langle f_m|\hat{V}|\phi_i\rangle\int_0^t e^{i\omega_{if}t'}\,dt' = \frac{1}{i\hbar}\frac{1}{i\omega_{if}}\langle f_m|\hat{V}|\phi_i\rangle e^{i\omega_{if}t'}\Big|_0^t = -\frac{1}{\hbar\omega_{if}}\langle f_m|\hat{V}|\phi_i\rangle\left(e^{i\omega_{if}t}-1\right)$

$a_{if}^{[1]}(t) = \frac{1}{\hbar\omega_{if}}\langle f_m|\hat{V}|\phi_i\rangle\left(1-e^{i\omega_{if}t}\right) = \langle f_m|\hat{V}|\phi_i\rangle\frac{1}{\hbar\omega_{if}}\left(e^{\frac{i\omega_{if}t}{2}}e^{-\frac{i\omega_{if}t}{2}} - e^{\frac{i\omega_{if}t}{2}}e^{\frac{i\omega_{if}t}{2}}\right)$

$a_{if}^{[1]}(t) = \langle f_m|\hat{V}|\phi_i\rangle e^{\frac{i\omega_{if}t}{2}}\frac{e^{-\frac{i\omega_{if}t}{2}}-e^{\frac{i\omega_{if}t}{2}}}{\hbar\omega_{if}}\frac{2i}{2i} \,\Bigg|\, \frac{e^{-\frac{i\omega_{if}t}{2}}-e^{\frac{i\omega_{if}t}{2}}}{2i} = \sin\left(-\frac{\omega_{if}}{2}t\right) = -\sin\left(\frac{\omega_{if}}{2}t\right)$

$a_{if}^{[1]}(t) = -\langle f_m|\hat{V}|\phi_i\rangle e^{\frac{i\omega_{if}t}{2}}\frac{2i\sin\left(\frac{\omega_{if}}{2}t\right)}{\hbar\omega_{if}}$ ... (1)

Übergangs-wahrscheinlich-keit

$P_{if}^{[1]}(t) = |a_{if}^{[1]}(t)|^2 \overset{(1)}{=} \left|-\langle f_m|\hat{V}|\phi_i\rangle e^{\frac{i\omega_{if}t}{2}}\frac{2i\sin\left(\frac{\omega_{if}}{2}t\right)}{\hbar\omega_{if}}\right|^2 = \frac{1}{\hbar^2}|\langle f_m|\hat{V}|\phi_i\rangle|^2\sin^2\left(\frac{\omega_{if}}{2}t\right)\frac{2^2}{\omega_{if}}$

$P_{if}^{[1]}(t) = \frac{1}{\hbar^2}|\langle f_m|\hat{V}|\phi_i\rangle|^2\sin^2\left(\frac{\omega_{if}}{2}t\right)\frac{1}{(\omega_{if}/2)^2} \,\Bigg|\, \lim_{t\to\infty}\left(\sin^2\left(\frac{\omega_{if}}{2}t\right)\frac{1}{(\omega_{if}/2)^2}\right) = 2\pi t\,\delta(\omega_{if})$

$\lim_{t\to\infty} P_{if}^{[1]}(t) = 2\pi t\,\delta(\omega_{if})\frac{1}{\hbar^2}|\langle f_m|\hat{V}|\phi_i\rangle|^2$

Asymptotische Übergangsrate

$\lim_{t\to\infty} W_{if} = \frac{d}{dt}\lim_{t\to\infty} P_{if}^{[1]}(t) = \frac{d}{dt}\left(\frac{2\pi t}{\hbar^2}\delta(\omega_{if})\,|\langle f_m|\hat{V}|\phi_i\rangle|^2\right) = \frac{2\pi}{\hbar^2}\delta(\omega_{if})\,|\langle f_m|\hat{V}|\phi_i\rangle|^2 \,\Big|\, \frac{1}{\hbar}\delta(\omega_{if}) = \delta(\hbar\omega_{if})$

$\lim_{t\to\infty} W_{if} = \frac{2\pi}{\hbar}\delta(\hbar\omega_{if})\,|\langle f_m|\hat{V}|\phi_i\rangle|^2 \,\Big|\, \hbar\omega_{if} = \hbar\frac{\varepsilon_f-\varepsilon_i}{\hbar} = \varepsilon_f - \varepsilon_i$

$\boxed{\lim_{t\to\infty} W_{if} = \frac{2\pi}{\hbar}\delta(\varepsilon_f-\varepsilon_i)\,|\langle f_m|\hat{V}|\phi_i\rangle|^2}$ ... Fermi's Goldene Regel (Wentzel); asymptotische Übergangsrate

Einschaltvorgang, Sudden Approximation

Einschaltvorgang

Im Zeitintervall $[-T,T]$ wird symmetrisch um $t = 0$ die Störung V mit einer „Switch"-Funktion $\mathrm{f}(t)$ eingeschaltet:
$\hat{H}(t) = (1-\mathrm{f}(t))\hat{H}_0 + \mathrm{f}(t)\,\hat{H}_1$ wobei $\mathrm{f}(-T) = 0$ und $\mathrm{f}(T) = 1$.

Transformation auf skalierte Zeit: $s = \frac{t}{T} \Longrightarrow [-T,T] \to [-1,1]$

Evolutionsoperator: $\hat{\mathrm{U}}(t,-T) = \mathbb{1} + \frac{1}{i\hbar}\int_{-T}^{t}\hat{\mathrm{H}}(t')\,\hat{\mathrm{U}}(t',-T)\,dt' \to \hat{\mathrm{U}}_T(s,-1) = \mathbb{1} + \frac{1}{i\hbar}\int_{-1}^{s}\hat{\mathrm{H}}(s')\,\hat{\mathrm{U}}(s',-1)\,ds'$

Der Parameter T des Operators $\hat{\mathrm{U}}_T$ gibt ab, wie schnell der Übergang von $\hat{H}_0$ auf $\hat{H}_1$ erfolgt.

„Sudden" Grenzfall

$\mathrm{f}(t) = \Theta(t)$; $T \to 0$; $\lim_{T\to 0}\hat{\mathrm{U}}_T(s,-1) = \mathbb{1}$. War die Wellenfunktion $|\Psi_0\rangle$ vor zum Zeitpunkt $t = 0 - \varepsilon$ noch ein Eigenzustand von $\hat{H}_0$, dann ist sie unmittelbar nach dem Einschalten $t = 0 + \varepsilon$ zwar noch unverändert, aber kein Eigenzustand des neuen Hamilton $\hat{H}_1$ mehr. Die weitere Evolution erfolgt mit $\hat{\mathrm{U}}_1(t) = e^{-i\hat{H}_1 t/\hbar}$

Seien $|\mathrm{n}\rangle$ Eigenzustände des „neuen" Hamiltons $\hat{H}_0$. Dann gilt:

$|\Psi(t)\rangle = \sum_{n,m}|m\rangle\langle m|\,\hat{\mathrm{U}}_1(t)\,|n\rangle\langle n|\Psi_0\rangle = \sum_{n,m}|m\rangle\langle m|e^{-iE_n t/\hbar}|n\rangle\langle n|\Psi_0\rangle = \sum_{n,m}|m\rangle e^{-iE_n t/\hbar}\langle m|n\rangle\langle n|\Psi_0\rangle \,\big|\, \langle m|n\rangle = \delta_{mn}$

$|\Psi(t)\rangle = \sum_n|n\rangle e^{-iE_n t/\hbar}\langle n|\Psi_0\rangle \,\big|\, \langle\phi_f|\cdot \Longrightarrow \langle\phi_f|\,\Psi(t)\rangle = a_{if} = \sum_n\langle\phi_f|n\rangle e^{-\frac{iE_n t}{\hbar}}\langle n|\Psi_0\rangle$ ... (1)

Übergangswahrscheinlichkeit: $P = |a_{if}|^2 \overset{(1)}{\Rightarrow} P \boxed{= \left|\sum_n\langle\phi_f|n\rangle e^{-\frac{iE_n t}{\hbar}}\langle n|\Psi_0\rangle\right|^2}$

$P = \sum_n|\langle\phi_f|n\rangle|^2|\langle n|\Psi_0\rangle|^2 + \underbrace{2\,\mathrm{Re}\left(\sum_{m>n}\langle\phi_f|n\rangle\langle n|\Psi_0\rangle\langle\phi_f|m\rangle^*\langle m|\Psi_0\rangle^* e^{-\frac{i(E_n-E_m)t}{\hbar}}\right)}_{Mischterme\ verursachen\ "Quantenbeats"}$

- Wird ein unendlich hoher Potentialtopf plötzlich schmäler, müsste die Wellenfunktion im ersten Moment in den „verbotenen" Bereich hineinragen, was unendlich viel Energie kosten würde (und daher nicht möglich ist)
- Wird ein harmonisches Oszillator-Potential plötzlich schmäler, hat die Wellenfunktion im ersten Moment einen höheren Wert im „äußeren" Bereich, als dies dem stationären Zustand entspricht. Dies ist nur mit Energiezufuhr möglich
- Umgekehrt: Wird ein harmonisches Oszillator-Potential plötzlich breiter, ist die Wellenfunktion im „äußeren" Bereich im ersten Moment null, weswegen weniger Energie benötigt wird (Energie wird abgegeben).

Systeme identischer Teilchen

Zählung von Zuständen

Das „naive" Zählen von Zuständen führt bei nicht unterscheidbaren Quantenteilchen i.A. nicht zum richtigen Ergebnis.
Beispiel: Zwei Teilchen können die Energieniveaus 0 und 1 besetzen. Naive Zählung: $\{|00\rangle, |01\rangle, |10\rangle, |11\rangle\} \to$ 4 Zustände.
Aber: Tatsächlich kann nicht zwischen $|01\rangle$ und $|10\rangle$ unterschieden werden. Tatsächlich gibt es die folgenden Zustände:
Bei Bosonen: $\left\{|00\rangle, \frac{1}{\sqrt{2}}(|01\rangle + |10\rangle), |11\rangle\right\} \to$ drei Zustände (symmetrisch)
Bei Fermionen: $\left\{\frac{1}{\sqrt{2}}(|01\rangle - |10\rangle)\right\} \to$ nur 1 antisymmetrischer Zustand, $|00\rangle$ und $|11\rangle$ nicht erlaubt (vernachlässige Spin)

Transpositions-operator

$\hat{P}_{ij} \to$ vertauscht i und j, z.B. $\vec{r}_i \leftrightarrow \vec{r}_j; \vec{p}_i \leftrightarrow \vec{p}_j; \hat{P}_{12}\,\Psi(\vec{x}_1, \vec{x}_2) \to \Psi(\vec{x}_2, \vec{x}_1)$ | Kommutator $[\hat{P}_{ij}, \hat{H}] = 0 \Longrightarrow \exists$ gem. Eigenbasis

Eigenschaften: $\hat{P}_{ij}^2 = \mathbb{1}$; $\hat{P}_{ij} = \hat{P}_{ij}^{-1}$ | Beispiel: $\hat{P}_{ij}\,\hat{V}(i,j)\,\hat{P}_{ij}^{-1} = \hat{P}_{ij}\,\hat{V}(i,j)\,\hat{P}_{ij} = \hat{V}(j,i) = \hat{V}(i,j)$ (sic!), weil $\hat{V}(i,j) = \frac{1}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|}$

Weil $\hat{P}_{ij}^2 = \mathbb{1}$ nur Eigenwerte ± 1 möglich.
Jeder gemeinsame Eigenvektor $\hat{P}_{ij}, \hat{H}$ ist entweder symmetrisch (bosonisch) oder antisymmetrisch (Fermionisch)

Permutations-operator

Bei N>2 sind nicht alle Permutationen durch einfache Transpositionen darstellbar, aber als Produkt von Transpositionen:
$\hat{P}_{123}|abc\rangle = \hat{P}_{12}\hat{P}_{23}|abc\rangle = \hat{P}_{12}|acb\rangle = |cab\rangle$ Achtung: Sequenz von Transpositionen kommutiert nicht: $[\hat{P}_{12}, \hat{P}_{23}] \neq 0 \Longrightarrow$
$\nexists$ gemeinsames VONS für alle Transpositionsoperatoren. Es ist nicht für alle Eigenzustände von $\hat{H}$ möglich entweder vollständig symmetrisch oder antisymmetrisch unter Transpositionen zu sein.

Symmetrisierer Antisymme-trisierer

Antisymme-trisierer: $\hat{A} = \frac{1}{N!}\sum_P (-1)^P P$ | P ... beliebige Permutation, $(-1)^P$=−1 wenn ungerade Zahl von Permutat., sonst 1 | Symmetri-sierer: $\hat{S} = \frac{1}{N!}\sum_P P$

Eigenschaften: $\hat{S}^2 = \hat{S}$; $\hat{A}^2 = \hat{A}$; $\hat{S}\hat{A} = \hat{A}\hat{S} = 0$ | Unterräume: $\mathcal{H}_S = \hat{S}\mathcal{H}$; $\mathcal{H}_A = \hat{A}\mathcal{H}$; $\mathcal{H}_S \cap \mathcal{H}_A = \{\}$

Slater-Determinante

Konstuktion komplett antiymmetr. Zustand:
$$|\Psi_A\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}}\begin{vmatrix} |a\rangle_1 & |a\rangle_2 & \dots & |a\rangle_n \\ |b\rangle_1 & |b\rangle_2 & \dots & |b\rangle_n \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ |\mu\rangle_1 & |\mu\rangle_2 & \dots & |\mu\rangle_n \end{vmatrix}$$
$|a\rangle_i$ ... i-tes Teilchen im Zustand a ($a \mathrel{\hat{=}}$ alle QZ)

Konstruktion Komplett symmetrischer Zustand:
$$|\Psi_S\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}}\begin{vmatrix} |a\rangle_1 & |a\rangle_2 & \dots & |a\rangle_n \\ |b\rangle_1 & |b\rangle_2 & \dots & |b\rangle_n \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ |\mu\rangle_1 & |\mu\rangle_2 & \dots & |\mu\rangle_n \end{vmatrix}_+$$

Zweite Quantisierung

Fock-Raum

Der Fock-Raum $\mathcal{H}^{Fock}$ entsteht als Summe der einzelnen Hilberträume für kein Teilchen ($\mathcal{H}_0$), ein Teilchen ($\mathcal{H}_1$), zwei Teilchen ($\mathcal{H}_2$), usw: $\mathcal{H}^{Fock} = \mathcal{H}_0 \oplus \mathcal{H}_1 \oplus \mathcal{H}_2 \oplus \dots \oplus \mathcal{H}_N \oplus \dots$ Die Basis B_0 von $\mathcal{H}_0$ ist $B_0 = \{|0\rangle\} = \{|\text{vac}\rangle\}$. Achtung: $|0\rangle \neq 0|0\rangle$, sondern $\langle vac|vac\rangle = 1$. Die Basis B_1 von $\mathcal{H}_1$ ist $B_1 = \{|\Phi_i\rangle\}$. Die Basis B_n von $\mathcal{H}_n$ ist
$B_n = \left\{\hat{O}\,\frac{\sqrt{N!}}{\sqrt{n_1!n_2!\dots n_i!}}|\Phi_{\alpha 1}\rangle|\Phi_{\alpha 2}\rangle \dots |\Phi_{\alpha N}\rangle\right\}$ mit
N ... Gesamtzahl Teilchen, n_i ... Teilchenzahl im jeweiligen Zustand und $\hat{O} = \hat{S}$ für Bosonen bzw. $\hat{O} = \hat{A}$ für Fermionen. Ein VONS für $\mathcal{H}^{Fock}$ ist gegeben mit $B_N = \{n_1, n_2, \dots, n_i, \dots\}$.

Besetzungszahl formalismus

Ein System aus N ununterscheidbaren Teilchen und diskreten Energieniveaus kann dann im Fock-Raum sehr kompakt mit dem Besetzungszahlformalismus angegeben werden. Der Fock-Vektor $|n_1, n_2, \dots, n_m, \dots\rangle = \hat{O}\,\frac{\sqrt{N!}}{n_1!n_2!\dots n_i!}|\Phi_{\alpha 1}\rangle|\Phi_{\alpha 2}\rangle \dots |\Phi_{\alpha N}\rangle$ bedeutet, dass n_1 (ununterscheidbare) Teilchen im ersten Zustand, n_2 Teilchen im zweiten Zustand und n_m Teilchen im m-ten Zustand sind, wobei die Reihenfolge der Zustände beliebig festgelegt werden kann, aber dann konstant gehalten werden muss.

Basisoperatoren

Erzeuger: $\hat{a}_i^\dagger\,|n_1, n_2, \dots, n_i, \dots\rangle = \sqrt{n_i + 1}|n_1, n_2, \dots, n_i + 1, \dots\rangle$ | $\hat{a}_i^\dagger\,|vac\rangle = |n_1 = 0, n_2 = 0, \dots, n_i = 1, \dots\rangle$
Bei Fermionen: Zustände höchstens 1x besetzt: $\hat{a}_i^\dagger\,|n_1, n_2, \dots, n_i = 1, \dots\rangle = 0$

Vernichter: $\hat{a}_i\,|n_1, n_2, \dots, n_i, \dots\rangle = \sqrt{n_i}|n_1, n_2, \dots, n_i - 1, \dots\rangle$ | $\hat{a}_i\,|n_1, n_2, \dots, n_i = 0, \dots\rangle = 0$

Basis erzeugen: $|n_1, n_2, \dots, n_i, \dots\rangle = \prod_{i=1}^{\infty}\frac{1}{\sqrt{n_i!}}\left(\hat{a}_i^\dagger\right)^{n_i}|vac\rangle$ | $\hat{a}_i\hat{a}_i^\dagger\,|n_1, n_2, \dots, n_i, \dots\rangle = (n_i + 1)\,|n_1, n_2, \dots, n_i, \dots\rangle$

Besetzungszahloperator: $\hat{N}_i\,|n_1, n_2, \dots, n_i, \dots\rangle = \hat{a}_i^\dagger\hat{a}_i\,|n_1, n_2, \dots, n_i, \dots\rangle = n_i\,|n_1, n_2, \dots, n_i, \dots\rangle$

Fermi-Algebra

$\hat{a}_1^\dagger\hat{a}_2^\dagger|vac\rangle \mathrel{\hat{=}} \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\Phi_2\rangle_1|\Phi_1\rangle_2 - |\Phi_2\rangle_2|\Phi_1\rangle_1\right)$; $\hat{a}_2^\dagger\hat{a}_1^\dagger|vac\rangle \mathrel{\hat{=}} \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\Phi_1\rangle_1|\Phi_2\rangle_2 - |\Phi_1\rangle_2|\Phi_2\rangle_1\right) \Longrightarrow$
$\hat{a}_i^\dagger\hat{a}_j^\dagger = -\hat{a}_j^\dagger\hat{a}_i^\dagger \Longrightarrow \boxed{[\hat{a}_i^\dagger\hat{a}_j^\dagger]_+ = [\hat{a}_i, \hat{a}_j]_+ = 0}$. Zustände höchstens 1x besetzt: $\boxed{[\hat{a}_i, \hat{a}_j^\dagger]_+ = \delta_{ij}}$

Bose-Algebra: $[\hat{a}_i^\dagger\hat{a}_j^\dagger]$=$[\hat{a}_i, \hat{a}_j]$=0; $[\hat{a}_i, \hat{a}_j^\dagger] = \delta_{ij}$

Einteilchen-operator

Wir suchen eine Darstellung eines allgemeinen Operators $\hat{F}^{(1)}$ durch $\hat{a}^\dagger$ und $\hat{a}$, wobei der Operator $\hat{F}^{(1)}$ als Summe von Einteilchenoperatoren gegeben ist: $\hat{F}^{(1)} = \hat{f}_1^{(1)} + \hat{f}_2^{(1)} + \dots + \hat{f}_N^{(1)} = \sum_{i=1}^N \hat{f}_i^{(1)}$. Ein Beispiel wäre der Hamilton-Operator $\hat{H}_V$, der sich aus der Summe der Einteilchenpotentiale $\hat{V}(\vec{r}_i)$ ergibt: $\hat{H}_V = \sum_{i=1}^N \hat{V}(\vec{r}_i)$. Die Matrixelemente eines Einteilchen-operators $\hat{f}_i^{(1)}$ ergeben sich in der Basis $B_1 = \{|\Phi_i\rangle\}$ zu $f_{\alpha,\beta}^{(1)} = \langle\Phi_\alpha|\hat{f}^{(1)}|\Phi_\beta\rangle$. Damit können wir den Einteilchenoperator $\hat{f}_i^{(1)}$ als Matrix anschreiben: $\hat{f}_i^{(1)} = \sum_{\alpha,\beta} f_{\alpha,\beta}^{(1)}\,|\Phi_\alpha\rangle_i\langle\Phi_\beta|_i$. Dabei sind $|\Phi_\alpha\rangle_i$ die Basisvektoren bezüglich des i-ten Einteilchen-operators $\hat{f}_i^{(1)}$. Nun können wir den Operator $\hat{F}^{(1)}$ schreiben als $\hat{F}^{(1)} = \sum_{i=1}^N \hat{f}_i^{(1)} = \sum_{i=1}^N\sum_{\alpha,\beta} f_{\alpha,\beta}^{(1)}\,|\Phi_\alpha\rangle_i\langle\Phi_\beta|_i \Longrightarrow$

$\boxed{\hat{F}^{(1)} = \sum_{\alpha,\beta} f_{\alpha,\beta}^{(1)}\sum_{i=1}^N |\Phi_\alpha\rangle_i\langle\Phi_\beta|_i}$. Wirkung von $\hat{F}^{(1)}$:

$\hat{F}^{(1)}|n_1, \dots, n_\alpha, \dots, n_\beta, \dots\rangle = \sum_{\alpha,\beta} f_{\alpha,\beta}^{(1)}\sum_{i=1}^N |\Phi_\alpha\rangle_i\langle\Phi_\beta|_i\,|n_1, \dots, n_\alpha, \dots, n_\beta, \dots\rangle$

$\hat{F}^{(1)}|n_1, \dots, n_\alpha, \dots, n_\beta, \dots\rangle = \sum_{\alpha,\beta} f_{\alpha,\beta}^{(1)}\sum_{i=1}^N |\Phi_\alpha\rangle_i\langle\Phi_\beta|_i\,\hat{O}\,\frac{\sqrt{N!}}{\sqrt{n_1!n_2!\dots n_i!}}|\Phi_{\alpha 1}\rangle|\Phi_{\alpha 2}\rangle \dots |\Phi_{\alpha N}\rangle$ | z.B. Bosonen: $\hat{O} = \frac{1}{N!}\sum_P P$

$\hat{F}^{(1)}|n_1, \dots, n_\alpha, \dots, n_\beta, \dots\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!n_1!n_2!\dots n_i!}}\sum_{\alpha,\beta} f_{\alpha,\beta}^{(1)}\sum_P P_p\sum_{i=1}^N |\Phi_\alpha\rangle_i\langle\Phi_\beta|_i\,|\Phi_{\alpha 1}\rangle|\Phi_{\alpha 2}\rangle \dots |\Phi_{\alpha N}\rangle$

Zwei Fälle: (1) $\nexists\alpha i: \alpha_i = \beta \Longrightarrow$Produkt null (2) $\exists\alpha i: \alpha_i = \beta \Longrightarrow \alpha_i$wird durch α ersetzt. Wir entfernen also ein Teilchen im Zustand $\Phi_{\alpha i} = \Phi_\beta$ und fügen ein Teilchen im Zustand Φ_α hinzu $\Longrightarrow$

$$\boxed{\hat{F}^{(1)}|n_1, \dots, n_\alpha, \dots, n_\beta, \dots\rangle = \sum_{\alpha,\beta} f_{\alpha,\beta}^{(1)}\,n_\beta\,\frac{\sqrt{n_\alpha + 1}}{\sqrt{n_\beta}}|n_1, \dots, n_\alpha, \dots, n_\beta, \dots\rangle = \sum_{\alpha,\beta} f_{\alpha,\beta}^{(1)}\,n_\beta\hat{a}_\alpha^\dagger\hat{a}_\beta|n_1, \dots, n_\alpha, \dots, n_\beta, \dots\rangle}$$

Jaynes-Cummings Modell

WW 2-Level Atom im quantisierten Lichtfeld einer Mode in Resonator: $\hat{H}_{JC} = \hat{H}_{Feld} + \hat{H}_{Atom} + \hat{H}_{WW}$; $\hat{H}_{Feld} = \hbar\omega_c\hat{a}^\dagger\hat{a}$;
$\hat{H}_{Atom} = \hbar\omega_a\hat{\sigma}_+\hat{\sigma}_-$ mit $\hat{\sigma}_+ = |e\rangle\langle g| \Longrightarrow \hat{\sigma}_+|g\rangle = |e\rangle$; $\hat{\sigma}_- = |g\rangle\langle e| \Longrightarrow \hat{\sigma}_-|e\rangle = |g\rangle$; $\hat{H}_{WW} = \hbar g(\hat{a}\hat{\sigma}_+ + \hat{a}^\dagger\hat{\sigma}_-)$

Relativistische Quantenmechanik

Motivation	Schrödingergleichung mit kinetischer Energie $E = \frac{p^2}{2m}$ nichtrelativistisch, daher nur für $v \ll c$. Relativistische Dispersions-relation: $E^2 = p^2c^2 + m^2c^4 \Longrightarrow E = \pm\sqrt{p^2c^2 + m^2c^4}$. Problem: Negative Energien?
1. Versuch	Wir kümmern uns nur um $E = +\sqrt{p^2c^2 + m^2c^4}$. Neue „relativistische SGL“ für freies Teilchen: $i\hbar\frac{d}{dt}\Psi(\vec{r},t) = \hat{H}\,\Psi(\vec{r},t) \Longrightarrow$ $i\hbar\frac{d}{dt}\Psi(\vec{r},t) = \sqrt{\hat{p}^2c^2 + m^2c^4}\,\Psi(\vec{r},t) = \sqrt{-\hbar^2c^2\Delta + m^2c^4}\,\Psi(\vec{r},t) \Longrightarrow \boxed{i\hbar\frac{d}{dt}\Psi(\vec{r},t) = mc^2\sqrt{1 - \frac{\hbar^2}{m^2c^2}\Delta}\,\Psi(\vec{r},t)} \ldots (1)$ $\sqrt{1-x} = 1 - \frac{x}{2} - \frac{x^2}{8} - \cdots \overset{(1)}{\Longrightarrow} i\hbar\frac{d}{dt}\Psi(\vec{r},t) \approx mc^2\left(1 - \frac{\hbar^2}{2m^2c^2}\Delta - \frac{\hbar^4}{8m^4c^4}\Delta^2 - \cdots\right) \ldots (2)$ **Probleme:** (1) $\Longrightarrow$ Zeit-Raum-asymmetrisch, (2) $\Longrightarrow$ Enthält Ableitung beliebiger Ordnung $\Longrightarrow$ hochgradig nichtlokal!
2. Versuch: Klein Gordon Gleichung	Quantisierung von $E^2 = p^2c^2 + m^2c^4$: „Quadratische relativistische SGL“: $-\hbar^2\frac{d^2}{dt^2}\Psi(\vec{r},t) = E^2\,\Psi(\vec{r},t) \Longrightarrow$ $-\hbar^2\frac{d^2}{dt^2}\Psi(\vec{r},t) = (\hat{p}^2c^2 + m^2c^4)\,\Psi(\vec{r},t) = (-\hbar^2c^2\Delta + m^2c^4)\,\Psi(\vec{r},t) = -\hbar^2c^2\Delta\,\Psi(\vec{r},t) + m^2c^4\,\Psi(\vec{r},t) \vert : (\hbar^2c^2) \Longrightarrow$ $-\frac{1}{c^2}\frac{d^2}{dt^2}\Psi(\vec{r},t) = -\Delta\,\Psi(\vec{r},t) + \frac{m^2c^2}{\hbar^2}\Psi(\vec{r},t) \Longrightarrow \boxed{\left(\Delta - \frac{1}{c^2}\frac{d^2}{dt^2}\right)\Psi(\vec{r},t) = \frac{m^2c^2}{\hbar^2}\Psi(\vec{r},t)} \ldots (3)$ $\boxed{\Box\,\Psi(\vec{r},t) = k_c^2\,\Psi(\vec{r},t)}$ … (4) Klein-Gordon Gleichung (mit $\Box = \left(\Delta - \frac{1}{c^2}\frac{d^2}{dt^2}\right); k_c = \frac{mc}{\hbar}$) Lösung: $\boxed{\Psi(\vec{r},t) \propto e^{-\frac{i}{\hbar}(Et - \vec{p}\cdot\vec{x})}}$ **Vorteil:** Ort-Zeit-Symmetrie. **Nachteil (?):** Negative Energie-Lösungen $\Psi^*\Box\Psi = -k_c^2\Psi^*\Psi \ldots (5a);\ \Psi\Box\Psi^* = -k_c^2\Psi\Psi^* \ldots (5b) \xrightarrow{(5a)-(5b)} \Psi^*\Box\Psi - \Psi\Box\Psi^* = 0 \Longrightarrow \Psi^*\partial_\mu\partial^\mu\Psi - \Psi\partial_\mu\partial^\mu\Psi^* = 0 \Longrightarrow$ $\partial_\mu(\Psi^*\partial^\mu\Psi - \Psi\partial^\mu\Psi^*) = 0 \Longrightarrow \frac{1}{c^2}\frac{\partial}{\partial t}\left(\Psi^*\frac{\partial}{\partial t}\Psi - \Psi\frac{\partial}{\partial t}\Psi^*\right) - \vec{\nabla}(\Psi^*\vec{\nabla}\Psi - \Psi\vec{\nabla}\Psi^*) = 0 \Longrightarrow$ $\frac{1}{c^2}\frac{\partial}{\partial t}\left(\Psi^*\frac{\partial}{\partial t}\Psi - \Psi\frac{\partial}{\partial t}\Psi^*\right) = \vec{\nabla}(\Psi^*\vec{\nabla}\Psi - \Psi\vec{\nabla}\Psi^*) \Big\vert \frac{i\hbar}{2m} \Longrightarrow \frac{\partial}{\partial t}\left[\frac{i\hbar}{2mc^2}\left(\Psi^*\frac{\partial}{\partial t}\Psi - \Psi\frac{\partial}{\partial t}\Psi^*\right)\right] = -\vec{\nabla}\left[\frac{\hbar}{2mi}(\Psi^*\vec{\nabla}\Psi - \Psi\vec{\nabla}\Psi^*)\right]$ $vgl.: \vec{j} = \frac{\hbar}{2mi}(\Psi^*\vec{\nabla}\Psi - \Psi\vec{\nabla}\Psi^*) \Longrightarrow \frac{\partial}{\partial t}\left[\frac{i\hbar}{2mc^2}\left(\Psi^*\frac{\partial}{\partial t}\Psi - \Psi\frac{\partial}{\partial t}\Psi^*\right)\right] = -\vec{\nabla}\cdot\vec{j} \Big\vert\, vgl{:}\, \frac{\partial}{\partial t}\rho = -\vec{\nabla}\cdot\vec{j} \Longrightarrow$ Wahrscheinlichkeitsdichte $\boxed{\rho = \frac{i\hbar}{2mc^2}\left(\Psi^*\frac{\partial}{\partial t}\Psi - \Psi\frac{\partial}{\partial t}\Psi^*\right)}$ Wir erwarten: $\rho \in \mathbb{R}, \rho > 0$. **Problem:** z.B. bei freier Lösung $\Psi(\vec{r},t) = e^{-\frac{i}{\hbar}(Et - \vec{p}\cdot\vec{x})}$ ist $\rho < 0$ für $E < 0$.
3. Versuch Dirac-Gleichung (Lösung)	Ansatz: $i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\vec{r},t) = \hat{H}_D\,\Psi(\vec{r},t)$ mit $\hat{H}_D = c\vec{\alpha}\vec{p} + \beta mc^2 + \hat{V} \ldots (1) \Longrightarrow \boxed{i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\vec{r},t) = \left(c\vec{\alpha}\vec{p} + \beta mc^2 + \hat{V}\right)\Psi(\vec{r},t)} \ldots (2) \Longrightarrow$ $\left(\hat{H}_D - \hat{V}\right)^2 \overset{(1)}{=} (c\vec{\alpha}\vec{p} + \beta mc^2)^2 \overset{!}{=} p^2c^2 + m^2c^4 \Longrightarrow (c\alpha_ip_i + \beta mc^2)(c\alpha_jp_j + \beta mc^2) = p^2c^2 + m^2c^4$ $\alpha_ip_i\alpha_jp_jc^2 + \beta^2m^2c^4 + mc^3\alpha_ip_i\beta + mc^3\beta\alpha_jp_j = p^2c^2 + m^2c^4 \,\vert\, \alpha_i$ und β von x^μ unabh.$\Longrightarrow [\alpha_i, p_j] = 0, [\beta, p_i] = 0$ $\alpha_i\alpha_jp_ip_jc^2 + \beta^2m^2c^4 + mc^3p_i(\alpha_i\beta + \beta\alpha_i) = p^2c^2 + m^2c^4 + 0 \Longrightarrow$ $\alpha_i\alpha_j = \mathbb{1} \Longrightarrow \alpha_i\alpha_j + \alpha_j\alpha_i = 2\delta_{ij};\ \beta^2 = \mathbb{1};\ \alpha_i\beta + \beta\alpha_i = \mathbb{0}$ … Cliffort-Algebra Wir brauchen 4 Dimensionen um GLSYS zu lösen (Matrix-GLSYS)! Lösung: $\alpha_i = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_i \\ \sigma_i & 0 \end{pmatrix};\ \beta = \begin{pmatrix} \mathbb{1}_2 & \mathbb{0}_2 \\ \mathbb{0}_2 & -\mathbb{1}_2 \end{pmatrix}; \Psi(\vec{r},t) = \begin{pmatrix} \Psi_1(\vec{r},t) \\ \Psi_2(\vec{r},t) \\ \Psi_3(\vec{r},t) \\ \Psi_4(\vec{r},t) \end{pmatrix}$ … ist kein SRT 4er-Vektor, sondern ein 4er-Spinor $\in \mathbb{C}^4$! Wahrscheinlichkeitsdichte $\boxed{\rho = \Psi^\dagger(\vec{r},t)\,\Psi(\vec{r},t) = \sum_{i=1}^4 \Psi_i^*(\vec{r},t)\,\Psi_i(\vec{r},t)}$ Wahrscheinlichkeitsstromdichte: $\boxed{\vec{j} = \Psi^\dagger(\vec{r},t)\,c\vec{\alpha}\,\Psi(\vec{r},t)}$ Kontinuitätsgleichung: $i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\underbrace{(\Psi^\dagger\Psi)}_{\rho} = \Psi^\dagger\hat{H}_D\Psi - \left(\hat{H}_D\Psi\right)^\dagger\Psi = -i\hbar\vec{\nabla}\underbrace{(\Psi^\dagger c\vec{\alpha}\Psi)}_{\vec{j}} \Longrightarrow \boxed{\frac{\partial}{\partial t}\rho + \vec{\nabla}\vec{j} = 0} \Longrightarrow$ positiv definite Dichte ✓
Lösung für freies Teilchen	$\hat{V} = 0 \overset{(2)}{\Longrightarrow} i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\vec{r},t) = (c\vec{\alpha}\vec{p} + \beta mc^2)\,\Psi(\vec{r},t) \Big\vert : c \Longrightarrow i\hbar\frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\vec{r},t) = (\vec{\alpha}\vec{p} + \beta mc)\,\Psi(\vec{r},t) \Big\vert \cdot\beta$ $i\hbar\beta\frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t}\Psi = (\beta\vec{\alpha}\vec{p} + \beta^2mc)\Psi \Big\vert\, \beta^2 = \mathbb{1} \Longrightarrow i\hbar\beta\frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t}\Psi = (\beta\vec{\alpha}\vec{p} + mc\mathbb{1})\Psi \Longleftrightarrow i\hbar\partial^\mu\partial_\mu\Psi - mc\Psi = 0$
Freies Teilchen ohne Impuls	$i\hbar\beta\frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t}\Psi = mc\mathbb{1}\Psi \Longrightarrow i\hbar\beta\frac{\partial}{\partial t}\Psi = mc^2\mathbb{1}\Psi \Longrightarrow i\hbar\begin{pmatrix} \mathbb{1}_2 & \mathbb{0}_2 \\ \mathbb{0}_2 & -\mathbb{1}_2 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \dot{\eta} \\ \dot{\chi} \end{pmatrix} = mc^2\begin{pmatrix} \eta \\ \chi \end{pmatrix} \Longrightarrow \begin{matrix} i\hbar\dot{\eta} = mc^2\eta \\ i\hbar\dot{\chi} = -mc^2\chi \end{matrix}$
Fermi-See	Immer noch Lösungen mit negativen Energien! Dirac’s Lösung: Der makroskopische Vakuumzustand ist dadurch gekennzeichnet, dass alle Zustände mit negativer Energie bereits besetzt sind. Die mit positiver Energie sind unbesetzt. Da für Fermionen das Pauli-Prinzip gilt, ist es nicht möglich, einen Zustand mit negativer Energie neu zu besetzen. Bringt man aber eine Energie $E > 2mc^2$ auf, kann ein Teilchen aus dem negativen in den positiven Energiebereich angeregt werden. Das Teilchen im positiven Bereich ist Materie; das „Loch“ im negativen Bereich Antimaterie.

Quantentheorie I

5.12.2023

Photonen und Wärmestrahlung

Planksches Wirkungsquantum	$h = 6{,}626 \cdot 10^{-34} Js$ Reduz. Wirkgsquantum: $\hbar = \frac{h}{2\pi}$ Energie: $E_{photon} = hf = \hbar\omega = pc$ Impuls: $p = \frac{E}{c} = \frac{hf}{c} = \frac{\hbar\omega}{c} = \hbar k = \frac{h}{2\pi}\frac{2\pi}{\lambda} = \frac{h}{\lambda}$ $[h] = [Wirkung] = [Energie \cdot Zeit] = [Impuls \cdot Länge] = [\int L\, dt]$; L… Lagrange-Funktion
Spektrale Energiedichte	$\varepsilon(\omega) = \frac{dE}{dV\, d\omega} = \langle E\rangle \mathrm{n}(\omega)$ Modendichte: $\mathrm{n}(\omega) = \frac{1}{V}\frac{d\,\mathrm{N}(\omega)}{d\omega} = \frac{\omega^2}{\pi^2 c^3}$; $\mathrm{n}(f) = \frac{8\pi f}{c^3}$ … Dichte alle Moden $\leq \omega$ bzw. $\leq f$
Rayleigh-Jeans (nur für kleine Frequenzen):	Bolzmannverteilung Wahrsch.dichte: $\mathrm{p}(E;\beta) = \frac{e^{-\beta E}}{\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\beta E'} dE'}$; $\beta = \frac{1}{k_B T}$ Erwartungswert Energie $\langle E\rangle = \int_0^\infty E\, \mathrm{p}(E;\beta)\, dE = k_B T \Rightarrow$ $\varepsilon_{RJ}(\omega) = \langle E\rangle \mathrm{n}(\omega) = k_B T \frac{\omega^2}{\pi^2 c^3}$ $\varepsilon_{RJ}(f) = k_B T\, \mathrm{n}(f) = k_B T \frac{8\pi f}{c^3}$
Wiensch'es Gesetz f. große ω	$\varepsilon_W(\omega) = A\omega^3 e^{-\rho\omega}$ Aus $\varepsilon_{pl}(\omega \to \infty)$: $A = \frac{\hbar\omega^3}{\pi^2 c^3}$; $\rho = \frac{\hbar}{k_B T}$ Wiensches versch.ges. $\frac{\omega_{max}}{k_B T} = const$; $\lambda_{max}(T) = \frac{C_W}{T}$; $C_W = 2{,}898\, mm \cdot K$
Planck'sches Strahlungsges.	Bose-Einstein Wahrsch. pro diskreter Energie $\mathrm{P}_n(E_n;\beta) = \frac{e^{-\beta E_n}}{\sum_{n=0}^\infty e^{-\beta E_n}}$; $\beta = \frac{1}{k_B T}$; $E_n = \hbar\omega n$ Erwartungswert Energie $\langle E\rangle = \sum_{n=0}^\infty \mathrm{E}_n \mathrm{P}_n = \frac{\hbar\omega}{e^{\hbar\omega/(k_B T)} - 1} \Rightarrow$ $\varepsilon_{pl}(\omega) = \langle E\rangle \mathrm{n}(\omega) = \frac{\hbar\omega^3}{\pi^2 c^3}\frac{1}{e^{\hbar\omega/(k_B T)} - 1}$
Verschränkung	$\lvert\Psi\rangle = \alpha_1\lvert 11\rangle + \alpha_2\lvert 10\rangle + \alpha_3\lvert 01\rangle + \alpha_4\lvert 00\rangle = \alpha_1\begin{pmatrix}1&0\\0&0\end{pmatrix} + \alpha_2\begin{pmatrix}0&1\\0&0\end{pmatrix} + \alpha_3\begin{pmatrix}0&0\\1&0\end{pmatrix} + \alpha_4\begin{pmatrix}0&0\\0&1\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}\alpha_1&\alpha_2\\\alpha_3&\alpha_4\end{pmatrix}$ Wenn det $\left(\begin{pmatrix}\alpha_1&\alpha_2\\\alpha_3&\alpha_4\end{pmatrix}\right) = \alpha_1\alpha_4 - \alpha_2\alpha_3 \neq 0 \Rightarrow$ vollst. bestimmt; verschränkt. Wenn $\alpha_1\alpha_4 - \alpha_2\alpha_3 = 0 \Rightarrow$ nicht verschränkt

Materiewellen

De-Broglie, klassisch	$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{mv} = \frac{h}{\sqrt{mmv^2}} = \frac{h}{\sqrt{2m\frac{1}{2}mv^2}} = \boxed{\frac{h}{\sqrt{2mE_{kin}}}}$ $p = \hbar k$ $v_{ph} = \frac{\omega}{k} = \frac{E_k}{\hbar k} = \frac{p^2}{2m\hbar k} = \boxed{\frac{\hbar k}{2m}}$; $v_G = \frac{d\omega}{dk} = \boxed{\frac{\hbar k}{m}}$ $k = \frac{2\pi}{\lambda}$ $E_K = \frac{p^2}{2m}$
relativistisch	$\hbar\omega = E = mc^2 = \gamma m_0 c^2$ $\hbar k = \frac{h}{\lambda} = p = mv = \gamma m_0 v$ $\lambda = \frac{h}{p}$; $v = c\sqrt{1 - \left(\frac{E_0}{E_0 + E_{kin}}\right)^2}$ $p = \frac{1}{c}\sqrt{2E_0 E_{kin} + E_{kin}^2}$

Schrödingergleichung

Allgemein (1D):	$\hat{E}\,\Psi(x,t) = \hat{H}\,\Psi(x,t)$ $\Big\vert$ $\hat{E} = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}$, *weil:* $i\hbar\frac{\partial}{\partial t}Ae^{i(kx-\omega t)} = \hbar\omega\Psi = E\Psi$ $i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(x,t) = \hat{H}\,\Psi(x,t)$ $\Big\vert$ $\hat{H} = \hat{E}_{kin} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}$, *weil:* $-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}Ae^{i(kx-\omega t)} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}\Psi = \frac{p^2}{2m}\Psi = \frac{m^2 v^2}{2m}\Psi = \frac{mv^2}{2}\Psi = E_{kin}\Psi \Rightarrow$
Freies Teilchen	$\boxed{i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(x,t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\Psi(x,t)}$ mit Potential: $\hat{H} = \hat{E}_{kin} + \hat{E}_{pot} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \mathrm{V}(x) \Rightarrow$
Teilch. im Pot.	$\boxed{i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(x,t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \mathrm{V}(x)\right)\Psi(x,t)}$ im konservativen System: $E = const. \Rightarrow \Psi(x,t) = \phi(x)\, e^{-i\omega t} \Rightarrow$
stationär	$\boxed{E\,\phi(x) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \mathrm{V}(x)\right)\phi(x)}$; $\Psi(x,t) = \phi(x)\, e^{-i\omega t}$
3D-Gleichung	$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\vec{r},t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right) + \mathrm{V}(\vec{r})\right]\Psi(\vec{r},t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + \mathrm{V}(\vec{r})\right]\Psi(\vec{r},t)$
N Teilchen	$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_n, t) = \left[\sum_{i=1}^N \left(\underbrace{-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta}_{E_{kin}} + \underbrace{\mathrm{V}_1(\vec{r}_i)}_{E_{pot}^{ext}}\right) + \underbrace{\frac{1}{2}\sum_{i,j,i\neq j}^N \mathrm{V}_2(\vec{r}_i - \vec{r}_j)}_{E_{pot\,Teilchen-WW}}\right]\Psi(\vec{r},t)$
Anschlussbedingungen	Potentialstufe bei x_0: (1) $\phi(x_0^-) = \phi(x_0^+)$; (2) $\phi'(x_0^-) = \phi'(x_0^+)$ Delta-Potential $V_0\,\delta(x - x_0)$: (1) $\phi(x_0^-) = \phi(x_0) = \phi(x_0^+)$; (wenn $V_0 < 0$: „attraktives Delta-Potential") (2) $\lim_{\varepsilon\to 0}\int_{x_0-\varepsilon}^{x_0+\varepsilon} E\,\phi(x)\,dx = \lim_{\varepsilon\to 0}\int_{x_0-\varepsilon}^{x_0+\varepsilon}\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V_0\,\delta(x - x_0)\right)\phi(x)\,dx \Rightarrow \phi'(x_0^+) - \phi'(x_0^-) = \frac{2m}{\hbar^2}V_0\,\phi(x_0)$
Eigenschaften	• SG ist partielle DGL • SG ist linear in Ψ, d.h. Ψ kommt nur in erster Potenz vor $\Longrightarrow$ Superpositionsprinzip anwendbar. Beliebige Linearkombinationen von Lösungen der SG sind wieder Lösungen der SG. • SG ist eine homogene DGL, d.h. es ist kein Term vorhanden, der nicht mit Ψ behaftet wäre • Keine Aussage über die Amplitude. Normierung notwendig. • allg. SG ist parabolische partielle DGL, d.h. $\mathrm{B}^2 - 4AC = 0$ für DGL $A\Psi_{xx} + B\Psi_{xt} + CA\Psi_{tt} + DA\Psi_x + E\Psi_t + F\Psi = 0$ • stationäre SG ist elliptische partielle DGL, dh. $\mathrm{B}^2 - 4AC < 0$

Gaußsches Wellenpaket

Ansatz	$\Psi(x,t) = A\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} e^{i(kx-\omega t)}e^{-(k-k_0)^2 d^2}\,dk$ $\Big\vert$ $\omega = \frac{E}{\hbar} = \frac{p^2}{2m\hbar} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m\hbar} = \frac{\hbar k^2}{2m} \Rightarrow \Psi(x,t) = A\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} e^{i\left(kx - \frac{\hbar k^2}{2m}t\right)}e^{-(k-k_0)^2 d^2}\,dk$
Lösung	$\Psi(x,t) = \frac{A}{\sqrt{i\frac{\hbar}{m}t + 2d^2}}e^{-k_0^2 d^2 + \frac{\left(\frac{x}{2} + k_0 d^2\right)^2}{i\frac{\hbar}{2m}t + d^2}}$; $\lvert\Psi(x,t)\rvert^2 = \frac{A^2}{\sqrt{2\pi d^2(1+\Delta^2)}}e^{-\frac{(x - v_0 t)^2}{2d^2 d^2(1+\Delta^2)}}$; $v_0 = \frac{\hbar k_0}{m}$; $\Delta = \frac{\hbar t}{2md^2}$
Eigenschaften	$\langle x\rangle_t = \langle\phi\lvert x\rvert\phi\rangle = v_0 t$; $\langle p\rangle_t = \langle\phi\lvert p\rvert\phi\rangle = \hbar k_0 = p_0 = m v_0 = const.$; $v_g = \frac{d\omega}{dk} = \frac{d}{dk}\frac{\hbar k^2}{2m} = \frac{\hbar k}{m} = v_g(k)$; $v_{ph} = \frac{\omega}{k} = \frac{1}{k}\frac{\hbar k^2}{2m} = \frac{\hbar k}{2m} = \frac{v_{ph}(k)}{2} < v_{ph}(k)$

Korrespondenz-Identitäten (Operatoren), Erwartungswerte und Eigenfunktionen

	Sei A irgendeine mit Quantenunschärfe behaftete quantenphysikalische Messgröße („*Observable*"), z.B. Ort oder Impuls.
Erwartungswert	$\langle A\rangle = \frac{1}{n}\sum_{n=1}^{n} A_i$ (Der Erwartungswert <A> ist der zu erwartende Mittelwert bei wiederholter Messung.)
Operatoren $\hat{A}$	$\langle A\rangle = \langle\Psi\lvert\hat{A}\rvert\Psi\rangle = \int_{Bereich}\Psi^*\hat{A}\,\Psi\,d\tau$ ($\hat{A}$… Operator von A)
Korrespondenz-	

Observable	Operator 1-dimensional	Operator 3-dimensional
Ortsvektor $\vec{r}$ bzw. Koordinate x	$\hat{x} = x$	$\hat{\vec{r}} = \vec{r}$
Potentielle Energie E_{pot}	$\hat{E}_{pot} = E_{pot}(x) = \hat{V}(x)$	$\hat{E}_{pot} = E_{pot}(\vec{r}) = \hat{V}(\vec{r})$
kinetische Energie E_{kin}	$\hat{E}_{kin} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}$	$\hat{E}_{kin} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta$
Gesamtenergie $E = E_{kin} + E_{pot}$	$\hat{H} = \hat{V} - \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}$ (Hamilton-Operator 1D)	$\hat{H} = \hat{V} - \frac{\hbar^2}{2m}\Delta$ (Hamilton-Operator 3D)
Impuls p bzw. $\vec{p}$	$\hat{p} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x} = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}$	$\hat{\vec{p}} = -i\hbar\vec{\nabla} = \frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}$
Drehimpuls $\vec{L}$	z-Komponente von $\vec{L}$: $\hat{L}_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}$	$\hat{\vec{L}} = -i\hbar(\hat{\vec{r}}\times\vec{\nabla}) = -i\hbar\left(\vec{e}_\varphi\frac{\partial}{\partial\vartheta} - \vec{e}_\vartheta\frac{1}{\sin(\vartheta)}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)$
Drehimpulsquadrat $\vec{L}^2$	$\hat{\vec{L}}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2 = -\hbar^2\left[\frac{1}{\sin(\vartheta)}\frac{\partial}{\partial\vartheta}\left(\sin(\vartheta)\frac{\partial}{\partial\vartheta}\right) + \frac{1}{\sin^2(\vartheta)}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right]$	

Mittlere quadr. Schwankung	$\langle A^2\rangle = \frac{1}{n}\sum_{n=1}^{n}(A_i - \langle A\rangle) = \hat{A}^2\Psi = \int\Psi^*\hat{A}^2\,\Psi\,d\tau$	Unschärfe:	$\Delta A = \sqrt{\langle A^2\rangle - \langle A\rangle^2}$
Wahrscheinlichkeitsdichte:	$d\,\mathrm{P}(x,t) = \rho(x,t) = \lvert\lvert\Psi(x,t)\rangle\rvert^2 = \Psi(x,t)\,\Psi^*(x,t)$	Wahrsch. dass Teilch in (a,b):	$\mathrm{P}(x,t) = \langle\Psi^*\lvert\Psi\rangle$; $\int_a^b \lvert\lvert\Psi\rangle\rvert^2\,dx$; $\int_{-\infty}^{+\infty}\lvert\lvert\Psi\rangle\rvert^2\,dx = 1$
Eigenfunktion, Eigenwert	Wenn gilt: $\hat{A}\Psi = A\Psi \Leftrightarrow \int\Psi^*\hat{A}\,\Psi\,d\tau = A\int\Psi^*\,\Psi\,d\tau$, dann ist $\hat{A}$ eine Eigenfunktion und A ein Eigenwert. Es gilt: $\langle A\rangle = A$; $\langle A^2\rangle - \langle A\rangle^2 = 0$; d.h. die mittlere quadr. Schwankung von A=0, man misst immer denselben Wert von A. Haben Operatoren $\hat{A}$ und $\hat{B}$ zu den Größen A und B dieselbe Eigenfunktion ϕ, dann lassen sich die Größen A und B am Teilchen mit der Wellenfunktion Ψ gleichzeitig scharf messen. Die Operatoren sind vertauschbar. Es gilt: $\hat{A}\hat{B}\Psi = \hat{B}\hat{A}\Psi$.		

Fourier-Transformationen

Hier: Konvention Faktor $\frac{1}{\sqrt{2\pi}}$ bei Hin- und Rücktrafo. Etwas schlüssiger bei δ-Funktion wäre Faktor 1 bei Hin- und $\frac{1}{2\pi}$ bei Rücktransformation.

k-Raum, stationär, 1D	$\tilde{\phi}(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}\phi(x)\,e^{-ikx}\,dx$	Rücktrafo:	$\phi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}\tilde{\phi}(k)\,e^{+ikx}\,dk$
k^3-Raum, stationär, 3D	$\tilde{\phi}(\vec{k}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}^3}\iiint_{\mathbb{R}^3}\phi(\vec{r})\,e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}}\,d\vec{r}$	Rücktrafo:	$\phi(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}^3}\iiint_{k^3}\tilde{\phi}(\vec{k})\,e^{+i\vec{k}\cdot\vec{r}}\,d\vec{k}$
k,ω-Raum, zeitabh., 1D	$\tilde{\Psi}(k,\omega) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\Psi(x,t)\,e^{-i(kx-\omega t)}\,dx\,dt$	Rücktrafo:	$\Psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\tilde{\Psi}(k,\omega)\,e^{+i(kx-\omega t)}\,dk\,d\omega$
k^3,ω-Raum, zeitabh., 3D	$\tilde{\Psi}(\vec{k},\omega) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}^3}\int_{-\infty}^{\infty}\iiint_{\mathbb{R}^3}\Psi(\vec{r},t)\,e^{-i(\vec{k}\cdot\vec{r}-\omega t)}\,d\vec{r}\,dt$	Rücktrafo:	$\Psi(\vec{r},t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}^3}\int_{-\infty}^{\infty}\iiint_{k^3}\tilde{\Psi}(\vec{k},\omega)\,e^{+i(\vec{k}\cdot\vec{r}-\omega t)}\,d\vec{k}\,d\omega$
p-Raum, stationär, 1D	$\tilde{\phi}(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{\infty}\phi(x)\,e^{-i\frac{p}{\hbar}x}\,dx$	Rücktrafo:	$\phi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{\infty}\tilde{\phi}(p)\,e^{+i\frac{p}{\hbar}x}\,dp$
δ-Funktion 1D	$\frac{1}{\sqrt{2\pi}} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}\delta(x-x_0)\,e^{-ik(x-x_0)}\,dx$	Rücktrafo:	$\delta(x-x_0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{+ik(x-x_0)}\,dk$
schlüssiger mit $1/\frac{1}{2\pi}$-Konvent.	$1 = \int_{-\infty}^{\infty}\delta(x-x_0)\,e^{-ik(x-x_0)}\,dx$	Rücktrafo:	$\delta(x-x_0) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}1\cdot e^{+ik(x-x_0)}\,dk$

Transfer- und Streumatrix; Wahrscheinlichkeitsstromdichte

Geg.: Potentialstufe; links Bereich I, rechts Bereich II. Wellenfkt. zweigeteilt: $\phi_I(x) = Ae^{\lambda_I k_1 x} + Be^{-\lambda_I k_1 x}$; $\phi_{II}(x) = Ce^{\lambda_{II}k_2 x} + De^{-\lambda_{II}k_2 x}$

flussnorm.	$\phi_I(x) = \tilde{A}\sqrt{\frac{1}{k_1}}e^{\lambda_I k_1 x} + \tilde{B}\sqrt{\frac{1}{k_1}}e^{-\lambda_I k_1 x}$; $\phi_{II}(x) = \tilde{C}\sqrt{\frac{1}{k_2}}e^{\lambda_{II}k_2 x} + \tilde{D}\sqrt{\frac{1}{k_2}}e^{-\lambda_{II}k_2 x} \Rightarrow A = \tilde{A}\sqrt{\frac{1}{k_1}}; B = \tilde{B}\sqrt{\frac{1}{k_1}};\ C = \tilde{C}\sqrt{\frac{1}{k_2}};\ D = \tilde{D}\sqrt{\frac{1}{k_2}}$	
Transfer-matrix:	$\begin{pmatrix}A\\B\end{pmatrix} = \underline{\underline{M}}\begin{pmatrix}C\\D\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}M_{11} & M_{12}\\M_{21} & M_{22}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}C\\D\end{pmatrix} \Rightarrow \begin{matrix}A = M_{11}C + M_{12}D\\B = M_{21}C + M_{22}D\end{matrix} \Rightarrow \text{löse}\begin{matrix}A = \mathrm{A}(C,D) = CM_{11} + DM_{12}\\B = \mathrm{B}(C,D) = CM_{21} + DM_{22}\end{matrix}$	
Streu-matrix (unitär):	$\underbrace{\begin{pmatrix}B\\C\end{pmatrix}}_{\psi_{out}} = \underline{\underline{S}}\underbrace{\begin{pmatrix}A\\D\end{pmatrix}}_{\psi_{in}} = \begin{pmatrix}S_{11} & S_{12}\\S_{21} & S_{22}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}A\\D\end{pmatrix} \Rightarrow \begin{matrix}B = S_{11}A + S_{12}D\\C = S_{21}A + S_{22}D\end{matrix} \Rightarrow \underline{\underline{S}} = \begin{pmatrix}\frac{M_{21}}{M_{11}} & M_{22} - \frac{M_{12}M_{21}}{M_{11}}\\ \frac{1}{M_{11}} & -\frac{M_{12}}{M_{11}}\end{pmatrix}; \underline{\underline{\tilde{S}}} = \begin{pmatrix}S_{11} & S_{12}\sqrt{\frac{k_1}{k_2}}\\ S_{21}\sqrt{\frac{k_2}{k_1}} & S_{22}\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}\sqrt{R} & \sqrt{T'}\\ \sqrt{T} & \sqrt{R'}\end{pmatrix}$	
Wahrscheinl stromdichte	$\mathrm{j}[\Psi] = \mathrm{Re}\left(\Psi^*\frac{1}{m}\hat{p}\Psi\right) = \mathrm{Re}\left(\Psi^*\frac{1}{m}\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\Psi\right)$; $j_{in} = \mathrm{j}[Ae^{\lambda_I kx}]$; $j_{refl} = \mathrm{j}[\mathrm{B}(A)\,e^{-\lambda_I kx}]$; $j_{out} = \mathrm{j}[Ce^{\lambda_{II}k'x}]$ $j_I = \mathrm{j}[Ae^{\lambda_I kx} + Be^{-\lambda_I kx}] = \frac{\hbar k_1}{m}(\lvert A\rvert^2 - \lvert B\rvert^2)$; $j_{II} = \mathrm{j}[Ce^{\lambda_{II}k'x} + De^{-\lambda_{II}k'x}] = \frac{\hbar k_2}{m}(\lvert C\rvert^2 - \lvert D\rvert^2)$	Kontinuitätsbedingung $\frac{\partial\rho}{\partial t} = -\frac{\partial j}{\partial x} \Longrightarrow j = \rho v$
T, R	$T_{li} = \left\lvert\frac{j_{out}}{j_{in}}\right\rvert = \frac{\lvert\tilde{C}\rvert^2}{\lvert\tilde{A}\rvert^2} = \frac{\lvert C\rvert^2}{\lvert A\rvert^2}\frac{k_2}{k_1} = \frac{1}{\lvert M_{11}\rvert^2}\frac{k_2}{k_1} = \lvert S_{21}\rvert^2\frac{k_2}{k_1}$ $R_{li} = \left\lvert\frac{j_{refl}}{j_{in}}\right\rvert = \frac{\lvert\tilde{B}\rvert^2}{\lvert\tilde{A}\rvert^2} = \frac{\lvert B\rvert^2}{\lvert A\rvert^2} = \lvert S_{11}\rvert^2 = \left\lvert\frac{M_{21}}{M_{11}}\right\rvert^2$	$k_1(\lvert A\rvert^2 - \lvert B\rvert^2) = k_2(\lvert C\rvert^2 - \lvert D\rvert^2)$
Verschiebg. Stufe/δ um L	Sei $\underline{\underline{M}}_0$ die Transfermatrix bei $x = 0$, dann ist $\underline{\underline{M}}_L = \underline{\underline{M}}_{-L}^{k_1}\underline{\underline{M}}_0\underline{\underline{M}}_L^{k_2}; mit\ \underline{\underline{M}}_L^{k_2} = \begin{pmatrix}e^{ikL} & 0\\0 & e^{-ikL}\end{pmatrix}$	

BraKet-Notation

<table>
<tr><td>Bra-Vektor:</td><td>$\langle\psi| \in \mathcal{H}^*$ Ket-Vektor: $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ → darstellungsfrei, d.h. keiner Basis zugeordnet! $\langle\psi| = |\psi\rangle^\dagger$; $|\psi\rangle = \langle\psi|^\dagger$</td></tr>
<tr><td>Eigenschaften von Vektoren in $\mathcal{H}$</td><td>$\mathcal{H}$ ist ein ∞-dimensionaler Hilbertraum isomorph zu $\mathbb{C}^\infty$ (∞-dimensional: es gibt unendlich viele LU Zustandsvektoren)
Für $|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle \in \mathcal{H}$ gilt:
V1: $|\psi_1\rangle + (|\psi_2\rangle + |\psi_3\rangle) = (|\psi_1\rangle + |\psi_2\rangle) + |\psi_3\rangle$ (Assoziativgesetz)
V2: $\exists 0 \in V: |\psi\rangle + 0 = 0 + |\psi\rangle \ \forall |\psi\rangle \in \mathcal{H}$ (neutrales Element 0)
V3: $|\psi\rangle + (-|\psi\rangle) = 0$ (inverses Element)
V4: $|\psi_1\rangle + |\psi_2\rangle = |\psi_2\rangle + |\psi_1\rangle$ (Kommutativgesetz)
Für $|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle, |\psi_3\rangle \in \mathcal{H}$ und $\alpha, \beta \in \mathbb{C}$ gilt:
S1: $\alpha(|\psi_1\rangle + |\psi_2\rangle) = \alpha|\psi_1\rangle + \alpha|\psi_2\rangle$
S2: $(\alpha + \beta)|\psi_1\rangle = \alpha|\psi_1\rangle + \beta|\psi_2\rangle$
S3: $\alpha(\beta|\psi_1\rangle) = (\alpha\beta)|\psi_1\rangle$
S4: $1 \cdot |\psi_1\rangle = |\psi_1\rangle$ (neutrales Element 1)</td></tr>
<tr><td>Skalarprodukt → komplexe Zahl</td><td>Sesquilinear:
$\langle\psi_1|\alpha\psi_2 + \beta\psi_3\rangle = \alpha\langle\psi_1|\psi_2\rangle + \beta\langle\psi_1|\psi_3\rangle$ (Linearität im ersten Argument des Skalarprodukts)
$\langle\alpha\psi_1 + \beta\psi_2|\psi_3\rangle = \alpha^*\langle\psi_1|\psi_3\rangle + \beta^*\langle\psi_2|\psi_3\rangle$ (Semilinearität im zweiten Argument des Skalarprodukts)
$\langle\psi_1|\psi_2\rangle = \langle\psi_2|\psi_1\rangle^*$
$\langle\psi_1|\psi_1\rangle \geq 0 \ \forall |\psi_1\rangle \in \mathcal{H}$
$\langle\psi_1|\psi_1\rangle = 0 \Leftrightarrow |\psi_1\rangle = 0$
Schwarz'sche Ungleichung:
$|\langle\psi_1|\psi_2\rangle|^2 \leq \langle\psi_1|\psi_1\rangle \cdot \langle\psi_2|\psi_2\rangle$
Norm:
$\|\psi_1\| = \sqrt{\langle\psi_1|\psi_1\rangle}$</td></tr>
<tr><td>Regeln</td><td>$\alpha\,|\psi_1\rangle + \beta\,|\psi_2\rangle \triangleq \alpha^*\langle\psi_1| + \beta^*\langle\psi_2|$ $\quad\alpha\,|\psi\rangle = |\alpha\psi\rangle \triangleq \langle\psi|\alpha^* = \langle\alpha\psi|$</td></tr>
<tr><td>Operatoren</td><td>Entstehen aus äußerem (Tensor)produkt: $\hat{A} = |\varphi\rangle\langle\psi| = (|\psi\rangle\langle\varphi|)^\dagger$ $\quad\hat{A}|\psi\rangle = |\hat{A}\psi\rangle \to \langle\hat{A}\psi| = \langle\psi|\hat{A}^\dagger$
$(\hat{A}\hat{B})^\dagger = \hat{B}^\dagger\hat{A}^\dagger \to \hat{A}\hat{B}|\psi\rangle = \langle\psi|(\hat{A}\hat{B})^\dagger = \langle\psi|\hat{B}^\dagger\hat{A}^\dagger$ $\quad(\alpha\hat{A})^\dagger = \alpha^*\hat{A}^\dagger$ $\quad\langle\varphi|\hat{A}|\psi\rangle = \langle\hat{A}^\dagger\varphi|\psi\rangle = \langle\varphi|\hat{A}\psi\rangle$
$\langle\varphi|\hat{A}|\psi\rangle^* = \langle\psi|\hat{A}^\dagger|\varphi\rangle$ Projektionsoperator: $\hat{P}_{\{u\}} = |u\rangle\langle u| \to \hat{P}_{\{u\}}|\psi\rangle = |u\rangle\langle u|\psi\rangle = \alpha|\psi\rangle$, analog zu $P_{e_x}\vec{a} = \vec{e}_x(\vec{e}_x \cdot \vec{a})$</td></tr>
<tr><td>Spektraldarst.</td><td>$\hat{A} = \sum_i A_i|a_i\rangle\langle a_i|$ (mit A_i…EW, $|a_i\rangle$…EV) $\quad$ Vollst. der Basisprojektoren: $\sum_i|a_i\rangle\langle a_i| = \mathbb{1}$</td></tr>
<tr><td>Hermitesche Operatoren</td><td>$\hat{A}^\dagger = \hat{A} \Leftrightarrow A^*_{nm} = A_{mn} \Longrightarrow$ EW $\lambda \in \mathbb{R}$ $\quad\langle\psi_1|(\hat{A}|\psi_2\rangle)\rangle = \langle(\langle\psi_1|\hat{A})|\psi_2\rangle = \langle\psi_1|\hat{A}|\psi_2\rangle$ (Klammern unnötig)
Messwerte $\Leftrightarrow$ EW von Â: $\hat{A}|\psi\rangle = \lambda|\psi\rangle \Longrightarrow \langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle = \lambda\langle\psi|\psi\rangle \Longrightarrow \lambda = \frac{\langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle}$ wenn: $\langle\psi|\psi\rangle = 1 \Longrightarrow \lambda = \langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle$
$\hat{A}|\psi\rangle = \lambda_2|\psi_2\rangle \Longrightarrow \langle\psi_1|\hat{A}|\psi_2\rangle = \langle\psi_1|\lambda_2\psi_2\rangle = \lambda_2\langle\psi_1|\psi_2\rangle$</td></tr>
<tr><td>Kommutierende Operatoren</td><td>Wenn $\hat{A}\hat{B} = \hat{A}\hat{B} \Longrightarrow$ (1) $\hat{A}$ und $\hat{B}$ bilden einen vollst. Satz kommutierender Observablen, (2) besitzen gem. Eigenfkt. (EV), und (3) sind gleichzeitig scharf messbar ($\Delta\hat{A}\Delta\hat{B} = 0$)</td></tr>
<tr><td>Projektion auf OGB (Vektor/Matrix Darstellung)</td><td>Eigenbasis von Â
A_i…Eigenwerte
$|a_i\rangle$…Eigenvektoren (Basis)
$\hat{A}|a_i\rangle = A_i|a_i\rangle \Longrightarrow |\psi\rangle = \sum_i \mathrm{P}_i^{\{a\}}|\psi\rangle = \overbrace{\sum_i|a_i\rangle\langle a_i}^{\mathbb{1}}|\psi\rangle = \sum_i \overbrace{|a_i\rangle}^{Basis}\overbrace{\langle a_i|\psi\rangle}^{Koeff.} \Longrightarrow$
Ket: $|\psi\rangle^{\{a\}} = \begin{pmatrix}\langle a_1|\psi\rangle \\ \langle a_2|\psi\rangle \\ \dots\end{pmatrix}$ Bra: $\langle\psi|^{\{a\}} = (\langle a_1|\psi\rangle^*, \langle a_2|\psi\rangle^*, \dots)$ Operator: $\hat{A}^{\{a\}}_{ij} = \langle a_i|\hat{A}|a_j\rangle$</td></tr>
<tr><td>Basiswechsel von Basis $\{|a_1\rangle, |a_2\rangle, \dots\}$ zu Basis $\{|b_1\rangle, |b_2\rangle, \dots\}$</td><td>$|b_i\rangle = \hat{U}|a_i\rangle|\cdot\langle a_i| \Rightarrow |b_i\rangle\langle a_i| = \hat{U}|a_i\rangle\langle a_i||\sum \Rightarrow \sum|b_i\rangle\langle a_i| = \hat{U}\sum|a_i\rangle\langle a_i| \Rightarrow \hat{U} = \sum_i|b_i\rangle\langle a_i| = \begin{pmatrix} | & | & | \\ |b_1\rangle^{\{a\}} & |b_2\rangle^{\{a\}} & \dots \\ | & | & | \end{pmatrix}$
Trafo Basisvektoren $|b_i\rangle = \hat{U}|a_i\rangle$ Trafo Vektoren: $|\psi\rangle^{\{b\}} = \hat{U}^{-1}|\psi\rangle^{\{a\}} = \hat{U}^\dagger|\psi\rangle^{\{a\}}$ Trafo Operatoren: $\hat{A}^{\{b\}} = \hat{U}^\dagger\hat{A}^{\{a\}}\hat{U}$</td></tr>
<tr><td>Wahrscheinlichkeit, Erwartungswert</td><td>Operator $\hat{A}$ („Observable“) mit EW $A_1 \dots A_n$ (entspr. „Messwerten“) und EV $|a_1\rangle, |a_2\rangle, \dots, |a_n\rangle$;
$\hat{A}$ wirkt auf Zust. $|\psi\rangle$ („Messung“) ⇒ $\hat{A}|\psi\rangle$ ⇒ dann ist die <u>Wahrscheinlichkeit W_i des Auftretens von EW (Messwert) A_i:</u>
$W_i = \langle\hat{P}_i\rangle = \langle\psi|\hat{\mathrm{P}}_i|\psi\rangle = \langle\psi|a_i\rangle\langle a_i|\psi\rangle = \langle a_i|\psi\rangle^*\langle a_i|\psi\rangle = |\langle a_i|\psi\rangle|^2$. Erwartungswert: $\langle\hat{A}\rangle = \langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle = \sum_n W_i A_i$
Wahrscheinlichkeit W_0, das System in Zustand ψ_0 zu finden: $W_0 = \langle\hat{P}_0\rangle = \langle\psi|\hat{\mathrm{P}}_0|\psi\rangle = \langle\psi|\psi_0\rangle\langle\psi_0|\psi\rangle = |\langle\psi_0|\psi\rangle|^2$</td></tr>
<tr><td>Erweiterter Hilbertr. mit Diracvektoren</td><td>bisher: abzählbare Basis $\{\varphi_1(x), \varphi_2(x) \dots\}$: $\quad\langle\varphi_n|\varphi_m\rangle = \delta_{nm}$
jetzt: kontinuierliche Basis $\varphi_k(x)\ k \in \mathbb{R}$: $\quad\langle\varphi_k|\varphi_{k'}\rangle = \delta(k' - k)$</td></tr>
<tr><td>Projektion auf VONS $\varphi_k(x)\ k \in \mathbb{R}$</td><td>bisher: abzählbare Basis $\{\varphi_1(x), \varphi_2(x) \dots\}$: $\quad\overbrace{|\psi\rangle}^{abstrakt} = \sum_k \overbrace{|\varphi_i\rangle}^{Basis}\overbrace{\langle\varphi_i|\psi\rangle}^{Koeff.};\ \overbrace{\psi(x)}^{konkret} = \sum_i \overbrace{\langle x|\varphi_i\rangle}^{Basis\ \varphi_i(x)}\overbrace{\langle\varphi_i|\psi\rangle}^{Koeff\ \mathrm{c(i)}=c_i} = \sum_k \varphi_i(x)\,c_i$
jetzt: kontinuierliche Basis $\varphi_i(x), i \in \mathbb{R}$: $\quad\overbrace{|\psi\rangle}^{abstrakt} = \int_{-\infty}^{\infty} \overbrace{|\varphi_i\rangle}^{Basis}\overbrace{\langle\varphi_i|\psi\rangle}^{Koeff.}\,di;\ \overbrace{\psi(x)}^{konkret} = \int_{-\infty}^{\infty} \overbrace{\langle x|\varphi_i\rangle}^{Basis\ \varphi_i(x)}\overbrace{\langle\varphi_i|\psi\rangle}^{Koeff\ \psi(i)}\,di = \int_{-\infty}^{\infty} \varphi_i(x)\,\psi(i)\,di$</td></tr>
<tr><td>z.B. Eigenfkt. d. Ortsoperators</td><td>$\psi(x) = |\psi_x\rangle = \langle x|\psi\rangle = \langle x|\hat{\mathbb{1}}|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty}\langle x|x'\rangle\langle x'|\psi\rangle\,dx' = \int_{-\infty}^{\infty}\langle x|x'\rangle\langle x'|\psi\rangle\,dx' = \int_{-\infty}^{\infty}\boxed{\delta(x - x')}\,\psi(x')\,dx' = \psi(x)$
$\psi(x) = |\psi_x\rangle = \langle x|\psi\rangle = \langle x|\hat{\mathbb{1}}|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty}\langle x|p\rangle\langle p|\psi\rangle\,dp = \int_{-\infty}^{\infty}\langle x|p\rangle\langle p|\psi\rangle\,dp = \int_{-\infty}^{\infty}\boxed{\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{i\frac{p}{\hbar}x}}\,\psi(p)\,dp = \psi(x)$</td></tr>
<tr><td>Umformungen:</td><td>$\langle x|\psi\rangle = \psi(x);\ \langle p|\psi\rangle = \psi(p);\ \langle x|\hat{x}|\psi\rangle = (\hat{x}\psi)(x);\ \langle x|\hat{p}|\psi\rangle = (\hat{p}\psi)(x);\ allg: \langle i|\hat{A}|\psi\rangle = (\hat{A}\psi)(i)$
$\langle x|x'\rangle = \varphi_x(x) = \delta(x - x');\ \langle x|p\rangle = \varphi_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{+i\frac{p}{\hbar}x};\ \int_{-\infty}^{\infty}\frac{1}{2\pi\hbar}e^{i\frac{p}{\hbar}(x-x')}\,dp = \delta(x - x');$
$\langle p|p'\rangle = \varphi_p(p) = \delta(p - p');\ \langle p|x\rangle = \varphi_x(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{-i\frac{p}{\hbar}x};\ \int_{-\infty}^{\infty}\frac{1}{2\pi\hbar}e^{i\frac{p-p'}{\hbar}x}\,dx = \delta(p - p');$</td></tr>
</table>

Zeitentwicklung

Rezept 1:	(1) Geg.: Wellenfunktion $\Psi(\mathrm{t}=0)$, ausgedrückt in Basis B, so dass $\Psi(0)=\sum_i \beta_i\lvert b_i\rangle$. (2) Berechne die Eigenenergiebasis, also Eigenwerte (Eigenenergien) E_n und Eigenvektoren $\lvert E_n\rangle$ des Hamiltonoperators $\hat{H}$. (3) Transformiere $\Psi(0)$ in die Eigenenergiebasis (z.B. mit $\lvert\psi\rangle^{\{H\}}=\hat{U}^{\dagger}\lvert\psi\rangle^{\{B\}}$), so dass $\Psi(0)=\sum_i \gamma_i\lvert E_i\rangle$. (4) $\Psi(\mathrm{t})=\sum_n e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t}\gamma_n\lvert E_n\rangle$
Rezept 2:	(1) Zeitentwicklungsoperator $\hat{U}=e^{-i\frac{\hat{H}}{\hbar}t}$. (2) Berechne die Eigenenergiebasis, E_n und $\lvert E_n\rangle$ des Hamiltonoperators $\hat{H}$. (3) Spektralzerlegung $\hat{U}=\sum_n \lvert E_n\rangle\langle E_n\rvert e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t}$ (4) $\Psi(\mathrm{t})=\hat{U}\,\Psi(0)$

Harmonischer Oszillator 1D

Potential, Hamilton	$V=\frac{1}{2}m\omega^2x^2 \Longrightarrow \hat{H}=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{1}{2}m\omega^2x^2$	Eigen-zust.:	$\langle x\vert n\rangle=\mathrm{u}_n(x)=\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}}\frac{1}{\sqrt{2^n n!}}e^{-\frac{1}{2}\frac{m\omega}{\hbar}x^2}\mathrm{H}_n\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x\right); E_n=\hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right)$
Reduz. Koord.:	$x_0=\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}; p_0=\sqrt{m\hbar\omega};\ y=\frac{x}{x_0};\ \varepsilon_n=\frac{E_n}{\hbar\omega}; V=\frac{1}{2}\hbar\omega y^2 \Longrightarrow \hat{H}_y=-\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{1}{2}y^2;\mathrm{u}_n(x)=\frac{1}{\sqrt{x_0\sqrt{\pi}2^n n!}}e^{-\frac{1}{2}y^2}\mathrm{H}_n(y);\varepsilon_n=n+\frac{1}{2}$		
Aufsteiger	$\hat{a}^{\dagger}=\frac{x}{\sqrt{2}}\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}-\frac{x}{\sqrt{2}}\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}\frac{\partial}{\partial x}=\frac{1}{\sqrt{2}}\frac{x}{x_0}-\frac{x_0}{\sqrt{2}}\frac{\partial}{\partial x}=\frac{1}{\sqrt{2}}y-\frac{1}{\sqrt{2}}\frac{\partial}{\partial y}$	$\hat{a}^{\dagger}\lvert\mathrm{u}_n\rangle=\sqrt{n+1}\lvert\mathrm{u}_{n+1}\rangle$	$\hat{a}\neq\hat{a}^{\dagger}\Longrightarrow$ nicht hermitesch $[\hat{a},\hat{a}^{\dagger}]=\mathbb{1}\Longrightarrow\hat{a}\hat{a}^{\dagger}=1+\hat{a}^{\dagger}\hat{a}\Longrightarrow$
Absteiger	$\hat{a}\ =\frac{x}{\sqrt{2}}\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}+\frac{x}{\sqrt{2}}\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}\frac{\partial}{\partial x}=\frac{1}{\sqrt{2}}\frac{x}{x_0}+\frac{x_0}{\sqrt{2}}\frac{\partial}{\partial x}=\frac{1}{\sqrt{2}}y+\frac{1}{\sqrt{2}}\frac{\partial}{\partial y}$	$\hat{a}\lvert\mathrm{u}_n\rangle\ =\sqrt{n}\lvert\mathrm{u}_{n-1}\rangle;\ \hat{a}\lvert\mathrm{u}_0\rangle=0$	$\langle\psi\vert\hat{a}^{\dagger}\hat{a}\vert\psi\rangle=\langle\hat{a}\psi\vert\hat{a}\psi\rangle$ $\langle\psi\vert\hat{a}\hat{a}^{\dagger}\vert\psi\rangle=\langle\psi\vert\psi\rangle+\langle\hat{a}\psi\vert\hat{a}\psi\rangle$
Orts-operator	$\hat{x}=\frac{1}{\sqrt{2}}\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}(\hat{a}+\hat{a}^{\dagger})=\frac{x_0}{\sqrt{2}}(\hat{a}+\hat{a}^{\dagger})$	$\langle\hat{\mathrm{x}}\rangle=\frac{x_0}{\sqrt{2}}\langle\psi\vert\hat{a}+\hat{a}^{\dagger}\vert\psi\rangle=\frac{x_0}{\sqrt{2}}(\langle\psi\vert\hat{a}\vert\psi\rangle+\langle\psi\vert\hat{a}^{\dagger}\vert\psi\rangle)=\frac{x_0}{\sqrt{2}}(\langle\psi\vert\hat{a}\psi\rangle+\langle\hat{a}\psi\vert\psi\rangle)$	
Impuls-operator	$\hat{p}=\frac{1}{\sqrt{2}}\frac{\hbar}{i}\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}(\hat{a}-\hat{a}^{\dagger})=\frac{1}{\sqrt{2}}\frac{\hbar}{i}\frac{1}{x_0}(\hat{a}-\hat{a}^{\dagger})$	$\langle\hat{\mathrm{p}}\rangle=\frac{\hbar}{i\sqrt{2}x_0}\langle\psi\vert\hat{a}-\hat{a}^{\dagger}\vert\psi\rangle=\frac{\hbar}{i\sqrt{2}x_0}(\langle\psi\vert\hat{a}\vert\psi\rangle-\langle\psi\vert\hat{a}^{\dagger}\vert\psi\rangle)=\frac{\hbar}{i\sqrt{2}x_0}(\langle\psi\vert\hat{a}\psi\rangle-\langle\hat{a}\psi\vert\psi\rangle)$	
Besetz.-operator	$\hat{N}=\hat{a}^{\dagger}\hat{a};\ \hat{N}\lvert\mathrm{u}_n\rangle=n\lvert\mathrm{u}_n\rangle$	Hamilton operator	$\hat{H}=\hbar\omega(\hat{a}\hat{a}^{\dagger}+\hat{a}^{\dagger}\hat{a})=\hbar\omega\left(\hat{a}^{\dagger}\hat{a}+\frac{1}{2}\right)=\hbar\omega\left(\hat{N}+\frac{1}{2}\right)$
Zeitent-wicklung	$\psi(x,t)=\sum_n c_n\,u_n(x)\,e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t}=\sum_n c_n\,u_n(x)\,e^{-i\left(n+\frac{1}{2}\right)\omega t}$		

„Kohärente" Glauberzustände

Glauberzustände $\lvert\varphi_\alpha\rangle$ sind Eigenzust. von $\hat{a}$:	$\hat{a}\lvert\varphi_\alpha\rangle=\alpha\lvert\varphi_\alpha\rangle;\ \alpha\epsilon\mathbb{C}$	$\alpha(t)=\alpha e^{-i\omega t}=\lvert\alpha\rvert e^{-i\delta}e^{-i\omega t}$	$\langle\varphi_\alpha\vert\varphi_\alpha\rangle=1;\ \langle\varphi_\alpha\vert\varphi_{\alpha'}\rangle\neq\delta(\alpha-\alpha')$

$$\lvert\varphi_\alpha(0)\rangle=e^{-\frac{\lvert\alpha\rvert^2}{2}}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{\sqrt{n!}}\alpha^n\lvert u_n\rangle;\ \lvert\varphi_\alpha(t)\rangle=e^{-\frac{i\omega t}{2}}e^{-\frac{\lvert\alpha\rvert^2}{2}}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{\sqrt{n!}}\alpha^n(t)\lvert u_n\rangle=\frac{1}{\sqrt{x_0\sqrt{\pi}}}e^{-\frac{\lvert\alpha\rvert^2}{2}}e^{-\frac{i\omega t}{2}}e^{-\frac{x^2}{2x_0^2}}e^{\frac{2\,\alpha(t)x}{\sqrt{2}x_0}}e^{-\frac{\alpha(t)^2}{2}}$$

$$\langle x\rangle=\frac{x_0}{\sqrt{2}}\langle\varphi_\alpha\vert\hat{a}+\hat{a}^{\dagger}\vert\varphi_\alpha\rangle=\frac{x_0}{\sqrt{2}}(\langle\varphi_\alpha\rvert\cdot\hat{a}\lvert\varphi_\alpha\rangle+\langle\varphi_\alpha\vert\hat{a}^{\dagger}\cdot\vert\varphi_\alpha\rangle)=\frac{x_0}{\sqrt{2}}(\langle\varphi_\alpha\rvert\cdot\alpha\lvert\varphi_\alpha\rangle+\langle\varphi_\alpha\vert\alpha^*\cdot\vert\varphi_\alpha\rangle)=\frac{x_0}{\sqrt{2}}(\alpha\langle\varphi_\alpha\vert\varphi_\alpha\rangle+\alpha^*\langle\varphi_\alpha\vert\varphi_\alpha\rangle)=$$

$\langle x\rangle=\frac{x_0}{\sqrt{2}}(\alpha+\alpha^*)=\frac{x_0}{\sqrt{2}}2\,\mathrm{Re}(\alpha)$; analog: $\langle x^2\rangle=\frac{x_0}{\sqrt{2}}((\alpha+\alpha^*)^2+1);\ \Delta x^2=\langle x^2\rangle-\langle x\rangle^2=\frac{x_0^2}{2}$

$$\langle p\rangle=\frac{\hbar}{i\sqrt{2}x_0}(\alpha-\alpha^*)=\frac{\hbar}{i\sqrt{2}x_0}2\,\mathrm{Im}(\alpha);\ \langle p^2\rangle=\frac{\hbar^2}{2x_0^2}((\alpha-\alpha^*)^2-1);\ \Delta p^2=\langle p^2\rangle-\langle p\rangle^2=\frac{\hbar^2}{2x_0^2}\Longrightarrow\Delta p\Delta x=\frac{\hbar^2}{2}$$

$$\langle\mathrm{x}(t)\rangle=\frac{x_0}{\sqrt{2}}(\alpha(t)+\alpha^*(t))=\sqrt{2}x_0\lvert\alpha\rvert\cos(\omega t-\delta);\ \langle\mathrm{p}(t)\rangle=\frac{\hbar}{i\sqrt{2}x_0}(\alpha(t)+\alpha^*(t))=\frac{\hbar}{x_0}\sqrt{2}\sin(\omega t-\delta)$$

Drehimpuls

Operator $\hat{\vec{L}}$:	$\hat{\vec{L}}=\hat{\vec{r}}\times\hat{\vec{p}}=\hat{\vec{r}}\times\left(\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}\right)=\frac{\hbar}{i}(\vec{r}\times\vec{\nabla})=\varepsilon_{ijk}x_j\frac{\partial}{\partial x_k}$	$\hat{L}_x=\frac{\hbar}{i}\left(y\frac{\partial}{\partial z}-z\frac{\partial}{\partial y}\right);\ \hat{L}_y=\frac{\hbar}{i}\left(z\frac{\partial}{\partial x}-x\frac{\partial}{\partial z}\right);\ \hat{L}_z=\frac{\hbar}{i}\left(x\frac{\partial}{\partial y}-y\frac{\partial}{\partial x}\right)=\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\varphi}$			
Vektoroperator	Ein Operator $\hat{\vec{A}}$ ist nur dann ein Vektoroperator, wenn gilt: $[L_i,A_j]=i\hbar\varepsilon_{ijk}A_k$. $\hat{\vec{r}},\hat{\vec{p}},\hat{\vec{L}}$ sind Vektoroperatoren $\Longrightarrow$				
Kommutatoren:	$[L_i,x_j]=i\hbar\varepsilon_{ijk}x_k;\ \ [L_i,p_j]=i\hbar\varepsilon_{ijk}x_k;\ \ [L_i,L_j]=i\hbar\varepsilon_{ijk}L_k$	Operator $\hat{L}^2$:	$\hat{L}^2=\hat{L}_x^2+\hat{L}_y^2+\hat{L}_z^2$		
Kompat. zu L_i:	$\hat{H},\hat{L}^2,\hat{S}^2,\hat{\vec{r}}^2,\hat{\vec{p}}^2$	kompat. zu $\hat{L}^2$: $\hat{H},L_i,\hat{S}^2,\hat{S}_i,\hat{\vec{r}}^2,\hat{\vec{p}}^2$	Erwartungswerte:	$\langle L_x\rangle=\langle L_y\rangle=0;\ \langle L_x^2\rangle=\langle L_y^2\rangle\geq\frac{1}{4}\hbar^2$	
Eigenzustände	$\hat{L}^2\lvert lm_l\rangle=l(l+1)\hbar^2\lvert lm_l\rangle$ $\hat{L}_z\lvert lm_l\rangle=m_l\hbar\lvert lm_l\rangle$	Bahndrehimpulsquantenz. l zu Operator $\hat{L}^2$	$l=0,\ldots,n-1$ $l=s,p,d,f,g,\ldots$	Magn. Drehimp.-QZ m_l zu Operator $\hat{L}_z$:	$m_l=\frac{L_z}{\hbar}=\{-l,\ldots,+l\}$
Leiteropera-toren	$\hat{L}_\pm=\hat{L}_x\pm i L_y$; nicht hermit.: $\hat{L}_+^{\dagger}=\hat{L}_-$; $\hat{L}_-^{\dagger}=\hat{L}_+$	Auf- Absteiger:	$\hat{L}_\pm\lvert lm_l\rangle=\sqrt{(l\mp m_l)(l\pm m_l+1)}\hbar\lvert l,m_l\pm1\rangle$		
	$\hat{L}_x=\frac{1}{2}(\hat{L}_++\hat{L}_-);\ \hat{L}_y=-i\frac{1}{2}(\hat{L}_+-\hat{L}_-);\ \hat{L}^2=\frac{1}{2}(\hat{L}_+\hat{L}_-+\hat{L}_-\hat{L}_+)+\hat{L}_z{}^2$				
Gyromag. Verh	$\gamma=\frac{\lvert\mu\rvert}{\lvert L\rvert}=\frac{\lvert q\rvert}{2m_q}$	Bohrsches Magneton	$\mu_B^{cgs}=\frac{\lvert e\rvert}{2m_e c}\hbar;\ \mu_B^{SI}=\frac{\lvert e\rvert}{2m_e}\hbar$	allgemeines Magneton	$\vec{\mu}_z=\mathrm{sign}(q)\,\mu_B\frac{\vec{L}_z}{\hbar}=\mathrm{sign}(q)\,\mu_B m=\mathrm{sign}(q)\,\gamma\vec{L}$
Entartung n,l	Entartung = $\sum_{l=0}^{n-1}(2l+1)=n^2$(ohne Spin)				
Eigenzust. allg.	Seien $\hat{A}^2,\hat{A}_z$ irgendwelche Drehimpuls-oder Spinoperatoren. Dann gilt: $\hat{A}^2\lvert\psi\rangle=a(a+1)\hbar^2\lvert\psi\rangle;\ \hat{A}_z\lvert\psi\rangle=m_a\hbar\lvert\psi\rangle$				

Spin

Spinmoment	$\vec\mu_s = \operatorname{sign}(q)\,\mu_B g_s \frac{\vec S}{\hbar} = \gamma \vec S$	Landé-Faktor:	$g_s^e = 2{,}0023\ldots \approx 2$	Spinquantenzahl:	Quantenzahl s zu Operator $\hat S^2$. Ferminionen: halbzahlig (Elektron: s=1/2). Bosonen: ganzzahlig.		
Magn. Spinquantenzahl	$m_s = \frac{S_z}{\hbar} = \{-s,\ldots,+s\} \Longrightarrow m_s^e = \pm 1/2$	Spin up:	$\left\lvert s=\frac12, m_s=\frac12\right\rangle = \lvert +\rangle = \lvert\uparrow\rangle = \lvert 0\rangle$	Spin down	$\left\lvert s=\frac12,m_s=-\frac12\right\rangle = \lvert -\rangle = \lvert\downarrow\rangle = \lvert 1\rangle$		
Eigenzust. $\hat S_z$:	$\hat S_z\lvert\uparrow\rangle = \frac{\hbar}{2}\lvert\uparrow\rangle;\ \hat S_z\lvert\downarrow\rangle = -\frac{\hbar}{2}\lvert\uparrow\rangle$	Eigenzustand $\hat S^2$	$\hat S^2\lvert\uparrow\rangle = s(s+1)\hbar^2\lvert\uparrow\rangle = \frac34\hbar^2\lvert\uparrow\rangle;\ \hat S^2\lvert\downarrow\rangle = s(s+1)\hbar^2\lvert\downarrow\rangle = \frac34\hbar^2\lvert\downarrow\rangle$				
Kommutator:	$[S_i,S_j] = i\hbar\varepsilon_{ijk}S_k$	kompatibel zu $\hat S_i$:	$\hat H, \hat L_i, \hat L^2, \hat S^2$	kompatibel zu $\hat S^2$:	$\hat H, \hat L_i, \hat L^2, \hat S_i$		
Produktraum:	$\lvert\psi\rangle = \lvert\psi_{nlm}\rangle\otimes\lvert\psi_s\rangle \in \mathcal H = \mathcal H_{nlm}\otimes\mathcal H_s$	$\langle\psi\vert\psi'\rangle = (\langle\psi_{nlm}\rvert\otimes\langle\psi_s\rvert)\cdot(\lvert\psi'_{nlm}\rangle\otimes\lvert\psi'_s\rangle) = \langle\psi_{nlm}\vert\psi'_{nlm}\rangle\cdot\langle\psi_s\vert\psi'_s\rangle$					
	$\dim(\mathcal H) = \dim(\mathcal H_{nlm})\dim(\mathcal H_s) = (2l+1)(2s+1) = (2l+1)\cdot 2$	Operator $\hat S^2$:	$\hat S^2 = \hat S_x^{\,2} + \hat S_y^{\,2}+\hat S_z^{\,2}$				
Spinor:	$\lvert\psi_s\rangle = \alpha\lvert\uparrow\rangle + \beta\lvert\downarrow\rangle \Longrightarrow \lvert\psi_s\rangle^{\{S_z\}} = \begin{pmatrix}\alpha\\\beta\end{pmatrix}$ mit Basis $\{S_z\} = \{\lvert\uparrow\rangle,\lvert\downarrow\rangle\}$	Operatoren $\hat S_x,\hat S_y,\hat S_z$	$\hat S_x = \frac\hbar2\sigma_x;\ \hat S_y=\frac\hbar2\sigma_y;\ \hat S_z = \frac\hbar2\sigma_z$				
Operator $\hat S_{\hat n}$	$\hat S_{\hat n} = \frac\hbar2(n_x\sigma_x+n_y\sigma_y+n_z\sigma_z) = \frac\hbar2(\sigma_x\sin\vartheta\cos\varphi+\sigma_y\sin\vartheta\sin\varphi+\sigma_z\cos\vartheta)$ mit $\lvert\hat n\rvert=1;\ \hat n = (n_x,n_y,n_z)^T$						
Leiteroperatoren	$\hat S_\pm = \hat S_x \pm i\hat S_y$; nicht herm. $\hat S_+^\dagger = \hat S_-;\ \hat S_-^\dagger = \hat S_+$	$\hat S_\pm\lvert sm_s\rangle = \sqrt{(s\mp m_s)(s\pm m_s+1)}\hbar\lvert s,m_s\pm1\rangle$	$\hat S_+\lvert\downarrow\rangle = \lvert\uparrow\rangle;\ \hat S_-\lvert\uparrow\rangle = \lvert\downarrow\rangle$				
	$\hat S_x = \frac12(\hat S_+ + \hat S_-) \Longrightarrow \hat S_x\lvert\uparrow\rangle = \frac\hbar2\lvert\downarrow\rangle;\ \hat S_x\lvert\downarrow\rangle = \frac\hbar2\lvert\uparrow\rangle$	$\hat S_y = -i\frac12(\hat S_+-\hat S_-)\Longrightarrow \hat S_y\lvert\uparrow\rangle = \frac{i\hbar}{2}\lvert\downarrow\rangle;\ \hat S_y\lvert\downarrow\rangle = -\frac{i\hbar}{2}\lvert\uparrow\rangle$					
Paulimatritzen	$\sigma_x = \lvert\uparrow\rangle\langle\downarrow\rvert + \lvert\downarrow\rangle\langle\uparrow\rvert = \begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix}^{\{S_z\}}$; $\sigma_y = i(-\lvert\uparrow\rangle\langle\downarrow\rvert+\lvert\downarrow\rangle\langle\uparrow\rvert) = \begin{pmatrix}0&-i\\i&0\end{pmatrix}^{\{S_z\}}$; $\sigma_z = \lvert\uparrow\rangle\langle\uparrow\rvert - \lvert\downarrow\rangle\langle\downarrow\rvert = \begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix}^{\{S_z\}}$						
Spinrichtung:	$\vec s = \frac2\hbar\langle\Psi\vert\hat{\vec S}\vert\Psi\rangle$	Spin-Hamilton:	$\hat H_s = -\vec\mu_s\cdot\vec B$	Larmorfrequenz:	$\omega_L = \gamma B = \frac{\lvert\mu_s\rvert}{\lvert\vec S\rvert}B = \frac{qB}{m}$	Bloch Vekt.	$\lvert\Psi\rangle = \cos\left(\frac\vartheta2\right)\lvert\uparrow\rangle + e^{i\varphi}\sin\left(\frac\vartheta2\right)\lvert\downarrow\rangle$
EV. in x,y-Richtung z. Basis z	$\lvert\uparrow_x\rangle = \frac1{\sqrt2}(\lvert\uparrow\rangle+\lvert\downarrow\rangle)$	$\lvert\uparrow_y\rangle = \frac1{\sqrt2}(\lvert\uparrow\rangle + i\lvert\downarrow\rangle)$	Herleitung mit Bloch-Vektor. Z.B. $\lvert\uparrow_y\rangle \mathrel{\hat=} \left(\vartheta=\frac\pi2,\varphi=\frac\pi2\right)\Longrightarrow$				
	$\lvert\downarrow_x\rangle = \frac1{\sqrt2}(\lvert\uparrow\rangle-\lvert\downarrow\rangle)$	$\lvert\downarrow_y\rangle = \frac1{\sqrt2}(\lvert\uparrow\rangle - i\lvert\downarrow\rangle)$	$\lvert\uparrow_y\rangle = \cos\left(\frac\pi4\right)\lvert\uparrow\rangle + e^{i\frac\pi2}\sin\left(\frac\pi4\right)\lvert\downarrow\rangle = \frac1{\sqrt2}\lvert\uparrow\rangle + i\frac1{\sqrt2}\lvert\downarrow\rangle$				

Produktbasis, gekoppelte Basis

Produktbasis	Observable $\{L^2,L_z,S^2,S_z\}$ mit QZ $\lvert L,M;S,M_s\rangle$	Gekoppelte Basis:	Observable $\{L^2,S^2,J^2,J_z\}$ mit QZ $\lvert L,S,J,M_j\rangle$		
Gesamtdrehimp.	$\vec J = \vec L + \vec S$	$[J_i,J_j] = i\hbar\varepsilon_{ijk}J_k$	Ges.drehimp.QZ:	$\lvert l-s\rvert \le J \le \lvert l+s\rvert$	magn. Gesamtdrehimp.-QZ $M_j = \{-J,\ldots,J\}$
	$\hat J_z = \hat L_z + \hat S_z$	$\hat J^2 = (\vec L+\vec S)^2 = \vec L^2 + \vec S^2 + 2\vec L\vec S$			
Clebsch-Gordon	(1) Finde Tabelle passend zu $(j_1,j_2) \mathrel{\hat=} (s_1,s_2)$. (2) Finde rechts oben die Spalte mit den zu transformierenden Werten für $(J,M_j) \mathrel{\hat=} (S,M_s)$. (3) Darunter stehen die Koeffizienten der Produktbasisvektoren (Wurzel hinzufügen) (4) Die passenden Werte m_1,m_2 für die Produktbasisvektoren $\lvert j_1m_1\rangle\otimes\lvert j_2m_2\rangle$ bzw. $\lvert s_1m_1\rangle\otimes\lvert s_2m_2\rangle$ stehen links.				

Schrödingergleichung für Wasserstoffatom und wasserstoffartige Atome

absolut Koord:	$\left(\frac{\hat p_e^2}{2m_e}+\frac{\hat P_N^2}{2M_N} - \frac{Ze^2}{\lvert\vec r_e-\vec r_N\rvert}\right)\Psi(\vec r_e,\vec r_N) = E\,\Psi(\vec r_e,\vec r_N)$	Relativkoord.	$\vec r = \vec r_e - \vec r_N$	Relativimpuls:	$\vec p = \frac{M_N\vec p_e - m_e\vec P_N}{M_{ges}}$	Gesamtmasse:	$M_{ges} = m_e+M_N$
SP-Koord:	$\left(\frac{\hat p^2}{2\mu}+\frac{\hat P^2}{2M_{ges}}-\frac{Ze^2}{r}\right)\Psi(\vec r,\vec R) = E\,\Psi(\vec r,\vec R)$	SP-koord:	$\vec R = \frac{\vec r_e m_e + \vec r_N M_N}{M_{ges}}$	Gesamtimpuls:	$\vec P = \vec p_e + \vec P_N$	Reduz. Masse:	$\mu = \frac{m_e M_N}{M_{ges}}$
relativ-koord.	$\Psi = \phi(\vec r)\,e^{i\vec K\cdot\vec R} \Longrightarrow \left(\frac{\hat p^2}{2\mu}-\frac{Ze^2}{r}\right)\phi(\vec r) = \varepsilon\,\phi(\vec r)$	Energ Rel.bew.	$\varepsilon = E - E_{kin}^{SP}$	Kin. Energ. des SP:	$E_{kin}^{SP} = \frac{\hbar K^2}{2M_{ges}}$	Kin. Energie Relativbew.: $\frac{\hat p^2}{2\mu}$	Kern-pot: $-\frac{Ze^2}{r}$

3D Schrödingergl.: $\left(-\frac{\hbar^2}{2\mu}\vec\nabla^2 + V(r)\right)\phi(\vec r) = \varepsilon\,\phi(\vec r)$ Coulomb-Pot.: $V(r) = -\frac{e^2Z}{r}\Longrightarrow \left(-\frac{\hbar^2}{2\mu}\vec\nabla^2 - \frac{e^2Z}{r}\right)\phi(\vec r) = \varepsilon\,\phi(\vec r)\Longrightarrow$

$\left(-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2}+\frac2r\frac{\partial}{\partial r}\right)+\frac{\hat L^2(\vartheta,\varphi)}{2\mu r^2}-\frac{e^2Z}{r}\right)\phi(\vec r) = \varepsilon\,\phi(\vec r)$ | $\hat L^2\Psi = \hbar^2 l(l+1)\Psi \Longrightarrow \left(-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2}+\frac2r\frac{\partial}{\partial r}\right)+\frac{\hbar^2l(l+1)}{2\mu r^2}-\frac{e^2Z}{r}\right)\phi(\vec r)=\varepsilon\,\phi(\vec r)$

Produktansatz: $\phi(\vec r) = R(r)\,Y_l^m(\vartheta,\varphi) \Longrightarrow \left(-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2}+\frac2r\frac{\partial}{\partial r}\right) + \underbrace{\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2}-\frac{e^2Z}{r}}_{\text{effektives Pot.}}\right)R(r) = \varepsilon\,R(r)$ mit $\frac{\hbar^2l(l+1)}{2\mu r^2}$ ... Zentrifugalpotential

Transformation zu Sturm-Liouville EW-Problem: $R(r)\to\frac{u(r)}{r}$ mit Dirichlet Randbedingungen $u(0)=0,\ \lim_{r\to\infty}u(r)=0\Longrightarrow$

$\left(-\frac12\frac{d^2}{dr^2}+\frac{l(l+1)}{2r^2}-\frac1{ar}+\frac{k^2}{2}\right)u(r) = 0$ mit $k^2 = \frac{2\mu\lvert E\rvert}{\hbar^2}$ und $a = \frac{a_0}{Z}$ und $a_0 = \frac{\hbar^2}{\mu e^2}$ Lösung mit Frobenius-Methode $u(r) = e^{-kr}r^{\alpha+1}\sum_{i=0}^\infty a_i r^i$

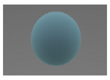
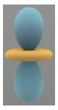
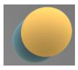
Lösung	$\phi_{nlm}(\vec r) = \phi_{nl}(r)\,Y_l^m(\vartheta,\varphi) = \frac{2}{n^2}\sqrt{\frac{(n-l-1)!}{(n+l)!\,a^3}}\left(\frac{2r}{an}\right)^l L_{n-l-1}^{2l+1}\left(\frac{2Zr}{an}\right)e^{-\frac{r}{na}}\,Y_l^m(\vartheta,\varphi)$	Atomradius	$a=\frac{a_0}{Z}$	Bohr Radius:	$a_0^{cgs} = \frac{\hbar^2}{\mu e^2};\ a_0^{SI} = \frac{4\pi\varepsilon_0\hbar^2}{\mu e^2}$
Eigenenerg.:	Geb. Zust: $\varepsilon<0;\ E_n = -\frac{\hbar^2}{2\mu a^2}\frac1{n^2} = -Z^2R_\mu\frac1{n^2}$	Rydberg konst.:	$R_\mu^{cgs} = \frac{\mu e^4}{2\hbar^2};\ R_\mu^{SI} = \frac{\mu e^4}{8\varepsilon_0^2h^3c}$	$E_n - E_m = Z^2\left(\frac1{m^2}-\frac1{n^2}\right)$	
Paritätstrafo:	$\vec r\to-\vec r \Leftrightarrow r\to r;\ \vartheta\to\pi-\vartheta;\ \varphi\to\varphi+\pi$	Paritätsoperator:	$\hat\Pi\lvert nlm\rangle = (-1)^l\lvert nlm\rangle$		

Kommutatoralgebra

Kommutator:	$[AB] = AB - BA$	Antikommutator:	$\{AB\} = [AB]_+ = AB + BA$	Vertauschen von Operatoren:	$AB = [AB] + BA$
Rechenregeln:	$[\hat A,\hat B] = -[\hat B,\hat A];\ [\hat A,\hat A]=0;\ [\hat A,\beta\hat B] = \beta[\hat A,\hat B];\ [\hat A,\hat B+\hat C] = [\hat A,\hat B]+[\hat A,\hat C];\ \left[\hat A,[\hat B,\hat C]\right]+\left[\hat B,[\hat C,\hat A]\right]+\left[\hat C,[\hat A,\hat B]\right]=0$				
	$[\hat A,\hat B\hat C] = [\hat A,\hat B]\hat C+\hat B[\hat A,\hat C];\ [\hat A,\hat B^n] = \sum_{\alpha=1}^n\hat B^{\alpha-1}[\hat A,\hat B]\hat B^{n-\alpha};\ [\hat A,1]=[1,\hat A]=0$	$\forall[\hat A,\hat B]=c\Longrightarrow[\hat A,\hat B^n] = nc\hat B^{n-1}$			
Hermitesch	Falls $[\hat A,\hat B]$ hermitesch (EW reel), dann ist $[\hat A,\hat B]_+$ antihermitesch (EW imaginär) und umgekehrt.				

Diverses

$\cos(\underline{z}) = \cosh(i\underline{z}) = \frac{e^{i\underline{z}}+e^{-i\underline{z}}}{2}$	$\sin(\underline{z}) = -i\sinh(i\underline{z}) = \frac{e^{i\underline{z}}-e^{-i\underline{z}}}{2i}$	$\cosh(\underline{z}) = \cos(i\underline{z}) = \frac{e^{\underline{z}}+e^{-\underline{z}}}{2}$	$\sinh(\underline{z}) = -i\sin(i\underline{z}) = \frac{e^{\underline{z}}-e^{-\underline{z}}}{2}$
$\tan(\underline{z}) = -i\tanh(i\underline{z}) = \frac{e^{i\underline{z}}-e^{-i\underline{z}}}{i(e^{i\underline{z}}+e^{-i\underline{z}})}$	$\cot(\underline{z}) = i\coth(i\underline{z}) = \frac{i(e^{i\underline{z}}+e^{-i\underline{z}})}{e^{i\underline{z}}-e^{-i\underline{z}}}$	$\tanh(\underline{z}) = -i\tan(i\underline{z}) = \frac{e^{\underline{z}}-e^{-\underline{z}}}{e^{\underline{z}}+e^{-\underline{z}}} = \frac{e^{2\underline{z}}-1}{e^{2\underline{z}}+1}$	$\coth(\underline{z}) = \frac{e^{\underline{z}}+e^{-\underline{z}}}{e^{\underline{z}}-e^{-\underline{z}}}$
$Ae^{ix}+Be^{-ix} = (A+B)\cos(x)+i(A-B)\sin(x)$		$Ae^{x}+Be^{-x} = (A+B)\cosh(x)+(A-B)\sinh(x)$	

Hermitesche Polynome	$\mathrm{H}_n(x) = (-1)^n e^{x^2}\frac{d^n}{dx^n}e^{-x^2}$; orthogonal bzgl. Gewichtsfunktion e^{-x^2}: $\frac{1}{2^n n!\sqrt{\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{H}_n(x)\,\mathrm{H}_m(x)\,e^{-x^2} = \delta_{nm}$ $\mathrm{H}_0(x) = 1;\ \mathrm{H}_1(x) = 2x;\ \mathrm{H}_2(x) = 4x^2-2;\ \ \mathrm{H}_3(x) = 8x^3-12x;\ \ \mathrm{H}_4(x) = 16x^4-48x^2+12;\ldots$					
Zugeord. Laguerre-Polynome	$L_\beta^\alpha(x) = \sum_{m=0}^{\beta}(-1)^m\frac{(\alpha+\beta)!}{(\beta-m)!(\alpha+m)!m!}x^m$	$L_0^k(x) = 1;\ L_1^k(x) = -x+k+1;\ L_2^k(x) = \frac{1}{2}(x^2-2(k+2)x+(k+1)(k+2))$				
Kugelflächenfunktion	$Y_{l,m}(\vartheta,\varphi) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}}\sqrt{\frac{(l-m)!}{(l+m)!}}\mathrm{P}_l^m(\cos\vartheta)\,e^{im\varphi}$	$Y_{l,m}^* = (-1)^m Y_{l,-m};\ Y_{l,m}(\pi-\vartheta,\pi+\varphi) = (-1)^l\,Y_{l,m}(\vartheta,\varphi)$				
	$Y_{0,0}(\vartheta,\varphi) = \sqrt{\frac{1}{4\pi}};\ Y_{1,-1}(\vartheta,\varphi) = \sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin(\vartheta)\,e^{-i\varphi};\ Y_{1,0}(\vartheta,\varphi) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos(\vartheta);\ Y_{1,1}(\vartheta,\varphi) = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin(\vartheta)\,e^{i\varphi}$					
	$Y_{2,0}(\vartheta,\varphi) = -\sqrt{\frac{5}{16\pi}}(3\cos^2(\vartheta)-1)$	$Y_{l,0}(0,\varphi) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}};\ Y_{l,m}(0,\varphi)_{\|m\neq0} = Y_{l,m}(\pi,\varphi)_{\|m\neq0} = 0;\ Y_{l,0}(\pi,\varphi) = (-1)^l\sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}}$				
	l=0 m=0 	l=1 m=0 	l=2 m=0 	l=3 m=0 	l=1 m=-1 	l=1 m=1  …

Herleitung Schrödingergleichung

Herleitung gemäß Skriptum:	Allgemeine Wellengleichung: $\frac{\partial^2}{\partial x^2}\Psi(x,t) = \frac{1}{v^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2}\Psi(x,t) \xRightarrow{allg.\ Lsg.} \Psi(x,t) = Ae^{i(kx-\omega t)}$ $\frac{\partial}{\partial t}\Psi(x,t) = -i\omega Ae^{i(kx-\omega t)} = -i\omega A\,\Psi(x,t)\,\|\cdot i\hbar \Rightarrow$ $i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(x,t) = \hbar\omega\cdot Ae^{i(kx-\omega t)}\,\|\,\hbar\omega = E, Ae^{i(kx-\omega t)} = \Psi(x,t) \Rightarrow$ $i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(x,t) = E\,\Psi(x,t)\ldots(1)$ $\frac{\partial^2}{\partial x^2}\Psi(x,t) = -k^2\cdot Ae^{i(kx-\omega t)} = -k^2\,\Psi(x,t)\,\Big\|\cdot\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{1}{i}\right)^2 \Rightarrow$ $\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{1}{i}\right)^2\frac{\partial^2}{\partial x^2}\Psi(x,t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{1}{i}\right)^2 k^2\,\Psi(x,t)$ $-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\Psi(x,t) = +\frac{\hbar^2k^2}{2m}\Psi(x,t)\,\|\hbar^2k^2 = p^2 \Rightarrow$ $-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\Psi(x,t) = +\frac{p^2}{2m}\Psi(x,t)\ldots(2)\,\|E = E_{kin} = \frac{mv^2}{2} = \frac{m^2v^2}{2m} = \frac{p^2}{2m} \Rightarrow$ $-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\Psi(x,t) = E\,\Psi(x,t)\ldots(3)$	$E\,\Psi(x,t) = E\,\Psi(x,t) \xRightarrow{(1),(3)}$ $\boxed{i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(x,t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\Psi(x,t)} \xRightarrow{(1)}$ $\boxed{E\,\Psi(x,t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\Psi(x,t)}$ Hamilton: $E = \mathrm{H}(x,p)\,\|\cdot\Psi(x,t) \Rightarrow$ $E\,\Psi(x,t) = \mathrm{H}(x,p)\,\Psi(x,t)\,\Big\|\mathrm{H}(x,p) = \frac{p^2}{2m}+\mathrm{V}(x) \Rightarrow$ $E\,\Psi(x,t) = \frac{p^2}{2m}\Psi(x,t)+E_{kin}\,\Psi(x,t) =$ $-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\Psi(x,t)\,\Psi(x,t) \xRightarrow{(2)}$ $\boxed{E\,\Psi(x,t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\mathrm{V}(x)\right)\Psi(x,t)} \xRightarrow{(1)}$ $\boxed{i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(x,t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\mathrm{V}(x)\right)\Psi(x,t)}$
Eigene Herleitung (kürzer, kein „Guesswork")	Allgemeine Wellengleichung: $\frac{\partial^2}{\partial x^2}\Psi(x,t) = \frac{1}{v^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2}\Psi(x,t) \xRightarrow{allg.\ Lsg.} \Psi(x,t) = Ae^{i(kx-\omega t)}$ $\frac{\partial^2}{\partial x^2}\Psi(x,t) = -k^2\cdot Ae^{i(kx-\omega t)} = -k^2\,\Psi(x,t)\,\Big\|k^2 = \frac{p^2}{\hbar^2} \Rightarrow$ $\frac{\partial^2}{\partial x^2}\Psi(x,t) = -\frac{p^2}{\hbar^2}\Psi(x,t)\,\Big\|E_{kin} = \frac{mv^2}{2} = \frac{m^2v^2}{2m} = \frac{p^2}{2m} \Rightarrow p^2 = 2mE_{kin} \Rightarrow$ $\frac{\partial^2}{\partial x^2}\Psi(x,t) = -\frac{2m}{\hbar^2}E_{kin}\,\Psi(x,t)\,\Big\|\cdot\frac{-\hbar^2}{2m} \Rightarrow$ $\boxed{E_{kin}\,\Psi(x,t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\Psi(x,t)}\,\|E_{kin} = E-E_{pot} = E-\mathrm{V}(x) \Rightarrow$	$E\,\Psi(x,t)-\mathrm{V}(x)\,\Psi(x,t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\Psi(x,t)$ $E\,\Psi(x,t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\Psi(x,t)+\mathrm{V}(x)\,\Psi(x,t)$ $\boxed{E\,\Psi(x,t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\mathrm{V}(x)\right)\Psi(x,t)}\ldots(4)$ $\frac{\partial}{\partial t}\Psi(x,t) = -i\omega\,\Psi(x,t)\,\Big\|\,\hbar\omega = E \Rightarrow \omega = \frac{E}{\hbar} \Rightarrow$ $\frac{\partial}{\partial t}\Psi(x,t) = -\frac{i}{\hbar}E\,\Psi(x,t) \Rightarrow E = -\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial t} \Rightarrow$ $E = i\hbar\frac{\partial}{\partial t} \xRightarrow{(4)}$ $\boxed{i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(x,t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\mathrm{V}(x)\right)\Psi(x,t)}$

Delta- und Heaviside-Funktion

Delta-Funktion	$\delta(x) \leftrightarrow \delta[\varphi] = \delta_0[\varphi] = \varphi(0) \leftrightarrow \int_{-\infty}^{\infty}\delta(x)\,\varphi(x)\,dx = \varphi(0)$	$\delta(x-x_0)\,\delta_{x_0}[\varphi] = \varphi(x_0)$			
	$\int_{-\infty}^{\infty}\delta(x)\,dx = 1$	$\int_a^b\delta(x)\,dx = \begin{cases}1, \mathit{für}\ 0\in[a,b]\\ 0, \mathit{sonst}\end{cases}$	$\delta(x) = \frac{d}{dx}\mathrm{H}(x)$	$\mathrm{f}(x)\,\delta(x-x_0) = \mathrm{f}(x_0)\,\delta(x-x_0)$	$\delta(x) = \delta(-x)$
	$x\,\delta(x) = 0$	$\delta(ax) = \frac{1}{\|a\|}\delta(x)$	$\|x\|\,\delta(x^2) = \delta(x)$	$\delta(\mathrm{f}(x)) = \sum_{x_i}\frac{\delta(x-x_i)}{\|\mathrm{f}'(x_i)\|};\ x_i\ldots\mathit{einfache\ NST}$	$\int\delta(x)\,dx = \mathrm{H}(x)$
Heaviside-Funktion	$\mathrm{H}(x) \leftrightarrow \mathrm{H}[\varphi] = \int_0^{\infty}\varphi(x)\,dx;\ \mathrm{H}(x-x_0) = \int_{-\infty}^{x-x_0}\delta(t)\,dt;\ \mathrm{H}(x) = \begin{cases}1\ \mathit{für}\ x>0\\ \frac{1}{2}\ \mathit{für}\ x=0\\ 0\ \mathit{sonst}\end{cases}$				

Quadratische $n_x n$-Matrizen

Determi-nante:	$\det\begin{vmatrix} a_1 & b_1 \\ a_2 & b_2 \end{vmatrix} = a_1 b_2 - b_1 a_2$ $\det\begin{vmatrix} a_1 & b_1 & c_1 \\ a_2 & b_2 & c_2 \\ a_3 & b_3 & c_3 \end{vmatrix} = \vec{a}\cdot(\vec{b}\times\vec{c}) = a_1\,b_2\,c_3 + b_1\,c_2\,a_3 + c_1\,a_2\,b_3 - c_1\,b_2\,a_3 - c_2\,b_3\,a_1 - c_3\,b_1\,a_2 = a_1(-1)^{1+1}\begin{vmatrix} b_2 & c_2 \\ b_3 & c_3 \end{vmatrix} + b_1(-1)^{1+2}\begin{vmatrix} a_2 & c_2 \\ a_3 & c_3 \end{vmatrix} + c_1(-1)^{1+3}\begin{vmatrix} a_2 & b_2 \\ a_3 & b_3 \end{vmatrix} = \varepsilon_{ijk} a_i b_j c_k$
invertierbar:	$\exists B: AB = \mathbb{1} \Leftrightarrow regulär$ Invertieren: $[A\|\mathbb{1}] \xrightarrow{Gauss} [\mathbb{1}\|A^{-1}]$ Invertieren 2x2: $\begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}^{-1} = \frac{1}{ad-bc}\begin{pmatrix} d & -b \\ -c & a \end{pmatrix}$
Rechen-regeln:	$\det(AB) = \det(A)\det(B)$ $\det(A^T) = \det(A)$ $\det(A^{-1}) = \det(A)^{-1}$ $\det(sA) = s^n \det(A)$
selbstadjung.	in $\mathbb{R}^{nxn}$: selbstadjungiert≡symetrisch (s.u.) $\langle A\vec{x},\vec{y}\rangle = \langle\vec{x},A\vec{y}\rangle$ in $\mathbb{C}^{nxn}$: selbstadjungiert≡hermit (s.u.) $\langle A\vec{x}\|\vec{y}\rangle = \langle\vec{x}\|A\vec{y}\rangle$
hermit:	$A = A^\dagger = A^* \Leftrightarrow EV\ bilden\ OGB\ D \Leftrightarrow \exists: OGB\ D: U^\dagger A\, U = D$ herm.$\Longrightarrow \forall\lambda_i \in \mathbb{R}$; h.$\Longrightarrow$diag.bar; h.$\Longrightarrow$selbstadj.; h.$\Longrightarrow$ normal
unitär:	$A \in \mathbb{C}^{nxn}: U^\dagger = U^{-1} \Leftrightarrow U\,U^\dagger = \mathbb{1} \Leftrightarrow \\|\vec{x}\\| = \\|U\vec{x}\\|$ unitär $\Longrightarrow \det(U) = 1$; unit. $\Longrightarrow \forall\lambda_i = e^{it_i}$, unit. $\Longrightarrow$ diag.bar; unit. $\Longrightarrow$ normal
diag.sierbar:	$\exists T: T\,A\,T^{-1} = D \Leftrightarrow \exists\ Eigenbasis\ D: A = X\,D\,X^{-1} \forall\lambda_i: algebr.Vielfachheit\ n = geom.Vielfachheit\ g \Leftrightarrow AB = BA$
normal:	A ist normal, wenn $[AA^*] = AA^* - A^*A = \mathbb{0}$.
orthogonal:	$A \in \mathbb{R}^{nxn}: A^T = A^{-1} \Leftrightarrow A\,A^T = \mathbb{1} \Leftrightarrow \\|\vec{x}\\| = \\|A\vec{x}\\|$ orthogonal $\Longrightarrow \det(A) = \pm 1$; orthognal $\Longrightarrow \forall\lambda_i = \pm 1$
EW λ, EV $\vec{v}$	$A\vec{v} = \lambda\vec{v};\ Eigenvektor\ \vec{v} \in \mathbb{C}^n \setminus \{\vec{0}\}; Eigenwert\ \lambda \in \mathbb{C}. Wenn\ A \in \mathbb{R}^{nxn} \wedge pos.definit \Longrightarrow \forall\lambda_i \in \mathbb{R} \wedge \forall\lambda_i > 0.$ Berechnung EW: $A\vec{v} = \lambda\vec{v} \Longrightarrow A\vec{v} = \lambda\mathbb{1}\vec{v} \Longrightarrow A\vec{v} - \lambda\mathbb{1}\vec{v} = 0 \Longrightarrow$
EW und EV	EW: $p(\lambda) = \det(A - \lambda\mathbb{1}) = 0$; EV: $\vec{v}_{1\ldots n} \in \mathrm{Eigenraum}(\lambda_i) = \mathrm{Kern}(A - \lambda_i\mathbb{1})$

Hilbertraum

Hilbertraum $\mathcal{H}$. Allgemein	Ein Hilbertraum H ist ein bezüglich der vom Skalarprodukt induzierten Metrik vollständiger Prähilbertraum $(\bar{V},\langle\cdot,\cdot\rangle)$. Das heißt jede Cauchy-Folge konvergiert gegen ein Element im Raum.
Prähilbertraum	Ein Vektorraum, in dem ein inneres Produkt definiert ist $(V,\langle\cdot,\cdot\rangle)$, heißt *Prähilbertraum*. Damit es ein inneres Produkt $\langle\cdot,\cdot\rangle$ geben kann, muss im Raum eine geeignete Norm definiert sein (nämlich eine Norm, die die Parallelogrammgleichung erfüllt; z.B. $\\|\cdot\\|_2$), bzw. das Innere Produkt *induziert* die Norm: $\\|x\\|_2 = \sqrt{\langle x,x\rangle}\ \ \forall x \in V$. In einem Prähilbertraum ist „*Orthogonalität*" x⊥y definiert ($x \perp y \Leftrightarrow \langle x,y\rangle = 0$), und es existieren *Orthonormalbasen*.
Norm. Vektor-raum (V, ‖ · ‖):	Vektorraum mit definierter Norm $V \to \mathbb{R}_0^+: \vec{x} \to \\|\vec{x}\\|: (\\|s\vec{x}\\| = \|s\|\\|\vec{x}\\|) \wedge (\\|\vec{x}+\vec{y}\\| \le \\|\vec{x}\\| + \\|\vec{y}\\|) \wedge (\\|\vec{x}\\| \ge 0;\ \ \\|\vec{x}\\| = 0 \Leftrightarrow \vec{x} = \vec{0})$
Vektorraum, allgemein	Es seien V eine Menge, $(\mathbb{K},+,\cdot)$ ein Körper, $\oplus$: $V \times V \to V$ die Vektoraddition und $\odot$: $\mathbb{K} \times V \to V$ die Skalar-multiplikation. Dann ist $(V,\oplus,\odot)$ ein Vektorraum über den Körper $\mathbb{K}$, wenn für die Vektoraddition gilt: V1: $u\oplus(v\oplus w) = (u\oplus v)\oplus w$ (Assoziativgesetz) V2: $\exists 0 \in V: V\oplus 0 = 0\oplus V$ (neutrales Element 0) V3: $\exists(-v) \in V: V\oplus(-v) = (-v)\oplus V = 0$ (inverses Element) V4: $v\oplus u = u\oplus v$ (Kommutativgesetz) und wenn für die Vektormultiplikation gilt: S1: $\alpha\odot(u\oplus v) = (\alpha\odot u)\oplus(\alpha\odot v)$ S2: $(\alpha+\beta)\odot v = (\alpha\odot v)\oplus(\beta\odot v)$ S3: $(\alpha\cdot\beta)\odot v = \alpha\odot(\beta\odot v)$ S4: $\exists 1 \in \mathbb{K}: 1\odot v = v$ (neutrales Element 1) für alle $u,v,w \in V$ und $\alpha,\beta \in \mathbb{K}$. V1, V2, V3 besagt, dass $(V,\oplus)$ eine Gruppe bildet, und V4, dass diese abelsch ist.

Modellpotentiale (1D)

Unendlich hoher Potentialtopf von x = 0 bis a	$\Psi = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$ mit $k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$ ... (1) Rand bed.: $\Psi(0) = 0 \Longrightarrow B = -A$ ... (2); $\Psi(a) = 0 \overset{(2)}{\Longrightarrow} k = \frac{n\pi}{a}$ ... (3) Lösung: $\Psi = C\sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right)$ mit $C = \sqrt{2/a}$ $E = \frac{m^2v^2}{2m} = \frac{p^2}{2m} = \frac{\hbar^2k^2}{2m} \overset{(3)}{\Longrightarrow}$ $E_n = \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\pi^2}{a^2}n^2 = E_1 n^2$
Potentialstufe $V(x \le 0) = 0$ $V(x > 0) = V_0$ mit $E < V_0$	$\Psi_I = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$ mit $k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$ ... (1) $\Psi_{II} = De^{-\kappa x}$ mit $\kappa = \sqrt{\frac{2m(V_0-E)}{\hbar^2}}$ ... (2) Anschluss-bedingungen: $\Psi_I(0) = \Psi_{II}(0) \Longrightarrow A + B = D$ ... (3); $\Psi_I'(0) = \Psi_{II}'(0) \Longrightarrow i\frac{k}{\kappa}A - i\frac{k}{\kappa}B = -D$ ... (4) $(3) + (4) \Longrightarrow B = -A\frac{\kappa+ik}{\kappa-ik}$ $\overset{(3)}{\Longrightarrow} D = A\frac{2ik}{ik-\kappa}$ $\Psi_I = A\left(e^{ikx} - \frac{\kappa+ik}{\kappa-ik}e^{-ikx}\right)$ $\Psi_{II} = A\frac{2ik}{ik-\kappa}e^{-\kappa x}$ Refl.-koeff: $R = \frac{\vert B\vert^2}{\vert A\vert^2} = 1$ Ein-dring-tiefe: $\frac{\Psi_{II}(\delta)}{\Psi_{II}(0)} \overset{!}{=} \frac{1}{e} \Longrightarrow \delta = \frac{1}{2\kappa}$ Wahrsch strom dichte: $j_{in} = \frac{\hbar k}{m}$ $j_{refl} = \frac{\hbar k}{m}$
Potentialstufe $V(x \le 0) = 0$ $V(x > 0) = V_0$ mit $E > V_0$	$\Psi_I = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$ mit ... (1) $\Psi_{II} = Ce^{ik'x}$ mit $k' = \sqrt{\frac{2m(E-V_0)}{\hbar^2}}$ ... (2) Anschluss-bedingungen: $\Psi_I(0) = \Psi_{II}(0) \Longrightarrow A + B = C$ ... (3); $\Psi_I'(0) = \Psi_{II}'(0) \Longrightarrow \frac{k}{k'}A - \frac{k}{k'}B = C$ ... (4) $(3) - (4) \Longrightarrow B = A\frac{k-k'}{k+k'}$ $\overset{(3)}{\Longrightarrow} C = A\frac{2k}{k+k'}$ Lösung: $\Psi_I = A\left(e^{ikx} + \frac{k-k'}{k+k'}e^{-ikx}\right)$ $\Psi_{II} = A\frac{2k}{k+k'}e^{-\kappa x}$ Refl.-koeff: $R = \frac{\vert B\vert^2}{\vert A\vert^2} = \left\vert\frac{k-k'}{k+k'}\right\vert^2$ $T = \frac{4kk'}{(k+k')^2}$ vgl. Optik: $R = \left\vert\frac{n_1-n_2}{n_1+n_2}\right\vert^2$
Wahrscheinlich-keitsstromdichte	$\mathrm{j}[\Psi] = \mathrm{Re}\left(\Psi^*\frac{1}{m}\hat{p}\Psi\right) = \mathrm{Re}\left(\Psi^*\frac{1}{m}\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\Psi\right)$; $j_{in} = \mathrm{j}[Ae^{ikx}]$; $j_{refl} = \mathrm{j}[Be^{-ikx}]$; $j_{out} = \mathrm{j}[Ce^{ik'x}]$ $j_I = \mathrm{j}[Ae^{\lambda_I kx} + Be^{-\lambda_I kx}] = \frac{\hbar k_1}{m}(\vert A\vert^2 - \vert B\vert^2)$; $j_{II} = \mathrm{j}[Ce^{\lambda_{II}k'x} + De^{-\lambda_{II}k'x}] = \frac{\hbar k_2}{m}(\vert C\vert^2 - \vert D\vert^2)$ Kontinuitätsbedingung $\frac{\partial\rho}{\partial t} = -\frac{\partial j}{\partial x} \Longrightarrow j = \rho v$
Potentialbarriere $V(0<x<a)=V_0$ sonst $V = 0$ mit $E < V_0$	$\Psi_I = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$ $\Psi_{II} = Ce^{\kappa x} + De^{-\kappa x}$ $\Psi_{III} = Ee^{ikx}$ mit $k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$; $\kappa = \sqrt{\frac{2m(V_0-E)}{\hbar^2}}$ AB: $\Psi_I(0) = \Psi_{II}(0) \Longrightarrow A + B = C + D$ $\Psi_I'(0) = \Psi_{II}'(0) \Longrightarrow ik(A - B) = \kappa(C - D)$ $\Psi_{II}(a) = \Psi_{III}(a) \Longrightarrow Ce^{\kappa a} + De^{-\kappa a} = Ee^{ika}$ $\Psi_{II}'(a) = \Psi_{III}'(a) \Longrightarrow \kappa Ce^{\kappa a} - \kappa De^{-\kappa a} = ikEe^{ika}$ $T = \frac{1-\frac{E}{V_0}}{1-\frac{E}{V_0}+\frac{V_0}{4E}\sinh^2(\kappa a)}$
Potentialbarriere $V(0<x<a)=V_0$ sonst $V = 0$ mit $E > V_0$	$\Psi_I = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$ $\Psi_{II} = Ce^{ik'x} + De^{-ik'x}$ $\Psi_{III} = Ee^{ikx}$ mit $k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$; $k' = \sqrt{\frac{2m(E-V_0)}{\hbar^2}}$ AB: $\Psi_I(0) = \Psi_{II}(0) \Longrightarrow A + B = C + D$ $\Psi_I'(0) = \Psi_{II}'(0) \Longrightarrow ik(A - B) = ik'(C - D)$ $\Psi_{II}(a) = \Psi_{III}(a) \Longrightarrow Ce^{ik'a} + De^{-ik'a} = Ee^{ika}$ $\Psi_{II}'(a) = \Psi_{III}'(a) \Longrightarrow ik'Ce^{ik'a} - ik'De^{-ik'a} = ikEe^{ika}$ $T = \frac{\frac{E}{V_0}-1}{\frac{E}{V_0}-1+\frac{V_0}{4E}\sin^2(ka)}$
Harmonischer Oszillator	$V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2x^2 \Longrightarrow E\,\Psi(x) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2}m\omega^2x^2\right)\Psi(x) \Longrightarrow E\,\Psi(x) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\partial}{\partial x}\Psi(x)\right) + \frac{1}{2}m\omega^2x^2\,\Psi(x)$ ... (1) reduzierte Einheiten: $E = \hbar\omega\varepsilon$ ... (2a) $x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$ ... (2b) $x = yx_0$ ... (2c) $\Longrightarrow y = \frac{x}{x_0}$ ... (2d) $\Longrightarrow \frac{\partial y}{\partial x} = \frac{1}{x_0}$ ... (2e) $\Psi(x) \to \tilde{\Psi}(y) \overset{(1)}{\Longrightarrow} E\,\tilde{\Psi}(y) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial}{\partial y}\left(\frac{\partial\tilde{\Psi}}{\partial y}\frac{\partial y}{\partial x}\right)\frac{\partial y}{\partial x} + \frac{1}{2}m\omega^2x^2\,\tilde{\Psi}(y) \overset{(2e)}{\Longrightarrow}$ $E\,\tilde{\Psi}(y) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial}{\partial y}\left(\frac{\partial\tilde{\Psi}}{\partial y}\frac{1}{x_0}\right)\frac{1}{x_0} + \frac{1}{2}m\omega^2x^2\,\tilde{\Psi}(y) \Longrightarrow E\,\tilde{\Psi}(y) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{x_0^2}\frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{1}{2}m\omega^2x^2\right)\tilde{\Psi}(y) \overset{(2b)}{\Longrightarrow}$ $E\,\tilde{\Psi}(y) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{m\omega}{\hbar}\frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{1}{2}m\omega^2x^2\right)\tilde{\Psi}(y) = \left(-\frac{1}{2}\hbar\omega\frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{1}{2}m\omega^2x^2\right)\tilde{\Psi}(y) \overset{(2c)}{\Longrightarrow}\overset{(2b)}{\Longrightarrow}$ $E\,\tilde{\Psi}(y) = \left(-\frac{1}{2}\hbar\omega\frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{1}{2}m\omega^2y^2\frac{\hbar}{m\omega}\right)\tilde{\Psi}(y) = \left(-\frac{1}{2}\hbar\omega\frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{1}{2}\hbar\omega y^2\right)\tilde{\Psi}(y) \overset{(2a)}{\Longrightarrow}$ $\hbar\omega\varepsilon\,\tilde{\Psi}(y) = \left(-\frac{1}{2}\hbar\omega\frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{1}{2}\hbar\omega y^2\right)\tilde{\Psi}(y) \Longrightarrow \boxed{\varepsilon\,\tilde{\Psi}(y) = \frac{1}{2}\left(-\frac{\partial^2}{\partial y^2} + y^2\right)\tilde{\Psi}(y)}$ ... (3) Ansatz: $\tilde{\Psi} = e^{-\frac{y^2}{2}}\,\mathrm{h}(y)$ mit Potenzreihe $\mathrm{h}(y) = \sum_{i=0}^{\infty} a_i y_i$. Spezialfall Grundzustand: $\mathrm{h}(y) = 1 \Longrightarrow \tilde{\Psi} = e^{-\frac{y^2}{2}}$ ... (4a) $\Longrightarrow$ $\frac{\partial\tilde{\Psi}}{\partial y} = -ye^{-\frac{y^2}{2}} \Longrightarrow \frac{\partial^2\tilde{\Psi}}{\partial y^2} = -e^{-\frac{y^2}{2}} + y^2e^{-\frac{y^2}{2}}$ ... (4b) $\overset{(3)}{\Longrightarrow} \varepsilon_1 e^{-\frac{y^2}{2}} = \frac{1}{2}\left(e^{-\frac{y^2}{2}} \cancel{- y^2e^{-\frac{y^2}{2}} + y^2e^{-\frac{y^2}{2}}}\right) \Longrightarrow \varepsilon_1 = \frac{1}{2} \overset{(2a)}{\Longrightarrow} \frac{E_1}{\hbar\omega} = \frac{1}{2} \Longrightarrow$ $\varepsilon_1 = \frac{1}{2} \overset{(2a)}{\Longrightarrow} \boxed{E_1 = \frac{1}{2}\hbar\omega}$ Allgemein: $\boxed{E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right)}$ Eigenzustände: $\tilde{u}_n(y) = \frac{1}{\sqrt{x_0\sqrt{\pi}2^n n!}}e^{-\frac{y^2}{2}}\,\mathrm{H}_n(y)$; $u_n(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}}\frac{1}{\sqrt{2^n n!}}e^{-\frac{1}{2}\frac{m\omega}{\hbar}x^2}\,\mathrm{H}_n\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x\right)$ mit $\mathrm{H}_n(x) = (-1)^n e^{x^2}\frac{d^n}{dx^n}e^{-x^2}$