

(V, \mathbb{K}) heißt **Vektorraum** $\Leftrightarrow \forall a, \forall b \in V; \forall \lambda, \forall \mu \in \mathbb{K} : a + b \in V, \exists 0 \in V : a + 0 = a, \exists [-a] \in V : a + [-a] = 0, [a + b] + c = a + [b + c], a + b = b + a, \lambda[a + b] = \lambda a + \lambda b, a[\lambda + \mu] = \lambda a + \mu a.$

$a_1, a_2, a_3 \in V : (a_1, a_2, a_3)$ heißt **Basis** $\Leftrightarrow a_1, a_2, a_3$ sind linear unabhängig ($\lambda_1 a_1 + \lambda_2 a_2 + \lambda_3 a_3 = 0 \Leftrightarrow \lambda_1 = \lambda_2 = \lambda_3 = 0$) und erzeugend ($\text{span}(a_1, a_2, a_3) = V$).

$\|\cdot\|$ heißt **Norm** $\Leftrightarrow \|a\| \geq 0, \|a\| = 0 \Leftrightarrow a = 0, \|\lambda a\| = |\lambda| \|a\|, \|a + b\| \leq \|a\| + \|b\| . \quad l_2 = \{ \{c_k\}_{k \in \mathbb{N}} \mid \sum_k |c_k|^2 < \infty \}$

$\langle \cdot, \cdot \rangle$ heißt **Skalarprodukt** $\Leftrightarrow \langle a, a \rangle \geq 0, \langle a, a \rangle = 0 \Leftrightarrow a = 0, \langle a, b \rangle = \langle b, a \rangle^*, \langle a, \lambda b + \mu c \rangle = \lambda \langle a, b \rangle + \mu \langle a, c \rangle . \quad \|a\|_p = \left[\sum_{i=1}^n |a_i|^p \right]^{\frac{1}{p}}, p \geq 1$

Gilt die Parallelogrammgleichung ($\|a + b\|^2 + \|a - b\|^2 = 2[\|a\|^2 + \|b\|^2]$), so kann die Norm durch ein Skalarprodukt definiert werden. $f \in L_2 \Leftrightarrow \int_{\mathbb{R}^n} |f|^2 d^n x < \infty$
 $\|f\|_{L_2} = \left[\int_{\mathbb{R}^n} |f|^2 d^n x \right]^{\frac{1}{2}}$

Standardskalarprodukt im C^n : $\langle a, b \rangle = \sum_{i=1}^n a_i^* b_i \quad \langle a, Ab \rangle = \langle A^\dagger b, a \rangle^*$

Fourier: $\hat{\Phi}(k) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{\sqrt{2\pi}} e^{-ikx} \Phi(x) \quad , \quad \Phi(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{\sqrt{2\pi}} e^{ikx} \hat{\Phi}(k) . \quad \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ik[x-x']} dk = \delta(x-x')$
 $\int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} dx = \sqrt{\pi}$

Planck'sches Strahlungsgesetz über Energiedichte im Hohlraum: $\rho(T, \nu) = \frac{8\pi\nu^2}{c^3} \frac{h\nu}{e^{\frac{h\nu}{k_B T}} - 1} \quad \langle a|^\dagger = |a\rangle$
 $[\langle a|AB|b\rangle]^* = \langle b|B^\dagger A^\dagger|a\rangle$

Wien'sches Verschiebungsgesetz: $\nu_{\max} = dT \quad , \quad d = 2,8221 \frac{k_B}{h}$
 Energiedichte im Hohlraum: $u = aT^4 \quad , \quad a = \frac{\pi^2}{15} \frac{k^4}{[\hbar c]^3}$
 selbstadjungiert: $U^\dagger = U$
 hermitesch: $\langle b|U|a\rangle = [\langle a|U|b\rangle]^*$

Photoeffekt: $h\nu = E_{\text{kin}, e^-} - W_{\text{Austritt}} .$

Compton-Streuung: $\lambda' - \lambda = \frac{h}{m_0 c} [1 - \cos(\theta)]$ mit der Compton-Wellenlänge $\lambda_C = \frac{h}{m_0 c} .$

Σ in x -Richtung relativ bewegt zum ruhenden Σ_0 : $t = \frac{1}{\gamma} t_0 + \frac{vx}{c^2} \quad , \quad x = \frac{1}{\gamma} x_0 + vt \quad , \quad y_0 = y \quad , \quad z_0 = z \quad , \quad \gamma = \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} .$

De Broglie: $\vec{p} = \hbar \vec{k} \quad , \quad E = \hbar \omega \quad , \quad \lambda = \frac{h}{2m_0 E_{\text{kin}}} .$
 Sommerfeld'sche Feinstrukturkonstante: $\alpha = \frac{e^2}{\hbar c} \approx \frac{1}{137,036}$

Bohr'sche Postulate:
 Elektronen-Ruhemasse: $E_0 = m_e c^2 \approx 0,51 \text{ MeV}$

- Für jedes Atom existieren stationäre Zustände, in denen das Atom nicht strahlt. Änderung der Energie eines Atoms sind nur durch einen Übergang zwischen stationären Zuständen möglich.
- Die Frequenz der beim Übergang zwischen zwei stationären Zuständen ausgestrahlten bzw. absorbierten Wellen genügt der bedingung $h\nu = E_m - E_n .$

Einstein-Koeffizienten:
 Bohrscher Radius: $0,529 \text{ \AA}$
 Rydberg-Energie: $-Ry = -\frac{\alpha^2}{2} m_e c^2 \approx -13,6 \text{ eV}$

Atom mit Zuständen k und l ($E_l > E_k$), Anzahl $N_{l/k} = e^{-\frac{E_{l/k}}{k_B T}}$, in einem Strahlungsfeld der Dichte $\rho(\nu, T)$; dann

- Absorption: $\dot{N}_{kl}^{\text{absorp}} = B_{kl} N_k \rho(T, \nu),$
- induzierte Emission: $\dot{N}_{lk}^{\text{ind}} = B_{lk} N_l \rho(T, \nu),$
- spontane Emission: $\dot{N}_{lk}^{\text{spont}} = A_{lk} N_l .$

Über Rayleigh-Jeans, Taylor in 1. Ordnung bzgl. $\frac{\nu}{T}$ und Grenzwertbetrachtungen folgt: $B_{lk} = B_{kl} \quad , \quad \frac{A_{lk}}{B_{kl}} = 8\pi h \frac{\nu^3}{c^3} .$

Grundannahmen (der nicht-relativistischen Quantenphysik):
 Für jeden Zustand eines Teilchens kann man zu jedem Zeitpunkt $[\Delta t = 0]$ eine Wahrscheinlichkeit $w(t, \vec{x}) d^3x$ $[\tilde{w}(t, \vec{p}) d^3p]$ dafür angeben, bei einer Messung des Teilchenortes [Teilchenimpulses] diesen innerhalb einer kleinen Umgebung des Ortes \vec{x} [Impulses \vec{p}] im Volumen d^3x [d^3p] zu finden. Zu jedem Zeitpunkt muss die Wahrscheinlichkeit, das Teilchen irgendwo [mit irgendeinem Impuls] zu finden, gleich Eins sein: $\int_{\mathbb{R}^3} w(t, \vec{x}) d^3x = 1 \quad [\int_{\mathbb{R}^3} \tilde{w}(t, \vec{p}) d^3p = 1] \quad \forall t .$

Mittelwerte: $\langle f(\vec{x}) \rangle_t = \int f(\vec{x}) w(t, \vec{x}) d^3x$, $\langle f(\vec{p}) \rangle_t = \int f(\vec{p}) \tilde{w}(t, \vec{p}) d^3p$.

Materiewellen: $\Psi(t, \vec{x}) = \kappa \int_{\mathbb{R}^d} \tilde{\psi}(t, \vec{p}) e^{i \frac{\vec{p}\vec{x}}{\hbar}} d^d p$, mit $\tilde{\Psi}(t, \vec{p}) = \tilde{\psi}(\frac{\vec{p}}{\hbar}) e^{-i \frac{Et}{\hbar}}$;

Umkehrtransformation: $\tilde{\Psi}(t, \vec{p}) = \kappa' \int_{\mathbb{R}^d} \psi(t, \vec{x}) e^{-i \frac{\vec{p}\vec{x}}{\hbar}} d^d x$ und $\kappa \kappa' = \left[\frac{1}{2\pi\hbar} \right]^d \xrightarrow{\text{Konvention}} \kappa = \kappa' = \left[\frac{1}{2\pi\hbar} \right]^{\frac{d}{2}}$

Wahrscheinlichkeitsinterpretation: $w(t, \vec{x}) = |\psi(t, \vec{x})|^2$, $\tilde{w}(t, \vec{p}) = |\tilde{\psi}(t, \vec{p})|^2$;

mit der Normierungsbedingung: $\int |\psi(t, \vec{x})|^2 d^3x = 1 = \int |\tilde{\psi}(t, \vec{p})|^2 d^3p$.

Plancherel: $\int_{\mathbb{R}^3} f^*(\vec{x}) g(\vec{x}) d^3x = \int_{\mathbb{R}^3} \tilde{f}^*(\vec{p}) \tilde{g}(\vec{p}) d^3p$

$$\langle \vec{x} \rangle_t = \frac{1}{m} \langle \vec{p} \rangle_{t=0} t + \langle \vec{x} \rangle_{t=0}$$

$$\mathcal{F}(\varphi \cdot \psi) = \mathcal{F}(\varphi) * \mathcal{F}(\psi)$$

Schrödinger-Gleichung für ein freies, nicht-relativistisches Teilchen:

$$i \hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(t, \vec{x}) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi(t, \vec{x})$$

Es gilt: 1. $\Psi(t_0, \vec{x}) \forall \vec{x}$ oder $\Psi(t, \vec{x}_0) \forall t$ bekannt $\rightarrow \Psi(t, \vec{x}) \forall t, \forall \vec{x}$ determiniert.

2. $\Psi(t, \vec{x})$ Lösung \Rightarrow auch $\Psi_T(t, \vec{x}) = \Psi^*(-t, \vec{x})$ Lösung der Schrödinger-Gleichung.

3. Galilei-Kovarianz der Schrödinger-Gleichung: $\vec{x}' = \vec{x} + \vec{v}t, t' = t, \Psi'(t', \vec{x}')$ Lösung in $I' \Rightarrow \Psi(t, \vec{x}) = e^{-i \Phi(t, \vec{x})} \Psi'(t', \vec{x}')$, mit $\Phi(t, \vec{x}) = \frac{Et - m\vec{v}\vec{x}}{\hbar}$, ist Lösung in I .

Die allgemeine Lösung (aufgrund der Linearität der Schrödingergleichung; $K_0(t, \vec{x} - \vec{y})$ heißt „Propagator“/„Kern“):

$$\Psi(t, \vec{x}) = \int_{\mathbb{R}^d} K_0(t, \vec{x} - \vec{y}) \Psi_0(y) d^d y \quad \text{mit} \quad K_0(t, \vec{x} - \vec{y}) = \left[\frac{m}{2\pi i \hbar t} \right]^{\frac{d}{2}} e^{i \frac{m[\vec{x}-\vec{y}]^2}{2\hbar t}}$$

$$K(t+t') = K(t) * K(t')$$

$$\Rightarrow w(t, \vec{x}) \leq \frac{\beta}{t^d} \quad , \beta = const. .$$

Korrespondenzregeln:	$\langle O \rangle = \int_{\mathbb{R}^d} \Psi^*(t, \vec{x}) \hat{O} \Psi(t, \vec{x}) d^d x$	Observable	klassisch	Ortsraum	Impulsraum
		Ort	\vec{x}	$\hat{\vec{x}} = \vec{x}$	$\hat{\vec{x}} = i \hbar \nabla_p$
		Impuls	\vec{p}	$\hat{\vec{p}} = \frac{\hbar}{i} \nabla_x$	$\hat{\vec{p}} = \vec{p}$
		Energie	E	$\hat{E} = i \hbar \partial_t$	$\hat{E} = i \hbar \partial_t$

Klassisch galt: $S(t, q, t_0, q_0) = \int_{q(t_0)}^{q(t)} L(s, q(s), \dot{q}(s)) ds$; mit der Hamilton-Jacobi-Gleichung: $\frac{\partial S}{\partial t} + H(t, q, \nabla_q S) = 0$.
 \Downarrow

Wellengleichung für ein nicht-relativistisches Teilchen in Potential V :

Seien V ein schwach variierendes Potential [$\vec{F}(\vec{x}) = -\nabla V(\vec{x})$, mit $\nabla \hat{p} \approx 0$] , \hat{q} generalisierte Koordinaten, \hat{p} generalisierte

Impulse und H die Hamilton-Funktion $H(\hat{q}, \hat{p}) = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{q})$, dann:

$$i \hbar \partial_t \Psi(t, \hat{q}) = H(t, \hat{q}, \hat{p}) \Psi(t, \hat{q})$$

Ist $\hat{H} = H(p, q)$ zeitunabhängig (stationär), E die Energie des Systems und $\Psi(t, q) = \Psi(q) e^{-i \frac{Et}{\hbar}}$, so erhält man die **zeitunabhängige Schrödingergleichung:**

$$E \Psi(q) = H(\hat{q}, \hat{p}) \Psi(q)$$

Harmonischer Oszillator: $H(p, q) = -\frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}q^2 \Rightarrow \Psi(t, \vec{x}) = \int d^d y K(t, \vec{x}, \vec{y}) \Psi_0(\vec{y})$ mit:

$$K(t, \vec{x}, \vec{y}) = \left[\frac{m\omega}{2\pi i \hbar \sin(\omega t)} \right]^{\frac{d}{2}} e^{i \frac{S(t, \vec{x}, \vec{y})}{\hbar}} \quad \text{und} \quad S = \frac{m\omega}{2 \sin(\omega t)} \left[[\vec{x}^2 + \vec{y}^2] \cos(\omega t) + 2\vec{x}\vec{y} \right].$$

Mehrteilchensysteme: $\Psi = \Psi(t, \vec{x}_1, \dots, \vec{x}_n) \quad i\hbar \partial_t \Psi = \hat{H} \Psi$

Elektromagnetische äußere Felder (\vec{A}, Φ Potentiale): $\hat{H} = \sum_k \left[-\frac{\hbar^2}{2m_k} \underbrace{\left[\nabla_k - \frac{iQ_k}{\hbar c} \vec{A}(t, \vec{x}_k) \right]^2}_{\vec{D} \text{ („kovariante Ableitung“)}} + Q_k \Phi(t, \vec{x}_k) \right] + \underbrace{V(\vec{x}_1, \dots, \vec{x}_n)}_{\text{Selbstwechselwirkungspotential}}.$

Wahrscheinlichkeits**kontinuitätsgleichung** (sofern Potential in SG $V \in \mathbb{R}$; \vec{j} Wahrscheinlichkeitsstromdichte):

$$\frac{\partial w}{\partial t} + \nabla \vec{j} = 0$$

[Für $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V$ ergibt sich $\vec{j} = \frac{\hbar}{m} \text{Im}(\Psi^* \nabla \Psi)$ und somit $\Psi \in \mathbb{R} \Rightarrow \vec{j} = 0$ bzw. $\Psi = \Psi(\vec{x}) e^{-i \frac{tE}{\hbar}} \Rightarrow \nabla \vec{j} = 0$.

Für $\hat{H} = -\sum_k \frac{\hbar^2}{2m_k} \vec{D}_k^2 + V$ ergibt sich $\vec{j} = \sum_k \frac{\hbar}{m_k} \text{Im}(\Psi^* \vec{D}_k \Psi)$

Das **Gram-Schmidt'sche Orthogonalisierungsverfahren:**

w_1, \dots, w_n seien linear unabhängige Vektoren, dann konstruiert folgende Vorschrift n orthogonale Vektoren v_1, \dots, v_n :

$$v_i = w_i - \sum_{j=1}^{i-1} \frac{\langle v_j, w_i \rangle}{\langle v_j, v_j \rangle} v_j \quad \forall i = 1, \dots, n$$

Schwarz'sche Ungleichung: $|\langle \Phi, \Psi \rangle| \leq \|\Phi\| \|\Psi\|.$

Dreiecks-Ungleichung: $\|\Phi + \Psi\| \leq \|\Phi\| + \|\Psi\|.$

Ein **Prähilbertraum** ist ein Vektorraum \mathcal{H} mit einem Skalarprodukt $\langle \cdot, \cdot \rangle$.

Konvergiert zudem jede Cauchy-Folge in \mathcal{H} [$\rightarrow \mathcal{H}$ ist „vollständig“ bezüglich der durch das Skalarprodukt induzierten Norm], so heißt \mathcal{H} **Hilbertraum**.

$\|\Psi\|^2 = \int_{\mathcal{C}} \Psi^* \Psi d^d x$ ist Norm bezüglich Äquivalenzklassen.

\mathcal{H} heißt *separabel*: \exists eine abzählbare Basis $\{\Psi_n\}$. $\Rightarrow \Phi = \underbrace{\sum_{n=1}^{\dim(\mathcal{H})} \langle \Phi, \Psi_n \rangle \Psi_n}_{\text{lineare, isometrische [längenerhaltende, umkehrbare] Abbildung}}, \Phi \in \mathcal{H}; \|\Phi\|^2 = \sum_{n=1}^{\dim(\mathcal{H})} |c_n|^2.$

Satz: Jeder separable Hilbertraum ist isomorph zu $\mathbb{C}^{\dim(\mathcal{H})}$ [$\dim(\mathcal{H}) < \infty$] oder l_2 [$\dim(\mathcal{H}) = \infty$].

[Für allgemeine Mehrteilchensysteme in beliebigen Koordinatensystemen gilt: $\|\Psi\|^2 = \int_{\mathcal{C}} d^d q \mu(q) |\Psi(q)|^2$ $\mu(q) > 0$ Gewichtsfunktion.]

Direkte Summe von Hilberträumen:

\mathcal{H}, \mathcal{K} Unterräume von $\tilde{\mathcal{H}}$; $\mathcal{H} + \mathcal{K} = \{\Phi + \Psi | \Phi \in \mathcal{H}, \Psi \in \mathcal{K}\}$ heißt Summe; gilt $\mathcal{H} \cap \mathcal{K} = \{0\}$, so schreibt man

$$\mathcal{H} \oplus \mathcal{K} \text{ - direkte Summe.}$$

Skalarprodukt: $\langle (\Phi, \Psi), (\Phi', \Psi') \rangle_{\mathcal{H} \oplus \mathcal{K}} = \langle \Phi, \Phi' \rangle_{\mathcal{H}} + \langle \Psi, \Psi' \rangle_{\mathcal{K}}$

$\{e_n\}$ Basis von \mathcal{H} , $\{f_m\}$ Basis von $\mathcal{K} \Rightarrow \{e_n\} \cup \{f_m\}$ ist Basis von $\mathcal{H} \oplus \mathcal{K}$.

Tensorprodukt von Hilberträumen:

$\{e_n\}$ Basis von \mathcal{H} , $\{f_m\}$ Basis von $\mathcal{K} \Rightarrow e_n \otimes f_m$ Basis in $\mathcal{H} \otimes \mathcal{K}$; $\dim(\mathcal{H} \otimes \mathcal{K}) = \dim(\mathcal{H}) \dim(\mathcal{K})$.

$$\Phi = \sum_n c_n e_n \in \mathcal{H}, \Psi = \sum_m d_m f_m \in \mathcal{K}, \Phi \otimes \Psi = \sum_{n,m} c_n d_m [e_n \otimes f_m] \in \mathcal{H} \otimes \mathcal{K}$$

Skalarprodukt: $\langle \Phi \otimes \Psi, \Phi' \otimes \Psi' \rangle_{\mathcal{H} \otimes \mathcal{K}} = \langle \Phi, \Phi' \rangle_{\mathcal{H}} \langle \Psi, \Psi' \rangle_{\mathcal{K}}$

$\tilde{\Psi} \in \mathcal{H} \otimes \mathcal{K}, \Psi \in \mathcal{H}, \Phi \in \mathcal{K} : \tilde{\Psi} = \Psi \otimes \Phi \Leftrightarrow \tilde{\Psi}$ „separabel“

Lineare Operatoren:

\hat{A} heißt linear, wenn für beliebige $\alpha, \beta \in \mathbb{C}$ und Vektoren Φ, Ψ in einem Definitionsbereich $\mathcal{D}_A \subset \mathcal{H}$ von \hat{A} gilt:

$$\hat{A}[\alpha\Phi + \beta\Psi] = \alpha\hat{A}\Phi + \beta\hat{A}\Psi$$

Sei nun (Ψ_n) eine orthonormale Basis in \mathcal{H} , so gilt: $A = (a_{mn})$, mit $a_{mn} = \langle \Psi_m, \hat{A}\Psi_n \rangle \leftrightarrow \hat{A}$.

Dies ist äquivalent zu: $\Psi' = \sum_m c'_m \Psi_m = \hat{A}\Psi = \hat{A} \sum_n c_n \Psi_n = \sum_{nm} c_n \Psi_m a_{mn} \Rightarrow c'_m = \sum_n a_{mn} c_n \Leftrightarrow \vec{c}' = (a_{mn})\vec{c}$

Ist $\dim \mathcal{H} = \infty$, so kann $\hat{A}\Psi \notin \mathcal{H}$ liegen; \hat{A} heißt dann **unbeschränkt**.
 $\Rightarrow \mathcal{D}_A \subset \mathcal{H}$ entsprechend wählen, so dass \hat{A} darauf beschränkt ist!

Die Menge der linearen, beschränkten Operatoren bildet eine normierte Algebra über \mathbb{C} .

$[(\hat{A} + \hat{B})\Psi = \hat{A}\Psi + \hat{B}\Psi, [\alpha\hat{A}]\Psi = \alpha[\hat{A}\Psi] \rightarrow$ Vektorraum], $\|\hat{A}\Psi\| \leq C_A \|\Psi\| \quad \forall \Psi \in \mathcal{D}_A \subset \mathcal{H} \rightarrow$ beschränkt], $\|\hat{A}\| := \sup \frac{\|\hat{A}\Psi\|}{\|\Psi\|} \rightarrow$ Norm], $\|\hat{A} + \hat{B}\| \leq \|\hat{A}\| + \|\hat{B}\|$, $[\hat{A}\hat{B}]\Psi = \hat{A}[\hat{B}\Psi], [\hat{A} + \hat{B}]\hat{C} = \hat{A}\hat{C} + \hat{B}\hat{C}, \hat{A}[\hat{B} + \hat{C}] = \hat{A}\hat{B} + \hat{A}\hat{C}, \alpha[\hat{A}\hat{B}] = [\alpha\hat{A}]\hat{B} = \hat{A}[\alpha\hat{B}] \rightarrow$ Algebra], $\|\hat{A}\hat{B}\| \leq \|\hat{A}\| \|\hat{B}\|$

Kommutator von Operatoren:

$$[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$$

Er ist antisymmetrisch:

$$[\hat{A}, \hat{B}] = -[\hat{B}, \hat{A}],$$

erfüllt die Jacobi-Identität: $[\hat{A}, [\hat{B}, \hat{C}]] + [\hat{C}, [\hat{A}, \hat{B}]] + [\hat{B}, [\hat{C}, \hat{A}]] = 0$,

und es gilt die Derivations-/ : $[\hat{A}, \hat{B}\hat{C}] = \hat{B}[\hat{A}, \hat{C}] + [\hat{A}, \hat{B}]\hat{C}$

Produktregel $[\hat{A}\hat{B}, \hat{C}] = \hat{A}[\hat{B}, \hat{C}] + [\hat{A}, \hat{C}]\hat{B}$

$$\begin{aligned} [\hat{x}_i, \hat{A}(\hat{x}, \hat{p})] &= i\hbar \frac{\partial}{\partial \hat{p}_i} \hat{A}(\hat{x}, \hat{p}) \\ [\hat{p}_i, \hat{A}(\hat{x}, \hat{p})] &= -i\hbar \frac{\partial}{\partial \hat{x}_i} \hat{A}(\hat{x}, \hat{p}) \end{aligned}$$

„bra|c|ket“

Dirac-Notation:

$\Psi \in \mathcal{H}$ über $\mathbb{C} \rightarrow |\Psi\rangle$ „Ket“

\mathcal{H}' dualer Raum (der Vektorraum der linearen Abbildungen von \mathcal{H} nach \mathbb{C}) zu $\mathcal{H} \rightarrow \langle \Psi|$ „Bra“

Skalarprodukt: $\langle \Phi, \Psi \rangle \rightarrow \langle \Phi | \Psi \rangle$

\mathcal{H} und \mathcal{H}' sind isomorph: $|\Psi\rangle \rightarrow F_\Psi \quad F_\Psi(\Phi) = \langle \Psi | \Phi \rangle : \forall \Phi \in \mathcal{H}$
 $F \rightarrow |\Psi_F\rangle \quad \langle \Psi_F | \Phi \rangle = F(\Phi) : \forall \Phi \in \mathcal{H}$

$\|F_\Psi\| = \sup_{\|\Psi\|=1} |F_\Psi(\Phi)| = \|\Psi\|$ [längenerhaltend], $F_{\Phi+\Psi} = F_\Phi + F_\Psi$, $F_{\alpha\Psi} = \alpha^* F_\Psi$ [antilinear], $\langle \Psi | \Phi \rangle = F_\Psi(\Phi) = \langle \Psi, \Phi \rangle$.

Projektion: $\hat{P}_\Psi = |\Psi\rangle\langle \Psi|$

$$\langle \Phi + \Psi | = \langle \Phi | + \langle \Psi |$$

$$|\Phi\rangle = \hat{A}|\Psi\rangle \Rightarrow \langle \Phi | = \langle \Psi | \hat{A}^\dagger$$

$$\langle \alpha\Psi | = \alpha^* \langle \Psi |$$

Tensorprodukt von Operatoren:

$\mathcal{H} = U \otimes V, \hat{A} : U \rightarrow U, \hat{B} : V \rightarrow V: [\hat{A} \otimes \hat{B}][|\Phi\rangle \otimes |\Psi\rangle] = [\hat{A}|\Phi\rangle] \otimes [\hat{B}|\Psi\rangle]$

$$\hat{A} \otimes \hat{B} \Leftrightarrow (a_{pm} b_{qn}) \Leftrightarrow \left(\begin{array}{ccc} a_{11}B & a_{12}B & \dots \\ a_{21}B & \ddots & \\ \vdots & & \end{array} \right) "$$

Addition: $\hat{A} + \hat{B} = \hat{A} \otimes \mathbb{1}_V + \mathbb{1}_U \otimes \hat{B}$

Der zu \hat{A} **adjungierte** Operator \hat{A}^\dagger ist definiert durch: $\langle \Phi, \hat{A}\Psi \rangle = \langle \hat{A}^\dagger\Phi, \Psi \rangle$.

Rechenregeln: $[\hat{A} + \hat{B}]^\dagger = \hat{A}^\dagger + \hat{B}^\dagger$, $[\alpha\hat{A}]^\dagger = \alpha^* \hat{A}^\dagger$, $[\hat{A}^\dagger]^\dagger = \hat{A}$, $[\hat{A}\hat{B}]^\dagger = \hat{B}^\dagger \hat{A}^\dagger$.

Hermiteische Operatoren [„selbstadjungiert“]: $\hat{A} = \hat{A}^\dagger$

; diese können diagonalisiert werden, Eigenfunktionen bilden [vollständige] orthogonale [orthonormierbare] Basis im \mathcal{H} , Eigenwerte sind reell.

Kommutierende Operatoren: \hat{A}, \hat{B} selbstadjungiert und $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$.

\hat{A}, \hat{B} diagonalisierbar, haben gleiche Eigenvektoren und somit eine gemeinsame Eigenbasis in \mathcal{H} .

Spektralzerlegung von selbstadjungierten Operatoren:

Diskret:

Eigenvektoren von \hat{A} : $\hat{A}|a_n, \xi\rangle = \overbrace{a_n}^{EW} \overbrace{|a_n, \xi\rangle}^{EV}$; $\hat{P}_n = \sum_{\xi} |a_n, \xi\rangle\langle a_n, \xi|$ projiziert auf Unterraum $\hat{P}_n \mathcal{H}$
 bei Entartung \Leftrightarrow mehreren EV zu einem EW aufgespannt von EVen zu EW a_n .

$\Rightarrow \hat{P}_n |\Psi\rangle = \sum_{\xi} \underbrace{\langle a_n, \xi | \Psi \rangle}_{c_{n,\xi}} |a_n, \xi\rangle$; Eigenschaften: $\hat{P}_n^\dagger = \hat{P}_n$, $\hat{P}_n^2 = \hat{P}_n$, $\hat{P}_n \hat{P}_m = \delta_{nm} \hat{P}_n = \hat{P}_m \hat{P}_n$, $\mathbb{1} = \sum_n \hat{P}_n$.

$$f(\hat{A})\hat{P}_n = f(a_n)\hat{P}_n$$

Kontinuierlich:

Eigenvektoren von \hat{A} : $\hat{A}|a\rangle = a|a\rangle$ [$|a\rangle \notin \mathcal{H}$] ; $\hat{P}(a) = |a\rangle\langle a|$

$\Rightarrow \hat{P}(a) |\Psi\rangle = \underbrace{\langle a | \Psi \rangle}_{c(a)} |a\rangle$

Damit gilt: $|\Psi\rangle = \sum_n c_n |a_n\rangle + \int da c(a) |a\rangle$; $\langle \Psi | = \sum_n \langle a_n | c_n^* + \int da \langle a | c^*(a)$;
 wobei: $\langle a_n | a_m \rangle = \delta_{nm}$, $\langle a | b \rangle = \delta(a - b)$, $\langle a_n | b \rangle = 0$.

$$\|\Psi\|^2 = \langle \Psi | \Psi \rangle = \sum_n |c_n|^2 + \int da |c(a)|^2$$

$$\mathbb{1} = \sum_n |a_n\rangle\langle a_n| + \int da |a\rangle\langle a|$$

\hat{A} ist invertierbar, wenn \hat{A} bijektiv ist. \hat{U} heißt isometrisch $\Leftrightarrow \langle \hat{U}\Phi, \hat{U}\Psi \rangle = \langle \Phi, \Psi \rangle = \langle \hat{U}^\dagger \hat{U}\Phi, \Psi \rangle$

Unitäre Operatoren: \hat{U} ist isometrisch und invertierbar. [$\hat{U}^\dagger = \hat{U}^{-1}$, $|\text{EW}| = 1$]

Satz: $\hat{U} = e^{i\hat{A}}$ [\hat{A} hermitesch, \hat{U} unitär] .

$$\hat{A} = \sum_n \hat{P}_n a_n, \quad e^{i\hat{A}} = \sum_n e^{i a_n} \hat{P}_n$$

\hat{A} und \hat{U} sind dann gleichzeitig diagonalisierbar [$\exists \hat{U}_A : \hat{U}_A \hat{A} \hat{U}_A^{-1} = \hat{D}_A$, $\hat{U}_A \hat{U} \hat{U}_A^{-1} = \hat{D}_U$] und kommutieren [$[\hat{U}, \hat{A}] = 0$].

Ähnlichkeitstransformation: \hat{A} selbstadjungiert, \hat{U}, \hat{V} unitär $\Rightarrow \hat{V} \hat{A} \hat{V}^{-1}$ auch hermitesch, $\hat{V} \hat{U} \hat{V}^{-1}$ auch unitär.

Die Postulate der Quantenmechanik - Kopenhagener Deutung:

1. Der Messapparat für eine Observable entspricht ein linearer selbstadjungierter Operator.
2. Einem reinen Zustand des Systems entspricht ein Strahl im Hilbertraum \mathcal{H} : $R_\Psi = \{ \lambda |\Psi\rangle \mid \lambda \in \mathbb{R} \setminus \{0\} \}$.
3. Eine Messung entspricht einer Wechselwirkung zwischen System und Apparat.
4. Die möglichen Messergebnisse sind die Eigenwerte des der Observablen entsprechenden selbstadjungierten Operators.
5. Die Wahrscheinlichkeit dafür, für ein System im Zustand $|\Psi\rangle$ für eine Observable \hat{A} ein Messresultat im Intervall $\Delta \subset \mathbb{R}$ zu finden, ist:
 $w_{\hat{A}, \Psi}(\Delta) = \langle \Psi | \hat{P}_\Delta | \Psi \rangle$

$\hat{P}_{a_n} [\hat{A}]$, $\hat{P}_{b_m} [\hat{B}]$ heißen „verträgliche Observablen“ $\Leftrightarrow [|\Psi\rangle \text{ beliebiger Anfangszustand, } \forall a_n, b_m :]$
 $\hat{P}_{a_n} \hat{P}_{b_m} \hat{P}_{a_n} |\Psi\rangle = \hat{P}_{b_m} \hat{P}_{a_n} |\Psi\rangle$ oder $\hat{P}_{a_n} \hat{P}_{b_m} = \hat{P}_{b_m} \hat{P}_{a_n}$ oder $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$.

Präparation eines reinen Zustands:

$|\Psi\rangle \xrightarrow{a_n} \hat{P}_{a_n} |\Psi\rangle \xrightarrow{b_m} \hat{P}_{b_m} \hat{P}_{a_n} |\Psi\rangle \xrightarrow{c_o} \dots \xrightarrow{k_w} \hat{P}_{k_w} \dots \hat{P}_{b_m} \hat{P}_{a_n} |\Psi\rangle = \underbrace{|k_w \dots b_m a_n\rangle}_{\text{Quantenzahlen}}$ bis Zustand des Systems eindeutig [bis

auf komplexen Vorfaktor]; die Operatoren müssen dabei paarweise kommutieren.

Mittelwert: $\langle \hat{A} \rangle_\Psi = \langle \Psi | \hat{A} | \Psi \rangle$ Abweichung: $\Delta \hat{A} = \hat{A} - \langle \hat{A} \rangle_\Psi \mathbb{1}$ Varianz: $\langle [\Delta \hat{A}]^2 \rangle_\Psi = \|\Delta \hat{A} | \Psi \rangle\|^2$

Eine Observable \hat{A} heißt **scharf**: $\langle [\Delta \hat{A}]^2 \rangle_\Psi = 0$ $[\hat{A}$ hermitesch $\Rightarrow \hat{A}|\Psi\rangle = \langle \hat{A} \rangle_\Psi |\Psi\rangle$ $[\Rightarrow \text{EW, EV}]$.

Allgemeine Unschärferelation: $\langle [\Delta \hat{A}]^2 \rangle_\Psi \langle [\Delta \hat{B}]^2 \rangle_\Psi \geq \langle \frac{i}{2} [\hat{A}, \hat{B}] \rangle_\Psi^2$ \hat{A}, \hat{B} hermitesch

$$\Rightarrow \langle [\Delta \hat{x}_i]^2 \rangle_\Psi \langle [\Delta \hat{p}_j]^2 \rangle_\Psi \geq \frac{\hbar^2}{4} \delta_{ij}$$

$$\text{tr}(\hat{A}) = \sum_n \langle n | \hat{A} | n \rangle$$

[für alle Orthonormalbasen $\{|n\rangle\}$]

$$\text{tr}(\alpha \hat{A} + \beta \hat{B}) = \alpha \text{tr}(\hat{A}) + \beta \text{tr}(\hat{B})$$

$$\langle \hat{A} \rangle_\Psi = \text{tr}(\hat{A} P_\Psi)$$

Gemischte Zustände:

Mischen von N Gesamtheiten [identische Kopien von Etwas] mit relativen Häufigkeiten λ_n , dann heißt „Gemisch“/„Statistischer Operator“/„Dichtematrix“:

$$\hat{\rho} = \sum_{n=1}^N \lambda_n \hat{P}_n \quad .$$

Mit $\text{tr}(\hat{\rho}) = 1$, $\hat{\rho}^\dagger = \hat{\rho}$, $\hat{\rho} \geq 0$.

Die Wahrscheinlichkeit, einen Zustand zu Eigenwerten in Δ zu finden, beträgt dann: $w_{A,\rho}(\Delta) = \text{tr}(\hat{P}_\Delta \hat{\rho})$.

$\hat{\rho}$ heißt **rein** $\Leftrightarrow \text{tr}(\hat{\rho}^2) = 1 \Leftrightarrow \hat{\rho}^2 = \hat{\rho} \Leftrightarrow \exists j \in \{1, 2, \dots, N\} : \forall i \in \{1, 2, \dots, N\} \wedge i \neq j : \lambda_i = 0 \wedge \lambda_j = 1$.

$\hat{\rho}$ nicht rein $\Leftrightarrow \text{tr}(\hat{\rho}^2) < 1$

Zeitentwicklung abgeschlossener Systeme:

Präparation zu $t_0: |\Psi(t_0)\rangle$; danach als abgeschlossenes System: $i \hbar \frac{d}{dt} |\Psi(t)\rangle = \hat{H} |\Psi(t)\rangle$.

$$\Rightarrow |\Psi(t)\rangle = \hat{U}(t, t_0) |\Psi(t_0)\rangle$$

\hat{U} heißt „Zeitentwicklungsoperator“/„Propagator“/„Evolutionsoperator“; er ist [nach Wahrscheinlichkeitserhaltung!] unitär.

$$\hat{U}(t, t_0) = \hat{U}(t, t_1) \hat{U}(t_1, t_0)$$

Basen:

System mit N Zuständen, \mathcal{H} , Basis $\{|n\rangle\}_{n=1, \dots, N}$, $|\Psi(t)\rangle = \sum_{n=1}^N c_n(t) |n\rangle$, dann wird die Schrödinger-Gleichung zu:

$$i \hbar \frac{d}{dt} c(t) = H c(t)$$

Lösung [\hat{H} zeitunabhängig]:

$$c(t) = e^{-i \hat{H} \frac{t-t_0}{\hbar}} c(t_0) = \hat{U}(t-t_0) c(t_0)$$

Auch $\hat{U}(t)$ erfüllt dann die Schrödingergleichung [$i \hbar \frac{d}{dt} \hat{U} = \hat{H} \hat{U}$].

Basiswechsel: $|n\rangle = \sum_m s_{mn} |m\rangle'$, $c' = S c$, $H' = S H S^{-1}$ [$S = (s_{mn})$].

In Eigenbasis $\{|E_n\rangle\}$ [$\hat{H} |E_n\rangle = E_n |E_n\rangle$] folgt: $c_n(t) = e^{-i E_n \frac{t-t_0}{\hbar}} c_n(t_0) = \hat{U}(t-t_0) |n\rangle E_n$

[Caley-Hamilton]

Satz: $M \in \text{Mat}(n, n, \mathbb{C})$, $P_M(\lambda) = \det(\lambda \mathbb{1} - M) = \lambda^n - \text{tr}(M) \lambda^{n-1} + \dots + [-1]^n \det(M)$ wobei $P_M(M) = 0$

$\Rightarrow \forall n : M^n = f(\mathbb{1}, M, \dots, M^{n-1})$; somit im Endeffekt M^n darstellbar ist als Linearkombination von M und $\mathbb{1}$.

Ist \hat{H} nicht zeitunabhängig, so entwickelt man \hat{U} in eine Potenzreihe bezüglich der Eigenbasis von \hat{H} :

$$\hat{U}(t, t_0) = \sum_{n=0}^{\infty} \hat{U}^{(n)}(t, t_0) \quad , \quad \hat{U}^{(n)} \in \mathcal{O}(\hat{H}^{n+1}) \quad \text{[Dyson'sche Reihe]}$$

Aus der SG für \hat{U} ergibt sich: $U(t, t_0) = \mathbb{1} + \frac{1}{i \hbar} \int_{t_0}^t dt' \hat{H}(t') \hat{U}(t', t_0) = \mathbb{1} + \frac{1}{i \hbar} \sum_{n=0}^{\infty} \int_{t_0}^t dt' \hat{H}(t') \hat{U}^{(n)}(t', t_0)$.

Aus dem Vergleich der Glieder mit Potenzen in \hat{H} folgt: $\hat{U}^{(n)}(t, t_0) = \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t dt' \hat{H}(t') \hat{U}^{(n-1)}(t', t_0)$ mit $\hat{U}^{(0)} = 1$.

$$\Rightarrow U^{(n)}(t, t_0) = \left[\frac{1}{i\hbar} \right]^n \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \dots \int_{t_0}^{t_{n-1}} dt_n \hat{H}(t_1) \hat{H}(t_2) \dots \hat{H}(t_n) = \frac{1}{n!} \left[\frac{1}{i\hbar} \right]^n \int_{t_0}^t dt_1 \dots \int_{t_0}^t dt_n T(\hat{H}(t_1) \dots \hat{H}(t_n))$$

Die Dyson'sche Reihe lässt sich daher wie folgt formulieren: $\hat{U}(t, t_0) = T \left(e^{-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' \hat{H}(t')} \right)$.

Zeitordnungsoperator: $T(\hat{A}(t_1) \hat{B}(t_2)) = \begin{cases} \hat{A}(t_1) \hat{B}(t_2) & , t_1 > t_2 \\ \hat{B}(t_2) \hat{A}(t_1) & , t_1 < t_2 \end{cases}$; er ist linear.

Bilder der Quantenmechanik:

- Schrödinger-Bild:

- \hat{A} ohne äußere Einflüsse zeitunabhängig, $|\Psi\rangle$ i.A. zeitabhängig.
- Schrödinger-Gleichung: $i\hbar \frac{d}{dt} |\Psi(t)\rangle = \hat{H} |\Psi(t)\rangle$.

- Heisenberg-Bild:

- $A_H(t) = \hat{U}^{-1}(t, t_0) \hat{A} \hat{U}(t, t_0)$, $|\Psi_H\rangle = |\Psi(t_0)\rangle = \hat{U}^{-1}(t, t_0) |\Psi(t)\rangle$.
- $\langle \hat{A} \rangle_t = \langle \Psi_H | \hat{A} | \Psi_H \rangle$, $[\hat{A}^n]_H = [\hat{A}_H]^n$, $[f(\hat{A})]_H = f(\hat{A}_H)$. $[\Rightarrow [\hat{A}, \hat{B}] = 0 \Leftrightarrow [\hat{A}_H, \hat{B}_H] = 0]$
- Heisenberg'sche-Bewegungsgleichung: $i\hbar \frac{d}{dt} \hat{A}_H = [\hat{A}_H(t), \hat{H}_H(t)] + i\hbar \left[\frac{\partial \hat{A}}{\partial t} \right]_H$.
- Ehrenfest-Gleichung: $i\hbar \left\langle \frac{d}{dt} \hat{A} \right\rangle = \langle [\hat{A}(t), \hat{H}(t)] \rangle + i\hbar \left\langle \left[\frac{\partial \hat{A}}{\partial t} \right] \right\rangle$.

Beispiele: $\frac{d}{dt} \langle \hat{q}_i \rangle = \langle \frac{\partial \hat{H}}{\partial \hat{p}_i} \rangle_t$, $\frac{d}{dt} \langle \hat{p}_i \rangle = -\langle \frac{\partial \hat{H}}{\partial \hat{q}_i} \rangle_t$.

\Rightarrow Ist \hat{H} höchstens quadratisch in \hat{q} bzw. \hat{p} , so sind die Ehrenfest-Gleichungen mit den klassischen gleich. $[\langle \hat{a} \rangle]^1 = \langle \hat{a}^1 \rangle$

- Wechselwirkungs-Bild:

- $\hat{H}(t) = H_0 + V(t)$, $\hat{U}_0(t, t_0) = e^{-\hat{H}_0 \frac{i}{\hbar} [t - t_0]}$, $\hat{H}_0 \gg V(t) : \forall t$
 $A_W(t) = \hat{U}_0^{-1}(t, t_0) \hat{A} \hat{U}_0(t, t_0)$, $|\Psi_W(t)\rangle = \hat{U}_0^{-1}(t, t_0) |\Psi(t)\rangle$.
- 1. & 2. Diracgleichung: $i\hbar \frac{d}{dt} |\Psi_W\rangle = \hat{V}_W(t) |\Psi_W(t)\rangle$, $i\hbar \frac{d}{dt} \hat{A}_W(t) = [\hat{A}_W, \hat{H}_{0W}] + i\hbar \left[\frac{\partial \hat{A}}{\partial t} \right]_W$.

- Streuprozess: $\hat{S} : |\Psi_W(t)\rangle = S(t, t_0) |\Psi_W(t_0)\rangle = T \left(e^{-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' \hat{V}_W(t')} \right)$;
 Streumatrix / Streuoperator: $\hat{S} = \lim_{t \rightarrow \infty, t_0 \rightarrow -\infty} \hat{S}(t, t_0)$; $\hat{S}^\dagger = \hat{S}^{-1}$.

$$0 = \frac{d}{dt} [\hat{U}^{-1} \hat{U}] = \left[\frac{d}{dt} \hat{U}^{-1} \right] \hat{U} + \hat{U}^{-1} \left[\frac{d}{dt} \hat{U} \right]$$

$\langle \hat{A}(t) \rangle_t = \text{const. } \forall t \Rightarrow \hat{A}$ heißt „**Erhaltungsgröße**“ / „Konstante der Bewegung“.

Linearkombination, Produkt und Kommutator von Erhaltungsgrößen ist wieder eine Erhaltungsgröße.

Eindimensionale Quantensysteme:

Potential $V \in \mathbb{R}$ [EW der SG reell] , hermitesche Randbedingungen: $\langle \Phi | H \Psi \rangle - \langle H \Phi | \Psi \rangle = -\frac{\hbar^2}{2m} [\Phi^* \Psi' - \Phi'^* \Psi] \Big|_a^b \stackrel{!}{=} 0$, auf Intervall $[a, b]$.

Realität: alle Lösungen der SG können reell gewählt werden $[\hat{H} |\Psi\rangle = E |\Psi\rangle$ mit $E \in \mathbb{R} \rightarrow \Psi$ in Real- und Imaginärteil separabel].

Regularität: $V(x)$ stetig $\Rightarrow \Psi(x)$ stetig.

Parität: $\Psi_P(x) := \Psi(-x)$ ist nun $V(x)$ zusätzlich gerade und $b = -a$, so: Ψ_P erfüllt die gleiche SG wie Ψ .
 $\Rightarrow \Psi$ kann gerade $[\Psi + \Psi_P]$ oder ungerade $[\Psi - \Psi_P]$ gewählt werden; ist E nicht entartet, so gilt dies automatisch.

Wronski-Determinante: $W(\Phi, \Psi) = \det \begin{pmatrix} \Phi & \Psi \\ \Phi' & \Psi' \end{pmatrix}$

Knotensatz:

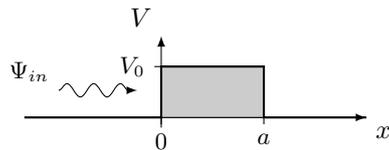
1. Φ, Ψ seien Lösungen der SG mit $E_\Psi > E_\Phi$, dann liegt zwischen zwei Knoten von Φ mindestens ein Knoten von Ψ .
2. Nimmt die Energie eines Zustandes zu, so wandern dessen Knoten enger zusammen.

Der n -te angeregte Zustand hat genau n Knoten im Intervall [und u.U. 2 an den Randpunkten].

Bewegen sich die Flächen konstanter Phase nach rechts/links, so heißt die Welle [z.B.: $e^{-i[\frac{E}{\hbar}t - /+kx]}$] „nach rechts/links laufende Welle“.

Eindimensionale Potentialstufe [$a \rightarrow \infty$]:

$$\begin{aligned}
 E > V & \quad \Psi(t, x) = e^{-i\frac{E}{\hbar}t} \int_0^\infty \frac{dk}{\sqrt{2\pi}} f(k) \begin{cases} e^{ikx + \frac{k-k'}{k+k'} e^{-ikx}} & , x < 0 \\ \frac{2k}{k+k'} e^{ik'x} & , x > 0 \end{cases} \\
 E < V & \quad \Psi(t, x) = e^{-i\frac{E}{\hbar}t} \int_0^\infty \frac{dk}{\sqrt{2\pi}} f(k) \begin{cases} e^{ikx} + e^{-ikx} - 2i\delta & , x < 0 \\ \frac{2k}{k+i\kappa'} e^{-\kappa'x} & , x > 0 \end{cases}
 \end{aligned}$$



mit der Energie der einfallenden Welle: $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k'^2}{2m} + V$ mit $\kappa' = -ik'$ und $\frac{k-i\kappa'}{k+i\kappa'} \stackrel{!}{=} e^{-i2\delta}$.

Für $E < V$ [Totalreflexion] gibt es einen Zeitversatz zwischen Ankommen und Reflexion des Wellenpakets [$t_0 = \frac{\hbar}{\sqrt{T_0[V-T_0]}}$, $T_0 = \frac{p_0^2}{2m}$] und einen evaneszenten Verlauf in die Stufe.

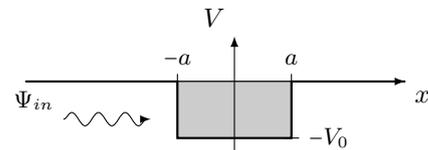
Potentialwall: [$a < \infty$]

$$\text{Hier gilt der Ansatz: } \Psi(x) = \begin{cases} e^{ik'x} + \mathcal{R}e^{-ik'x} & , x < 0 \\ C e^{-\kappa x} + D e^{\kappa x} & , 0 \leq x \leq a \\ \mathcal{T} e^{ik'[x-a]} & , a < x \end{cases} \quad , \text{ wobei } \Psi, \Psi' \text{ stetig an Übergängen.}$$

$$\Rightarrow |\mathcal{T}|^2 = \left[1 + \frac{V^2}{4E[V-E]} \sinh^2(\kappa a) \right]^{-1} .$$

Eindimensionaler Potentialtopf [$a \in \mathbb{R}$]:

$$0 > E > -V_0 \quad \Psi(x) = \begin{cases} B e^{-\kappa'x} & , x > a \\ B e^{\kappa'x} & , x < -a \\ A \cos(kx) & , -a \leq x \leq a \end{cases} + \begin{cases} B' e^{-\kappa'x} & , x > a \\ -B' e^{\kappa'x} & , x < -a \\ A' \sin(kx) & , -a \leq x \leq a \end{cases}$$



Es gibt immer mindestens eine [gerade] Lösung; vergrößert man ak_0 [$\rightarrow V_0$], so gibt es immer mehr gebundene Zustände. [Bedingung: $\tan(ka) = \frac{\kappa'}{k}$ bzw. $-\cot(ka) = \frac{\kappa'}{k}$.]

$$E > 0 \quad \Psi(x) = \begin{cases} e^{ik'x} + \mathcal{R}e^{-ik'x} & , x < -a \\ C e^{ikx} + D e^{-ikx} & , -a \leq x \leq a \\ \mathcal{T} e^{ik'[x-a]} & , x > a \end{cases}$$

Es gilt dann $|\mathcal{T}|^2 = \frac{1}{1 + \frac{V_0^2}{4E[V_0+E]} \sin^2(2ka)}$ \Rightarrow Transmission für $2ka = 0$ [$\Leftrightarrow E_n = \frac{\hbar^2 n^2}{32ma^2} - V_0$].

Absteigeoperator: $\hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2}}[u + \partial_u]$, **Aufsteigeoperator:** $\hat{a}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}}[u - \partial_u]$, **Besetzungszahloperator:** $\hat{N} = \hat{a}^\dagger \hat{a}$
 $[x = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} u = lu]$ $[\hat{N}, \hat{a}^m] = -m\hat{a}^m$, $[\hat{N}, \hat{a}^{\dagger m}] = m\hat{a}^{\dagger m}$, $[\hat{a}, \hat{a}^{\dagger m}] = m\hat{a}^{\dagger m-1}$

$$:= \sqrt{n+1} |n+1\rangle \qquad \qquad \qquad := \sqrt{n} |n-1\rangle$$

Da $[|n\rangle$ Eigenvektor, a_n Eigenwert] $\hat{N} \hat{a}^\dagger |n\rangle = [a_n + 1] \hat{a}^\dagger |n\rangle$ und $\hat{N} \hat{a} |n\rangle = [a_n - 1] \hat{a} |n\rangle$ und die Eigenwerte dieser Gleichung nur positiv reell sein dürfen [$\hat{N}^\dagger = \hat{N}$, $\langle \Psi | \hat{N} | \Psi \rangle \geq 0$], muss ein $a_m = 0$ sein. Mit Hilfe des Aufsteigeoperators sieht man dann, dass $a_n \in \mathbb{N}^0 : \forall n \in \mathbb{N}^0$.

$$|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} \hat{a}^{\dagger n} |0\rangle$$

Mit $l := \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$, $u := \frac{x}{l}$ ergibt sich für einen eindimensionalen harmonischen Oszillator:

$$\hat{H} = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{m\omega}{2} x^2 \right] \Psi(x) = \frac{\hbar\omega}{2} \left[\frac{\partial^2}{\partial u^2} + u^2 \right] \Psi(lu) = \hbar\omega \left[\hat{N} + \frac{1}{2} \right] \Psi(lu)$$

$\Rightarrow \hat{H} |n\rangle = E_n |n\rangle = \hbar\omega \left[n + \frac{1}{2} \right] |n\rangle$, mit der Nullpunktsenergie $E_0 = \frac{\hbar\omega}{2}$.

\Rightarrow Normiert man nun $\Psi_0(u) = \frac{1}{\pi^{1/4}} e^{-\frac{u^2}{2}}$, so ergibt sich: $\Psi_n(u) = \frac{1}{\pi^{1/4} \sqrt{n! 2^n}} H_n(u) e^{-\frac{u^2}{2}}$

mit den **Hermite-Polynomen**: $H_n(u) = e^{\frac{u^2}{2}} \left[u - \frac{\partial}{\partial u} \right]^n e^{-\frac{u^2}{2}}$.

Man kann nun $\hat{x} = l \frac{\hat{a} + \hat{a}^\dagger}{\sqrt{2}}$, $\hat{p} = \frac{\hbar}{i l} \frac{\hat{a} - \hat{a}^\dagger}{\sqrt{2}}$ schreiben und damit zeigen: $[\Delta x]_n [\Delta p]_n = \frac{\hbar}{2} [2n + 1]$ $[\Delta x]_n [\Delta p]_n > \frac{\hbar}{2}$.
 $[\langle n | \hat{x} | n \rangle = 0, \langle n | \hat{x}^2 | n \rangle = l^2 [n + \frac{1}{2}], \langle n | \hat{p} | n \rangle = 0, \langle n | \hat{p}^2 | n \rangle = \frac{\hbar^2}{l^2} [n + \frac{1}{2}]]$

Nullpunktsfluktuationen: $\langle \hat{H} \rangle \geq \frac{\hbar\omega}{2}$.

Symmetrie:

1. Ist eine 1-zu-1-Abbildung zwischen den [physikalisch realisierbaren] reinen Zuständen; dargestellt durch Strahlen in \mathcal{H} .
2. Sie erhält die Übergangswahrscheinlichkeiten: $|\langle \Phi | \Psi \rangle|^2 = |\langle \Phi' | \Psi' \rangle|^2$.

Wigner-Theorem: $\hat{U} |\Phi\rangle = |\Phi'\rangle$ $\hat{U} \hat{A} \hat{U}^{-1} = \hat{A}'$; \hat{U} ist dann

- entweder linear & unitär $[\hat{U}[c_1 |\Psi\rangle + c_2 |\Phi\rangle] = c_1 |\Psi'\rangle + c_2 |\Phi'\rangle]$, $\hat{U}^\dagger = \hat{U}^{-1}$

- oder antilinear & unitär [„antiunitär“] $[\hat{U}[c_1 |\Psi\rangle + c_2 |\Phi\rangle] = c_1^* |\Psi'\rangle + c_2^* |\Phi'\rangle]$, $\hat{U}^\dagger = \hat{U}^{-1}$.

Parität $\hat{x}_i \rightarrow -\hat{x}_i$:

$[\hat{U}(P)\Psi](\hat{x}_i) = \Psi(-\hat{x}_i)$, $\hat{U}(P)\hat{U}(P) = 1$ [\Rightarrow EW = ± 1] , $\hat{U}(P)\hat{x}_i\hat{U}^{-1}(P) = -\hat{x}_i$ und $\hat{U}(P)\hat{p}_i\hat{U}^{-1}(P) = -\hat{p}_i$
 und damit $\hat{U}(P)\hat{H}(\hat{x}_i, \hat{p}_i)\hat{U}^{-1}(P) = \hat{H}(-\hat{x}_i, -\hat{p}_i)$.

Ist nun \hat{H} [und somit V] spiegelinvariant, so kommutieren \hat{U} & \hat{H} und können somit gleichzeitig diagonalisiert werden.

Translation $\hat{x}_i \rightarrow \hat{x}_i + \vec{a}$:

$[\hat{U}(\vec{a})\Psi](\hat{x}_i) = \Psi(\hat{x}_i + \vec{a})$, $\hat{U}(\vec{a})\hat{H}(\hat{x}_i, \hat{p}_i)\hat{U}^{-1}(\vec{a}) = \hat{H}(\hat{x}_i + \vec{a}, \hat{p}_i)$.

Ist nun \hat{H} [und somit V] translationsinvariant, so kommutieren \hat{U} & \hat{H} und können somit gleichzeitig diagonalisiert werden.

Jeder Translation im \mathbb{R}^3 ist ein unitärer Operator in $\mathcal{H} = L_2(\mathbb{R}^3)$ zugeordnet $[\hat{U}(\vec{a}), \hat{U}(\vec{a} + \vec{b}) = \hat{U}(\vec{a})\hat{U}(\vec{b}), \hat{U}(\vec{0}) = \mathbf{1}_{\mathcal{H}}]$.

Die Zuordnung heißt Gruppenhomomorphismus

Die Menge der Translationen bildet dabei eine *abelsche Gruppe* [bzw. kommutierende Gruppe: $\vec{a} + \vec{b} = \vec{b} + \vec{a}$]; die Menge der ihnen zugeordneten unitären Operatoren ebenso $[\hat{U}(\vec{a})\hat{U}(\vec{b}) = \hat{U}(\vec{b})\hat{U}(\vec{a})]$.

Sei nun: $\hat{U}(\vec{a}) = e^{\frac{i}{\hbar} \vec{a} \hat{p}}$, so ergibt sich: $\hat{p} = -i \hbar \vec{\nabla}$ [Impulsoperator, hermitesch].

Ist \hat{H} nun translationsinvariant, so gilt: $[\hat{p}_k, \hat{H}] = 0$.

Da $\{\hat{U}(\vec{a})\}$ abelsch ist, folgt aus der Baker-Campbell-Hausdorff-Formel $[e^{\hat{X}} e^{\hat{Y}} = e^{\hat{X} + \hat{Y} + \frac{1}{2} [\hat{X}, \hat{Y}] + \dots}]$:

$[\hat{p}_i, \hat{p}_j] = 0$: $\forall i, j \in \{1, 2, 3\}$.

Drehung $\vec{x}_i \rightarrow R \vec{x}_i$:

$$[\hat{U}(R) \Psi](\vec{x}_i) = \Psi(R^{-1} \vec{x}_i) \quad , \quad \hat{U}(R) \hat{H}(\hat{x}_i, \hat{p}_i) \hat{U}(R^{-1}) = \hat{H}(R \hat{x}_i, R \hat{p}_i).$$

Ist nun \hat{H} [und somit V] dreh invariant, so kommutieren \hat{U} & \hat{H} und können somit gleichzeitig diagonalisiert werden.
 [Dies gilt, wenn: $V = \sum_{i \neq j} V(|\vec{x}_i - \vec{x}_j|)$]

Jeder Drehung im \mathbb{R}^3 ist ein unitärer Operator in $\mathcal{H} = L_2(\mathbb{R}^3)$ zugeordnet $[\hat{U}(R), \hat{U}(R_2 R_1) = \hat{U}(R_2) \hat{U}(R_1), \hat{U}(1_{\mathbb{R}^3}) = 1_{\mathcal{H}}]$.

Die Menge der Drehungen [nicht Drehspiegelungen $\Rightarrow \det(R) = +1$] bildet eine *Liesche Gruppe* [$SO(3)$, nicht abelsch!]; die Menge der ihnen zugeordneten unitären Operatoren ebenso.

Bei Drehung um die Achse in Richtung des Einheitsvektor \vec{e} um einen Winkel θ gilt:

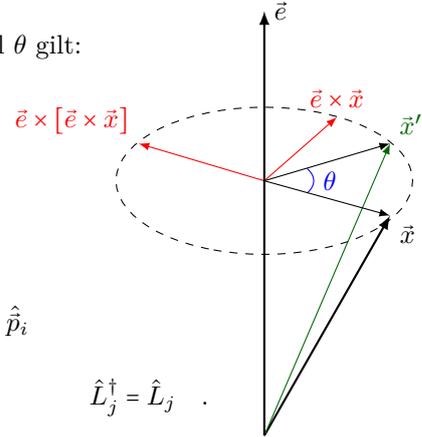
$$R(\vec{e}, \theta) \vec{x} = [\vec{e} \vec{x}] \vec{e} - \vec{e} \times [\vec{e} \times \vec{x}] \cos(\theta) + \vec{e} \times \vec{x} \sin(\theta) \quad .$$

Sei $\vec{e} \times \vec{x} = \Omega_e \vec{x} \Rightarrow \Omega_e = \begin{pmatrix} 0 & -e_3 & e_2 \\ e_3 & 0 & -e_1 \\ -e_2 & e_1 & 0 \end{pmatrix} = -\Omega_e^T \Rightarrow R(\vec{e}, \theta) = e^{\theta \Omega_e}$

Sei weiterhin $\hat{U}(e^{\theta \Omega_e}) = e^{-\frac{i}{\hbar} \theta \hat{L}_e}$ [\hat{L}_e hermitesch], so gilt $\hat{L}_e = \vec{e} \hat{L}$ und:

$$[\hat{U}(R(\vec{e}, \theta)) \Psi](\vec{x}_i) = \left[e^{-\frac{i}{\hbar} \theta \vec{e} \hat{L}} \Psi \right](\vec{x}_i) \quad \hat{L} = \sum_i \hat{x}_i \times \hat{p}_i$$

Es gilt: $[\hat{L}_j, \hat{x}_k] = i \hbar \varepsilon_{jkl} \hat{x}_l \quad , \quad [\hat{L}_j, \hat{L}_k] = i \hbar \varepsilon_{jkl} \hat{L}_l \quad , \quad \hat{L}_j^\dagger = \hat{L}_j \quad .$



Für alle Operatoren mit $[\hat{J}_j, \hat{J}_k] = i \hbar \varepsilon_{jkl} \hat{J}_l \quad , \quad \hat{J}_j^\dagger = \hat{J}_j$ definiert man Leitoperatoren: $\hat{J}_\pm = \hat{J}_1 \pm i \hat{J}_2 \quad .$

Dann gilt: $[\hat{J}_3, \hat{J}_\pm] = \pm \hbar \hat{J}_\pm \quad , \quad [\hat{J}_+, \hat{J}_-] = 2 \hbar \hat{J}_3 \quad \text{und} \quad [\hat{J}^2, \hat{J}_j] = 0 \quad . \quad [\hat{J}^2 = \hat{J}_1^2 + \hat{J}_2^2 + \hat{J}_3^2]$

Diagonalisiert man nun gleichzeitig \hat{J}_3 und \hat{J}^2 [EW $\hbar j[j+1] > 0$], so ergeben sich aus $\hat{J}^2 |j, j_3\rangle = \hbar^2 j[j+1] |j, j_3\rangle \quad , \quad \hat{J}_3 |j, j_3\rangle = \hbar j_3 |j, j_3\rangle$
 $\hat{J}_+ |j, j_3\rangle = \hbar \sqrt{c_+(j, j_3)} |j, j_3 + 1\rangle$
 $\hat{J}_- |j, j_3\rangle = \hbar \sqrt{c_-(j, j_3)} |j, j_3 - 1\rangle$ und $\hat{J}_+^\dagger = \hat{J}_-$, dass

$$\|\hat{J}_\pm |j, j_3\rangle\|^2 = \hbar^2 [j[j+1] - j_3[j_3 \pm 1]] \| |j, j_3 \pm 1\rangle \|^2 = \hbar^2 c_\pm \| |j, j_3 \pm 1\rangle \|^2 \geq 0 \quad .$$

Das bedeutet $c_\pm \geq 0$ und $[j > 0] \quad -j \leq j_3 \leq j \quad .$

Nach den Abbruchbedingungen für die Leiteroperatoren gilt: $-\hbar j$ und $\hbar j$ müssen EW von \hat{J}_3 sein.

Resultat: EW von \hat{J}^2 sind $\hbar^2 j[j+1] \quad , \quad j \in \frac{\mathbb{N}_0}{2}$ und EW von \hat{J}_3 sind $\hbar j_3 \quad , \quad j_3 \in \{-j, -j+1, \dots, j-1, j\} \quad .$

Für den Drehimpuls \hat{L} ergeben sich mit der [Bahn-] Drehimpuls-Quantenzahl l [vgl. j] und der magnetischen Quantenzahl m [vgl. j_3], sowie $\langle \vec{x} | l, m \rangle = Y_{l,m}(\vec{x})$ die Kugelflächenfunktionen als Eigenfunktionen [$r \equiv 1$]:

$$Y_{l,l} = \frac{[-1]^l}{2^l l!} \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} [2l]! e^{i l \varphi} \sin^l(\theta) \quad , \quad Y_{l,m-1} = \frac{1}{\sqrt{l[l+1] - m[m-1]}} e^{-i \varphi} [-\partial_\theta + i \cot(\theta) \partial_\varphi] Y_{l,m}(\theta, \varphi)$$

mit $-l \leq m \leq l, l \in \frac{\mathbb{N}_0}{2}, m \in \mathbb{Z} \quad .$

Es ergibt sich: $Y_{l,m}(\theta, \varphi) = \frac{[-1]^l}{2^l l!} \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi} \frac{[l+m]!}{[l-m]!} \frac{e^{i m \varphi}}{\sin^m(\theta)}} \left[\frac{d}{du} \right]^{l-m} [1-u^2]^l \Big|_{u=\cos(\theta)}$

$Y_{l,-m} = [-1]^m Y_{l,m}^*(\theta, \varphi) \quad , \quad [\hat{P} Y_{l,m}](\theta, \varphi) = Y_{l,m}(\pi - \theta, \pi + \varphi) = [-1]^l Y_{l,m}(\theta, \varphi) \quad ,$
 $\sum_{l,m} Y_{l,m}^*(\theta', \varphi') Y_{l,m}(\theta, \varphi) = \delta(\varphi - \varphi') \delta(\cos(\theta) - \cos(\theta')) \quad .$

$[\hat{L}_j, \hat{V}_k] = i \hbar \varepsilon_{jkl} \hat{V}_l \quad , \quad \hat{V}$ heißt Vektoroperator; $[\hat{L}_j, \hat{S}] = 0 \quad , \quad \hat{S}$ heißt skalärer Operator.

In einem **Zentralkraftfeld** mit [μ - reduzierte Masse] $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta + V(r)$ und Drehimpulsoperator \hat{L} gilt:

$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \underbrace{\frac{1}{r^2 \sin^2(\theta)} \frac{\partial}{\partial \theta} \left[\sin(\theta) \frac{\partial}{\partial \theta} \right]}_{= -\frac{\hat{L}^2}{r^2 \hbar^2}} + \frac{1}{r^2 \sin^2(\theta)} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} .$$

Das heißt: $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \left[\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right] + \frac{1}{2\mu} \frac{\hat{L}^2}{r^2} + V(r)$ und $\hat{H} |E, l, m\rangle = E |E, l, m\rangle$
 $\hat{L}^2 |E, l, m\rangle = \hbar^2 l[l+1] |E, l, m\rangle$; daraus ergibt sich die
 $\hat{L}_3 |E, l, m\rangle = \hbar m |E, l, m\rangle$

Schrödinger-Gleichung für $\langle \vec{x} | E, l, m\rangle = \Psi_{E,l,m}(\vec{x}) = f_{E,l} Y_{l,m}(\theta, \varphi)$ zur [gewöhnlichen] radialen Schrödinger-Gleichung:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \left[\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right] + \frac{1}{2\mu} \frac{\hbar^2 l[l+1]}{r^2} + V(r) \right] f_{E,l} = E f_{E,l} \quad , \text{ wobei } \|\Psi_{E,l,m}\|^2 = \int_0^\infty dr r^2 |f_{E,l}(r)|^2$$

[durch die Normierung von $Y_{l,m}$].

Mit $U_{E,l}(r) = r f_{E,l}(r)$ gilt: $\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{2\mu} \frac{\hbar^2 l[l+1]}{r^2} + V(r) \right] U_{E,l} = E U_{E,l}$, wobei $\|\Psi_{E,l,m}\|^2 = \int_0^\infty dr |U_{E,l}(r)|^2$.

Ist das Potential V im ∞ -en schnell genug abfallend, so ergeben sich keine gebundenen Zustände

$$[\lim_{r \rightarrow \infty} : V(r) = 0, U_{E,l}(r) = \begin{cases} e^{i\kappa r} & , E = \frac{\hbar^2 \kappa^2}{2\mu} > 0 \\ e^{-\kappa r} & , E = \frac{-\hbar^2 \kappa^2}{2\mu} < 0 \end{cases}] .$$

Ist das Potential gegen 0 nicht zu stark ansteigend [$\sim \frac{1}{r^\alpha}$], so kann man $U_{E,l}$ in ein Polynom entwickeln

$$[U_{E,l} = r^{l+1} [1 + a_1 r + a_2 r^2 + \dots] \Rightarrow l \neq 0 : \Psi_{E,l,m}(0) = 0] .$$

Für wasserstoffähnliche Atome ergibt sich so mit $\Psi(t, \vec{x}_K, \vec{x}_e)$, $\hat{L} = \hat{L}_K + \hat{L}_e$, $V = V(|\vec{x}_K - \vec{x}_e|)$ nach Betrachtung in Relativ- [$\mu = \frac{m_K m_e}{m_K + m_e}$, $M = m_K + m_e$, $\hat{x} = \hat{x}_K - \hat{x}_e$, $M\hat{p} = m_e \hat{p}_K - m_K \hat{p}_e$] und Schwerpunktskoordinaten [$M\hat{X} = m_K \hat{x}_K + m_e \hat{x}_e$, $\hat{P} = \hat{p}_K + \hat{p}_e$], mit $\hat{H} = \underbrace{\frac{1}{2M} \hat{P}^2}_{\hat{H}_{\text{Schwerpunkt}}} + \underbrace{\frac{1}{2\mu} \hat{p}^2 + V(|\hat{x}|)}_{\hat{H}_{\text{relativ}}}$ in Ortsdarstellung und mit $\hat{P}\Psi(t, \vec{X}, \vec{x}) = \vec{P}\Psi(t, \vec{X}, \vec{x})$,

$\hat{H}_{\text{relativ}} \Psi(t, \vec{x}) = E \Psi(t, \vec{x})$ und $E_{\text{tot}} = \frac{\vec{P}^2}{2M} + E$, aus der Schrödingergleichung, dass:

$$\Psi(t, \vec{X}, \vec{x}) = e^{-\frac{i}{\hbar} E_{\text{tot}} t} e^{\frac{i}{\hbar} \vec{P} \cdot \vec{X}} \Psi(\vec{x}) .$$

Für Coulomb-Potential $V(|\vec{x}|) = -\frac{Ze^2}{|\vec{x}|}$ mit $\Psi_{E,l,m}(\vec{x}) = \frac{1}{r} U_{E,l}(r) Y_{l,m}(\theta, \varphi)$, dem bohrschen Radius $a_B = \frac{\hbar^2}{\mu e^2}$ und einer typischen Energie $E_a = \frac{e^2}{a_B}$ [$\rho = \frac{r}{a_B}$, $\varepsilon = \frac{E}{E_a}$] ergibt sich: $\left[\frac{d^2}{d\rho^2} + 2\varepsilon + \frac{2Z}{\rho} - \frac{l[l+1]}{\rho^2} \right] U_{E,l}(a_B \rho) = 0$.

Für gebundene Zustände [$\varepsilon = -\frac{1}{2} \kappa^2$, $\kappa \in \mathbb{R}$] und über Endlichkeit der Wellenfunktion $\Psi(\vec{x})$ ergibt sich mit dem Ansatz $U_{E,l}(\rho) \sim \rho^{l+1} e^{-\kappa \rho} \sum_{k=0}^\infty a_k \rho^k$ und dem Verschwinden aller Summanden in Potenz von ρ^n :

$$a_{n+1} = \frac{2[\kappa[n+l+1] - Z]}{2[n+1][l+1] + [n+1]n} a_n .$$

Fordert man nun den Abbruch [$a_{n_r+1} = 0$], so gilt mit der **Hauptquantenzahl** $n = n_r + l + 1$, dass $\kappa n = Z$ und somit

$$E_n = -\frac{Z^2 E_a}{n^2} .$$

Die Anzahl der möglichen Zustände zu E_n ist n^2 .

$$\left[\hat{L}, \hat{H} \right] = 0 \Leftrightarrow V = V(r)$$

Es ergibt sich:
$$\frac{U_{E,l}(\rho)}{\rho} = f_{n,l} = - \underbrace{\left[\frac{(2Z)^3}{n} \frac{[n-l-1]!}{2n[(n+l)!]^3} \right]}_{N_{n,l}} e^{-\frac{Z\rho}{n}} \left[\frac{2Z\rho}{n} \right]^l \underbrace{\frac{d^{2l+1}}{d\eta^{2l+1}} \left[e^\eta \frac{d^{n+l}}{d\eta^{n+l}} [\eta^{n+l} e^{-\eta}] \right]}_{\text{Laguerre-Polynome } L_{n+l}^{2l+1} \left(\frac{2Z\rho}{n} \right)} \Big|_{\eta = \frac{2Z\rho}{n}} .$$

Dabei gilt:
$$\int_0^\infty \rho^2 f_{n,l}^2(\rho) d\rho = 1 .$$

Mit $\int_0^\infty \rho^q e^{-\beta\rho} d\rho = \frac{q!}{\beta^{q+1}}$ ist dann $\langle r^p \rangle_{\Psi_{n,l,m}} = \frac{\int_{\mathbb{R}^3} d^3x r^p |\Psi_{n,l,m}|^2}{\int_{\mathbb{R}^3} d^3x |\Psi_{n,l,m}|^2} = \frac{\int_0^\infty dr r^p \tilde{f}_{n,l}^2(r) r^2}{\int_0^\infty dr \tilde{f}_{n,l}^2 r^2} = a_B^p \int d\rho \rho^{2+p} f_{n,l}^2(\rho)$

berechenbar und man erhält das **Virialtheorem**:
$$\langle E_{pot} \rangle = -Ze^2 \left\langle \frac{1}{r} \right\rangle = -\frac{Z^2 e^2}{a_B} \frac{1}{n^2} = 2E_n .$$

 [Der Mittelwert der potentiellen Energie ist genauso groß wie die doppelte Gesamtenergie.]

(Historische) Benennung des Bahndrehimpulses l :

0	1	2	3	4
s	p	d	f	g
scharf	prinzipal	diffus	fundamental	[alphabetisch...]

Geladene Teilchen im „äußeren“ elektromagnetischen Feld: [im *cgs*-System!]

Mit Potenzialen φ, \vec{A} [$\vec{E} = -\text{grad}(\varphi) - \frac{d\vec{A}}{dt}$, $\vec{B} = \text{rot}(\vec{A})$] gilt klassisch $H = \frac{1}{2\mu} [\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A}]^2 + e\varphi .$

Nach Symmetrie und Hermitizität gilt in QM:
$$\hat{H} = \frac{1}{2\mu} \left[\hat{p}^2 + \frac{e}{c} \hat{p} \hat{A} + \frac{e}{c} \hat{A} \hat{p} + \frac{e^2}{c^2} \hat{A}^2 \right] + e\varphi .$$

Für ein Wasserstoffatom in „äußeren“ \vec{B} -Feld mit [o.B.d.A] \vec{B} in z -Richtung, $\vec{A} = \frac{1}{2} \vec{B} \times \vec{x}$ [\vec{B} in Umgebung von Wasserstoff räumlich konstant] und $\vec{A} \vec{\nabla} = \frac{i}{2\hbar} \vec{B} \vec{L}$ gilt:
$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta - \underbrace{\frac{e}{2\mu c} \vec{B} \vec{L}}_{\text{paramagnetisch}} + \underbrace{\frac{e^2}{8\mu c^2} B^2 [x^2 + y^2]}_{\text{diamagnetisch}} + e\varphi .$$

Unter Vernachlässigung des diamagnetischen Terms [$\frac{\text{diamagnet.}}{\text{paramagnet.}} \approx 10^{-10} \cdot B[\text{Gauss}]$] ergibt sich der normale Zeeman-Effekt:

$$\hat{H} |n, l, m\rangle = \left[-\frac{Ry}{n^2} + \mu_B B m \right] |n, l, m\rangle ,$$
 mit dem Bohrschen Magneton $\mu_B = \frac{e\hbar}{2\mu c}$.

Der Spin: $\hat{s} = \begin{pmatrix} \hat{s}_1 \\ \hat{s}_2 \\ \hat{s}_3 \end{pmatrix}$, wobei \hat{s} die Drehimpulsalgebra erfüllt $[[\hat{s}_j, \hat{s}_k] = i\hbar \varepsilon_{jkl} \hat{s}_l]$; die gemessenen Eigenwerte sind $\pm \frac{\hbar}{2}$.

$$\Rightarrow \Psi = \underbrace{\Psi_\uparrow(\vec{x})}_{|n_\uparrow\rangle} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \underbrace{\Psi_\downarrow(\vec{x})}_{|n_\downarrow\rangle} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$
 mit $\hat{s}_i = \frac{\hbar}{2} \sigma_i$ auf Hilbertraum $\mathcal{H} = L_2(\mathbb{R}^3) \otimes \mathbb{C}^2$ mit $\langle \Phi | \Psi \rangle = \int_{\mathbb{R}^3} \Phi^*(\vec{x}) \Psi(\vec{x}) d^3x$.

Sei nun $A = \sigma_i a_i = \begin{pmatrix} a_3 & a_1 - i a_2 \\ a_1 + i a_2 & -a_3 \end{pmatrix}$ die allgemeinste spurfreie, hermitesche 2×2 -Matrix, $U = \begin{pmatrix} a & b \\ -b^* & a^* \end{pmatrix} \in SU(2)$

[$U^\dagger U = \mathbb{1}$, $\det(U) = 1$] und $U[\vec{a} \vec{\sigma}]U^{-1} = \vec{b} \vec{\sigma}$, dann gilt: $\vec{b} = R\vec{a}$, $b^2 = a^2 \Rightarrow R \in SO(3)$ [Drehung!].

Dabei gilt $R(\mathbb{1}_2) = \mathbb{1}_3$, $R(U_1 U_2) = R(U_1)R(U_2)$, $R(U) = R(-U)$ und daher $SO(3) = SU(2)/\mathbb{Z}_2$.

$$U = e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{c} \vec{s} \theta} \Rightarrow R = e^{\Omega_{\vec{c}} \theta}$$

\Rightarrow Bei Realraumdrehung um 2π wechselt die Wellenfunktion des e^- durch den Spin ihr Vorzeichen.

Die Spins transformieren unter Drehung $\vec{m} = R(U)\vec{n}$ gemäß: $|m_\uparrow\rangle = U |n_\uparrow\rangle$, $|m_\downarrow\rangle = U |n_\downarrow\rangle$.

Der Gesamtdrehimpuls des Wasserstoffatoms ist dann: $\hat{J} = \hat{L} \otimes \mathbb{1} + \mathbb{1} \otimes \hat{s} \stackrel{!}{=} \hat{L} + \hat{s}$.

Wiederum unter Vernachlässigung des Diamagnetismus ergibt sich [„anomalere Zeeman-Effekt“]

$$\hat{H} |n, l, m, s_3\rangle = [\hat{H}_0 - \mu_B \vec{B} [\hat{L} + g\hat{s}]] |n, l, m, s_3\rangle = \left[-\frac{Ry}{n^2} + \mu_B B [m + g \frac{s_3}{\hbar}] \right] |n, l, m, s_3\rangle$$

Pauli-Matrizen: $\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$, $\sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$, $\sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$, $\sigma_j \sigma_k = \delta_{jk} \mathbb{1} + i \varepsilon_{jkl} \sigma_l$, $[\sigma_j, \sigma_k] = 2i \varepsilon_{jkl} \sigma_l$.