

• Blatt 1:

1. **Hermiteische Matrizen, Pauli-Matrizen:**

Für Bedingung vergleiche Matrix mit ihrer Adjungierten. Für Eigenwertformel schreibe charakteristisches Polynom aus und Forme um bis  $\text{Tr}(M)$  und  $\det(M)$  erscheinen. Für Eigenschaften der Pauli-Matrizen rechne nach, beziehungsweise nutze Ergebnisse aus vorherigen Teilaufgaben. Für Basis stelle Gleichungen für jeden Koeffizienten der linearen Hülle in Abhängigkeit von den Matrixeinträgen  $a, b, b^*$  und  $c$  auf.

Bedingungen für eine hermitesche  $2 \times 2$ -Matrix:

$$M = M^\dagger = (M^*)^T = (M^T)^*$$

$$\Leftrightarrow a, d \in \mathbb{R} \wedge b = c^*$$

Eigenwerte:

$$\text{Lsg. von } 0 = |M - \lambda I|$$

Eigenwertgleichung für hermitesche  $2 \times 2$ -Matrizen:

$$\lambda_{1,2} = \frac{\text{Tr}(M)}{2} \pm \sqrt{\frac{\text{Tr}^2(M)}{4} - \det(M)}$$

Hermitesche Matrizen haben rein reelle Eigenwerte.

Die Pauli-Matrizen sind hermitesch, selbstinvers, Elemente der unitären Gruppe, bilden eine orthonormale Basis des Raums der hermiteschen  $2 \times 2$ -Matrizen, und erfüllen die Relation:

$$\sigma_i \sigma_j = i \epsilon_{ijk} \sigma_k + \delta_{ij} \sigma_0$$

2. **Fouriertransformation, Dirac-Delta, Plancherel, Faltung:**

Um die Relationen zu zeigen schreibe die Funktionen jeweils aus, oder schreibe sie als Rücktrafo ihrer Fouriertrafo auf, forme dann um, z. B. durch zusammenziehen der Exponenten der e-Fkt., nutze dann Identitäten wie z. B. die Kollaps-Eigenschaft des Dirac-Delta, oder seine mögliche Darstellung über ein Integral über eine e-Fkt. (s. u.).

Für die erste Eigenschaft nutze die Integral-Kollapseigenschaft des Dirac-Deltas. Für die zweite Eigenschaft schreibe die Trafos aus, und ziehe die Komplexkonjugation hinein, forme dann um auf  $-k$ . Für Plancherel schreibe den Betrag als Produkt einer Fourier-Trafo und ihres Komplexkonjugats in Fourier-Form aus, ziehe sie zusammen, und nutze die mögliche Integraldefinition des Dirac-Deltas, um eine Integrationsvariable auf die andere kollabieren zu lassen. Für das Faltungstheorem schreibe die in der Faltungsdefinition beide als ihre Fourier-Rücktrafo, ziehe zusammen, und nutze Dirac-Integraldefinition. Für die Trafo der Gaußfunktion schreibe Exponenten der  $m$ -Fkt. mit quad. Ergänzung um, und wende dann Cauchyschen Integralsatz an.

Fouriertrafo:

$$\mathbb{F}[f(x)] = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} f(x) e^{-ikx} dx$$

$$\mathbb{F}^{-1}[f(x)] = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{f}(x) e^{ikx} dx$$

Fouriertrafo der Dirac-Delta-Fkt.:

$$\mathbb{F}[\delta_{(x-x_0)}]_{;k} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-ikx_0}$$

Integraldefinition der Dirac-Delta-Fkt.:

$$\delta_{(x-x_0)} = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ik(x-x_0)} dk$$

Komplexkonjugation Fouriertrafo:

$$\tilde{f}_{(k)}^* = \tilde{f}_{(-k)}$$

Plancherels Theorem:

$$\int_{-\infty}^{\infty} |f(x)|^2 dx = \int_{-\infty}^{\infty} |\tilde{f}(k)|^2 dk$$

Faltungstheorem:

$$\mathbb{F}[f * g] = \tilde{f}_{(k)} \tilde{g}_{(k)}$$

Fouriertrafo einer Gaußverteilung:

$$\mathbb{F}[G_{[0,\sigma,x]}]_{;k} = \sigma^{-1} G_{[0,\sigma^{-1},x]}$$

3. **Plancksches Wirkungsquantum, experimentelle Bestimmung:**

Um das Plancksche Wirkungsquantum (PW) experimentell zu bestimmen, werden jeweils die verschiedenen Beziehungen in denen es auftaucht meist über Dreisatz nach dem PW umgestellt, und dann die nötigen Werte eingesetzt, beziehungsweise über andere bekannte Beziehungen hergeleitet.

Photoeffekt:

$$h\nu = eU_g + W_A$$

PW aus Photoeffekt:

$$h = \frac{eU_g + W_A}{\nu} = \frac{\lambda(eU_g + W_A)}{c}$$

PW aus Diodenspannung und Wellenlänge:

$$h = \frac{\lambda e U_0}{c}$$

Wellenlänge aus Gitterkonstanten und Maximawinkeln:

$$\lambda = b \sin(\alpha) = b \sin\left(\arctan\left(\frac{d}{L}\right)\right)$$

PW aus Franck-Hertz-Versuch:

$$h = \frac{\lambda \Delta E}{c}$$

Gitterkonstante eines Gitters aus stehenden Lichtwellen:

$$b = \frac{\lambda}{2}$$

De-Broglie-Wellenlänge aus Beobachtung am Gitter:

$$\lambda_{DB} = b \sin(\alpha) \approx b \tan(\alpha) \text{ (Näherung für kleine Winkel)}$$

Nichtrelativistischer Elektronenimpuls:

$$p = \sqrt{2m_e E}$$

PW aus De-Broglie-Wellenlänge und Impuls:

$$h = \lambda_{DB} p$$

• Blatt 2

1. **Kommutatoren, Produktregel, Jacodidentität, Kommutatoralgebra:**

Für die Produktregel schreibe den Kommutator aus und addiere eine Null, sodass sich die für die beiden gesuchten

Kommutatoren nötigen Terme ergeben (Oder in die andere Richtung subtrahieren sich die Terme von selbst heraus). Für die Jakobidentität schreibe alle alle Terme aus, sie subtrahieren sich alle gegenseitig heraus.

Produktregel für Kommutatoren:

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

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

Jacobi-Identität:

$$[\hat{A}; [\hat{B}; \hat{C}]] + [\hat{B}; [\hat{C}; \hat{A}]] + [\hat{C}; [\hat{A}; \hat{B}]] = 0$$

Vertauschung des Operators mit seinem Kommutator:

$$[[\hat{A}; \hat{B}]; \hat{A}] = 0$$

$$[[\hat{A}; \hat{B}]; \hat{B}] = 0$$

Potenzregel für Kommutatoren:

$$[\hat{A}^n; \hat{B}] = n\hat{A}^{n-1}[\hat{A}; \hat{B}]$$

$$[\hat{A}; \hat{B}^n] = n\hat{B}^{n-1}[\hat{A}; \hat{B}]$$

2. **Plancksches Strahlungsgesetz, Hohlraumstrahlung, Maximierung, Integrationskonstanten:**

Um auf die Wellenlänge umzuschreiben, nutze Wellenlängen-Frequenzbeziehung und berechne das Wellenlängenelement. Um das Wiensche Verschiebungsgesetz herzuleiten, maximiere die Funktion durch Ableiten und ungefähre Nullpunktbestimmung des dafür notwendig-gleich-nuln Faktors im Term des Maximums. Um die Gesamtenergiedichte zu berechnen, integriere von Null bis unendlich und substituiere im Integral  $v$  so, dass die Identität zum Produkt der Zeta- und der Gamma-Funktion nutzbar wird. Gehe zur Bestimmung des Maximums der spektralen Energiedichte analog zur Maximierung bei der Herleitung des Wienschen Verschiebungsgesetzes vor, zur Bestimmung der Gesamtphotonenzahl integriere über das gesamte Spektrum.

Wellenlängen-Frequenzbeziehung:

$$v\lambda = c$$

Integrationskonstanten umrechnen:

$$dy = \frac{dy}{dx} dx$$

Energiedichte der Hohlraumstrahlung im Frequenzintervall  $[v, v + dv]$ :

$$u_\nu dv = \frac{8\pi h}{c^3} \frac{e^{-\frac{c^3}{h\nu}}}{e^{\frac{h\nu}{k_B T}} - 1} dv \text{ Energiedichte der Hohlraumstrahlung im}$$

Wellenlängenintervall  $[\lambda, \lambda + d\lambda]$ :

$$u_\lambda d\lambda = \frac{8\pi hc}{\lambda^5} \frac{1}{e^{\frac{hc}{\lambda k_B T}} - 1} d\lambda$$

Wiensches Verschiebungsgesetz für die Lage des Strahlungsmaximums abhängig von der Temperatur:

$$\lambda_{max} T = const.$$

$$\nu_{max} T = const. \text{ (Aber } \nu_{max} \text{ nicht direkt in } \lambda_{max} \text{ umrechenbar!)}$$

Zeta-Gamma-Funktionsidentität:

$$\int_0^\infty \frac{x^n}{e^x - 1} dx = \zeta_{(n+1)} \Gamma_{(n+1)}$$

Gammafunktion und Fakultät:

$$\Gamma_{(n+1)} = n! \text{ für } n \in \mathbb{N}$$

Spektrale Photonendichte:

$$n_{(v)} v = \frac{u_\nu}{h\nu}$$

Gesamtphotonenzahl:

$$n = \frac{8\pi(k_B T)^3}{h^3 c^3} \zeta_3 \Gamma_3$$

3. **Bohr-Sommerfeld-Quantisierung, Umparametrisierung:**

Schreibe die Differentialgleichung und ihre allgemeine Lösung, dann leite entsprechend ab, bestimme die Koeffizienten in Abhängigkeit der Anfangsbedingungen und setze die geforderten Stellen ein. Für die Herleitung der Energiequantelung aus der Wirkung umparametrisierung auf Zeitintegral, setze dann entsprechend eine Periode als Zeitintervall, multipliziere dafür die Zeitableitung des Ortes ein und ziehe die Masse aus dem Impuls heraus, integriere das sich so ergebende Geschwindigkeitsquadrat durch erneute Substitution, forme dann nach der Gleichung für die kinetische Energie um. DGL ungedämpfter harmonischer Oszillator:

$$\ddot{x} + \omega x = 0 \implies x_{(t)} = A \sin(\omega t) + B \cos(\omega t)$$

(Allgemeine Lösung)

Integrationskonstanten umrechnen:

$$dy = \frac{dy}{dx} dx$$

Integral über Cosinusquadrat:

$$\int_0^{2\pi} \cos^2(x) dx = \int_0^{2\pi} \sin^2(x) dx = \pi$$

Kinetische Energie:

$$E_{kin} = \frac{1}{2} m v^2$$

4. **Normierung, Skalarprodukt, Erwartungswert, Gaußfunktion, Wellenpaket:**

Für die Normierung berechne Skalarprodukt mit sich selbst und stelle nach der Normierungskonstanten um. Für die Erwartungswerte stelle das Integral auf, ziehe Exponentialfunktionen zusammen und nutze Symmetrieargumente beziehungsweise berechne die schweren Integrale(????). Für die Impulserwartungswerte wende innerhalb des Erwartungswertintegrals die Ableitung an und gehe analog zu den Ortserwartungswerten vor. Für das Schwankungsprodukt berechne zunächst die Varianzen der Operatoren, nutze dazu die bereits errechneten Werte, dann setze die Varianzen in die allgemeine Unbestimmtheitsrelation ein. Skalarprodukt zweier Funktionen:

$$\langle \psi_{(x)} | \phi_{(x)} \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_{(x)}^* \phi_{(x)} dx$$

Erwartungswert zum Operator  $\hat{A}$ :

$$\langle \hat{A} \rangle = \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x) \hat{A} \psi(x) dx$$

Integral über gaußartige Funktion:

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-bx^2} dx = \sqrt{\frac{\pi}{b}}$$

Ortsdarstellung des Ortsoperators:

$$\hat{Q} = x$$

Impulsoperator in Ortsdarstellung:

$$\hat{P} = -i\hbar \partial_x$$

Varianz:

$$\langle \Delta \hat{A}^2 \rangle = \langle \hat{A}^2 \rangle - \langle \hat{A} \rangle^2$$

Allgemeine Unbestimmtheitsrelation zweier Operatoren:

$$\langle \Delta \hat{A}^2 \rangle \langle \Delta \hat{B}^2 \rangle \geq -\frac{1}{4} \langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle^2$$

Heisenbergsche Unschärferelation für Ort und Impuls:

$$\Delta x \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{4\pi} = \frac{\hbar}{2}$$

Linienelement mit Gradienten. Um um eine endliche Strecke zu verschieben, wende den Operator  $n$ -fach an, hebe ihn also in die  $n$ -te Potenz. Um infinitesimalen Grenzfall zu bilden, nutze den Limes, der resultierende Operator lässt sich im Limes dann durch die Exponentialfunktion schreiben. Aufgrund des Gradienten lässt sich das Argument der Exponentialfunktion auch über den Impulsoperator schreiben. Um den Kommutator mit dem Hamiltonoperator zu bilden, zerlege die Exponentialfunktion in ihre Reihendarstellung, und nutze den Satz von Schwarz, aus der Kommutativität folgt dann die Impulserhaltung.

3. **Tensorprodukt, Tensorraum, Spin, Spinalggebra** Um die Wirkungen der Pauli-Matrizen zu zeigen, rechne einfach nach. Um den Summenquadrats-Operator zu bilden, schreibe als Summe und multipliziere aus, beachte dabei dass links auf links, rechts auf rechts wirkt. Zum Berechnen der Zustände berechne zunächst  $\hat{S}^2$ , es entspricht einem sehr einfachen Operator, vereinfacht die Berechnung der Wirkung von  $\hat{S}^2$  auf die verschiedenen Vektoren.

Tensorprodukt Rechenregeln:

$$(\lambda A + B) \otimes C = \lambda(A \otimes C) + B \otimes C$$

(Multilinear)

$$A \otimes B \neq B \otimes A \text{ (im Allgemeinen)}$$

$$(A \otimes B)(C \otimes D) = (AC \otimes BD) \text{ (Verrechnung von Operatorprodukten und Wirkung auf Elemente des Tensorraums)}$$

• Blatt 4

1. **Differentialgleichung, Schrödingergleichung, Entwicklung in  $\hbar$**  Um die Beziehung herzuleiten, berechne die Ableitungen von  $\psi$ , am besten erst separat, setze dann ein. Für die Entwicklung in  $\hbar$  setze zunächst die Reihendarstellung in Potenzen von  $\hbar$  für die genäherte Funktion ein, mache dann Koeffizientenvergleich und stelle separate Gleichungen für jede Potenz von  $\hbar$  auf, beachte hierbei die Quadrierung. Die DGL ist leicht lösbar, um die Allgemeine Lösung für  $\psi$  anzugeben, bilde Linearkombination aus den möglichen Lösungen der DGL (Addiere alle mit individuellen Koeffizienten).

2. **Ehrenfesttheorem, Operatorableitungen** Für generelle Operatorableitungsbeziehung leite die Formel für den Erwartungswert nach Produktregel ab, setze die Zeitableitungen der Zustandsvektoren nach der Schrödingergleichung ein, und drücke deren Terme dann durch einen einzelnen Kommutator aus. Um das Ehrenfesttheorem

zu zeigen, setze die Operatorzeitableitungsbeziehung ein, setze dann den Hamiltonoperator ein, nutze dann die Produktregel für Kommutatoren. Für die Ehrenfestformel des Impulses setze analog in die Operatorableitungsbeziehung ein, der Impulskommutator verschwindet, betrachte dann Erwartungswert als Skalarprodukt mit Zustandsvektoren, wende das Nabla im Impuls über die Produktregel auf den rechten Produktteil an, dann kürzen sich die ungewünschten Summanden, es verbleibt der gesuchte Term.

Allgemeine Zeitableitung eines Erwartungswertes:

$$\frac{d\langle \hat{A} \rangle}{dt} = \frac{i}{\hbar} \langle [\hat{H}; \hat{A}] \rangle + \langle \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} \rangle$$

Produktregel für Kommutatoren:

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

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

Kommutator von Orts- und Impulsoperator:

$$[\hat{Q}; \hat{P}] = i\hbar$$

$$[\hat{Q}_i; \hat{P}_j] = i\hbar \delta_{ij}$$

3. **Zeitentwicklung, Zeno-Effekt, Wahrscheinlichkeiten** Berechne Wahrscheinlichkeit vom Zeitentwicklungsoperator auf Anfangszustand, vereinfache dann die Hamiltonoperatoren zu Erwartungswerten, dabei kürzen sich im Betragsquadrat viele Terme heraus, schreibe Erwartungswertdifferenz dann zu Varianz um. Für die Entwicklung zu weiteren Zeiten  $k \cdot t$  wird die Wahrscheinlichkeit mit  $k$  potenziert. Um den Limes für viele kleine Schritte zu bilden, setze für die Zeit  $\frac{t}{n}$  ein und potenziere den Gesamtterm mit  $n$ , der Limes konvergiert gegen 1.

Wahrscheinlichkeit das System zur Zeit  $t$  im Zustand  $|\psi_0\rangle$  anzutreffen:

$$P_{(t)} = |\langle \psi_0 | \hat{U}_{(t)} | \psi_0 \rangle|^2$$

Varianz/Schwankungsprodukt:

$$Var(\hat{A}) \equiv \langle \Delta \hat{A}^2 \rangle \equiv \langle (\Delta \hat{A})^2 \rangle = \langle \hat{A}^2 \rangle - \langle \hat{A} \rangle^2$$

• Blatt 5

1. **Potentialtopf, Wellenfunktion, stationäre Schrödingergleichung** Nutze stationäre Schrödingergleichung, da Eigenfunktionen gesucht, nutze allgemeinen Wellenansatz für  $\psi(x)$ , berechne für die drei verschiedenen Zonen mit verschiedenen Potentialen die unterschiedlichen Koeffizienten der Funktionen, und stelle um. ???TODO???. Für die Aussage über die Existenz von Lösungen betrachte die Gleichung für gerade Funktionen, und die Kreisgleichung graphisch als Funktion von  $Ka$ , es muss immer einen Schnittpunkt geben, sodass

beide Gleichungen erfüllt sind, es existiert also immer ein gebundener Zustand.

Stationäre Schrödingergleichung:

$$E\psi(x) = \hat{H}\psi(x)$$

Allgemeiner Ansatz einer ebenen Welle:

$$\psi(x) = Ae^{+ikx} + Be^{-ikx}$$

Impulsoperator in Ortsdarstellung:

$$\hat{P} = -i\hbar \partial_x$$

Wellen...

2. **Operatoren, Projektoren, Adjungation, Spektraldarstellung**

Für Projektionsoperator schreibe Ket-Bra-Definition zwei mal hintereinander, mittlere Terme werden 1, für die Selbstadjungiertheit schreibe Ket-Bra-Definition aus und wende die Adjungation an, dabei werden beide Vektoren vertauscht und transponiert, ergibt gleichen Operator. Für die Eigenwerte, wende auf einen Eigenzustand den Projektionsoperator einmal einfach und einmal doppelt an, ergibt einmal Eigenwert und einmal sein Quadrat, aber doppelte Anwendung entspricht einfacher Anwendung, daher muss der Eigenwert gleich seinem Quadrat sein, das ist nur für 0 oder 1 erfüllt. Für die Beweise zu den Operatoren schreibe einen allgemeinen Vektor als Linearkombination der möglichen Projektionsvektoren, wende dann den Projektor in gleicher Summenschreibweise an, ziehe in den Summen die Vektoren zu einem Kronecker-Delta zusammen, und führe so das Produkt der Summen zurück auf den jeweils dem Operator entsprechenden Ausdruck.

Definierende Eigenschaft eines Projektionsoperators:

$$\hat{P}^2 = \hat{P}$$

Mögliche Eigenwerte von Projektionsoperatoren sind nur 0 oder 1.

Skalarprodukt gleicher Vektoren:

$$\langle \psi | \psi \rangle = 1$$

Transposition auf Matrixprodukt:

$$(AB)^T = B^T A^T$$

Adjungation auf Matrixprodukt:

$$(AB)^\dagger = B^\dagger A^\dagger$$

Adjungation Bra-Ket:

$$|\psi\rangle^\dagger = \langle \psi |$$

Adjungation Operator-Ket:

$$(\hat{A}|\psi\rangle)^\dagger = \langle \psi | \hat{A}^\dagger$$

Wirkung von Operator auf Eigenzustand  $|a\rangle$  zu Eigenwert  $a$ :

$$\hat{A}|a\rangle = a|a\rangle$$

Skalarprodukt orthonormaler Vektoren:

$$\langle \psi_i | \psi_j \rangle = \delta_{ij}$$

Basisdarstellung eines Vektors:

$$|\psi\rangle = \sum_{i=1}^n a_i |\psi_i\rangle$$

Spektraldarstellung eines Operators über

Projektor auf seine Eigenbasis:

$$\hat{A} = \sum_{i=1}^n a_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i|$$

### 3. Potentialbarriere, Wellenzahl

Für die Wellenzahlen benutze direkt die Wellenzahlenformeln für freie Teilchen und solche im Potential.

Wellenzahl eines freien Teilchens der Energie  $E$ :

$$k = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} E}$$

Wellenzahl eines Teilchens der Energie  $E$  im Potential  $V(x)$ :

$$k = \sqrt{\frac{2m}{\hbar} (E - V_x)}$$

Wellenfunktion eines nach rechts (+)/links (-) laufenden freien Teilchens:

$$\psi(x) = e^{\pm ikx}$$

Trigonometrische Identität Für Sinusquadrat und Doppelwinkelfunktion:

$$\sin^2(x) = \frac{1}{2}(1 - \cos(2x))$$

Reflexions- und Transmissionskoeffizienten durch Kastenpotential bei rechtsläufiger Welle bei üblicher Benennung der Koeffizienten der Exponentialfunktionen:

$$R = |B|^2$$

$$T = |E|^2$$

$$[a\hat{A} + b\hat{B}; c\hat{A} + d\hat{B}] = ad[\hat{A}; \hat{B}] + bc[\hat{B}; \hat{A}] = (ad - bc)[\hat{A}; \hat{B}]$$

Trigonometrische Identität Sinusdifferenz:

$$\sin(x - y) = -\sin(y - x) = \sin(x) \cos(y) - \cos(x) \sin(y)$$

Trigonometrische Identität Cosinusdifferenz:

$$\cos(x - y) = \cos(y - x) = \cos(x) \cos(y) + \sin(x) \sin(y)$$

Allgemeiner Hamiltonoperator im Potential  $V(x)$ :

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(x)$$

### 2. Dirac-Delta-Potential, Stetigkeit, Sprung

Um die Sprung- Ableitungsbedingung herzuleiten schreibe die

Schrödingergleichung aus, schreibe den Impulsoperator als Ortsableitung und integriere entsprechend, und nutze dass das Integral über einen sehr kleinen Bereich an der Stetigen Stelle 0 verschwindet. Um die Energie des gebundenen Zustands zu bestimmen, mache für diesen einen abschnittweisen Ansatz der ebenen Wellenfunktion so, dass er für  $x$  in beide Richtungen gegen null geht (Exponent stets negativ). Folgere dann die Gleichheit der Koeffizienten aus der Stetigkeit bei 0, und nutze die Bedingung an die Ableitung, um die Wellenzahl  $K$  zu errechnen dann setze die so erhaltene Wellenzahl in die Energiegleichung ein. Nur positive Wellenzahlen liefern physikalisch sinnvolle Ergebnisse, deswegen sind negative Wellenzahlen keine gebundenen Zustände, das heißt es gibt keine gebundenen Zustände für das invertierte Delta-Potential.

Schrödingergleichung:

$$\hat{H} \psi(x) = E \psi(x) \Leftrightarrow \left( \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(x) \right) \psi(x) = E \psi(x)$$

Verschwindendes Integral über kleine Intervalle bei stetiger Funktion:

$$f(x) \text{ stetig} \implies \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \left( \int_{-\epsilon}^{\epsilon} f(x) dx \right) = 0$$

Energie aus der Wellenzahl für Ebene Welle:

$$E = -\frac{\hbar^2 K^2}{2m}$$

### 3. Schrödinger-Gleichung Impuls

Wähle die stationäre Schrödinger-Gleichung, da stationäre Zustände betrachtet werden. Nutze jeweils Orts- und Impulsdarstellungen von Orts- und Impulsoperator. Löse die Differentialgleichung durch Trennung der Variablen. Wende die Fouriertransformation aus dem Impuls- in den Ortsraum an. Auf Höhe der Spiegelebene muss die Wellenfunktion verschwinden, Forme die erhaltene Ortswellenfunktion über die Trigonometrische Darstellung so auf die Airy-Funktion zurück, dass die Nullstellen der Airy-Funktion dem verbleibenden

Argument der Funktion gleichgesetzt werden können. Dann können durch Kenntnis der verschiedenen Nullstellen alle Energieniveaus berechnet werden. Schrödingergleichung:

$$\hat{H} \psi(x) = E \psi(x) \Leftrightarrow \left( \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(x) \right) \psi(x) = E \psi(x)$$

Impulsoperator in Ortsdarstellung:

$$\hat{p} = -i\hbar \partial_x$$

Ortsoperator in Impulsdarstellung:

$$\hat{x} = i\hbar \partial_p$$

Impulsdarstellung der Wellenfunktion

$$\text{fouriertransformieren in Ortsdarstellung:}$$

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\frac{p}{\hbar}x} \tilde{\psi}(p) dp$$

Airy-Funktion:

$$Ai(z) \equiv \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \cos\left(\frac{t^3}{3} + tz\right) dt \quad (\text{Nullstellen}$$

numerisch, erste bei  $z \approx -2, 338$ )

Exponentialfunktion und Sinus-Cosinus:

$$e^{ix} = \cos(x) + i \sin(x)$$

Das Symmetrische Integral über einen Sinus mit antisymmetrischem Argument verschwindet.

Energieeigenzustände Teilchenreflexion am Spiegel im Schwerpotential mit Nullstellen der Airyfunktion  $z_n$ :

$$E_n = -\left(\frac{\hbar^2 m g^2}{2}\right)^{\frac{1}{3}}$$

### • Blatt 7

#### 1. Auf- und Absteigeoperatoren, Leiteroperatoren, harmonischer Oszillator

Um die Normierung zu zeigen betrachte zunächst die Wirkung des Aufsteigeoperators auf den 0-Zustand, schreibe dazu die Exponentialreihe aus, nutze die Orthogonalitätsrelation der Zustände und die Wirkung des Aufsteigeoperators. Für die Wahrscheinlichkeit einen  $n$ -ten Energieeigenzustand im kohärenten Zustand vorzufinden schreibe den kohärenten Zustand wie hergeleitet als Reihe, setze die Orthogonalitätsrelation der beiden Zustandsvektoren ein und rechne so aus. Um die Wirkung des Absteigeoperators auf den kohärenten Zustand als Eigenvektor zu identifizieren, schreibe die Reihendarstellung des kohärenten Zustandes, wende den Absteigeoperator einmalig an, und verschiebe den Summenindex entsprechend, sodass der Zustand auf den ursprünglichen zurückgeführt wird. Um auf Zeitentwicklung umzuformen nutze den Eigenzustand des Hamiltonians und setze die Eigenenergie des harmonischen Oszillators ein, ziehe dann die Exponentialfunktion auseinander und führe den zeitabhängigen Parameter ein. Um die Orts- und

Impulserwartungswerte zu berechnen formuliere die Orts- und Impulsoperatoren durch die Leiteroperatoren und berechne dann wie gewohnt, nutze dabei dass der kohärente Zustand Eigenzustand des Absteigeoperators ist.

Skalarprodukt orthonormaler Zustände:

$$\langle n|m \rangle = \delta_{nm}$$

Wirkung des Aufsteigeoperators auf den Grundzustand:

$$(\hat{a}^\dagger)^n |0\rangle = \sqrt{n!} |n\rangle$$

Wirkung des Absteigeoperators auf einen Zustand:

$$\hat{a} |n\rangle = \sqrt{n} |n-1\rangle \quad (\text{aber } \hat{a} |0\rangle = 0 \text{ Zahl null!})$$

Auf und Absteigeoperator:

$$\langle n| \hat{a}^\dagger \hat{a} |n\rangle = \langle n| \hat{N} |n\rangle = n \langle n|n\rangle = n$$

Wirkung des Absteigeoperators auf einen kohärenten Zustand:

$$\hat{a} |\alpha\rangle = \alpha |\alpha\rangle$$

Reihendarstellung eines kohärenten Zustandes:

$$|\alpha\rangle = e^{-\frac{|\alpha|^2}{2}} e^{\alpha \hat{a}^\dagger} |0\rangle = e^{-\frac{|\alpha|^2}{2}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle$$

Eigenzustand des Hamiltonians:

$$\psi(t) = e^{-i\frac{E_n}{\hbar} t}$$

Eigenenergien des harmonischen Oszillators:

$$E_n = \hbar\omega(n + \frac{1}{2})$$

Ortsoperator aus Leiteroperatoren:

$$\hat{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\hat{a} + \hat{a}^\dagger)$$

Ortsquadratoperator aus Leiteroperatoren:

$$\hat{x}^2 = \frac{\hbar}{2m\omega} (\hat{a}^{\dagger 2} + 2\hat{a}^\dagger \hat{a} + \hat{a}^2 + 1)$$

Impulsoperator aus Leiteroperatoren:

$$\hat{p} = -i\sqrt{\frac{\hbar m \omega}{2}} (\hat{a} - \hat{a}^\dagger)$$

Impulsquadratoperator aus Leiteroperatoren:

$$\hat{p}^2 = -\frac{\hbar \omega m}{2} (\hat{a}^{\dagger 2} - 2\hat{a}^\dagger \hat{a} + \hat{a}^2 - 1)$$

Sinus und Cosinus aus Exponentialfunktionen:

$$\sin(x) = \frac{e^{ix} - e^{-ix}}{2i}$$

$$\cos(x) = \frac{e^{ix} + e^{-ix}}{2}$$

Klassischer Harmonischer Oszillator Ort und Impuls:

$$x(t) = x_0 \cos(\omega t - \phi)$$

$$p(t) = -p_0 \sin(\omega t - \phi)$$

Unschärfe:

$$\Delta x = \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2}$$

#### 2. Gemische, Dichteoperator

Um die Formel für den Energieerwartungswert zu bestimmen setze die Erwartungswertsformel für Gemische ein. Um die Energie zu errechnen, setze für den Hamiltonian die

### • Blatt 6

#### 1. Heisenbergbild, Kommutatoren

Für die DGL-Lösung nutze die Heisenbergsche Bewegungsgleichung, in der die expliziten Ableitungen verschwinden, berechne dann die Kommutatoren, die sich teilweise herauskürzen, und nutze den bekannten Kommutator von Orts- und Impulsoperator. Leite die Erhaltenen DGL noch einmal ab, so erhält man ein LGS, beziehungsweise im Endeffekt DGLs für die gesuchten Operatoren, die Lösung dieser ist leicht ersichtlich Sinus/Cosinus. Um die Kommutatoren zu berechnen, nutze die Kommutatoridentität für Summen/Differenzen in beiden Argumenten des Kommutators, sowie noch einmal den Kommutator von Orts- und Impulsoperator, aber auch Trigonometrische Identitäten zur Kombination der beiden Zeitargumente in eine Funktion.

Heisenbergsche Bewegungsgleichung einer Observablen  $A$ :

$$\frac{dA_H}{dt} = \frac{i}{\hbar} [H_H; A_H] + \left( \frac{\partial A}{\partial t} \right)_H$$

Potenzregel für Kommutatoren:

$$[\hat{A}^n; \hat{B}] = n\hat{A}^{n-1} [\hat{A}; \hat{B}]$$

$$[\hat{A}; \hat{B}^n] = n\hat{B}^{n-1} [\hat{A}; \hat{B}]$$

Kommutator von Orts- und Impulsoperator:

$$[\hat{p}_H; \hat{x}_H] = -i\hbar$$

Allgemeine Lösung der DGL  $\ddot{x} = -\omega^2 x$ :

$$x = A \sin(\omega t) + B \cos(\omega t)$$

Kommutatoridentität für Summen:

Besetzungszahloperatordefinition ein.  
Erwartungswert in Zustandsgemisch mit Dichteoperator  $\hat{\rho}$ :  
 $\langle \hat{A} \rangle = \text{Tr}(\hat{\rho} \hat{A})$   
Hamiltonian des harmonischen Oszillators durch Besetzungszahloperator:

$$\hat{H} = \frac{p^2}{2m} + m\omega x^2 = \hbar\omega \left( \hat{N} + \frac{1}{2} \right) = \hbar\omega \left( \hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{1}{2} \right)$$

Spur eines Operators:  
 $\text{Tr}(\hat{A}) = \sum_n \langle \psi_n | \hat{A} | \psi_n \rangle$   
Wirkung eines Operatorexponentials auf die Eigenzustände des Operators:

$$e^{\hat{A}} |a\rangle = e^a |a\rangle$$

Grenzwert der geometrischen Reihe:  
 $\sum_{n=0}^{\infty} q^n = \frac{1}{1-q}$

Definition Sinus Hyperbolicus:  
 $\sinh(x) = \frac{e^x - e^{-x}}{2}$

**3. Virialsatz, Homogenität vom Grad...**  
Um die Eigenwert-Hamiltonian-Beziehung herzuleiten, nutze die Produktregel der Ableitung, schreibe die Terme um, und nutze die Produktregel rückwärts, damit die Ableitung der Zustandsvektoren verschwindet. Um die Normierung zu prüfen, substituiere im

Skalarproduktsintegral die Parameter der Wellenfunktion, die Vorfaktoren kürzen sich gegen die neuen Koeffizienten der Integrationskonstanten. Zeige die Eigenzustände durch Umparametrisierung des Hamiltonoperators, alles übrige kürzt sich so. Um den Virialsatz zu zeigen setze die Ableitung des Hamiltonoperators aus der ersten Teilaufgabe gleich null, dies ist nach der zweiten Teilaufgabe erlaubt, da der Energieeigenwert unabhängig von der Homogenität des Potentials konstant bleibt. Leite nun den Hamiltonoperator ab, parametrisiere die Ableitung wieder um, und setze die Definition des Kinetischen Energieoperators für den Impulsanteil ein. Setzt man nun den Skalierungsparameter auf eins, verbleibt der Virialsatz.

Homogenes Potential vom Grad k:  
 $V_{(\lambda \vec{x})} = \lambda^k V_{(\vec{x})}$   
Virialsatz:  
 $2 \langle T \rangle = k \langle V \rangle$

• Blatt 8

- 1. Matrixexponentiale, Generatoren •**  
Orthogonalität von Exponential reell  
Antisymmetrischer Matrix X:  
 $X^T = -X \wedge X \in \mathbb{R}_{n \times n} \implies (e^X)^T = (e^X)^{-1}$
- 2. Paritätsoperator, Selbstadjungiertheit, Selbstinversität, Selbstadjungiertheit**  
Um die Selbstinversität zu zeigen, wende den Paritätsoperator zwei Mal

hintereinander auf eine Funktion an, sie wird auf sich selber abgebildet, damit entspricht der doppelt angewendete Paritätsoperator dem Einsoperator. Um die Selbstadjungiertheit zu zeigen, Führe ein Skalarprodukt über einen Zustand und einen anderen Zustand mit vorgeschaltetem Paritätsoperator aus, substituiere dabei im Integral mit negativer Integrationsvariable, das Integral entspricht dann einem Skalarprodukt über den ersten Vektor mit adjungiertem Paritätsoperator, und dem zweiten Vektor, damit ist der Vektor selbsadjungiert. Die Eigenwerte  $\pm 1$  ergeben sich aus der Selbstadjungiertheit - Wendet man den Operator drei Mal auf den Eigenzustand an, so muss der gleiche Eigenwert wie bei einmaliger Anwendung resultieren.

Unitarität:  
 $U$  ist unitär  $\Leftrightarrow U^\dagger U = \mathbb{1} \Leftrightarrow U^\dagger = U^{-1}$   
Eigenschaften des Paritätsoperators:  
 $\hat{p}^2 = \hat{p}$   
 $\hat{p} = \hat{p}^\dagger$   
Eigenwerte  $\pm 1$   
 $[\hat{x}; \hat{p}] = 2i\hat{p}$   
 $[\hat{p}; \hat{p}] = 2i\hat{p}$

3.

• Blatt 9

- 1.
- 2.
- 3.

• Blatt 10

- 1.
- 2.
- 3.

• Blatt 11

**1. Eichinvarianz, Elektrisches Feld, kinetischer Impuls** Nutze, die Transformationseigenschaften des kinetischen Impulsoperators, sowie die Kettenregel der Ableitung um alle Operatoren und Ableitungen weitestgehend auszuführen, die Gleichung kürzt sich dann so, dass die untransformierte Schrödingergleichung verbleibt.

Kinetischer Impulsoperator mit:  
 $\hat{\pi} = \hat{p} - \frac{q}{c} \vec{A}(\vec{x})$   
Hamiltonoperator im eines freien Teilchens im Elektrischen Feld:  
 $\hat{H} = \frac{1}{2m} \hat{\pi}^2 + q\Phi(\vec{x})$   
Eichtransformation der Potentiale:  
 $A \longrightarrow A - \vec{\nabla} \Lambda$   
 $\Phi \longrightarrow \Phi + \frac{1}{c} \frac{\partial \Lambda}{\partial t}$

Einhergehende Phasentransformation der Ortswellenfunktion:

$$\psi(\vec{x}, t) \longrightarrow e^{-\frac{iq}{\hbar c} \lambda(\vec{x}, t)} \psi(\vec{x}, t)$$

Transformierter kinetischer Impulsoperator  $\hat{\pi}'$  auf transformierte Wellenfunktion  $\psi'(\vec{x}, t)$ :

$$\hat{\pi}' \psi'(\vec{x}, t) = e^{-\frac{iq}{\hbar c} \lambda(\vec{x}, t)} \hat{\pi} \psi(\vec{x}, t)$$

$$(\hat{\pi}')^2 \psi'(\vec{x}, t) = e^{-\frac{iq}{\hbar c} \lambda(\vec{x}, t)} \hat{\pi}^2 \psi(\vec{x}, t)$$

Transformiert man Potentiale und Wellenfunktionen in der Schrödingergleichung durch eine Eichtransformation, so kürzen sich im Endeffekt alle Zusätzlichen Terme heraus, und man erhält wieder die untransformierte Schrödingergleichung.

**2. Zeitunabhängiges Magnetfeld, kinetischer Impuls**

Nutze für den Komponentenkommutator die Kommutatoridentität für Summen. Um die Heisenbergsche Bewegungsgleichung auszurechnen nutze die Produktregel für Kommutatoren und den Kommutator von Ort und kinetischem Impuls, im Falle der Zeitentwicklung des kinetischen Impulses außerdem die Kommutativität von kinetischem Impuls und Magnetfeld aufgrund der Homogenität des Feldes. Um die Differentialgleichungen zu lösen spalte in zum Magnetfeld parallele und orthogonale Anteile auf.

Kommutatoridentität Summen:  
 $[a\hat{A} + b\hat{B}; c\hat{C} + d\hat{D}] = ac[\hat{A}; \hat{C}] + ad[\hat{A}; \hat{D}] + bc[\hat{B}; \hat{C}] + bd[\hat{B}; \hat{D}]$   
Kommutator der Komponenten des kinetischen Impulses:  
 $[\hat{\pi}_i; \hat{\pi}_j] = i\hbar \frac{q}{c} (\partial_i A_j - \partial_j A_i) = i\hbar \frac{q}{c} \epsilon_{ijk} B_k$   
Heisenbergsche Zeitentwicklungsgleichung für beliebigen Operator  $\hat{A}$ :

$\partial_t \hat{A} = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}; \hat{A}]$   
Hamiltonoperator in stationärem Magnetfeld:  
 $\hat{H} = \frac{1}{2m} \hat{\pi}^2$   
Produktregel für Kommutatoren:  
 $[\hat{A}\hat{B}; \hat{C}] = \hat{A}[\hat{B}; \hat{C}] + [\hat{A}; \hat{C}]\hat{B}$   
 $[\hat{A}; \hat{B}\hat{C}] = \hat{B}[\hat{A}; \hat{C}] + [\hat{A}; \hat{B}]\hat{C}$   
Kommutator von Ort und kinetischem Impuls:  
 $[\hat{\pi}_i; \hat{x}_j] = -2\delta_{ij}$   
Heisenbergsche Bewegungsgleichungen in homogenem Magnetfeld:  
 $\partial_t \hat{x} = \frac{1}{m} \hat{\pi}$   
 $\partial_t \hat{\pi} = \omega_B \hat{\pi} \vec{e}_B$  (Zyklotronfrequenz)  
 $\omega_B = 0 \frac{qB}{mc}$

**3. Zeitabhängiges Magnetfeld, Zeitabhängiger Hamiltonoperator**  
Der Hamiltonoperator vereinfacht sich auf

ein skalares Vielfaches einer einzigen Paulimatrix, da die B-Feldkomponenten in zwei Raumrichtungen gleich null sind. Damit lassen sich die beiden Eigenzustände zur kanonischen Basis des zweidimensionalen Raumes erraten. Die Eigenwerte lassen sich durch Anwendung der Paulimatrix leicht ablesen., beziehungsweise ergeben sich durch Multiplikation der Eigenwerte der entsprechenden Pauli-Matrix mit dem Vorfaktor. Die allgemeine Zeitentwicklung ergibt sich jetzt als Linearkombination der beiden Eigenfunktionen mit von ihren Eigenenergien abhängigen Phasenfaktoren und variablen Vorfaktoren. Um die Schrödingergleichung für das variable Magnetfeld zu erhalten, bestimme wieder die relevanten Paulimatrizen und stelle den Hamiltonoperator als Summe aus dem vorherigen und dem so erhaltenen neuen Operator dar. Um die einzelnen Koeffizienten zu bestimmen zerlege die Schrödingergleichung nach den verschiedenen Eigenvektoren, und erhalte so die einzelnen Differentialgleichungen. Im Resonanzfall werden die Phasenfaktoren der beiden Koeffizienten gleich eins, damit führen die Beiden Differentialgleichungen für die Koeffizienten auf eine Sinus-Cosinus-Überlagerung. Zur Beachtung der Randbedingung des Starts beim ersten Eigenzustand wählt man den einen Koeffizienten der Sinus-Cosinus-Überlagerung gleich eins, und den anderen als imaginäre Einheit. Um die Zeit zu bestimmen, zu der sicher der zweite Eigenzustand angenommen wird, fordere dass der Vorfaktor des Zustandes in der Wellenfunktion im Betragsquadrat eins ergibt, und stelle dann nach der Zeit um.

• Blatt 12

**1. Ritzches Variationsverfahren, Heliumatom**

Idee des Verfahrens: Finde den Zustand so, dass der Energieerwartungswert minimal wird, diese Energie ist dann die Grundzustandsenergie. Es wird zunächst der Energieerwartungswert einer beliebigen Ortswellenfunktion bestimmt. Dazu werden für die einzelnen Elektronen jeweils gaußähnliche Funktionen gewählt, die dann multiplikativ zur Gesamtwellenfunktion gekoppelt werden. Um die Berechnung zu vereinfachen, wird zunächst der Energieerwartungswert für ein einzelnes Elektron berechnet. Aufgrund der additiven Struktur des Hamiltonians entspricht die Energie für zwei Elektronen dem doppelten dieses Wertes, plus einen Kopplungsbeitrag,

dessen Integral im Hinweis der Aufgabe bereits gelöst ist. Nun wird das so erhaltene Polynom für die Energie nach dem Parameter der effektiven Ladung minimiert, und das Energieminimum berechnet, es stellt ein obere Abschätzung für die Grundzustandsenergie dar.

Jacobideterminante für Kugelkoordinaten:

Laplaceoperator in Kugelkoordinaten:

Bohrradius:

$$a_B = \frac{\hbar^2}{m_e^2}$$

Erhaltene Energie im Heliumatom:

$$E = \left( Z_{eff}^2 - 4Z_{eff} + \frac{5}{8}Z_{eff} \right) \frac{e^2}{a_B}$$

## 2. Störungstheorie, Störung erster Ordnung

Es wird zunächst der Hamiltonian so aufgestellt, dass er sich in eine ungestörten- und einen Störungsanteil zerlegen lässt. Dabei muss, um das Potential zu realisieren, die Heavisidefunktion eingesetzt werden. Mit diesem Operator wird dann nach der Störungstheorie die Störung in erster Ordnung berechnet. Abschließend können die Werte für das Wasserstoffatom eingesetzt werden.

Störung der Energie des n-ten Zustandes in erster Ordnung Störungstheorie:

$$E_n^{(1)} = \langle \psi_n^{(0)} | \hat{H}^{(1)} | \psi_n^{(0)} \rangle$$

## 3. Störungstheorie, Übergangswahrscheinlichkeit, zeitabhängige Störung

### Formeln aus dem grauen Kästen im Skript:

De-Broglie-Wellenlänge:

$$\lambda_{DB} = \frac{2\pi}{k} = \frac{h}{p}$$

Energiedifferenz im Atom:

$$E_m - E_n = h\nu \text{ mit } \nu = \frac{Ry}{h} \left( \frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right)$$

Heisenbergsche Unschärferelation:

$$\Delta x \Delta p = 2\hbar$$

Wahrscheinlichkeitsdichte am Ort x:

$$P(x) = |\psi(t, x)|^2$$

Nichtrelativistische Energie-Impulsbeziehung:

$$E = \frac{p^2}{2m}$$

Schrödingergleichung:

$$\hat{H}\psi(x) = i\hbar \partial_t \psi(x) \Leftrightarrow \left( \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(x) \right) \psi(x) = i\hbar \partial_t \psi(x)$$

Operatoren in Ortsdarstellung:

$$\hat{x} = \vec{x}; \hat{p} = -i\hbar \vec{\nabla}; E = i\hbar \partial_t$$

Hamiltonoperator:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\vec{x}) = -\frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}^2 + V(x) \text{ (In Ortsdarstellung)}$$

Wahrscheinlichkeitsstromdichte:

$$\vec{j} = \frac{\hbar}{2im} (\psi^* \vec{\nabla} \psi - \psi \vec{\nabla} \psi^*) = \frac{\hbar}{m} \text{Im}(\psi^* \vec{\nabla} \psi)$$

Erhaltung der Wahrscheinlichkeit, Kontinuität der

Wahrscheinlichkeitsstromdichte:

$$\partial_t w + \vec{\nabla} \cdot \vec{j} = 0$$

Schwarzsche Ungleichung:

$$|\langle v | w \rangle| \leq \|v\| \|w\|$$

Definition Hilbertraum:

Vektorraum mit Skalarprodukt der außerdem

Cauchy-vollständig ist heißt Hilbertraum.

Verschränkte Tensoren:

Ein Element eines Produktraumes heißt verschränkt, wenn der Rang seiner Koeffizientenmatrix größer als eins ist.

Linearer Operator:

$$\hat{A}(\lambda x + \mu y) = \lambda \hat{A}x + \mu \hat{A}y$$

Eigenwerte von Operatoren:

$$\hat{A}|a\rangle = a|a\rangle$$

Hermitescher Operator:

$$\hat{A} \text{ hermitesch} \Leftrightarrow A = A^\dagger \text{ und Definitionsbereich gleich}$$

der adjungierten Operator  $\Rightarrow \langle \hat{A}\phi | \psi \rangle = \langle \phi | \hat{A}\psi \rangle$

Wahrscheinlichkeit das System  $|\psi\rangle$  im Zustand  $|a\rangle$

vorzufinden:

$$P = |\langle a | \psi \rangle|^2$$

Schrödingergleichung:

$$i\hbar \frac{d|\psi\rangle}{dt} = \hat{H}|\psi\rangle$$

Allgemeine Unbestimmtheitsrelation:

$$\langle \Delta A^2 \rangle \langle \Delta B^2 \rangle \geq \frac{1}{4} \langle \{ \hat{A}; \hat{B} \} \rangle^2 \text{ (Observablen sind}$$

verträglich  $\Leftrightarrow$  Ihre Operatoren kommutieren  $\Leftrightarrow$  Ihre

Operatoren sind gleichzeitig diagonalisierbar)

Bellsche Ungleichung:

$$|E_{(\vec{m}, \vec{n})} - E_{(\vec{m}, \vec{n}')}| \leq 1 + E_{(\vec{n}, \vec{n}')} \text{ (Von Quantenmechanik}$$

nicht erfüllt  $\Rightarrow$  kein verborgener Parameter, also

vollständige Theorie)

Dichteoperator eines Gemisches:

$$\hat{\rho} = \sum_n p_n \hat{P}_n = \sum_n p_n |n\rangle \langle n|$$

Zeitentwicklungsoperator:

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

Schrödingergleichung für Zeitentwicklungsoperator:

$$i\hbar \frac{d\hat{U}(t, t_0)}{dt} = H\hat{U}(t, t_0)$$

Rabi-Oszillation Zeitentwicklungsoperator:

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

$$e^{i \frac{E(t-t_0)}{\hbar}} \left( \cos\left(\frac{\Omega(t-t_0)}{2}\right) I - \frac{2i}{\hbar\Omega} \sin\left(\frac{\Omega(t-t_0)}{2}\right) \Delta H \right)$$

Heisenbergsche Entwicklungsgleichung:

$$i\hbar \frac{d\hat{A}_H}{dt} = [\hat{A}_H; \hat{H}_H] + i\hbar (\partial_t \hat{A})_H$$

Wechselwirkungsbild/Diracbild Entwicklungsgleichung

mit Störoperator  $\hat{V}$ :

$$\frac{d|\psi(t)\rangle}{dt} = \hat{V}_I \psi(t)_I$$

Zeitentwicklung von Gemischen und Dichteoperator:

$$\frac{d|\hat{\rho}(t)\rangle}{dt} = [\hat{H}; \hat{\rho}]$$

Skalarprodukt über Funktionen:

$$\langle \phi | \psi \rangle = \int \phi^*(t, \vec{x}) \psi(t, \vec{x}) d^d x$$

Operatoren in Impulsdarstellung:

$$\hat{x} = i\hbar \vec{\nabla}_p$$

$$\hat{p} = p$$

Kommutator von Ort und Impuls:

$$[\hat{x}_i; \hat{p}_j] = -i\hbar [x_i; p_j] = i\hbar \delta_{ij}$$

Hamiltonoperator in Impulsdarstellung:

$$\hat{H} = \frac{p^2}{2m} + V(i\hbar \vec{\nabla}_p)$$

Zeitunabhängige Schrödingergleichung:

$$\hat{H}\phi(x) = E\phi(x)$$

Knotensatz:

Der Grundzustand hat im seinem geltenden Intervall

keine Nullstelle, der n-te Anregungszustand hat n

Nullstellen.

Wellenlänge eines Teilchens im unendlich tiefen

Potentialtopf der Breite L:

$$\lambda = \frac{2L}{k} = \frac{2L}{n} \text{ (n} \in \mathbb{N})$$

Ab- und Aufsteigeoperator:

$$\hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2}}(u + \partial_u) \text{ (Ab)}; \hat{a}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}}(u - \partial_u) \text{ (Auf)}$$

Hamiltonoperator des Harmonischen Oszillators in

Leiteroperatorschreibweise:

$$\hat{H} = \hbar\omega \left( \hat{N} + \frac{1}{2} \right)$$

Eigenenergien des harmonischen Oszillators:

$$E_n = \hbar\omega \left( n + \frac{1}{2} \right)$$

Wirkung des Aufsteigeoperators:

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

Ortsdarstellung Energieeigenzustände harmonischer

Oszillator:

$$\psi_n(x) = \frac{H_n(x) e^{-\frac{x^2}{2}}}{\pi^{\frac{1}{4}} \sqrt{2^n n!}}$$

Pfadintegral Übergangswahrscheinlichkeit:

$$\langle x | \hat{U}(t) | y \rangle = \int_{x(0)=y}^{x(t)=x} \mathcal{D}x e^{i \frac{S[x]}{\hbar}}$$

Noether-Theorem:

Zu jeder kontinuierlichen Symmetrieeoperation  $\hat{U}$

gehören Erhaltungsgrößen  $\hat{G}$  die durch Generatoren

von  $\hat{U}$  ausgedrückt werden.

Impulserhaltung:

In QM-Systemen die Invariant gegenüber

kontinuierlichen räumlichen Translationen sind, ist der

Impuls erhalten.

Drehimpulserhaltung:

In QM-Systemen, die invariant gegenüber räumlichen

Translationen sind, ist der Drehimpuls erhalten.

Kommutatoren des Drehimpulses:

$$[\hat{L}_i; \hat{x}_j] = i\hbar \epsilon_{ijk} \hat{x}_k$$

$$[\hat{L}_i; \hat{p}_j] = i\hbar \epsilon_{ijk} \hat{p}_k$$

$$[\hat{L}_i; \hat{L}_j] = i\hbar \epsilon_{ijk} \hat{L}_k$$

Kommutatorforderung an allgemeine Drehimpulse:

$$[\hat{J}_i; \hat{J}_j] = i\hbar \epsilon_{ijk} \hat{J}_k$$

Drehimpuls Leiteroperatoren:

$$\hat{J}_3(\hat{J}_\pm |j_3\rangle) = \hbar(j_3 \pm 1)(\hat{J}_\pm |j_3\rangle)$$

$$[\hat{J}_3; \hat{J}_\pm] = \hbar$$

Bereich der magnetischen Quantenzahl  $j_3$ :

$$-j \leq j_3 \leq j \text{ wobei } 2j \in \mathbb{N}_0$$

Eigenfunktionen zu  $\hat{L}_3$  und  $\hat{L}^2$ :

$$\langle \vec{x} | l m \rangle = Y_{lm}(\theta, \phi) \text{ (Kugelflächenfunktionen)}$$

Clebsch-Gordan-Koeffizienten:

$$|JM\rangle = \sum_{m_1 m_2} \langle j_1 m_1 j_2 m_2 | j_1 j_2 JM \rangle |j_1 m_1 j_2 m_2\rangle$$

$$C_{j_1 m_1 j_2 m_2}^{JM} = \langle j_1 m_1 j_2 m_2 | j_1 j_2 JM \rangle$$

Drehimpulsaddition:

$$-J \leq M \leq J \text{ mit } |j_1 - j_2| \leq J \leq j_1 + j_2$$

Schrödingergleichung im Wasserstoffatom:

$$u''_{El} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} u_{El} + \left( \epsilon + \frac{2Z}{\rho} \right) u_{El} = 0 \text{ mit } \rho = \frac{r}{a_B} \text{ und}$$

$$\epsilon = \frac{E}{Ry}$$

Energieniveaus im Wasserstoffatom:

$$E_n = -\frac{Z^2 Ry}{n^2} \text{ mit } \mathbb{N} \ni n = s_* + l + 1$$

Radiale Eigenfunktionen im Wasserstoffatom:

$$R_{nl}(x_n) = -N_{nl} e^{-\frac{x_n}{2}} x_n^l L_{n-l}^{2l+1} \text{ mit } N_{nl}^2 = Z^3 \frac{4(n-l-1)!}{n^4(n+l)!}$$

Hamiltonfunktion und Operator im EM-Feld:

$$H = \vec{v} \cdot \vec{p} - L = \gamma mc^2 + q\Phi$$

$$\hat{H} = \frac{1}{2\mu} \left( \hat{p} - \frac{q}{c} \vec{A}(\vec{x}) \right)^2 + q\Phi(\vec{x}) \text{ Landau-Energieniveaus}$$

eines geladenen Teilchens im homogenen Magnetfeld:

$$E_n = \hbar\omega_B \left( n + \frac{1}{2} \right) + \frac{p_z^2}{2}$$

Energieänderung durch angelegtes Magnetfeld

(Zeeman-Effekt):

$$\Delta E = -\frac{m\hbar\omega_B}{2} = B\mu_B m$$

Landé-Faktor g erhöht magnetische Moment:

$$|\vec{m}| = \frac{g\mu_B}{\hbar} |J|$$

Zeitentwicklung eines Spins im Magnetfeld

(Lamorpräzession):

$$|s(t)\rangle = e^{i\omega_L t \sigma_3} |s(0)\rangle \text{ mit } \omega_L = \frac{g\mu_B B}{2\hbar}$$

Energiedifferenz durch Paschen-Back-Effekt:

$$\Delta \hat{H} \psi_{nlm\uparrow} = \mu_B(m+1) B \psi_{nlm\uparrow}$$

$$\Delta \hat{H} \psi_{nlm\downarrow} = \mu_B(m-1) B \psi_{nlm\downarrow}$$

Störung der Energie des n-ten Zustandes in erster

Ordnung Störungstheorie:

$$E_n^{(1)} = \langle \psi_n^{(0)} | \hat{H}^{(1)} | \psi_n^{(0)} \rangle$$

n-ter Energieeigenzustand erster Ordnung:

$$|\psi_n^{(1)}\rangle = \sum_{k \neq n} \frac{\langle \psi_n^{(0)} | \hat{H}^{(1)} | \psi_k^{(0)} \rangle}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} |\psi_k^{(0)}\rangle$$

Störung der Energie des n-ten Zustandes in zweiter

Ordnung Störungstheorie:

$$E_n^{(2)} = \sum_{k \neq n} \frac{\langle \psi_n^{(0)} | \hat{H}^{(1)} | \psi_k^{(0)} \rangle^2}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}}$$

Linearer Stark-Effekt (Verschiebung durch äußeres

elektrisches Feld):

$$E_2^{(1)} = \pm 3e |E| a_B \text{ mit Bohrradius } a_B$$

Virialsatz:

$$\text{Allgemein: } 2\langle T \rangle = \langle \vec{x} \cdot \vec{\nabla} V(\vec{x}) \rangle$$

Speziell:  $2\langle T \rangle = k\langle V \rangle$  (Wenn k-Homogen

$(V(a\vec{x}) = a^k V(\vec{x}))$ )

Fermis goldene Regel:

$$\Gamma = \frac{2\pi}{\hbar} \langle \psi_m^{(0)} | \hat{H}^{(1)} | \psi_n^{(0)} \rangle^2 \rho(E_n)$$

Übergangsrate bei harmonischen Störungen:

$$\Gamma_{nm} = \frac{2\pi}{\hbar^2} \left| \langle \psi_m^{(0)} | \hat{V} | \psi_n^{(0)} \rangle \right|^2 \delta(\omega_{nm} - \omega) +$$

$$\frac{2\pi}{\hbar^2} \left| \langle \psi_m^{(0)} | \hat{V}^\dagger | \psi_n^{(0)} \rangle \right|^2 \delta(\omega_{nm} + \omega)$$

Fermionen und Bosonen:

Bosonen symmetrische Wellenfunktion unter

Paritätstransformationen  $\hat{P}_{12} |\xi_1 \xi_2\rangle_s = |\xi_1 \xi_2\rangle_s$

Fermionen antisymmetrische Wellenfunktion unter

Paritätstransformationen  $\hat{P}_{12} |\xi_1 \xi_2\rangle_a = -|\xi_1 \xi_2\rangle_a$

Spin-Statistik-Theorem:

$$\hat{P}|\psi\rangle = \text{sgn}(\pi) |\psi\rangle$$

Pauli-Verbot:

In einem System können keine zwei Fermionen exakt

gleiche Quantenzahlen haben.

Semi-Klassische-/WKB-Näherung des harmonischen

Oszillators:

$$\psi(x) = \psi(0) e^{i \frac{\Phi_0}{\hbar}} = \frac{C}{\sqrt{p}} e^{\pm \frac{i}{\hbar} \int_0^x p(x') dx'}$$

Lösung der Airyschen Differentialgleichung als Schrödingergleichung der WKB-Näherung in einer Potentialsenke:

$$Ai(\xi) \text{ mit } \xi = \frac{x}{l} \text{ mit } l = \left( \frac{2mE}{\hbar^2} \right)^{\frac{1}{3}}$$

Bohr-Sommerfeldsche Quantisierungsbedingung als WKB-Näherung einer beliebigen Potentialsenke:

$$\oint p(x') dx' = h \left( n + \frac{1}{2} \right)$$

Lippmann-Schwinger-Gleichung:

$$\psi_k(\vec{x}) = \psi_0(\vec{x}) + \int G(\vec{x}-\vec{y}) U(\vec{y}) \psi_k(\vec{y}) d^3 y$$

Streuamplitude:

$$f(\vec{k}, \vec{k}') = -\frac{1}{4\pi} \int G(\vec{x}-\vec{y}) U(\vec{y}) \psi_k(\vec{y}) e^{-i\vec{k}'\vec{y}} d^3 y$$

Streugleichung mit Streuamplitude:

$$\psi_k(\vec{x}) = \psi_0(\vec{x}) + \frac{e^{ikr}}{r} f(\vec{k}, \vec{k}')$$

Wirkungsquerschnitt bei Streuung an Potential:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\vec{k}, \vec{k}')|^2 \text{ Bornsche Näherung der Streuamplitude}$$

(Ist proportional zur Fouriertransformierten des Potentials):

$$f(\vec{k}, \vec{k}') = -\frac{1}{4\pi} \int U(\vec{y}) e^{-i(\vec{k}-\vec{k}')\vec{y}} d^3 y \text{ mit Impulsübertrag}$$

$$\vec{q} = \vec{k} - \vec{k}'$$

Elastische Streuung an Atomen:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left( \frac{e^2}{4E} \right)^2 \frac{(Z-F(q))^2}{\sin^4(\frac{\theta}{2})}$$

Partialwellenzerlegung:

$$f(\theta, k) = \frac{1}{2ik} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1)(S_{l(E)} - 1) P_l(\cos(\theta))$$

$$\psi_s(\vec{x}) = \frac{e^{ikr}}{r} f(\theta, k)$$

Optisches Theorem:

$$\sigma_{tot} = \frac{4\pi}{k} \text{Im}(f_{(0, \vec{k})})$$

**Weitere Formeln:**

Störungstheorie:

Störung der Energie des n-ten Zustandes in erster

Ordnung:

$$E_n^{(1)} = \langle \psi_n^{(0)} | \hat{H}^{(1)} | \psi_n^{(0)} \rangle$$

Störung der Energie des n-ten Zustandes in zweiter

Ordnung:

$$E_n^{(2)} = \sum_{k \neq n} \frac{|\langle \psi_n^{(0)} | \hat{H}^{(1)} | \psi_k^{(0)} \rangle|^2}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}}$$

Kommutatoren:

Kommutator eines allgemeinen Drehimpulses mit dem

Ort:

$$[J_i; x_j] = i\hbar \epsilon_{ijk} x_k$$

Energie im unendlich hohen Potentialtopf:

$$E_n = \frac{\hbar^2}{8mL^2} n^2 \quad (n > 0)$$

Beziehung der Kommutatoren von Heisenberg- und

Schrödingerbild:

$$[\hat{A}; \hat{B}]_H = [\hat{A}_H; \hat{B}_H]$$

Wellenzahl:  $k = \frac{p}{\hbar}$

Übergangswahrscheinlichkeit bei Einschaltung kleiner

Störung bei  $t = t_1$  von  $|\psi_n\rangle$  nach  $|\psi_m\rangle$  in der Zeit bis  $t_2$ :

$$p_{nm} = |c_{nm(t)}^{(1)}|^2 = \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_{t_1}^{t_2} \langle \psi_m | \hat{H}^{(1)}(t) | \psi_n \rangle e^{i\omega_{nm}t} dt \right|^2 \text{ mit}$$

$$\text{Übergangsfrequenz } \omega_{mk} = \frac{E_m^{(0)} - E_k^{(0)}}{\hbar}$$