# 3 Postulate und Formulierung

### Eigenschaften von Kets

Linearer Operator mit Eigenkets $|a\rangle$:

$$A|a\rangle = a|a\rangle$$

Erwartungswert:

$$\langle A\rangle_s = \langle s|A|s\rangle \quad , \quad \langle A\rangle_a = a\langle a|a\rangle = a$$

Flukuation und Dispersion:

$$\Delta A = A - \langle A\rangle$$

$$\left\langle(\Delta A)^2\right\rangle = \left\langle A^2\right\rangle - \langle A\rangle^2$$

Unschärferelation:

$$\left\langle(\Delta A)^2\right\rangle \cdot \left\langle(\Delta B)^2\right\rangle \geq \frac{1}{4}|\langle[A,B]\rangle|^2$$

# 4 Das freie Teilchen

### Ort und Impuls

Ortsoperator:

$$X|x\rangle = x|x\rangle$$

Translationsoperator:

$$T(dx)|x\rangle = |x+dx\rangle$$

$$T(dx) = 1 - iGdx + \mathcal{O}(dx^2)$$

$$T(dx) = 1 - \frac{i}{\hbar}Pdx + \mathcal{O}(dx^2) \Longleftrightarrow G = \frac{P}{\hbar}$$

Kommutator:

$$[X_i, P_j] = i\hbar\delta_{ij}$$

### Wellenfunktionen

Kontinuumsformulierung:

$$\langle a|b\rangle = \int dx\,\langle a|x\rangle\langle x|b\rangle = \int dx\,\psi_a^*(x)\psi_b(x)$$

Erwartungswert für $X$:

$$\langle a|X|a\rangle = \int dx\,x\cdot\psi_a^*(x)\psi_a(x) = \int dx\,x|\psi_a(x)|^2$$

Matrixelement für $P$:

$$\left\langle x\left|\frac{iP}{\hbar}\right|a\right\rangle = \frac{\partial\psi_a(x)}{\partial x}$$

### Darstellungen

Ortsdarstellung:

$$(|a\rangle, X, P) \longleftrightarrow (\psi_a(x), x, -i\hbar\partial_x)$$

Impulsdarstellung:

$$(|a\rangle, P, X) \longleftrightarrow (\phi_a(p), p, i\hbar\partial_p)$$

Darstellungswechsel:

$$\langle x|P|p\rangle = p\langle x|p\rangle$$

$$\langle x|P|p\rangle = -i\hbar\partial_x\langle x|p\rangle$$

$$\Rightarrow \langle x|p\rangle = \psi_p(x) = Ce^{\frac{ipx}{\hbar}}$$

$$\psi_a(x) = \langle x|a\rangle = \int dp\,\langle x|p\rangle\langle p|a\rangle = \int \frac{dp}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{\frac{ipx}{\hbar}}\phi_a(p)$$

# 5 Schrödinger-Gleichung

### Zeitentwicklung

Zeitentwicklungsoperator:

$$|a,t\rangle = U(t,t_0)|a,t_0\rangle$$

$$U(t_2,t_0) = U(t_2,t_1)U(t_1,t_0),\; U(t,t) = 1$$

Hamilton-Operator:

$$U(t_0+dt,t_0)|a,t_0\rangle = (1 - i\frac{H}{\hbar}dt)|a,t_0\rangle + \mathcal{O}(dt^2)$$

$$H|E_n\rangle = E_n|E_n\rangle \qquad \text{stationäre S-Gl.}$$

### Schrödinger- und Heisenbergbild

Schrödinger-Gleichung:

$$i\hbar|a,t\rangle = H|a,t\rangle$$

$H \neq H(t)$ Hamilton zeitunabhängig:

$$\Rightarrow |a,t\rangle = \sum_n a_n(0)\,e^{-i\frac{E_n t}{\hbar}}|E_n\rangle$$

Heisenberg-Gleichung:

$$\frac{dA}{dt} = \frac{1}{i\hbar}[A,H]$$

Polynome von $P$ und $X$:

$$[X, F(P)] = i\hbar\,\partial_P F(P)$$

$$[P, G(X)] = -i\hbar\,\partial_X G(X)$$

# 6 1-dimensionale Systeme

### Lösungsstrategie

1. Asymptotische Analyse
2. Reihenansatz
3. Reihenabbruchbedingung suchen

### Harmonischer Oszillator

$$H = \frac{P^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2} X^2$$

Schrödinger-Gleichung lösen:

$$\Rightarrow E_n = \hbar\omega(n + \frac{1}{2})$$
$$\Rightarrow \psi_n(x,t) = \frac{1}{\sqrt{a_H}} \frac{\pi^{-\frac{1}{4}}}{\sqrt{2^n n!}} \cdot H_n\left(\frac{x}{a_H}\right) e^{-\frac{x^2}{2a_H^2} - i\frac{E_n t}{\hbar}}$$

Operatorsprache:

$$a = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left(X + \frac{iP}{m\omega}\right), \qquad a^\dagger = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left(X - \frac{iP}{m\omega}\right)$$

$$N = a^\dagger a$$
$$\Rightarrow H = \hbar\omega\left(N + \frac{1}{2}\right), \qquad N\left|E_n\right\rangle = n\left|E_n\right\rangle$$

### Erzeuger- und Vernichter

$$[a, a^\dagger] = 1$$
$$[N, a] = -a$$
$$[N, a^\dagger] = a^\dagger$$

Wirkung von $a$ und $a^\dagger$:

$$a\left|n\right\rangle = \sqrt{n}\left|n-1\right\rangle$$
$$a^\dagger n = \sqrt{n+1}\left|n+1\right\rangle$$

Ort und Impuls ausgedrückt mit Erzeuger und Vernichter:

$$X = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(a + a^\dagger)$$
$$P = \frac{1}{i}\sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}}(a - a^\dagger)$$

# 7 Zentralkraftproblem und Drehimpuls

### Drehimpuls

$$\vec{L} = \vec{X} \times \vec{P}$$
$$\langle L_3 \rangle = \hbar l_3$$

Drehimpulsalgebra:

$$[L_i, L_j] = i\hbar \sum_k \varepsilon_{ijk} L_k$$

$$L_3\left|l, l_3\right\rangle = \hbar l_3\left|l, l_3\right\rangle$$
$$\vec{L}^2\left|l, l\right\rangle = \hbar^2 l(l+1)\left|l, l\right\rangle$$

### Coulomb-Potential

$$V(r) = \frac{\gamma}{r}$$

Stationäre Schrödinger-Gleichung lösen:

$$E = -\frac{l^2}{2a_B}\frac{Z}{n^2}$$
$$\Psi_{nll_3} = \frac{2}{n^2}\sqrt{\frac{Z^3}{a_B^3}}\sqrt{\frac{(n-1-l)!}{(n+l)!}}\left(\frac{2Zr}{na_B}\right)^l \cdot L_{n-l-1}^{2l+1}\left(\frac{2Zr}{na_B}\right) e^{-\frac{Zr}{na_B}} Y_{ll_3}(\theta, \omega)$$

Quantenzahlen für Zustand $\left|n, l, l_3\right\rangle$:

$n$ : Hauptquantenzahl
$l$ : Bahndrehimpuls
$l \leq n-1$
$l_3$ : z-Komponente Bahndrehimpuls.
$l_3 = -l, \ldots, 0, \ldots, l$
$(2l+1)$-fach entartet.

### Harmonischer Oszillator in 3D

Kartesische Koordinaten:

$$H = \sum_i \left( -\frac{\hbar^2}{2m}\partial_i^2 + \frac{m\omega_i^2}{2} x_i^2 \right)$$

$$\Rightarrow E = \sum_i \hbar\omega_i \left( n_i + \frac{1}{2} \right)$$

$$H = \sum_i \hbar\omega_i \left( a_i^\dagger a_i + \frac{1}{2} \right)$$

Kugelkoordinaten und Drehimpuls:

$$\Rightarrow E = 2n + l + \frac{3}{2}$$

$$\phi_{nll_3} = \sqrt{\frac{2n!}{(n+l+\frac{1}{2})!}} \frac{r^l}{a_h^{l+\frac{3}{2}}} L_n^{l+\frac{1}{2}} \left( \frac{r}{a_h} \right) e^{-\frac{r^2}{2a_h^2}} Y_{ll_3}(\theta, \omega)$$

## 8 Symmetrien

### Erhaltungsgrößen

Symmetrien sind unitäre Operatoren ($S^\dagger = S^{-1}$) mit $[H, S] = 0$

$$S = 1 - i \cdot \varepsilon \frac{1}{\hbar} G + \mathcal{O}(\varepsilon^2)$$

$$[H, G] = 0 \Rightarrow G(t) = G(0) \Rightarrow \langle t|G|t\rangle = \langle 0|G|0\rangle$$

Erzeugte Observablen $G$ (hermitisch) sind Erhaltungsgrößen.

### Parität

$$\text{Spiegelsymmetrie: } \vec{X} \to -\vec{X}$$
$$t \to t$$

Operator $\Pi$ mit $\Pi^\dagger X \Pi = -X$ und $\Pi^\dagger = \Pi^{-1} = \Pi$ hermitisch und unitär.

$$\Pi |x\rangle = e^{i\delta} |-x\rangle, \quad \text{Konvention: } \delta = 0$$

$$\Pi |x\rangle = \pm |x\rangle$$

$$\Pi |l, l_3\rangle = (-1)^l |l, l_3\rangle$$

$$\Pi^\dagger P \Pi = -P$$

Paritätseigenkets $|\alpha\rangle$ und $|\beta\rangle$ und -eigenwerte $\pi_\alpha$ und $\pi_\beta$:

$$\langle\beta|X|\alpha\rangle = \langle\beta|\Pi^\dagger\Pi X \Pi^\dagger\Pi|\alpha\rangle = \langle\beta|\Pi^\dagger(-X)\Pi|\alpha\rangle$$
$$= -\pi_\alpha\pi_\beta \langle\beta|X|\alpha\rangle$$

Möglichkeiten:

1. $\pi_\alpha\pi_\beta = 1 \Rightarrow \langle\beta|X|\alpha\rangle = -\langle\beta|X|\alpha\rangle = 0$
2. $\pi_\alpha\pi_\beta = -1 \Rightarrow \langle\beta|X|\alpha\rangle \neq 0$

$$\langle n|X|n\rangle = -\pi_n^2 \langle n|X|n\rangle = -\langle n|X|n\rangle = 0$$

### Zeitumkehr

$$\text{Bewegungsumkehr: } \vec{x} \to \vec{x}$$
$$\vec{P} \to -\vec{P}$$

Operator $\Theta$ mit:

$$\Theta(a|\alpha\rangle + b|\beta\rangle) = a^*\Theta|\alpha\rangle + b^*\Theta|\beta\rangle$$

## 9 Näherungsmethoden

### Störungstheorie ohne Degeneration

Hamilton-Operator wird in bekannten $H_0$ und Störpotenzial $V$ aufgeteilt.

$$H = H_0 + \lambda V$$

Energiedifferenz zu ungestörten Energieniveaus:

$$\Delta_n = E_n - E_n^{(0)}$$

Erste Ordnung in Störungstheorie:

$$\Delta_n^{(1)} = V_{nn} = \left\langle n^{(0)} \middle| V \middle| k^{(0)} \right\rangle$$

$$|n^{(1)}\rangle = \sum_{n^{(0)} \neq k^{(0)}} \frac{V_{kn}}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} |k^{(0)}\rangle$$

Zweite Ordnung in Störungstheorie:

$$\Delta_n^{(2)} = \sum_{n^{(0)} \neq k^{(0)}} \frac{|V_{kn}|^2}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}}$$

$$|n^{(2)}\rangle = \sum_{n \neq k} \sum_{l \neq n} \frac{V_{kl} V_{ln}}{\left(E_n^{(0)} - E_k^{(0)}\right)\left(E_n^{(0)} - E_l^{(0)}\right)} |k^{(0)}\rangle$$
$$- \sum_{n \neq k} \frac{V_{nn} V_{kn}}{\left(E_n^{(0)} - E_k^{(0)}\right)^2} |k^{(0)}\rangle$$

Näherung:

$$|n\rangle = |n^{(0)}\rangle + \lambda |n^{(1)}\rangle + \lambda^2 |n^{(2)}\rangle + \ldots$$

$$\Delta_n = \lambda\Delta_n^{(1)} + \lambda^2\Delta_n^{(2)} + \ldots$$

### Variationsansatz