Formelsammlung zur Lehrveranstaltung
TP III: Quantenmechanik (SoSe 22)

- **relativistische Energie-Impuls-Beziehung**

$$E \;=\; \sqrt{p^2c^2 + m^2c^4}$$

- **de Broglie-Beziehung (Materiewellen)**

$$p \;=\; \frac{h}{\lambda} \;=\; \hbar k\,, \qquad E \;=\; h\nu \;=\; \hbar\omega$$

- **Eigenwerte und Eigenvektoren einer hermiteschen (2×2)-Matrix:**

Hermitesche (2×2)-Matrix: $\begin{pmatrix} a & c\,e^{i\gamma} \\ c\,e^{-i\gamma} & b \end{pmatrix}$ mit reellen a, b, c, γ.

Eigenwerte: $\lambda_- = k_+ - \sqrt{k_-^2 + c^2}, \qquad \lambda_+ = k_+ + \sqrt{k_-^2 + c^2};$

Eigenvektoren: $|\,\lambda_-\,\rangle = \begin{pmatrix} \cos\alpha\; e^{i\gamma/2} \\ -\sin\alpha\; e^{-i\gamma/2} \end{pmatrix}, \qquad |\,\lambda_+\,\rangle = \begin{pmatrix} \sin\alpha\; e^{i\gamma/2} \\ \cos\alpha\; e^{-i\gamma/2} \end{pmatrix}$, wobei

$$k_+ = \frac{a+b}{2}, \quad k_- = \frac{b-a}{2}, \quad \tan\alpha = \frac{\sqrt{k_-^2 + c^2} - k_-}{c}, \quad \tan 2\alpha = \frac{c}{k_-},$$

$$\cos\alpha = 1/\sqrt{1+\tan^2\alpha}, \qquad \sin\alpha = \tan\alpha/\sqrt{1+\tan^2\alpha}.$$

- **Eigenschaften der Delta-Funktion**

$$\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x\; f(x)\,\delta(x-a) \;=\; f(a)\,, \qquad \delta\big(g(x)\big) \;=\; \sum_i \frac{\delta(x-x_i)}{|g'(x_i)|} \quad \text{(Nullstellen } x_i\text{)}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x\; x^n\, f(x)\,\delta^{(n)}(x) \;=\; (-1)^n\, n! \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x\; f(x)\,\delta(x)$$

- **Schwarz'sche Ungleichungen**

$$|\langle\,\varphi\,|\,\psi\,\rangle|^2 \;\leq\; \langle\,\varphi\,|\,\varphi\,\rangle\,\langle\,\psi\,|\,\psi\,\rangle\,, \qquad |\,\langle\,\varphi\,|\,\widehat{\Omega}\,|\,\psi\,\rangle\,|^2 \;\leq\; |\,\langle\,\varphi\,|\,\widehat{\Omega}\,|\,\varphi\,\rangle\,|\,|\,\langle\,\psi\,|\,\widehat{\Omega}\,|\,\psi\,\rangle\,|$$

- **Kommutator und Antikommutator**

$$\Big[\,\widehat{\mathrm{A}}\,,\,\widehat{\mathrm{B}}\,\Big] \;=\; \widehat{\mathrm{A}}\widehat{\mathrm{B}} \;-\; \widehat{\mathrm{B}}\widehat{\mathrm{A}}\,, \qquad \Big[\widehat{\mathrm{A}},\widehat{\mathrm{B}}\Big]_+ \;=\; \widehat{\mathrm{A}}\widehat{\mathrm{B}} \;+\; \widehat{\mathrm{B}}\widehat{\mathrm{A}}; \qquad [\,\widehat{\mathrm{x}}_j,\,\widehat{\mathrm{p}}_k\,] \;=\; i\,\hbar\,\delta_{j,k}$$

- **Mittelwert, Schwankungsquadrat und Unschärfe eines Operators**

$$\langle\Omega\rangle_\psi \;=\; \langle\,\psi\,|\,\widehat{\Omega}\,|\,\psi\,\rangle\;, \qquad (\Delta\Omega)_\psi^2 \;=\; \langle\Omega^2\rangle_\psi \;-\; \langle\Omega\rangle_\psi^2\,, \qquad (\Delta\Omega)_\psi \;=\; \sqrt{(\Delta\Omega)_\psi^2}$$

- **Unschärferelation**

$$\Delta\Omega_1\,\Delta\Omega_2 \;\geq\; \frac{1}{2}\,|\,\langle\,\Big[\,\widehat{\Omega}_1\,,\,\widehat{\Omega}_2\Big]\,\rangle\,|\,, \qquad \Delta x_i\,\Delta p_j \;\geq\; \frac{\hbar}{2}\,\delta_{ij}$$

- **Matrixelementdarstellung eines Operators** (in VON-Basen $\{|\,\varphi\,\rangle\}, \{|\,\psi\,\rangle\}$)

$$\widehat{\Omega} \;=\; \sum_{\varphi,\psi} \langle\,\varphi\,|\,\widehat{\Omega}\,|\,\psi\,\rangle \;|\,\varphi\,\rangle\langle\,\psi\,| \;=\; \sum_{\varphi,\psi} \Omega_{\varphi\psi} \;|\,\varphi\,\rangle\langle\,\psi\,|$$

- **Spektraldarstellung und Funktion eines Operators** ($\widehat{\Omega}\,|\,i\,\rangle = \lambda_i\,|\,i\,\rangle$)

$$\widehat{\Omega} \;=\; \sum_i \lambda_i \;|\,i\,\rangle\langle\,i\,| \;, \qquad f(\widehat{\Omega}) \;=\; \sum_i f(\lambda_i) \;|\,i\,\rangle\langle\,i\,|$$

- **Ortsoperator und -eigenfunktionen (1D)**

$$\text{Ortsdarstellung:} \quad \widehat{\mathrm{q}} \to q \;, \qquad \langle\,q\,|\,q'\,\rangle \;=\; \varphi_q(q') \;=\; \delta(q-q')$$

$$\text{Impulsdarstellung:} \quad \widehat{\mathrm{q}} \to i\hbar\,\frac{\partial}{\partial p} \;, \quad \langle\,p\,|\,q\,\rangle \;=\; \widetilde{\varphi}_q(p) \;=\; \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\,\mathrm{e}^{-ipq/\hbar}$$

- **Impulsoperator und -eigenfunktionen (1D)**

$$\text{Ortsdarstellung:} \quad \widehat{\mathrm{p}} \to -i\hbar\frac{\partial}{\partial q} \;, \quad \langle\,q\,|\,p\,\rangle \;=\; \psi_p(q) \;=\; \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\,\mathrm{e}^{ipq/\hbar}$$

$$\text{Impulsdarstellung:} \quad \widehat{\mathrm{p}} \to p \;, \qquad \langle\,p\,|\,p'\,\rangle \;=\; \widetilde{\psi}_p(p') \;=\; \delta(p-p')$$

- **Zusammenhang Orts- und Impulswellenfunktion (1D)**

$$\widetilde{\Psi}(p) \;=\; \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}q\; \Psi(q)\;\mathrm{e}^{-ipq/\hbar} \;, \qquad \Psi(q) \;=\; \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}p\; \widetilde{\Psi}(p)\;\mathrm{e}^{ipq/\hbar}$$

- **Schrödinger-Gleichung**

$$\text{zeitabhängig:} \quad i\hbar\,\frac{\partial}{\partial t}\,|\,\Psi(t)\,\rangle \;=\; \widehat{\mathrm{H}}\;|\,\Psi(t)\,\rangle$$

$$\text{zeitunabhängig:} \quad \widehat{\mathrm{H}}\;|\,\Psi_n\,\rangle \;=\; E_n\;|\,\Psi_n\,\rangle$$

$$\text{Ortsdarstellung:} \quad i\hbar\,\frac{\partial}{\partial t}\,\Psi(q;t) \;=\; \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\,\frac{\partial^2}{\partial q^2} \;+\; V(q)\right]\;\Psi(q;t)$$

$$\text{Impulsdarstellung:} \quad i\hbar\,\frac{\partial}{\partial t}\,\widetilde{\Psi}(p;t) \;=\; \left[\frac{p^2}{2m} \;+\; V\left(i\hbar\,\frac{\partial}{\partial p}\right)\right]\;\widetilde{\Psi}(p;t)$$

- **Kontinuitätsgleichung und Wahrscheinlichkeitsstromdichte**

$$\frac{\partial}{\partial t}\,|\psi(\vec{r};t)|^2 \;+\; \vec{\nabla}\cdot\vec{j}(\vec{r},t) \;=\; 0$$

$$\vec{j}(\vec{r},t) \;=\; \frac{i\hbar}{2m}\left[\,\psi(\vec{r};t)\,\vec{\nabla}\,\psi^*(\vec{r};t) \;-\; \psi^*(\vec{r};t)\,\vec{\nabla}\,\psi(\vec{r};t)\,\right]$$

- **Freies Teilchen**

$$\text{1D:} \qquad \Psi(q;t) \;=\; \int_{-\infty}^{+\infty} c(p)\;\varphi_p(q;t)\;\mathrm{d}p \;=\; \int_{-\infty}^{+\infty} c(p)\;e^{\frac{i}{\hbar}\,(pq-Et)}\;\mathrm{d}p$$

$$\text{3D:} \qquad \Psi(\vec{r};t) \;=\; \iiint_{-\infty}^{+\infty} c(\vec{p})\;\varphi_p(\vec{r};t)\;\mathrm{d}V_p \;=\; \iiint_{-\infty}^{+\infty} c(\vec{p})\;e^{\frac{i}{\hbar}\,(\vec{p}\cdot\vec{r}-Et)}\;\mathrm{d}V_p$$

- **Transmission durch Potentialbarriere (Höhe V_0, Breite L, Teilchenenergie E)**

$$T = \frac{4E(E-V_0)}{4E(E-V_0) + V_0^2 \sin^2(kL)} \qquad k = \begin{cases} \sqrt{2m(E-V_0)}/\hbar & \text{für } E > V_0 \\ i\sqrt{2m(V_0-E)}/\hbar & \text{für } E < V_0 \end{cases}$$

- **Teilchen im unendlich hohen Kastenpotential (1D)** ($0 \le q \le L$)

$$\text{Energieniveaus:} \quad E = \frac{1}{2m}\left(\frac{n\pi\hbar}{L}\right)^2 \qquad (n = 1, 2, 3, \dots)$$

$$\text{Wellenfunktion:} \quad \psi_n(q) = \sqrt{\frac{2}{L}}\,\sin\left(\frac{n\pi}{L}\,q\right)$$

- **Harmonischer Oszillator (1D)** (Masse m, Frequenz ω)

Hamilton-Operator (in Ortsdarstellung): $\hat{\mathrm{H}} = -\frac{\hbar^2}{2\,m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} + \frac{m\,\omega^2\,x^2}{2}$.

Eigenwerte und -funktionen: $E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right), \quad n = 0, 1, \dots$

$$\psi_n(x) = \psi_n(x;a) = \left[\sqrt{\pi}\,2^n\,n!\,a\right]^{-1/2}\,\mathrm{H}_n\left(\frac{x}{a}\right)\,e^{-\frac{x^2}{2a^2}}, \qquad a^2 = \frac{\hbar}{m\omega}.$$

Matrixelemente: $\langle\,\psi_n\,|\,x\,|\,\psi_m\,\rangle = \frac{a}{\sqrt{2}} \times \begin{cases} \sqrt{n} & \text{für} \quad m = n-1 \\ \sqrt{n+1} & \text{für} \quad m = n+1 \\ 0 & \text{für} \quad \text{andere } m \end{cases}$.

$$\langle\,\psi_n\,|\,x^2\,|\,\psi_m\,\rangle = \frac{a^2}{2} \times \begin{cases} \sqrt{n(n-1)} & \text{für} \quad m = n-2 \\ 2n+1 & \text{für} \quad m = n \\ \sqrt{(n+1)(n+2)} & \text{für} \quad m = n+2 \\ 0 & \text{für} \quad \text{andere } m \end{cases}.$$

- **Hermite-Polynome**

$$H_n(x) = (-1)^n\,\mathrm{e}^{x^2}\,\frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}x^n}\,\mathrm{e}^{-x^2} \qquad (n = 0, 1, 2, \dots)$$

$$H_{n+1}(x) = 2x\,H_n(x) - 2n\,H_{n-1}(x)\,, \qquad \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\,H_n(x) = 2n\,H_{n-1}(x)$$

$$H_0(x) = 1\,, \qquad H_1(x) = 2x\,, \qquad H_2(x) = 4x^2 - 2\,, \qquad H_3(x) = 8x^3 - 12x$$

- **Auf- und Absteigeoperatoren des harmonischen Oszillators** ($\hat{\mathrm{n}}\,|\,n\,\rangle = n\,|\,n\,\rangle$)

$$\hat{a} := \sqrt{\frac{m\,\omega}{2\,\hbar}}\left(\hat{\mathrm{q}} + \frac{i}{m\,\omega}\,\hat{\mathrm{p}}\right), \quad \hat{a}^\dagger := \sqrt{\frac{m\,\omega}{2\,\hbar}}\left(\hat{\mathrm{q}} - \frac{i}{m\,\omega}\,\hat{\mathrm{p}}\right), \quad \hat{\mathrm{H}} = \hbar\omega\left(\hat{\mathrm{n}} + \frac{1}{2}\right)$$

$$\hat{a}\,|\,n\,\rangle = \sqrt{n}\,|\,n-1\,\rangle\,, \quad \hat{a}^\dagger\,|\,n\,\rangle = \sqrt{n+1}\,|\,n+1\,\rangle\,, \quad [\,\hat{a},\,\hat{a}^\dagger\,] = 1\,, \quad \hat{n} := \hat{a}^\dagger\,\hat{a}$$

- **Kohärente Zustände des harmonischen Oszillators**

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

- **Kugelflächenfunktionen**

$$Y_\ell^m(\theta,\varphi) \;=\; (-1)^{(m+|m|)/2} \left[\frac{2\ell+1}{4\pi}\,\frac{(\ell-|m|)!}{(\ell+|m|)!}\right]^{1/2} \cdot P_\ell^{|m|}(\cos\theta)\cdot \mathrm{e}^{im\varphi}$$
$$(\ell = 0,1,2,\dots\;; \quad m = -\ell, -\ell+1, \dots, \ell-1, \ell)$$
$$Y_0^0 \;=\; \frac{1}{\sqrt{4\pi}}\,, \qquad Y_1^0 \;=\; \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\,\cos\theta\,, \qquad Y_1^{\pm1} \;=\; \mp\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\,\sin\theta\cdot\mathrm{e}^{\pm i\varphi}$$

- **assoziierte Legendre-Funktionen und Legendre-Polynome**

$$P_\ell^m(x) \;=\; (1-x^2)^{m/2}\,\frac{\mathrm{d}^m}{\mathrm{d}x^m}\,P_\ell(x)\,, \qquad P_\ell(x) \;=\; \frac{(-1)^\ell}{2^\ell\,\ell!}\,\frac{\mathrm{d}^\ell(1-x^2)^\ell}{\mathrm{d}x^\ell}$$
$$(\ell = 0,1,2,\dots\;; \quad m = 0,1,2,\dots,\ell)$$
$$(\ell+1)\,P_{\ell+1} \;=\; (2\ell+1)\,x\,P_\ell \;-\; \ell P_{\ell-1}\,, \qquad (1-x^2)\,\frac{\mathrm{d}P_\ell}{\mathrm{d}x} \;=\; \ell\,(\,P_{\ell-1} \;-\; xP_\ell\,)$$

- **Sphärische Bessel-, von Neumann- und Hankel-Funktionen**

$$j_\ell(z) \;=\; (-z)^\ell \left[\frac{1}{z}\,\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}z}\right]^\ell \frac{\sin z}{z}\,, \quad j_0(z) \;=\; \frac{\sin z}{z}\,, \quad j_1(z) \;=\; \frac{\sin z}{z^2} - \frac{\cos z}{z}$$
$$n_\ell(z) \;=\; (-1)^{\ell+1}\,z^\ell \left[\frac{1}{z}\,\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}z}\right]^\ell \frac{\cos z}{z}\,, \quad n_0(z) = -\frac{\cos z}{z}\,, \quad n_1(z) = -\frac{\cos z}{z^2} - \frac{\sin z}{z}$$
$$h_\ell^{(+)}(z) = j_\ell(z) \;+\; i n_\ell(z)\,, \qquad h_\ell^{(-)}(z) = j_\ell(z) \;-\; i n_\ell(z)$$

- **Entwicklung von ebenen Wellen in Kugelflächenfunktionen**

$$\mathrm{e}^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \;=\; 4\pi \sum_{\ell=0}^{\infty}\sum_{m=-\ell}^{+\ell} i^\ell\, j_\ell(kr)\,\left[\,Y_\ell^m(\theta_k,\varphi_k)\,\right]^* \cdot Y_\ell^m(\theta_r,\varphi_r)$$
$$\mathrm{e}^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \;=\; \mathrm{e}^{ikr\cos\theta} \;=\; \sum_{\ell=0}^{\infty} i^\ell\,(2\ell+1)\,j_\ell(kr)\,P_\ell(\cos\theta) \qquad \text{für } \vec{k}\parallel\hat{e}_z$$

- **Schrödinger-Gleichung für kugelsymmetrisches Potential** (reduzierte Masse μ, Drehimpulsvektoroperator $\widehat{\mathbf{L}}$)

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} \;+\; \frac{2}{r}\,\frac{\partial}{\partial r}\right) \;+\; \frac{\widehat{\mathrm{L}}^2}{2\mu r^2} \;+\; V(r)\right]\phi(r,\theta,\varphi) \;=\; E\,\phi(r,\theta,\varphi)$$

Separationsansatz: $\phi(r,\theta,\varphi) \;=\; \widetilde{R}(r)\cdot Y_\ell^m(\theta,\varphi) \;=\; \dfrac{R(r)}{r}\cdot Y_\ell^m(\theta,\varphi)$

Radialgleichung: $\left[-\dfrac{\hbar^2}{2\mu}\,\dfrac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2} \;+\; \dfrac{\hbar^2\ell(\ell+1)}{2\mu r^2} \;+\; V(r)\right] R_\ell(r) \;=\; E_\ell\,R_\ell(r)$

- **Freies Teilchen (3D) in Kugelkoordinaten**

Schrödinger-Gleichung: $\left[\dfrac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}z^2} + \dfrac{2}{z}\,\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}z} - \dfrac{\ell(\ell+1)}{z^2} + 1\right]\widetilde{R}_\ell(z) \;=\; 0 \qquad (z = kr)$

allgemeine Lösungen: $\widetilde{R}_\ell(r) \;=\; A\,j_\ell(kr) \;+\; B\,n_\ell(kr)$

$\widetilde{R}_\ell(r) \;=\; C\,h_\ell^{(+)}(kr) \;+\; D\,h_\ell^{(-)}(kr)$

- **Wasserstoffartiges Atom oder wasserstoffartiges Ion** (Kernladungszahl Z, gebundene Zustände; nicht-relativistische Beschreibung)

$$\text{Energieniveaus:} \quad E_n = -\frac{Z^2\,\hbar^2}{2\,\mu\,a_\mu^2\,n^2} \qquad (n = 1, 2, 3, \dots)$$

$$\text{Wellenfunktion:} \quad \psi_{n\ell m}(r,\theta,\varphi) = \widetilde{R}_{n\ell}(r)\cdot Y_\ell^m(\theta,\varphi)$$

$$\widetilde{R}_{n\ell}(r) = -\left[\left(\frac{\rho}{r}\right)^3 \frac{(n-\ell-1)!}{2n[(n+\ell)!]^3}\right]^{1/2} \cdot \mathrm{e}^{-\rho/2}\cdot\rho^\ell\cdot L_{n-\ell-1}^{2\ell+1}(\rho)$$

$$\text{mit} \quad \rho = \frac{2Zr}{na_\mu}\,, \quad a_\mu = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{\mu e^2} \quad (\mu\ldots\text{reduzierte Masse})$$

$$(\ell = 0, 1, 2, \dots, n-1\,; \quad m = -\ell, -\ell+1, \dots, \ell-1, \ell)$$

$$\widetilde{R}_{10}(r) = 2\left(\frac{Z}{a_\mu}\right)^{3/2} \mathrm{e}^{-Zr/a_\mu}\,, \qquad \widetilde{R}_{20}(r) = 2\left(\frac{Z}{2a_\mu}\right)^{3/2}\left(1-\frac{Zr}{2a_\mu}\right)\mathrm{e}^{-Zr/2a_\mu}$$

$$\widetilde{R}_{21}(r) = \frac{1}{\sqrt{3}}\left(\frac{Z}{2a_\mu}\right)^{3/2}\left(\frac{Zr}{a_\mu}\right)\mathrm{e}^{-Zr/2a_\mu}$$

- **Zugeordnete Laguerre-Polynome**

$$L_r^s(x) \;=\; \sum_{k=0}^{r-s}(-1)^{k+s}\,\frac{(r!)^2}{k!(k+s)!(r-k-s)!}\,x^k$$

- **Dichteoperator $\hat\rho$**

$$\hat\rho = \sum_i p_i\;|\,\psi_i\,\rangle\,\langle\,\psi_i\,| \qquad \text{mit den statistischen Gewichten } p_i$$

- **Erwartungswert einer Observablen $\boldsymbol{A}$**

$$\langle\,A\,\rangle \;=\; \mathrm{Sp}\,\{\,\hat\rho\,\hat{\mathrm{A}}\,\}\,, \qquad \text{es gilt zudem} \quad \mathrm{Sp}\left\{\hat{\mathrm{A}}\hat{\mathrm{B}}\hat{\mathrm{C}}\right\} \;=\; \mathrm{Sp}\left\{\hat{\mathrm{B}}\hat{\mathrm{C}}\hat{\mathrm{A}}\right\} \;=\; \mathrm{Sp}\left\{\hat{\mathrm{C}}\hat{\mathrm{A}}\hat{\mathrm{B}}\right\}$$

- **Reduzierter Dichteoperator von $\hat\rho$ (Freiheitsgrade/Teilchen A und B)**

$$\hat\rho_A \;:=\; \sum_j\,\langle\,j(B)\,|\;\hat\rho\;|\,j(B)\,\rangle_B \;\equiv\; \mathrm{Sp_B}\,\{\hat\rho\} \qquad \text{mit} \;\sum_{\mathrm{j}}\,|\,\mathrm{j(B)}\,\rangle\,\langle\,\mathrm{j(B)}\,| \;=\; \mathbb{1}_{\mathrm{B}}$$

- **Von-Neumann-Gleichung**

$$\frac{\partial}{\partial t}\,\hat\rho \;=\; -\,\frac{i}{\hbar}\,\left[\,\hat{\mathrm{H}},\hat\rho\,\right]$$

- **Allgemeiner Drehimpulsoperator $\hat{\mathbf{J}}$** (Beispiel: $\hat{\mathbf{J}} = \hat{\mathbf{L}}$, $j \to \ell$)

$$\hat{\mathbf{J}} \;=\; \hat{\mathbf{J}}^\dagger, \quad \hat{\mathbf{J}}\times\hat{\mathbf{J}} \;=\; i\hbar\,\hat{\mathbf{J}}$$

Charakteristische Kommutatoreigenschaften

$$[\hat{\mathbf{J}}^2,\hat{\mathrm{J}}_x] \;=\; 0, \quad [\hat{\mathbf{J}}^2,\hat{\mathrm{J}}_y] \;=\; 0, \quad [\hat{\mathbf{J}}^2,\hat{\mathrm{J}}_z] \;=\; 0$$

$$[\hat{\mathrm{J}}_x,\hat{\mathrm{J}}_x] \;=\; 0, \quad [\hat{\mathrm{J}}_x,\hat{\mathrm{J}}_y] \;=\; i\hbar\,\hat{\mathrm{J}}_z, \quad [\hat{\mathrm{J}}_x,\hat{\mathrm{J}}_z] \;=\; -\,i\hbar\,\hat{\mathrm{J}}_y \quad \text{und zyklische Relationen.}$$

Eigenwertgleichungen:

$$\hat{\mathbf{J}}^2 \; |\, j\, m\, \rangle = j(j+1)\,\hbar^2 \; |\, j\, m\, \rangle\,, \quad \hat{\mathrm{J}}_z \; |\, j\, m\, \rangle = m\,\hbar \; |\, j\, m\, \rangle\,, \quad j \geq 0, \quad -j \leq m \leq j.$$

Auf- und Absteigeoperatoren:

$$\hat{\mathrm{J}}_+ = \hat{\mathrm{J}}_x + i\hat{\mathrm{J}}_y, \quad \hat{\mathrm{J}}_- = \hat{\mathrm{J}}_x - i\hat{\mathrm{J}}_y, \qquad \hat{\mathrm{J}}_- = \hat{\mathrm{J}}_+^\dagger, \quad \text{und} \quad \hat{\mathrm{J}}_+ = \hat{\mathrm{J}}_-^\dagger.$$

$$\hat{\mathrm{J}}_+\hat{\mathrm{J}}_- = \hat{\mathbf{J}}^2 - \hat{\mathrm{J}}_z^2 + \hbar\hat{\mathrm{J}}_z, \qquad \hat{\mathrm{J}}_-\hat{\mathrm{J}}_+ = \hat{\mathbf{J}}^2 - \hat{\mathrm{J}}_z^2 - \hbar\hat{\mathrm{J}}_z, \qquad [\hat{\mathrm{J}}_+, \hat{\mathrm{J}}_-] = 2\hbar\hat{\mathrm{J}}_z.$$

$$\hat{\mathrm{J}}_\pm \; |\, j\, m\, \rangle = \sqrt{j(j+1) - m(m\pm 1)}\,\hbar \; |\, j\, m \pm 1\, \rangle\,.$$

- **Kopplung von Drehimpulsen $\hat{\mathbf{J}}$**

Ungekoppelte Basis (Eigenvektoren von $\hat{\mathbf{J}}_1^2, \hat{\mathrm{J}}_{1,z}, \hat{\mathbf{J}}_2^2$ und $\hat{\mathrm{J}}_{2,z}$):

$$|\, j_1, m_1\, \rangle \otimes |\, j_2, m_2\, \rangle \equiv |\, j_1, m_1; j_2, m_2\, \rangle$$

Gekoppelte Basis (Eigenvektoren von $\hat{\mathbf{J}}_1^2, \hat{\mathbf{J}}_2^2, \hat{\mathbf{J}}^2$ und $\hat{\mathrm{J}}_z$, mit $\hat{\mathbf{J}} = \hat{\mathbf{J}}_1 + \hat{\mathbf{J}}_2$):

$$|\, j_1, j_2; J, M\, \rangle\,, \qquad |j_1 - j_2| \leq J \leq j_1 + j_2, \quad -J \leq M \leq +J,$$

Es gilt: $\quad \hat{\mathbf{J}}_1 \cdot \hat{\mathbf{J}}_2 = \hat{\mathbf{J}}_2 \cdot \hat{\mathbf{J}}_1 = \frac{1}{2}\left(\hat{\mathbf{J}}^2 - \hat{\mathbf{J}}_1^2 - \hat{\mathbf{J}}_2^2\right) = \hat{\mathrm{J}}_{1z}\hat{\mathrm{J}}_{2z} + \frac{1}{2}\left(\hat{\mathrm{J}}_{1+}\hat{\mathrm{J}}_{2-} + \hat{\mathrm{J}}_{1-}\hat{\mathrm{J}}_{2+}\right)$

Basiswechsel:

$$|\, j_1, j_2; J, M\, \rangle \; = \sum_{m_1=-j_1}^{j_1} \; \sum_{m_2=-j_2}^{j_2} C^{J,M}_{j_1,m_1;j_2,m_2} \, |\, j_1, m_1; j_2, m_2\, \rangle \quad ,$$

$$|\, j_1, m_1; j_2, m_2\, \rangle \; = \sum_{J=|j_1-j_2|}^{j_1+j_2} \; \sum_{M=-J}^{J} C^{J,M}_{j_1,m_1;j_2,m_2} \, |\, j_1, j_2; J, M\, \rangle \quad ,$$

mit den Clebsch-Gordan-Koeffizienten: $\quad C^{J,M}_{j_1,m_1;j_2,m_2} \; := \; \langle\, j_1, m_1; j_2, m_2 \,|\, j_1, j_2; J, M\, \rangle\,,$

z. B. $\quad C^{\ell+\frac{1}{2},m}_{\ell,m\mp\frac{1}{2};\frac{1}{2},\pm\frac{1}{2}} \; = \; \sqrt{\dfrac{\ell \pm m + 1/2}{2\ell+1}}, \qquad C^{\ell-\frac{1}{2},m}_{\ell,m\mp\frac{1}{2};\frac{1}{2},\pm\frac{1}{2}} \; = \; \pm\sqrt{\dfrac{\ell \mp m + 1/2}{2\ell+1}}\,.$

Rekursionsbeziehungen (mit $A(J,M) = \sqrt{J(J+1) - M(M+1)}$):

$$\begin{aligned} A(j_1, m_1 - 1)\, C^{j,m}_{j_1,m_1-1;j_2,m_2} \; &+ \; A(j_2, m_2 - 1)\, C^{j,m}_{j_1,m_1;j_2,m_2-1} &= A(j,m)\, C^{j,m+1}_{j_1,m_1;j_2,m_2} \\ A(j_1, m_1)\, C^{j,m}_{j_1,m_1+1;j_2,m_2} \; &+ \; A(j_2, m_2)\, C^{j,m}_{j_1,m_1;j_2,m_2+1} &= A(j,m-1)\, C^{j,m-1}_{j_1,m_1;j_2,m_2} \end{aligned}$$

Wigner-3j-Symbole: $\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & J \\ m_1 & m_2 & M \end{pmatrix} \; := \; \dfrac{(-1)^{j_1-j_2-M}}{\sqrt{2\,J\,+\,1}}\; C^{J,M}_{j_1,m_1;j_2,m_2}$

- **Fundamentale physikalische Konstanten**

Vakuumlichtgeschwindigkeit:	$c \;\approx\; 3 \cdot 10^8 \text{ ms}^{-1}$
Elementarladung:	$e \;\approx\; 1{,}6 \cdot 10^{-19} \text{ C}$
Planck'sches Wirkungsquantum:	$h \;\approx\; 6{,}63 \cdot 10^{-34} \text{ Js}$
Boltzmann-Konstante:	$k_B \;\approx\; 1{,}38 \cdot 10^{-23} \text{ JK}^{-1}$
Ruhemasse des Elektrons:	$m_e \;\approx\; 9{,}11 \cdot 10^{-31} \text{ kg}$
Ruhemasse des Protons/Neutrons:	$m_{p/n} \;\approx\; 1{,}67 \cdot 10^{-27} \text{ kg}$
Permittivität des Vakuums:	$\varepsilon_0 \;\approx\; 8{,}85 \cdot 10^{-12} \text{ CV}^{-1}\text{m}^{-1}$