

# Theoretische Physik IV

613348

24. Februar 2025

## Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Addition von Drehimpulsen</b>	<b>2</b>
1.1	Manuelle Konstruktion . . . . .	3
<b>2</b>	<b>Hellmann-Feynman-Theorem</b>	<b>4</b>
<b>3</b>	<b>Beweise Dirac-Notation</b>	<b>5</b>
<b>4</b>	<b>Bilder</b>	<b>6</b>
4.1	Schrödinger-Bild . . . . .	6
4.2	Heisenberg-Bild . . . . .	6
4.3	Dirac-Bild . . . . .	6
<b>5</b>	<b>Zeitunabhängige Störungstheorie</b>	<b>7</b>
5.1	Nichtentartete Zustände . . . . .	7
5.2	Entartete Zustände . . . . .	9
<b>6</b>	<b>WKB-Näherung</b>	<b>11</b>
6.1	Bohr-Sommerfeld-Quantisierungsbedingung . . . . .	11
<b>7</b>	<b>Variationsmethode</b>	<b>14</b>
<b>8</b>	<b>Zeitabhängige Störungstheorie</b>	<b>15</b>
<b>9</b>	<b>Streutheorie</b>	<b>17</b>
9.1	Born-Approximation . . . . .	17
<b>10</b>	<b>Relativistische Quantenmechanik</b>	<b>18</b>
10.1	Gamma-Matrizen . . . . .	18
<b>11</b>	<b>Stichwortverzeichnis</b>	<b>21</b>

## 1 Addition von Drehimpulsen

Ein Zustand aus zwei Drehimpulsen kann in zwei verschiedenen Basen ausgedrückt werden: In der Produktbasis  $|j_1, m_1, j_2, m_2\rangle \equiv |j_1, m_1\rangle \otimes |j_2, m_2\rangle$  und der "Gesamtbasis"  $|j_1, j_2, j, m\rangle_j \equiv |j, m\rangle$ .

Für die Werte  $j$  und  $m$  gelten dabei folgende Regeln.

$$j = |j_1 - j_2|, |j_1 - j_2 + 1|, \dots, |j_1 + j_2 - 1|, |j_1 + j_2| \quad (1)$$

$$m = -j, -j + 1, \dots, j - 1, j \quad (2)$$

Der Basiswechsel zwischen  $|j, m\rangle$  und  $|j_1, m_1\rangle \otimes |j_2, m_2\rangle$  wird über die Clebsch-Gordan-Koeffizienten beschrieben, die leicht aus der folgenden Grafik bestimmt werden können.

hello

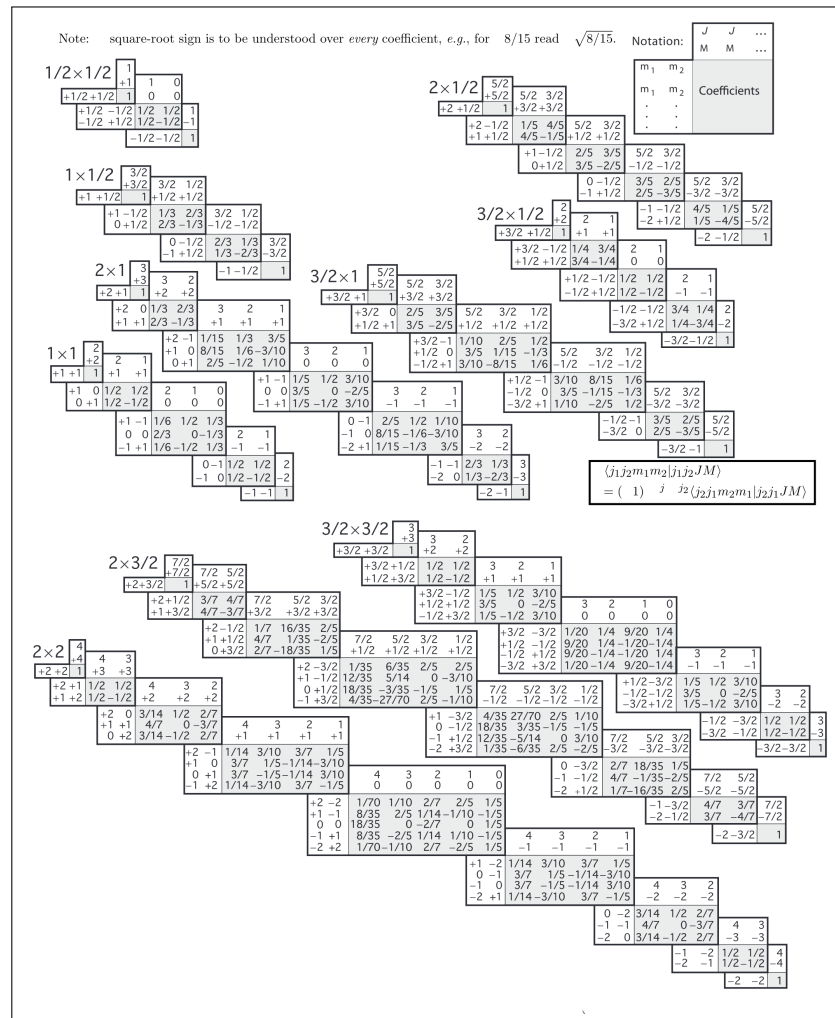


Abbildung 1: Clebsch-Gordan-Koeffizienten

## 1.1 Manuelle Konstruktion

Die Zustände können aber auch manuell konstruiert werden, indem vom Zustand mit höchstem  $m$  begonnen wird (also  $|j, j\rangle$ ), da für ihn die Darstellung in beiden Basen eindeutig ist. Dann wird mit dem Leiteroperator  $\hat{J}_-$  in der jeweiligen Basis auf ihn gewirkt und die Ergebnisse gleichgesetzt.

Alternativ kann auch beim Zustand mit kleinstem  $m =$  (also  $|j, -j\rangle$ ) begonnen und mit  $\hat{J}_+$  darauf gewirkt werden.

Beispiel	
Kopplung von $j_1 = 1/2$ und $j_2 = 1/2$ .	
Gesamtdrehimpulsbasis $ j_1, j_2, j, m\rangle_j \equiv  j, m\rangle$	Produktbasis $ j_1, m_1\rangle \otimes  j_2, m_2\rangle$
$ 1, 1\rangle$	$ \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle \otimes  \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle$
$\hat{J}_-  1, 1\rangle = \sqrt{(1-1+1)(1+1)}  1, 0\rangle$ $= \sqrt{2}  1, 0\rangle$	$\hat{J}_-  \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle \otimes  \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle =$ $= (\hat{J}_- \otimes \mathbb{1} + \mathbb{1} \otimes \hat{J}_-)  \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle \otimes  \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle =$ $= \hat{J}_-  \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle \otimes  \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle +  \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle \otimes \hat{J}_-  \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle =$ $=  \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle \otimes  \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle +  \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle \otimes  \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle$
$\stackrel{\sqrt{2}}{\Leftrightarrow}  1, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(  \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle \otimes  \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle +  \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle \otimes  \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle \right)$	
$\hat{J}_-  1, 0\rangle = \sqrt{(1-0+1)(1+0)}  1, -1\rangle$ $= \sqrt{2}  1, -1\rangle$	$\hat{J}_- \frac{1}{\sqrt{2}} \left(  \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle \otimes  \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle +  \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle \otimes  \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle \right) =$ $= \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{J}_- \otimes \mathbb{1} + \mathbb{1} \otimes \hat{J}_-) (...) = ... =$ $= \frac{2}{\sqrt{2}} \left(  \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle \otimes  \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle \right)$
$\stackrel{\sqrt{2}}{\Leftrightarrow}  1, -1\rangle =  \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle \otimes  \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle$	

Die Zustände  $|21\rangle$  und  $|11\rangle$  müssen orthogonal zueinander sein. Ist  $|21\rangle$  bestimmt, so kann man ein Vorzeichen ändern und die Koeffizienten vertauschen.

## 2 Hellmann-Feynman-Theorem

Hängen Hamilton-Operator  $\hat{H}_\lambda$ , Eigenzustand  $|n_\lambda\rangle$  und Eigenwert  $E_\lambda$  von einem Parameter  $\lambda$  ab, so gilt

$$\frac{dE_n(\lambda)}{d\lambda} = \langle n(\lambda) | \frac{dH_\lambda}{d\lambda} | n(\lambda) \rangle \quad (3)$$

Mit diesem Theorem können z.B. Erwartungswerte relativ einfach berechnet werden.

### Beispiel

ges:  $\langle n, l, m | \frac{1}{r^2} | n, l, m \rangle$  für ein Wasserstoffatom

Lös: Wähle  $\lambda = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}$  als Parameter, da dieser sowohl in Hamilton-Operator, Energien und Eigenzuständen des Wasserstoffatoms vorkommt.

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \frac{\hat{p}^2}{2m} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r} \\ \Rightarrow \hat{H}_\lambda &= \frac{\hat{p}^2}{2m} - \frac{\lambda}{r} \\ E_n &= -\frac{m}{2n^2} \alpha^2 \stackrel{\text{a}}{=} -\frac{m}{2n^2} \left( \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar} \right)^2 \\ \Rightarrow E_n(\lambda) &= -\frac{m}{2n^2 \hbar^2} \lambda^2 \end{aligned}$$

Einsetzen in das Hellmann-Feynman-Theorem liefert:

$$\begin{aligned} \frac{dE_n(\lambda)}{d\lambda} &= \langle n(\lambda) | \frac{dH_\lambda}{d\lambda} | n(\lambda) \rangle \\ \stackrel{E_n(\lambda), \hat{H}_\lambda}{\Rightarrow} \frac{d}{d\lambda} \left( -\frac{m}{2n^2} \left( \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar} \right)^2 \right) &= \langle n, l, m | \frac{d}{d\lambda} \left( \frac{\hat{p}^2}{2m} - \frac{\lambda}{r} \right) | n, l, m \rangle \\ &\Rightarrow -\frac{2m}{2n^2 \hbar^2} \lambda = \langle n, l, m | 0 - \frac{1}{r} | n, l, m \rangle \\ \Leftrightarrow \langle n, l, m | \frac{1}{r} | n, l, m \rangle &= +\frac{2m}{2n^2 \hbar^2} \lambda \\ &\stackrel{\text{a}}{=} \frac{2m}{2n^2 \hbar^2} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} = \frac{1}{a_0 n^2} \end{aligned}$$

wobei im letzten Schritt der Bohr-Radius erkannt wurde.

### 3 Beweise Dirac-Notation

- **1 einfügen**

An Terme kann die Einheitsmatrix  $\mathbb{1}$  in Form von vollständigen Systemen multipliziert werden, um vor allem Eigenwertgleichungen auszunutzen.

$$\mathbb{1} = \sum_i |i\rangle \langle i|$$

$$\mathbb{1} = \int |i\rangle \langle i| \, di$$

Beispiel

$$\langle x|\hat{p}^2|\psi\rangle \stackrel{\mathbb{1}}{=} \int \langle x|\hat{p}^2|p\rangle \langle p|\psi\rangle \, dp \stackrel{\hat{p}|p\rangle=p|p\rangle}{=} p^2 \int \langle x|p\rangle \langle p|\psi\rangle \, dp = \dots$$

- **$\delta$ -Funktionen erkennen**

Die  $\delta$ -Funktion ausgedrückt mittels Exponentialfunktion ist im Allgemeinen die erste Form. In der QM taucht sie häufig in der zweiten Form (mit einem  $\hbar$ ) auf.

$$\delta(x-a) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ik(x-a)} \, dk$$

$$\delta(x-a) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\frac{k}{\hbar}(x-a)} \, dk$$

Beispiel

geg:  $\langle x|p\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{i\frac{p}{\hbar}x}$ ; ges:  $\langle x|\hat{p}|x'\rangle$

$$\begin{aligned} \langle x|\hat{p}|x'\rangle &\stackrel{\mathbb{1}}{=} \int \langle x|\hat{p}|p\rangle \langle p|x'\rangle \, dp \stackrel{\hat{p}|p\rangle=p|p\rangle}{=} p \int \langle x|p\rangle \langle p|x'\rangle \, dp = p \int \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{i\frac{p}{\hbar}x} \cdot \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{-i\frac{p}{\hbar}x'} \, dp = \\ &= \frac{1}{2\pi\hbar} \int \underbrace{p \cdot e^{i\frac{p}{\hbar}(x-x')}}_{=\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} e^{i\frac{p}{\hbar}(x-x')}} \, dp = \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \frac{1}{2\pi\hbar} \int e^{i\frac{p}{\hbar}(x-x')} \, dp \stackrel{\delta(x-x')}{=} \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \delta(x-x') \end{aligned}$$

## 4 Bilder

### 4.1 Schrödinger-Bild

Im Schrödinger-Bild entwickelt man den Anfangszustand  $|\psi(t_0)\rangle$  mit dem Zeitentwicklungsoperator (Dyson-Reihe), während der Operator unverändert bleibt.

$$\hat{A}_S = \hat{A} \quad (4)$$

$$|\psi_S(t)\rangle = U(t, t_0) |\psi(t_0)\rangle \quad (5)$$

$$\Rightarrow \langle \hat{A} \rangle = \langle \psi_S(t) | \hat{A}_S | \psi_S(t) \rangle = \langle \psi(t_0) U^\dagger(t, t_0) | \hat{A} | U(t, t_0) \psi(t_0) \rangle \quad (6)$$

### 4.2 Heisenberg-Bild

Im Heisenberg-Bild verwendet man einen zeitabhängigen Operator und lässt den Zustand unverändert.

$$|\psi_H(t)\rangle = |\psi(t_0)\rangle \quad (7)$$

$$\hat{A}_H = U^\dagger(t, t_0) \hat{A} U(t, t_0) \quad (8)$$

$$\Rightarrow \langle \hat{A} \rangle = \langle \psi_H(t) | \hat{A}_H | \psi_H(t) \rangle = \langle \psi(t_0) | U^\dagger(t, t_0) \hat{A} U(t, t_0) | \psi(t_0) \rangle \quad (9)$$

Der Operator im Heisenberg-Bild  $\hat{A}_H$  kann auch gefunden werden, indem die Heisenberg-Gleichung gelöst wird.

$$\frac{d}{dt} \hat{A}_H = \frac{1}{i\hbar} [\hat{A}_H, \hat{H}_H] + (\partial_t \hat{A}_S)_H \quad (10)$$

### 4.3 Dirac-Bild

Im Dirac-Bild teilt man den Hamilton-Operator in einen ungestörten und einen störenden Operator auf  $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}'$ . Man entwickelt den Anfangszustand  $|\psi(t_0)\rangle$  mit dem Zeitentwicklungsoperator, der den Stör-Hamilton-Operator  $\hat{H}'$  trägt, und transformiert den Operator mit dem Zeitentwicklungsoperator, der den ungestörten Hamilton-Operator  $\hat{H}_0$  trägt.

$$|\psi_I(t)\rangle = U'(t, t_0) |\psi(t_0)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}'(t-t_0)} |\psi(t_0)\rangle \quad (11)$$

$$\hat{A}_I(t) = U_0^\dagger(t, t_0) \hat{A} U_0(t, t_0) = e^{\frac{i}{\hbar} \hat{H}_0(t-t_0)} \hat{A} e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}_0(t-t_0)} \quad (12)$$

$$\Rightarrow \langle \hat{A} \rangle = \langle \psi_I(t) | \hat{A}_I | \psi_I(t) \rangle = \langle \psi(t_0) | U^\dagger(t, t_0) \hat{A} U(t, t_0) | \psi(t_0) \rangle \quad (13)$$

Der Operator im Dirac-Bild  $\hat{A}_I(t)$  kann auch gefunden werden, indem die folgende Bestimmungsgleichung (Heisenberg-Gleichung mit  $\hat{A}_H \rightarrow \hat{A}_I$ ,  $\hat{H}_H \rightarrow \hat{H}_0$ ) gelöst wird.

$$\frac{d}{dt} \hat{A}_I = \frac{1}{i\hbar} [\hat{A}_I, \hat{H}_0] + (\partial_t \hat{A}_S)_I \quad (14)$$

## 5 Zeitunabhängige Störungstheorie

### 5.1 Nichtentartete Zustände

Betrachte den Hamilton-Operator  $\hat{H} = \hat{H}_0 + \lambda \hat{H}'$  mit den Eigenwert-Gleichungen  $\hat{H} |n'\rangle = E_n |n'\rangle$  und  $\hat{H}_0 |n\rangle = E_n^{(0)} |n\rangle$ .

Die Energien in 1. und 2. Ordnung, sowie der Zustand in 1. Ordnung Störungstheorie sind

$$E_n^{1.\text{ST}} = E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} \quad (15)$$

$$E_n^{2.\text{ST}} = E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)} \quad (16)$$

$$|n^{1.\text{ST}}\rangle = N(\lambda) \left( |n\rangle + \lambda \sum_{k \neq n} c_{nk}^{(1)} |k\rangle \right) \quad (17)$$

mit

$$\begin{aligned} E_n^{(1)} &= \langle n | \hat{H}' | n \rangle \\ E_n^{(2)} &= \sum_{k \neq n} \frac{|\langle k | \hat{H}' | n \rangle|^2}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} \\ c_{nk}^{(1)} &= \frac{\langle k | \hat{H}' | n \rangle}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} \end{aligned}$$

Beispiel

geg:  $\hat{H} = \frac{1}{2m} (\hat{p}_1^2 + \hat{p}_2^2) + \frac{1}{2} m \omega^2 (\hat{x}_1^2 + \hat{x}_2^2) + \lambda \frac{m^2 \omega^3}{\hbar} \hat{x}_1^2 \hat{x}_2^2$

ges:  $E_{00}^{2.\text{ST}}$

$$\begin{aligned} E_{00}^{(0)} &= \langle 00 | \hat{H}^{(0)} | 00 \rangle = \hbar \omega (0 + 0 + 1) = \hbar \omega \\ E_{00}^{(1)} &= \langle 00 | \hat{H}' | 00 \rangle = \frac{m^2 \omega^3}{\hbar} \langle 0 | \hat{x}_1^2 | 0 \rangle \langle 0 | \hat{x}_2^2 | 0 \rangle = \frac{m^2 \omega^3}{\hbar} \left( \frac{1}{2} \frac{\hbar}{m \omega} \right)^2 = \frac{1}{4} \hbar \omega \\ E_{00}^{(2)} &= \sum_{\substack{k_1, k_2 \\ (k_1, k_2) \neq (0,0)}} \frac{|\langle k_1 k_2 | \hat{H}' | 00 \rangle|^2}{E_{00}^{(0)} - E_{k_1 k_2}^{(0)}} = \\ &= \sum_{\substack{k_1, k_2 \\ (k_1, k_2) \neq (0,0)}} \frac{\left| \frac{m^2 \omega^3}{\hbar} \frac{1}{4} \frac{\hbar^2}{m^2 \omega^2} (\sqrt{2} \delta_{n_1, 2} + \delta_{n_1, 0}) (\sqrt{2} \delta_{n_2, 2} + \delta_{n_2, 0}) \right|^2}{\hbar \omega - \hbar \omega (k_1 + k_2 + 1)} = \\ &= \sum_{\substack{k_1, k_2 \\ (k_1, k_2) \neq (0,0)}} \frac{\left| \frac{1}{4} \hbar \omega (2 \delta_{n_1, 2} \delta_{n_2, 2} + \sqrt{2} \delta_{n_1, 2} \delta_{n_2, 0} + \sqrt{2} \delta_{n_1, 0} \delta_{n_2, 2} + \delta_{n_1, 0} \delta_{n_2, 0}) \right|^2}{-\hbar \omega (k_1 + k_2)} = \\ &= \frac{1}{16} \hbar \omega \left( \frac{4}{-4} + \frac{2}{-2} + \frac{2}{-2} \right) = -\frac{3}{18} \hbar \omega \\ \Rightarrow E_{00}^{2.\text{ST}} &= \hbar \omega \left( 1 + \frac{1}{4} \lambda - \frac{3}{18} \lambda^2 \right) \end{aligned}$$

---

**Herleitung**

Mache für die Eigenzustände und Energien die Ansätze

$$\begin{aligned} E_n &= E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)} + \dots \\ |n'\rangle &= N(\lambda) \left( |n\rangle + \lambda |n^{(1)}\rangle + \lambda |n^{(2)}\rangle + \dots \right) = \\ &= N(\lambda) \left( |n\rangle + \lambda \sum_{k \neq n} c_{nk}^{(1)} |k\rangle + \lambda^2 \sum_{k \neq n} c_{nk}^{(2)} |k\rangle + \dots \right) \end{aligned}$$

Einsetzen der Ansätze in die Eigenwert-Gl. von  $\hat{H} = \hat{H}_0 + \lambda \hat{H}'$  liefert

$$\begin{aligned} (\hat{H}_0 + \lambda \hat{H}') |n'\rangle &= E_n |n'\rangle \\ (\hat{H}_0 + \lambda \hat{H}') N(\lambda) \left( |n\rangle + \lambda \sum_{k \neq n} c_{nk}^{(1)} |k\rangle + \dots \right) &= (E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \dots) N(\lambda) \left( |n\rangle + \lambda \sum_{k \neq n} c_{nk}^{(1)} |k\rangle + \dots \right) \end{aligned}$$

Koeffizientenvergleich nach  $\boxed{\lambda^0}$ ,  $\boxed{\lambda^1}$  und  $\boxed{\lambda^2}$  ergeben

$$\begin{aligned} \hat{H}_0 |n\rangle &= E_n^{(0)} |n\rangle \\ \hat{H}_0 \sum_{k \neq n} c_{nk}^{(1)} |k\rangle + \hat{H}' |n\rangle &= E_n^{(0)} \sum_{k \neq n} c_{nk}^{(1)} |k\rangle + E_n^{(1)} |n\rangle \\ \hat{H}_0 \sum_{k \neq n} c_{nk}^{(2)} |k\rangle + \hat{H}' \sum_{k \neq n} c_{nk}^{(1)} |k\rangle &= E_n^{(0)} \sum_{k \neq n} c_{nk}^{(2)} |k\rangle + E_n^{(1)} \sum_{k \neq n} c_{nk}^{(1)} |k\rangle + E_n^{(2)} |n\rangle \end{aligned}$$

Multipliziere  $\boxed{\lambda^1}$  mit  $\langle n|$  von links.

$$\begin{aligned} \Rightarrow \underbrace{\langle n| \hat{H}_0 \sum_{k \neq n} c_{nk}^{(1)} |k\rangle}_{=E_n^{(0)} \langle n|} + \langle n| \hat{H}' |n\rangle &= 0 + E_n^{(1)} \\ \Leftrightarrow E_n^{(1)} &= \langle n| \hat{H}' |n\rangle \end{aligned}$$

Multipliziere  $\boxed{\lambda^1}$  mit  $\langle k'|$  von links.

$$\begin{aligned} \Rightarrow \underbrace{\langle k'| \hat{H}_0 \sum_{k \neq n} c_{nk}^{(1)} |k\rangle}_{=E_k^{(0)} \langle k'|} + \langle k'| \hat{H}' |n\rangle &= E_n^{(0)} \sum_{k \neq n} c_{nk}^{(1)} \underbrace{\langle k'| k\rangle}_{=\delta_{k',k}} + 0 \\ E_k^{(0)} c_{nk}^{(1)} + \langle k'| \hat{H}' |n\rangle &= E_n^{(0)} c_{nk}^{(1)} \\ \Leftrightarrow c_{nk}^{(1)} &= \frac{\langle k| \hat{H}' |n\rangle}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} \end{aligned}$$

Multipliziere  $\boxed{\lambda^2}$  mit  $|n\rangle$  von links.

$$\begin{aligned} 0 + \langle n| \hat{H}' \sum_{k \neq n} c_{nk}^{(1)} |k\rangle &= 0 + 0 + E_n^{(2)} \\ \Leftrightarrow E_n^{(2)} &= \sum_{k \neq n} c_{nk}^{(1)} \langle n| \hat{H}' |k\rangle \stackrel{c_{nk}^{(1)}}{=} \sum_{k \neq n} \frac{|\langle n| \hat{H}' |k\rangle|^2}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} \end{aligned}$$

---



## 5.2 Entartete Zustände

Für entartete Zustände  $|a_j \ n\rangle$  (wobei  $a_j$  die Entartung zählt) sind die Energiekorrekturen in Störungstheorie 1. Ordnung die Eigenwerte des folgenden Eigenwertproblems.

$$h \cdot \vec{\alpha} = E_n^{(1)} \cdot \vec{\alpha} \quad (18)$$

wobei die Matrix  $h$  die Elemente  $h_{ij} = \langle a_i \ n | \hat{H}' | a_j \ n \rangle$  trägt, also die Form

$$h = \begin{pmatrix} \langle a_1 \ n | \hat{H}' | a_1 \ n \rangle & \langle a_1 \ n | \hat{H}' | a_2 \ n \rangle & \langle a_1 \ n | \hat{H}' | a_3 \ n \rangle & \dots \\ \langle a_2 \ n | \hat{H}' | a_1 \ n \rangle & \langle a_2 \ n | \hat{H}' | a_2 \ n \rangle & \langle a_2 \ n | \hat{H}' | a_3 \ n \rangle & \dots \\ \langle a_3 \ n | \hat{H}' | a_1 \ n \rangle & \langle a_3 \ n | \hat{H}' | a_2 \ n \rangle & \langle a_3 \ n | \hat{H}' | a_3 \ n \rangle & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \quad (19)$$

### Beispiel

geg:  $\hat{H} = \frac{1}{2m}(\hat{p}_1^2 + \hat{p}_2^2) + \frac{1}{2}m\omega^2(\hat{x}_1^2 + \hat{x}_2^2) + \lambda \frac{m^2\omega^3}{\hbar} \hat{x}_1^2 \hat{x}_2^2$

ges: Korrektur Energie erster angeregter Zustand 1. Ordnung ST

Lös: Der erste angeregte Zustand ist entartet, da die Zustände  $|0, 1\rangle, |1, 0\rangle$  dieselbe Energie haben

$E_{01}^{(0)} = E_{10}^{(0)} = \hbar\omega(1 + 0 + 1) = \hbar\omega 2$ .

Bestimme also die Eigenwerte der Matrix  $h$ , dessen Matrixelemente aus den entarteten Zuständen bestehen:

$$\begin{aligned} h &= \begin{pmatrix} \langle 01 | \hat{H}' | 01 \rangle & \langle 01 | \hat{H}' | 10 \rangle \\ \langle 10 | \hat{H}' | 01 \rangle & \langle 10 | \hat{H}' | 10 \rangle \end{pmatrix} = \dots = \begin{pmatrix} \frac{3}{4}\hbar\omega & 0 \\ 0 & \frac{3}{4}\hbar\omega \end{pmatrix} \\ \Rightarrow E_{10}^{(1)} = E_{01}^{(1)} &= \frac{3}{4}\hbar\omega \\ \Rightarrow E_{10} = E_{01} &= E_{01}^{(0)} + \lambda E_{01}^{(1)} = \hbar\omega \left( 2 + \lambda \frac{3}{4} \right) \end{aligned}$$

### Herleitung

Mache den Ansatz (der eine kleine Erweiterung des nichtentarteten Ansatzes ist)

$$|n'\rangle = N(\lambda) \left( \sum_j \alpha_j |a_j \ n\rangle + \lambda \sum_{k \neq n} \sum_j \beta_j^k c_{nk}^{(1)} |a_j \ k\rangle + \dots \right)$$

Einsetzen der Ansätze in die Eigenwert-Gl. von  $\hat{H} = \hat{H}_0 + \lambda \hat{H}'$  liefert

$$\begin{aligned} (\hat{H}_0 + \lambda \hat{H}') |n'\rangle &= E_n |n'\rangle \\ (\hat{H}_0 + \lambda \hat{H}') \cancel{N(\lambda)} \left( \sum_j \alpha_j |a_j \ n\rangle + \lambda \sum_{k \neq n} \sum_j \beta_j^k c_{nk}^{(1)} |a_j \ k\rangle + \dots \right) &= (E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \dots) \cancel{N(\lambda)} \left( \sum_j \alpha_j |a_j \ n\rangle + \right. \\ &\quad \left. + \lambda \sum_{k \neq n} \sum_j \beta_j^k c_{nk}^{(1)} |a_j \ k\rangle + \dots \right) \end{aligned}$$

Koeffizientenvergleich nach  $\boxed{\lambda^1}$

$$\hat{H}_0 \sum_{k \neq n} \sum_j \beta_j^k c_{nk}^{(1)} |a_j \ k\rangle + \hat{H}' \sum_j \alpha_j |a_j \ n\rangle = E_n^{(0)} \sum_{k \neq n} \sum_j \beta_j^k c_{nk}^{(1)} |a_j \ k\rangle + E_n^{(1)} \sum_j \alpha_j |a_j \ n\rangle$$

Multiplizieren mit  $\langle a_i \ n|$  von links.

$$\begin{aligned} 0 + \sum_j \alpha_j \underbrace{\langle a_i \ n | \hat{H}' | a_j \ n \rangle}_{=: h_{ij}} &= 0 + \alpha_i E_n^{(1)} \\ \Leftrightarrow h_{ij} \cdot \alpha_j &= E_n^{(1)} \cdot \alpha_i \\ \Leftrightarrow h \cdot \tilde{\alpha} &= E_n^{(1)} \cdot \tilde{\alpha} \end{aligned}$$


---

## 6 WKB-Näherung

Die WKB-Näherung ist eine Näherungsmethode für langsam veränderliche Potentiale. Für klassisch erlaubte und klassisch verbotene Bereiche werden die folgenden Ansätze genutzt

$$u(x) = \begin{cases} \frac{C_+}{\sqrt{k(x)}} \exp(i \int k(x) dx) + \frac{C_-}{\sqrt{k(x)}} \exp(-i \int k(x) dx), & E > V(x) \\ \frac{\gamma_+}{\sqrt{\kappa(x)}} \exp(i \int \kappa(x) dx) + \frac{\gamma_-}{\sqrt{\kappa(x)}} \exp(-i \int \kappa(x) dx), & E < V(x) \end{cases} \quad (20)$$

mit  $k(x) = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(E - V(x))}$  und  $\kappa(x) = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(V(x) - E)}$ .

Für die klassischen Wendepunkte (klassisch erlaubt  $\rightarrow$  klassisch verboten bzw. klassisch verboten  $\rightarrow$  klassisch erlaubt) gelten für die WKB-Näherungsfunktionen die Anschlussbedingungen

$$\begin{aligned} & \frac{2A}{\sqrt{k(x)}} \cos\left(\int_x^a k(x') dx' - \frac{\pi}{4}\right) - \frac{B}{\sqrt{k(x)}} \sin\left(\int_x^a k(x') dx' - \frac{\pi}{4}\right) \\ \leftrightarrow & \frac{A}{\sqrt{\kappa(x)}} \exp\left(-\int_a^x \kappa(x') dx'\right) + \frac{B}{\sqrt{\kappa(x)}} \exp\left(\int_a^x \kappa(x') dx'\right) \end{aligned} \quad (21)$$

$$\begin{aligned} & \frac{A}{\sqrt{\kappa(x)}} \exp\left(-\int_x^b \kappa(x') dx'\right) + \frac{B}{\sqrt{\kappa(x)}} \exp\left(\int_x^b \kappa(x') dx'\right) \\ \leftrightarrow & \frac{2A}{\sqrt{k(x)}} \cos\left(\int_b^x k(x') dx' - \frac{\pi}{4}\right) - \frac{B}{\sqrt{k(x)}} \sin\left(\int_b^x k(x') dx' - \frac{\pi}{4}\right) \end{aligned} \quad (22)$$

### 6.1 Bohr-Sommerfeld-Quantisierungsbedingung

Für topfförmige Potentiale folgt aus den Anschlussbedingungen die Bohr-Sommerfeld-Quantisierungsbedingung, mit der die Energie des Potentials bestimmt werden kann.

$$\int_b^a dx \, k(x) \stackrel{k(x)}{=} \frac{1}{\hbar} \int_b^a dx \sqrt{2m(E - V(x))} = \left(n + \frac{1}{2}\right) \pi \quad (23)$$

Dabei wird verwendet, dass der linke klassische Umkehrpunkt  $b$  und der Rechte  $a$  ist.

### Herleitung

Verwende den Ansatz

$$\psi(\vec{x}, t) = e^{\frac{i}{\hbar}(S(\vec{x}) - Et)} = e^{\frac{i}{\hbar}S(\vec{x})} e^{-\frac{i}{\hbar}Et} \equiv u(\vec{x}) \cdot e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$$

mit  $S(\vec{x}) = \sum_k \left(\frac{\hbar}{i}\right)^k S_k(\vec{x})$  und setze ihn in die Schrödinger-Gleichung ein

$$\begin{aligned} i\hbar \partial_t \psi &= \hat{H} \psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi + V(\vec{x}) \psi \\ \stackrel{\psi}{\Rightarrow} i\hbar e^{\frac{i}{\hbar}S(\vec{x})} \partial_t e^{-\frac{i}{\hbar}Et} &= -e^{-\frac{i}{\hbar}Et} \frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla} (\vec{\nabla} e^{\frac{i}{\hbar}S(\vec{x})}) + V e^{\frac{i}{\hbar}S(\vec{x})} e^{-\frac{i}{\hbar}Et} \\ i\hbar e^{\frac{i}{\hbar}S} \left(-\frac{i}{\hbar}E\right) e^{-\frac{i}{\hbar}Et} &= -e^{-\frac{i}{\hbar}Et} \frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla} \left(\frac{i}{\hbar} (\vec{\nabla} S) e^{\frac{i}{\hbar}S}\right) + V e^{\frac{i}{\hbar}S(\vec{x})} e^{-\frac{i}{\hbar}Et} \\ E \cdot e^{\frac{i}{\hbar}S} e^{-\frac{i}{\hbar}Et} &= -e^{-\frac{i}{\hbar}Et} \frac{\hbar^2}{2m} \frac{i}{\hbar} \left((\Delta S) e^{\frac{i}{\hbar}S(\vec{x})} + (\vec{\nabla} S) \frac{i}{\hbar} (\vec{\nabla} S) e^{\frac{i}{\hbar}S}\right) + V e^{\frac{i}{\hbar}S(\vec{x})} e^{-\frac{i}{\hbar}Et} \\ E \cdot \cancel{e^{\frac{i}{\hbar}S} e^{-\frac{i}{\hbar}Et}} &= -\frac{i\hbar}{2m} (\Delta S) \cancel{e^{-\frac{i}{\hbar}Et} e^{\frac{i}{\hbar}S}} + \frac{1}{2m} (\vec{\nabla} S)^2 \cancel{e^{-\frac{i}{\hbar}Et} e^{\frac{i}{\hbar}S}} + V \cancel{e^{-\frac{i}{\hbar}Et} e^{\frac{i}{\hbar}S}} \\ 0 &= -\frac{i\hbar}{2m} (\Delta S) + \frac{1}{2m} (\vec{\nabla} S)^2 + V - E \end{aligned}$$

Einsetzen von  $S = S_0 + \frac{\hbar}{i} S_1 + \left(\frac{\hbar}{i}\right)^2 S_2 + \dots$  in die DGL und Koeffizientenvergleich nach  $\boxed{\hbar^0}$ ,  $\boxed{\hbar^1}$ ,  $\boxed{\hbar^2}$  ergibt:

$$\begin{aligned} 0 &= \frac{1}{2m} (\vec{\nabla} S_0)^2 + V - E \\ 0 &= 2(\Delta S_1)(\Delta S_0) + \Delta S_0 \\ 0 &= \Delta S_1 + 2(\vec{\nabla} S_0)(\vec{\nabla} S_1) + (\vec{\nabla} S_1)^2 \end{aligned}$$

Betrachte den 1d-Fall, d.h.  $\vec{\nabla} \rightarrow \frac{d}{dx}$ .

Lösen der DGLs  $\boxed{\hbar^0}$ ,  $\boxed{\hbar^1}$ ,  $\boxed{\hbar^2}$  (nach und nach) ergibt

$$\begin{aligned} \frac{d}{dx} S_0 &= \pm \sqrt{2m(E - V(x))} =: p(x) & \Rightarrow S_0 &= \pm \int p(x) dx + c \\ \frac{d}{dx} S_1 &= -\frac{1}{2} \frac{p'(x)}{p(x)} & \Rightarrow S_1 &= \ln \left( \sqrt{\frac{p_0}{p(x)}} \right) \\ \frac{d}{dx} S_2 &= \pm \left( \frac{1}{8} \frac{p'^2}{p^3} - \frac{1}{4} \frac{p''}{p^2} \right) & \Rightarrow S_2 &= \pm \left( \frac{1}{4} \frac{p'}{p^2} + \frac{1}{8} \int \frac{p'^2}{p^3} dx \right) \end{aligned}$$

Betrachte die Näherung der ortsabhängigen Wellenfunktion mit  $S = S_0 + \frac{\hbar}{i} S_1$ , also  $u(\vec{x}) = e^{\frac{i}{\hbar}(S_0 + \frac{\hbar}{i} S_1)}$ .

Betrachte den Fall  $\boxed{E > V}$

$$\begin{aligned}
u_{\pm}(x) &= e^{\frac{i}{\hbar}(S_0 + \frac{\hbar}{i}S_1)} = e^{\frac{i}{\hbar}S_0 + S_1} \stackrel{S_0, S_1}{=} \exp\left[\frac{i}{\hbar}\left(\pm \int p(x) dx + c\right) + \ln\left(\sqrt{\frac{p_0}{p(x)}}\right)\right] = \\
&= e^{\ln\left(\sqrt{\frac{p_0}{p(x)}}\right)} \cdot e^{\pm \frac{i}{\hbar} \int p(x) dx + c} = \frac{C_{\pm}}{\sqrt{p(x)}} e^{\pm \frac{i}{\hbar} \int p(x) dx} \equiv \frac{C_{\pm}}{\sqrt{k(x)}} e^{\pm i \int k(x) dx} \\
\Rightarrow u(x) &= \frac{C_+}{\sqrt{k(x)}} e^{i \int k(x) dx} + \frac{C_-}{\sqrt{k(x)}} e^{-i \int k(x) dx}
\end{aligned}$$

Betrachte den Fall  $\boxed{E < V}$

Hier wird  $p(x) = \sqrt{2m(E - V(x))} = i\sqrt{2m(V(x) - E)} \equiv i\hbar\kappa(x)$  und somit

$$\begin{aligned}
u_{\pm}(x) &= \exp\left[\frac{i}{\hbar}\left(\pm i \int \kappa(x) dx\right) + \ln\left(\sqrt{\frac{\kappa_0}{\kappa(x)}}\right)\right] = \frac{\gamma_{\pm}}{\sqrt{\kappa(x)}} e^{\pm \int \kappa(x) dx} \\
\Rightarrow u(x) &= \frac{\gamma_+}{\sqrt{\kappa(x)}} e^{\int \kappa(x) dx} + \frac{\gamma_-}{\sqrt{\kappa(x)}} e^{-\int \kappa(x) dx}
\end{aligned}$$


---

## 7 Variationsmethode

Die Variationsmethode liefert eine Abschätzung der Energie eines Zustands in Form von einer oberen Schranken.

Dabei wird eine Testfunktion  $\psi(\lambda_1, \dots, \lambda_m)$  geraten, wobei die  $\lambda_i$  Parameter sind, die so gewählt werden, dass die obere Schranke minimal wird.

- **Grundzustand**

$$E_0 \leq f(\lambda_1, \dots, \lambda_N) = \frac{\langle \psi(\lambda_1, \dots, \lambda_m) | \hat{H} | \psi(\lambda_1, \dots, \lambda_m) \rangle}{\langle \psi(\lambda_1, \dots, \lambda_m) | \psi(\lambda_1, \dots, \lambda_m) \rangle} \quad (24)$$

Die Minimierung verläuft über  $\vec{\nabla}_\lambda f \stackrel{!}{=} \vec{0}$ .

- **Erster angeregter Zustand**

Möchte man die Energie des nächsthöheren Zustands abschätzen, nimmt man eine weitere Testfunktion  $|\phi\rangle$  und modifiziert sie wie folgt:

$$|\tilde{\phi}\rangle = (\mathbb{1} - |\psi\rangle\langle\psi|) |\phi\rangle \quad (25)$$

wobei  $|\psi\rangle$  die Testfunktion mit den minimierenden Parametern vom Grundzustand  $E_0$  ist. Der erste angeregte Zustand wird also abgeschätzt durch

$$E_1 \leq \frac{\langle \tilde{\phi} | \hat{H} | \tilde{\phi} \rangle}{\langle \tilde{\phi} | \tilde{\phi} \rangle} \quad (26)$$

---

### Beispiel

ges: Abschätzung Grundzustandsenergie für  $\text{Li}^+$

Lös:

$$\begin{aligned} E_0 \leq f(\tilde{Z}) &= \langle \psi(\tilde{Z}) | \hat{H} | \psi(\tilde{Z}) \rangle \stackrel{\text{Virialtheorem}}{=} m_e c^2 \alpha^2 (\tilde{Z}^2 - 2\tilde{Z}Z + \frac{5}{8}\tilde{Z}) = \\ &= -2(-13,6 \text{ eV})(\tilde{Z}^2 - 2\tilde{Z}Z + \frac{5}{8}\tilde{Z}) \stackrel{Z=3}{=} 27,2 \text{ eV}(\tilde{Z}^2 - 6\tilde{Z} + \frac{5}{8}\tilde{Z}) \end{aligned}$$

Finde das  $\tilde{Z}$ , für das  $f$  minimal wird.

$$\begin{aligned} \frac{d}{d\tilde{Z}} f(\tilde{Z}) &= 27,2 \text{ eV} (2\tilde{Z} - 6 + \frac{5}{8}) = 27,2 \text{ eV} (2\tilde{Z} - \frac{43}{8}) \stackrel{!}{=} 0 \\ \Leftrightarrow \tilde{Z} &= \frac{43}{16} \\ \Rightarrow E_0 \leq f(\tilde{Z} = \frac{43}{16}, Z = 3) &= -196,5 \text{ eV} \end{aligned}$$


---

## 8 Zeitabhängige Störungstheorie

Die Übergangswahrscheinlichkeit und Übergangsrate (für große Zeitintervalle  $T$ ) sind definiert als

$$P_{n \rightarrow k} = \left| a_k^{(1)} \right|^2 = \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_{t_0}^t dt' \langle k | \hat{H}'(t') | n \rangle e^{i\omega_{kn}t'} \right|^2 \quad (27)$$

$$\Gamma_{n \rightarrow k} = \frac{P_{n \rightarrow k}}{T} \quad (28)$$

mit  $\omega_{kn} = \frac{1}{\hbar}(E_k - E_n)$ .

### Beispiel

geg:  $\hat{H} = \underbrace{\frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2}_{\hat{H}_0} + \underbrace{eE\hat{x}e^{-t^2/\tau^2}}_{\hat{H}'(t)}$

ges: Übergangswahrscheinlichkeit  $P_{0 \rightarrow k}$  für  $t_0 \rightarrow -\infty$ ,  $t \rightarrow +\infty$

$$\begin{aligned} P_{0 \rightarrow k} &= \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_{t_0}^t dt' \langle k | \hat{H}'(t') | 0 \rangle e^{i\omega_{k0}t'} \right|^2 \stackrel{\hat{H}'(t)}{=} \frac{e^2 E^2}{\hbar^2} \cdot |\langle k | \hat{x} | 0 \rangle|^2 \cdot \left| \int_{-\infty}^{\infty} dt' e^{-t'^2/\tau^2} e^{i\omega_{k0}t'} \right|^2 = \\ &= \frac{e^2 E^2}{\hbar^2} \cdot |\langle k | \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\hat{a} + \hat{a}^\dagger) | 0 \rangle|^2 \cdot \left| \int_{-\infty}^{\infty} dt' e^{-t'^2/\tau^2} e^{i\omega_{k0}t'} \right|^2 = \\ &= \frac{e^2 E^2}{2m\omega\hbar} \cdot |0 + \langle k | 1 \rangle|^2 \cdot \left| \int_{-\infty}^{\infty} dt' e^{i\omega_{k0}t' - t'^2/\tau^2} \right|^2 \stackrel{(*)}{=} \\ &= \frac{e^2 E^2}{2m\omega\hbar} \cdot \delta_{k1} \cdot \left| \int_{-\infty}^{\infty} dt' e^{-y(t'+\tilde{c})^2} e^{\tilde{c}^2 y} \right|^2 = \frac{e^2 E^2}{2m\omega\hbar} \cdot \delta_{k1} \cdot |e^{\tilde{c}y}|^2 \cdot \left| \int_{-\infty}^{\infty} dt' e^{-y(t'+\tilde{c})^2} \right|^2 \\ &= \frac{e^2 E^2}{2m\omega\hbar} \cdot \delta_{k1} \cdot |e^{\tilde{c}^2 y}|^2 \cdot \left| \sqrt{\frac{\pi}{y}} \right|^2 \stackrel{\tilde{c}, y}{=} \frac{e^2 E^2}{2m\omega\hbar} \cdot \delta_{k1} \cdot e^{-\frac{1}{2}\tau^2\omega_{k0}^2} \cdot \pi\tau^2 = \end{aligned}$$

mit der quadratische Ergänzung  $(*)$  im Exponenten

$$\begin{aligned} -t'^2/\tau^2 + i\omega_{k0}t' &= -\frac{1}{\tau^2}(t'^2 - i\tau^2\omega_{k0}t') \stackrel{c:=-i\tau^2\omega_{k0}}{=} -\frac{1}{\tau^2}(t'^2 + ct') \stackrel{0}{=} -\frac{1}{\tau^2} \left[ t'^2 + ct' + \left(\frac{c}{2}\right)^2 - \left(\frac{c}{2}\right)^2 \right] = \\ &= -\frac{1}{\tau^2} \left[ \left(t' + \frac{c}{2}\right)^2 - \left(\frac{c}{2}\right)^2 \right] \stackrel{y:=1/\tau^2, \tilde{c}:=(\frac{c}{2})^2}{=} -y(t' + \tilde{c})^2 + \tilde{c}^2 y \end{aligned}$$

---

Herleitung

Setze den Ansatz

$$|\psi(t)\rangle = \sum_j a_j(t) e^{-\frac{i}{\hbar} E_j(t-t_0)} |j\rangle$$

in die Schrödinger-Gleichung ein.

$$\begin{aligned} i\hbar \partial_t |\psi(t)\rangle &= \hat{H} |\psi(t)\rangle = (\hat{H}_0 + \hat{H}') |\psi(t)\rangle \\ \stackrel{|\psi(t)\rangle}{\Rightarrow} i\hbar \partial_t \sum_j a_j(t) e^{-\frac{i}{\hbar} E_j(t-t_0)} |j\rangle &= (\hat{H}_0 + \hat{H}') \sum_j a_j(t) e^{-\frac{i}{\hbar} E_j(t-t_0)} |j\rangle \\ i\hbar \left( \sum_j \dot{a}_j(t) e^{-\frac{i}{\hbar} E_j(t-t_0)} |j\rangle - \sum_j \frac{i}{\hbar} E_j a_j(t) e^{-\frac{i}{\hbar} E_j(t-t_0)} |j\rangle \right) &= \sum_j a_j(t) e^{-\frac{i}{\hbar} E_j(t-t_0)} E_j |j\rangle + \sum_j a_j(t) e^{-\frac{i}{\hbar} E_j(t-t_0)} \hat{H}' |j\rangle \end{aligned}$$

Multiplikation mit  $\langle k|$  von links:

$$\begin{aligned} i\hbar \sum_j \dot{a}_j(t) e^{-\frac{i}{\hbar} E_j(t-t_0)} \langle k|j\rangle &= \sum_j a_j(t) e^{-\frac{i}{\hbar} E_j(t-t_0)} \langle k|\hat{H}'|j\rangle \\ \Rightarrow i\hbar \dot{a}_k(t) e^{-\frac{i}{\hbar} E_k(t-t_0)} &= \sum_j a_j(t) e^{-\frac{i}{\hbar} E_j(t-t_0)} \langle k|\hat{H}'|j\rangle \\ \Leftrightarrow \dot{a}_k(t) &= \frac{1}{i\hbar} \sum_j a_j(t) e^{-\frac{i}{\hbar} (E_k - E_j)(t-t_0)} \langle k|\hat{H}'|j\rangle \end{aligned}$$

Mache den Ansatz:  $a_k(t) = a_k^{(0)} + \lambda a_k^{(1)} + \lambda^2 a_k^{(2)} + \dots$  und setze  $\hat{H}' \rightarrow \lambda \hat{H}'$ . Führe dann einen Koeffizientenvergleich bezüglich  $\boxed{\lambda}$  durch:

$$\begin{aligned} a_k^{(0)} + \lambda a_k^{(1)} + \dots &= \frac{1}{i\hbar} \sum_j (a_k^{(0)} + \lambda a_k^{(1)} + \dots) e^{-\frac{i}{\hbar} (E_k - E_j)(t-t_0)} \lambda \langle k|\hat{H}'|j\rangle \\ \stackrel{\boxed{\lambda}}{\Rightarrow} \dot{a}_k^{(1)} &= \frac{1}{i\hbar} \sum_j a_k^{(0)} e^{-\frac{i}{\hbar} (E_k - E_j)(t-t_0)} \langle k|\hat{H}'|j\rangle \\ \stackrel{\int}{\Rightarrow} a_k^{(1)} &= \frac{1}{i\hbar} \sum_j a_k^{(0)} \int_{t_0}^t dt' e^{-\frac{i}{\hbar} (E_k - E_j)(t'-t_0)} \langle k|\hat{H}'|j\rangle \end{aligned}$$

Mit der Anfangsbedingung  $a_k^{(0)} = \delta_{jn}$  folgt dann

$$a_k^{(1)} = \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t dt' e^{-i\omega_{kj}(t'-t_0)} \langle k|\hat{H}'|j\rangle$$

---



## 9 Streutheorie

Der Zusammenhang zwischen differentiellem Wirkungsquerschnitt und Streuamplitude ist

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\theta)|^2$$

### 9.1 Born-Approximation

In der Born-Approximation ist die Streuamplitude durch den folgenden Ausdruck gegeben

$$f^{(1)}(\vec{k}, \vec{k}') = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d^3x e^{i(\vec{k}-\vec{k}')\vec{x}} V(\vec{x}) \quad (29)$$

Für rotationssymmetrische Potentiale  $V(\vec{x}) = V(r)$  gilt die nützliche Beziehung

$$f^{(1)}(\vec{k}, \vec{k}') = -\frac{2m}{\hbar^2} \int_0^\infty dr r V(r) \cdot \frac{\sin(qr)}{q} \quad (30)$$

Herleitung

$$\begin{aligned} f^{(1)}(\theta) &= -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d^3x' e^{-i\vec{q}\vec{x}'} V(\vec{x}') \stackrel{\text{KK, V(r)}}{=} -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int_0^\infty dr' \int_0^\pi d\theta' \int_0^{2\pi} d\varphi' e^{-i\vec{q}\vec{x}'} V(r') \cdot r'^2 \sin\theta' = \\ &\stackrel{\vec{q}\vec{x}, u=\cos\theta'}{=} -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \cdot 2\pi \cdot \int_0^\infty dr' r'^2 V(r') \cdot \int_{-1}^{+1} \frac{du}{\sin\theta'} \cdot \sin\theta' \cdot e^{-iqr'u} = \\ &= -\frac{m}{\hbar^2} \int_0^\infty dr' r'^2 V(r') \cdot \left( -\frac{1}{iqr'} \right) \cdot e^{-iqr'u} \Big|_{-1}^{+1} = \\ &= -\frac{m}{\hbar^2} \int_0^\infty dr' r' V(r') \cdot \frac{1}{q} \cdot \left( -\frac{2}{2i} \left( e^{-iqr'} - e^{iqr'} \right) \right) = \\ &= -\frac{m}{\hbar^2} \int_0^\infty dr' r' V(r') \cdot \frac{1}{q} \cdot 2 \sin(qr') = -\frac{2m}{\hbar^2} \int_0^\infty dr' r' V(r') \cdot \frac{\sin(qr')}{q} \quad \blacksquare \end{aligned}$$

## 10 Relativistische Quantenmechanik

Die Kontraktion erfolgt mittels

$$x_\mu = g_{\mu\nu} x^\nu \quad (31)$$

$$x^\mu = g^{\mu\nu} x_\nu \quad (32)$$

mit der Metrik

$$(g_{\mu\nu}) = (g^{\mu\nu}) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (33)$$

### 10.1 Gamma-Matrizen

Die Gamma-Matrizen sind

$$\gamma^0 = \begin{pmatrix} \mathbb{1} & 0 \\ 0 & \mathbb{1} \end{pmatrix}, \quad \gamma^i = \begin{pmatrix} 0 & \sigma^i \\ -\sigma^i & 0 \end{pmatrix} \quad (34)$$

also ausformuliert

$$\gamma^0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \gamma^1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \gamma^2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & i & 0 \\ 0 & i & 0 & 0 \\ -i & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \gamma^3 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (35)$$

und erfüllen die Kommutatoreigenschaft

$$\{\gamma^\mu, \gamma^\nu\} = 2g^{\mu,\nu} \mathbb{1} \quad (36)$$

## Anhang

### Delta-Funktion

Die Delta-Funktion ist wie folgt definiert und hat die Eigenschaften

$$\begin{aligned}\delta(x-y) &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk e^{i(x-y)k} \\ f(y) &= \int_{-\infty}^{\infty} dx f(x) \delta(x-y) \\ \delta(ax) &= \frac{1}{|a|} \delta(x)\end{aligned}$$

### Analytisch gelöste qm. Systeme

$$\begin{aligned}E_n &= -\frac{1}{2} m_e c^2 \alpha^2 \frac{Z^2}{n^2} \\ E_n &= \hbar \omega \left(n + \frac{1}{2}\right) \\ E_n &= \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} n^2\end{aligned}$$

mit  $\alpha = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar c}$ ,  $a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{m_e e^2}$

### Pauli-Matrizen

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Für die Pauli-Matrizen gilt die Kommutatorrelation, sowie die Multiplikation

$$\begin{aligned}[\sigma_i, \sigma_j] &= 2i \cdot \varepsilon_{ijk} \cdot \sigma_k \\ \sigma_i \sigma_j &= \delta_{ij} \mathbb{1}_2 + i \cdot \varepsilon_{ijk} \cdot \sigma_k\end{aligned}$$

bzw. für die Spin-Operatoren  $\hat{S}_i = \frac{\hbar}{2} \sigma_i$  von Spin-1/2-Teilchen

$$[\hat{S}_i, \hat{S}_j] = i\hbar \cdot \varepsilon_{ijk} \cdot \hat{S}_k$$

### Gauß-Integral & Fourier-Transformation

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{-ax^2} = \sqrt{\frac{\pi}{a}}$$

Die Fourier-Transformation und dessen Inverse der Dimension  $n$  ist

$$\mathcal{F}\{f(\vec{x})\}(\vec{k}) \equiv \tilde{f}(\vec{k}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}^n} \int_{\mathbb{R}^n} f(\vec{x}) \cdot e^{-i\vec{k}\vec{x}} d^n x \quad (37)$$

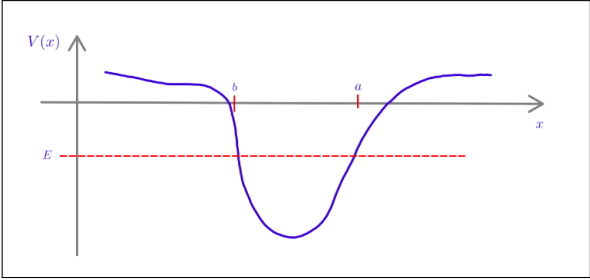
$$\mathcal{F}^{-1}\{\tilde{f}(\vec{k})\}(\vec{x}) \equiv f(\vec{x}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}^n} \int_{\mathbb{R}^n} \tilde{f}(\vec{k}) \cdot e^{i\vec{k}\vec{x}} d^n k \quad (38)$$

wobei für den eindimensionalen Fall  $k$  und  $x$  keine Vektoren sind.

### Quadratische Ergänzung

$$ax^2 + bx \stackrel{1}{=} a \left( x^2 + 2 \frac{b}{2a} x \right) \stackrel{0}{=} a \left( x^2 + 2 \frac{b}{2a} x + \left( \frac{b}{2a} \right)^2 - \left( \frac{b}{2a} \right)^2 \right) = a \left( x + \frac{b}{2a} \right)^2 - a \left( \frac{b}{2a} \right)^2$$

## 11 Stichwortverzeichnis

Begriff	Erklärung
$i\varepsilon$ -Vorschrift	Ersetzung $x \rightarrow x \pm i\varepsilon$ zur Regularisierung von Integralen. Taucht in der Streutheorie auf, um die Greens-Funktion mittels Residuensatz zu bestimmen
Bell'sche Ungleichungen	Ungleichungen, die die Theorie über verborgene Parameter in der Quantenmechanik ausschließen. Sie zeigen, dass in der QM sowohl Realität (= Zustand ist vor der Messung festgelegt) als auch Lokalität (= Physikalische Einflüsse können höchstens mit Lichtgeschwindigkeit propagieren) verletzt sind.
Besetzungszahldarstellung	Darstellung, in der z.B. ein photonischer Zustand durch Besetzungszahlen beschrieben wird $ n_{\lambda_1, \vec{k}_1}, n_{\lambda_2, \vec{k}_2}, \dots\rangle = (\hat{a}_{\lambda_1, \vec{k}_1}^\dagger)^{n_{\lambda_1, \vec{k}_1}} (\hat{a}_{\lambda_2, \vec{k}_2}^\dagger)^{n_{\lambda_2, \vec{k}_2}} \dots  0\rangle$
Besetzungszahlen	Zahlen $n_{\lambda, \vec{k}}$ , die in der Besetzungszahldarstellung die Anzahl der Photonen mit Polarisation $\lambda$ und Impuls $\hbar k$ angibt
Bohr-Sommerfeld Quantisierungsbedingung	<p>Quantisierungsbedingung, die in der WKB-Näherung eines topfförmigen Potentials mit 2 klassischen Wendepunkten auftritt.</p>  $\int_b^a k(x) dx \stackrel{!}{=} \left(n + \frac{1}{2}\right) \pi$ <p>mit <math>k(x) = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(E - V(x))}</math>.</p>
Born-Approximation	Leading-order der Streuamplitude $f^{(1)}(\vec{k}, \vec{k}')$ .

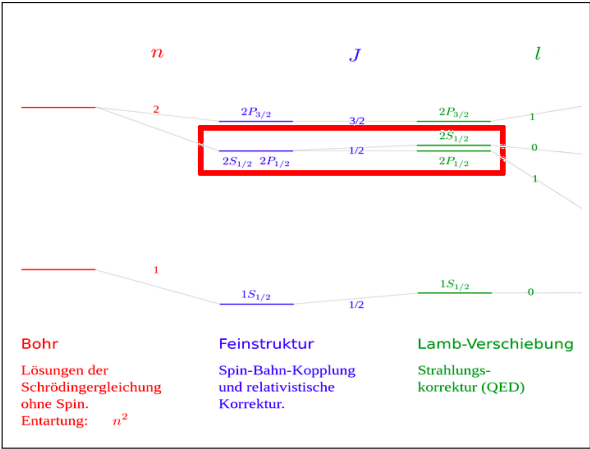
	<p>Diese entsteht durch die störungstheoretische Behandlung der Wellenfunktion des Streuproblems <math>\psi_{\vec{k}} = \psi_{\vec{k}}^{(0)} + \psi_{\vec{k}}^{(1)} + \dots</math></p> $f^{(1)}(\vec{k}, \vec{k}') = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d^3x' e^{i(\vec{k}-\vec{k}')\vec{x}'} V(\vec{x}')$ <p>bzw. für rotationssymmetrische Potentiale</p> $f^{(1)}(\vec{k}, \vec{k}') = -\frac{2m}{\hbar^2} \int_0^\infty dr r V(r) \frac{\sin(qr)}{q}$
Born-Oppenheimer-Näherung	<p>Näherungsmethode zur Vereinfachung der Schrödinger-Gleichung bei z.B. Molekülen.</p> <ol style="list-style-type: none"> <li>1. Löse das elektronische Problem <math>\hat{H}_e \phi_n = \varepsilon_n \phi_n</math> (Vernachlässigung der Kernbewegung)</li> <li>2. Ansatz für die Wellenfunktion des gesamten Problems <math>\hat{H} \psi = E \psi</math> mit <math>\psi = \sum_n u_n \phi_n</math></li> </ol> <p>Oft genügt bereits die Kenntnis von <math>\varepsilon_n</math>, um darüber entscheiden zu können, ob Bindungen möglich sind.</p>
Bornsche-Näherung	<a href="#">siehe Born-Näherung</a>
Bosonen	Teilchen mit ganzzahligem Spin
chirale Darstellung	<p>Darstellung der <math>\gamma</math>-Matrizen, in der die <math>\gamma^5</math>-Matrix diagonal ist (auch Weyl-Darstellung genannt).</p> $\gamma^0 = \begin{pmatrix} 0 & -\mathbb{1}_2 \\ -\mathbb{1}_2 & 0 \end{pmatrix}, \quad \gamma^i = \begin{pmatrix} 0 & \sigma^i \\ -\sigma^i & 0 \end{pmatrix}$ <p>D.h. dass die Chiralitäten auf der Hauptdiagonalen stehen.</p> $\gamma^5 = i\gamma^0\gamma^1\gamma^2\gamma^3 = \begin{pmatrix} \mathbb{1}_2 & 0 \\ 0 & -\mathbb{1}_2 \end{pmatrix}$
Chiralität	Eigenwert $\pm 1$ der $\gamma^5$ -Matrix $\gamma^5 = i\gamma^0\gamma^1\gamma^2\gamma^3$ .
Clifford-Algebra	<p>Algebra von Elementen <math>\gamma^\mu</math>, die die Antikommutationsrelation</p> $\{\gamma^\nu, \gamma^\mu\} = 2g^{\nu\mu} \mathbb{1}_4$ <p>erfüllen</p>
Dipolstrahlung	<a href="#">siehe E1-Strahlung</a>
Dirac'sche Löchertheorie	Theorie, die ein qualitatives Verständnis für die Lösungen der Dirac-Gleichung mit "negativer Energie" liefert.

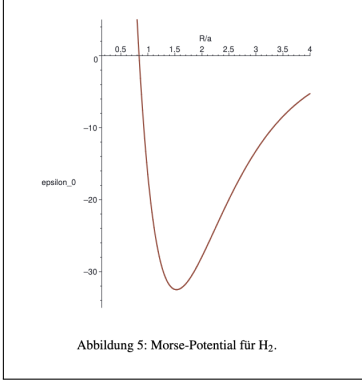
	<p>Sie besagt, dass das Vakuum als ein vollständig besetzter See aus negativen Energiezuständen betrachtet werden kann (Dirac-See). Ein unbesetzter Zustand wird als Positron interpretiert.</p>
E1-Strahlung	<p>Elektromagnetische Strahlung, die bei einem Übergang zwischen zwei Zuständen eines Atoms oder Moleküls emittiert oder absorbiert wird, wenn die Wechselwirkung des Systems mit dem elektromagnetischen Feld durch das elektrische Dipolmoment beschrieben werden kann</p> $\hat{H}' = \frac{e}{m_e} \vec{A} \hat{p} = \frac{a_0}{2} \frac{e}{m_e} (e^{i(\vec{k}\vec{x}-\omega t)} + e^{-i(\vec{k}\vec{x}-\omega t)}) \vec{\varepsilon} \hat{p} \approx$ $\approx \frac{a_0}{2} \frac{e}{m_e} (e^{i\omega t} + e^{-i\omega t}) \vec{\varepsilon} \hat{p}$ <p>wobei bei <math>\approx</math> die entscheidende Dipolnäherung <math>e^{i\vec{k}\vec{x}} \approx 1</math> gemacht wird</p>
E2-Strahlung	<p>Elektromagnetische Strahlung, die bei einem Übergang zwischen zwei Zuständen eines Atoms oder Moleküls emittiert oder absorbiert wird, wenn die Wechselwirkung des Systems mit dem elektromagnetischen Feld durch das elektrische Quadrupolmoment beschrieben werden kann</p>
Erzeugendefunktion	<p>Potenzreihe <math>F(s, x)</math>, die eine Folge <math>a_n</math> oder eine Sequenz von Funktionen <math>a_n(x)</math> so kodieren kann, dass die einzelnen Folgeglieder/Funktionen durch Ableiten der Erzeugendenfunktion erzeugt werden.</p> $F(s, x) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n(x) s^n$ $\left. \frac{d^n}{ds^n} F(s, x) \right _{s=0} = a_n(x)$ <p>Taucht bei der Berechnung der Korrektur <math>E_{\text{GZ}}^{(1)}</math> des Heliumatoms auf (Integrationstrick).</p> $\frac{1}{\sqrt{1 - 2\varepsilon z + \varepsilon^2}} = \sum_{l=0}^{\infty} P_l(\varepsilon) \varepsilon^l$
entanglement	<a href="#">siehe verschränkte Zustände</a>
entangled states	<a href="#">siehe verschränkte Zustände</a>

Fermi's Goldene Regel	<p>Beschreibt die Übergangsrate eines Systems von einem Anfangs- in einen Endzustand unter der Wirkung einer schwachen Störung</p> $\Gamma_{a \rightarrow b} = \frac{2\pi}{\hbar}  \langle b   \hat{H}'   a \rangle ^2 \rho(E_b)$ <p>wobei <math>\rho(E_b)</math> die Zustandsdichte ist</p>
Fermi-Energie	Höchste besetzte Energie $\varepsilon_F$ in einem System von nicht wechselwirkenden, ununterscheidbaren Fermionen im Grundzustand
Fermi-Impuls	<p>Impuls <math>p_F</math>, der der Fermi-Energie <math>\varepsilon_F</math> entspricht</p> $p_F = \sqrt{2m\varepsilon_F}$
Fermionen	Teilchen mit halbzahligen Spin
Feynman-Diagramme	Grafische Darstellung der Störungstheorie
fixed-target Experimente	Experimente, bei denen ein Teilchenstrahl auf ein festes Ziel geschossen wird
Fock-Raum	<p>Zustandsraum für Vielteilchensysteme mit variabler Teilchenzahl</p> $\mathcal{F} =  0\rangle \oplus \mathcal{H}_{1\gamma} \oplus \mathcal{H}_{2\gamma} \oplus \dots$
Greens-Funktion	<p>Funktion, die die folgende Eigenschaft erfüllt</p> $\hat{L}G_k(t) = \delta(t)$ <p>wobei <math>\hat{L}</math> ein Differentialoperator ist, der wiederum die DGL <math>\hat{L}y = f</math> erfüllt. Taucht in der qm. Beschreibung der elastischen Streuung auf.</p>
Hamilton-Jacobi Gleichung	<p>Partielle DGL, die in der klassischen Mechanik verwendet wird, um die Bewegung eines Systems zu beschreiben.</p> <p>Sie taucht in der QM auf, wenn man den WKB-Näherungs-Ansatz in die Schrödinger-Gleichung einsetzt und <math>\hbar = 0</math> betrachtet.</p> $0 = \frac{1}{2m} (\vec{\nabla} W)^2 + V(\vec{x}) + \partial_t W$
Hartree-Fock-Methode	Verbesserung der Hartree-Methode, die im Fall von Atomen mit $N$ Elektronen, die Slater-Determinante als Ansatz wählt.



	Im Gegensatz zur Hartree-Methode wird also die Antisymmetrie der Wellenfunktionen und die Orthogonalität der Einteilchenwellenfunktionen berücksichtigt.
Hartree-Methode	<p>Variationsmethode für Mehrteilchensysteme mit dem Ansatz, dass die Wellenfunktion das Produkt der Einteilchenwellenfunktionen ist.</p> $\psi = \prod_{i=1}^N \psi_i(\vec{x}_i)$ <p>Die Einteilchenwellenfunktionen sind dabei paarweise orthogonal und normiert. Im Fall von Atomen mit <math>N</math> Elektronen wird jedoch die Antisymmetrie der Wellenfunktionen nicht berücksichtigt.</p>
Helmholtz-Gleichung	$(\Delta + k^2)\psi = 0$ <p>Taucht in der qm. Beschreibung der elastischen Streuung auf.</p>
Hundsche Regel	<p>Regeln, die die Besetzungsreihenfolge von Elektronen in Atomen unter Berücksichtigung des Pauli-Prinzips beschreiben</p> <ol style="list-style-type: none"> <li>1. Der Gesamtspin <math>S</math> wird maximal</li> <li>2. Der Gesamtbahndrehimpuls <math>L</math> wird maximal</li> <li>3. Für nicht mehr als halb gefüllte Schalen gilt</li> </ol> $J =  L - S $ <p>und für mehr als halb gefüllte Schalen</p> $J = L + S$
Klein-Gordon-Gleichung	<p>Gleichung, die die Kinematik kräftefreier Spin-0-Teilchen beschreibt. Sie ist forminvariant unter Lorentz-Transformation.</p> $\left( \square + \frac{m^2 c^2}{\hbar^2} \right) \psi(x) = 0$ <p>Sie wird aus der Energie-Impuls-Beziehung eines kräftefreien, massiven Teilchens <math>p^2 - mc^2 = 0</math> abgeleitet.</p>

	<p>Ihre Probleme sind jedoch</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Da sie eine DGL 2. Ordnung bzgl. der Zeit ist, ist eine zusätzliche AB nötig</li> <li>• Lösungen mit negativen Energien möglich, obwohl man ein freies Teilchen betrachtet</li> </ul>
Lamb-Verschiebung	<p>Aufspaltung der Wasserstoffniveaus <math>2^2S_{1/2}</math> und <math>2^2P_{1/2}</math>. Sie ist Folge der Quantisierung des elektromagnetischen Feldes und kann im Rahmen der Quantenelektrodynamik (QED) berechnet werden</p>  <p>The diagram illustrates the energy levels of a hydrogen atom. The vertical axis represents energy, and the horizontal axis represents the principal quantum number <math>n</math>. The levels are labeled with <math>n</math>, <math>J</math>, and <math>l</math>. The <math>n=1</math> level is split into <math>1S_{1/2}</math> and <math>1P_{1/2}</math> states. The <math>n=2</math> level is split into <math>2S_{1/2}</math> and <math>2P_{1/2}</math> states. A red box highlights the small energy difference between <math>2S_{1/2}</math> and <math>2P_{1/2}</math>, which is the Lamb shift. The diagram also shows the fine structure splitting of the <math>n=2</math> level into <math>2P_{3/2}</math> and <math>2P_{1/2}</math> states. The legend indicates that the Bohr model (red) is for solutions of the Schrödinger equation without spin, the fine structure (blue) includes spin-orbit and relativistic corrections, and the Lamb shift (green) is a QED radiation correction.</p>
LCAO-Methode	<p>Methode, bei der für die Wellenfunktion von Molekülen eine Linearkombination von Atomorbitalen gewählt wird. Wird z.B. bei der Abschätzung der Grundzustandsenergie von <math>H_2^+</math> verwendet.</p>
Methode des selbstkonsistenten Feldes	<p>Iteratives, numerisches Lösungsverfahren für die Einteilchenwellenfunktionen in einem Vielteilchensystem. Bricht ab, wenn sich die Wellenfunktionen nicht mehr merklich ändert.</p>
minimalen Substitution	<p>Substitution in der kl. Mechanik, um die Wechselwirkung eines geladenen Teilchens mit einem B-Feld zu beschreiben.</p> $\vec{p} \rightarrow \vec{p} - q\vec{A}$ <p>Die zusätzliche Berücksichtigung des skalaren Potentials <math>\varphi</math> erfordert den Term <math>q\varphi</math>.</p>

	<p>Der Hamilton-Operator ist dann</p> $\hat{H} = \frac{1}{2m}(\hat{p} - q\vec{A})^2 + q\varphi$
Morse-Potential	<p>Empirisches Potential, das die Energie eines zweiatomigen Moleküls in Abhängigkeit vom Kernabstand beschreibt.</p>  <p>Abbildung 5: Morse-Potential für H<sub>2</sub>.</p> <p>Wurde im Zusammenhang mit dem H<sub>2</sub>-Molekül genannt.</p>
optisches Theorem	<p>Theorem, das den totalen Wirkungsquerschnitt <math>\sigma_{\text{tot}}</math> mit dem Imaginärteil der Vorwärtsstreuamplitude <math>f(\vec{k}, \vec{k})</math> verknüpft</p> $\text{Im} f(\vec{k}, \vec{k}) = \frac{k}{4\pi} \sigma_{\text{tot}}$
Partialwellenanalyse	<p>Methode, bei der eine ebene Welle gemäß</p> $e^{ikz} = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \cdot i^l \cdot j_l(kr) \cdot P_l(\cos \theta)$ <p>in Drehimpulskomponenten (<math>l = 0, 1, 2, \dots</math>) zerlegt wird. Diese werden für große Abstände als Partialwellen interpretiert. Sie taucht in der Streutheorie zur Beschreibung der Streuung an rotationssymmetrischen Potentialen auf.</p>
Pauli-Prinzip	<p>Zwei identische Fermionen können nicht im selben Zustand sein.</p>

Pauli-Theorem	<p>Besagt, dass falls zwei Sätze von Gamma-Matrizen die Clifford-Algebra erfüllen</p> $\{\gamma^\mu, \gamma^\nu\} = 2g^{\mu\nu}, \quad \{\gamma'^\mu, \gamma'^\nu\} = 2g^{\mu\nu}$ <p>eine nicht singuläre Matrix <math>S</math> existiert, sodass die folgende Ähnlichkeitstransformation gilt</p> $S\gamma^\mu S^{-1} = \gamma'^\mu$
Polarisation (des Ensembles)	<p>Erwartungswert von <math>2\hat{S}_i</math></p> $\langle 2\hat{S}_i \rangle = \text{Spur}(2\hat{\rho}\hat{S}_i)$
Potentialstreuung	<p>Problem, in dem Teilchen an einem externen Potential gestreut werden.</p> <p>Dafür wird angenommen, dass das Targetpotential stationär ist und von der Streuung nicht beeinflusst wird.</p>
Quadrupolstrahlung	<a href="#">siehe E2-Strahlung</a>
Ritzsches Variationsverfahren	<p>Näherungsverfahren, mit dem eine obere Schranke für die Energien von Zuständen (meist des Grundzustands) gefunden werden kann</p> $E_0 \leq \frac{\langle \psi   \hat{H}   \psi \rangle}{\langle \psi   \psi \rangle}, \quad E_1 \leq \frac{\langle \tilde{\phi}   \hat{H}   \tilde{\phi} \rangle}{\langle \tilde{\phi}   \tilde{\phi} \rangle}, \quad \dots$ <p>mit <math> \tilde{\phi}\rangle = (\mathbb{1} -  0\rangle\langle 0 ) \phi\rangle</math> und <math> 0\rangle =  \psi\rangle</math> in der Praxis.  Die obere Schranke wird gemäß <math>\tilde{\nabla}_\lambda f = 0</math> minimiert, wobei <math>\lambda</math> für die Parameter der Wellenfunktion <math>f</math> steht.</p>
Rutherford-Wirkungsquerschnitt	<p>Differentieller Wirkungsquerschnitt für die Streuung eines geladenen Teilchens an einer Punktladung</p> $\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{\tilde{\alpha}^2}{16E^2} \frac{1}{\sin^4(\theta/2)}$
Schalenmodell	<p>Modell für ein fermionisches Vielteilchensystem, in dem die Wechselwirkung der Fermionen untereinander vernachlässigt wird.</p> <p>Die Einteilchenzustände werden dann in der Reihenfolge zunehmender Energie besetzt.</p>

Slater-Determinante	<p>Konstruiert für ein System aus Fermionen einen antisymmetrischen Zustand aus den Einteilchenlösungen</p> $ \psi_E^F\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_P \text{sgn}(P)  E_{\alpha_{P(1)}}\rangle \otimes \dots \otimes  E_{\alpha_{P(N)}}\rangle$
Spin-Statistik-Theorem	<p>Besagt:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>Die Wellenfunktion eines Systems aus <math>N</math> identischen <b>Fermionen</b> ist <b>vollständig antisymmetrisch</b>, wechselt also ihr Vorzeichen unter Vertauschung zweier Teilchen</li> </ul> $\hat{P}_{ij}\psi(1, \dots, i, \dots, j, \dots, N) = -\psi(1, \dots, i, \dots, j, \dots, N)$ <ul style="list-style-type: none"> <li>Die Wellenfunktion eines Systems aus <math>N</math> identischen <b>Bosonen</b> ist <b>vollständig symmetrisch</b>, behält also ihr Vorzeichen unter Vertauschung zweier Teilchen</li> </ul> $\hat{P}_{ij}\psi(1, \dots, i, \dots, j, \dots, N) = +\psi(1, \dots, i, \dots, j, \dots, N)$
Streuamplitude	<p>Term <math>f(\vec{k}, \vec{k}')</math> in der Lösung der Schrödinger-Gleichung für im Unendlichen verschwindende Potentiale</p> $\psi_{\vec{k}}(\vec{x}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \left( e^{i\vec{k}\vec{x}} + \frac{e^{ikr}}{r} f(\vec{k}, \vec{k}') \right)$ <p>Das Betragsquadrat der Streuamplitude ist der differentielle Wirkungsquerschnitt</p> $\frac{d\sigma}{d\Omega} =  f(\theta) ^2$ <p><a href="#">Taucht bei der Behandlung von Streuproblemen auf.</a></p>
Unitaritätsschranke (unitarity bound)	<p>Obere Schranke für den partiellen WQ <math>\sigma_l(k)</math> (<math>\sigma(k) = \sum_l \sigma_l(k)</math>) in der Partialwellenanalyse und Niederenergiestreuung.</p> $\sigma_l(k) = \frac{4\pi}{k^2} (2l+1) \sin^2(\delta_l) \leq \frac{4\pi}{k^2} (2l+1)$
Variationsmethode	<a href="#">siehe Ritzsches Variationsverfahren</a>
verborgene Parameter	Parameter, die nach Einstein, Podolsky und Rosen die probabilistische Natur der Quantenmechanik erklären und somit auflösen sollten.

verschränkte Zustände	<p>Zustände, die sich nicht als ein Tensorprodukt zweier separater Zustände schreiben lassen, sondern als Summe mehrerer Produktzustände vorliegen, z.B. <math> \psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}( \uparrow\rangle \otimes  \downarrow\rangle \pm  \downarrow\rangle \otimes  \uparrow\rangle)</math>.</p> <p>Das Messergebnis eines Teilchens ist bei solchen Zuständen mit dem Ergebnis anderer Teilchen korreliert.</p>
von-Neumann-Gleichung	<p>Gleichung, die die zeitliche Entwicklung der Dichtematrix beschreibt</p> $\frac{\partial}{\partial t} \hat{\rho} = -\frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{\rho}]$
Wentzel-Kramers-Brillouin Näherung	<p>Methode zur näherungsweisen Lösung der Schrödinger-Gleichung für langsam veränderliche Potentiale gegenüber der Ausdehnung der de-Broglie-Wellenlänge des Teilchens.</p> <p>Sie verwendet den Ansatz <math>\psi(\vec{x}, t) = e^{\frac{i}{\hbar} W(\vec{x}, t)}</math> bzw.</p> $u(\vec{x}) = u^{\frac{i}{\hbar} S(\vec{x})} = \exp\left(\frac{i}{\hbar} \sum_k \left(\frac{\hbar}{i}\right)^k S_k(\vec{x})\right)$ <p>für stationäre Probleme.</p>
WKB-Näherung	<a href="#">siehe Wentzel-Kramers-Brillouin Näherung</a>
Yukawa-Potential	<p>Potential, das die endliche Reichweite der starken Wechselwirkung modelliert</p> $V(r) = \frac{V_0}{\mu} \frac{e^{-\mu r}}{r}$
Zentralfeldnäherung	Mittelung der effektiven Potentiale in der Hartree- und Hartree-Fock-Methode über den Winkel. D.h. dass das Potential als kugelsymmetrisch genähert wird.
zweite Quantisierung	<p>Quantisierung des relativistischen "Wellenfeldes"</p> <p>Dabei werden die Wellenfunktion zu Operatoren, um QFT-Effekte beschreiben zu können.</p>