

Quantenmechanik

Jonas Spinner
27. Februar 2022

Bitte nicht diese pdf weiterverbreiten,
sondern den Link <https://www.jspinner.de>.
Dort gibts die aktuelle Version!

Dies ist eine privat erstellte Zusammenfassung und richtet sich an einen Studenten, der das Thema bereits aus einer Einführungsvorlesung kennt. Übersichtlichkeit und Struktur sind mir besonders wichtig, deshalb schreibe ich in Stichpunkten. Ich kommentiere die Themen, die ich wichtig finde und zeige die Rechnungen, die ich lehrreich finde. Insbesondere versuche ich, Aussagen zu verallgemeinern und direkt zu formulieren, was sicherlich manchmal schief geht. Ich freue mich über Rückmeldungen!

Im Folgenden eine kleine Liste von Quellen, auf die ich beim Anfertigen dieser Zusammenfassung zurückgegriffen habe. Die Punkte sind nach abnehmender Relevanz geordnet.

- Sakurai, Napolitano - Modern quantum mechanics: Kurz und präzise in den Grundlagen
- Einführungsvorlesung 2019 bei Nierste(TheoD) und 2019/2020 bei Zeppenfeld(TheoE)
- Lecture notes 2018/19 Melnikov(TheoE)
- Cohen-Tannoudji - Quantenmechanik: Fokus auf viele(ehrliche) Rechnungen
- Überschneidung mit Gruppentheorie-Zusammenfassung bei Drehimpulsen, relativistischer Quantenmechanik

Überblick

- Quantenmechanik = Lineare Algebra in der Natur
 - Anschaulich: Es geht um Matrizen (evtl unendlichdimensional), Skalarprodukte, Vollständigkeitsrelationen, Basiswechsel und Diagonalisierung
 - Neu: Postulate der Quantenmechanik (Lineare-Algebra-Konzepte bekommen eine physikalische Interpretation)
 - Kann Lineare-Algebra-Problem durch Wahl einer Basis (Ort- oder Impulsbasis) in Analysis-Problem (Wellenfunktion/Ableitungen/Integrale) umwandeln
 - Trick 17 in Quantenmechanik: Vollständigkeitsrelation verwenden
- Die Dirac-Notation verinnerlicht das Konzept, dass Quantenmechanik basisunabhängig ist
 - Problem der Dirac-Notation: In ihr sehen manche Aussagen so trivial aus, dass es schwer fällt sie aufzuschreiben
 - Gute Übung: Kann jedes Quantenmechanik-Problem basisunabhängig lösen
- Der “Quanten-Teil” von Quantenmechanik: Nicht-kommutierende Operatoren
 - Nicht-kommutierende Operatoren \Rightarrow Ergebnisse hängen davon ab, in welcher Reihenfolge man Operatoren anwendet \Rightarrow Probleme mit Determinismus
 - Kommutatoren sind oft proportional zu $\hbar \Rightarrow$ Interpretiere \hbar als Maß dafür, wie wichtig Quanteneffekte sind
 - * Typische Wirkung von Quantenmechanik-Effekten: $\hbar \sim 10^{-34} \text{ Js}$
 - * Typische Wirkung im Alltag: $Et \sim 1 \text{ J} 1 \text{ s} = 1 \text{ Js} \gg \hbar$
 - * Fazit: Für $Et \sim 10^{-34}$ (geringe Energien und/oder kurze Zeiten) werden Quantenmechanik-Effekte wichtig
- Struktur
 1. Grundlagen (Kapitel 1-3)
 2. Anwendungen (Kapitel 4-7)
 3. Bonus-Themen (Kapitel 8)

Inhaltsverzeichnis

1	Statik	5
1.1	Hilbertraum	5
1.1.1	Hilbertraum \mathcal{H} mit Zuständen $ a\rangle \in \mathcal{H}$	5
1.1.2	Dualraum \mathcal{H}^* des Hilbertraums \mathcal{H} mit Darstellungen $\langle a \in \mathcal{H}^*$	6
1.1.3	Basis eines Hilbertraums	6
1.1.4	Tensorprodukt	7
1.1.5	Kommentar: Unterschiedliche Behandlung von $\dim \mathcal{H} < \infty$ und $\dim \mathcal{H} = \infty$	7
1.2	Lineare Operatoren auf einem Hilbertraum	7
1.2.1	Linearer Operator A	7
1.2.2	Eigenschaften linearer Operatoren	8
1.2.3	Eigenzustände und Eigenwerte	9
1.2.4	Kommutierende und nicht kommutierende Operatoren	9
1.2.5	Typen von Operatoren	9
1.2.6	Symmetrien und Erhaltungsgrößen	10
1.2.7	Was ändert sich bei einem Basiswechsel im Erwartungswert $\langle a A a\rangle$?	10
1.3	Kopenhagener Interpretation der Messung	10
1.3.1	Elemente des Hilbertraums als Zustände	10
1.3.2	Observablen	11
1.3.3	Messung als spontane Zustandsreduktion	11
1.3.4	Wahrscheinlichkeitsdeutung	11
1.3.5	Korrespondenzregel	11
1.4	Diskrete Transformationen	11
1.4.1	Eigenschaften von Z_2 -Transformationen \mathcal{Z} (bzw. $\mathcal{Z}^2 = 1$)	11
1.4.2	Parität \mathcal{P}	12
1.4.3	Zeitumkehr/Bewegungsumkehr \mathcal{T}	13
1.4.4	Ladungskonjugation	13
1.5	Anwendungen	13
1.5.1	Überlegung zu $[X, P] = i\hbar$	13
1.5.2	Unschärferelation $\Delta A \Delta B \geq \frac{1}{2} \langle \psi [A, B] \psi \rangle $	14
1.5.3	Aharonov-Bohm-Effekt	14
1.5.4	Gemischte Zustände	15
1.5.5	Gebundene und ungebundene Zustände	15
1.5.6	Quantenmechanischer Harmonischer Oszillator $H = \frac{1}{2m}P^2 + \frac{m\omega^2}{2}X^2$	16
1.5.7	Verschränkung und das EPR-Paradoxon	17
1.5.8	Ehrenfest-Theorem	17
1.5.9	Energiebänder in Festkörpern	17
2	Dynamik	19
2.1	Zeit in der Quantenmechanik	19
2.1.1	Zeit ist ein Parameter	19
2.1.2	Der Zeitentwicklungsoperator $U(t, t_0)$	19
2.2	Bilder der Quantenmechanik im Vergleich	20
2.2.1	Schrödinger-Bild $i\hbar \partial_t \psi, t\rangle = H \psi, t\rangle$	20
2.2.2	Heisenberg-Bild $\frac{d}{dt} A(t) = \frac{i}{\hbar} [H, A(t)] + \frac{\partial}{\partial t} A(t)$	21
2.2.3	Wechselwirkungs-Bild $H(t) = H_0 + V(t)$, $i\hbar \partial_t \psi, t\rangle_I = V_I(t) \psi, t\rangle_I$, $\frac{d}{dt} A_I = \frac{i}{\hbar} [H_0, A_I]$	21
2.2.4	Übergang zwischen den Bildern	21

3	Drehimpulse	23
3.1	Drehoperator und Drehimpulsoperator	23
3.1.1	Drehimpulsoperator \vec{J} und Drehoperator $\mathcal{D}(\vec{\alpha})$	23
3.1.2	Leiteroperatoren $J_{\pm} = J_1 \pm iJ_2$	23
3.1.3	Eigenwerttheorie des Drehimpulsoperators $\vec{J}^2 jm\rangle = j(j+1)\hbar^2 jm\rangle$, $J_3 jm\rangle = m\hbar jm\rangle$	24
3.2	Darstellungen von Drehoperator und Drehimpulsoperator = Darstellungstheorie von $\mathfrak{su}(2)$ und $SU(2)$	25
3.2.1	Matrixelemente des Drehimpulsoperators $\langle j'm' J_i jm \rangle$	25
3.2.2	Matrixelemente des Drehoperators $\langle j'm' \mathcal{D}(\vec{\alpha}) jm \rangle$	25
3.2.3	Eulerwinkel-Darstellung	26
3.3	Drehimpulsaddition	26
3.3.1	Grundlagen	26
3.3.2	Anmerkungen zu Clebsch-Gordon-Koeffizienten $\langle j_1 j_2 m_1 m_2 j_1 j_2 jm \rangle$	27
3.3.3	Konstruktion der Clebsch-Gordon-Koeffizienten	28
3.3.4	Wigner-3j-Symbole	28
3.3.5	Drehimpulsaddition der Wigner-Funktionen	29
3.4	Tensoroperatoren	29
3.4.1	Tensoroperator (Vertiefung in Gruppentheorie)	29
3.4.2	Wigner-Eckart-Theorem	30
3.5	Anwendungen	31
3.5.1	Spin, Bahndrehimpuls, Gesamtdrehimpuls	31
3.5.2	Hamiltonoperator eines Zentralpotential-Problems	31
3.5.3	Energie-Eigenzustände eines Zentralpotential-Problems	32
3.5.4	Wasserstoff-Problem $H = \frac{p_r^2}{2m} + \frac{\vec{L}^2}{2mR^2} - \frac{\hbar c \alpha}{R}$	32
4	Störungstheorie	34
4.1	Zeitunabhängige Störungstheorie	34
4.1.1	Grundlagen	34
4.1.2	Entartung anschaulich	34
4.1.3	Master-Gleichung	35
4.1.4	Rechnung im nicht entarteten Fall	36
4.1.5	Rechnung im entarteten Fall	36
4.1.6	Renormierung von $ n\rangle$	38
4.2	Variationsmethode	38
4.2.1	Grundlagen	38
4.2.2	Theorem $\langle \psi H \psi \rangle \geq E_0$	38
4.3	WKB-Methode	39
4.3.1	Grundlagen	39
4.3.2	Rechnung mit der WKB-Methode	39
4.4	Zeitabhängige Störungstheorie	39
4.4.1	Grundlagen	39
4.4.2	Allgemeine Rechnung	40
4.4.3	Konstante Störung $V(t) = V\Theta(t)$	41
4.4.4	Harmonische Störung $V(t) = V e^{i\omega t} + V^\dagger e^{-i\omega t}$	41
4.4.5	Allgemeine Störung	41
4.4.6	Fermis Goldene Regel $\omega_{i \rightarrow n} = \frac{2\pi}{\hbar} \left(\sum_{n: E_n = E_i} V_{in} ^2 \right) \rho(E_i)$	42
4.4.7	Energieerhaltung in Quantenmechanik	42
4.5	Extreme Zeitabhängigkeiten	43
4.5.1	Sudden approximation	43
4.6	Anwendungen	43
4.6.1	H-Atom im statischen B-Feld	43
4.6.2	H-Atom im statischen E-Feld	44
4.6.3	Übergänge des H-Atoms im freien Strahlungsfeld	44

5	Streutheorie	46
5.1	Grundlagen	46
5.1.1	Streuung	46
5.1.2	Größen zur Beschreibung von Streuung	46
5.2	Stationäre, elastische Streuung	47
5.2.1	Grundlagen	47
5.2.2	Optisches Theorem $\sigma = \frac{4\pi}{k} \text{Im} f(0)$	47
5.2.3	Partialwellenentwicklung	48
5.3	Störungstheorie mit der Lippmann-Schwinger-Gleichung	48
5.3.1	Übersicht	48
5.3.2	Formale Rechnung mit der Lippmann-Schwinger-Gleichung	49
5.3.3	Altmodische Störungstheorie für QFT	50
6	Vielteilchensysteme	51
6.1	Vielteilchenzustände	51
6.1.1	Notation	51
6.1.2	Identische Teilchen	51
6.1.3	Permutations-Eigenwerte	52
6.2	Anwendungen	52
6.2.1	Statistik für 2-Teilchen-Zustände	52
6.2.2	2-Elektronen-System	52
6.2.3	Quantisierung des freien Strahlungsfelds	53
7	Relativistische Quantenmechanik	55
7.0.1	Grundlagen	55
7.1	Relativistische Bewegungsgleichungen	56
7.1.1	Klein-Gordon-Gleichung $\left(\partial_\mu \partial^\mu + \left(\frac{mc}{\hbar}\right)^2\right) \psi = 0$	56
7.1.2	Dirac-Gleichung $(i\gamma^\mu \partial_\mu - \frac{mc}{\hbar}) \psi = 0$	56
7.1.3	Lösungen der Bewegungsgleichungen	57
7.2	Elektromagnetische Wechselwirkung	58
7.2.1	Minimale Substitution $p^\mu \rightarrow p^\mu - qA^\mu$	58
7.2.2	Pauli-Gleichung $H = \frac{(\vec{p} - q\vec{A})^2}{2m} - \frac{q}{m} \vec{S} \vec{B} + q\phi$	58
8	Dinge, über die man in der Vorlesung eher nicht redet	60
8.0.1	Interpretationen der Quantenmechanik	60
8.0.2	Formulierungen der Quantenmechanik	60
8.1	Pfadintegralformalismus mit Pfadintegral $\langle q_f, t_f q_i, t_i \rangle = \int_{q(t_i)=q_i}^{q(t_f)=q_f} \mathcal{D}q e^{\frac{i}{\hbar} S[q]}$	61
8.1.1	Anschaulich	61
8.1.2	Ableitung aus dem kanonischen Formalismus für ein Teilchen im Potential $H = \frac{p^2}{2m} + V(X)$	61

Kapitel 1

Statik

1.1 Hilbertraum

1.1.1 Hilbertraum \mathcal{H} mit Zuständen $|a\rangle \in \mathcal{H}$

- Notation für Zustände: $|a\rangle$ mit einer Liste a
 - Basisunabhängige Notation: $|a\rangle$ ist Element eines Hilbertraums, dessen Basis nicht gewählt wurde
 - * Nachteil: Kann $|a\rangle$ nicht als Vektor hinschreiben
 - * Vorteil: Es ist trivial zu sehen, dass Ergebnisse nicht von der Basis des Hilbertraums abhängig sind
 - Zustand soll durch die Quantenzahlen a eindeutig charakterisiert werden
 - * Quantenzahlen a können Eigenwerte von Operatoren (zB x, p) oder normale Parameter (zB t) sein
 - Lässige Notation für Operator A , der auf den Zustand $|a\rangle$ wirkt: $|Aa\rangle := A|a\rangle$
 - * Sieht seltsam aus für eine Liste von Quantenzahlen a , man versteht aber was gemeint ist
- Definition Hilbertraum: Vektorraum \mathcal{H} heißt Hilbertraum $\iff \mathcal{H}$ ist vollständig, separabel und unitär
 - \mathcal{H} heißt unitär \iff Auf \mathcal{H} ist ein Skalarprodukt $\langle \cdot | \cdot \rangle : \mathcal{H} \times \mathcal{H} \rightarrow \mathbb{C}$ definiert
 - * Abbildung $\langle \cdot | \cdot \rangle : \mathcal{H} \times \mathcal{H} \rightarrow \mathbb{C}$ heißt (komplexes) Skalarprodukt, falls folgende Eigenschaften erfüllt sind
 - Positiv semidefinit: $\langle a | a \rangle \geq 0$, $\langle a | a \rangle = 0 \iff a = 0$
 - Antilinear im ersten Argument: $\langle \lambda_1 a_1 + \lambda_2 a_2 | b \rangle = \lambda_1^* \langle a_1 | b \rangle + \lambda_2^* \langle a_2 | b \rangle$
 - Linear im zweiten Argument: $\langle a | \lambda_1 b_1 + \lambda_2 b_2 \rangle = \lambda_1 \langle a | b_1 \rangle + \lambda_2 \langle a | b_2 \rangle$
 - * Skalarprodukt definiert Norm: $\|a\| = \sqrt{\langle a | a \rangle}$
 - * Skalarprodukt definiert Orthogonalität: $|a\rangle$ und $|b\rangle$ heißen orthogonal $\iff \langle a | b \rangle = 0$
 - \mathcal{H} heißt vollständig \iff Jede konvergente Folge in \mathcal{H} hat ihren Grenzwert in \mathcal{H}
 - * Für Definition von Konvergenz benötigte Norm durch das Skalarprodukt von \mathcal{H} definiert
 - \mathcal{H} heißt separabel $\iff \mathcal{H}$ hat eine Basis mit höchstens abzählbar vielen Elementen
- Physikalische Zustände sind Strahlen im Hilbertraum \mathcal{H}
 - Anschaulich: Zustände sind normiert $\langle a | a \rangle = 1$ und nur bis auf komplexe Phase $e^{i\phi}$ bestimmt
 - Unterschied zwischen Strahlen und Vektoren: Ein Strahl ist eine Menge von normierten Vektoren, wobei zwei Vektoren $|a\rangle, |b\rangle$ mit $|a\rangle = c|b\rangle$ und $|c| = 1$ zum selben Strahl gehören
 - Gruppentheorie: Zustände transformieren sich unter projektiven Darstellungen der Symmetriegruppen
 - * Anschaulich: Unterscheide nicht zwischen Transformationen, die die Phase ändern
- Beispiele für Hilberträume
 - Endlichdimensionaler, unitärer Vektorraum
 - ℓ^2 : Quadratisch summierbare Zahlenfolgen (\Rightarrow Heisenbergsche Matrizenmechanik)

- * Kann diskrete Vektoren als Basis verwenden, da es höchstens abzählbar viele Basiselemente gibt
- * Kann mir Abbildungen zwischen Folgen als Matrizen(unendlich groß, aber diskret) vorstellen
- L^2 : Quadratintegrable Funktionen mit Erweiterung, dass Funktionen mit endlich vielen unterschiedlichen Punkten eine Äquivalenzklasse bilden(\Rightarrow Schrödingers Wellenmechanik)
 - * Wellenfunktionen mit Quantenzahlen als Indizes sind Darstellung der Zustände
- Mathematik sagt: Hilberträume gleicher Dimension sind isomorph
 - $\dim \mathcal{H} = \infty$: Matrizenmechanik und Wellenmechanik sind äquivalent
 - $\dim \mathcal{H} < \infty$: Unitäre Basiswechsel für Matrizen ändern das System nicht

1.1.2 Dualraum \mathcal{H}^* des Hilbertraums \mathcal{H} mit Darstellungen $\langle a | \in \mathcal{H}^*$

- Dualraum \mathcal{H}^* des Hilbertraums \mathcal{H} : Menge der linearen Abbildungen $\langle a | : \mathcal{H} \rightarrow \mathbb{C}$
 - Anschaulich: Dualraum ist Vektorraum der Bras/Darstellungen
- Interpretation von $\langle a | b \rangle$
 - Zustand $|b\rangle$ in der a -Darstellung
 - Zustand $|a\rangle$ in der b -Darstellung und komplex konjugiert
 - Skalarprodukt der basisunabhängigen Zustände $|a\rangle, |b\rangle$ in einem beliebigen Hilbertraum
- Mehr Darstellungen als Zustände
 - Für $\dim \mathcal{H} < \infty$ gibt es zu jedem Zustand eine Darstellung und umgekehrt($\mathcal{H} \simeq \mathcal{H}^*$)
 - Für $\dim \mathcal{H} = \infty$ gibt es zu jedem Zustand eine Darstellung, aber nicht umgekehrt
 - * Problem: Orts- und Impulsoperator sollten kontinuierliches Spektrum und damit kontinuierliche Eigenzustände haben
 - * Lösung: Orts- und Impulseigenzustände sind gemäßigte Distributionen mit $\langle x_1 | x_2 \rangle = \delta(x_1 - x_2)$, $\langle p_1 | p_2 \rangle = \delta(p_1 - p_2)$
 - * Die Zustände $|x\rangle, |p\rangle$ sind nicht normiert und daher streng genommen keine Elemente des Hilbertraums (nicht-physikalische Zustände)
 - * Achtung: Aussage(mehr Bras als Kets) ist irreführend, da man durch komplexe Konjugation Darstellungen zu Zuständen machen kann
 - Besser: Finde beliebig genaue Orts- und Impulseigenzustände, aber Grenzwert liegt nicht in \mathcal{H}
 - * Anschaulich: Finde beliebig genaue Darstellungen der Delta-Distribution über Gaußkurve etc
 - Interpretation: Ort- und Impulseigenzustände sind unphysikalisch
 - * Physikalische Überlegung: Impuls eines Ortseigenzustands in der Ortsdarstellung $\langle y | P | x \rangle = -i\hbar \partial_x \langle x | y \rangle = -i\hbar \partial_x \delta(x - y)$ undefiniert

1.1.3 Basis eines Hilbertraums

- $\{|e_1\rangle, \dots, |e_n\rangle\}$ heißt Orthonormalbasis von $\mathcal{H} \iff \langle e_i | e_j \rangle = \delta_{ij}$
 - Zustände sind normiert \Rightarrow Orthogonalbasis = Orthonormalbasis
 - Basisunabhängige Darstellung: Es existiert eine Orthonormalbasis \Rightarrow Wähle die Orthonormalbasis
- Basis erfüllt Vollständigkeitsrelation $1 = \sum_i |e_i\rangle \langle e_i|$
 - Anwendung: Entwicklung eines Zustands $|a\rangle$ in einer Orthonormalbasis: $|a\rangle = \sum_i |e_i\rangle \langle e_i | a \rangle = \sum_i a_i |e_i\rangle$
- Symmetry representation theorem(Wigner): Basiswechsel/Symmetrietransformationen im Hilbertraum der physikalischen Zustände werden durch lineare unitäre oder antilineare antiunitäre Operatoren beschrieben

- Kontinuierliche Basiswechsel stetig müssen aus $U = 1$ (linear, unitär) hervorgehen und daher auch linear und unitär sein
 - * Das gilt für die meisten Basiswechsel \Rightarrow Antilineare antiunitäre Operatoren kommen nicht oft vor (ich kenne nur Zeitumkehroperator)

1.1.4 Tensorprodukt

- Tensorprodukt (= direktes Produkt) von 2 Hilberträumen $\mathcal{H}, \mathcal{H}'$: $\mathcal{H} \otimes \mathcal{H}'$, $\dim(\mathcal{H} \otimes \mathcal{H}') = \dim \mathcal{H} \times \dim \mathcal{H}'$
 - Mit Basisvektoren $|e_i\rangle$ von \mathcal{H} und $|e'_i\rangle$ von \mathcal{H}' hat $\mathcal{H} \otimes \mathcal{H}'$ die Basisvektoren $|e_i\rangle \otimes |e'_i\rangle$
 - Anschaulich: Neue Basisvektoren sind alle möglichen direkten Produkte der alten Basisvektoren
- Interpretation
 - Je ein Hilbertraum für jeden Freiheitsgrad des Systems, direktes Produkt der Hilberträume liefert Hilbertraum des Gesamtsystems
 - Operatoren als Matrizen ($\dim \mathcal{H} < \infty$): Schreibe in jedes Matricelement des Operators in \mathcal{H} die komplette Matrixdarstellung des Operators in \mathcal{H}' und multipliziere mit dem Eintrag des Operators von \mathcal{H}
- Notationen für Elemente aus $\mathcal{H} \otimes \mathcal{H}'$: $|e_i\rangle \otimes |e'_i\rangle =: |e_i e'_i\rangle$
 - Neue Quantenzahlen sind Vereinigung der alten Quantenzahlen
- Warum der Begriff Tensorprodukt?
 - Für endlichdimensionale Hilberträume sind die Zustände Tensoren (Objekte mit n offenen Indizes)
- $\mathcal{H} \otimes \mathcal{H}'$ ist mehr als die Kombinationen von \mathcal{H} und \mathcal{H}'
 - Vergleiche $|a\rangle \in \mathcal{H} \otimes \mathcal{H}'$ mit $|a\rangle = \sum_{i,j} a_{ij} |e_i\rangle \otimes |e'_j\rangle$ und $|a\rangle \in \mathcal{H}, |b\rangle \in \mathcal{H}', |a\rangle \otimes |b\rangle = \sum_{i,j} a_i b_j |e_i\rangle \otimes |e'_j\rangle$
 - a_{ij} ist allgemeiner als $a_i b_j$
- Beispiel
 - \vec{L} und \vec{S} : Zwei Hilberträume \mathcal{H}_L und \mathcal{H}_S mit Produkthilbertraum $\mathcal{H} = \mathcal{H}_L \otimes \mathcal{H}_S$: $\vec{S} = \mathbb{1}_L \otimes \vec{S}_S, \vec{L} = \vec{L}_L \otimes \mathbb{1}_S$ und $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S} = \vec{L}_L \otimes \mathbb{1}_S + \mathbb{1}_L \otimes \vec{S}_S$

1.1.5 Kommentar: Unterschiedliche Behandlung von $\dim \mathcal{H} < \infty$ und $\dim \mathcal{H} = \infty$

- Streng genommen muss man die QM für beide Fälle getrennt formulieren
 - $\sum_i \rightarrow \int di, \delta_{ij} \rightarrow \delta(x_i - x_j)$ etc
 - Kompromiss: Behandle die Fälle gemeinsam und verzichte auf mathematische Strenge
- Dirac-Formalismus erlaubt gemeinsame Behandlung der beiden Fälle
 - Vorteil: Kompakte Beschreibung
 - Nachteil: Formell nicht hasenrein (aber nicht falsch)

1.2 Lineare Operatoren auf einem Hilbertraum

1.2.1 Linearer Operator A

- A heißt linearer Operator: $\iff A: \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ mit $A(\alpha|a\rangle + \beta|b\rangle) = \alpha A|a\rangle + \beta A|b\rangle$
- Zu A hermitesch konjugierter Operator A^\dagger : $\langle a|A|b\rangle = \langle a|Ab\rangle = \langle A^\dagger a|b\rangle$
- Zu A Inverser Operator A^{-1} : $AA^{-1}|a\rangle = A^{-1}A|a\rangle = |a\rangle$
- Verknüpfung von Operatoren

- Addition ist kommutativ und assoziativ
- Multiplikation ist nur assoziativ
- Matrixdarstellung eines Operators
 - Anschaulich: Wenn ich die Matricelemente des Operators bezüglich einer Basis kenne, weiß ich alles über den Operator
 - Matricelemente $A_{ij} = \langle e_i | A | e_j \rangle$ in der Basis $|e_i\rangle$ mit $A = \sum_{i,j} |e_i\rangle \langle e_i | A | e_j \rangle \langle e_j| = \sum_{i,j} |e_i\rangle A_{ij} \langle e_j|$
 - In der Eigenzustand-Basis ist A_{ij} diagonal: $A_{ij} = \langle e_i | A | e_j \rangle = a_j \langle e_i | e_j \rangle = a_j \delta_{ij}$
- Exotisch: Antilineare Operatoren
 - θ heißt antilinearer Operator : $\iff \theta(\alpha|a\rangle + \beta|b\rangle) = \alpha^* \theta|a\rangle + \beta^* \theta|b\rangle, \langle \theta a | \theta b \rangle = \langle a | b \rangle^* = \langle b | a \rangle$
 - θ heißt antiunitärer Operator : $\iff \langle \theta a | \theta b \rangle = \langle a | b \rangle^*$
 - Auch Transformationen mit antilinearen antiunitären Operatoren lassen Wahrscheinlichkeiten invariant \Rightarrow Sind genauso erlaubt wie lineare unitäre Operatoren
 - * $\langle a | b \rangle \rightarrow \langle \theta a | \theta b \rangle = \langle a | b \rangle^*$ lässt $|\langle a | b \rangle|$ invariant
 - Kann antiunitären Operatoren θ zerlegen in $\theta = UK$ mit unitärem Operator U und Komplex-Konjugiert-Operator $K(K\alpha|a\rangle = \alpha^* K|a\rangle)$
 - Achtung: Dirac-Notation wurde für lineare Operatoren entwickelt, nicht für antilineare Operatoren
 - * Bsp: Kann Eigenschaften von θ in $\langle \theta a | \theta b \rangle = \langle a | b \rangle^*$ mit Dirac-Notation nicht gut beschreiben
 - Einziges mir bekanntes Bsp für antilinearen Operator: Zeitumkehroperator

1.2.2 Eigenschaften linearer Operatoren

- A heißt hermitesch $\iff \langle a | Ab \rangle = \langle Aa | b \rangle$
- A heißt selbstadjungiert $\iff A = A^\dagger$ bzw. A ist hermitesch und $\mathcal{D}(A) = \mathcal{D}(A^\dagger)$ mit Definitionsbereich \mathcal{D}
 - Selbstadjungierter Operator ist diagonalisierbar, hat reelle Eigenwerte und es gibt eine Basis, in der seine Eigenzustände orthonormal sind
 - Physiker nehmen an, dass sie keine Probleme mit Definitionsbereichen bekommen, und benutzen daher hermitesch als Synonym für selbstadjungiert
- A heißt unitär $\iff \mathcal{D}(A) = \mathcal{W}(A) = \mathcal{H}, \langle Aa | Ab \rangle = \langle a | b \rangle \iff A^\dagger A = 1$
 - \mathcal{D}/\mathcal{W} für Definitions-/Wertebereich
- Spur $\text{tr} A = \sum_n \langle n | A | n \rangle$ eines Operators A ist basisunabhängig
- Projektionsoperator $P: P^2 = P$
 - Projektionsoperator P_a auf den Zustand $|a\rangle$: $P_a = |a\rangle \langle a|$
- A heißt Normaloperator $\iff [A, A^\dagger] = 0$
 - Normaloperatoren sind diagonalisierbar
 - * Zerlegung $A = \frac{1}{2}(A + A^\dagger) + \frac{1}{2i}(iA - iA^\dagger)$ in einen hermiteschen ($B_1^\dagger = B_1$) Operator $B_1 = A + A^\dagger$ und einen antihermiteschen ($B_2^\dagger = -B_2$) Operator $B_2 = iA - iA^\dagger$
 - * B_1, B_2 sind hermitesch, antihermitesch und daher einzeln diagonalisierbar
 - * Wenn $[A, A^\dagger] = 0$, ist $[B_1, B_2] = 0$ und B_1, B_2 sind simultan diagonalisierbar, damit ist auch A diagonalisierbar
 - Hermitesche Operatoren $A^\dagger = A$ und unitäre Operatoren $A^\dagger = A^{-1}$ sind Spezialfälle von Normaloperatoren, da beide $[A, A^\dagger] = 0$ erfüllen

1.2.3 Eigenzustände und Eigenwerte

- $|a\rangle$ heißt Eigenzustand von A zum Eigenwert $a \iff A|a\rangle = a|a\rangle$
- Trick: Wähle Basis von Eigenzuständen(immer möglich für selbstadjungierten Operator)
- Spektrum von A : $\sigma_A = \{\lambda \in \mathbb{C} : A - \lambda \mathbb{1} \text{ hat kein beschränktes Inverses}\}$
 - Verallgemeinerung der Eigenwerte auf unendlichdimensionale Vektorräume
 - * Kein beschränktes Inverses bedeutet $\det(A - \lambda \mathbb{1}) = 0$ für unendlichdimensionalen Vektorraum
 - Grundlage für Berechnung der Eigenwerte
 - Unterscheide Punktspektrum(Menge der Eigenwerte) und kontinuierlichem Spektrum(Erweiterung)
 - * Kann zu Elementen des kontinuierlichen Spektrums beliebig genaue approximative Eigenzustände finden

1.2.4 Kommutierende und nicht kommutierende Operatoren

- Kommutierende Operatoren $[A, B] = 0$
 - Interpretation: Operatoren reden nicht miteinander(da $AB = BA$)
 - Kommutierende Operatoren haben gemeinsame Eigenzustände
 - Strategie: Bestimme vollständiges System kommutierender Observablen(vSkO) und wähle deren gemeinsame Eigenzustände als Basis
 - * Gemeinsame Eigenzustände sind Elemente des direkten Produkts der Hilberträume der Eigenzustände jedes einzelnen Operators
 - * Kann gemeinsame Eigenzustände eindeutig mit Quantenzahlen bezüglich aller Operatoren beschreiben
- Nicht kommutierende Operatoren $[A, B] \neq 0$
 - Interpretation: Operatoren reden miteinander($AB \neq BA$) \Rightarrow Neues Phänomen in Quantenmechanik
 - Kommutatoren von Observablen oft proportional zu \hbar : $[X, P] = i\hbar$, $[J_i, J_j] = i\hbar \epsilon_{ijk} J_k$
 - * Interpretation: Größe \hbar ist Maß dafür, wie groß QM-Effekte sind

1.2.5 Typen von Operatoren

- Observable X : $X^\dagger = X$
 - Hermitesch \Rightarrow Diagonalisierbar mit reellen Eigenwerten
 - Interpretation: Observable misst eine physikalische Größe, indem der Zustand mit bestimmter Wahrscheinlichkeit in einen Eigenzustand geändert wird, man erhält den entsprechenden Eigenwert als Ergebnis der Messung
- Basiswechsel U : $U^\dagger U = \mathbb{1}$
 - Unitär \Rightarrow Basiswechsel lässt Skalarprodukte invariant
 - Interpretation: Basiswechsel, zB Wechsel in Eigenzustand-Basis, Zeitentwicklung, Translation, Drehung
- Projektor P : $P^2 = P$
 - Mehrere Anwendungen eines Projektors liefern dasselbe Ergebnis $P^2 = P \Rightarrow$ Eigenwerte $\{0, 1\}$
 - Interpretation: Projektor lässt nur bestimmte Komponenten eines Zustands durch

1.2.6 Symmetrien und Erhaltungsgrößen

- Wirkung von unitären Transformationen auf Observablen
 - Transformationen mit unitären Operatoren lassen Wahrscheinlichkeiten invariant $\langle a|b\rangle \rightarrow \langle Ua|Ub\rangle = \langle a|U^\dagger U|b\rangle = \langle a|b\rangle \Rightarrow |\langle a|b\rangle|^2 = |\langle Ua|Ub\rangle|^2$
 - Kann Basiswechsel $|a\rangle \rightarrow |b\rangle = U|a\rangle$ mit $\langle a|X|a\rangle \rightarrow \langle a|U^\dagger XU|a\rangle$ auf mehrere Arten interpretieren
 1. Zustand ändert sich $|a\rangle \rightarrow |b\rangle = U|a\rangle$ mit unverändertem X
 2. Operator ändert sich $X \rightarrow U^\dagger XU$ mit unverändertem $|a\rangle$
 3. Zerlege $U = VW \Rightarrow$ Zustand $|a\rangle \rightarrow W|a\rangle$ und Operator $X \rightarrow V^\dagger XV$ ändern sich
 - Erwartungswert des Operators X bleibt gleich unter dem Basiswechsel $\Leftrightarrow [U, X] = 0$
 - * $[U, X] = 0 \Rightarrow X$ ist Erhaltungsgröße unter der Transformation U
- Kontinuierliche Transformationen S haben die Form $S = 1 - i\epsilon G$ mit Generator $G = G^\dagger$
 - $S^\dagger S = 1$ (unitär) erzwingt $G = G^\dagger$ (hermitesch)
 - Interpretation: Kontinuierliche Transformationen werden durch Observablen generiert
 - Vermutlich alle Observablen in der Quantenmechanik werden auf diese Art durch Transformationen motiviert
 - * Bsp für S/G : Zeitentwicklung/Energie, Translation/Impuls, Drehung/Drehimpuls ...

1.2.7 Was ändert sich bei einem Basiswechsel im Erwartungswert $\langle a|A|a\rangle$?

- Standardbild: Basiswechsel $|a\rangle \rightarrow U|a\rangle$ führt zu $\langle a|A|a\rangle \rightarrow \langle a|U^\dagger AU|a\rangle$
- Interpretation 1: $\langle a|U^\dagger AU|a\rangle = \langle b|A|b\rangle$
 - Zustände ändern sich $|a\rangle \rightarrow |b\rangle = U|a\rangle$
 - Operatoren bleiben gleich $A \rightarrow A$
- Interpretation 2: $\langle a|U^\dagger AU|a\rangle = \langle a|B|a\rangle$
 - Zustände bleiben gleich $|a\rangle \rightarrow |a\rangle$
 - Operatoren ändern sich $A \rightarrow B = U^\dagger AU$
- Interpretation 3: $\langle a|U^\dagger AU|a\rangle = \langle b|B|b\rangle$
 - Zerlege U geschickt in $U = VW$
 - Zustände ändern sich $|a\rangle \rightarrow |b\rangle = W|a\rangle$
 - Operatoren ändern sich $A \rightarrow B = V^\dagger AV$
- Alle 3 Interpretationen sind gleichwertig \Rightarrow Kann diese Interpretationsfreiheit geschickt wählen, um die Beschreibung des Problems zu vereinfachen
 - Bsp Zeitentwicklung: Interpretation 3 ist geschickt für zeitabhängige Störungstheorie

1.3 Kopenhagener Interpretation der Messung

1.3.1 Elemente des Hilbertraums als Zustände

- Postulat: $|a\rangle$ repräsentiert einen physikalischen Zustand des Systems
 - Hilbertraum \mathcal{H} ist der Raum aller möglichen Zustände des Systems
- Postulat: Multiplikation eines Faktors $\alpha \neq 0$ auf den Zustand ändert den Zustand nicht
 - Fordere Normierung der Zustände $\Rightarrow |\alpha| = 1$
 - Zustände sind nur bis auf eine komplexe Phase bestimmt

1.3.2 Observablen

- Postulat: Observablen(messbare physikalische Größen) werden durch hermitesche Operatoren $A^\dagger = A$ beschrieben
 - Hermitesch \Rightarrow Reelle Eigenwerte und Diagonalisierbarkeit(benötigt für physikalische Größen)
- Kommutierende Observablen heißen kommensurabel

1.3.3 Messung als spontane Zustandsreduktion

- Postulat: Durch die Messung der Observable A springt das System in einen Eigenzustand von A , und das mit einer Wahrscheinlichkeit $|\langle a_i | \psi \rangle|^2$ für den Zustand $|a_i\rangle$
 - System befindet sich vor der Messung der Observablen A im Zustand $|\psi\rangle = \sum_i |a_i\rangle \langle a_i | \psi \rangle$
 - Messung: Ein Term aus $\langle \psi | A | \psi \rangle = \sum_i a_i |\langle a_i | \psi \rangle|^2$ trägt bei
 - Nach der Messung bleibt das System im gemessenen Zustand
 - Nur Eigenwerte von A können gemessen werden(a_i im Zustand $|a_i\rangle$)
- Interpretation: Messung verändert den Zustand
 - Problem: Es gibt Zufall(schlechte Eigenschaft einer Theorie?)

1.3.4 Wahrscheinlichkeitsdeutung

- Postulat: Erwartungswert $\langle A \rangle$ der Observable A im Zustand $|\psi\rangle$ ist $\langle A \rangle := \langle \psi | A | \psi \rangle$
 - Mit Eigenzuständen $A|a_i\rangle = a_i|a_i\rangle$ gilt $\langle \psi | A | \psi \rangle = \sum_i \langle \psi | A | a_i \rangle \langle a_i | \psi \rangle = \sum_i a_i \langle \psi | a_i \rangle \langle a_i | \psi \rangle = \sum_i a_i |\langle a_i | \psi \rangle|^2$
- Unschärfe ΔA der Observable A im Zustand $|\psi\rangle$ ist $\Delta A := \sqrt{\langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2}$

1.3.5 Korrespondenzregel

- Postulat: Klassische Mechanik ist Grenzfall des Quantenmechanik
- Definiere mit Korrespondenzregel QM-Größen in Analogie zu klassischen Größen
 - Alle klassischen Größen können durch die kanonischen Variablen \vec{x}, \vec{p} ausgedrückt werden
 - * Zustand im Hamilton-Formalismus komplett charakterisiert durch Angabe von \vec{x}, \vec{p}
 - 1. Ersetze in klassischer Größe die Variablen \vec{x}, \vec{p} durch die entsprechenden Operatoren \vec{X}, \vec{P}
 - 2. Observablen hermitesch machen $a \rightarrow \frac{1}{2} (A + A^\dagger)$

1.4 Diskrete Transformationen

1.4.1 Eigenschaften von Z_2 -Transformationen Z (bzw $Z^2 = 1$)

- Darstellungen sind linear+unitär oder antilinear+antiunitär (“Symmetry Representation Theorem”)
 - Kontinuierliche Transformationen müssen linear+unitär sein, da sie stetig mit 1 (linear und unitär) verbunden sind
 - Diskrete Transformationen sind nicht stetig mit 1 verbunden \Rightarrow Können auch antilinear+antiunitär sein
 - * Es gibt nur wenige “Ausnahmen” (antilineare+antiunitäre Transformationen) \Rightarrow Nehme an, dass die Transformation linear+unitär ist, bis etwas schiefeht
 - Z ist linear+unitär $\Rightarrow 1 = ZZ^{-1} \stackrel{!}{=} ZZ^\dagger$ und $Z^2 = 1 \Rightarrow Z = Z^{-1} = Z^\dagger$
 - * Kann so eine Relation nicht für antilinear+antiunitäre Operatoren formulieren, da sie die Information “Vertauschung der Zustände” nicht enthalten kann

- Komplexe Phasen $\mathcal{Z}|a\rangle = \xi_{\mathcal{Z},a}|\mathcal{Z}a\rangle$
 - Anschaulich: Jeder Zustand $|a\rangle$ hat eine charakteristische Phase $\xi_{\mathcal{Z},a}$ für \mathcal{Z} -Transformationen
 - * $\xi_{\mathcal{Z},a}$ ist eine Phase $\Rightarrow |\xi_{\mathcal{Z},a}| = 1$
 - * Was der Zustand $|\mathcal{Z}a\rangle$ bedeutet, hängt von der Implementation von \mathcal{Z} ab (\mathcal{P} , \mathcal{T} oder \mathcal{C})
 - Formal: Bedingung $|\langle a|b\rangle| = |\langle a|\mathcal{Z}^{-1}\mathcal{Z}|b\rangle| \stackrel{!}{=} |\langle a|b\rangle|$ erlaubt eine zusätzliche Phase $\xi_{\mathcal{Z},a}$ im Transformationsgesetz
 - Konventionen für die Wahl der Phase $\xi_{\mathcal{Z},a}$
 - * Kann $\xi_{\mathcal{Z},a}$ prinzipiell beliebig wählen
 - Formal: Zustände sind projektive Darstellungen bzw nur bis auf eine Phase definiert
 - Konkret: Observablen dürfen nicht von $\xi_{\mathcal{Z},a}$ abhängen
 - * Typisch: Wähle $\xi_{\mathcal{Z},a} = 1/\xi_{\mathcal{Z},\bar{a}} = -1$ für das Teilchen a /Antiteilchen \bar{a}
 - * Achtung: Wenn 2 Zustände a, b in Beziehung zueinander stehen (zB Teilchen/Antiteilchen), hängen auch deren \mathcal{Z} -Phasen $\xi_{\mathcal{Z},a}, \xi_{\mathcal{Z},b}$ voneinander ab
 - Phasenkonvention hier wichtig, da nicht immer klar ist, welcher Zustand Teilchen und welcher Antiteilchen ist (zB Mesonen: B^+ vs B^-)
- Eigenzustände von \mathcal{Z} : $\mathcal{Z}|z\rangle = z|z\rangle$
 - Anschaulich: Eigenzustände $|z\rangle$ von \mathcal{Z} müssen “neutral” unter \mathcal{Z} sein
 - * Bsp: Eigenzustände von \mathcal{C} haben Ladung 0
 - Nur 2 mögliche Eigenwerte $z = \pm 1$
 1. Eigenwertgleichung $\mathcal{Z}|z\rangle = z|z\rangle$ zweimal anwenden: $\mathcal{Z}^2|z\rangle = z^2|z\rangle = |z\rangle$ wegen $\mathcal{Z}^2 = 1 \Rightarrow z^2 = 1$
 2. $\mathcal{Z}^\dagger = \mathcal{Z} \Rightarrow \mathcal{Z}$ hat reelle Eigenwerte $z \in \mathbb{R} \Rightarrow z = \pm 1$ (funktioniert nur für linear+hermitesch)

1.4.2 Parität \mathcal{P}

- Intuitiver Zugang: Eine \mathcal{P} -Transformation spiegelt alle Ortsvariablen
 - Kann aus dem \mathcal{P} -Transformationsverhalten der Ortsvariablen $t \xrightarrow{\mathcal{P}} t, x_i \xrightarrow{\mathcal{P}} -x_i$ mithilfe der Definitionen anderer Größen das \mathcal{P} -Transformationsverhalten aller anderen Größen ableiten
 - * Bsp: $[x_i, p_i] = i\hbar = \text{const} \Rightarrow p_i \xrightarrow{\mathcal{P}} -p_i; J_i = \epsilon_{ijk}x_jp_k \Rightarrow J_i \xrightarrow{\mathcal{P}} \epsilon_{ijk}x_jp_k$
- Formale Zugang: \mathcal{P} ist Element der Lorentz-Gruppe
 1. Definierende Darstellung/ $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2})$ -Darstellung: $\mathcal{P}^\mu{}_\nu = g^{\mu\nu}$
 - Achtung: Die Indexpositionen sind hier richtig bzw $\mathcal{P}^\mu{}_\nu = g^{\mu\nu}, \mathcal{P}^{\mu\nu} = \delta^\mu_\nu$ etc – Nicht einfach zusammenhängende Transformationen sind besonders
 - Anmerkung: Manche Leute verwenden die “Halunken-Notation” $x^\mu \xrightarrow{\mathcal{P}} x_\mu$
 2. Kann Transformationsverhalten aller anderen Darstellungen aus dem Transformationsverhalten der $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2})$ -Darstellung ableiten
- Klassifikation von Lorentz-Tensoren durch ihr \mathcal{P} -Transformationsverhalten
 - Lorentz-Skalare: Skalar/Pseudoskalar A : $\mathcal{P}A\mathcal{P}^\dagger = A/\mathcal{P}A\mathcal{P}^\dagger = -A$
 - * Notiz: Skalare/Pseudoskalare sind Eigenzustände von \mathcal{P} mit Eigenwert $+1/-1$
 - Lorentz-Vektoren: (Polar-)Vektor/Axialvektor A^μ : $\mathcal{P}A^\mu\mathcal{P}^\dagger = g^{\mu\mu}A^\mu/\mathcal{P}A^\mu\mathcal{P}^\dagger = -g^{\mu\mu}A^\mu$
 - * Notiz: Begriff Polar-Vektor ist korrekter (im Gegensatz zum Axial-Vektor)
 - Lorentz-Tensor $A^{\mu\nu}$: $\mathcal{P}A^{\mu\nu}\mathcal{P}^\dagger = g^{\mu\mu}g^{\nu\nu}A^{\mu\nu}$

1.4.3 Zeitumkehr/Bewegungsumkehr \mathcal{T}

- Intuitiver Zugang: Eine \mathcal{T} -Transformation lässt einen Prozess in die umgekehrte Richtung ablaufen
 - Begriff “Zeitumkehr” ist missverständlich, da \mathcal{T} nicht nur aus $t \rightarrow -t$ besteht
 - * \mathcal{T} ist antilinear und antihermitesch, das bedeutet das sich komplexe Zahlen unter \mathcal{T} -Transformationen transformieren $i \rightarrow -i$
 - * In der klassischen Physik hat $t \rightarrow -t$ noch gereicht
 - Intuition für \mathcal{T} -Transformationen zu haben ist schwierig, daher betrachtet man in der Praxis meist \mathcal{CT} -Transformationen (und nimmt an, dass alle Größen \mathcal{CPT} -invariant sind, was für “normale Theorien” wegen dem \mathcal{CPT} -Theorem gilt)
 - In QM-Sprache: \mathcal{T} vertauscht in- und out-Zustände $|\psi\rangle$ und $\langle\psi|$
- Formale Zugang: \mathcal{T} ist Element der Lorentz-Gruppe
 1. Definierende Darstellung/ $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2})$ -Darstellung: $\mathcal{T}^\mu{}_\nu = -g^{\mu\nu}$
 2. Kann Transformationsverhalten aller anderen Darstellungen aus dem Transformationsverhalten der $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2})$ -Darstellung ableiten
- \mathcal{T} ist ein antilinear antihermitescher Operator
 1. Definition $(1 - \frac{iH}{\hbar}\delta t) \mathcal{T}|\alpha\rangle = \mathcal{T}(1 - \frac{iH}{\hbar}(-\delta t))|\alpha\rangle \Leftrightarrow -iH\mathcal{T}|\alpha\rangle = \mathcal{T}iH|\alpha\rangle$
 - Infinitesimaler Zeitentwicklungsoperator $U(t, t + \delta t) = 1 - \frac{iH}{\hbar}\delta t$
 - Erwartung an Bewegungsumkehr: Zeit im Zeitentwicklungsoperator ändert ihr Vorzeichen
 2. Linearer Operator $\Rightarrow H\mathcal{T} = -\mathcal{T}H \Rightarrow$ Energie nicht nach unten beschränkt, da für $H|n\rangle = E_n|n\rangle$ gilt, dass $H\mathcal{T}|n\rangle = (-E_n)\mathcal{T}|n\rangle$
 3. Antilinearer Operator $\Rightarrow H\mathcal{T} = \mathcal{T}H$ und alles funktioniert

1.4.4 Ladungskonjugation

- Intuitiver Zugang: Eine \mathcal{C} -Transformation invertiert alle Ladungen
- Formaler Zugang: Für komplexe Darstellungen einer Gruppe kann man \mathcal{C} -Transformationen definieren
 - \mathcal{C} -Transformationen ändern Darstellung eines Zustands zu seinem komplex konjugierten
- \mathcal{C} -Transformationen bringen Antiteilchen ins Spiel
 - Das Antiteilchen zum Teilchen $|a\rangle$ ist $\mathcal{C}|a\rangle$
 - \mathcal{C} -Eigenzustände sind ungeladene Teilchen
 - * Begründung: Die Eigenwertgleichung $\mathcal{C}|a\rangle = a|a\rangle$ bedeutet, dass Teilchen und Antiteilchen bis auf eine Phase identisch sind

1.5 Anwendungen

1.5.1 Überlegung zu $[X, P] = i\hbar$

- $[X, P] = i\hbar$ ist ein Postulat der Quantenmechanik, das kann man nicht beweisen(aber plausibel machen)
1. Erwarte für eine infinitesimale Translation $T(dl) = 1 - i\frac{Pdl}{\hbar}$
 - Kann infinitesimale Transformation als $1 - i\epsilon G$ mit Generator $G = G^\dagger$ und Parameter ϵ schreiben
 - Erwarte(Korrespondenz zur klassischen Mechanik), dass so etwas wie ein Impulsoperator P Translationen generiert
 - Brauche für richtige Dimension eine universelle Konstante mit Dimension Wirkung(\hbar)
 2. Translation eines Ortseigenzustands $X|x\rangle = x|x\rangle \Rightarrow [X, P] = i\hbar$
 - Erwarte $XT(dl)|x\rangle = (x + dl)|x + dl\rangle = T(dl)(X + dl)|x\rangle \Rightarrow [X, T(dl)] = dlT(dl) = dl$
 - Kann $dlT(dl) = dl(1 - i\frac{Pdl}{\hbar}) = dl$ setzen, da die Korrektur $\mathcal{O}(dl^2)$ ist
 - $T(dl)$ einsetzen liefert $dl = [X, T(dl)] = -i\frac{dl}{\hbar}[X, P] \Rightarrow [X, P] = i\hbar$

1.5.2 Unschärferelation $\Delta A \Delta B \geq \frac{1}{2} |\langle \psi | [A, B] | \psi \rangle|$

- Interpretation der Heisenbergschen Unschärferelation $\Delta P \Delta X \geq \frac{\hbar}{2}$
 - Ort und Impuls sind nicht gleichzeitig genau messbar, da es einen Unterschied macht, in welcher Reihenfolge man die Messungen durchführt ($[X, P] = i\hbar$)
 - Grundlage aller Unschärferelationen mit klassischen Größen, da x und p die klassischen Zustandsgrößen sind
- Herleitung der Unschärferelation $\Delta A \Delta B \geq \frac{1}{2} |\langle \psi | [A, B] | \psi \rangle|$
 - Definiere Operator $\bar{A} = A - \langle A \rangle$
 - 1. $(\Delta A)^2 = \langle \psi | (A - \langle A \rangle)^2 | \psi \rangle = \langle \psi | \bar{A}^2 | \psi \rangle = \langle \bar{A} \psi | \bar{A} \psi \rangle = \| \bar{A} \psi \|^2$
 - Verwende $A^\dagger = A$ für die Observable A
 - 2. $\| \bar{A} \psi \| \| \bar{B} \psi \| \geq | \langle \bar{A} \psi | \bar{B} \psi \rangle | = | \langle \psi | \bar{A} \bar{B} | \psi \rangle |$
 - Verwende Schwarzsche Ungleichung $| \langle a | b \rangle | \leq \| a \| \| b \|$
 - 3. $| \langle \psi | \bar{A} \bar{B} | \psi \rangle | = \frac{1}{2} | \langle [\bar{A}, \bar{B}] | \psi \rangle + \langle \psi | \{ \bar{A}, \bar{B} \} | \psi \rangle |$
 - $AB = \frac{1}{2} ([A, B] + \{A, B\})$
 - 4. $\frac{1}{2} | \langle [\bar{A}, \bar{B}] | \psi \rangle + \langle \psi | \{ \bar{A}, \bar{B} \} | \psi \rangle | \geq \frac{1}{2} | \langle \psi | [\bar{A}, \bar{B}] | \psi \rangle | = \frac{1}{2} | \langle \psi | [A, B] | \psi \rangle |$
 - $[\bar{A}, \bar{B}] = [A, B]$ ist antihermitesch: $[A, B]^\dagger = [B, A] = -[A, B]$ und hat daher rein komplexe Eigenwerte
 - $\{ \bar{A}, \bar{B} \}$ ist hermitesch (Antikommutator ist symmetrisch) und hat daher reelle Eigenwerte
 - Für $z \in \mathbb{C}$ gilt $|z| \geq |\text{Im} z|$
 - $[\bar{A}, \bar{B}] = [A - \langle A \rangle, B - \langle B \rangle] = [A, B]$, da $\langle A \rangle, \langle B \rangle$ Zahlen sind

1.5.3 Aharonov-Bohm-Effekt

- Bedeutung
 - Vom Teilchen auf zwei verschiedenen Bahnen umlaufenes Magnetfeld hat einen Einfluss auf die Phase der Wellenfunktion, obwohl das Magnetfeld im erlaubten Bereich verschwindet
- Setup
 - QM-Objekt mit einem Pfad entweder über oder unter einem senkrecht zur Ebene der Teilchenbahn ausgerichteten Zylinder
 - Im Zylinder verläuft ein Magnetfeld \vec{B} parallel zu dessen Achse, außerhalb des Zylinders verschwindet das Magnetfeld
 - * Vektorpotential \vec{A} ist deshalb konstant außerhalb des Zylinders
- Rechnung im Pfadintegralformalismus
 1. Pfadintegral für Pfade über den Zylinder
 - Lagrangian $\mathcal{L} = \frac{m}{2} \left(\frac{dx_i}{dt} \right)^2 + \frac{e}{c} \frac{dx_i}{dt} A_i$
 - Wirkung $S = \int dt \mathcal{L} = S_0 + \frac{e}{c} \int dt \frac{dx_i}{dt} A_i = S_0 + \frac{e}{c} \int d\vec{s} \vec{A}$ mit Substitutionsregel
 - Pfadintegral $\int \mathcal{D}x e^{\frac{iS_0}{\hbar}} \exp \left(\frac{ie}{\hbar c} \int d\vec{s} \vec{A} \right) = \exp \left(\frac{ie}{\hbar c} \int d\vec{s} \vec{A} \right) \int \mathcal{D}x e^{\frac{iS_0}{\hbar}}$
 - * Magnetfeldterm hängt nach Substitution in der Wirkung nicht mehr von x ab und kann vors Pfadintegral gezogen werden
 2. Gesamtes Pfadintegral
 - Kann Pfadintegral über Wege über und unter dem Zylinder zerlegen
 - Finde $\exp \left(\frac{ie}{\hbar c} \int_{\text{unten}} d\vec{s} \vec{A} \right) \int_{\text{unten}} \mathcal{D}x e^{\frac{iS_0}{\hbar}} + \exp \left(\frac{ie}{\hbar c} \int_{\text{oben}} d\vec{s} \vec{A} \right) \int_{\text{oben}} \mathcal{D}x e^{\frac{iS_0}{\hbar}}$
 - Problem ohne Magnetfeld ist symmetrisch $\int_{\text{oben}} \mathcal{D}x e^{\frac{iS_0}{\hbar}} = \int_{\text{unten}} \mathcal{D}x e^{\frac{iS_0}{\hbar}} \Rightarrow$ Keine Phasendifferenz durch die kinetischen Terme

3. Phasendifferenz eines beliebigen Weges über den Zylinder und eines beliebigen Weges unter dem Zylinder

$$- \frac{e}{\hbar c} \left(\int_{\text{oben}} d\vec{s} \vec{A} - \int_{\text{unten}} d\vec{s} \vec{A} \right) = \frac{e}{\hbar c} \oint d\vec{s} \vec{A} = \frac{e}{\hbar c} \Phi \text{ mit magnetischem Fluss } \Phi \text{ durch den Zylinder}$$

- Interpretation: Phasendifferenz durch den umgangenen magnetischen Fluss
- Rechnung auch im kanonischen Formalismus möglich
 - Schrödingergleichung lösen \Rightarrow Stressigere Rechnung, selbes Ergebnis

1.5.4 Gemischte Zustände

- Dichteoperator $\rho = \sum_i w_i |\alpha_i\rangle \langle \alpha_i|$
 - Situation: System ist in Zuständen $|\alpha_i\rangle$ mit Anteilen w_i präpariert
 - * Zustände $|\alpha^i\rangle$ müssen nicht orthogonal sein
 - Normierung $\text{tr} \rho = \sum_i w_i = 1$
 - Sinn: Beschreibe Mischung des Systems durch diesen Operator und kann damit wie in der QM für pure Ensembles(bisher betrachtet) rechnen
- Ensemble-Mittelwert $\langle A \rangle_E = \sum_i w_i \langle A \rangle = \text{tr}(\rho A)$
 - Interpretation: Mittelwert bezüglich Quantenmechanik(Eigenwerte) und Statistik(Ensemble)
 - Klassisches Analogon: $\langle A \rangle_E = \frac{\int d\Gamma A \rho}{\int d\Gamma \rho}$ mit Phasenraumelement $d\Gamma$
- Statistische Zustände
 - Reiner Zustand: Alle Teilchen im selben Zustand präpariert
 - * Ein i mit $w_i = 1 \Rightarrow \rho = |\alpha_i\rangle \langle \alpha_i|, \rho^2 = \rho, \text{tr} \rho^2 = \text{tr} \rho = 1$
 - * $\rho_{ij} = \delta_{ik} \delta_{jk}$ für ausgezeichneten Zustand k
 - Komplette zufälliger Zustand: Teilchen gleichmäßig auf alle möglichen Zustände verteilt
 - * $\rho_{ij} = \frac{1}{N} \delta_{ij}$
 - Gemischter Zustand: Mischform von reinem und komplett zufälligem Zustand
- Zeitentwicklung von Ensembles $i\hbar \partial_t \rho = [H, \rho]$ (Liouville-Gleichung)
 - Verwende, dass die Zustände im Dichteoperator die Schrödingergleichung erfüllen
 - * $i\hbar \partial_t \rho = i\hbar \sum_i w_i \partial_t |\alpha_i\rangle \langle \alpha_i| = \sum_i w_i (H |\alpha_i\rangle \langle \alpha_i| - |\alpha_i\rangle \langle \alpha_i| H) = [H, \rho]$
 - * Minus kommt von der hermitesch konjugierten Schrödingergleichung für ein Bra
 - Das ist nicht die Bewegungsgleichung für Operatoren im Heisenberg-Bild(zusätzliches Minus)

1.5.5 Gebundene und ungebundene Zustände

- Allgemeine Lösung von $H|n\rangle = E_n|n\rangle$ ist Superposition aus gebundenen und ungebundenen Zuständen
- Gebundene Zustände
 - Definition: $E < V(\pm\infty)$
 - * Interpretation: Teilchen ist klassisch im Potential gefangen, da es zu wenig Energie hat
 - * Meist ist $V(\pm\infty) = 0$
 - Folgerung: $|\psi(\pm\infty)|^2 = 0 \Rightarrow$ Teilchen hält sich in einem begrenzten Bereich auf
 - Diskrete Energieeigenwerte
 - * Anschaulich: Randbedingungen an die Wellenfunktion \Rightarrow Finde nur diskrete Lösungen
- Ungebundene Zustände/Streuzustände
 - Definition: $E > V(\pm\infty)$

* Interpretation: Alle Bereiche sind für das Teilchen klassisch erlaubt (genug Energie)

- Folgerung: $|\psi(\pm\infty)|^2 > 0 \Rightarrow$ Teilchen kann überall sein

- Kontinuierliche Energieeigenwerte

* Anschaulich: Keine Randbedingungen \Rightarrow Kontinuierliche Lösungen

• Asymptotisches Verhalten eines Teilchens mit Energie E im Potential $V(X)$

1. Schrödingergleichung $\partial^2\psi = \frac{2m}{\hbar^2}(V(x) - E)\psi$

2. Asymptotische Schrödingergleichung mit $V(\pm\infty) = 0$: $\partial^2\psi = -\frac{2m}{\hbar^2}E\psi$

- Lösung für $E < 0$: $\psi \propto e^{\pm k|x|}$ mit $k = \sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2}}$

- Lösung für $E > 0$: $\psi \propto e^{\pm ikx}$ mit $k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$

• Kontinuitätsgleichung für gebundene Zustände $\partial_t\rho = 0$

- Kontinuitätsgleichung $\partial_t\rho + \partial_i j_i = 0$ mit $\rho = |\psi|^2$, $j_i = \frac{i\hbar}{2m}(\psi^* \partial_i \psi - \psi \partial_i \psi^*)$

- Kann ψ für gebundene Zustände reell wählen $\Rightarrow j_i = 0$

* Eigenwertgleichung von H ist reell (nur für reelles H) \Rightarrow Kann eine reelle Lösung ψ finden und deshalb $j_i = 0$

- Andere Perspektive: Stationäre Zustände (zeitunabhängiges H , $E < 0$) haben konstantes ρ , da die Zeitabhängigkeit sich im Betrag kürzt

1.5.6 Quantenmechanischer Harmonischer Oszillator $H = \frac{1}{2m}P^2 + \frac{m\omega^2}{2}X^2$

• Basisunabhängige Lösung

- Idee: Problem umwandeln in Eigenwerttheorie von $N = a^\dagger a$ mit $[a, a^\dagger] = 1$

* Interpretation von a, a^\dagger : Ab- und Aufsteigeoperatoren

* Allgemeines Konzept - Tritt auch bei Eigenwerten von \vec{L} und in der QFT auf

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

- Erfüllen $[a, a^\dagger] = 1$

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

2. Eigenwerttheorie von $N = a^\dagger a$ mit $[a, a^\dagger] = 1$

- Eigenwertgleichung $N|n\rangle = n|n\rangle$

* N ist ein hermitescher Operator (weil H hermitesch ist) und damit diagonalisierbar mit reellen Eigenwerten n

- Mit $|n\rangle$ sind auch $a|n\rangle$, $a^\dagger|n\rangle$ Eigenzustände von N mit Eigenwerten $n \pm 1$

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

* $Na|n\rangle = (n-1)a|n\rangle$, $Na^\dagger|n\rangle = (n+1)a^\dagger|n\rangle$

- Normierung von $|n \pm 1\rangle$: $a|n\rangle \propto |n-1\rangle$, $a^\dagger|n\rangle \propto |n+1\rangle$

* $0 \leq \langle an|an\rangle = \langle n|a^\dagger a|n\rangle = n \Rightarrow n \geq 0$

* $0 \leq \langle a^\dagger n|a^\dagger n\rangle = n+1$

* $a|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle$, $a^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle$

- In $Na|0\rangle = (0-1)a|0\rangle$ ist $n = -1$ verboten ($n \geq 0$) \Rightarrow Es gilt $a|0\rangle = 0 \Rightarrow n = 0 + \sum_i 1 \in \mathbb{N}$

- Allgemein $|n\rangle = \left(\frac{(a^\dagger)^n}{\sqrt{n!}}\right)|0\rangle$ mit $a|0\rangle = 0$

3. Ergebnisse aufsammeln

- Energieeigenwerte $H|n\rangle = E_n|n\rangle$ mit $E_n = \hbar\omega(n + \frac{1}{2})$

- Eigenzustände $|n\rangle = \left(\frac{(a^\dagger)^n}{\sqrt{n!}}\right)|0\rangle$ mit $a|0\rangle = 0$

- Erhalte anschauliche Ergebnisse durch Auflösen von X, P nach a, a^\dagger

- Kohärente Zustände $|\lambda\rangle = \left(\sum_{n=0}^{\infty} \frac{\lambda^n}{n!} (a^\dagger)^n\right)|0\rangle$ mit $a|\lambda\rangle = \lambda|\lambda\rangle$

* $\langle \lambda | X | \lambda \rangle$, $\langle \lambda | P | \lambda \rangle$ und $\rho(x, t) = |\langle x | \lambda, t \rangle|^2$ verhalten sich wie die klassischen Lösungen

• Lösung in der Ortsbasis

1. Eigenwertgleichung in Ortsbasis $\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\partial_x^2 + \frac{m\omega^2}{2}x^2 - E_n\right)\phi_n(x) = 0$
2. Ansatz $\phi_n(x) = \sqrt{\frac{4}{\pi\hbar}} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2} H_n\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x\right)$ mit Hermite-Polynomen $H_n(x)$
 - Verwende Eigenschaften der Hermite-Polynome $\partial_x H_n(x) = 2nH_{n-1}(x)$, $H_n(x) = 2xH_{n-1}(x) - 2(n-1)H_{n-2}(x)$

1.5.7 Verschränkung und das EPR-Paradoxon

- $|\Psi\rangle \in \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ heißt verschränkter Zustand : $\iff |\Psi\rangle$ kann nicht als $|\Psi\rangle = |\psi_1\rangle \otimes |\psi_2\rangle$ mit $|\psi_1\rangle \in \mathcal{H}_1, |\psi_2\rangle \in \mathcal{H}_2$ geschrieben werden
 - Übliches Beispiel $|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle \otimes |\downarrow\rangle - |\downarrow\rangle \otimes |\uparrow\rangle)$
 - Anschaulich: Verschränkte Zustände die Menge $\{|\Psi\rangle \in \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2\} \setminus \{|\psi_1\rangle \otimes |\psi_2\rangle : |\psi_1\rangle \in \mathcal{H}_1, |\psi_2\rangle \in \mathcal{H}_2\}$
 - Zustände als Vektoren
 - * Unverschränkter Zustand hat nur einen Eintrag oder kann durch Basiswechsel auf diese Form gebracht werden
 - * Verschränkter Zustand hat mehrere Einträge
 - Interpretation: Verschränkter Zustand enthält räumlich getrennte Elemente, die instantan miteinander kommunizieren
- EPR-Paradoxon: Räumlich getrennte Systeme können nicht instantan miteinander wechselwirken
 - Auflösung: Das ist eine intuitive(klassische) Annahme, die in der Quantenmechanik nicht mehr gilt
 - Erklärung in QM: Die räumlich getrennten Systeme sind Teile eines gemeinsamen(verschränkten) Zustands, der bei einer Messung spontane Zustandsreduktion macht

1.5.8 Ehrenfest-Theorem

- Erhalte klassischen Grenzfall der Theorie eines Teilchens im Potential über die Erwartungswerte der Operatoren
 - Verwende Heisenberg-Bild für klassischen Grenzfall, da es in der klassischen Mechanik keine zeitabhängigen Zustände gibt(nur zeitabhängige Größen)
- Für $H = \frac{\vec{P}^2}{2m} + V(\vec{X})$ gilt $\partial_t \langle \vec{X} \rangle = \frac{1}{m} \langle \vec{P} \rangle$, $\partial_t \langle \vec{P} \rangle = -\langle \vec{\nabla} V(\vec{x}) \rangle$
 - Stelle Heisenberg-Bewegungsgleichungen auf und bilde den Erwartungswerte der Gleichungen bezüglich einem beliebigen Zustand

1.5.9 Energiebänder in Festkörpern

- Problem: Eindimensionales periodisches Potential $\tau^\dagger(a)V(X)\tau(a) = V(X+a) = V(X)$ und damit $[H, \tau(a)] = 0$ mit einem Minima von $V(X)$ in jedem Abschnitt
 - Bsp: Festkörper mit Gitterkonstante a
 - Suche Energie der entarteten Grundzustände
- Energiebänder $E = E_0 - 2\Delta \cos \theta$
 - Verwende die tight-binding approximation $H|n\rangle = E_0|n\rangle - \Delta(|n+1\rangle + |n-1\rangle)$
 - * Anschaulich: Wechselwirkung nur mit nächsten Nachbarn
- 1. Definiere geschickt $|\theta\rangle = \sum_n e^{in\theta}|n\rangle$ mit $\theta \in \mathbb{R}$
 - Definiere Grundzustände $|n\rangle$ der n ten Senke des Potentials durch $\tau(a)|n\rangle = |n+1\rangle$

- Suche Eigenzustände von H und $\tau(a)$ wegen $[H, \tau(a)] = 0$ (nicht erfüllt durch $|n\rangle$)
- Periodisches System: Summe über n ist zyklisch

2. Eigenwertgleichungen der $|\theta\rangle$

- $\tau(a)|\theta\rangle = \sum_n e^{in\theta} \tau(a)|n\rangle = \sum_n e^{in\theta} |n+1\rangle = \sum_n e^{i(n-1)\theta} |n\rangle = e^{-i\theta} |\theta\rangle$
- $H|\theta\rangle = \sum_n e^{in\theta} H|n\rangle = \sum_n e^{in\theta} (E_0|n\rangle - \Delta(|n+1\rangle + |n-1\rangle)) = (E_0 - \Delta(e^{-i\theta} + e^{i\theta})) |\theta\rangle$
 $= (E_0 - 2\Delta \cos \theta) |\theta\rangle$
- $\theta \in \{-\pi, \pi\}$ als Winkel ist sinnvoll

• Blochs Theorem: $\langle x|\theta\rangle = e^{ikx} u_k(x)$ mit $u_k(x+a) = u_k(x)$, $\theta = ka$

- Bedingung für $\langle x|\theta\rangle$: $\langle x|\tau(a)|\theta\rangle = \langle x-a|\theta\rangle = e^{-i\theta} \langle x|\theta\rangle$
- Lösung $\langle x|\theta\rangle = e^{ikx} u_k(x)$: $\langle x-a|\theta\rangle = e^{ik(x-a)} u_k(x-a) = e^{-i\theta} e^{ikx} u_k(x) = e^{-i\theta} \langle x|\theta\rangle$

Kapitel 2

Dynamik

2.1 Zeit in der Quantenmechanik

2.1.1 Zeit ist ein Parameter

- Es gibt keinen Zeitoperator T mit Eigenwertgleichung $T|t\rangle = t|t\rangle$
 - Wenn das so wäre, wäre Zeit eine Quantenzahl
 - Kann definiert werden, führt aber zu Interpretationsschwierigkeiten(...)
- Zeit ist der einzige Parameter in der Quantenmechanik(soweit ich weiß...)
- Anschaulich: In nichtrelativistischer Theorie wird Zeit nicht durch andere Größen beeinflusst und liefert einen unveränderten Hintergrund, relativ zu dem man Dinge messen kann
 - In relativistischer Theorie mischen Ort und Zeit unter Lorentztransformationen \Rightarrow Zeit muss genauso wie Ort behandelt werden(bei beiden als Operator oder beide als Parameter)
- Zeit und Ort in QM nicht gleichberechtigt \Rightarrow Quantenmechanik ist nicht lorentzinvariant
 - Zeit ist ein Parameter(kein Zeitoperator), für den Ort gibt es eine Observable(Ortsoperator)
 - Nicht schlimm, da QM eine nichtrelativistische Theorie ist und daher nicht den Anspruch hat, lorentzinvariant zu sein

2.1.2 Der Zeitentwicklungsoperator $U(t, t_0)$

- Definition: $|\psi, t\rangle = U(t, t_0)|\psi, t_0\rangle$ / $A(t) = U^\dagger(t, t_0)A(t_0)U(t, t_0)$
 - Zeitentwicklungsoperator beschreibt die Zeitentwicklung des Systems
 - Formulierung mit Zeitentwicklungsoperator ist fundamental: Behandle nur die Transformation Zeitentwicklung, spezifiziere nicht, ob sich Zustände(Schrödingerbild) oder Operatoren(Heisenbergbild) verändern
- Übergangsamplitude/Propagator $K(x, x_0, t, t_0) = \langle x_0, t_0|x, t\rangle = \langle x_0, t_0|U(t, t_0)|x, t_0\rangle$
 - Interpretation: Wahrscheinlichkeit für Übergang des Systems von $|x_0, t_0\rangle$ zu $|x, t\rangle$
 - Propagator enthält volle Information über Dynamik/Zeitentwicklung des Systems
- Zeitentwicklung als unitäre Transformation $U(t, t_0)$: $\langle\psi, t_0|A(t_0)|\psi, t_0\rangle \rightarrow \langle\psi, t_0|U^\dagger(t, t_0)A(t_0)U(t, t_0)|\psi, t_0\rangle$
 - Interpretation 1(Schrödinger-Bild): Zustände transformieren sich mit $|\psi, t_0\rangle \rightarrow |\psi, t\rangle = U(t, t_0)|\psi, t_0\rangle$, Operatoren bleiben konstant(bis auf explizite Zeitabhängigkeiten)
 - Interpretation 2(Heisenberg-Bild): Operatoren transformieren sich mit $A(t_0) \rightarrow A(t) = U(t, t_0)^\dagger A(t_0)U(t, t_0)$, Zustände bleiben konstant
 - Interpretation 3(Wechselwirkungs-Bild): Zerlege $U(t, t_0) = V(t, t_0)U_I(t, t_0) \Rightarrow$ Operatoren transformieren sich mit $A(t_0) \rightarrow A_I(t) = V^\dagger(t, t_0)A(t_0)V(t, t_0)$, Zustände transformieren sich mit $|\psi, t_0\rangle \rightarrow |\psi, t\rangle_I = U_I(t, t_0)|\psi, t_0\rangle$

- * Verwende Index I für Wechselwirkungsbild-Größen (Zustände und Operatoren), um deren Zeitabhängigkeit von der Zeitabhängigkeit der Schrödinger-Bild- und Heisenberg-Bild-Zeitabhängigkeit zu unterscheiden
- Physikalisch äquivalent: Erwartungswert $\langle \psi | A | \psi \rangle$ transformiert sich in beiden Bildern gleich
- Schrödingergleichung für den Zeitentwicklungsoperator $i\hbar \partial_t U(t, t_0) = H U(t, t_0)$
 1. Infinitesimale Darstellung $U(t + dt, t) = 1 - \frac{iH}{\hbar} dt$ mit Generator H für Zeitentwicklungen
 - Erwarte, dass H Zeitentwicklung generiert, universelle Konstante \hbar mit Dimension Wirkung
 2. $U(t + dt, t_0) - U(t, t_0) = \frac{1}{i\hbar} dt H = \frac{1}{i\hbar} dt H U(t, t_0)$
 - Fehler in $1 = U(t, t_0)$ ist $\mathcal{O}(dt^2)$ und deshalb hier ($\mathcal{O}(dt)$) vernachlässigbar
 3. $i\hbar \partial_t U(t, t_0) = i\hbar \lim_{dt \rightarrow 0} \frac{U(t+dt, t_0) - U(t, t_0)}{dt} = H U(t, t_0)$
- Alternative Herleitungen über Schrödingergleichung für Zustände $i\hbar \partial_t |\psi, t\rangle = H |\psi, t\rangle$
 - * Nichtrelativistischer Grenzfall von Klein-Gordon- und Dirac-Gleichung
 - * Qualitative Überlegungen: Lineare homogene DGL 1. Ordnung, die ebene Wellen als Lösung für freies Teilchen liefert
- Lösungen für den Zeitentwicklungsoperator aus $i\hbar \partial_t U(t, t_0) = H(t) U(t, t_0)$
 - Allgemeine Lösung: Dyson-Reihe $U(t, t_0) = \mathcal{T} \exp \left(-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t d\tau H(\tau) \right)$
 - * $\mathcal{T} \exp$ ist Abkürzung für $U(t, t_0) = \mathcal{T} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(\frac{-i}{\hbar} \right)^n \int_{t_0}^t dt_1 \cdots \int_{t_0}^t dt_n H(t_1) \cdots H(t_n)$
 - * Zeitgeordnetes Produkt \mathcal{T} ordnet Operatoren so, dass Terme mit kleinem t zuerst ausgewertet werden: $\mathcal{T} A(t_1) B(t_2) = B(t_2) A(t_1)$ für $t_2 > t_1$, $\mathcal{T} A(t_1) B(t_2) = A(t_1) B(t_2)$ für $t_1 > t_2$
 - 1. Rekursive Lösung der Schrödingergleichung $\partial_t U(t, t_0) = -\frac{i}{\hbar} H U(t, t_0)$
 - * Integriere Gleichung von t_0 bis t : $U(t, t_0) - U(t_0, t_0) = \int_{t_0}^t d\tau \partial_\tau U(\tau, t_0) = -\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t d\tau H(\tau) U(\tau, t_0)$
 - * Fordere $U(t_0, t_0) = 1$ - Zeitentwicklung zur selben Zeit ändert nichts
 - * Umstellen liefert rekursive Gleichung $U(t, t_0) = 1 - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t d\tau H(\tau) U(\tau, t_0)$
 - 2. Gleichung in sich einsetzen: $U(t, t_0) = \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{-i}{\hbar} \right)^n \int_{t_0}^t dt_1 \cdots \int_{t_0}^{t_{n-1}} dt_n \cdots H(t_1) \cdots H(t_n) \cdots$
 - * Für $n \rightarrow \infty$ wird $U(t_n, t_0) \rightarrow 1$ und die Reihe konvergiert gegen die exakte Lösung der DGL
 - * Hier sind Hamiltonoperatoren wegen den Integrationsbereichen automatisch zeitgeordnet
 - 3. Integrationsbereich umparametrisieren: Von $\int_{t_0}^{t_{n-1}}$ zu $\int_{t_0}^t \Rightarrow$ Faktor $\frac{1}{n!}$, explizite Zeitordnung
 - * Geometrische Überlegung: Linie \rightarrow Linie für $n = 1$, Dreieck \rightarrow Quadrat für $n = 2$, usw \Rightarrow Erhalte Faktor $\frac{1}{n!}$ für Änderung des Integrationsbereichs im n -ten Integral
 - * Muss explizite Zeitordnung einfügen, damit Hamiltonoperatoren in den neuen Integrationsgrenzen gleich geordnet sind wie vor der Umparametrisierung des Integrationsbereichs
- Spezialfall $[H(t_1), H(t_2)] = 0$: $U(t, t_0) = \exp \left(-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t d\tau H(\tau) \right)$
 - * Hamiltonoperatoren kommutieren zu jedem Zeitpunkt \Rightarrow Zeitordnung ist egal
- Spezialfall $\frac{\partial H}{\partial t} = 0$: $U(t, t_0) = e^{-\frac{i}{\hbar} H(t-t_0)}$
 - * Hamiltonoperatoren sind zeitunabhängig und kommutieren daher automatisch \Rightarrow Kann Hamiltonoperator aus dem Integral ziehen und benutze $\int_{t_0}^t dt = t - t_0$
 - * Andere Überlegung: $i\hbar \partial_t U(t, t_0) = H U(t, t_0)$ ist DGL erster Ordnung mit konstanten Koeffizienten \Rightarrow e-Funktion ist triviale Lösung

2.2 Bilder der Quantenmechanik im Vergleich

2.2.1 Schrödinger-Bild $i\hbar \partial_t |\psi, t\rangle = H |\psi, t\rangle$

- Anschaulich
 - Zeitentwicklung des Systems steckt in den Zuständen

- Operatoren können höchstens explizite Zeitabhängigkeit haben
- Zeitentwicklung bestimmen: Schrödinger-Gleichung für Zustände $|\psi, t\rangle$ oder Zeitentwicklungsoperator $U(t, t_0)$ lösen
- Referenzwert τ für den Zeitpunkt der Auswertung der übrigen Quantenzahlen
 - Problem: Quantenzahlen können sich während der Zeitentwicklung ändern
 - Gebe zusätzlich zum Zeitparameter t einen Referenzwert τ an, in dem der Zustand mit den restlichen angegebenen Quantenzahlen präpariert wurde
 - Wahl des Zeitnullpunkts ist beliebig \Rightarrow Wähle idR $\tau = 0$ und lasse das zusätzliche Argument weg

2.2.2 Heisenberg-Bild $\frac{d}{dt}A(t) = \frac{i}{\hbar}[H, A(t)] + \frac{\partial}{\partial t}A(t)$

- $\frac{\partial}{\partial t}A$ meint die Ableitung nach expliziten Zeitabhängigkeiten in A
- Anschaulich
 - Zustände sind zeitlich konstant (keine Abhängigkeit von einem Zeit-Parameter)
 - Zeitentwicklung des Systems steckt in den Operatoren, die außerdem explizite Zeitabhängigkeiten enthalten können
- Zeitentwicklung bestimmen: Heisenberg-Bewegungsgleichung für jeden vorkommenden Operatoren aufstellen und damit Zeitabhängigkeit der Operatoren bestimmen
- Physikalisch sinnvoller wegen Korrespondenz zur klassischen Mechanik
 - In klassischer Mechanik gibt es keine Zustände, die Zustandsgrößen (Observablen in der QM) enthalten die Zeitabhängigkeit
 - Heisenberg-Bewegungsgleichung entspricht Hamilton-Bewegungsgleichung $\frac{d}{dt}A = \{H, A\}$ mit Ersetzung $\{\cdot, \cdot\} \rightarrow \frac{i}{\hbar}[\cdot, \cdot]$ (Poissonklammer $\{\cdot, \cdot\}$)

2.2.3 Wechselwirkungs-Bild $H(t) = H_0 + V(t), i\hbar\partial_t|\psi, t\rangle_I = V_I(t)|\psi, t\rangle_I, \frac{d}{dt}A_I = \frac{i}{\hbar}[H_0, A_I]$

- Anschaulich
 - Zeitentwicklung wird geschickt verteilt auf Zustände und Observablen
 - Komplizierte Zeitentwicklung durch $V_I(t)$ (explizit zeitabhängig) wird im Schrödinger-Bild behandelt
 - Triviale Zeitentwicklung durch H_0 (nicht explizit zeitabhängig) wird im Heisenberg-Bild behandelt
- Zeitentwicklung bestimmen: Schrödinger-Gleichung und Heisenberg-Bewegungsgleichung lösen
- Anwendung: $V_I(t)$ ist kleine Störung der Zeitentwicklung durch $H_0 \Rightarrow$ Zeitabhängige Störungstheorie

2.2.4 Übergang zwischen den Bildern

- Indizes S, H, I für Größen im Schrödinger-, Heisenberg-, Wechselwirkungs-Bild (interaction picture)
- Hamiltonoperator bekommt keine zusätzliche Zeitabhängigkeit im Heisenberg- und Wechselwirkungsbild \Rightarrow Gleich in allen Bildern $H = H_S = H_H = H_I$
 - Bsp Heisenberg-Bild: $\frac{dH}{dt} = \frac{i}{\hbar}[H, H] + \frac{\partial H}{\partial t} = \frac{\partial H}{\partial t}$
- Schrödinger-Bild \Rightarrow Heisenberg-Bild
 - Zustände im Heisenbergbild $|\psi\rangle_H = |\psi, 0\rangle_S$
 - Operatoren im Heisenbergbild $A_H(t) = U^\dagger(0, t)A_S(t)U(0, t)$, $A_S(t)$ ist nur explizit zeitabhängig
 - Heisenberg-Bewegungsgleichung folgt durch Ausrechnen von $\frac{d}{dt}A_H(t)$ und benutzen, dass $U(t, 0)$ die Definitionsgleichung erfüllt: $\partial_t U(t, 0) = \frac{i}{\hbar}HU(t, 0)$

$$\star \frac{dA_H}{dt} = \frac{\partial U^\dagger}{\partial t} A_S U + U^\dagger A_S \frac{\partial U}{\partial t} + U^\dagger \frac{\partial A_S}{\partial t} U = \frac{i}{\hbar} [U^\dagger H U, U^\dagger A_S U] + U^\dagger \frac{\partial A_S}{\partial t} U = \frac{i}{\hbar} [U^\dagger H U, A_H] + \frac{\partial A_H}{\partial t} = \frac{i}{\hbar} [H, A_H] + \frac{\partial A_H}{\partial t}$$

$$\star \text{ Benutze, dass } U \text{ die Schrödingergleichung erfüllt: } \frac{\partial U}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} H U, \frac{\partial U^\dagger}{\partial t} = \frac{i}{\hbar} U^\dagger H$$

$$\star \text{ Aus der Form der Dyson-Reihe folgt } U^\dagger H U = H$$

• Schrödinger-Bild \Rightarrow Wechselwirkungs-Bild

$$\text{– Zustände im Wechselwirkungsbild } |\psi, t\rangle_I = e^{\frac{iH_0 t}{\hbar}} |\psi, t\rangle_S$$

$$\text{– Operatoren im Wechselwirkungsbild } A_I(t) = e^{\frac{iH_0 t}{\hbar}} A_S(t) e^{-\frac{iH_0 t}{\hbar}}$$

$$\text{– Schrödingergleichung } i\hbar \partial_t |\psi, t\rangle_I = V_I(t) |\psi, t\rangle_I$$

$$\begin{aligned} \star i\hbar \partial_t |\psi, t\rangle_S &= i\hbar \partial_t e^{-\frac{iH_0 t}{\hbar}} |\psi, t\rangle_I = H_0 e^{-\frac{iH_0 t}{\hbar}} |\psi, t\rangle_I + i\hbar e^{-\frac{iH_0 t}{\hbar}} \partial_t |\psi, t\rangle_I = (H_0 + V(t)) |\psi, t\rangle_S \\ &= H_0 e^{-\frac{iH_0 t}{\hbar}} |\psi, t\rangle_I + V(t) e^{-\frac{iH_0 t}{\hbar}} |\psi, t\rangle_I \Rightarrow i\hbar e^{-\frac{iH_0 t}{\hbar}} \partial_t |\psi, t\rangle_I = V(t) e^{-\frac{iH_0 t}{\hbar}} |\psi, t\rangle_I \\ &\Rightarrow i\hbar \partial_t |\psi, t\rangle_I = e^{\frac{iH_0 t}{\hbar}} V(t) e^{-\frac{iH_0 t}{\hbar}} |\psi, t\rangle_I = V_I(t) |\psi, t\rangle_I \end{aligned}$$

$$\star \text{ Kann damit den Zeitentwicklungsoperator im WW-Bild ablesen: } U_I(t, t_0) = \mathcal{T} \exp \left(-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t d\tau V_I(\tau) \right)$$

$$\text{– Heisenberg-Bewegungsgleichung } \frac{dA_I}{dt} = \frac{i}{\hbar} [H_0, A_I] + \frac{\partial A_I}{\partial t}$$

Kapitel 3

Drehimpulse

3.1 Drehoperator und Drehimpulsoperator

3.1.1 Drehimpulsoperator \vec{J} und Drehoperator $\mathcal{D}(\vec{\alpha})$

- Ziel: Rotation von Zuständen beschreiben: $|\psi\rangle \rightarrow |\psi'\rangle = \mathcal{D}(\vec{\alpha})|\psi\rangle$
 - Rotation ist ein unitärer Basiswechsel
 - Wähle in Analogie zur klassischen Mechanik die $SU(2)$ als Gruppe der Rotationen
 - * $SU(2)$ hat gleiche Lie-Algebra wie die klassische Drehgruppe $SO(3)$, ist aber deren universal cover und enthält daher (im Gegensatz zu $SO(3)$) die volle Information über Drehungen
 - Drehoperator $\mathcal{D}(\vec{\alpha})$ ist ein Element der Lie-Gruppe $SU(2)$ auf einem beliebigen Hilbertraum
 - Drehimpulsoperator \vec{J} ist Generator des Drehoperators \mathcal{D} : $\mathcal{D}(\vec{\alpha}) = 1 - \frac{i}{\hbar} \vec{\alpha} \cdot \vec{J}$ für $\alpha_i \ll 1$ und Element der $su(2)$ auf einem allgemeinem Hilbertraum
- Definierende Eigenschaft des Drehimpulsoperators $[J_i, J_j] = i\hbar \epsilon_{ijk} J_k$
 - Entspricht der Definition der Lie-Algebra $su(2) = so(3)$ von $SU(2)$ und $SO(3)$
- Definition des Drehoperators $\mathcal{D}(\vec{\alpha}) = e^{\frac{i}{\hbar} \vec{\alpha} \cdot \vec{J}}$ über Generatoren J_i
 - Gruppenelemente können durch e-Funktionen mit Linearkombinationen der Generatoren dargestellt werden (Gruppenelemente durch Exponenzierung der Lie-Algebra)
 - Bsp für Parameter: Euler-Winkel, Richtung φ und Winkel \vec{n} mit $\vec{n}^2 = 1$
- System heißt rotationsinvariant $\iff H$ ist rotationsinvariant: $\mathcal{D}^\dagger(\alpha) H \mathcal{D}(\alpha) = H$
 - Anschaulich: Charakterisierende Größe H des Systems ändert sich unter Drehungen nicht
 - Baker-Campbell-Hausdorff-Theorem \Rightarrow Definition ist äquivalent zu $[J_i, H] = 0$
 - * Sieht man direkt für infinitesimale Transformationen, schwieriger für makroskopische Transformationen

3.1.2 Leiteroperatoren $J_\pm = J_1 \pm iJ_2$

- Geschickte Basiswechsel für nicht-diagonalen Generatoren J_1, J_2
 - Kann ein Generator der Lie-Algebra diagonal wählen \Rightarrow Wähle J_3
 - Eigenschaften von J_1, J_2 besser durch J_\pm beschrieben
 - Kann für Anschaulichkeit am Ende von J_\pm zurück zu J_1, J_2 wechseln
- Kommutatorrelationen für J_\pm : $[J_+, J_-] = 2\hbar J_3$, $[J_3, J_\pm] = \pm\hbar J_\pm$, $[J_\pm, \vec{J}^2] = 0$
- Interpretation als Leiteroperatoren: $J_\pm |j, m\rangle = \hbar \sqrt{j(j+1) - m(m \pm 1)} |j, m \pm 1\rangle$
 - J_\pm ändern m bei gleichem j und liefern außerdem einen Vorfaktor
 - Relation wird später mit den Eigenkets $|j, m\rangle$ formal hergeleitet

3.1.3 Eigenwerttheorie des Drehimpulsoperators $\vec{J}^2|jm\rangle = j(j+1)\hbar^2|jm\rangle, J_3|jm\rangle = m\hbar|jm\rangle$

- Ziel: Möglichst viele Eigenwertgleichungen finden

1. $[\vec{J}^2, J_i] = 0$ folgt aus der Kommutatorrelation

- Gruppentheorie: \vec{J}^2 ist Casimir-Operator der $su(2)$
- Anschaulich: Kann Darstellungen der $SU(2)$ durch Eigenwerte von \vec{J}^2 klassifizieren

2. Basiswechsel, sodass J_3 diagonal ist

- Achtung: Nur einer der Generatoren J_i kann gleichzeitig diagonalisiert werden (kommutieren nicht)
- Gruppentheorie: J_3 ist Cartan-Element der $su(2)$
- Anschaulich: Kann Elemente einer Darstellung der $SU(2)$ durch Eigenwerte von J_3 klassifizieren

3. $[\vec{J}^2, J_3] = 0 \Rightarrow \vec{J}^2$ und J_3 haben gemeinsame Eigenkets

\Rightarrow Ansatz $\vec{J}^2|jm\rangle = j(j+1)\hbar^2|jm\rangle, J_3|jm\rangle = m\hbar|jm\rangle$

- Kann auch naiven Ansatz $\vec{J}^2|ab\rangle = a|ab\rangle, J_3|ab\rangle = b|ab\rangle$ machen \Rightarrow Finde mit aufwändiger Rechnung die obige Struktur
- Sinn von weiteren Rechnungen: Erlaubte Werte für m und j finden

4. Eigenschaften der Leiteroperatoren J_{\pm}

- $J_{\pm}|jm\rangle$ ist Eigenket von \vec{J}^2 mit Eigenwert $\hbar^2 j(j+1)$ oder es gilt $J_{\pm}|jm\rangle = 0$
 - Rechnung: $\vec{J}^2(J_{\pm}|jm\rangle) = J_{\pm}\vec{J}^2|jm\rangle = j(j+1)\hbar^2(J_{\pm}|jm\rangle)$
- $J_{\pm}|jm\rangle$ ist Eigenket von J_3 mit Eigenwert $\hbar(m \pm 1)$ oder es gilt $J_{\pm}|jm\rangle = 0$
 - Rechnung: $J_3(J_{\pm}|jm\rangle) = (J_{\pm}J_3 \pm \hbar J_{\pm})|jm\rangle = (m \pm 1)\hbar(J_{\pm}|jm\rangle)$

5. Eigenschaften der Quantenzahlen j, m finden

- $|m| \leq j$
 - $0 \leq \|J_{\pm}|jm\rangle\|^2 = \langle jm|J_{\mp}J_{\pm}|jm\rangle = \langle jm|\vec{J}^2 - J_3^2 \mp \hbar J_3|jm\rangle = \hbar^2(j(j+1) - m(m \mp 1))$
 $\Rightarrow j(j+1) \geq m(m \pm 1)$
 - * Es gilt $0 \leq \|J_{\pm}|jm\rangle\|^2$ und nicht $\|J_{\pm}|jm\rangle\|^2 = 1$, da $J_{\pm}|jm\rangle$ noch nicht normiert wurde
 - * Kann auch den Fall $J_{\pm}|jm\rangle = 0$ haben \Rightarrow Schreibe $0 \leq \dots$ statt $0 < \dots$
 - * Für $m < 0$ ist $m(m-1)$ größer, für $m > 0$ ist $m(m+1)$ größer
 - Finde für $0 = \|J_{\pm}|jm\rangle\|^2$ ein maximales $m_{\max} = j$ mit $J_{+}|jj\rangle = 0$ und ein minimales $m_{\min} = -j$ mit $J_{-}|j, -j\rangle = 0$
 - * $\|J_{+}|jm\rangle\|^2 = 0: j(j+1) = m(m+1) \Rightarrow$ Für $m_{\max} = j$ gilt $J_{+}|jm_{\max}\rangle = 0$
 - * $\|J_{-}|jm\rangle\|^2 = 0: j(j+1) = m(m-1) \Rightarrow$ Für $m_{\min} = -j$ gilt $J_{-}|jm_{\min}\rangle = 0$
 - Bonus: $J_{\pm}|jm\rangle = \hbar\sqrt{j(j+1) - m(m \pm 1)}|jm \pm 1\rangle$ für $J_{\pm}|jm\rangle \neq 0$
 - * Verwende Eigenwert-Eigenschaften von $J_{\pm}|jm\rangle$ und fordere Normierung $\|J_{\pm}|jm\rangle\|^2 = 1$
- $m \in \{-j, -j+1, \dots, j-1, j\}$
 - Erhalte aus einer Kombination $(j, j)/(j, -j)$ alle anderen (j, m) mit selbem j durch Anwendung von J_{\pm} , da J_{\pm} die m -Quantenzahl um ± 1 verändert
- $j \in \{\frac{n}{2} : n \in \mathbb{N}_0\}$
 - Muss von $(j, -j)$ zu (j, j) durch $n \in \mathbb{N}_0$ Anwendungen von J_{\pm} kommen, da beide dasselbe $|m|$ haben
 - Jede Anwendung von J_{\pm} verändert m um 1 $\Rightarrow 2j = n \in \mathbb{N} \Rightarrow j = \frac{n}{2}$

3.2 Darstellungen von Drehoperator und Drehimpulsoperator = Darstellungstheorie von $\mathfrak{su}(2)$ und $SU(2)$

3.2.1 Matricelemente des Drehimpulsoperators $\langle j'm'|J_i|jm\rangle$

- Idee: Verwende Ergebnisse für $J_i|jm\rangle$ von oben
- Wähle Basis, in der \vec{J}^2 und J_3 diagonal sind
 - $\langle j'm'|\vec{J}^2|jm\rangle = j(j+1)\hbar^2\delta_{jj'}\delta_{mm'}$
 - $\langle j'm'|J_3|jm\rangle = m\hbar\delta_{jj'}\delta_{mm'}$
- Bestimme Matricelemente der J_{\pm} anstatt der J_1, J_2
 - $\langle j'm'|J_{\pm}|jm\rangle = \hbar\sqrt{j(j+1)-m(m\pm 1)}\langle j'm'|jm\pm 1\rangle = \hbar\sqrt{j(j+1)-m(m\pm 1)}\delta_{jj'}\delta_{m'm\pm 1}$
 - Kann damit auch einfach die Matricelemente von J_1, J_2 bestimmen (Fleißarbeit)
- Matricelemente von \vec{J}^2, J_3, J_{\pm} als Einträge einer Matrix vorstellen
 - Schwierigkeit: Habe Abhängigkeit von 4 Indizes j, m, j', m'
 - * Wähle eine Achse für gestrichene und eine für ungestrichene Indizes
 - * Reihenfolge der Indizes: Beginne bei $j = 0$ und gehe für jedes j von $m = -j$ bis $m = j$, dann zum nächsten j
 - * Konkret: Reihenfolge der Zeilen/Spalten (j, m) : $(0, 0), (\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}), (\frac{1}{2}, \frac{1}{2}), (1, -1), (1, 0), \dots$
 - Alle Matrizen haben Blockdiagonalform
 - * Für $j \neq j'$ verschwinden alle Einträge wegen $\propto \delta_{jj'}$
 - J_3 ist diagonal wegen $\propto \delta_{mm'}$
 - J_{\pm} hat nur Einträge auf der Nebendiagonalen wegen $\propto \delta_{m'm\pm 1}$
- Gruppentheorie: Matricelemente des Drehimpulsoperators $\langle jm'|J_i|jm\rangle$ mit festem j sind $2j+1$ -dimensionale irreduzible Darstellungen der $\mathfrak{su}(2)$

3.2.2 Matricelemente des Drehoperators $\langle j'm'|\mathcal{D}(\vec{\alpha})|jm\rangle$

- Wigner-Funktionen $\mathcal{D}_{mm'}^{(j)}(\vec{\alpha}) := \langle jm'|\mathcal{D}(\vec{\alpha})|jm\rangle$
 - Anschaulich: Matricelemente von $\mathcal{D}(\vec{\alpha})$ bezüglich den Eigenkets $|jm\rangle$
 - Wähle festes j , da $\langle j'm'|\mathcal{D}(\vec{\alpha})|jm\rangle \propto \delta_{jj'}$
- Berechne Wigner-Funktionen mit Matricelementen des Drehimpulsoperators: $\mathcal{D}_{mm'}^{(j)}(\vec{\alpha}) = \langle jm'|e^{\frac{i}{\hbar}\vec{\alpha}\cdot\vec{J}}|jm\rangle$
 - Aufgabe: Matrixexponentialfunktion nach allen Regeln der Kunst
- Matricelemente $\langle j'm'|\mathcal{D}(\vec{\alpha})|jm\rangle$ als Matrix
 - Blockdiagonalform bezüglich j, j' wie bei $\langle j'm'|J_i|jm\rangle$
 - Wegen der Matrixexponentialfunktion sind die Einträge der Blockmatrizen nichttrivial
- Gruppentheorie: Wigner-Funktionen $\mathcal{D}_{mm'}^{(j)}(\vec{\alpha})$ mit festem j sind $2j+1$ -dimensionale irreduzible Darstellungen der $SU(2)$

3.2.3 Eulerwinkel-Darstellung

- Anschaulich: Eulerwinkel-Darstellung ist Parametrisierung von Drehungen durch 3 Winkel α, β, γ
 - Benötige 3 Winkel als Parameter für 3 Generatoren der $SU(2)$
 1. Drehung um α um z-Achse
 2. Drehung um β um y-Achse
 3. Drehung um γ um z-Achse
- Eine Achse wird bevorzugt(z-Achse)
 - Praktisch, da J_3 diagonal ist
- Darstellung des Drehoperators mit Euler-Winkeln $\mathcal{D}(\alpha, \beta, \gamma) = e^{\frac{i}{\hbar}\gamma J_3} e^{\frac{i}{\hbar}\beta J_2} e^{\frac{i}{\hbar}\alpha J_3}$
- Darstellung der Wigner-Funktionen mit Euler-Winkeln $\mathcal{D}_{mm'}^{(j)}(\alpha, \beta, \gamma) = \langle jm' | \mathcal{D}(\alpha, \beta, \gamma) | jm \rangle = e^{i(\alpha m - \gamma m')} d_{mm'}^{(j)}(\beta)$ mit $d_{mm'}^{(j)}(\beta) = \langle jm' | e^{\frac{i}{\hbar}\beta J_2} | jm \rangle$
 - Grund, dass bei der zweiten Drehung um die y-Achse statt um die x-Achse gedreht wird: $d_{mm'}^{(j)} \in \mathbb{R}$ wegen $J_2 \in \mathbb{C} \setminus \mathbb{R}$

3.3 Drehimpulsaddition

3.3.1 Grundlagen

- Habe bei 2 vorkommenden Drehimpulsen \vec{J}_1, \vec{J}_2 mehrere mögliche Basen
 - Definiere Gesamtdrehimpuls $\vec{J} = \vec{J}_1 \oplus \vec{J}_2$ (direkte Summe) bzw $\vec{J}^2 = (\vec{J}_1 + \vec{J}_2)^2, J_3 = J_{1,3} + J_{2,3}$
 - 1. Basis der Einzeldrehimpulse $|j_1 j_2 m_1 m_2\rangle$: Kommutierende Observablen $\vec{J}_1^2, \vec{J}_2^2, J_{1,3}, J_{2,3}$
 - 2. Basis des Gesamtdrehimpulses $|j_1 j_2 j m\rangle$: Kommutierende Observablen $\vec{J}_1^2, \vec{J}_2^2, \vec{J}^2, J_3$
 - Argument, warum \vec{J}^2 für feste \vec{J}_1^2 - und \vec{J}_2^2 -Eigenwerte mehrere Eigenwerte annehmen kann:
 $\vec{J}^2 = (\vec{J}_1 + \vec{J}_2)^2 = \vec{J}_1^2 + \vec{J}_2^2 + 2\vec{J}_1 \vec{J}_2 = \vec{J}_1^2 + \vec{J}_2^2 + 2J_{1,3}J_{2,3} + J_{1,+}J_{2,-} + J_{1,-}J_{2,+}$
 \Rightarrow Die ersten beiden Terme sind diagonal in der Gesamtdrehimpulsbasis, aber die restliche nicht(diese können den Eigenwert j von \vec{J}^2 ändern)
 - Je nach Situation ist die eine oder die andere Basis geschickter
 - * Will die Basis so wählen, dass möglichst viele in H auftauchende Operatoren diagonal sind
 - * Kann mit Clebsch-Gordon-Koeffizienten nicht-diagonale Operatoren in H behandelt, ist aber aufwändiger
- Basiswechsel mit Clebsch-Gordon-Koeffizienten(cgk) $\langle j_1 j_2 m_1 m_2 | j_1 j_2 j m \rangle$
 - Unitärer Basiswechsel mit Vollständigkeitsrelation $|j_1 j_2 j m\rangle = \sum_{m_1, m_2} |j_1 j_2 m_1 m_2\rangle \langle j_1 j_2 m_1 m_2 | j_1 j_2 j m \rangle$
 - Summe über m_1, m_2 , da dies die wechselnden Indizes sind(Rücktransformation: Summe über j, m)
 - * Präziser: Finde beim Nachrechnen, dass cgk mit wechselndem j_1, j_2 verschwinden(außerdem: $m_1 + m_2 = m$)
 - Genaugogute Notation: $c_{j_1 j_2 m_1 m_2 j m} := \langle j_1 j_2 m_1 m_2 | j_1 j_2 j m \rangle$
- Andere Perspektive: $(2j_1 + 1) \otimes (2j_2 + 1) = (2(j_1 + j_2) + 1) \oplus (2(j_1 + j_2 - 1) + 1) \cdots \oplus (2|j_1 - j_2| + 1)$
 - Bedeutung der Notation: $2j + 1$ für $2j + 1$ -dimensionalen Hilbertraum für von Drehungen charakterisiert durch Drehimpuls j
 - Linke Seite(Einzeldrehimpulsbasis): Schreibe betrachteten Hilbertraum als direktes Produkt der Hilberträume der Einzeldrehimpulse

- Rechte Seite(Gesamtdrehimpulsbasis): Schreibe betrachteten Hilbertraum als direkte Summe der Gesamtdrehimpuls-Hilberträume
 - * Matrixdarstellung von Operatoren hat Blockdiagonalform in der Gesamtdrehimpuls-Basis \Rightarrow Das ist das formale Argumentation dafür, dass man Drehimpulsaddition macht
- Aussage: Die Einzeldrehimpulsbasis und die Gesamtdrehimpulsbasis hängen über einen Basiswechsel zusammen
 - * Für Hilberträume ist ein Basiswechsel trivial, deshalb wird der mit $=$ notiert
- Überlegung auf beliebig viele Drehimpulse erweiterbar, da mehrere Drehimpulsadditionen nacheinander durchgeführt werden können

3.3.2 Anmerkungen zu Clebsch-Gordon-Koeffizienten $\langle j_1 j_2 m_1 m_2 | j_1 j_2 j m \rangle$

- Kurznotation für die verschiedenen Basen
 - Korrekte Notation: $|j_1 j_2 m_1 m_2\rangle$ und $|j_1 j_2 j m\rangle$
 - Problem: j_1, j_2 werden während der Rechnung nicht verändert(unnötig, immer hinzuschreiben), kann bei Auflistung von mehreren Quantenzahlen nicht festlegen, was sie beschreiben
 - Übliche Konvention: $|j_1 j_2 m_1 m_2\rangle$ und $|j m\rangle := |j_1 j_2 j m\rangle$
 - * Unterscheide Zustände aufgrund der Anzahl der Quantenzahlen
 - Tolle Konvention: $|m_1 m_2\rangle_a := |j_1 j_2 m_1 m_2\rangle, |j m\rangle_b := |j_1 j_2 j m\rangle$
 - * Lege Reihenfolge und Typ der Quantenzahlen in den Zuständen durch einen neuen Index fest
 - * Verwendet, wenn klar ist, was j_1, j_2 sind
- Auswahlregeln
 - Aussage: cgk, die die Auswahlregeln nicht erfüllen, verschwinden
 - $m_1 + m_2 = m$
 1. $J_3 = J_{1,3} + J_{2,3} \Rightarrow 0 = {}_b\langle j m | (J_3 - J_{1,3} - J_{2,3}) | m_1 m_2 \rangle_a = (m - m_1 - m_2) {}_b\langle j m | m_1 m_2 \rangle_a$
 2. Fordere, dass ${}_b\langle j m | m_1 m_2 \rangle_a \neq 0 \Rightarrow m = m_1 + m_2$
 - $|j_1 - j_2| \leq j \leq (j_1 + j_2)$
 - * Wenn auch andere j erlaubt wären, hätten der Gesamtdrehimpuls-Hilbertraum und der Einzeldrehimpuls-Hilbertraum unterschiedliche Dimension
 - * Formal: Erhalte $\sum_{j=|j_1-j_2|}^{j_1+j_2} (2j+1) = (2j_1+1)(2j_2+1)$ nur für $|j_1 - j_2| \leq j \leq (j_1 + j_2)$
- Condon-Shortley-Konvention zur Festlegung der Phase der cgk: ${}_a\langle j, -j | j j \rangle_b \geq 0$
 - Anschaulich: In $|j m\rangle = \dots$ bekommt Term mit höchstem m_1 ein positives Vorzeichen
 - * Wähle $j_1 \geq j_2$, damit m_1 klar definiert ist
 - Benötigt man in der Konstruktion nur bei der Wahl der orthogonalen Zustände
 - Äquivalent: ${}_a\langle m_1, -m_2 | j m \rangle_b = (-1)^{j_1+j_2-j} {}_a\langle m_2 m_1 | j m \rangle_b$
 - * m_1 und m_2 vertauschen liefert ein Vorzeichen $(-1)^{j_1+j_2-j}$
- Eigenschaften der cgk
 - $cgk \in \mathbb{R}$ und eindeutig mit der Condon-Shortley-Konvention
 - Alle cgk , die die Auswahlregeln erfüllen, sind von 0 verschieden
 - cgk sind orthogonal im Sinne von Matrizen
 - * $\delta_{jj'} \delta_{mm'} = \sum_{m_1 m_2} {}_a\langle m_1 m_2 | j m \rangle_b {}_a\langle m_1 m_2 | j' m' \rangle_b$
 - * $\delta_{m_1 m'_1} \delta_{m_2 m'_2} = \sum_{j m} {}_a\langle m_1 m_2 | j m \rangle_b {}_a\langle m'_1 m'_2 | j m \rangle_b$
 - Symmetrie $|j_1 j_2 m_1 m_2\rangle_a = |j_2 j_1 m_2 m_1\rangle_a$
 - * Grund: Reihenfolge von \vec{J}_1 und \vec{J}_2 in der Drehimpulsaddition ist beliebig

3.3.3 Konstruktion der Clebsch-Gordon-Koeffizienten

- Grundidee zur Konstruktion

1. Schreibe Zustände $|jm\rangle_b$ als Linearkombination der Zustände $|m_1m_2\rangle_a$ mit $m_1 + m_2 = m$
 - Linearkombination der Zustände sind meist schon das, was man braucht
2. Clebsch-Gordon-Koeffizienten sind Koeffizienten in der Linearkombination \Rightarrow Ablesen

1. Zustand höchsten Gewichts eindeutig: $|j_1 + j_2, j_1 + j_2\rangle_b = |j_1j_2\rangle_a$ bzw. $|-j_1 - j_2, -j_1 - j_2\rangle_b = |-j_1, -j_2\rangle_a$
 - Begründung: Wegen $j = j_1 + j_2$ und $m_1 = j_1, m_2 = j_2$ (höchster Zustand) ist mit $m = m_1 + m_2$ auch $m = j$ festgelegt \Rightarrow Nur ein Zustand $|jm\rangle_b$ trägt zu $|j_1j_2\rangle_a$ bei bzw nur ein Zustand $|m_1m_2\rangle_a$ trägt zu $|jj\rangle_b$ bei
 - Starte bei $|j_1 + j_2, j_1 + j_2\rangle_b = |j_1j_2\rangle_a$, kann genauso gut bei $|-j_1 - j_2, -j_1 - j_2\rangle_b = |-j_1, -j_2\rangle_a$ starten
2. Rekursiv: Erhalte für Menge von n bekannten Zuständen (j, m) $n + 1$ Zustände $(j, m - 1)$ (festes m und variables j)
 - Abbruch bei $m \in \{0, \frac{1}{2}\}$
 - n neue Zustände: $J_- = J_{1-} + J_{2-}$ auf beiden Seiten anwenden liefert für jeden bekannten Zustand $|jm\rangle_b$ einen Zustand niedrigerer Ordnung $|j, m - 1\rangle_b$ mit selbem j und $m \rightarrow m - 1$
 - Zusätzlicher neuer Zustand: Erhalte $|m - 1, m - 1\rangle$ mit Gram-Schmidt-Verfahren aus n bekannten Zuständen selber Ordnung $m - 1$ und verschiedenem j
 - Wähle Vorzeichen des neuen Zustands mit Condon-Shortley-Konvention: Term mit größtem m_1 bekommt positives Vorzeichen
3. Zustände $m \rightarrow -m$ mit Symmetrieüberlegung: ${}_a\langle m_1m_2 | jm \rangle_b = (-1)^{j_1+j_2-j} {}_a\langle -m_1, -m_2 | j, -m \rangle_b$
 - Anschaulich: Gleichzeitig m, m_1, m_2 invertieren liefert ein Vorzeichen $(-1)^{j_1+j_2-j}$ für den cgk
 - Alternative: Gehe in Schritt 2) bis $m = -j$
 - Begründung: Drücke cgk durch Wigner-3j-Symbole aus und verwende deren Symmetrierelation

3.3.4 Wigner-3j-Symbole

- Alternative Formulierung der Clebsch-Gordon-Koeffizienten $\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j \\ m_1 & m_2 & -m \end{pmatrix} = \frac{1}{2j+1} (-1)^{j_1-j_2+m} \langle j_1j_2m_1m_2 | jm \rangle$
- Vorteil: Elegantere Darstellung der Symmetrien der Clebsch-Gordon-Koeffizienten
 - $\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix} = (-1)^{j_1+j_2+j_3} \begin{pmatrix} j_2 & j_1 & j_3 \\ m_2 & m_1 & m_3 \end{pmatrix} = (-1)^{j_1+j_2+j_3} \begin{pmatrix} j_1 & j_3 & j_2 \\ m_1 & m_3 & m_2 \end{pmatrix}$
 - * Invariant unter zyklischer Permutation
 - * Vorzeichen $(-1)^{j_1+j_2+j_3}$ bei anderer Permutation
 - $\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix} = (-1)^{j_1+j_2+j_3} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ -m_1 & -m_2 & -m_3 \end{pmatrix}$
 - Orthogonalität
 - * $\sum_{j,m} (2j+1) \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j \\ m_1 & m_2 & m \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j \\ m'_1 & m'_2 & m \end{pmatrix} = \delta_{m'_1m_1} \delta_{m'_2m_2}$
 - * $\sum_{m_1,m_2} (2j+1) \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j \\ m_1 & m_2 & m \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j' \\ m_1 & m_2 & m' \end{pmatrix} = \delta_{jj'} \delta_{mm'}$
 - Auswahlregeln $m_1 + m_2 + m_3 = 0, |j_1 + j_2| \leq j_3 \leq j_1 + j_2$

3.3.5 Drehimpulsaddition der Wigner-Funktionen

- Idee: Konstruiere $\mathcal{D}_{mm'}^{(j)}(\vec{\alpha})$ aus $\mathcal{D}_{m_1 m'_1}^{(j_1)}(\vec{\alpha})$ und $\mathcal{D}_{m_2 m'_2}^{(j_2)}(\vec{\alpha})$ mit $\vec{J} = \vec{J}_1 + \vec{J}_2$ mit Clebsch-Gordon-Koeffizienten
- $\mathcal{D}_{mm'}^{(j)}(\vec{\alpha}) = \sum_{m_1, m_2, m'_1, m'_2} \langle j m' | m'_1 m'_2 \rangle \langle m_1 m_2 | j m \rangle \mathcal{D}_{m_1 m'_1}^{(j_1)}(\vec{\alpha}) \mathcal{D}_{m_2 m'_2}^{(j_2)}(\vec{\alpha})$
 - Formel folgt fast automatisch daraus, dass die Drehimpulszustände eine orthonormale Basis bilden
- 1. $\mathcal{D}_{mm'}^{(j)}(\vec{\alpha}) = \langle j m' | \mathcal{D}(\vec{\alpha}) | j m \rangle = \sum_{m_1, m_2, m'_1, m'_2} \langle j m' | m'_1 m'_2 \rangle \langle m'_1 m'_2 | \mathcal{D}(\vec{\alpha}) | m_1 m_2 \rangle \langle m_1 m_2 | j m \rangle$
 - Benutze Vollständigkeitsrelation $1 = \sum_{m_1 m_2} |m_1 m_2\rangle \langle m_1 m_2|$
- 2. $\langle m'_1 m'_2 | \mathcal{D}(\vec{\alpha}) | m_1 m_2 \rangle = \langle m'_1 m'_2 | e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{\alpha} \vec{J}} | m_1 m_2 \rangle = \langle m'_1 | e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{\alpha} \vec{J}_1} | m_1 \rangle \langle m'_2 | e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{\alpha} \vec{J}_2} | m_2 \rangle = \mathcal{D}_{m'_1 m_1}^{(j_1)}(\vec{\alpha}) \mathcal{D}_{m'_2 m_2}^{(j_2)}(\vec{\alpha})$
 - Benutze Darstellung des Drehimpulsoperators mit Generatoren \vec{J} : $\mathcal{D}(\vec{\alpha}) = e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{\alpha} \vec{J}}$ und, dass die Generatoren verschiedener Drehimpulsoperatoren vertauschen
- Formel gilt auch für $\mathcal{D}_{mm'}^{(j)}(\vec{\alpha}) \rightarrow d_{mm'}^{(j)}(\beta)$ aus der Eulerwinkel-Darstellung $\mathcal{D}_{mm'}^{(j)}(\alpha, \beta, \gamma) = e^{i(\alpha m - \gamma m')} d_{mm'}^{(j)}(\beta)$

3.4 Tensoroperatoren

3.4.1 Tensoroperator(Vertiefung in Gruppentheorie)

- Globale Ersetzung, wenn man nicht sattelfest in Gruppentheorie ist: $SU(2) \rightarrow$ Drehungen
- Tensoroperator = Operator, der sich wie ein Tensor transformiert
 - Transformieren: Transformation bezüglich einer beliebigen Darstellung (Bsp $SU(2)$: $j = 0, j = \frac{1}{2}, j = 1, \dots$) einer bestimmten Gruppe (zB $SU(2)$)
 - Tensoroperator: Tensor (= Objekt mit Indizes), das ein Operator (evtl interessante Kommutatorrelationen) ist
 - * Art der Indizes (kartesisch, sphärisch, ...) bestimmt Typ des Tensors
- Motivation: Tensoroperatoren einer Gruppe haben dieselben Eigenschaften wie Zustände (charakterisiert durch Quantenzahlen) der Gruppe
 - Quantifizierung der Idee: Wigner-Eckardt-Theorem
- Kartesischer Tensoroperator T_{a_1, \dots, a_n}
 - Kartesische Indizes in d Dimensionen laufen von 1 bis d
 - Kartesischer Tensoroperator T^{a_1, \dots, a_n} vom Rang n : Tensoroperator mit n kartesische Indizes
 - Kartesische Tensoroperatoren sind reduzibel unter $SU(2)$
 - * Anschaulich: Kartesische Tensoroperatoren nicht optimal für Arbeit mit Drehimpulsen etc
 - * Kann (reduziblen) kartesischen Tensoroperator vom Rang n in eine Summe (irreduzibler) $SU(2)$ -Tensoroperatoren vom Rang $m \leq n$ zerlegen
 - * Bsp: $U_i V_j = \frac{1}{3} U_k V_k \delta_{ij} + \frac{1}{2} (U_i V_j - U_j V_i) + \frac{1}{2} (U_i V_j + U_j V_i - \frac{2}{3} U_k V_k \delta_{ij})$ für kartesische Rang-1-Tensoroperatoren U_i, V_i
 - Erster Term ist sphärischer Tensoroperator mit $j = 0$
 - Zweiter Term ist sphärischer Tensoroperator mit $j = 1$: $U_i V_j - U_j V_i = \epsilon_{ijk} (\vec{U} \times \vec{V})_k$
 - Dritter Term ist sphärischer Tensoroperator mit $j = 2$
 - Beweis: Terme in Definition des sphärischen Tensoroperators einsetzen
- $SU(2)$ -Tensoroperator $T_m^{(j)}$
 - $SU(2)$ -Indizes: j, m
 - * Formal: Eigenwerte des Casimir-Operators \vec{J}^2 und des Cartan-Elements J_3
 - Abstrakte Definition: $T_m^{(j)}$ heißt Tensoroperator vom Rang j : $\iff \mathcal{D}(\vec{\alpha}) T_m^{(j)} \mathcal{D}^\dagger(\vec{\alpha}) = \sum_{m'} T_{m'}^{(j)} \mathcal{D}_{mm'}^{(j)}(\vec{\alpha})$

- * Anschaulich: $SU(2)$ -Tensoroperator transformiert sich unter Drehungen mit den Wigner-Funktionen $\mathcal{D}_{mm'}^{(j)}(\vec{\alpha})$, einer Darstellung des Drehoperators $\mathcal{D}(\vec{\alpha})$ und damit der $SU(2)$
- Konkretere Definition: $T_m^{(j)}$ heißt Tensoroperator vom Rang $j : \iff$
 1. $[J_3, T_m^{(j)}] = \hbar m T_m^{(j)}$
 2. $[J_{\pm}, T_m^{(j)}] = \hbar \sqrt{j(j+1) - m(m \pm 1)} T_{m \pm 1}^{(j)}$
- * Interpretation: $SU(2)$ -Tensoroperatoren verhalten sich unter Kommutation mit Drehimpulsoperatoren so wie wenn man Drehimpulsoperatoren auf die $SU(2)$ -Eigenzustände $|jm\rangle$ anwendet
- * Kann mit diesen Eigenschaften die abstrakte Definition für infinitesimale Drehungen nachrechnen(einfach für infinitesimale Transformationen, Fleißarbeit für makroskopische Transformationen)
- $SU(2)$ -Tensoroperatoren sind per Konstruktion irreduzibel unter $SU(2)$

3.4.2 Wigner-Eckart-Theorem

- $\langle \alpha j m | T_{m_1}^{(j_1)} | \beta j_2 m_2 \rangle = \langle j_1 j_2 j m | j_1 j_2 m_1 m_2 \rangle \frac{\langle \alpha j || T^{(j_1)} || \beta j_2 \rangle}{\sqrt{2j_2+1}}$
 - Interpretation: (m, m_1, m_2) -Abhängigkeit(Clebsch-Gordon-Koeffizient) und Abhängigkeit vom Tensoroperator(reduziertes Matricelement) faktorisieren
 - Bezeichnung Reduziertes Matricelement $\langle \alpha j || T^{(j_1)} || \beta j_2 \rangle$ ist historisch für die Proportionalitätskonstante
 - * Botschaft: Reduziertes Matricelement hängt nicht von m, m_1, m_2 ab
 - * Hat keine Bedeutung im Sinne von Matricelement, genauso gute Notation: $C_{\alpha, \beta, j, j_1, j_2}$
 - α, β sind zusätzliche Quantenzahlen, die nichts mit Drehimpulsen zu tun haben
- Wigner-Eckart-Theorem als Drehimpulsaddition: $T_{m_1}^{(j_1)} | j_2 m_2 \rangle \propto | j_1 j_2 m_1 m_2 \rangle$
 - Idee: $T_{m_1}^{(j_1)} | j_2 m_2 \rangle$ hat dieselben Eigenschaften bei Veränderung von m_1, m_2 wie $| j_1 j_2 m_1 m_2 \rangle \Rightarrow$ Erwarte Proportionalität mit einer Proportionalitätskonstante, die nur von j, j_1, j_2 abhängt
 - * Wigner-Eckart-Theorem ist diese Aussage als Formel verpackt
 - 1. $J_3 T_{m_1}^{(j_1)} | j_2 m_2 \rangle = [J_3, T_{m_1}^{(j_1)}] | j_2 m_2 \rangle + T_{m_1}^{(j_1)} J_3 | j_2 m_2 \rangle = \hbar(m_1 + m_2) T_{m_1}^{(j_1)} | j_2 m_2 \rangle$
 - Gleiches Ergebnis wie $J_3 | j_1 j_2 m_1 m_2 \rangle = \hbar(m_1 + m_2) | j_1 j_2 m_1 m_2 \rangle$
 - 2. $J_{\pm} T_{m_1}^{(j_1)} | j_2 m_2 \rangle = [J_{\pm}, T_{m_1}^{(j_1)}] | j_2 m_2 \rangle + T_{m_1}^{(j_1)} J_{\pm} | j_2 m_2 \rangle$

$$= \hbar \sqrt{j_1(j_1+1) - m_1(m_1 \pm 1)} T_{m_1 \pm 1}^{(j_1)} | j_2 m_2 \rangle + \hbar \sqrt{j_2(j_2+1) - m_2(m_2 \pm 1)} T_{m_1}^{(j_1)} | j_2, m_2 \pm 1 \rangle$$
 - Gleiches Ergebnis wie $J_{\pm} | j_1 j_2 m_1 m_2 \rangle = J_{1, \pm} | j_1 j_2 m_1 m_2 \rangle + J_{2, \pm} | j_1 j_2 m_1 m_2 \rangle$
- Formale Herleitungen
 - Überlegung mit LGS
 - Herleitung aus Schurschem Lemma(?)
- Anwendung
 1. Rechne reduziertes Matricelement für eine Wahl von (m_1, m_2, m) aus \Rightarrow Finde reduziertes Matricelement $\langle \alpha j || T^{(j_1)} || \beta j_2 \rangle$
 - Wähle (m, m_1, m_2) geschickt, damit die Rechnung vereinfacht wird
 2. Verwende Wigner-Eckart-Theorem mit bekanntem $\langle \alpha j || T^{(j_1)} || \beta j_2 \rangle$, um $\langle \alpha j m | T_{m_1}^{(j_1)} | \beta j_2 m_2 \rangle$ für beliebige (m, m_1, m_2) zu berechnen
 - Feeling: Muss statt $(2j+1)(2j_1+1)(2j_2+1)$ Matricelementen(alle möglichen (m, m_1, m_2)) nur ein Matricelement berechnen und finde alle übrigen Matricelemente mit dem Wigner-Eckart-Theorem und den nachschlagbaren cgk

3.5 Anwendungen

3.5.1 Spin, Bahndrehimpuls, Gesamtdrehimpuls

- Bahndrehimpulsoperator $L_i = \epsilon_{ijk} X_j P_k$
 - Finde $[L_i, L_j] = i\hbar\epsilon_{ijk} L_k \Rightarrow L_i$ ist Drehimpulsoperator
 - Einschränkung $l \in \mathbb{N}_0$ an Eigenwerte zusätzlich zu den Einschränkungen aus $[L_i, L_j] = i\hbar\epsilon_{ijk} L_k$
 1. Definiere Vernichtungsoperatoren $a_j = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} (X_j + \frac{i}{m\omega} P_j)$, $a_{\pm} = \frac{1}{\sqrt{2}} (a_1 \pm ia_2)$
 2. Finde $L_3 = X_1 P_2 - X_2 P_1 = \hbar(N_- - N_+)$
 3. Vernichtungsoperatoren erfüllen $[a_{\pm}, a_{\pm}^{\dagger}] = 1$, alle anderen Kommutatoren verschwinden
 - * Eigenwerttheorie $a^{\dagger} a |n\rangle = n |n\rangle$ bekannt $\Rightarrow N_{\pm} = a_{\pm}^{\dagger} a_{\pm}$ hat die Eigenwerte $n \in \mathbb{N}_0$
 - Kugelflächenfunktionen $Y_m^l(\varphi, \vartheta) = \langle \varphi, \vartheta | l m \rangle$
 - * Löse Eigenwertgleichungen $\vec{L}^2 Y_m^l = \hbar^2 l(l+1) Y_m^l$, $L_3 Y_m^l = \hbar m Y_m^l$ mit Differentialoperatoren \vec{L}^2 , L_3 im Ortsraum
 - * Wichtige Eigenschaften: Normierung, Vollständigkeit, Parität
- Spinoperator $S_i = \frac{\hbar}{2} \sigma_i$
 - Spin = Interne SU(2)-Symmetrie von Teilchen
 - * Eigenwert s des Spinoperators ist Spin des Teilchens
 - * Spinoperator für Fermionen ($s = \frac{1}{2}$) durch Pauli-Matrizen σ_i dargestellt
 - Spinoperator operiert nicht auf dem Orts- oder Impulsraum
- Gesamtdrehimpulsoperator $\vec{J} = \vec{L} \oplus \vec{S}$
 - Gesamtdrehimpuls-Hilbertraum aus direkter Summe der Hilberträume von \vec{L} und \vec{S}
 - Kommutator $[L_i, S_j] = 0$, da L_i und S_i auf unterschiedlichen Hilberträume operieren

3.5.2 Hamiltonoperator eines Zentralpotential-Problems

- Zentralpotential $V(r) \iff$ Potential hängt nur von r ab
 - Übergang zur QM: Radialabstandsoperator R mit $R^2 = \vec{X}^2$
 - Winkeloperator wäre für $R = 0$ nicht eindeutig definiert, daher wird er nicht eingeführt
- Hamiltonoperator in kartesischer Basis: $H = \frac{\vec{P}^2}{2m} + V(R)$
- Drehimpulsoperator \vec{L} ist Erhaltungsgröße $[H, L_i] = 0$
 - Folgt aus $[\vec{P}^2, L_i] = 0$, $[\vec{X}^2, L_i] = 0$
- Hamiltonoperator in sphärischer Basis: $H = \frac{P_r^2}{2m} + \frac{\vec{L}^2}{2mR^2} + V(R) = \frac{P_r^2}{2m} + V_{\text{eff}}(R)$
 - Koordinatenwechsel in günstige Koordinaten $\vec{P}^2 = P_r^2 + \frac{1}{R^2} \vec{L}^2$, $R^2 = \vec{X}^2$
 - * $\vec{P}^2 = P_r^2 + \frac{\vec{L}^2}{R^2}$ wird deutlich in der Ortsdarstellung (Kugelkoordinaten-Fest)
 - Zentralpotential $V_Z(R) = \frac{\vec{L}^2}{2mR^2}$
 - * Interpretation wie in der klassischen Mechanik: Potential, das Annähern an $r = 0$ erschwert
 - Effektives Potential $V_{\text{eff}}(R) = \frac{\vec{L}^2}{2mR^2} + V(R)$

3.5.3 Energie-Eigenzustände eines Zentralpotential-Problems

- Suche Eigenkets der Form $|Elm_l\rangle$
 - Fordere Eigenwertgleichungen $H|Elm_l\rangle = E|Elm_l\rangle, \vec{L}^2|Elm_l\rangle = l(l+1)\hbar^2|Elm_l\rangle, L_3|Elm_l\rangle = m_l\hbar|Elm_l\rangle$ wegen $[H, L_i] = 0$
- Separationsansatz für Ortseigenzustände $\langle r, \vartheta, \varphi | Elm_l \rangle = \psi_{Elm_l}(r, \vartheta, \varphi) = \frac{1}{r} u_{El}(r) Y_{m_l}^l(\vartheta, \varphi)$
 - Winkelabhängigkeit $\vec{L}^2 Y_{m_l}^l(\vartheta, \varphi) = l(l+1)\hbar^2 Y_{m_l}^l(\vartheta, \varphi), L_3 Y_{m_l}^l(\vartheta, \varphi) = \hbar m_l Y_{m_l}^l(\vartheta, \varphi)$ wird durch $Y_{m_l}^l(\vartheta, \varphi)$ per Definition erfüllt
 - Radiale Gleichung $\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \partial_r^2 + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} + V(r) - E\right) u_{El}(r) = 0$
 - * Mit $f_{El}(r) = \frac{1}{r} u_{El}(r)$ gilt $\frac{1}{r} \partial_r^2 u_{El} = (\partial_r^2 + \frac{2}{r} \partial_r) f_{El}$ und die Ableitung nach radialen Komponenten wird vereinfacht
 - u_{El} hängt immer nur von E, l ab, nie von m
 - * m -Abhängigkeit kann man nur durch L_3 in V erhalten, das ist aber wegen $[H, L_i] = 0$ verboten
- Für $r = 0$ ist ∂_r nicht definiert \Rightarrow Brauche Extra-Untersuchung für Quadrat-Integrierbarkeit
 1. $u_{El}(0) \neq 0 \Rightarrow V(r) \propto \delta(r)$
 - $V(r)$ muss bei $r = 0$ singulär sein, da sonst die Schrödingergleichung nicht erfüllbar ist
 - $0 = \left(4\pi \frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(r)\right) \frac{1}{r} u_{El} Y_{m_l}^l = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \delta^3(r) + V(r) \frac{1}{r}\right) Y_{m_l}^l$ für $r \rightarrow 0$ wegen $\Delta \frac{1}{r} = -4\pi \delta^3(r)$
 2. $u_{El}(0) = 0 \Rightarrow \lim_{r \rightarrow 0} u_{El}(r) \propto r^{l+1}$
 - $V(r)$ hat keinen singulären Anteil bei $r = 0$
 - Annahme: $\lim_{r \rightarrow 0} r^2 V(r) = 0$
 - * $V(r)$ fällt für $t \rightarrow 0$ schneller ab als das Zentrifugalpotential, daher kann $V(r)$ für $r \rightarrow 0$ vernachlässigt werden
 - Erhalte Gleichung $\left(\partial_r^2 - \frac{l(l+1)}{r^2}\right) u_{El}(r) = 0$
 - * Ansatz $u_{El} = r^\alpha$ liefert $\alpha(\alpha - 1) = l(l + 1)$ mit Lösungen $\alpha = -l, \alpha = l + 1$
 - * Lösung $u_{El}(r) \propto r^{-l}$ steht im Widerspruch zu $u_{El}(0) = 0$ und macht daher keinen Sinn
 - * Lösung $u_{El}(r) \propto r^{l+1}$ macht Sinn
- Freies Teilchen in 3D $H = \frac{P_r^2}{2m} + \frac{\vec{L}^2}{2mR^2}$ hat sphärischen Besselfunktionen $j_l(r) = \langle r | nlm \rangle$ als Lösung für u_{El}

3.5.4 Wasserstoff-Problem $H = \frac{P_r^2}{2m} + \frac{\vec{L}^2}{2mR^2} - \frac{\hbar c \alpha}{R}$

- Aufgabe: Energieniveaus und Eigenzustände $|nlm_l\rangle$ des Hamiltonians in der Ortsdarstellung finden
 - Typisches Zentralpotential-Problem
 - n ist geschickt gewählte Energie-Quantenzahl
 - Eines der wenigen analytisch lösbaren Zentralpotential-Probleme (vgl Keplerproblem in der klassischen Mechanik)
 - Rechnung hier für gebundene Zustände ($E < 0$), es gibt auch ungebundene Zustände ($E > 0$)

1. Typische Zentralpotentialschritte $\Rightarrow 0 = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \partial_r^2 + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} - \frac{\hbar c \alpha}{r} - E\right) u_{nl}(r)$
 - Eigenwertgleichung in Ortsbasis $E_n \psi_{nlm_l} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_r + \frac{\vec{L}^2}{2mr^2} - \frac{\hbar c \alpha}{r}\right) \psi_{nlm_l}$
 - Zerlege Laplace-Operator ($\vec{P}^2 = -\hbar^2 \Delta$) in Kugelkoordinaten $\Delta = \Delta_r + \Delta_{\theta, \phi}$ mit $\Delta_r = \partial_r^2 + \frac{2}{r} \partial_r$, $\Delta_{\theta, \phi} = \frac{1}{\sin \theta} \partial_\theta (\sin \theta \partial_\theta) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \partial_\phi^2$
 - Separationsansatz $\psi_{nlm_l}(r, \theta, \phi) = \frac{1}{r} u_{nl}(r) Y_{m_l}^l(\theta, \phi)$
2. Konstanten absorbieren $\Rightarrow \left(\partial_\rho^2 - \frac{l(l+1)}{\rho^2} + \frac{\rho_0}{\rho} - 1\right) u_{nl}(\rho) = 0$

- Abkürzungen $\rho = \kappa r$, $\kappa^2 = -\frac{2mE}{\hbar^2}$, $\rho_0 = \frac{2mc\alpha}{\hbar\kappa} = c\alpha\sqrt{-\frac{2m}{E}}$
- Hier andere Definitionen für $E > 0$: $\kappa^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$

3. Asymptotisch motivierter Ansatz $u_{nl}(\rho) = \rho^{l+1}e^{-\rho}W(\rho) \Rightarrow 0 = \rho\partial_\rho^2 W + 2(l+1-\rho)\partial_\rho W + (\rho_0 - 2(l+1))W$

- Für $\rho \rightarrow 0$: $u_{nl} \propto \rho^{l+1}$ löst $\left(\partial_\rho^2 - \frac{l(l+1)}{\rho^2}\right)u_{nl} = 0$
- Für $\rho \rightarrow \infty$: $u_{nl}(\rho) \propto e^{-\rho}$ löst $(\partial_\rho^2 - 1)u_{nl} = 0$
- Mit $\partial_\rho^2(\rho^{l+1}e^{-\rho}W) = \rho^{l+1}e^{-\rho}\left(\partial_\rho^2 + 2\left(\frac{l+1}{\rho} - 1\right)\partial_\rho + \left(\frac{l(l+1)}{\rho^2} - 2\frac{l+1}{\rho} - 1\right)\right)W$ vereinfacht sich die DGL

4. Energieniveaus finden mit Potenzreihenansatz $W = \sum_{k=0} a_k \rho^k \Rightarrow E_n = -\frac{mc^2}{2} \frac{\alpha^2}{n^2}$, $n \in \mathbb{N}$

- Potenzreihenansatz liefert 2 Anfangsbedingungen und Rekursionsgleichung $\frac{a_{k+1}}{a_k} = \frac{\rho_0 - 2(k+l+1)}{(k+1)(k+2(l+1))}$
 - Reihe bricht ab $\Rightarrow \exists k_0 \in \mathbb{N} : \rho_0 = 2(k_0 + l + 1) =: 2n$ mit $n \in \mathbb{N}_0$
 - Reihe bricht nicht ab \Rightarrow Finde $W \propto e^{2\rho}$ und Widerspruch zur Asymptotik von u_{nl}
 - * Für $k \rightarrow \infty$ ist $\frac{a_{k+1}}{a_k} = \frac{2}{k}$, für $\rho \rightarrow \infty$ ist $a_k \propto \frac{2^k}{k!}$ und $W = \sum_{k=0} a_k \rho^k \propto e^{2\rho}$ ist nicht normierbar
- $\rho_0 = 2n$ in $\rho_0 = c\alpha\sqrt{-\frac{2m}{E}}$ einsetzen und nach E auflösen

5. $0 = \rho\partial_\rho^2 W + 2(l+1-\rho)\partial_\rho W + (\rho_0 - 2(l+1))W$ ist Laguerre-DGL mit zugeordneten Laguerre-Polynomen als Lösung

- Geschickte Darstellungen der Laguerre-Polynome etc
- Kann Energieniveaus E_n auch algebraisch herleiten mit dem Runge-Lenz-Vektor(Erhaltungsgröße für $\frac{1}{r}$ -Potential)
 - Gibts auch eine algebraische Herleitung für die Zustände?

Kapitel 4

Störungstheorie

4.1 Zeitunabhängige Störungstheorie

4.1.1 Grundlagen

- Problem: Suche Lösungen für $H|n\rangle = E|n\rangle$, finde aber keine exakte Lösung
- Voraussetzungen
 - Zeitunabhängiger Hamiltonian $H = H_0 + V$ mit kleiner Störung V
 - Eigenwerte $E_n^{(0)}$ und Eigenkets $|n^{(0)}\rangle$ für das ungestörte Problem $H_0|n^{(0)}\rangle = E_n^{(0)}|n^{(0)}\rangle$ sind bekannt
 - Wenn Terme der Form $\frac{\langle m^{(0)}|V|n^{(0)}\rangle}{|E_n^{(0)} - E_m^{(0)}|}$ hinreichend klein sind ($\forall_{n,m} \frac{\langle m^{(0)}|V|n^{(0)}\rangle}{|E_n^{(0)} - E_m^{(0)}|} \ll 1$), findet man beliebig genaue approximative Lösungen
- Idee: Entwickle Eigenkets $|n\rangle = \sum_{i=0} \lambda^i |n^{(i)}\rangle$ und Eigenwerte $E_n = \sum_{i=0} \lambda^i E_n^{(i)}$ in einer Potenzreihe mit kleinem Parameter λ (enthält Information über die Kleinheit von V) und löse die resultierenden Gleichungen bis zu einer bestimmten Ordnung in λ
- Alternative Notation: Operatoren $\Pi_{LS}(n) = \frac{1}{E_n^{(0)} - H_0}$, $\Phi_n = \sum_{k \neq n} |k^{(0)}\rangle \langle k^{(0)}|$, evtl Projektoren für den entarteten Unterraum
 - Kann Notation damit vereinfachen, verliere aber Anschaulichkeit darüber, was passiert

4.1.2 Entartung anschaulich

- Entartung: $E_n^{(0)} = E_k^{(0)}$ für manche Kombinationen n, k
- Zustände $|n^{(0)}\rangle$ müssen Eigenzustände eines weiteren Operators A sein, damit die Zustände über ihre Eigenwerte komplett unterscheidbar sind
 - Übliche Notation in Literatur: $|n^{(0)}, \alpha\rangle$ mit Quantenzahlen α bzgl A , dann gilt $\exists_{n,m} : E_n^{(0)} = E_m^{(0)}$
 - Meine Notation: Zustände $|n^{(0)}\rangle$ ohne neue Quantenzahl, Entartung bedeutet $\exists_{n,m} : E_n^{(0)} = E_m^{(0)}$
- Ursache allen Übels: $[H_0, A] = 0$, aber $[V, A] \neq 0$ und daher $[H, A] \neq 0$
 - Anschaulich: Störung V hebt Entartung des ungestörten Problems auf
 - Für H_0 ist A kommutierende Observable, für V und damit auch $H = H_0 + V$ aber nicht
- Technisches Problem: Terme $\frac{1}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}}$ können singulär werden
- Lösung: Basiswechsel zu Zuständen $|n'^{(0)}\rangle$, die V diagonalisieren ($V|n'^{(0)}\rangle = E_n^{(1)}|n'^{(0)}\rangle$) und die Entartung aufheben
 - Kann Diagonalisierungs-Verfahren beliebig oft wiederholen (wähle diagonale Operatoren so, dass die Rechnung vereinfacht wird), falls die Entartung nicht aufgehoben wird

4.1.3 Master-Gleichung

- Finde $\langle k^{(0)} | V | n^{(i-1)} \rangle = E_n^{(i)} \delta_{nk} + (E_n^{(0)} - E_k^{(0)}) \langle k^{(0)} | n^{(i)} \rangle + \sum_{j=1}^{i-1} E_n^{(i-j)} \langle k^{(0)} | n^{(j)} \rangle$
 - Eigentlich ist mit dieser Gleichung alles Physikalische gesagt, der Rest ist Mathematik
 - Weiteres Vorgehen: Fallunterscheidungen $k = n/k \neq n$ und $E_n^{(0)} - E_k^{(0)} \neq 0 / E_n^{(0)} - E_k^{(0)} = 0$

1. Parameter λ parametrisiert kleine Störung in $H = H_0 + V' = H_0 + \lambda V$

- Formal: Freier Parameter $\lambda \ll 1$ parametrisiert für beliebiges V' , dass V' klein gegenüber H_0 ist
 - Dilemma: Kann konkrete Form von V' für eine allgemeine Rechnung nicht verwenden, muss aber einbauen, dass $V' = \lambda V$ eine kleine Störung ist
- (a) Während der Rechnung: V ist groß, $\lambda \ll 1$
- (b) Am Ende der Rechnung: V ist klein, $\lambda = 1$
- Anwendung: Kann oft explizit $V' = \lambda V$ zerlegen mit kleinem Parameter $\lambda \ll 1$

2. Potenzreihenansatz in λ für $|n\rangle$ und E_n : $|n\rangle = \sum_{i=0} \lambda^i |n^{(i)}\rangle$, $E_n = \sum_{i=0} \lambda^i E_n^{(i)}$

- Oberer Index streng genommen unendlich (für exakte Lösung)
 - In der Praxis wird nur zu endlicher Ordnung entwickelt und dann argumentiert, dass die Störung klein ist und man deshalb die Entwicklung abbrechen kann
- Zustände $\langle n^{(0)} | m^{(0)} \rangle = \delta_{mn}$ sind orthonormal nach Voraussetzung
 - Ungestörte Zustände sind Orthonormalsystem von Eigenzuständen des Operators H_0
- Nachteil der verwendeten Normierung: Exakte Zustände $|n\rangle$ sind nicht normiert $\langle n | m \rangle \neq \delta_{nm}$
 - Kann $|n\rangle$ am Ende der Rechnung renormieren bis zu beliebiger Ordnung in λ

3. Potenzreihenansatz in $(H + \lambda V) |n\rangle = E_n |n\rangle$ einsetzen und Koeffizientenvergleich in λ^i durchführen

$$\Rightarrow H_0 |n^{(i)}\rangle + V |n^{(i-1)}\rangle = \sum_{j=0}^i E_n^{(i-j)} |n^{(j)}\rangle \text{ für } i \neq 0$$

- Linke Seite kann man ablesen
- Rechte Seite folgt aus allen möglichen Kombinationen der beiden unendlichen Summen (vgl Cauchy-Produkt)
- Notiz: Wenn $|n^{(i)}\rangle$ diese Gleichung löst, wird sie auch durch $|n^{(i)}\rangle + \alpha |n^{(0)}\rangle$ mit $\alpha \in \mathbb{C}$ gelöst
 - Begründung: Erhalte links und rechts denselben zusätzlichen Term $\alpha H_0 |n^{(0)}\rangle = \alpha E_n^{(0)} |n^{(0)}\rangle$
 - Aussage gilt für alle i , da $H_0 |n^{(i)}\rangle + V |n^{(i-1)}\rangle = \sum_{j=0}^i E_n^{(i-j)} |n^{(j)}\rangle$ für alle i gilt
- Für $i = 0$: Erhalte Schrödinger-Gleichung des ungestörten Problems $H_0 |n^{(0)}\rangle = E_n^{(0)} |n^{(0)}\rangle$

4. Multipliziere Zustand $\langle k^{(0)} | \Rightarrow \langle k^{(0)} | V | n^{(i-1)} \rangle = E_n^{(i)} \delta_{nk} + (E_n^{(0)} - E_k^{(0)}) \langle k^{(0)} | n^{(i)} \rangle + \sum_{j=1}^{i-1} E_n^{(i-j)} \langle k^{(0)} | n^{(j)} \rangle$

- Erhalte $\langle k^{(0)} | H_0 | n^{(i)} \rangle + \langle k^{(0)} | V | n^{(i-1)} \rangle = E_k^{(0)} \langle k^{(0)} | n^{(i)} \rangle + \langle k^{(0)} | V | n^{(i-1)} \rangle = \sum_{j=0}^i E_n^{(i-j)} \langle k^{(0)} | n^{(j)} \rangle = E_n^{(i)} \delta_{nk} + E_n^{(0)} \langle k^{(0)} | n^{(i)} \rangle + \sum_{j=1}^{i-1} E_n^{(i-j)} \langle k^{(0)} | n^{(j)} \rangle$
- Umstellen liefert $\langle k^{(0)} | V | n^{(i-1)} \rangle = E_n^{(i)} \delta_{nk} + (E_n^{(0)} - E_k^{(0)}) \langle k^{(0)} | n^{(i)} \rangle + \sum_{j=1}^{i-1} E_n^{(i-j)} \langle k^{(0)} | n^{(j)} \rangle$

- Zustände $|n^{(i)}\rangle$ und $|n^{(i)}\rangle + \alpha |n^{(0)}\rangle$ sind ununterscheidbar \Rightarrow Lege Beliebigkeit fest durch $\langle n^{(0)} | n^{(i)} \rangle = 0$
 - Zustände sind ununterscheidbar bedeutet, dass sie beide die Schrödingergleichung lösen
 - Formal: Wähle $\alpha = -\langle n^{(0)} | n^{(i)} \rangle \Rightarrow \langle n^{(0)} | (|n^{(i)}\rangle + \alpha |n^{(0)}\rangle) \rangle = \langle n^{(0)} | n^{(i)} \rangle - \langle n^{(0)} | n^{(i)} \rangle \langle n^{(0)} | n^{(0)} \rangle = 0 = \delta_{i0}$

4.1.4 Rechnung im nicht entarteten Fall

1. Fall $n = k \Rightarrow E_n^{(i)} = \langle n^{(0)} | V | n^{(i-1)} \rangle$
 - Verwende $E_n^{(0)} = E_k^{(0)}$ (wegen $k = n$) und Normierung $\langle n^{(0)} | n^{(j)} \rangle = 0$
 2. Fall $n \neq k \Rightarrow \langle k^{(0)} | n^{(i)} \rangle = \frac{\langle k^{(0)} | V | n^{(i-1)} \rangle - \sum_{j=1}^{i-1} E_n^{(i-j)} \langle k^{(0)} | n^{(j)} \rangle}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}}$
 - Verwende $E_n^{(0)} - E_k^{(0)} \neq 0$ und $\delta_{nk} =$
 - Verwende Vollständigkeit der $|n^{(0)}\rangle$: $|n^{(i)}\rangle = \sum_{n \neq k} |k^{(0)}\rangle \langle k^{(0)} | n^{(i)} \rangle$
 - Erhalte Koeffizienten $\langle k^{(0)} | n^{(i)} \rangle$ durch Umstellen
- Wichtige Spezialfälle
 - $E_n^{(1)} = \langle n^{(0)} | V | n^{(0)} \rangle$
 - $|n^{(1)}\rangle = \sum_{n \neq k} |k^{(0)}\rangle \frac{\langle k^{(0)} | V | n^{(0)} \rangle}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}}$
 - $E_n^{(2)} = \sum_{n \neq k} \frac{|\langle k^{(0)} | V | n^{(0)} \rangle|^2}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}}$
 - * Interpretation: $E_n^{(2)}$ hängt von den Energien aller möglichen Zustände ab
 - * Anwendung: Kann Zustände $|k^{(0)}\rangle$ untersuchen, deren Energie $E_k^{(0)}$ nicht erreichbar ist

4.1.5 Rechnung im entarteten Fall

1. Entarteten Unterraum E finden
 - Für welche Quantenzahlen n ist H_0 entartet? $\Rightarrow E = \text{Lin}\{|n^{(0)}\rangle : E_n^{(0)} \text{ entartet}\}$
 - Rechnung hier nur für einen entarteten Unterraum
 - Verallgemeinerung auf mehrere entarteten Unterräume ist Fleißsache (muss Fallunterscheidungen für jeden entarteten Unterraum machen)
2. V im entarteten Unterraum diagonalisieren
 - Wahl der Eigenvektoren $|n^{(0)}\rangle$ zu den entarteten Energie-Eigenwerten $E_n^{(0)}$ ist nicht eindeutig \Rightarrow Lege diesen Freiheitsgrad fest durch die Forderung, dass die Eigenvektoren $|n^{(0)}\rangle$ auch V diagonalisieren
 - Einzige Forderung an die Eigenvektoren $|n^{(0)}\rangle$ zu entarteten Energie-Eigenwerten $E_n^{(0)}$: $|n^{(0)}\rangle$ bilden Orthonormalbasis
 - Anschaulich: Habe bei der Diagonalisierung von H_0 irgendeine Basis für $|n^{(0)}\rangle$ im entarteten Unterraum gewählt
 - Andere Perspektive: $\{H_0\}$ ist kein vSkO und legt damit die Eigenvektoren nicht eindeutig fest \Rightarrow Verwende stattdessen den vSkO $\{H_0, V\}$ und die Eigenvektoren sind eindeutig (falls V die Entartung aufhebt)
 - Finde nach der Diagonalisierung neue Eigenvektoren $|n'^{(0)}\rangle$ von H_0 und V : $H_0 |n'^{(0)}\rangle = E_n^{(0)} |n'^{(0)}\rangle, V |n'^{(0)}\rangle = E_n^{(1)} |n'^{(0)}\rangle$
 - Eigenwerte bezüglich V sind per Konstruktion die Energiekorrekturen $E_n^{(1)}$: $V |n^{(0)}\rangle = E_n^{(1)} |n^{(0)}\rangle$
 - Verwende ab jetzt nur noch $|n'^{(0)}\rangle \Rightarrow$ Redefiniere $|n'^{(0)}\rangle \rightarrow |n^{(0)}\rangle$
 - Rechnung hier nur für den Fall, dass $E_n^{(1)}$ nicht mehr entartet ist
 - Erweiterung auf den Fall, dass $E_n^{(1)}$ immer noch entartet ist, ist Fleißsache (unten kommt ein Kommentar dazu) (Notation wird unhandlich)
3. $n = k \Rightarrow$ Energien berechnen $E_n^{(i)} = \langle n^{(0)} | V | n^{(i-1)} \rangle$
 - Rechnung wie im nicht-entarteten Fall
4. $n \neq k \Rightarrow$ Matrixelemente $\langle k^{(0)} | n^{(i)} \rangle$ berechnen

- **Strategie:** Berechne $\langle k^{(0)} | n^{(i)} \rangle$ für $|k^{(0)}\rangle \in E$ und $|k^{(0)}\rangle \notin E$, dann $|n^{(i)}\rangle = \sum_{|k^{(0)}\rangle \in E} |k^{(0)}\rangle \langle k^{(0)} | n^{(i)} \rangle + \sum_{|k^{(0)}\rangle \notin E} |k^{(0)}\rangle \langle k^{(0)} | n^{(i)} \rangle$

(a) Fall $E_n^{(0)} \neq E_k^{(0)}$ bzw $|k^{(0)}\rangle \notin E$ oder $|n^{(0)}\rangle \notin E$: $\langle k^{(0)} | n^{(i)} \rangle = \frac{\langle k^{(0)} | V | n^{(i-1)} \rangle - \sum_{j=1}^{i-1} E_n^{(i-j)} \langle k^{(0)} | n^{(j)} \rangle}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}}$

- $|k^{(0)}\rangle \notin E$ oder $|n^{(0)}\rangle \notin E \Rightarrow E_n^{(0)} \neq E_k^{(0)} \Rightarrow$ Kann durch $E_n^{(0)} - E_k^{(0)}$ teilen
- Rechnung wie im nicht-entarteten Fall

(b) Fall $E_n^{(0)} = E_k^{(0)}$ bzw $|k^{(0)}\rangle \in E$ und $|n^{(0)}\rangle \in E$:

$$\langle k^{(0)} | n^{(i-1)} \rangle = \frac{1}{E_n^{(1)} - E_k^{(1)}} \left(\sum_{|l^{(0)}\rangle \notin E} \langle k^{(0)} | V | l^{(0)} \rangle \langle l^{(0)} | n^{(i-1)} \rangle - \sum_{j=1}^{i-2} E_n^{(i-j)} \langle k^{(0)} | n^{(j)} \rangle \right)$$

- **Problem:** $|k^{(0)}\rangle, |n^{(0)}\rangle \in E \Rightarrow E_n^{(0)} = E_k^{(0)} \Rightarrow$ Rechnung wie im nicht-entarteten Fall funktioniert nicht
- **Lösung:** Ausgangsgleichung für den Fall $k = n, E_n^{(0)} = E_k^{(0)}$ untersuchen

$$\langle k^{(0)} | V | n^{(i-1)} \rangle = E_n^{(i)} \delta_{nk} + (E_n^{(0)} - E_k^{(0)}) \langle k^{(0)} | n^{(i)} \rangle + \sum_{j=1}^{i-1} E_n^{(i-j)} \langle k^{(0)} | n^{(j)} \rangle = \sum_{j=1}^{i-1} E_n^{(i-j)} \langle k^{(0)} | n^{(j)} \rangle$$
- Rechte Seite $\sum_{j=1}^{i-1} E_n^{(i-j)} \langle k^{(0)} | n^{(j)} \rangle = E_n^{(1)} \langle k^{(0)} | n^{(i-1)} \rangle + \sum_{j=1}^{i-2} E_n^{(i-j)} \langle k^{(0)} | n^{(j)} \rangle$
- Linke Seite $\langle k^{(0)} | V | n^{(i-1)} \rangle = \langle k^{(0)} | V \left(\sum_{|l^{(0)}\rangle \notin E} |l^{(0)}\rangle \langle l^{(0)}| + \sum_{|l^{(0)}\rangle \in E} |l^{(0)}\rangle \langle l^{(0)}| \right) | n^{(i-1)} \rangle$

$$= \sum_{|l^{(0)}\rangle \notin E} \langle k^{(0)} | V | l^{(0)} \rangle \langle l^{(0)} | n^{(i-1)} \rangle + \sum_{|l^{(0)}\rangle \in E} \langle k^{(0)} | V | l^{(0)} \rangle \langle l^{(0)} | n^{(i-1)} \rangle$$

$$= \sum_{|l^{(0)}\rangle \notin E} \langle k^{(0)} | V | l^{(0)} \rangle \langle l^{(0)} | n^{(i-1)} \rangle + E_k^{(1)} \langle k^{(0)} | n^{(i-1)} \rangle$$
 - Idee: Vollständigkeitsrelation einfügen und zwischen $|l^{(0)}\rangle \in E$ und $|l^{(0)}\rangle \notin E$ unterscheiden
 - $|l^{(0)}\rangle \notin E$: $\langle l^{(0)} | n^{(i-1)} \rangle$ bekannt aus einer Ordnung Störungstheorie niedriger (Fall a)
 - $|l^{(0)}\rangle \in E$: Kann $\langle k^{(0)} | V | l^{(0)} \rangle = E_l^{(1)} \delta_{kl}$ benutzen
- Kann dann nach $\langle k^{(0)} | n^{(i-1)} \rangle$ auflösen, indem ich durch $E_n^{(1)} - E_k^{(1)} \neq 0$ teile
- Konsistenzcheck $i = 1$: $\langle k^{(0)} | n^{(i-1)} \rangle = 0$ passt zusammen mit $\langle k^{(0)} | n^{(0)} \rangle = \delta_{kn} = 0$ wegen $k \neq n$
 - Erster Term: $\langle l^{(0)} | n^{(i-1)} \rangle = \langle l^{(0)} | n^{(0)} \rangle = \delta_{ln} = 0$ wegen $|l^{(0)}\rangle \notin E, |n^{(0)}\rangle \in E$
 - Zweiter Term: $\sum_{j=1}^{i-2} \dots = \sum_{j=1}^{-1} \dots = 0$

- **Ergebnisse für den entarteten Unterraum hängen eine Ordnung Störungstheorie hinterher:** Berechne $|n^{(i-1)}\rangle$ im i -ten Schritt

- Anwendung: Muss für Korrektur $|n^{(i)}\rangle \in E$ immer eine Ordnung Störungstheorie höher gehen
- Aber: Koeffizienten von $|n^{(i)}\rangle \in E$ haben selbe Größenordnung wie $|n^{(i)}\rangle \notin E$ (wie erwartet)
 - * Begründung: Vgl Ergebnisse von (a) und (b); $E_n^{(1)} - E_k^{(1)}$ ist von selber Größenordnung wie V

5. Allgemeiner Zustand $|n^{(i)}\rangle = \sum_{|l^{(0)}\rangle \notin E} |l^{(0)}\rangle \langle l^{(0)} | n^{(i)} \rangle + \sum_{|l^{(0)}\rangle \in E} |l^{(0)}\rangle \langle l^{(0)} | n^{(i)} \rangle$

- $|n^{(0)}\rangle \notin E$: Setze vorne und hinten Ergebnis von (a) ein
- $|n^{(0)}\rangle \in E$: Setze vorne Ergebnis von (a) und hinten Ergebnis von (b) ein

- Wenn die Entartung nach der ersten Diagonalisierung nicht aufgehoben ist...

- Kann Vorgehen in Schritt 4.b) immer noch verwenden, aber Notation wird unhandlich
 - * Konkret: Einen Term aus der Summe ziehen, Vollständigkeitsrelation links einsetzen, Operator durch Basiswechsel von $|n^{(i)}\rangle$ diagonalisieren (Operator wird in jedem Schritt hässlicher)
- Konkret: Diagonalisiere $V, V \left(\sum_{|k^{(0)}\rangle \in E} \frac{|k^{(0)}\rangle \langle k^{(0)}|}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} \right) V, V \left(\sum_{|k^{(0)}\rangle \in E} \frac{|k^{(0)}\rangle \langle k^{(0)}|}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} \right) V \left(\sum_{|q^{(0)}\rangle \in E} \frac{|q^{(0)}\rangle \langle q^{(0)}|}{E_m^{(0)} - E_q^{(0)}} \right) V$
 usw auf dem verbleibenden entarteten Unterraum durch einen Basiswechsel von $|n^{(0)}\rangle$

- (Nicht ganz so) häufig verwendete Formeln für n mit $|n^{(0)}\rangle \in E$

- $|n^{(0)}\rangle \notin E \Rightarrow$ Ergebnisse vom nicht-entarteten Fall gelten
- $E_n^{(1)}$ folgt direkt aus der Diagonalisierung
- $|n^{(1)}\rangle = \sum_{|k^{(0)}\rangle \notin E} |k^{(0)}\rangle \frac{\langle k^{(0)} | V | n^{(0)} \rangle}{E_n^{(1)} - E_k^{(0)}} + \sum_{|k^{(0)}\rangle \in E} |k^{(0)}\rangle \frac{1}{E_n^{(1)} - E_k^{(1)}} \sum_{|l^{(0)}\rangle \notin E} \frac{\langle k^{(0)} | V | l^{(0)} \rangle \langle l^{(0)} | V | n^{(0)} \rangle}{E_n^{(0)} - E_l^{(0)}}$
- $E_n^{(2)} = \langle n^{(0)} | V | n^{(1)} \rangle = \sum_{|k^{(0)}\rangle \notin E} \frac{|\langle k^{(0)} | V | n^{(0)} \rangle|^2}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} + \sum_{|k^{(0)}\rangle \in E} \frac{\langle n^{(0)} | V | k^{(0)} \rangle}{E_n^{(1)} - E_k^{(1)}} \sum_{|l^{(0)}\rangle \notin E} \frac{\langle k^{(0)} | V | l^{(0)} \rangle \langle l^{(0)} | V | n^{(0)} \rangle}{E_n^{(0)} - E_l^{(0)}}$

4.1.6 Renormierung von $|n\rangle$

- Problem: Benötige Normierung $\langle n|m\rangle = \delta_{nm}$ für Wahrscheinlichkeitsinterpretation, verwende aber in der Rechnung $|n\rangle = \sum_i \lambda^i |n^{(i)}\rangle$ mit $\langle n^{(0)}|m^{(0)}\rangle = \delta_{mn}$, $\langle n^{(i)}|n^{(j)}\rangle = \delta_{ij}$
 - Das hier ist kleiner Bruder von der Renormierung in Quantenfeldtheorie
- Renormiere Zustände $|n\rangle_R = \sqrt{Z_n}|n\rangle$, sodass ${}_R\langle n|m\rangle_R = Z_n\langle n|m\rangle = \delta_{nm}$
 1. $Z_n^{-1} = \langle n|n\rangle = (\langle n^{(0)}| + \lambda\langle n^{(1)}| + \mathcal{O}(\lambda^2))(|n^{(0)}\rangle + \lambda|n^{(1)}\rangle + \mathcal{O}(\lambda^2)) = \langle n^{(0)}|n^{(0)}\rangle + \lambda^2\langle n^{(1)}|n^{(1)}\rangle + \mathcal{O}(\lambda^4) = 1 + \lambda^2 \sum_{k \neq n} \frac{|V_{kn}|^2}{(E_n^{(0)} - E_k^{(0)})^2} + \mathcal{O}(\lambda^4)$
 2. Invertiere für $\lambda \ll 1 \Rightarrow Z_n = 1 - \lambda^2 \sum_{k \neq n} \left(\frac{|V_{kn}|}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} \right)^2 + \mathcal{O}(\lambda^4)$
 - Interpretation von Z_n : Wahrscheinlichkeit, dass der gestörte Zustand $|n\rangle = \sum_i \lambda^i |n^{(i)}\rangle$ sich im ungestörten Zustand $|n^{(0)}\rangle$ befindet
 - * Begründung: $|\langle n^{(0)}|n\rangle_R|^2 = Z_n |\langle n^{(0)}|n\rangle|^2 = Z_n$ wegen $\langle n^{(i)}|n^{(j)}\rangle = \delta_{ij}$
- Allgemein gilt $Z_n = \frac{\partial E_n}{\partial E_n^{(0)}}$
 - Kann Gleichung bis $\mathcal{O}(\lambda^2)$ einfach nachrechnen mit Störungstheorie-Ergebnissen für $E_n^{(i)}$ und $\langle k^{(0)}|n^{(i)}\rangle$
 - Interpretation dieser Beziehung?

4.2 Variationsmethode

4.2.1 Grundlagen

- Idee: Mache Ansatz für Grundzustand $|\psi\rangle$ und finde so obere Grenze für Grundzustandsenergie
 - Nachteil: Keine Informationen über höhere Zustände
 - Vorteil: Brauche keine exakten Lösungen für ungestörtes Problem wie in der richtigen Störungstheorie
- Anwendung
 1. Normierter Ansatz $|\psi\rangle$ für Grundzustand
 - Wähle Funktion mit freien Parametern (Polynom, Gaußfunktion, ...)
 2. $\langle \psi|H|\psi\rangle \geq E_0 \Rightarrow$ Finde obere Grenze für Grundzustandsenergie E_0
 - Minimiere $\langle \psi|H|\psi\rangle$ mit freien Parametern

4.2.2 Theorem $\langle \psi|H|\psi\rangle \geq E_0$

- Bedeutung: Für beliebigen Ket $|\psi\rangle$ ist $\langle \psi|H|\psi\rangle$ größer oder gleich der Grundzustandsenergie E_0
 - Logisch: Grundzustand $|0\rangle$ hat per Definition den niedrigsten Energie-Erwartungswert aller Zustände
- Herleitung
 1. Energieeigenkets $|n\rangle$ mit $H|n\rangle = E_n|n\rangle$ bilden orthonormale Basis $1 = \sum_n |n\rangle\langle n|$, $\langle n|k\rangle = \delta_{nk}$
 - $|n\rangle$ -Basis ist nicht bekannt, existiert aber, da H hermitesch ist
 - Entwickle $|\psi\rangle$ in $|n\rangle$ -Basis: $|\psi\rangle = \sum_n |n\rangle\langle n|\psi\rangle$
 2. Abschätzung $\langle \psi|H|\psi\rangle = \sum_n \langle \psi|H|n\rangle\langle n|\psi\rangle = \sum_n |\langle n|\psi\rangle|^2 E_n = \sum_n |\langle n|\psi\rangle|^2 (E_n - E_0) + E_0 \sum_n |\langle n|\psi\rangle|^2 = \sum_n |\langle n|\psi\rangle|^2 (E_n - E_0) + E_0 \geq E_0$
 - Benutze $H|n\rangle = E_n|n\rangle$, $E_n = E_n - E_0 + E_0$, Normierung der Wahrscheinlichkeit $\sum_n |\langle \psi|n\rangle|^2 = 1$
 - Verwende in der Abschätzung, dass $|\langle \psi|n\rangle|^2 \geq 0$, $(E_n - E_0) \geq 0$
 - Gleichheit gilt, falls $|\psi\rangle = |0\rangle$: $|\langle \psi|n\rangle|^2 = \delta_{n0}$ und der erste Term verschwindet

4.3 WKB-Methode

4.3.1 Grundlagen

- Idee: Löse Schrödingergleichung $E\psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\partial_x^2\psi + V(x)\psi$ eines Teilchens im schwachen Potential V in Ortsdarstellung näherungsweise, indem ich von ebenen Wellen ausgehe
 - Allgemeines Vorgehen für lineare DGLs mit ortsabhängigen Koeffizienten
 - Lösung von $E\psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\partial_x^2\psi$ wären ebene Wellen, $V(x)$ ist eine kleine Störung der DGL
- Anschaulich: Semiklassische Theorie - Entwicklung in $\hbar \ll 1$

4.3.2 Rechnung mit der WKB-Methode

- Rechnung abseits der klassischen Umkehrpunkte
 1. Ansatz $\psi = e^{\frac{i}{\hbar}\phi(x)}$
 - $\phi(x) = \sum_{k=0}^{\infty} \hbar^k \phi_k(x)$ ist Potenzreihe in kleinem Parameter \hbar
 - Definiere Äquivalent $p(x)$ zum klassischen Impuls durch $\frac{p^2}{2m} = E - V(x)$
 2. Einsetzen in $E\psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\partial_x^2\psi + V(x)\psi$ liefert $0 = p^2 + i\hbar\partial_x^2\phi - (\partial_x\phi)^2$
 - Entwickle $\phi = \sum_i \hbar^i \phi_i$ und mache Koeffizientenvergleich
 - * \hbar^0 : $(\partial_x\phi_0)^2 = p^2 \Rightarrow \phi_0 = \pm \int dx' p(x')$
 - * \hbar^1 : $\partial_x\phi_1 = \frac{i}{2} \frac{\partial_x^2\phi_0}{\partial_x\phi_0} \Rightarrow \phi_1 = i \ln \sqrt{|p(x)|} - i \ln c$ mit geschickter Integrationskonstante $-i \ln c$
 - * $\partial_x\phi_1 = \frac{i}{2} \frac{\partial_x^2\phi_0}{\partial_x\phi_0} = \frac{i}{2} \partial_x \ln(\partial_x\phi_0) = i \partial_x \ln \sqrt{|p(x)|}$
 - Finde Näherung $\psi(x) = \frac{c}{\sqrt{|p(x)|}} e^{\pm \frac{i}{\hbar} \int dx' p(x')}$ bis zur Ordnung \hbar
 - * Interpretation zum Freiheitsgrad \pm : Ausbreitung in positive oder negative x-Richtung
 - * Setze $p(x) = \sqrt{\frac{E-V(x)}{2m}}$ ein, um den Ausdruck explizit zu berechnen
 - * Klassisch erlaubte Bereiche $E - V(x) > 0$: Schwingung
 - * Klassisch verbotene Bereiche $E - V(x) < 0$: Exponentieller Abfall
- Rechnung im Bereich der klassischen Umkehrpunkte
 1. Entwickle $V(x)$ im Bereich der Umkehrpunkte x_1, x_2 : $V(x) \approx V(x_i) + \partial_x V(x)|_{x_i} (x - x_i)$
 2. Löse vereinfachte Schrödingergleichung $E\psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\partial_x^2\psi + V(x_i)\psi + \partial_x V(x)|_{x_i} (x - x_i) \psi$
 - Lösungen sind Airy-Funktionen
- Stetiger Anschluss der Lösungen in unterschiedlichen Bereichen für die globale Lösung
 - Finde Quantisierungsbedingung $(n + \frac{1}{2})\pi = \frac{1}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} p(x) dx$
 - * Klassische Endpunkte $x_{1,2}$ des Potentials mit $E = V(x_{1,2})$
 - * Grund: An klassischen Umkehrpunkten jeweils Phasenshift um $\frac{\pi}{4} \Rightarrow$ Insgesamt Phasenshift $\pi(\frac{1}{2} + n)$ zwischen den klassischen Umkehrpunkten erlaubt
 - * Kann damit Energieeigenwerte E_n bestimmen
- Tunneln mit der WKB-Methode: Kann mit Kastenpotential Tunneln untersuchen

4.4 Zeitabhängige Störungstheorie

4.4.1 Grundlagen

- Voraussetzungen
 - Hamiltonian $H = H_0 + V(t)$ mit kleiner, zeitabhängiger Störung $V(t)$
 - Lösungen $E_n, |n\rangle$ des ungestörten Problems $H_0|n\rangle = E_n|n\rangle$ bekannt

- Idee: Benutze das WW-Bild und entwickle zeitabhängige Störung $V(t)$ in einer Dyson-Reihe
 - Finde kleine Störung der Zeitentwicklung durch $V(t)$
- Vorgehen: Beliebige Störungen aus konstanten Störungen aufbauen
 1. Konstante Störung ist einfachster Fall
 2. Harmonische Störung ist konstante Störung mit zusätzlicher exp-Zeitabhängigkeit
 3. Kann alle Störungen als Superposition harmonischer Störungen darstellen
 - Formal: Kann Funktionen als Fouriertransformation entwickeln
 - Interpretation: Kann beliebige Übergänge in stimulierte Emission und Absorption zerlegen

4.4.2 Allgemeine Rechnung

1. Benutze WW-Bild

- Zustände $|\psi, t\rangle_I = e^{\frac{i}{\hbar} H_0 t} |\psi, t\rangle_S$ mit Energieeigenzustand $|i\rangle = |\psi, 0\rangle$ zu Beginn des Prozesses
- Störung $V_I(t) = e^{\frac{i}{\hbar} H_0 t} V(t) e^{-\frac{i}{\hbar} H_0 t}$
- Schrödingergleichung $i\hbar \partial_t |\psi, t\rangle = V_I(t) |\psi, t\rangle_I$
- Allgemeine Lösung der Schrödinger-Gleichung ist Dyson-Reihe $U_I(t, 0) = \mathcal{T} \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int_0^t d\tau V_I(\tau)\right)$
 - Für eine kleine Störung V sind nur endlich viele Terme für eine hinreichend genaue Lösung nötig

2. Koeffizienten $c_n(t) = \langle n | \psi, t \rangle_I$ statt Zuständen $|\psi, t\rangle_I$ für die Beschreibung

- $|\psi, t\rangle_I = \sum_n c_n(t) |n\rangle$ mit Koeffizienten $c_n(t) = \langle n | \psi, t \rangle_I$
 - Die Koeffizienten $c_n(t)$ enthalten dieselbe Information wie $|\psi, t\rangle_I = \sum_n c_n(t) |n\rangle$
 - Anschaulich: $|c_n(t)|^2$ ist Wahrscheinlichkeit dafür, dass das System zum Zeitpunkt t im Zustand $|n\rangle$ ist, wenn es zu Beginn im Zustand $|i\rangle$ war
- Definiere Abkürzungen
 - Übergangsfrequenz $\omega_{nm} = \frac{E_n - E_m}{\hbar}$ als Energieäquivalent für Übergänge zwischen $|n\rangle$ und $|m\rangle$
 - Matricelemente der Störung $V_{nm} = \langle n | V | m \rangle$
- Schrödingergleichung für Koeffizienten: $i\hbar \partial_t c_n(t) = \sum_m V_{nm} e^{i\omega_{nm} t} c_m(t)$
 - Multipliziere Schrödingergleichung mit $\langle n |$
 - $i\hbar \partial_t \langle n | \psi, t \rangle_I = i\hbar \partial_t c_n(t)$
 - $\langle n | V_I | \psi, t \rangle_I = \sum_m \langle n | e^{\frac{i}{\hbar} H_0 t} V(t) e^{-\frac{i}{\hbar} H_0 t} | m \rangle \langle m | \psi, t \rangle_I = \sum_m e^{\frac{i}{\hbar} E_n t} \langle n | V | m \rangle e^{-\frac{i}{\hbar} E_m t} c_m(t) = \sum_m V_{nm} e^{i\omega_{nm} t} c_m(t)$

3. Dyson-Reihe für Koeffizienten

$$c_n(t) = \langle n | U_I(t, 0) | i \rangle = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^k \int_0^t d\tau_0 \cdots \int_0^t d\tau_k \langle n | V_I(\tau_0) \cdots V_I(\tau_k) | i \rangle =: \sum_{i=0} c_n^{(i)}(t)$$

- $U_I(t, 0)$ enthält nur Information über die Zeitentwicklung durch $V(t)$
- Zerlege $\langle n | V_I(\tau_0) \cdots V_I(\tau_k) | i \rangle$ durch Einfügen von $1 = \sum_m |m\rangle \langle m|$, dann $\langle a | V_I(\tau) | b \rangle = e^{i\omega_{ab}\tau} V_{ab}(\tau)$

4. Andere Größen aus dem Matricelement $c_n(t)$ berechnen

- Übergangswahrscheinlichkeit für den Übergang $i \rightarrow n$: $P_{i \rightarrow n}(t) = |c_n(t)|^2$
 - Aus der Wahrscheinlichkeitsinterpretation $P_{i \rightarrow n}(t) = |\langle n | \psi, t \rangle_I|^2 = |c_n(t)|^2$
- Übergangsrate $\omega_{i \rightarrow n}(t) = \partial_t P_{i \rightarrow n}(t)$
 - Wahrscheinlichkeit für Übergang zum Zeitpunkt t ist Ableitung der Übergangswahrscheinlichkeit

• Häufig verwendete Formeln

- $c_n^{(0)}(t) = \delta_{ni}$
- $c_n^{(1)}(t) = -\frac{i}{\hbar} \int_0^t d\tau V_{ni}(\tau) e^{i\omega_{ni}\tau}$
- $c_n^{(2)}(t) = -\frac{1}{2\hbar^2} \sum_m \int_0^t d\tau_1 \int_0^t d\tau_2 V_{nm}(\tau_1) e^{i\omega_{nm}\tau_1} V_{mi}(\tau_2) e^{i\omega_{mi}\tau_2}$
 - * Interpretation: Alle möglichen Zwischenzustände $|m\rangle$ werden berücksichtigt

4.4.3 Konstante Störung $V(t) = V\Theta(t)$

- $V(t) = V\Theta(t)$ ist allgemeiner Ansatz für konstante Störung
 - Lege Zeitachse fest durch Zeitpunkt $t = 0$, bei dem die Störung eingeschaltet wird
- Erhalte $c_n^{(1)} = -\frac{iV_{ni}}{\hbar} \int_0^t d\tau e^{i\omega_{ni}\tau} = -\frac{2iV_{ni}}{\hbar} e^{i\frac{\omega_{ni}t}{2}} \frac{\sin\left(\frac{\omega_{ni}t}{2}\right)}{\omega_{ni}}$ und $P_{i \rightarrow n} \approx |c_n^{(1)}|^2 = \left(\frac{2|V_{ni}|}{\hbar} \frac{\sin\left(\frac{\omega_{ni}t}{2}\right)}{\omega_{ni}}\right)^2$
 - $P_{i \rightarrow n} \propto \left(\frac{\sin x}{x}\right)^2 = \text{sinc}^2 x$ hat ein Maximum bei $x = 0$ und Minima in festen Abständen
 - Ergebnis für beliebige Endzustände n , muss daher später (Fermis Goldene Regel) über n summieren
- Interpretation des Ergebnisses
 - Breite des Maximums proportional zu $\frac{1}{t}$ - Für $t \rightarrow \infty$ gilt Energieerhaltung und nur Übergänge mit $\omega_{ni} = \frac{E_n - E_i}{\hbar} = 0$ sind möglich
 - Energie-Zeit-Unschärfe $\Delta E \Delta t \approx \hbar$
 1. Halber Bereich zwischen Nullstellen von $P_{i \rightarrow n}$ entspricht dem maximal beitragenden Zeitintervall T mit $\pi \approx \frac{\omega_{ni}T}{2}$
 2. $T = \Delta t \approx \frac{2\pi}{\omega_{ni}} = \frac{2\pi\hbar}{E_n - E_i} = \frac{\hbar}{E_n - E_i} = \frac{\hbar}{\Delta E}$ und Umstellen liefert $\Delta E \Delta t \approx \hbar$
 - * Prinzipiell andere Art von Unschärferelation wie $\Delta x \Delta p = \frac{\hbar}{2}$, da sie nicht aus Kommutatoren sondern aus Eigenschaften von Übergängen folgt
 - * Interpretation: Für endliche Übergangszeit $t < \infty$ kann man Energieerhaltung verletzen
 - Grenzfall $\omega_{ni} \rightarrow 0$ / Energieerhaltung: $P_{i \rightarrow n} = \frac{|V_{ni}|^2 t^2}{\hbar^2}$
 - * $\lim_{x \rightarrow 0} \frac{\sin(\alpha x)}{x} = \alpha$
 - * Für Übergänge mit Energieerhaltung ist die Übergangswahrscheinlichkeit quadratisch in der Zeit
 - Grenzfall $t \rightarrow \infty$ / Lange Übergangszeit: $P_{i \rightarrow n} = \frac{2\pi}{\hbar} |V_{ni}|^2 t \delta(E_n - E_i)$
 - * Verwende $\lim_{\alpha \rightarrow \infty} \frac{1}{\pi} \frac{\sin(\alpha x)^2}{\alpha x^2} = \delta(x)$
 - * Für lange Übergangszeit ist die Übergangswahrscheinlichkeit linear in t und nur Übergänge mit Energieerhaltung sind erlaubt
 - * Übergangsrate $\omega_{i \rightarrow n} = \frac{2\pi}{\hbar} |V_{ni}|^2 \delta(E_n - E_i)$ ist konstant

4.4.4 Harmonische Störung $V(t) = V e^{i\omega t} + V^\dagger e^{-i\omega t}$

- $V(t) = V e^{i\omega t} + V^\dagger e^{-i\omega t}$ ist allgemeiner Ansatz für harmonische Störung wegen $V(t)^\dagger = V(t)$
 - Es gilt $|V_{ni}|^2 = |V_{ni}^\dagger|^2$ wegen $\langle i | V^\dagger | n \rangle = \langle n | V | i \rangle^*$
- Gleiche Rechnung wie für konstante Störung mit zwei Termen (V, V^\dagger) und einer Ersetzung $\omega_{ni} \rightarrow \omega_{ni} + \omega$ im ersten Term und $\omega_{ni} \rightarrow \omega_{ni} - \omega$ im zweiten Term
 - Wegen Energieerhaltung trägt für $t \rightarrow \infty$ jeweils nur einer der Terme bei und man erhält dieselbe Rechnung mit $\omega_{ni} \rightarrow \omega_{ni} \pm \omega$
- Interpretation des Ergebnisses für $t \rightarrow \infty$
 - Term $V e^{i\omega t}$ liefert stimulierte Emission und trägt nur bei für $\omega_{ni} + \omega = 0 / E_n - E_i = -\hbar\omega < 0$
 - Term $V^\dagger e^{-i\omega t}$ liefert Absorption und trägt nur bei für $\omega_{ni} - \omega = 0 / E_n - E_i = \hbar\omega > 0$

4.4.5 Allgemeine Störung

- Allgemeine Störung als Linearkombination harmonischer Störungen: $V(t) = \int_0^\infty d\omega (V(\omega) e^{i\omega t} + V^\dagger(\omega) e^{-i\omega t})$
 - Fouriertransformation mit $\omega > 0$ und Entwicklungskoeffizienten $V(\omega), V^\dagger(\omega)$ für Hermitezität
- Verwende wieder dieselbe Rechnung wie für die konstante Störung, wobei nun für $t \rightarrow \infty$ alle möglichen Terme mit Energieerhaltung $E_n - E_i = \hbar\omega$ beitragen
 - Für jede Frequenz ω ist Absorption und stimulierte Emission möglich

4.4.6 Fermis Goldene Regel $\omega_{i \rightarrow n} = \frac{2\pi}{\hbar} \left(\sum_{n: E_n = E_i} |V_{in}|^2 \right) \rho(E_i)$

- Bedeutung: Übergangsrate von Übergängen $i \rightarrow n$ mit beliebigem n unter der Bedingung $E_n = E_i$
 - Formal: Verallgemeinerung von $\lim_{t \rightarrow \infty} \omega_{i \rightarrow n}$ für $V(t) = V\Theta(t)$ auf kontinuierliches Energiespektrum
 - Verallgemeinerung auf höhere Ordnungen Störungstheorie einfach
 - Gilt auch für allgemeine Potentiale $V(t)$, da diese in periodische Störungen mit beliebigem ω zerlegt werden können, dann ersetzt man $E_n = E_i$ durch $E_n = E_i + \hbar\omega$ für erlaubte ω
 - Physikalische Version: Erlaube kleine Abweichungen von Energieerhaltung ($E_n = E_i$ wird zu $E_n \approx E_i$), da reale Übergangsdauern $t < \infty$ sind
- 1. Führe Zustandsdichte $\rho(E)$ ein mit der Zustandsanzahl $\rho(E)dE$ im Energieintervall $[E, E + dE]$
 - Parametrisiere damit beliebige Verteilung der Energieeigenwerte
 - Oben betrachteter Fall mit diskreten Energieeigenwerten ist ein Spezialfall: $\rho(E) = \delta(E - E_i) + \sum_{n=1}^N \delta(E - E_n)$
 - Verallgemeinere $\sum_n = \int dE_n \rho(E_n)$ für Summation über alle Energieeigenwerte
- 2. Betrachte nun gesamte Übergangswahrscheinlichkeit $P_{\text{ges}} = \sum_n |c_n^{(1)}|^2 = \int dE_n \rho(E_n) |c_n^{(1)}|^2$
 $= \frac{2\pi}{\hbar} t \int dE_n \rho(E_n) |V_{ni}|^2 \delta(E_n - E_i) = \frac{2\pi}{\hbar} t \left(\sum_{n: E_n = E_i} |V_{ni}|^2 \right) \rho(E_i)$
- 3. Übergangsrate $\omega_{i \rightarrow n} = \partial_t P_{i \rightarrow n} = \frac{2\pi}{\hbar} \left(\sum_{n: E_n = E_i} |V_{in}|^2 \right) \rho(E_i)$

4.4.7 Energieerhaltung in Quantenmechanik

- Interpretation 1: Energieerhaltung verletzt(naiv)
 - Begründung: Energie-Zeit-Unschärferelation $\Delta E \Delta t \approx \hbar$ erlaubt Verletzung der Energieerhaltung
 - Anschaulich: Für endliche Übergangsdauern Δt kann sich das System Energie aus dem Vakuum borgen
 - * Für $\Delta t \rightarrow \infty$ gilt Energieerhaltung \Rightarrow System muss die geborgte Energie irgendwann wieder an das Vakuum zurückgeben
 - Übergangswahrscheinlichkeit umso geringer, je mehr Energie aus dem Vakuum geborgt wird
 - An der klassischen Physik ändert sich nichts, da dort $\Delta E \approx \frac{\hbar}{\Delta t}$ im Vergleich zu typischen Energien extrem klein ist
- Interpretation 2: Virtuelle Zustände(sinnvoll)
 - Anschaulich: Alternative Interpretation zur Verletzung der Energieerhaltung durch $\Delta E \Delta t \approx \hbar$
 - Während eines Übergangs gibt es eine Wahrscheinlichkeit dafür, dass das System sich in Zwischenzuständen(virtuelle Zustände) befindet
 - * Virtuelle Zustände bekommt man, weil man die Störungstheorie-Entwicklung nach einer endlichen Ordnung abbricht und daher einen Teil des Systems abschneidet
 - Die exakten Eigenzustände des Systems sind stabile Zustände und erfüllen daher Energieerhaltung etc
 - * Virtuelle Zustände sind instabil, weil sie die Schrödingergleichung nicht exakt lösen \Rightarrow Zerfallen nach einer Zeit $\Delta t \ll \infty \Rightarrow$ Für $\Delta t \rightarrow \infty$ befindet sich das System in einem ungestörten Zustand und Energieerhaltung ist erfüllt
- Selbes Problem in QFT mit Teilchen statt Zuständen
 - In QFT kann man zeitabhängige Störungstheorie graphisch darstellen mit Feynmandiagrammen \Rightarrow Konzept virtuelle Teilchen wird viel klarer als in QM
 - * Virtuelle Teilchen erfüllen nicht $p^2 = m^2$, ihre Effekte sind mit der Abweichung von $p^2 = m^2$ unterdrückt bzw mit $\frac{1}{p^2 - m^2}$
 - Verwende Perspektive 2, da Lorentz-Symmetrie(und damit Energieerhaltung) das Grundkonzept von Feldtheorie ist

4.5 Extreme Zeitabhängigkeiten

4.5.1 Sudden approximation

- Anschaulich: Hamilton-Operator hat sehr starke Zeitabhängigkeit \Rightarrow System hat nicht genug Zeit für einen Übergang und bleibt im selben Zustand
- Formale Behandlung
 1. Zerlege Zeitparameter $t = sT$ mit dimensionslosem Parameter s (beschreibt die Zeitabhängigkeit) und eine Konstante $T \ll 1$ (typische Zeitabhängigkeit)
 - Definiere typische Frequenz $\omega = \frac{1}{T}$ der Zeitabhängigkeit
 2. Setze $t = sT$ in Schrödingergleichung für Zeitentwicklungsoperator ein $i\hbar\partial_t U(t, t_0) = i\hbar\omega\partial_s U(t, t_0) = HU(t, t_0) \Rightarrow i\partial_s U(t, t_0) = \frac{H}{\hbar\omega} U(t, t_0) \ll 1 \Rightarrow U(t, t_0) = 1$
 - Aus $\partial_s U(t, t_0) = 0$ folgt $U(t, t_0) = c$ und wegen $U^\dagger U = 1$ folgt daraus $U(t, t_0) = 1$
 - Adiabatische Näherung: $\frac{H}{\hbar\omega} \ll 1 \Rightarrow$ Kein Übergang möglich $U(t, t_0) = 1$

4.6 Anwendungen

4.6.1 H-Atom im statischen B-Feld

- Hamiltonian $H = H_0 + H_{LS} + H_{Para} + H_{Dia} = \frac{\vec{P}^2}{2m} - \frac{\hbar c \alpha}{R} + \frac{1}{2m^2 c^2} \frac{1}{r} \frac{\partial V}{\partial r} \vec{L} \vec{S} - \frac{e}{2m} B(2S_3 + L_3) + \frac{e^2}{2m} \vec{A}^2$
 - Pauli-Gleichung für homogenes Magnetfeld $\vec{B} = \frac{1}{2}(\vec{R} \times \vec{r})$ mit zusätzlichem Term für LS-Kopplung
 - * Für $\vec{L}, \vec{S} \neq 0$ ist H_{Dia} (Diamagnetismus) vernachlässigbar
 - * Wähle Koordinatensystem mit $\vec{B} = B\hat{e}_3$
 - Ziel: Korrektur durch H_{Para} (Paramagnetismus) berechnen
- Idee: Wähle je nach Fall H_B oder H_{LS} als kleine Störung und nehme den anderen Term, um die Basis für Drehimpulse zu wählen ($\vec{J}^2, J_3, \vec{L}^2, \vec{S}^2$ oder $\vec{L}^2, L_3, \vec{S}^2, S_3$)
 - In der ungestörten Rechnung zum H-Atom werden nur \vec{L}^2, L_3 betrachtet, da \vec{S} in der Schrödingergleichung nicht auftaucht \Rightarrow Muss nicht über \vec{S} -Eigenzustände nachdenken
 - Großer Term ist jeweils diagonal und man kann die Korrekturen direkt berechnen
 - Kleine Störung ist jeweils nicht diagonal und man muss Clebsch-Gordon-Koeffizienten verwenden
- Zeeman-Effekt $H_{Para} \ll H_{LS}$
 - Wähle Basis $\vec{J}^2, J_3, \vec{L}^2, \vec{S}^2$, damit $H_{LS} \propto \vec{L} \vec{S} = \frac{1}{2}(\vec{J}^2 - \vec{L}^2 - \vec{S}^2)$ diagonal ist
 - Korrektur durch LS-Kopplung $E_{LS} = -\frac{\hbar c \alpha}{2m^2 c^2} \langle nlsjm | \frac{1}{r^2} \vec{L} \vec{S} | jlsjm \rangle = -\frac{\hbar^3 c \alpha}{4m^2 c^2} (j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)) \langle nlsjm | \frac{1}{r^3} | nlsjm \rangle$
 - Korrektur durch Magnetfeld $E_{Para} = -\frac{eB}{2m} \langle nlsjm | 2S_3 + L_3 | nlsjm \rangle = -\frac{eB}{2m} \hbar m \left(1 + \frac{j(j+1) + s(s+1) - l(l+1)}{2j(j+1)} \right)$
 - * Verwende Vektormodell (Folge aus Wigner-Eckardt-Theorem) oder Clebsch-Gordon-Koeffizienten für Berechnung des Matrixelements
 - Normaler Zeeman-Effekt $s = 0 \Rightarrow j = l, m = m_l$
 - * In E_{Para} verschwindet der hintere Term in der Klammer und das Ergebnis wird einfach
 - * Wegen $\vec{S} = 0$ muss man nicht über richtige Observablen-Basis nachdenken und man kann das Ergebnis ablesen: $E_{Para} = -\frac{eB}{2m} \langle nlm_l | L_3 | nlm_l \rangle = -\frac{eB\hbar}{2m} m_l$
- Paschen-Back-Effekt $H_{Para} \gg H_{LS}$
 - Wähle Basis $\vec{L}^2, L_3, \vec{S}^2, S_3$, damit $H_B \propto 2S_3 + L_3$ diagonal ist
 - Korrektur durch Magnetfeld $E_{Para} = -\frac{eB\hbar}{2m} (2m_s + m_l)$
 - Korrektur durch LS-Kopplung $E_{LS} = -\frac{\hbar^2}{2m^2 c^2} m_l m_s \langle nls m_l m_s | \frac{1}{r^3} | nls m_l m_s \rangle$

* Verwende $\langle n l s m_l m_s | \vec{L} \vec{S} | n l s m_l m_s \rangle = \langle n l s m_l m_s | L_3 S_3 + \frac{1}{2}(L_+ S_- + L_- S_+) | n l s m_l m_s \rangle$
 $= \langle n l s m_l m_s | L_3 S_3 | n l s m_l m_s \rangle = \hbar^2 m_l m_s$

* Alternative: Basiswechsel mit Clebsch-Gordon-Koeffizienten

- Zustand mit $l = s = 0$: H_{para} und H_{LS} verschwinden und H_{Dia} wird wichtig

4.6.2 H-Atom im statischen E-Feld

- Hamiltonian $H = H_0 + H_E = \frac{\vec{P}^2}{2m} - \frac{\hbar c \alpha}{R} + e E z$
 - Pauli-Gleichung für $\vec{A} = 0$ und lineares Potential $\phi = \vec{E} \vec{x} = E z$
 - Wähle Koordinatensystem mit $\vec{E} = E \hat{e}_3$
- Linearer Stark-Effekt für $n > 1$
 - $|n l m_l\rangle$ ist $n^2 > 1$ -fach entartet und die Störung muss im entarteten Unterraum diagonalisiert werden
 \Rightarrow Erste Energiekorrektur $E_n^{(1)} \propto E$ verschwindet nicht
 - Entartung wird durch Diagonalisierung des entarteten Unterraums teilweise aufgehoben
- Quadratischer Stark-Effekt für $n = 1$
 - Erste Energiekorrektur(nicht-entartet) verschwindet $E_1^{(1)} = e E \langle 100 | Z | 100 \rangle = 0$
 - Zur zweiten Energiekorrektur $E_1^{(2)} \propto E^2$ tragen alle Zustände bei, daher ist diese endlich

4.6.3 Übergänge des H-Atoms im freien Strahlungsfeld

- Problem: Zeitabhängige Störungstheorie mit $H = \frac{(\vec{P} - e \vec{A})^2}{2m} + V(\vec{R}) + H_{\text{rad}}$
 $= \frac{\vec{P}^2}{2m} + V(\vec{R}) + H_{\text{rad}} - \frac{e}{mc} \vec{A} \vec{P} + \frac{e^2}{2mc^2} \vec{A}^2 = H_0 + V$
 - Ungestörtes Problem: H-Atom und kinetische Energie des Strahlungsfelds
 $H_0 = \frac{\vec{P}^2}{2m} + V(\vec{R}) + \sum_{\vec{k}, r} \hbar \omega_{\vec{k}} \left(a_{\vec{k}, r}^\dagger a_{\vec{k}, r} + \frac{1}{2} \right)$
 - * Kinetische Energie des Strahlungsfelds $H_{\text{rad}} = \frac{1}{2} \int d^3 x (\epsilon_0 \vec{E}^2 + \frac{1}{\mu_0} \vec{B}^2) = \sum_{\vec{k}, r} \hbar \omega_{\vec{k}} \left(a_{\vec{k}, r}^\dagger a_{\vec{k}, r} + \frac{1}{2} \right)$
 - Verwende Lösung für \vec{A} des freien Strahlungsfelds mit Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren
 - * $\vec{A} = \sum_{\vec{k}, r} \sqrt{\frac{\hbar}{2 \epsilon_0 \omega_{\vec{k}} V}} \hat{e}_r \left(a_{\vec{k}, r} e^{i(\vec{k} \vec{x} - \omega_{\vec{k}} t)} + a_{\vec{k}, r}^* e^{-i(\vec{k} \vec{x} - \omega_{\vec{k}} t)} \right)$ ist zeitabhängig
 - Typen von Übergängen
 - 1-Photon-Übergänge durch $V_1 = -\frac{e}{mc} \vec{A} \vec{P}$
 - 2-Photon- oder o-Photon-Übergänge durch $V_2 = \frac{e^2}{2mc^2} \vec{A}^2$
 - Begründung: Zähle Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren in $\vec{A} \propto a_{r, \vec{k}} + a_{r, \vec{k}}^\dagger$
 - Vorgehen zur Berechnung von Übergangsraten für Strahlungsübergänge
 - Problem: Übergang von $|i\rangle$ zu $|f\rangle$ mit Emission von o-2 Photonen, induziert durch $V = V_1 + V_2 = -\frac{e}{mc} \vec{A} \vec{P} + \frac{e^2}{2mc^2} \vec{A}^2$
 - * Für 1-Photon-Übergänge trägt ein Term aus V_1 bei, für o- und 2-Photon-Übergänge trägt ein Term aus V_2 bei
 - * Es trägt immer nur ein Term bei, dieser hat eine Zeitabhängigkeit $e^{i n \omega_{\vec{k}} t}$ für n -Photon-Übergänge
1. Fermis goldene Regel liefert Übergangsraten $\omega_{fi} = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle f | V_0 | i \rangle|^2 \delta(E_f - E_i)$
 - V_0 ist das normale V ohne Zeitabhängigkeit(e-Funktion)
 - $E_f = E_2 + n \hbar \omega_{\vec{k}}$, $E_i = E_1$ mit den Zuständen $|1\rangle, |2\rangle$ des H-Atoms vor und nach dem Übergang
 2. Berechne $\langle f | V_0 | i \rangle \propto \langle f | \vec{P} \hat{e}_{r, \vec{k}} e^{\pm i n \vec{k} \vec{r}} | i \rangle$

- Multipolentwicklung: Entwickle $e^{\pm i n \vec{k} \vec{r}}$ in $\vec{k} \vec{r} \ll 1$
 - * $\vec{k} \vec{r} \approx |\vec{k}| a_B = \frac{\omega_{\vec{k}}}{c} \frac{\hbar}{m c \alpha} = \frac{\Delta E}{\hbar c} \frac{\hbar}{m c \alpha} \approx \frac{m c^2 \alpha^2}{\hbar c} \frac{\hbar}{m c \alpha} = \alpha \ll 1$ mit $E_n = -\frac{m c^2}{2} \frac{\alpha^2}{n^2}$, $a_B = \frac{\hbar}{m c \alpha}$
- Finde Matricelemente von elektrischen oder magnetischen Multipolmomenten

3. Finde winkelabhängige Übergangsrate, totale Übergangsrate, Lebensdauer des zerfallenden Zustands

• Interpretation von Multipolübergängen

- Erhalte die Übergänge $E(n+1), M_n$ aus dem n ten Term in der Entwicklung von $e^{i \vec{k} \vec{r}}$
 - * Für $n = 0$ erhält man nur den elektrischen Multipolübergang $E1$
- Auswahlregel für n ten Multipolübergang: Änderung des Drehimpulses l um $\pm n$
 - * Interpretation: n -ter Multipolübergang ist n -Photonen-Prozess (Photonen haben $s = 1$)
- Höhere Multipolübergänge sind mit einem Faktor α für jede zusätzliche Ordnung unterdrückt
 - * Können wichtig werden, wenn Übergänge niedrigerer Ordnung durch Auswahlregeln verboten sind
- Unterschied elektrische und magnetische Multipolübergänge: Für gleiches n haben die Übergänge entgegengesetzte Parität
- Multipolmomente bekannt von Entwicklung der Potentiale von Elektro- und Magnetostatik in Kugelflächenfunktionen
 - * Multipolmomente sind sphärische Tensoroperatoren

Kapitel 5

Streutheorie

5.1 Grundlagen

5.1.1 Streuung

- Idee: Untersuche unbekanntes Objekt(Target) durch Beschuss mit bekanntem Objekt(projektil)
 - Konkret: Untersuche räumliche Verteilung und Eigenschaften der emittierten Projektil
- Beschreibung von Streuung: $H = \frac{\vec{P}^2}{2m} + V(X)$ - Freies Teilchen im Potential
 - Aufgabe: Löse $E\psi = H\psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\partial_i^2\psi + V\psi$
 - Potential V wirkt räumlich begrenzt, asymptotische Zustände(Anfangs- und Endzustand) sind frei
- Zeitabhängige Streuung
 - Löse Zeitentwicklung mit zeitabhängiger Störungstheorie, benutze die Transfermatrix T_{fi} statt V_{fi} , um mit den asymptotischen Zuständen arbeiten zu können
- Gebundene Zustände und Streuzustände
 - Gebundene Zustände sind räumlich lokalisiert, daher gilt asymptotisch $\psi(x) \propto e^{-\lambda|x|}$ und $E_\lambda = -\frac{\hbar^2\lambda^2}{2m} < 0$ mit diskretem λ (diskret wegen Randbedingungen)
 - Streuzustände sind nicht räumlich lokalisiert, daher gilt asymptotisch $\psi(x) \propto e^{\pm ikx}$ und $E_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} > 0$ mit kontinuierlichem k

5.1.2 Größen zur Beschreibung von Streuung

- Anschauliche Größen
 - Streuparameter b : Kürzester Abstand des Projektils vom Target, falls es nicht abgelenkt werden würde
 - Streuwinkel θ : Asymptotischer Winkel zwischen den Bahnen mit und ohne Ablenkung
 - Stromdichte \vec{j} : Anzahl Teilchen $dN = \vec{j}\vec{F}dt$, die pro Zeit dt eine Fläche $d\vec{F}$ durchqueren
 - * Wähle Koordinatensystem $j_{in} \propto \hat{e}_z$, j_{in} ist konstant
 - * Für einen homogenen Strom gilt $dF = r^2 d\Omega$ und $j_{out} \propto \frac{1}{r^2}$
- Abstrakte Beschreibung: Wirkungsquerschnitt
 - $d\sigma = b db d\phi$: Fläche $b db d\phi$ des Strahls vor der Streuung
 - $d\Omega$: Raumwinkel $d\Omega = \sin\theta d\phi d\theta$, auf dem Teilchen nach der Streuung verteilt sind
 - Differentieller Wirkungsquerschnitt $\frac{d\sigma}{d\Omega} := \left|\frac{d\sigma}{d\Omega}\right| = \frac{b}{\sin\theta} \left|\frac{db}{d\theta}\right|$
 - * Interpretation: Auslaufender Strom pro einlaufender Strom in Abhängigkeit vom Raumwinkel
 - Totaler Wirkungsquerschnitt $\sigma = \int d\Omega \frac{d\sigma}{d\Omega}$
 - * Interpretation: Effektive Fläche, an der gestreut wird

5.2 Stationäre, elastische Streuung

5.2.1 Grundlagen

- Betrachte elastische Streuung $E_{\text{in}} = E_{\text{out}} = E$ eines freien Teilchens an zeitunabhängigem Potential $V(\vec{X})$: $H = \frac{\vec{P}^2}{2m} + V(R)$
 - Übliche Vereinfachung: Radialsymmetrisches Potential $V(R)$
 - * Erweiterung auf beliebiges Potential ist Kugelkoordinaten-Spielerei (zusätzliche Abhängigkeit von φ)
 - Fordere $\lim_{r \rightarrow \infty} rV(r) = 0$, damit für $\psi = e^{ikz} + f(\theta) \frac{e^{ikr}}{r}$ asymptotisch Energiekorrekturen durch das Potential vernachlässigbar sind
 1. Setze Ansatz für ψ in $H\psi = \frac{\vec{P}^2}{2m} + V(R) = E\psi$ ein
 2. Für $r \rightarrow \infty$ konkurrieren $\frac{\vec{P}^2}{2m} f(\theta) \frac{e^{ikr}}{r} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} f(\theta) \frac{e^{ikr}}{r}$ und $V(R) e^{ikz}$
 3. Multipliziere mit r durch \Rightarrow Für $\lim_{r \rightarrow \infty} rV(r) = 0$ trägt der Potential-Term nicht bei
- Vorüberlegungen zur Wellenfunktion
 - Rechnung hier nur für eine Mode k , kann alles auf Wellenpakete erweitern
 - * Wellenpaket: Kann jede Funktion als Superposition ebener Wellen schreiben (Fouriertransformation)
 - Einlaufende Welle $\psi_{\text{in}}(\vec{x}, t) = e^{i\vec{k}\vec{x}} = e^{ikz}$
 - * Wähle Koordinatensystem mit $\vec{k} = k\hat{e}_z$
 - Auslaufendes Wellenpaket $\psi = \psi_{\text{in}} + \psi_{\text{out}} = e^{ikz} + f(\theta) \frac{e^{ikr}}{r}$
 - * Geschickter Ansatz, der Symmetrien des Problems berücksichtigt (auch andere Ansätze möglich)
 - * Erster Term für Wellen, die nicht wechselwirken
 - * Zweiter Term für gestreute Wellen, die für ein radialsymmetrisches Problem in Kugelwellen $\frac{e^{ikr}}{r}$ mit der Streuamplitude $f(\theta)$ entwickelt werden können
 - $u(r) = \frac{e^{ikr}}{r}$ löst asymptotische DGL für r ($\Delta + k^2$) $\frac{e^{ikr}}{r} = 0$ mit $\Delta = \frac{1}{r} \partial_r^2 r$ in Kugelkoordinaten
- Relation $\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\theta)|^2$
 - Benutze $\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{r^2 j_{\text{out}}}{j_{\text{in}}}$
 - Herleitung: Wellenfunktionen $\psi_{\text{in}}, \psi_{\text{out}}$ einsetzen in $j_i = \frac{\hbar}{2mi} (\psi^* \partial_i \psi - \text{c.c.}) \Rightarrow \vec{j}_{\text{in}} = \vec{v}, \vec{j}_{\text{out}} = v \frac{|f(\theta)|^2}{r^2} \hat{e}_r$

5.2.2 Optisches Theorem $\sigma = \frac{4\pi}{k} \text{Im} f(0)$

- Interpretation: Imaginärteil der Amplitude für Vorwärtsstreuung $\text{Im} f(0)$ hängt mit dem totalen Wirkungsquerschnitt σ zusammen
 - $\theta = 0$ ist ausgezeichnet, da man ohne Streuung nur für $\theta = 0$ einen auslaufenden Strahl bekommt

1. Stromdichte des auslaufenden Teilchens

- Benutze $j_i = \frac{\hbar}{2mi} (\psi^* \partial_i \psi - \text{c.c.})$ und $\psi = e^{ikz} + f(\theta) \frac{e^{ikr}}{r}$
 - c.c./h.c.: Abkürzung für komplex/hermitesch Konjugiertes des vorherigen Terms
- Zerlege $\vec{j} = \vec{j}_{\text{in}} + \vec{j}_{\text{out}} + \vec{j}_{\text{WW}}$ und berechne die Ausdrücke für $r \rightarrow \infty$
 - $\vec{j}_{\text{in}} = \vec{v}, \vec{j}_{\text{out}} = v \frac{|f(\theta)|^2}{r^2} \hat{e}_r$ wie oben
 - $\vec{j}_{\text{WW}} = \frac{\hbar}{2mi} (\psi_{\text{in}}^* \vec{\partial} \psi_{\text{out}} + \psi_{\text{out}}^* \vec{\partial} \psi_{\text{in}} - \text{c.c.}) = -\frac{2\hbar}{mr^2} \text{Im} f(0) \delta(1 - \cos \theta) \hat{e}_r$ aus
 - $\psi_{\text{in}} = e^{ikz} = \frac{1}{ikr} (\delta(1 - \cos \theta) e^{ikr} - \delta(1 + \cos \theta) e^{-ikr}), \psi_{\text{out}} = f(\theta) \frac{e^{ikr}}{r}$ in Kugelkoordinaten
 - * Verwendete Form von ψ_{in} ist Zwischenergebnis der Partialwellenentwicklung für $r \rightarrow \infty$
 - Rechne im Grenzfall $r \rightarrow \infty$: $\vec{\partial} \psi_{\text{out}}$ fällt asymptotisch zu schnell ab und trägt daher nicht bei

2. Teilchenzahl ist erhalten/Kein effektiver Strom durch den Rand des Raums $\Rightarrow \int_{\partial V} d\vec{S} \vec{j} = 0$

- Kein effektiver Strom fließt aus der betrachteten Fläche, die Gesamtteilchenzahl ist erhalten
- $\int d\vec{S} \vec{j}_{\text{in}} = 0$: Kein effektiver Strom durch die ebene Welle
- $\int d\vec{S} \vec{j}_{\text{out}} = v \int d\Omega |f(\theta)|^2 = v \int d\Omega \frac{d\sigma}{d\Omega} = v\sigma$
- $\int d\vec{S} \vec{j}_{\text{WW}} = -\frac{2\hbar}{m} \text{Im} f(0) \int d\vec{S} \hat{e}_r \delta(1 - \cos \theta) = -\frac{4\pi\hbar}{m} \text{Im} f(0)$
- Finde $0 = \int_{\partial V} d\vec{S} \vec{j} = v\sigma - \frac{4\pi\hbar}{m} \text{Im} f(0) \Rightarrow \sigma = \frac{4\pi}{k} \text{Im} f(0)$ mit $p = \hbar k = mv$

5.2.3 Partialwellenentwicklung

- Idee: Verwende Radialsymmetrie $[H, \vec{L}^2] = [H, L_3] = 0$ und entwickle $\psi(\vec{x}) = e^{ikz} + f(\theta) \frac{e^{ikr}}{r}$ in Kugelflächenfunktionen
 - Betrachte sphärisch symmetrisches Problem $\Rightarrow f(\theta)$ und $P_l(\cos \theta)$ statt $f(\theta, \phi)$ und $Y_{lm}(\theta, \phi)$
- 1. Separationsansatz $\psi_{lm}(\vec{x}) = \frac{u_l(r)}{r} Y_{lm}(\theta)$ für $E\psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \partial_i^2 \psi + V(r)\psi$
 - Vernachlässige zweiten Term in $\vec{P}^2 = P_r^2 + \frac{1}{r^2} \vec{L}^2$ und $V(r)$ und erhalte $(\partial_r^2 + k^2) u_l = 0$, $k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$ mit Lösung $u_l(r) = A_l \sin(kr - \frac{l\pi}{2} + \delta_l)$
 - Streuphase δ_l enthält Information über das Potential
 - * Erwarte nach der Streuung immer noch Kugelwellen, deren Phasen sind aber um $2\delta_l$ verschoben gegenüber Kugelwellen, die nicht mit dem Potential interagiert haben
 - Definiere δ_l so, dass aus $V = 0$ auch $\delta_l = 0$ folgt
 - Präziser(aber unnötig): Vernachlässige nur $V(r)$ und erhalte $(\partial_r^2 + k^2 - \frac{2ml(l+1)}{r^2}) u_l = 0$, $k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$ mit sphärischen Besselfunktionen $j_l(r)$ als Lösung
 - Näherung der sphärischen Besselfunktionen für große Abstände: $j_l(r) \approx A_l \sin(kr - \beta_l) \Rightarrow$ Wieder im ersten Fall
- 2. Vergleiche Separationsansatz mit asymptotischer Lösung $\psi = e^{ikz} + f(\theta) \frac{e^{ikr}}{r} = \sum_l^\infty C_l P_l(\cos \theta) \frac{\sin(kr - \frac{l\pi}{2} + \delta_l)}{kr}$
 - Identität: $e^{ikz} = \frac{1}{2ikr} \sum_l^\infty (2l+1) P_l(\cos \theta) (e^{ikr} - (-1)^l e^{-ikr})$
 - Interpretation: Kann ebene Wellen in Kugelwellen entwickeln(wie im Huygenschen Prinzip)
 - Vergleich der Ergebnisse liefert $C_l = (2l+1) i^l e^{i\delta_l}$, $f(\theta) = \frac{1}{2ik} \sum_{l=0}^\infty (2l+1) (e^{2i\delta_l} - 1) P_l(\cos \theta)$
- 3. Ergebnisse aufsammeln
 - Streuamplitude $f(\theta) = \frac{1}{k} \sum_{l=0}^\infty (2l+1) e^{i\delta_l} \sin \delta_l P_l(\cos \theta)$
 - Wirkungsquerschnitt $\sigma = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^\infty (2l+1) \sin^2 \delta_l$
 - Verwende $\sigma = \int d\Omega \frac{d\sigma}{d\Omega} = \int d\Omega |f(\theta)|^2$ und Orthogonalitätsrelation der P_l
 - Alternative Herleitung des optischen Theorems: $\text{Im} f(0) = \frac{1}{k} \sum_{l=0}^\infty (2l+1) \sin^2 \delta_l = \frac{k}{4\pi} \sigma$
- Interpretation der Ergebnisse
 - Kann Wellenfunktion in Beiträge mit festem Drehimpuls l (Partialwellen) zerlegen wegen $[H, \vec{L}_i] = 0$
 - Asymptotisch steckt die Information über das Potential komplett in der Streuphase δ_l
- Anwendung: Für Streuung bei niedrigen Energien bricht $\sum_{l=0}^\infty$ nach endlich vielen Termen ab und man kann δ_l aus dem Potential bestimmen

5.3 Störungstheorie mit der Lippmann-Schwinger-Gleichung

5.3.1 Übersicht

- Grundidee: Rechne mit asymptotischen Zustände mit selber Energie
 - Kann Lippmann-Schwinger-Kernel-Notation auch für zeitunabhängige Störungstheorie verwenden
- Störungstheorie für stationäre Streuprozesse
 - Arbeite mit eingehenden-, auslaufenden- und Zwischenzuständen
 - Eingehende und auslaufende Zustände haben dieselbe Energie(asymptotische Energieerhaltung)

5.3.2 Formale Rechnung mit der Lippmann-Schwinger-Gleichung

- Gestörte und ungestörte Eigenzustände von $H = H_0 + V$
 - Ungestörte Eigenzustände $H_0|\phi\rangle = E|\phi\rangle$
 - Gestörte Eigenzustände $H|\psi\rangle = E|\psi\rangle$
 - Lange vor und nach dem Prozess(asymptotisch) gilt $|\phi\rangle = |\psi\rangle$
 - * Deshalb muss auch $E = E_\phi = E_\psi$ gelten
 - Asymptotisch gilt Energieerhaltung, daher ist $E = E_i = E_f$
- Lippmann-Schwinger-Gleichung $|\psi\rangle = |\phi\rangle + \frac{1}{E-H_0}V|\psi\rangle$
 - Herleitung: Multipliziere mit $E - H_0$
 - * $(E - H_0)|\psi\rangle = (H - H_0)|\psi\rangle$
 - * $(E - H_0)|\phi\rangle + V|\psi\rangle = V|\psi\rangle$
 - Lippmann-Schwinger-Kernel $\Pi_{LS} = \frac{1}{E-H_0}$ ist Greensfunktion(Inverse eines Differentialoperators)
- Zusammenhang gestörte/ungestörte Zustände $|\psi\rangle = \frac{1}{1 - \frac{1}{E-H_0}V}|\phi\rangle = \left(1 + \frac{1}{E-H_0}V + \frac{1}{E-H_0}V\frac{1}{E-H_0}V + \dots\right)|\phi\rangle$
 - Herleitung: Lippmann-Schwinger-Gleichung nach $|\psi\rangle$ auflösen
- Transfermatrix T mit $V|\psi\rangle = T|\phi\rangle$
 - $|\psi\rangle = \left(1 + \frac{1}{E-H_0}T\right)|\phi\rangle$ durch Einsetzen
 - $T = V + V\frac{1}{E-H_0}T = V + V\Pi_{LS}V + V\Pi_{LS}V\Pi_{LS}V + \dots$
 - * Multipliziere letzte Gleichung mit V
 - * Kann Summe nach endlich vielen Termen abbrechen, falls V klein ist
- Ungestörte Übergangsraten mit der Transfermatrix $T_{fi} = V_{fi} + \sum_j V_{fj}\Pi_{LS}(j)V_{ji} + \dots$
 - Ungestörte Zwischenzustände $|\phi_k\rangle$ mit $H_0|\phi_k\rangle = E_k|\phi_k\rangle$
 - Abkürzungen $T_{fi} = \langle\phi_f|T|\phi_i\rangle$, $V_{jk} = \langle\phi_j|V|\phi_k\rangle$, $\Pi_{LS}(j) = \frac{1}{E-E_j}$
- Übergang zur Streuamplitude $f(\theta)$
 1. Berechne Wellenfunktion $\langle\vec{x}|\psi\rangle \approx \langle\vec{x}|i\rangle + \int d^3y \langle\vec{x}|\frac{1}{E-H_0\pm i\epsilon}|\vec{y}\rangle\langle\vec{y}|V|\psi\rangle \doteq \langle\vec{x}|i\rangle - \frac{2m}{\hbar^2} \int d^3y \frac{e^{\pm i k|\vec{x}-\vec{y}|}}{4\pi|\vec{x}-\vec{y}|} V(\vec{y})\langle\vec{y}|\psi\rangle$
 - Schwierigkeit: Greensfunktion $\langle\vec{x}|\frac{1}{E-H_0\pm i\epsilon}|\vec{y}\rangle$ berechnen
 2. Finde $f(\theta)$ (Ortsraum) bzw. $f(\vec{k}, \vec{q})$ (Impulsraum) für $r \rightarrow \infty$: $f(\vec{k}, \vec{q}) = -\frac{mL^3}{2\pi\hbar^2} \langle\vec{q}|V|\psi\rangle$
 - Muss Zustände diskretisieren(Box mit Länge L), am Ende $L \rightarrow \infty$: $\langle\vec{x}|\vec{k}\rangle = \frac{e^{i\vec{k}\vec{x}}}{\sqrt{L^3}}$
 - Einlaufender Zustand sei ebene Welle $|i\rangle = |\vec{k}\rangle$
 - Für $r \rightarrow \infty$ gilt $e^{\pm i k|\vec{x}-\vec{y}|} \approx e^{\pm i k r} e^{\mp i \vec{q}\vec{y}}$ mit $\vec{q} = k\hat{e}_r$
 - Finde für $t \rightarrow \infty$ $\langle\vec{x}|\psi\rangle = \langle\vec{x}|\vec{k}\rangle - \frac{1}{4\pi} \frac{2m}{\hbar^2} \frac{e^{i k r}}{r} \int d^3y e^{-i \vec{q}\vec{y}} V(\vec{y})\langle\vec{y}|\psi\rangle =: \frac{1}{\sqrt{L^3}} \left(e^{i \vec{k}\vec{y}} + \frac{e^{i k r}}{r} f(\vec{k}, \vec{q})\right)$
 - Schreibe Integral für $f(\vec{k}, \vec{q})$ wieder in ein Matricelement um $f(\vec{k}, \vec{q}) = -\frac{mL^3}{2\pi\hbar^2} \int d^3y \frac{e^{-i \vec{q}\vec{y}}}{\sqrt{L^3}} V(\vec{y})\langle\vec{y}|\psi\rangle = -\frac{mL^3}{2\pi\hbar^2} \langle\vec{q}|V|\psi\rangle$
 - Kann mit $V|\psi\rangle = T|\phi\rangle$ und der Bornschen Reihe für T die Matricelemente $\langle\vec{q}|V|\psi\rangle$ berechnen
- Interpretation: $\Pi_{LS}(j)$ ist Propagator eines Zwischenzustands $|\phi_j\rangle$, der mit einer Potential-Wechselwirkung erzeugt und vernichtet wird(steht zwischen zwei V s)
 - Entwicklung von T_{fi} heißt Bornsche Reihe
 - * n -ter Term in der Entwicklung heißt n -te Bornsche Näherung
 - Höhere Terme in der Bornschen Reihe bedeuten Mehrfachstreuung(mehrere V kommen vor)
 - * Kann Elemente der Bornschen Reihe als Diagramme vorstellen mit Austausch von Zwischenzuständen(gleiches Prinzip wie Feynman-Diagramme)

5.3.3 Altmodische Störungstheorie für QFT

- Propagator Π_{LS} in der Impulsdarstellung

1. Greensfunktion $G_{\pm}(\vec{q}, \vec{k}) = \frac{\hbar^2}{2m} \langle \vec{q} | \frac{1}{E - H_0 \pm i\epsilon} | \vec{k} \rangle$

- Warum sie wichtig ist: $E\psi(x) = H\psi(x) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(x)\right)\psi(x)$ bzw. $(\Delta + k^2)\psi(x) = \alpha V(x)\psi(x)$ kann mit der Greensfunktion gelöst werden
- Faktor $\frac{\hbar^2}{2m}$, damit $G(\vec{x}, \vec{y})$ dimensionslos ist
- Term $\pm i\epsilon$ mit $\epsilon \ll 1$, damit der Propagator nicht singulär wird

2. $G_{\pm}(\vec{q}, \vec{k}) = \frac{1}{\frac{2mE}{\hbar^2} - k^2 \pm i\epsilon} \delta_{kq}$

- Reskaliere $\frac{2m}{\hbar^2} \epsilon \rightarrow \epsilon$

3. Wechsel in Ortsbasis $G_{\pm}(\vec{x}, \vec{y}) = -\frac{1}{4\pi} \frac{e^{\pm i \frac{2mE}{\hbar^2} |\vec{x} - \vec{y}|}}{|\vec{x} - \vec{y}|}$

- Ergebnis: Propagator ist eine Greensfunktion
- Interpretation: \pm für retardierten und avancierten Propagator (Teilchen bewegt sich vorwärts oder rückwärts in der Zeit)

- Vergleich mit Feynman-Störungstheorie

- Altmodische Störungstheorie: Zwischenzustände erfüllen Energie-Impuls-Relation, Energieerhaltung ist verletzt
- Feynman-Störungstheorie: Zwischenzustände erfüllen Energie-Impuls-Relation nicht, Energieerhaltung gilt
- Feynman-Propagator ist kovariante Kombination von avanciertem und retardiertem Propagator
- Feynman-Störungstheorie ist aus Symmetriegründen besser: Komplette Kovarianz, 4-Impuls-Erhaltung = Noetherladung der Poincaré-Transformation

Kapitel 6

Vielteilchensysteme

6.1 Vielteilchenzustände

6.1.1 Notation

- Hilbertraum der Vielteilchenzustände $|k_1\rangle \otimes |k_2\rangle \cdots \otimes |k_n\rangle$ ist direktes Produkt der Hilberträume der Einteilchenzustände
- Abgekürzte Notationen
 - Gute Notation $|k_1 k_2 \dots k_n\rangle := |k_1\rangle \otimes |k_2\rangle \cdots \otimes |k_n\rangle$
 - Andere Notation $|k_1\rangle |k_2\rangle \dots |k_n\rangle := |k_1\rangle \otimes |k_2\rangle \cdots \otimes |k_n\rangle$
 - * Nachteil: Vielteilchenzustände können leicht mit sowas wie Produkten von Einteilchenzuständen verwechselt werden
 - * Vorteil: Kann Quantenzahlen verschiedener Teilchen besser auseinanderhalten

6.1.2 Identische Teilchen

- Idee: Bisher Einteilchenzustände untersucht, jetzt werden diese zu Vielteilchenzuständen kombiniert
- 2 Teilchen heißen identisch : \iff Die Teilchen haben selbe Masse, Spin, Ladungen und es gilt $[H, P_{12}] = 0$ für den Vielteilchen-Hamilton-Operator H
 - Formaler: Masse, Spin und Ladung sind fundamentalere Quantenzahlen als die Quantenmechanik-Quantenzahlen(zB n, l, m_l etc)
 - * Spin und Ladung sind Quantenzahlen der Lorentzsymmetrie
 - * Ladungen sind Quantenzahlen von Eichsymmetrien(zB elektrische Ladung, Farbladung)
 - Achtung: Fordere nicht, dass die Quantenmechanik-Quantenzahlen gleich sind
 - Betrachte identische Teilchen, da ich hier neuen kommutierenden Operator P_{12} in $[H, P_{12}] = 0$ und damit eine neue Quantenzahl habe
 - * Besonderheit: Vertauschungssymmetrie ist ein Mehrteilcheneffekt, bisher wurden nur Einteilcheneffekte betrachtet
 - * Anschaulich: Die Begriffe Boson/Fermion machen nur Sinn, wenn man ein zweites Boson/Fermion hat, mit dem man vertauschen kann
 - Begriffe für die Symmetrie $[H, P_{12}] = 0$: Austauschsymmetrie, Austauschentartung
 - * Begründung: In einem System von 2 identischen Teilchen sind die Zustände $|k_1 k_2\rangle$ und $|k_2 k_1\rangle$ nicht unterscheidbar(alle Eigenwerte sind identisch)
- 2 Teilchen heißen ununterscheidbar : \iff Die beiden Teilchen sind identisch und befinden sich im selben Zustand
 - Kann in klassischer Mechanik Teilchen die ganze Zeit beobachten und so unterscheiden
 - Ortsmessung in der QM hat Einfluss auf den Zustand \Rightarrow Teilchen kann nicht die ganze Zeit klassisch beobachtet werden(ohne den Zustand des Teilchens zu ändern)
- QFT beschreibt dieses Verhalten besser mit Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren für Teilchen

6.1.3 Permutations-Eigenwerte

- Symmetrisierungspostulat: In der Natur treten nur die eindimensionalen Darstellungen der Permutationsgruppe auf
 - Eindimensionale Darstellungen: Zustand bekommt einen Vorfaktor ± 1 unter Transformation
 - * Vorfaktor ± 1 ist der Permutations-Eigenwert des Zustands
 - * Höherdimensionale Darstellungen: Permutations-Eigenzustand ist ein Vektor, Permutation ist eine Matrix
 - Könnte hier noch viel über Theorie der Permutationsgruppe sagen
 - * Für das Verständnis genügt es, zu passieren, wenn man 2 Teilchen vertauscht
- Bosonen und Fermionen
 - Begriffe Boson/Fermion sind andere Worte für die Permutations-Eigenwerte $+1/-1$
 - Anschaulich: Verwende Begriffe statt Quantenzahlen zur Charakterisierung des Zustands
 - * Möglicher Grund: Vielteilchen-Quantenzahl wäre komisch zu notieren, da die Vielteilchen-Quantenzahl eine Liste von Einteilchen-Quantenzahlen sind
 - * Möglicher Grund: Wegen Spin-Statistik-Theorem ist Boson-/Fermion-Eigenschaft durch den Spin festgelegt und muss nicht explizit in den Zustand geschrieben werden
- Spin-Statistik-Theorem: Teilchen mit ganzzahligem/halbzahligen Spin sind Bosonen/Fermionen
 - Hochgradig nichttrivial: Verbindung zwischen Statistik(Vielteilchen-Eigenschaft) und Drehimpulsen aus Lorentzsymmetrie
 - Herleitung in QFT mit dem Ausschlussprinzip: Wenn Teilchen mit ganzzahligem/halbzahligen Spin Fermionen/Bosonen wären, geht die Physik kaputt(kein stabiler Grundzustand, keine Lorentz-Symmetrie, keine Kausalität, bekomme falsche Bewegungsgleichungen...)

6.2 Anwendungen

6.2.1 Statistik für 2-Teilchen-Zustände

- Betrachte 2 identische Einteilchenzustände mit je 2 möglichen Eigenzuständen $|0\rangle, |1\rangle$
- Erlaubte Zustände
 - Klassische Maxwell-Boltzmann-Statistik: Erlaubte Zustände $|00\rangle, |11\rangle, |10\rangle, |01\rangle$
 - Fermi-Dirac-Statistik: Erlaubter Zustand $\frac{1}{\sqrt{2}}(|10\rangle - |01\rangle)$
 - Bose-Einstein-Statistik: Erlaubte Zustände $|00\rangle, |11\rangle, \frac{1}{\sqrt{2}}(|10\rangle + |01\rangle)$
 - Nicht erlaubte Zustände verschwinden wegen dem Symmetrisierungs-Postulat

6.2.2 2-Elektronen-System

- Betrachte Fall $[H, \vec{S}] = 0$ (Gemeinsame Eigenkets von \vec{S} und H)
- Zustände in Ortsbasis $\langle \vec{x}_1, \vec{x}_2 | \alpha, s_1 m_{s_1}, s_2 m_{s_2} \rangle = \phi(\vec{x}_1, \vec{x}_2) \chi(m_{s_1}, m_{s_2})$
 - Wellenfunktion faktorisiert in ortsabhängigen und spinabhängigen Anteil, da der Gesamt-Hilbertraum das direkte Produkt von Orts- und Spin-Raum ist
- Kann Spin-Funktion χ in Triplett($S = 1$)- und Singulett($S = 0$)-Teil zerlegen (Drehimpulsaddition)
 - Notation $\chi(m_{s_1}, m_{s_2}) = \chi_{m_{s_1}, m_{s_2}}$ und $m_{s_i} = \pm$
 - Da Elektronen Fermionen sind, ist mit der Vertauschungsquantenzahl des Spin-Teils die Vertauschungsquantenzahl des Orts-Teils festgelegt
 - Singulett $\frac{1}{\sqrt{2}}(\chi_{+-} - \chi_{-+})$ antisymmetrisch \Rightarrow Orts-Teil symmetrisch

- Triplet $\chi_{++}, \chi_{--}, \frac{1}{\sqrt{2}}(\chi_{+-} + \chi_{-+})$ symmetrisch \Rightarrow Orts-Teil antisymmetrisch
- Wichtig: Der Orts-Grundzustand ist immer symmetrisch \Rightarrow Triplet-Zustände haben höhere Energie als Singulett-Zustände, da sie nicht im Orts-Grundzustand sein können

6.2.3 Quantisierung des freien Strahlungsfelds

- Ziel: Operatoren für \vec{A}, ϕ und darauf aufbauend \vec{E}, \vec{B}, E und deren Eigenwerte und Eigenzustände finden
 - Freies Strahlungsfeld: $\rho = 0, \vec{j} = 0$
1. Wähle periodische Randbedingungen $\vec{A}(\vec{x}, t) = \vec{A}(\vec{x} + L\hat{e}_i, t)$ mit $i \in \{1, 2, 3\}$
 - Grund: Habe sonst divergente Integrale
 - Am Ende Übergang zum normalen Raum mit $L \rightarrow \infty$ möglich
 - In periodischen Randbedingungen quantisierte Wellenvektoren $\vec{k} = \frac{2\pi}{L}\vec{n}$ mit $n_i \in \mathbb{Z}$
 2. Strahlungsfeld in der klassischen Physik
 - Potentiale \vec{A}, ϕ und Felder $\vec{E} = \vec{\nabla} \times \vec{A}, \vec{E} = -\vec{\nabla}\phi - \partial_t \vec{A}$
 - Eichfreiheit $\phi \rightarrow \phi + \partial_t \alpha, \vec{A} \rightarrow \vec{A} - \vec{\nabla}\alpha$ hier festgelegt durch Coulomb-Eichung $\vec{\nabla} \cdot \vec{A} = 0$
 - Bewegungsgleichungen für Potentiale in Coulomb-Eichung: $\phi = 0$ folgt aus $\rho = 0$, Wellengleichung $\square \vec{A} = 0$ für \vec{A}
 - Bewegungsgleichungen für Felder: Freie Maxwellgleichungen
 - Energie des Strahlungsfelds $E = \frac{\epsilon_0}{2} \sum_{\vec{x}} (\vec{E}^2 + c^2 \vec{B}^2)$
 3. Lösung von $\square \vec{A} = 0$ mit Fouriertransformation: $\vec{A}(\vec{x}) = \sum_{\vec{k}} \left(\vec{A}_{\vec{k}} e^{i(\vec{k}\vec{x} - \omega_{\vec{k}}t)} + \vec{A}_{\vec{k}}^* e^{-i(\vec{k}\vec{x} - \omega_{\vec{k}}t)} \right)$
 $= \sum_{\vec{k}, r} \sqrt{\frac{\hbar}{2\epsilon_0 \omega_{\vec{k}} V^2}} \hat{e}_r \left(a_{\vec{k}, r} e^{i(\vec{k}\vec{x} - \omega_{\vec{k}}t)} + a_{\vec{k}, r}^* e^{-i(\vec{k}\vec{x} - \omega_{\vec{k}}t)} \right)$ mit $\omega_{\vec{k}}^2 = c^2 k^2$
 - $\vec{A} \in \mathbb{R}^3 \Rightarrow$ Koeffizienten $\vec{A}_{\vec{k}}, \vec{A}_{\vec{k}}^*$ sind abhängig voneinander
 - Coulomb-Eichung $0 = \vec{\nabla} \cdot \vec{A} = i\vec{k} \cdot \vec{A}_{\vec{k}} = 0 \Rightarrow \vec{A}_{\vec{k}} \perp \vec{k}$ (transversal polarisierte Wellen)
 - Wähle Polarisationsvektoren \hat{e}_r mit $\hat{e}_1 \times \hat{e}_2 = \hat{k} = \frac{\vec{k}}{k} \Rightarrow \vec{A}_{\vec{k}} = \sqrt{\frac{\hbar}{2\epsilon_0 \omega_{\vec{k}} V^2}} \sum_r \hat{e}_r a_{\vec{k}, r}$
 - Wähle Vorfaktor $\sqrt{\frac{\hbar}{2\epsilon_0 \omega_{\vec{k}} V^2}}$, damit die Koeffizienten $a_{\vec{k}, r}$ dimensionslos sind
 4. Energie des Strahlungsfelds $E = \sum_{\vec{k}, r} \frac{1}{2} \left(a_{\vec{k}, r} a_{\vec{k}, r}^* + a_{\vec{k}, r}^* a_{\vec{k}, r} \right)$
 - Folgt aus $\vec{E} = -\partial_t \vec{A}, \vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A}$ und $E = \frac{\epsilon_0}{2} \sum_{\vec{x}} (\vec{E}^2 + c^2 \vec{B}^2)$
 5. Quantisierung des Strahlungsfelds $[a_{\vec{k}, r}, a_{\vec{q}, s}^\dagger] = \delta_{rs} \delta_{\vec{k}\vec{q}}$
 - Motivation: $E \propto \sum_{\vec{x}} (\vec{E}^2 + c^2 \vec{B}^2)$ hat dieselbe Struktur wie der harmonische Oszillator, allerdings mit beliebig vielen Moden $\vec{k} \Rightarrow$ Kann $R_{r, \vec{k}}, P_{r, \vec{k}}$ definieren mit $H = \sum_{r, \vec{k}} \left(\frac{1}{2} P_{r, \vec{k}}^2 + \frac{\omega_{\vec{k}}^2}{2} R_{r, \vec{k}}^2 \right)$
 - Ehrliche Argumentation für $[a_{\vec{k}, r}, a_{\vec{q}, s}^\dagger] = \delta_{rs} \delta_{\vec{k}\vec{q}}$ mit Definition von $a_{\vec{k}, r}$ in Abhängigkeit von \vec{A} mit Boson-Kommutatorrelationen fehlt hier (kommt in QFT)
 - Finde $E = \sum_{\vec{k}, r} \hbar \omega_{\vec{k}} \left(a_{\vec{k}, r}^\dagger a_{\vec{k}, r} + \frac{1}{2} \right)$
 - Interpretation: $N_{\vec{k}, r} = a_{\vec{k}, r}^\dagger a_{\vec{k}, r}$ ist Besetzungszahloperator für Photonen
 - Multiphotonenzustände $a_{\vec{k}, r}^\dagger |0\rangle = |\vec{k}, r\rangle, a_{\vec{k}, r} |\vec{k}, r\rangle = 0$
 - Unendliche Grundzustandsenergie $E_0 = \sum_{\vec{k}, r} \frac{\hbar \omega_{\vec{k}}}{2} \Rightarrow$ Betrachte nur Energiedifferenzen
- Anwendung der Ergebnisse

- Hamiltonian des freien Strahlungsfelds $H_{\text{rad}} = \sum_{\vec{k},r} \hbar \omega_{\vec{k}} \left(a_{\vec{k},r}^\dagger a_{\vec{k},r} + \frac{1}{2} \right)$
- Quantisiertes Vektorpotential $\vec{A}(\vec{x}) = \sum_{\vec{k},r} \sqrt{\frac{\hbar}{2\epsilon_0 \omega_{\vec{k}} V^2}} \hat{e}_r \left(a_{\vec{k},r} e^{i(\vec{k}\vec{x} - \omega_{\vec{k}}t)} + a_{\vec{k},r}^* e^{-i(\vec{k}\vec{x} - \omega_{\vec{k}}t)} \right)$
 - * Taucht oft in Störungen auf, zB für optische Übergänge
- Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren mit $[a_{\vec{k},r}, a_{\vec{q},s}^\dagger] = \delta_{\vec{k}\vec{q}} \delta_{rs}$

Kapitel 7

Relativistische Quantenmechanik

7.0.1 Grundlagen

- Ziel: Quantenmechanik auf relativistische Theorie verallgemeinern
 - Relativistische Quantenmechanik: Benutze Quantenmechanik-Formalismus (Zustände und Operatoren) und postuliere relativistische Bewegungsgleichungen und neue Objekte (Spinoren, Lorentz-Vektoren)
 - * Problem 1: Ort \vec{X} und Zeit t in Quantenmechanik nicht gleichbehandelt (Operator vs Parameter), aber nicht in spezieller Relativitätstheorie: $(x^\mu) = (ct, \vec{x})$
 - Lösung: Rechne im Ortsraum, dann sind Ort und Zeit Parameter
 - Eine Grundidee von QM ist, dass man basisunabhängig rechnen kann \Rightarrow Beschränkung auf Ortsraum ist unschön
 - * Problem 2: Quantenmechanik kann Erzeugung und Vernichtung von Zuständen (Interpretation: Teilchen) nicht beschreiben, diese Prozesse sind aber wichtig in der Realität
 - Bsp für Teilchenerzeugung/-vernichtung: Spontane Emission von Photonen, Teilchenphysik
 - Lösung: Betrachte diese Prozesse nicht in relativistischer QM
 - * Fazit: Zwingt Quantenmechanik in Relativitäts-Konzept, obwohl die beiden nicht zusammenpassen \Rightarrow Relativistische Quantenmechanik ist zum Scheitern verurteilt
 - Quantenfeldtheorie: Erweitere klassische Feldtheorie um Quantisierungsbedingungen
 - * Quantenfeldtheorie ist natürliche Verallgemeinerung von Quantenmechanik für hohe Energien
 - * Klassische Feldtheorie: Gleicher Formalismus wie in klassischer Mechanik ($S = \int dt \mathcal{L}$ mit Lagrangefunktion \mathcal{L}) mit Gleichberechtigung von Raum und Zeit ($S = \int d^4x \mathcal{L}$ mit Lagrangedichte \mathcal{L})
 - Stichworte klassische Feldtheorie: Prinzip der kleinsten Wirkung, Lagrangedichte, Euler-Lagrange-Gleichungen, Noethertheorem
 - Standardbeispiel für klassische Feldtheorie: Elektrodynamik
 - * Finde gleiche Ergebnisse wie in relativistischer Quantenmechanik, aber mit besseren Begründungen und natürlicherem Formalismus
- Verschiedene relativistische Bewegungsgleichungen für verschiedene Lorentz-Tensoren
 - Erhalte erlaubte Lorentz-Tensoren aus Darstellungstheorie der Lorentz-Gruppe (Gruppentheorie)
 - Bsp: Skalar (Klein-Gordon-Gleichung), Dirac-Spinor (Dirac-Gleichung), Weyl-Spinor (Weyl-Gleichungen), 4-Vektor (Proca-Gleichung)
- Zugänge zu relativistischen Bewegungsgleichungen
 - Zugang über Quantenmechanik: Versuche, die Schrödingergleichung zu einer relativistischen Gleichung zu verallgemeinern
 - * Klein-Gordon-Gleichung und Dirac-Gleichung historisch entdeckt durch Probieren (suche relativistische Verallgemeinerungen der Schrödinger-Gleichung)
 - Zugang über Quantenfeldtheorie: Lagrangian für freies Teilchen aufstellen, Euler-Lagrange-Gleichungen liefern Bewegungsgleichung
 - * Lagrangian ist eindeutig festgelegt durch Symmetrien des Teilchens

7.1 Relativistische Bewegungsgleichungen

7.1.1 Klein-Gordon-Gleichung $(\partial_\mu \partial^\mu + (\frac{mc}{\hbar})^2) \psi = 0$

- Klein-Gordon-Gleichung beschreibt relativistisches $s = 0$ -Teilchen
- Historische Herleitung als Verallgemeinerung der Schrödinger-Gleichung
 - Idee: Schrödinger-Gleichung $i\hbar \partial_t \psi = E\psi$ von nichtrelativistischer Dispersionsrelation $E = \frac{p^2}{2m}$ auf relativistische Dispersionsrelation $E = \sqrt{(mc^2)^2 + (\vec{p}c)^2}$ verallgemeinern
- 1. Versuch 1: $i\hbar \partial_t \psi = \sqrt{(mc^2)^2 + (\vec{p}c)^2} \psi$
 - Entwicklung der Wurzel führt auf Gleichung mit beliebig vielen Impulsoperatoren/Ableitungen
 - * $i\hbar \partial_t \langle \vec{x} | \psi, t \rangle = i\hbar \partial_t \psi = \langle \vec{x} | \sqrt{(mc^2)^2 + (\vec{p}c)^2} | \psi, t \rangle = \sqrt{(mc^2)^2 + (\hbar c \vec{\nabla})^2} \psi$
 - * Problem bei Interpretation des Wurzel-Operators: Bei Entwicklung erhält man beliebig viele $\vec{\nabla}^2$ -Operatoren \Rightarrow Nichtlokalität
 - * Unendlich viele Ableitungen ist ein Zeichen für Nichtlokalität (Bsp: Translationsoperator $T(\vec{l}) = e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{p} \vec{l}}$ enthält unendlich viele Ableitungen)
 - * Problem: Gleichung nicht symmetrisch in Orts- und Zeitableitungen (notwendig für relativistische Theorie)
 - Interpretation: Theorie ohne Antiteilchen (hier nur $E > 0$) funktioniert nicht
- 2. Versuch 2: Gleicher Ansatz wie oben, aber Operator $i\hbar \partial_t$ zweimal anwenden
 - $(i\hbar \partial_t)^2 \psi = -\hbar^2 \partial_t^2 \psi = E^2 \psi = ((mc)^2 + (\vec{p}c)^2) \psi$
 - In Ortsdarstellung ist $\vec{p} = -i\hbar \vec{\nabla}$ und umstellen liefert die Klein-Gordon-Gleichung
 - Interpretation: Mit E^2 gibt es Teilchen und Antiteilchen und die Gleichung macht Sinn
- Relativistische Dispersionsrelation $E^2 = (mc^2)^2 + (c\vec{p})^2$
 - Ansatz $\psi \propto e^{\frac{i}{\hbar} p x}$ löst die Gleichung unter der Bedingung $\frac{p^0}{c} = E = \pm \sqrt{(mc^2)^2 + (\vec{p}c)^2}$
 - Interpretation: Teilchen ($E > 0$) und Antiteilchen ($E < 0$) notwendig für relativistische Theorie
- Wahrscheinlichkeitsstromdichte $j^\mu = \frac{i\hbar}{2m} (\psi^* \partial^\mu \psi - \psi \partial^\mu \psi^*)$ eines $s = 0$ -Teilchens ψ
 - Kontinuitätsgleichung $\partial_\mu j^\mu = 0$ erfüllt durch $j^\mu = \frac{i\hbar}{2m} (\psi^* \partial^\mu \psi - \psi \partial^\mu \psi^*)$
 1. Verwende, dass ψ und $\bar{\psi}$ die KGE erfüllen: $\psi^* \partial_\mu \partial^\mu \psi - \psi \partial_\mu \partial^\mu \psi^* = 0$
 2. Integriere partiell: $0 = \partial_\mu (\psi^* \partial^\mu \psi - \psi \partial^\mu \psi^*) \equiv \alpha \partial_\mu j^\mu$ mit Einheiten-Konstante α
 - Für $\psi \in \mathbb{R}$ ist $\psi^* = \psi$ und $j^\mu = 0 \Rightarrow$ Wahrscheinlichkeitsinterpretation geht schief
 - Interpretation der Wahrscheinlichkeitsdichte $\rho = \frac{j^0}{c} = \frac{i\hbar}{2mc^2} (\psi^* \partial_t \psi - \psi \partial_t \psi^*)$
 - * Betrachte stationären Zustand $\psi_E(x) = e^{-i \frac{Et}{\hbar}} \psi_0(\vec{x})$
 - * Einsetzen liefert $\rho = \frac{i\hbar}{2mc^2} \frac{-2iE}{\hbar} |\psi_E|^2 = \frac{E}{mc^2} |\psi_E|^2$
 - * Interpretation als Wahrscheinlichkeitsdichte geht schief, da mit E auch ρ negativ werden kann
 - * Bessere Interpretation von ρ : $\rho > 0 / \rho < 0$ für mehr Teilchen/mehr Antiteilchen
 - Interpretation des nichtrelativistischen Grenzfalls $j^0 = \frac{i\hbar}{2m} (\psi^* \partial^0 \psi - \psi \partial^0 \psi^*) \stackrel{!}{=} \psi^* \psi$
 - * Ansatz $\psi = e^{-i \frac{mc^2 t}{\hbar}} \psi_0$ mit Wellenfunktion ψ_0 mit nichtrelativistischer Zeitabhängigkeit liefert $j^0 = c \psi_0^* \psi_0$ wie in der nichtrelativistischen Quantenmechanik

7.1.2 Dirac-Gleichung $(i\gamma^\mu \partial_\mu - \frac{mc}{\hbar}) \psi = 0$

- Dirac-Gleichung beschreibt relativistisches $s = \frac{1}{2}$ -Teilchen
- Historische Herleitung
 - Idee: Hamiltonoperator H finden, sodass die Schrödingergleichung $i\hbar \partial_t \psi = H\psi$ mit irgendeinem (nicht unbedingt einkomponentigen) Objekt ψ lorentz-invariant ist

1. Ansatz $H = c\alpha_i p_i + \beta mc^2$

- H muss zeitunabhängig sein, damit die Energie erhalten ist
- Erlaubte Lorentz-invariante Terme in der kompletten Gleichung: $a^\mu \partial_\mu = a^0 \partial_0 + a^i \partial_i$, b (Andere Terme hätten eine andere Zeitabhängigkeit)
- α_i, β müssen hermitesche Matrizen sein, damit H hermitesch ist
- Füge Konstanten so hinzu, dass die Koeffizienten α_i, β dimensionslos sind

2. Lösungen der Dirac-Gleichung müssen Klein-Gordon-Gleichung $(mc^2)^2 + (cp_i)^2 = E^2 = H^2$ erfüllen

- Finde Bedingungen $\{\alpha_i, \alpha_j\} = 2\delta_{ij}, \{\alpha_i, \beta\} = 0, \beta^2 = 1$
- $\text{tr}\alpha_i = \text{tr}\beta = 0$ folgt aus Spielerei mit $\{\alpha_i, \beta\} = 0$

3. Wähle Basis, in der β diagonal ist (Dirac-Basis)

- Begründung: Hermitesche Matrizen sind diagonalisierbar
- $\beta^2 = 1 \Rightarrow \beta$ hat Eigenwerte ± 1
- Dimension von β, α_i muss gerade sein
 - * Wegen $\text{tr}\beta = 0$ muss β gleich viele Eigenvektoren mit Eigenwert $+1$ wie -1 haben

4. Kovariante Formulierung der Dirac-Gleichung

- Definiere bessere Proportionalitätskonstanten (Gamma-Matrizen) $\gamma^0 := \beta, \gamma^i := \beta\alpha_i$
 - * Eigenschaften der Gamma-Matrizen komplett beschrieben durch $\{\gamma^\mu, \gamma^\nu\} = 2g^{\mu\nu} \Rightarrow$ Elegante Darstellung
 - * Vorteil von α_i, β : $\alpha_i^\dagger = \alpha_i, \beta^\dagger = \beta \Rightarrow$ Hermitesche Operatoren bzw reelle Eigenwerte \Rightarrow Sinnvoll, einen Hamilton-Operator durch α_i, β auszudrücken
- Umstellen liefert kovariante Formulierung der Dirac-Gleichung $(i\gamma^\mu \partial_\mu - \frac{mc}{\hbar})\psi = 0$

• Relativistische Dispersionsrelation $m^2 c^4 = p^2 c^2 = E^2 - \vec{p}^2 c^2$

- $p^2 \psi = \vec{p}^2 \psi = (mc)^2 \psi$ liefert $m^2 c^4 = p^2 c^2 = E^2 - (\vec{p}c)^2$
 - * $i p^\mu = \hbar \partial^\mu$ und $i \not{p} = \hbar \not{\partial}$ liefert mit der Dirac-Gleichung $\not{p}\psi = -i\hbar \not{\partial}\psi = mc\psi$ und $\not{\partial}\psi = -i\frac{mc}{\hbar}\psi$

• Wahrscheinlichkeitsstromdichte $j^\mu = c\bar{\psi}\gamma^\mu\psi$

- Kontinuitätsgleichung $\partial_\mu j^\mu = 0$ erfüllt durch $j^\mu = c\bar{\psi}\gamma^\mu\psi$
 - * Verwende Produktregel und Dirac-Gleichungen $(i\vec{\not{\partial}} - \frac{mc}{\hbar})\psi = 0, \bar{\psi}(i\overleftarrow{\not{\partial}} + \frac{mc}{\hbar}) = 0$
- Wahrscheinlichkeitsdichte j^0 ist positiv-semidefinit, daher funktioniert die Wahrscheinlichkeitsinterpretation für Fermionen
 - * $\rho = c\bar{\psi}\gamma^0\psi = c\psi^\dagger\gamma^0\gamma^0\psi = c\psi^\dagger\psi = c|\psi|^2 \geq 0$

7.1.3 Lösungen der Bewegungsgleichungen

• Idee: Bewegungsgleichungen der freien Felder sind linear \Rightarrow Kann sie mit Fouriertransformation lösen

- Funktioniert gleich für alle Bewegungsgleichungen, nur die Vektorräume bzw Basisvektoren $\tilde{\psi}_\pm(p)$ sind unterschiedlich

1. Wechsel in Fourierraum

- Unterscheide Teilchen und Antiteilchen: $\psi(x) = \int d^3p \left(e^{-\frac{i}{\hbar}px} \tilde{\psi}_+(p) + e^{\frac{i}{\hbar}px} \tilde{\psi}_-(p) \right) |_{E_{\vec{p}}=p^0 c}$
 - Integriere nur über $p > 0$ (Alternative: Integriere über alle p und schreibe nur einen Term $e^{-\frac{i}{\hbar}px} \tilde{\psi}(p)$)
 - Trick: Schreibe px im Exponent und werte dafür am Ende $(mc)^2 = p^2$ aus
 - Entwicklungskoeffizienten $\tilde{\psi}_\pm(p)$ sind Fouriertransformierte von $\psi(x)$
- Bewegungsgleichung im Fourierraum schreiben (verwende $\partial_\mu e^{ipx} = ip_\mu e^{ipx}$)

2. Wechsel ins Ruhesystem $p = (mc, 0, 0, 0)$

- Wegen Lorentz-Invarianz immer möglich

- Fouriertransformierte Bewegungsgleichungen im Ruhesystem sind lineares Gleichungssystem
 - Für $s = 0$ -Teilchen hat das Gleichungssystem sogar nur eine Gleichung
- Alternative: Bewegungsgleichung direkt für beliebiges p lösen

3. Lorentz-Transformation in beliebiges Bezugssystem

7.2 Elektromagnetische Wechselwirkung

7.2.1 Minimale Substitution $p^\mu \rightarrow p^\mu - qA^\mu$

- Berücksichtige Einfluss der elektromagnetischen Wechselwirkung durch minimale Substitution
 - Begründung kommt in QFT: Ableitungen von Feldern sollen sich unter Eichtransformationen so transformieren wie Felder
 - Ersetze normale Ableitung $p^\mu = -i\hbar\partial^\mu$ durch kovariante Ableitung $p^\mu - qA^\mu = -i\hbar\left(\partial^\mu - \frac{iq}{\hbar}A^\mu\right)$ mit Eichfeld A^μ
 - Anschaulich: Berücksichtige EM-WW eines Teilchens mit Ladung q , indem ich $p^\mu \rightarrow p^\mu - qA^\mu$ ersetze
- Hamiltonian für freien Dirac-Spinor im EM-Feld $H = c\alpha_i\pi_i + \beta mc^2 + q\phi$ aus $\left(i\gamma^\mu(\partial_\mu - \frac{iq}{\hbar}A_\mu) - \frac{mc}{\hbar}\right)\psi = 0$
 - Wichtiger Hamiltonian, da er Elektronen im EM-Feld beschreibt(interessant)
 - Definiere kovarianten Impuls $\pi_i = p_i - qA_i$ und Potential $A^0 = \frac{1}{c}\phi$
 - Achtung: A^μ hat normale VZ bei oberem Index, $\partial_\mu = \frac{\partial}{\partial x^\mu}$ hat normale VZ bei unterem Index

7.2.2 Pauli-Gleichung $H = \frac{(\vec{p}-q\vec{A})^2}{2m} - \frac{q}{m}\vec{S}\vec{B} + q\phi$

- Pauli-Gleichung ist nichtrelativistischer Grenzfall des allgemeinen Hamiltonian $H = c\alpha_i\pi_i + \beta mc^2 + q\phi$
 - Nichtrelativistisch: Parametrisiere Energie $E = mc^2 + E_S$ und entwickle in $\frac{E_S}{mc^2} \ll 1$
- 1. Ansatz $\psi(\vec{x}, t) = e^{-\frac{i}{\hbar}mc^2t} \begin{pmatrix} \varphi(\vec{x}, t) \\ \chi(\vec{x}, t) \end{pmatrix}$ mit $\begin{pmatrix} \varphi(\vec{x}, t) \\ \chi(\vec{x}, t) \end{pmatrix} = e^{-\frac{iE_S t}{\hbar}} \begin{pmatrix} \varphi_0(\vec{x}) \\ \chi_0(\vec{x}) \end{pmatrix}$ liefert gekoppelte DGLs in φ, χ
 - Anschaulich: Behandle Zeitabhängigkeiten durch mc^2 und E_S getrennt
 - $2mc^2\chi + i\hbar\partial_t\chi - q\phi\chi = c\sigma_i\pi_i\varphi$ bzw. $2mc^2\chi_0 + E_S\chi_0 - q\phi\chi_0 = c\sigma_i\pi_i\varphi_0$
 - $i\hbar\partial_t\varphi - q\phi\varphi = c\sigma_i\pi_i\chi$ bzw. $E_S\varphi_0 - q\phi\varphi_0 = c\sigma_i\pi_i\chi_0$
- 2. Gleichungssystem lösen mit nichtrelativistischer Näherung $E_S - q\phi \ll 2mc^2$
 - $\chi \ll \varphi \Rightarrow$ Kann χ im nichtrelativistischen Grenzfall entwickeln und nur mit φ weiterrechnen
 - * Konkret: $\chi = \frac{c}{2mc^2 + E_S - q\phi}\sigma_i\pi_i\varphi \ll \frac{c}{E_S - q\phi}\sigma_i\pi_i\chi = \varphi$
 - * Im ultrarelativistischen Grenzfall sind χ und φ ähnlich groß
 - Erste Gleichung liefert $\chi = \frac{c}{2mc^2 + E_S - q\phi}\sigma_i\pi_i\varphi = \frac{1}{2mc} \frac{1}{1 + \frac{E_S - q\phi}{2mc^2}}\sigma_i\pi_i\varphi \approx \frac{1}{2mc}\sigma_i\pi_i\varphi$
 - Einsetzen in zweite Gleichung $i\hbar\partial_t\varphi = c\sigma_i\pi_i\chi + q\phi\varphi = \left(\frac{1}{2m}(\sigma_i\pi_i)^2 + q\phi\right)\varphi = \left(\frac{(\vec{p}-q\vec{A})^2}{2m} - \frac{q}{m}\vec{S}\vec{B} + q\phi\right)\varphi$
 - * Benutze $(\sigma_i\pi_i)^2 = \pi_i^2 - 2qS_iB_i$ mit $S_i = \frac{\hbar}{2}\sigma_i$, $B_i = \epsilon_{ijk}\partial_j A_k$
- Pauli-Gleichung für homogenes B-Feld $H = \frac{\vec{p}^2}{2m} - \frac{q}{2m}\vec{B} \cdot (2\vec{S} + \vec{L}) + \frac{q^2}{2m}\vec{A}^2$
 - Homogenes B-Feld bedeutet $\phi = 0$, $\vec{A} = \frac{1}{2}\vec{B} \times \vec{r}$
 - * $\vec{A} = \frac{1}{2}\vec{B} \times \vec{r}$ erfüllt $\vec{B} = \text{rot}\vec{A}$ und ist damit Parametrisierung für konstantes \vec{B}
 - $(\vec{p} - q\vec{A})^2 = \vec{p}^2 - \frac{q}{2}(\vec{p}(\vec{B} \times \vec{r}) + (\vec{B} \times \vec{r})\vec{p}) + q^2\vec{A}^2 = \vec{p}^2 - q\vec{B}\vec{L} + q^2\vec{A}^2$ mit $\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$
 - * Verwende hier Coulomb-Eichung $\vec{\nabla}\vec{A} = 0 \Rightarrow [\vec{p}, \vec{A}] = \vec{p}\vec{A} = 0$
- Pauli-Gleichung für homogenes E-Feld $H = \frac{\vec{p}^2}{2m} + q\vec{E}\vec{X}$

– Homogenes E-Feld bedeutet $\vec{A} = 0, \phi = \vec{E} \vec{X}$

• Relativistische Korrekturen zur Pauli-Gleichung

– Idee: Entwickle χ bis zur nächsthöheren Ordnung und mache dann dieselbe Rechnung

$$\chi = \frac{c}{2mc^2 + E_S - q\phi} \sigma_i \pi_i \varphi = \frac{1}{2mc} \frac{1}{1 + \frac{E_S - q\phi}{2mc^2}} \sigma_i \pi_i \varphi \approx \frac{1}{2mc} \left(1 - \frac{E_S - q\phi}{2mc^2} \right) \sigma_i \pi_i \varphi$$

– Erhalte 3 Korrekturterme für $\vec{A} = 0, \phi = \phi(r)$

* Korrektur zur relativistischen E - \vec{p} -Beziehung $H_{\text{rel}} = -\frac{1}{8m} \left(\frac{\vec{p}^2}{2m} \right)^2$

* LS-Kopplung $H_{\text{LS}} = \frac{q}{2m^2 c^2} \frac{1}{r} \frac{\partial \phi}{\partial r} \vec{L} \vec{S}$

* Darwin-Term $H_{\text{D}} = \frac{q\hbar^2}{4m^2 c^2} \left(\left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial r^2} + \frac{\partial \phi}{\partial r} \frac{\partial}{\partial r} \right) \right) \stackrel{F.W.T.}{=} \frac{q\hbar^2}{8m^2 c^2} \frac{\partial^2 \phi}{\partial r^2}$

• Erste Form nicht hermitesch, Foldy-Wouthysen-Transformation von φ liefert zweite Form

– Zeitunabhängige Störungstheorie für Wasserstoff-Problem $q\phi = \frac{\hbar c \alpha}{R}$ liefert Energiekorrektur (Feinstruktur)

$$E_{nj}^{(1)} = E_n^{(0)} \frac{\alpha^2}{n} \left(\frac{3}{4n} - \frac{1}{j + \frac{1}{2}} \right) \text{ mit } E_n^{(0)} = -\frac{mc^2}{2} \frac{\alpha^2}{n^2}$$

Kapitel 8

Dinge, über die man in der Vorlesung eher nicht redet

8.0.1 Interpretationen der Quantenmechanik

- Verschiedene Möglichkeiten, die Postulate der Quantenmechanik zu interpretieren
 - Habe Modell, das richtige Ergebnisse aufgrund von unintuitiven Postulaten liefert \Rightarrow Wie interpretiere man die Postulate?
 - Interpretationen sind Geschmackssache, da man sie nicht verifizieren oder falsifizieren kann
- Typische Überlegungen in Interpretationen der Quantenmechanik
 - Ist die Welt deterministisch oder gibt es fundamentalen Zufall?
 - * Fundamentaler Zufall: Bei einer Messung gibt es Zufall
 - * Verborgene Variablen: Uns erscheint die Welt zufällig, da wir die verborgenen Variablen nicht kennen
 - Was passiert im Moment der Messung?
 - * Spontane Zustandsreduktion: System springt in einen zufälligen Eigenzustand der Observable
 - * Viele-Welten-Theorie: System teilt sich auf in verschiedene Subsysteme, wobei jedes Subsystem in einen anderen Eigenzustand der Observable springt

8.0.2 Formulierungen der Quantenmechanik

- Unterschiedliche Formulierungen beschreiben dieselben Probleme und kommen zur selben Lösung, verwenden dabei aber unterschiedliche Annahmen und Basisgrößen
- Formulierungen der klassischen Mechanik
 - Newton: Kräfte im Alltagsraum \vec{x} mit Newtonschen Axiomen
 - Lagrange: Lagrangedichte(Energie) im Konfigurationsraum($\vec{q}, \partial_t \vec{q}$) mit Euler-Lagrange-BGL
 - Hamilton: Hamiltondichte(Energie) im Phasenraum(\vec{q}, \vec{p}) mit Hamilton-BGL
 - Zustände: Wahrscheinlichkeiten und Operatoren im Hilbertraum mit einer BGL analog zur Liouville-Gleichung(Koopman-von-Neumann-Mechanik)
- Formulierungen der Quantenmechanik
 - Newton: Böhmsche Mechanik mit Quanten-Potential und Quanten-Kraft
 - Lagrange: Pfadintegralformalismus mit Wirkung im Konfigurationsraum
 - * Erhalte klassisches Prinzip der kleinsten Wirkung im Grenzfall $\frac{S}{\hbar} \rightarrow 0$
 - Hamilton: Phasenraum-Quantenmechanik mit von-Neumann-Gleichung, Poissonklammer und Moyal-Klammer
 - * Erhalte klassische Liouville-Gleichung im Grenzfall $\hbar \rightarrow 0$
 - Zustände: Kanonische Quantenmechanik(Wahrscheinlichkeiten und Operatoren) im Hilbertraum
 - * Erhalte klassische Koopman-von-Neumann-Mechanik im Grenzfall $\hbar \rightarrow 0$

8.1 Pfadintegralformalismus mit Pfadintegral $\langle q_f, t_f | q_i, t_i \rangle = \int_{q(t_i)=q_i}^{q(t_f)=q_f} \mathcal{D}q e^{\frac{i}{\hbar} S[q]}$

8.1.1 Anschaulich

- Propagator $\langle q_f, t_f | q_i, t_i \rangle$ als Basisgröße
 - Propagator enthält Entwicklung des Systems in Zeit- und Raumrichtung \Rightarrow Alles, was man will
- Interpretation des Pfadintegrals $\int_{q(t_i)=q_i}^{q(t_f)=q_f} \mathcal{D}q e^{\frac{i}{\hbar} S[q]}$
 - $\int_{q(t_i)=q_i}^{q(t_f)=q_f} \mathcal{D}q$: Integration über alle Pfade (q, t) durch die Raumzeit, für die t streng monoton zunimmt
 - * Alle Pfade $q(t)$ mit den Randbedingungen $q(t_i) = q_i$ und $q(t_f) = q_f$ werden berücksichtigt
 - * Beiträge verschiedener Pfade können miteinander interferieren (verstärken oder abschwächen)
 - $e^{\frac{i}{\hbar} S[q]}$: Jeder Pfad trägt durch eine Phase zum Pfadintegral bei
 - * Phase wird durch die Wirkung $S[q]$ des Pfades $q(t)$ bestimmt
- Klassischer Grenzfall $\frac{S[q]}{\hbar} \gg 1 \Rightarrow$ Nur ein beitragender Pfad $q(t)$ mit $\delta S[q] = 0$
 - $S[q]$ ist ein Funktional \Rightarrow Brauche Funktionalanalysis für Ableitungen von $S[q]$
 - Technisch: Method of steepest descent für Funktionalanalysis
 - * Method of steepest descent in Analysis: $\int dx e^{i\phi(x)} \approx \int dx e^{i\phi(x_0) + \frac{i}{2}\phi''(x_0)(x-x_0)^2} = e^{i\phi(x_0)} \sqrt{\frac{2\pi i \hbar}{\phi''(x_0)}}$
mit Minimum von ϕ bei $x_0 \Rightarrow$ Nur Beitrag von x_0 trägt im Integral bei
 - Interpretation: Bei großen Phasen $\frac{S[q]}{\hbar}$ werden Interferenzeffekte zunehmend unterdrückt und nur Pfade $q(t)$, in denen $S[q]$ stationär ist (=Extrema von S) tragen bei
 - * Erwarte in der Realität, dass es keine Maxima der Wirkung gibt \Rightarrow Das Extrema ist ein Minimum
- Quantenmechanik als Verallgemeinerung der klassischen Mechanik
 - In der Quantenmechanik werden zusätzlich klassisch verbotene Pfade ($\delta S[q] \neq 0$) berücksichtigt
 - Durch die neuen Pfade kann es Interferenzen zwischen verschiedenen Pfaden geben (multipliziere Phasen) und neue Effekte sind möglich
- Anwendung
 - Problem: Pfadintegral kann nur in wenigen Fällen (freies Teilchen) explizit berechnet werden
 - Vorteil: Pfadintegral ist konzeptionell nützlich

8.1.2 Ableitung aus dem kanonischen Formalismus für ein Teilchen im Potential $H = \frac{P^2}{2m} + V(X)$

1. $K = \langle q_f, t_f | q_i, t_i \rangle = \langle q_f | U(t_f, t_i) | q_i \rangle$
 - $U(t_f, t_i) = e^{-\frac{i}{\hbar} H(t_f - t_i)}$ für zeitunabhängiges H
2. Propagator zerlegen $K = \langle q_f, t_f | q_i, t_i \rangle = \int dq_1 \dots \int dq_n \langle q_f, t_f | q_n, t_f \rangle \dots \langle q_1, t_1 | q_i, t_i \rangle$
 - Definiere infinitesimale Zeitintervalle $\tau = \frac{t_f - t_i}{n+1} = t_{j+1} - t_j$ und rechne im Grenzfall $n \rightarrow \infty$
3. Für $n \gg 1$ gilt $\langle q_{j+1}, t_{j+1} | q_j, t_j \rangle \approx \int \frac{dp_j}{2\pi\hbar} e^{\frac{i}{\hbar} p_j (x_{j+1} - x_j)} \left(1 - \frac{i\tau}{\hbar} H(p, q_j)\right) \approx \int \frac{dp_j}{2\pi\hbar} e^{\frac{i}{\hbar} p_j (x_{j+1} - x_j)} e^{-\frac{i}{\hbar} \tau H(p_j, q_j)}$
4. Einfügen liefert $K = \int \prod_{j=1}^n dq_j \frac{dp_j}{2\pi\hbar} \exp\left(\frac{i\tau}{\hbar} \left(p_j \frac{q_{j+1} - q_j}{\tau} - H(q_j, p_j)\right)\right)$
5. Impuls-Integrale berechnen (Gauss-Integrale): $K = \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar \tau}}^{n+1} \int \prod_{j=1}^n \exp\left(\frac{i\tau}{\hbar} \left(\frac{m}{2} \left(\frac{q_{j+1} - q_j}{\tau}\right)^2 - V(q_j)\right)\right)$
6. Pfadintegral für $n \rightarrow \infty$ definieren: $K = \int \mathcal{D}q e^{\frac{i}{\hbar} S}$
 - Für $n \rightarrow \infty$ wird $\frac{q_{j+1} - q_j}{\tau} \rightarrow \dot{q}_j$ und $\frac{m}{2} \left(\frac{q_{j+1} - q_j}{\tau}\right)^2 - V(q_j) \rightarrow \mathcal{L}(q, \dot{q}) = \frac{m}{2} \dot{q}^2 - V(q)$ mit kontinuierlichen Funktionen $q(t)$
 - Pfadintegral-Differential $\mathcal{D}q := \lim_{n \rightarrow \infty} \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar \tau}}^{n+1} \prod_{j=1}^n dq_j$