

Quantenmechanik (PTP4) — Lernzusammenfassung

Kompakte Referenz der Konzepte, Formeln und Standardtricks, nicht der Einzelaufgaben.

1 Größenordnungen: Wann ist QM nötig?

Ein System muss quantenmechanisch behandelt werden, wenn die de-Broglie-Wellenlänge λ eines Teilchens *nicht mehr klein* gegen die charakteristische Längenskala d des Systems ist (Teilchenabstand, Gitterkonstante, Ausdehnung des Potentials, ...):

$$\lambda = \frac{h}{p}, \quad \text{thermisch: } \lambda = \frac{h}{\sqrt{3mk_B T}} \quad \left(\text{aus } \frac{p^2}{2m} = \frac{3}{2} k_B T \right).$$

Kriterium: $\lambda \gtrsim d \Rightarrow$ quantenmechanisch. $\lambda \ll d \Rightarrow$ klassisch erlaubt.

Herleitungsmuster (Schwellentemperatur): Ungleichung $\lambda(T) > d$ nach T auflösen. Da $\lambda(T)$ monoton fällt, ist das äquivalent zu $T < T^*$ mit $\lambda(T^*) = d$. *Ungleichungen darf man nur dann potenzieren/umkehren, wenn beide Seiten dasselbe (hier: positive) Vorzeichen haben* – das ist hier immer erfüllt.

- Feste Länge d : $T^* = \frac{h^2}{3mk_B d^2}$.
- Ideales Gas ($d \sim (V/N)^{1/3} = (k_B T/P)^{1/3}$ aus $PV = Nk_B T$): $T^* = \left(\frac{h^2}{3m} \right)^{3/5} \frac{P^{2/5}}{k_B}$.

Skalierung statt Neurechnen: Bei festem d ist $T^* \propto 1/m$ – ändert sich nur die Masse (z.B. Elektron $\rightarrow$ Atomkern), genügt ein Massenverhältnis statt kompletter Neurechnung. Leichte Teilchen + kleine d / hoher Druck $\Rightarrow$ eher quantenmechanisch (typisch: freie Elektronen in Festkörpern immer QM, Ionen/Kerne meist klassisch; Gase nur bei sehr tiefen T oder hoher Dichte QM). Ist stattdessen d *direkt* gegeben (nicht über P), lohnt sich der direkte Vergleich λ vs. d mehr als eine Formel wie oben zu erzwingen.

Nützliche Konstanten: $h = 6.626 \times 10^{-34}$ Js, $\hbar = 1.055 \times 10^{-34}$ Js, $k_B = 1.381 \times 10^{-23}$ J/K, $m_e = 9.11 \times 10^{-31}$ kg, $1 \text{ u} = 1.661 \times 10^{-27}$ kg.

2 Hilbertraum-Struktur: Bra, Ket, Skalarprodukt

Zustände: Ket $|v\rangle \in V$, Dualvektor (Bra) $\langle v| \in V^*$, Skalarprodukt $\langle u|v\rangle \in \mathbb{C}$ (auf $\mathbb{C}^n$: $\langle u|v\rangle = \sum_i u_i^* v_i$).

Physiker-Konvention: $\langle \cdot | \cdot \rangle$ ist *antilinear im ersten* (Bra-)Argument und *linear im zweiten* (Ket-)Argument:

$$\langle u | \alpha v + \beta w \rangle = \alpha \langle u | v \rangle + \beta \langle u | w \rangle,$$

$$\langle \alpha u + \beta v | w \rangle = \alpha^* \langle u | w \rangle + \beta^* \langle v | w \rangle.$$

(Mathematiker verwenden oft die umgekehrte Konvention – immer nachsehen, welche gemeint ist!)

Axiome: hermitesch $\langle u|u\rangle v = \langle v|v\rangle u^*$; positiv definit $\langle v|v\rangle \geq 0$, $= 0 \Leftrightarrow v = 0$. Beweise sind reines Nachrechnen mit $(\sum_i z_i)^* = \sum_i z_i^*$, $(ab)^* = a^* b^*$.

2.1 Unitäre Operatoren

Definition: $\hat{U}^\dagger \hat{U} = \hat{U} \hat{U}^\dagger = \mathbb{I}$ (in Matrixform $U^\dagger = (U^T)^*$; Rechenregel $(AB)^\dagger = B^\dagger A^\dagger$).

Unitäre Operatoren erhalten das Skalarprodukt: $\langle \hat{U}u | \hat{U}v \rangle = \langle u | \hat{U}^\dagger \hat{U} v \rangle = \langle u | v \rangle$. Deshalb erhalten sie Wahrscheinlichkeiten $|\langle \phi | \psi \rangle|^2$ und Normen – Basiswechsel, Symmetrietransformationen und Zeitentwicklung in der QM sind stets unitär.

Eigenwerte unitärer Operatoren liegen auf dem Einheitskreis: aus $\hat{U}|u\rangle = \lambda|u\rangle$ folgt $|\lambda|^2 \langle u|u\rangle = \langle u|\hat{U}^\dagger \hat{U}|u\rangle = \langle u|u\rangle$, also $|\lambda| = 1$, $\lambda = e^{i\theta}$.

Erzeuger unitärer Operatoren: $\hat{U} = e^{i\alpha \hat{A}}$ ($\alpha \in \mathbb{R}$) ist unitär $\Leftrightarrow \hat{A} = \hat{A}^\dagger$ (hermitesch).

Beweistechnik: $e^{\hat{X}} e^{\hat{Y}} = e^{\hat{X}+\hat{Y}}$ gilt für Operatoren *nur* falls $[\hat{X}, \hat{Y}] = 0$ – Exponenten unitärer Operatoren daher *nie* naiv zusammenfassen! Stattdessen $\hat{U}^\dagger \hat{U} = \mathbb{I}$ als Potenzreihe in α entwickeln und Koeffizienten ordnungsweise vergleichen: Term erster Ordnung liefert $\hat{A} - \hat{A}^\dagger = 0$. Umgekehrt: ist $\hat{A}$ hermitesch, kommutiert $i\alpha \hat{A}$ mit $-i\alpha \hat{A}^\dagger = -i\alpha \hat{A}$ trivial (dieselbe Observable!), BCH ist dann ausnahmsweise erlaubt.

Merke fürs ganze Semester: Generatoren unitärer Symmetrien/Zeitentwicklung sind immer hermitesche Observablen ($\hat{H}$ erzeugt Zeittranslation, $\hat{p}$ Ortstranslation, $\hat{L}$ Rotation, ...).

Vollständigkeitsrelation (Einsen einschieben): Für eine Orthonormalbasis (ONB) $\{|e_i\rangle\}$ gilt $\langle e_i | e_j \rangle = \delta_{ij}$ und (Beweis: Abschnitt 4)

$$\sum_i |e_i\rangle \langle e_i| = \mathbb{I}.$$

Diese Zerlegung der Eins “einzuschieben” ist *die* Standardtechnik, um abstrakte Bra-Ket-Ausdrücke in konkrete Basisdarstellungen/Matrixelemente zu übersetzen – wird das ganze Semester ständig gebraucht.

Wendet man $\hat{U}$ (unitär) auf eine ONB an, $|e'_i\rangle = \hat{U}|e_i\rangle$, bleibt $\{|e'_i\rangle\}$ eine ONB (da $\langle e'_i | e'_j \rangle = \langle e_i | e_j \rangle$), d.h. $\hat{U}$ vermittelt einen **Basiswechsel**. Mit der Vollständigkeitsrelation:

$$\hat{U} = \hat{U} \sum_i |e_i\rangle \langle e_i| = \sum_i |e'_i\rangle \langle e_i|.$$

2.2 Beispiel: Fourier-Reihen als vollständige ONB

Auf $\mathcal{L}^2([0, a])$ ist $\phi_n(x) = a^{-1/2} e^{i2\pi n x/a}$, $n \in \mathbb{Z}$, ein vollständiges ONS. **Orthonormalität:** $\langle \phi_n | \phi_m \rangle = \frac{1}{a} \int_0^a e^{i2\pi(m-n)x/a} dx = \delta_{nm}$ (für $m \neq n$ verschwindet das Integral, da $e^{i2\pi\ell} = 1$ für alle $\ell \in \mathbb{Z}$). **Vollständigkeit** (Abschlussrelation, diskrete Version der Fourier-Integraldarstellung von δ aus Abschnitt 10):

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} \phi_n^*(x) \phi_n(x') = \delta(x - x').$$

Divergente Summen regularisieren: Faktor $e^{-\varepsilon|n|}$ einführen, geometrische Reihe aufsummieren (ergibt den Poisson-Kern $\frac{1-r^2}{1-2r \cos \theta + r^2}$, $r = e^{-\varepsilon}$), dann $\varepsilon \rightarrow 0$ und das Ergebnis mit einer bekannten Delta-Folge (hier: Lorentz-Darstellung, Abschnitt 10) vergleichen.

Das reelle System $\{1, \cos(2\pi n x/a), \sin(2\pi n x/a)\}$ entsteht aus $\{\phi_n\}$ durch eine *unitäre* 2×2 -Blocktransformation, $\chi_n^+ = \frac{1}{\sqrt{2}}(\phi_n + \phi_{-n})$, $\chi_n^- = \frac{1}{\sqrt{2}}(-i\phi_n + i\phi_{-n})$. Da unitäre Transformationen einer vollständigen ONB nach Abschnitt 2.1 wieder eine vollständige ONB liefern, ist damit *automatisch* auch das reelle System vollständig und orthonormal – ganz ohne die Integrale erneut auszurechnen!

3 Adjungierter Operator & Matrixdarstellung

Definition (verallgemeinert $U^\dagger = (U^T)^*$ von Blatt 1 auf abstrakte Operatoren): $\langle u | \hat{A}^\dagger | v \rangle = \langle \hat{A}u | v \rangle$ für alle u, v .

Kernformel für Adjungierte in Bra-Ket (folgt aus obiger Definition + Hermitizität des Skalarprodukts):

$$\langle \phi_1 | \hat{A} | \phi_2 \rangle^* = \langle \phi_2 | \hat{A}^\dagger | \phi_1 \rangle.$$

Das ist der Standardweg, um $\hat{A}^\dagger$ konkret zu berechnen (z.B. $\langle n | \hat{A}^\dagger | 1 \rangle = \langle 1 | \hat{A} | n \rangle^*$), ohne jedes Mal die abstrakte Definition neu hinschreiben zu müssen.

Matrixdarstellung: In einer ONB $\{|n\rangle\}$ hat $|\phi\rangle = \sum_n c_n |n\rangle$ die Koeffizienten $c_n = \langle n | \phi \rangle$ (Spaltenvektor); $\langle \phi |$ entspricht dem konjugiert-transponierten Zeilenvektor (c_n^*). Ein Operator $\hat{O}$ entspricht der Matrix $O_{mn} = \langle m | \hat{O} | n \rangle$ (Matrizelement); $\hat{O}|\phi\rangle$ entspricht der Matrix-Vektor-Multiplikation. Die Matrix von $\hat{A}^\dagger$ ist die konjugiert-transponierte Matrix von $\hat{A}$.

Operator $\leftrightarrow$ Matrix (doppeltes Einsen-Einschieben):

$$\hat{O} = \mathbb{K} \hat{O} \mathbb{K} = \sum_{i,j} |i\rangle \langle i | \hat{O} | j \rangle \langle j| = \sum_{i,j} O_{ij} |i\rangle \langle j|.$$

So übersetzt man zwischen abstrakter Operatorschreibweise und einer gegebenen Matrixdarstellung in beide Richtungen.

Basiswechsel von Operator-Matrizen: Ist $|b_i\rangle = \hat{U} |a_i\rangle$ ein unitärer Basiswechsel (Abschnitt 2.1), so transformiert sich die Matrixdarstellung eines Operators $\hat{O}$ als Ähnlichkeitstransformation

$$O^{(b)} = U^\dagger O^{(a)} U,$$

wobei die Spalten von U die Komponenten der $|b_i\rangle$ in der alten Basis $\{|a_i\rangle\}$ sind. Erhält Hermitizität, Eigenwerte, Spur und Determinante – nur die *Darstellung* ändert sich, nicht der Operator selbst.

4 Selbstadjungierte Operatoren, Projektionen & Spektralsatz

Eigenwerte selbstadjungierter Operatoren ($\hat{A} = \hat{A}^\dagger$) sind reell: Mit $\hat{A}|a\rangle = a|a\rangle$ gilt $\langle a | \hat{A} | a \rangle = a \langle a | a \rangle$, aber auch $\langle a | \hat{A} | a \rangle^* = \langle a | \hat{A}^\dagger | a \rangle = \langle a | \hat{A} | a \rangle$ (Kernformel oben, $\hat{A}^\dagger = \hat{A}$) $\Rightarrow \langle a | \hat{A} | a \rangle \in \mathbb{R} \Rightarrow a \in \mathbb{R}$ (da $\langle a | a \rangle \in \mathbb{R}_{>0}$).

Eigenzustände zu verschiedenen Eigenwerten sind orthogonal: Aus $a_i \langle a_j | a_i \rangle = \langle a_j | \hat{A} | a_i \rangle = a_j \langle a_j | a_i \rangle$ (zweimal ausgewertet, via Kernformel + Selbstadjungiertheit + Reellwertigkeit der Eigenwerte) folgt $(a_i - a_j) \langle a_j | a_i \rangle = 0$, also $\langle a_j | a_i \rangle = 0$ für $a_i \neq a_j$.

Überlagerung verschiedener Eigenwerte ist nie Eigenzustand: $|a_i\rangle + |a_j\rangle$ ist nur dann Eigenzustand von $\hat{A}$, wenn $a_i = a_j$ (entarteter Eigenwert, Summe bleibt trivial im selben Eigenraum). Sind die Eigenwerte verschieden, ist die Summe *niemals* Eigenzustand – Ursprung nicht-stationärer Zustände bei Zeitentwicklung.

$\hat{A}\hat{B}$ (beide selbstadjungiert) ist selbstadjungiert $\iff [\hat{A}, \hat{B}] = 0$. **Aber $i[\hat{A}, \hat{B}]$ ist immer selbstadjungiert** (auch wenn $[\hat{A}, \hat{B}] \neq 0$): $(i[\hat{A}, \hat{B}])^\dagger = -i(\hat{B}\hat{A} - \hat{A}\hat{B}) = i[\hat{A}, \hat{B}]$. Das ist der Grund, warum Kommutatoren von Observablen in der QM immer mit Faktor i auftreten ($[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$, $[\hat{L}_i, \hat{L}_j] = i\hbar \epsilon_{ijk} \hat{L}_k$): nur so bleibt das Ergebnis wieder eine (potentiell messbare) Observable.

Projektionsoperator: $\hat{P}^2 = \hat{P}$ (idempotent) und $\hat{P}^\dagger = \hat{P}$. Eigenwerte immer 0 oder 1 (aus $\hat{P}|\psi\rangle = \lambda|\psi\rangle \Rightarrow \lambda^2 = \lambda$). $\hat{P}_i = |i\rangle \langle i|$ projiziert auf die Gerade $\mathbb{C}|i\rangle$; für eine ONB $\{|i\rangle\}_{i=1}^{N_1}$ eines Unterraums $\mathcal{H}_1$ ist $P_{\mathcal{H}_1} = \sum_{i=1}^{N_1} |i\rangle \langle i|$ der Projektor auf $\mathcal{H}_1$ ($P_{\mathcal{H}_1}|\phi\rangle \in \mathcal{H}_1$ für alle $|\phi\rangle$, und $P_{\mathcal{H}_1}|\phi_1\rangle = |\phi_1\rangle$ für $|\phi_1\rangle \in \mathcal{H}_1$).

$\mathcal{H}_1$).

Vollständigkeitsrelation, jetzt bewiesen: Für eine vollständige ONB $\{|i\rangle\}_{i=1}^N$ von $\mathcal{H}$ existiert für jedes $|\phi\rangle$ die Entwicklung $|\phi\rangle = \sum_i c_i |i\rangle$ mit $c_i = \langle i | \phi \rangle$ (Koeffizienten via Orthonormalität). Einsetzen zeigt $|\phi\rangle = (\sum_i |i\rangle \langle i|) |\phi\rangle$ für jedes $|\phi\rangle$, also $\sum_i |i\rangle \langle i| = \mathbb{K}$.

Spektralsatz (nicht entartet, endlichdim.): Ist $\{|i\rangle\}$ vollständige ONB aus Eigenvektoren von $\hat{A}$ mit $\hat{A}|i\rangle = a_i|i\rangle$, dann (Identität von rechts einschieben)

$$\hat{A} = \hat{A} \sum_i |i\rangle \langle i| = \sum_i a_i |i\rangle \langle i| = \sum_i a_i \hat{P}_i.$$

Jeder Operator zerfällt in Eigenwerte $\times$ Projektoren auf die Eigenräume.

Diagonalisierungs-Rezept: (1) Charakteristisches Polynom $\det(A - \lambda \mathbb{K}) = 0$ lösen $\rightarrow$ Eigenwerte. (2) Für jedes λ : $(A - \lambda \mathbb{K})v = 0$ lösen $\rightarrow$ Eigenvektor, normieren. (3) **Fehlerkontrolle:** Ist A hermitesch, müssen alle Eigenwerte automatisch reell und Eigenvektoren zu verschiedenen Eigenwerten automatisch orthogonal herauskommen – tut es das nicht, Rechenfehler suchen!

Kommutierende Observablen teilen eine Eigenbasis: Sind $\hat{A}, \hat{B}$ selbstadjungiert, $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$, und ist $\{|a_n\rangle\}$ eine *nicht entartete* vollständige Eigenbasis von $\hat{A}$, dann folgt aus $0 = \langle a_n | [\hat{A}, \hat{B}] | a_l \rangle = (a_n - a_l) \langle a_n | \hat{B} | a_l \rangle$, dass $\hat{B}$ diagonal in dieser Basis ist – und (zwei Einsen einschieben in $\hat{B}|a_l\rangle$) damit sind alle $|a_n\rangle$ automatisch auch Eigenzustände von $\hat{B}$. Kompatible (kommutierende) Observablen sind also gleichzeitig scharf messbar.

Entartung durch Inkompatibilität erzwungen (VSKO): Kommutieren $\hat{B}, \hat{C}$ *nicht*, aber beide mit $\hat{A}$, dann muss $\hat{A}$ entartet sein. Indirekter Beweis: Wäre $\hat{A}$ nicht entartet, müssten $\hat{B}$ und $\hat{C}$ nach obigem Satz dieselbe (eindeutige) Eigenbasis von $\hat{A}$ teilen $\Rightarrow [\hat{B}, \hat{C}] = 0$, Widerspruch. Ist $\hat{A}$ entartet, ergänzt man um weitere, untereinander und mit $\hat{A}$ kommutierende Observablen, bis die Kombination der Eigenwerte die Basis eindeutig festlegt – *vollständiger Satz kommutierender Observablen* (VSKO).

4.1 Spur (Trace)

$$\text{Tr}(\hat{A}) := \sum_n \langle n | \hat{A} | n \rangle \text{ (ONB } \{|n\rangle\} \text{)}.$$

Zyklische Invarianz: $\text{Tr}(\hat{A}\hat{B}) = \text{Tr}(\hat{B}\hat{A})$ (Einsen einschieben, dann sind Matricelemente gewöhnliche Zahlen, die kommutieren); für drei Operatoren durch Gruppieren zu zwei Faktoren: $\text{Tr}(\hat{A}\hat{B}\hat{C}) = \text{Tr}(\hat{B}\hat{C}\hat{A}) = \text{Tr}(\hat{C}\hat{A}\hat{B})$. **Achtung:** nur *zyklisch* vertauschbar, nicht beliebig permutierbar ($\text{Tr}(\hat{A}\hat{B}\hat{C}) \neq \text{Tr}(\hat{A}\hat{C}\hat{B})$ im Allgemeinen). Direkte Folgen: $\text{Tr}([\hat{A}, \hat{B}]) = 0$ *immer*; und die Spur ist **basisunabhängig** ($\text{Tr}(\hat{U}^\dagger \hat{A} \hat{U}) = \text{Tr}(\hat{A} \hat{U} \hat{U}^\dagger) = \text{Tr}(\hat{A})$ für unitäres $\hat{U}$).

5 Operator-Exponentiale: BCH & Hadamard-Lemma

$[\hat{A}, \hat{B}] = 0 \Rightarrow [\hat{A}, \hat{B}^n] = 0 \forall n \Rightarrow [\hat{A}, f(\hat{B})] = 0$ für jede Operatorfunktion f (Potenzreihe, Linearität des Kommutators).

Exponential vertauscht mit unitärer Konjugation:

$$e^{\hat{U}\hat{A}\hat{U}^\dagger} = \hat{U}e^{\hat{A}}\hat{U}^\dagger$$

(Beweis: $(\hat{U}\hat{A}\hat{U}^\dagger)^n = \hat{U}\hat{A}^n\hat{U}^\dagger$ teleskopiert via $\hat{U}^\dagger\hat{U} = \mathbb{1}$, dann Potenzreihe). Zentral für Zeitentwicklung (Abschnitt 6): diagonalisieren, exponentieren, zurücktransformieren.

Hadamard-Lemma (Taylor-Entwicklung von $f(\lambda) = e^{\lambda\hat{A}}\hat{B}e^{-\lambda\hat{A}}$ um $\lambda = 0$, ausgewertet bei $\lambda = 1$; erfüllt DGL $f' = [\hat{A}, f]$):

$$e^{\hat{A}}\hat{B}e^{-\hat{A}} = \hat{B} + [\hat{A}, \hat{B}] + \frac{1}{2!}[\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]] + \frac{1}{3!}[\hat{A}, [\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]]] + \dots$$

Allgemeine Technik: Operatoridentität auf eine skalare Parameter-DGL zurückführen (hier in λ), Taylor entwickeln, Koeffizienten ablesen – dieselbe Grundidee wie bei der Potenzreihenmethode für Unitaritäts-Erzeuger (Abschnitt 2.1). Bricht die Kommutatorreihe ab (z.B. $[\hat{x}, [\hat{x}, \hat{p}]] = 0$, da $[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar\mathbb{1}$ zentral ist), bleibt oft nur der erste Term übrig: $e^{\hat{x}}\hat{p}e^{-\hat{x}} = \hat{p} + i\hbar$.

BCH-Spezialfall (Kommutator $[\hat{A}, \hat{B}]$ "zentral", d.h. $[\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]] = [\hat{B}, [\hat{A}, \hat{B}]] = 0$ – z.B. wenn $[\hat{A}, \hat{B}] \propto \mathbb{1}$ wie bei $\hat{x}, \hat{p}$):

$$e^{\hat{A}}e^{\hat{B}} = e^{\hat{A}+\hat{B}+\frac{1}{2}[\hat{A}, \hat{B}]}$$

Allgemein (beliebige $\hat{A}, \hat{B}$) gilt nur die volle BCH-Formel $e^{\hat{A}}e^{\hat{B}} = e^{\hat{A}+\hat{B}+Z(\hat{A}, \hat{B})}$ mit $Z = \frac{1}{2}[\hat{A}, \hat{B}] + \frac{1}{12}[\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]] - \frac{1}{12}[\hat{B}, [\hat{A}, \hat{B}]] + \dots$ – insbesondere $e^{\hat{A}}e^{\hat{B}} \neq e^{\hat{A}+\hat{B}}$, außer wenn $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$.

Warum die DGL einfach lösbar ist: Eine operatorwertige DGL $f'(t) = G(t)f(t)$ darf man nur dann wie im Skalarfall durch $f(t) = \exp\left(\int_0^t G(s)ds\right)f(0)$ lösen, wenn $[G(t), G(t')] = 0$ für alle t, t' – das muss man im BCH-Spezialfall explizit nachrechnen (folgt hier aus den Voraussetzungen $[\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]] = [\hat{B}, [\hat{A}, \hat{B}]] = 0$), sonst ist naives Integrieren *nicht* erlaubt.

Kommutator mit Operatorfunktion des kanonisch Konjugierten: Mit $[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar\mathbb{1}$ und Induktion über $[\hat{x}, \hat{p}^n] = i\hbar n\hat{p}^{n-1}$ (Kommutator-Produktregel $[\hat{A}, \hat{B}\hat{C}] = [\hat{A}, \hat{B}]\hat{C} + \hat{B}[\hat{A}, \hat{C}]$):

$$[\hat{x}, G(\hat{p})] = i\hbar G'(\hat{p}), \quad [\hat{p}, F(\hat{x})] = -i\hbar F'(\hat{x})$$

für jede als Potenzreihe darstellbare Funktion F, G (Vorzeichenunterschied durch $[\hat{p}, \hat{x}] = -i\hbar$). Verallgemeinert die obige Aussage " $[\hat{A}, \hat{B}] = 0 \Rightarrow [\hat{A}, f(\hat{B})] = 0$ " auf den kanonischen (nicht-kommutierenden) Fall: der Kommutator verschwindet nicht, ist aber explizit und einfach.

Translationsoperator $\hat{T}(a) = e^{-ia\hat{p}/\hbar}$: Mit obigem Merksatz ($G(\hat{p}) = e^{-ia\hat{p}/\hbar}$) folgt sofort $[\hat{x}, \hat{T}(a)] = a\hat{T}(a)$, äquivalent $\hat{T}(a)^\dagger \hat{x} \hat{T}(a) = \hat{x} + a$ – die definierende Eigenschaft einer Verschiebung um a . Dasselbe Ergebnis folgt auch direkt aus dem Hadamard-Lemma, da $[\frac{ia\hat{p}}{\hbar}, \hat{x}] = a$ bereits eine Zahl ist und die Reihe daher abbricht – zwei äquivalente Rechenwege, je nachdem was schneller geht.

6 Zeitentwicklung: Der Propagator $e^{-i\hat{H}t/\hbar}$

Für diagonales $\hat{H}_d = \sum_n E_n |n\rangle \langle n|$ (Energie-Eigenbasis) gilt trivial $e^{-i\hat{H}_d t/\hbar} |n\rangle = e^{-iE_n t/\hbar} |n\rangle$ (Funktion des Operators wirkt auf Eigenvektor als Funktion des Eigenwerts), also für

$$|\psi(0)\rangle = \sum_n c_n(0) |n\rangle:$$

$$|\psi(t)\rangle = e^{-i\hat{H}_d t/\hbar} |\psi(0)\rangle = \sum_n c_n(0) e^{-iE_n t/\hbar} |n\rangle.$$

Für allgemeines (nicht-diagonales) $\hat{H}$: Diagonalisieren ($\hat{H} = \hat{U}\hat{H}_d\hat{U}^\dagger$, existiert immer nach Spektralsatz + Blatt-1-Basiswechsel), im diagonalen Bild lösen, zurücktransformieren – mit der Identität $e^{\hat{U}\hat{A}\hat{U}^\dagger} = \hat{U}e^{\hat{A}}\hat{U}^\dagger$ aus Abschnitt 5 folgt sofort $e^{-i\hat{H}t/\hbar} = \hat{U}e^{-i\hat{H}_d t/\hbar}\hat{U}^\dagger$, also gilt $|\psi(t)\rangle = e^{-i\hat{H}t/\hbar} |\psi(0)\rangle$ für jedes selbstadjungierte $\hat{H}$.

Nur Energiedifferenzen sind physikalisch: Jedes $\hat{H}$ lässt sich zerlegen als $\hat{H} = E_0\mathbb{1} + \hat{\tilde{H}}$ mit $E_0 = \text{Tr}(\hat{H})/N$ und $\text{Tr}(\hat{\tilde{H}}) = 0$. Da $E_0\mathbb{1}$ mit allem kommutiert, faktorisiert die Zeitentwicklung:

$$e^{-i\hat{H}t/\hbar} = e^{-iE_0 t/\hbar} \cdot e^{-i\hat{\tilde{H}}t/\hbar}.$$

Der E_0 -Teil liefert nur eine globale Phase $e^{-iE_0 t/\hbar}$ – unbeobachtbar (kürzt sich in allen $\langle \hat{A} \rangle$ und $|\langle \phi | \psi \rangle|^2$ heraus). Deshalb darf man o.B.d.A. $\text{Tr}(\hat{H}) = 0$ annehmen: der absolute Energienullpunkt ist willkürlich, nur **Energiedifferenzen** sind messbar.

Zeitabhängiges $\hat{H}(t)$ – Dyson-Reihe: Löst die DGL $i\hbar \partial_t \hat{U}(t, t_0) = \hat{H}(t)\hat{U}(t, t_0)$, $\hat{U}(t_0, t_0) = \mathbb{1}$, für i. A. nicht-diagonales/zeitabhängiges $\hat{H}(t)$:

$$\hat{U}(t, t_0) = \mathbb{1} + \sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{-i}{\hbar}\right)^n \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \cdots \int_{t_0}^{t_{n-1}} dt_n \hat{H}(t_1)\hat{H}(t_2)\cdots\hat{H}(t_n).$$

Beweisidee: Ableiten nach der oberen Grenze t des äußersten Integrals (Hauptsatz), Summe teleskopiert. Die verschachtelte Integrationsreihenfolge $t_1 > t_2 > \dots > t_n$ kodiert automatisch die *Zeitordnung* – nötig, da $\hat{H}(t_1)$ und $\hat{H}(t_2)$ zu verschiedenen Zeiten i. A. nicht kommutieren. Reduziert sich für zeitunabhängiges $\hat{H}$ auf die gewöhnliche Exponentialreihe $e^{-i\hat{H}t/\hbar}$.

Zwei-Niveau-Oszillation (Standardmuster): Ist $\hat{H}$ diagonal in $\{|1\rangle, |2\rangle\}$ mit Energien $E_{1,2}$, und ist der präparierte/gemessene Zustand $|a\rangle = \cos\theta|1\rangle + \sin\theta|2\rangle$ (unitäre Drehung um Winkel θ), dann oszilliert die Rückkehrwahrscheinlichkeit rein geometrisch (Kreuzterme $\propto \cos(\Delta E t/\hbar)$, dann $\cos^4 + \sin^4 = 1 - 2\sin^2\cos^2$ und $1 - \cos x = 2\sin^2(x/2)$ benutzen):

$$P(t) = |\langle a | a(t) \rangle|^2 = 1 - \sin^2(2\theta) \sin^2\left(\frac{\Delta E t}{2\hbar}\right), \quad \Delta E = E_1 - E_2,$$

unabhängig vom Vorzeichen von ΔE . Dieses Muster (2-Zustands-Mischung + Energie-differenz-getriebene Oszillation) taucht überall auf: Neutrino-Oszillationen, Spin-Präzession, Ammoniak-Maser, Rabi-Oszillationen.

Variation der Konstanten für $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_1(t)$ (Ergänzung zur Dyson-Reihe oben für den häufigen Fall $\hat{H}_0$ zeitunabhängig, $\hat{H}_1(t)$ eine oszillierende Störung): Ansatz $|\psi(t)\rangle = c_1(t)e^{-iE_1 t/\hbar}|1\rangle + c_2(t)e^{-iE_2 t/\hbar}|2\rangle$ (dieselbe Form wie bei freier Entwicklung, aber mit zeitabhängigen $c_i(t)$) in die Schrödingergleichung einsetzen – die $\hat{H}_0$ -Anteile heben sich exakt gegen die Phasenableitungen weg, übrig bleibt ein gekoppeltes ODE-System nur in $\hat{H}_1$ und den Bohr-Phasen $e^{\pm i(E_1 - E_2)t/\hbar}$. **Beispiel Rabi-Oszillation** (Spin im rotierenden Magnetfeld, resonant, $\omega = \omega_0$): führt auf $\dot{c}_1 = -i\Omega c_2$, $\dot{c}_2 = -i\Omega c_1$ (Kopplungsstärke Ω), gelöst durch $c_1(t) = \cos(\Omega t)$, $c_2(t) = -i\sin(\Omega t)$ – exaktes Analogon zum Zwei-Niveau-Muster oben, jetzt für eine echte Zeitabhängigkeit der Störung hergeleitet statt nur behauptet.

7 Heisenberg-Bild

Definition ($\hat{H}$ nicht explizit zeitabhängig, $\hat{U}(t) = e^{-i\hat{H}t/\hbar}$): $\hat{A}_H(t) := \hat{U}^\dagger(t)\hat{A}_S\hat{U}(t)$, Zustände fest, $|\psi\rangle_H := \hat{U}^\dagger(t)|\psi(t)\rangle_S$.

Heisenberg-Gleichung: $\frac{d\hat{A}_H}{dt} = \frac{i}{\hbar}[\hat{H}, \hat{A}_H]$ (analog zur klassischen Poisson-Klammer-Bewegungsgleichung, $[\cdot, \cdot]/i\hbar \leftrightarrow \{\cdot, \cdot\}$). **Gleichzeitige** kanonische Kommutatoren bleiben erhalten, $[\hat{x}_H(t), \hat{p}_H(t)] = \hat{U}^\dagger[\hat{x}_S, \hat{p}_S]\hat{U} = i\hbar$ für jedes t (unitäre Konjugation erhält Kommutatoren) – aber **ungleichzeitige** Kommutatoren $[\hat{x}_H(t_2), \hat{p}_H(t_1)]$ mit $t_1 \neq t_2$ verschwinden i. A. *nicht* und oszillieren mit der Systemdynamik (Beispiel harmonischer Oszillator, Abschnitt 16).

Beispiel harmonischer Oszillator: Heisenberg-Gleichungen für $\hat{x}_H, \hat{p}_H$ liefern dieselbe Struktur wie die klassischen Hamilton-Gleichungen, $\hat{\dot{x}}_H = \hat{p}_H/m$, $\hat{\dot{p}}_H = -m\omega^2\hat{x}_H$ – gelöst durch $\hat{x}_H(t) = \hat{x}_S \cos \omega t + \frac{\hat{p}_S}{m\omega} \sin \omega t$ (äquivalent zum Leiteroperator-Resultat $\hat{a}_H(t) = \hat{a}_S e^{-i\omega t}$, Abschnitt 16).

Eigenbasis im Heisenberg-Bild: Ist $\hat{A}_S|n\rangle = a_n|n\rangle$, dann ist $|n\rangle_H := \hat{U}^\dagger(t)|n\rangle$ Eigenzustand von $\hat{A}_H(t)$ zum selben Eigenwert a_n – aber i. A. *nicht* derselbe Vektor wie $|n\rangle$ (rotiert mit $\hat{U}^\dagger(t)$ mit). Trotzdem stimmen die Entwicklungskoeffizienten überein, ${}_H\langle n|\psi_H\rangle = \langle n|\hat{U}(t)\hat{U}^\dagger(t)|\psi(t)\rangle_S = c_n(t)$: beide Bilder liefern identische Wahrscheinlichkeiten, nur die Zeitabhängigkeit sitzt an anderer Stelle (Zustand vs. Basis/Operator).

Erhaltungsgrößen (Noether in der QM): Kommutiert ein zeitunabhängiger, selbstadjungierter Symmetriegenerator $\hat{G}_S$ mit $\hat{H}_S$, dann (mit Blatt-5-Fakt $[\hat{A}, \hat{B}] = 0 \Rightarrow [\hat{A}, f(\hat{B})] = 0$, hier $f = \exp$)

$$\hat{G}_H(t) = \hat{U}^\dagger(t)\hat{G}_S\hat{U}(t) = \hat{U}^\dagger(t)\hat{U}(t)\hat{G}_S = \hat{G}_S \quad \forall t,$$

also $\frac{d\hat{G}_H}{dt} = 0$: $\hat{G}$ ist **Erhaltungsgröße** (alle Erwartungswerte zeitlich konstant). Verallgemeinert: Impuls bei Translationsinvarianz, Drehimpuls bei Rotationsinvarianz, Parität bei symmetrischem Potential (Abschnitt 15).

8 Messpostulate & Unschärferelation

Messpostulate: Für Observable $\hat{A} = \sum_i a_i \hat{P}_i$ (Spektralsatz, Abschnitt 4):

- Mögliche Messwerte: die Eigenwerte a_i (reell).
- **Born-Regel:** $P(a_i) = \langle \psi | \hat{P}_i | \psi \rangle = \|\hat{P}_i |\psi\rangle\|^2$ (nicht entartet: $= |\langle a_i | a_i \rangle \psi|^2$).
- **Kollaps:** nach Messergebnis a_i ist der Zustand $\hat{P}_i |\psi\rangle / \|\hat{P}_i |\psi\rangle\|$ (projiziert & renormiert).
- Erwartungswert: $\langle \hat{A} \rangle = \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle = \sum_i a_i P(a_i)$.

Kommutierende Observablen (Abschnitt 4): gemeinsame Eigenbasis, gleichzeitig scharf messbar, Reihenfolge der Messungen egal. Landet ein System einmal in einem *simultanen* Eigenzustand aller verfügbaren (kommutierenden) Messoperatoren, ist es dort für immer "gefangen" – keine weitere Messung ändert es noch (wichtig für Präparations-Strategien: manche Zielzustände können durch reine Projektivmessung endgültig unerreichbar werden).

Unschärferelation (Heisenberg–Robertson):

$$\Delta \hat{A} \Delta \hat{B} \geq \frac{1}{2} |\langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle|.$$

In einem Eigenzustand von $\hat{A}$ gilt $\Delta \hat{A} = 0$ und $\langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle = 0$ (beide Seiten trivial Null) – die Ungleichung ist dann als $0 \geq 0$ automatisch (aber trivial) gesättigt. **Nicht verwechseln** mit echten "Zuständen minimaler Unschärfe" (z.B. Gauß-Wellenpakete für $\hat{x}, \hat{p}$), wo *beide Seiten* ungleich Null, aber exakt gleich sind.

9 Kontinuitätsgleichung

Mit $\rho = |\psi|^2$ und $\vec{j} := \frac{i\hbar}{2m}(\psi \nabla \psi^* - \psi^* \nabla \psi)$ gilt für die Schrödingergleichung mit *reellem* Potential V :

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

Herleitung: Schrödingergleichung und ihre komplex konjugierte nach $\partial_t \psi, \partial_t \psi^*$ auflösen, in $\partial_t \rho = \psi^* \partial_t \psi + \psi \partial_t \psi^*$ einsetzen. Die V -Terme heben sich *nur weg*, weil V *reell* ist. Übrig bleibt $\frac{i\hbar}{2m}(\psi^* \nabla^2 \psi - \psi \nabla^2 \psi^*)$, was sich mit der Produktregel-Identität $\nabla \cdot (f \nabla g - g \nabla f) = f \nabla^2 g - g \nabla^2 f$ direkt als $-\nabla \cdot \vec{j}$ erkennen lässt.

Äquivalente, anschauliche Form: $\vec{j} = \frac{\hbar}{m} \text{Im}(\psi^* \nabla \psi) = \text{Re}(\psi^* \frac{\hat{p}}{m} \psi)$ – "Strom = Dichte $\times$ Geschwindigkeit", wie in der Hydrodynamik.

Bedeutung: Lokale Erhaltung der Wahrscheinlichkeit (wie Ladungs-/Massenerhaltung). Integriert über den ganzen Raum ($\vec{j} \rightarrow 0$ im Unendlichen) folgt $\frac{d}{dt} \int |\psi|^2 d^3x = 0$: die Norm ist erhalten $\iff$ Zeitentwicklung ist unitär (vgl. Abschnitt 2.1: $\hat{U} = e^{i\hat{H}t/\hbar}$ unitär $\iff \hat{H} = \hat{H}^\dagger$).

Komplexes Potential $V + iU$ (U reell) macht $\hat{H}$ nicht-hermitesch, und die U -Terme heben sich *nicht* mehr weg:

$$\partial_t \rho + \nabla \cdot \vec{j} = \frac{2U}{\hbar} \rho \Rightarrow \frac{d}{dt} \int |\psi|^2 d^3x = \frac{2}{\hbar} \int U \rho d^3x \neq 0.$$

$U < 0$: Absorption/Zerfall ("optisches Potential" in der Streutheorie); $U > 0$: Quelle. Direkte Bestätigung des Zusammenhangs hermitesch $\leftrightarrow$ unitär aus Abschnitt 2.1.

10 Delta-Distribution

Definiert über die Auswähleigenschaft: $\int_{\mathbb{R}} dx \delta(x - x_0) f(x) = f(x_0)$ für alle f, x_0 .

Wichtigste Darstellung (FT von δ ist $\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{-ikx_0}$, s. Abschnitt 11):

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

Delta-Folgen: Jede Familie $f_\varepsilon(x - x_0)$ mit (i) $\int f_\varepsilon dx = 1$ für jedes ε und (ii) Konzentration auf einen Punkt für $\varepsilon \rightarrow 0$ konvergiert distributionell gegen $\delta(x - x_0)$. Standardvertreter zum Auswendiglernen:

- Kasten: $f_\varepsilon = (2\varepsilon)^{-1}$ auf $|x| \leq \varepsilon$, sonst 0.
- Gauß: $\frac{1}{\sqrt{2\pi\varepsilon}} \exp[-(x - x_0)^2/2\varepsilon^2]$.
- Lorentz: $\frac{1}{\pi} \frac{\varepsilon}{(x - x_0)^2 + \varepsilon^2}$.

Beweisschema (immer gleich): Gegen Testfunktion g integrieren, Variable $x = x_0 + \varepsilon u$ substituieren, sodass die ε -Abhängigkeit nur noch im Argument von g steckt; dann $\varepsilon \rightarrow 0$ und Stetigkeit von g ausnutzen.

Distributionelle Ableitung (partielle Integration, Randterm verschwindet immer, da $\delta \rightarrow 0$ im Unendlichen):

$$\int d^3p \nabla_p \delta(\vec{p} - \vec{p}_0) f(\vec{p}) = -\nabla_p f(\vec{p})|_{\vec{p}=\vec{p}_0}.$$

Allgemein: Ableitung wandert unter dem Integral mit Vorzeichenwechsel auf die Testfunktion.

11 Fourier-Transformation: Werkzeugkasten

$$\mathcal{F}[f](k) = \tilde{f}(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dx f(x) e^{-ikx},$$

$$\mathcal{F}^{-1}[\tilde{f}](x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dk \tilde{f}(k) e^{ikx}.$$

Die 6 Standardidentitäten (auswendig können!):

- Linearität: $\mathcal{F}[\alpha f + \beta g] = \alpha \mathcal{F}[f] + \beta \mathcal{F}[g]$.
- Verschiebung: $\mathcal{F}[f(x - a)](k) = e^{-ika} \mathcal{F}[f](k)$.
- Skalierung: $\mathcal{F}[f(ax)](k) = \frac{1}{a} \mathcal{F}[f]\left(\frac{k}{a}\right)$, $a > 0$.
- Spiegelung: $\mathcal{F}[f(-x)](k) = \mathcal{F}[f](-k)$.
- Ableitung $\rightarrow$ Multiplikation: $\mathcal{F}[f'](k) = ik \mathcal{F}[f](k)$.
- Multiplikation $\rightarrow$ Ableitung: $\mathcal{F}[xf(x)](k) = i \frac{d}{dk} \mathcal{F}[f](k)$.

(In 3D: komponentenweise, Skalierungsfaktor $1/a^3$.)

Gauß-Integral (quadratische Ergänzung) – eine der wichtigsten Formeln überhaupt:

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha k^2 + \beta k} dk = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} e^{\beta^2/4\alpha}, \quad \text{Re}(\alpha) > 0.$$

FT einer Gaußfunktion ist wieder gaußförmig ("selbstdual") – zentral für Grundzustand des harmonischen Oszillators, kohärente Zustände, minimale Wellenpakete. Auch bei komplexem Shift des Integrationswegs gültig (Analytizität + Abfall des Integranden).

Kasten $\leftrightarrow$ Sinc: FT eines Kastens der Breite $2a$ ist $\propto \sin(ka)/k$ (sinc-Funktion). Mit $\Delta x \sim a$ (Halbbreite) und $\Delta k \sim \pi/a$ (erste Nullstelle) gilt $\Delta x \cdot \Delta k = \pi = \text{const.}$, unabhängig von a .

Vorstufe der Unschärferelation: Schmal in $x \Rightarrow$ zwangsläufig breit in k (und umgekehrt) – Ort und Impuls ($p = \hbar k$) sind Fourier-konjugiert, ihre Breiten lassen sich nie gleichzeitig beliebig klein machen ($\Delta x \Delta p \gtrsim \hbar/2$).

Symmetrie-Merkregel: reelles $f \Rightarrow \tilde{f}(-k) = \tilde{f}(k)^*$; zusätzlich gerades $f \Rightarrow \tilde{f}$ reell und gerade. (Grund für $\langle \hat{p} \rangle = 0$ bei reellem ψ , Abschnitt 12 – selbe Symmetrie wie hier.)

12 Wellenfunktionen, Erwartungswerte, Fourier-raum

Normierung ($\mathcal{L}^2$ -Norm): $\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx = 1$. Erwartungswerte:

$$\langle \hat{x} \rangle = \int \psi^* x \psi dx, \quad \langle \hat{p} \rangle = \int \psi^* (-i\hbar \partial_x) \psi dx.$$

Symmetrie statt Integration: Ist $|\psi(x)|^2$ spiegelsymmetrisch um x_0 (also eine gerade Wahrscheinlichkeitsdichte um x_0), dann ist $\langle \hat{x} \rangle = x_0$ ohne jede Rechnung.

Für jede reelle, normierbare Wellenfunktion gilt $\langle \hat{p} \rangle = 0$:

$$\langle \hat{p} \rangle = -i\hbar \int \psi \psi' dx = -\frac{i\hbar}{2} \int (\psi^2)' dx = -\frac{i\hbar}{2} [\psi^2]_{-\infty}^{\infty} = 0,$$

da $\psi(\pm\infty) = 0$. Gilt auch für stückweise glatte ψ (Knicke in ψ' sind egal, solange ψ selbst stetig bleibt – innere Randterme heben sich weg).

Impulsraum (Fourier-Transformation):

$$\phi(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int \psi(x) e^{-ipx/\hbar} dx, \quad \langle \hat{p} \rangle = \int \phi^* p \phi dp.$$

Fourier-Transformation ist unitär (Parseval) $\Rightarrow$ Normierung und Erwartungswerte sind in Orts- und Impulsdarstellung konsistent (gute Rechenkontrolle!).

Ableiten vor Transformieren: Ist ψ stückweise linear, ist ψ' stückweise konstant – viel einfacher zu transformieren. Mit partieller Integration ($\psi \rightarrow 0$ am Rand $\Rightarrow$ Randterme = 0):

$$\int \psi'(x) e^{-ikx} dx = ik \int \psi(x) e^{-ikx} dx,$$

also $\text{FT}[\psi] = \text{FT}[\psi']/(ik)$. Praktisch für Kasten-/Dreieck-Wellenpakete. Nützlich dabei: $\sin \theta = \frac{e^{i\theta} - e^{-i\theta}}{2i}$, um Exponentiale zu $\sin^2$ zusammenzufassen.

Für reelles ψ ist $\phi(-p) = \phi^*(p)$ (allgemeine FT-Eigenschaft), also $|\phi(p)|^2$ stets gerade $\Rightarrow \langle \hat{p} \rangle = 0$ auch direkt im Impulsraum sichtbar (ungerader Integrand über symmetrisches Intervall).

Orts- $\leftrightarrow$ Impulsraum-Dualität: Im Ortsraum ist $\hat{p} \hat{x} \hat{p} \hat{x}$; im Impulsraum ist spiegelbildlich $\hat{x} \hat{p} \hat{x} \hat{p}$. Beide folgen aus demselben Trick, den Multiplikator im Exponentialkern $e^{\pm i\vec{p}\vec{x}/\hbar}$ durch Ableiten nach der jeweils anderen Variablen zu erzeugen ($\vec{x} e^{i\vec{p}\vec{x}/\hbar} = -i\hbar \nabla_{\vec{p}} e^{i\vec{p}\vec{x}/\hbar}$ bzw. $\vec{p} e^{i\vec{p}\vec{x}/\hbar} = -i\hbar \nabla_{\vec{x}} e^{i\vec{p}\vec{x}/\hbar}$), gefolgt von partieller Integration (Randterme verschwinden, da $\psi, \phi \rightarrow 0$ im Unendlichen).

13 Gaußsche Wellenpakete & freie Zeitentwicklung

Ein Gauß-Wellenpaket im k -Raum, $\phi(k, 0) \propto e^{-\sigma^2(k-k_0)^2}$, hat im Ortsraum ebenfalls Gaußform, $\psi(x, 0) \propto e^{-x^2/4\sigma^2 + ik_0 x}$ (Gauß-Integral mit quadratischer Ergänzung, Abschnitt 11).

Freies Teilchen ($\hat{H} = \hat{p}^2/2m$): Ebene Wellen sind Impulseigenzustände, $\hat{H}$ also diagonal im k -Raum mit $E(k) = \hbar^2 k^2/2m$. Die Zeitentwicklung fügt nur eine Phase hinzu, $\phi(k, t) = \phi(k, 0)e^{-iE(k)t/\hbar}$, daher ist $|\phi(k, t)|^2 = |\phi(k, 0)|^2$ **zeitunabhängig** – die Impulsverteilung ist erhalten ($[\hat{H}, \hat{p}] = 0$). Im Ortsraum dagegen zerfließt das Paket: mit $\tau := 2m\sigma^2/\hbar$ und $v_0 := \hbar k_0/m$ (klassische Gruppengeschwindigkeit) gilt

$$\rho(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\bar{\sigma}^2}} \exp\left(-\frac{(x - v_0 t)^2}{2\bar{\sigma}^2}\right),$$

$$\bar{\sigma}^2(t) = \sigma^2\left(1 + \frac{t^2}{\tau^2}\right).$$

Also $\langle \hat{x} \rangle = v_0 t$, $(\Delta x)^2 = \bar{\sigma}^2(t)$ (wächst), aber $\langle \hat{k} \rangle = k_0$, $(\Delta k)^2 = 1/(4\sigma^2)$ (konstant!) – **nur die Ortsbreite zerfließt**, die Impulsbreite bleibt für ein freies Teilchen immer erhalten.

Rechenweg: Zeitentwicklung im k -Raum ausführen (trivial, Phase), dann zurück-Fourier-transformieren mit demselben Gauß-Integral-Trick wie bei $t = 0$, nur mit komplexer, zeitabhängiger effektiver Breite $\bar{\sigma}^2 = \sigma^2(1 + t^2/\tau^2)$. Danach $|\psi|^2$ bilden und in x quadratisch ergänzen, um wieder eine saubere Gaußform zu erhalten.

Echtes Minimum-Unschärfe-Paket: $\Delta x(t)\Delta p = \frac{\hbar}{2}\sqrt{1 + t^2/\tau^2}$. Bei $t = 0$ ist dies $= \hbar/2$: das Gauß-Paket sättigt die Unschärferelation (Abschnitt 8) **nicht-trivial** ($\Delta x, \Delta p$ beide $\neq 0$, im Gegensatz zur trivialen Sättigung $\Delta A = 0$ in Eigenzuständen). Für $t \neq 0$ wächst das Produkt wieder über das Minimum – die Minimal-Unschärfe-Eigenschaft gilt nur momentan bei $t = 0$, getrieben allein durch das Wachstum von Δx .

14 Streuung an Potentialbarrieren: Tunneleffekt

Ansatz für ein stückweise konstantes Potential (z.B. Barriere der Höhe V_0 , Breite a): ebene Wellen in jedem Bereich, $\psi'' = -\frac{2m(E-V)}{\hbar^2}\psi$, also $k = \sqrt{2mE}/\hbar$ außerhalb und $k' = \sqrt{2m(E - V_0)}/\hbar$ innerhalb der Barriere.

Anschlussbedingungen: ψ und ψ' müssen an jeder Stelle stetig sein, an der V höchstens einen endlichen Sprung hat (sonst wäre ψ'' nicht wohldefiniert). Liefert pro Grenzfläche zwei lineare Gleichungen für die Koeffizienten – Standardrezept für alle stückweise-konstanten Potentialprobleme (Stufen, Töpfe, Barrieren).

Gebunden $\leftrightarrow$ ungebunden per analytischer Fortsetzung: Für $E < V_0$ ist k' imaginär, Substitution $k' \rightarrow i\kappa'$ ($\kappa' \in \mathbb{R}$) macht die Lösung im Barrierebereich exponentiell statt oszillatorisch. Formeln für $E > V_0$ folgen aus denen für $E < V_0$ durch Rücksubstitution $\kappa' \rightarrow -ik'$ (und $\sinh(\kappa'a) \rightarrow -i\sin(k'a)$) – man muss nicht zweimal rechnen.

Transmission/Reflexion (einlaufend von links, $E < V_0$):

$$|T|^2 = \left[1 + \frac{(k^2 + \kappa'^2)^2}{4k^2\kappa'^2} \sinh^2(\kappa'a)\right]^{-1}, \quad |R|^2 = 1 - |T|^2$$

($|R|^2 + |T|^2 = 1$ immer – Wahrscheinlichkeitserhaltung/Kontinuitätsgleichung, Abschnitt 9, für reelles $V(x)$). Für $E > V_0$: $\sinh^2(\kappa'a) \rightarrow -\sin^2(k'a)$, $\kappa'^2 \rightarrow -k'^2$, also $|T|^2 = \left[1 + \frac{(k^2 - k'^2)^2}{4k^2k'^2} \sin^2(k'a)\right]^{-1}$ – oszilliert mit **Resonanzen** $|T|^2 = 1$ bei $k'a = n\pi$ (Fabry-Pérot-artige konstruktive Interferenz); selbst für $E > V_0$ also i.A. $|T|^2 < 1$ (rein quantenmechanische Reflexion, klassisch immer $|T|^2 = 1$).

Tunneln ist nicht-perturbativ in $\hbar$: Für $E < V_0$ und $\hbar \rightarrow 0$ divergiert $\kappa' \propto 1/\hbar$, also $|T|^2 \sim e^{-2\kappa'a} = e^{-C/\hbar} \rightarrow 0$ – schneller als jede Potenz von $\hbar$. Klassischer Limes: keine Tunnelwahrscheinlichkeit (Korrespondenzprinzip), aber die $e^{-C/\hbar}$ -Form zeigt, dass Tunneleffekte grundsätzlich nicht in einer Potenzreihe/Störungstheorie in $\hbar$ erfasst werden können (Muster, das bei WKB und Instantonen wiederkehrt).

14.1 Delta-Potential

Für $V(x) = -q\delta(x)$ ($q > 0$): Schrödingergleichung über $[-\epsilon, \epsilon]$ integrieren liefert die Anschlussbedingung für einen **unendlich** scharfen Potentialsprung (Verallgemeinerung der Regel für endliche Sprünge aus Abschnitt 14):

ψ bleibt stetig, aber ψ' springt:

$$\psi'(0^+) - \psi'(0^-) = -\frac{2mq}{\hbar^2}\psi(0).$$

Gebundener Zustand ($E < 0$): Ansatz $\psi \propto e^{-\kappa|x|}$ (Stetigkeit erzwingt gleiche Amplitude beidseitig); die Sprungbedingung liefert eine **eindeutige** lineare Gleichung für $\kappa = mq/\hbar^2$ – ein attraktives δ -Potential hat **immer genau einen** gebundenen Zustand, $E_0 = -mq^2/2\hbar^2$, notwendig gerade (einziger, nicht entarteter Zustand eines symmetrischen Potentials, Abschnitt 15).

Streuung ($E > 0$): Kontinuum von Streuzuständen für jedes $E > 0$. Mit $\kappa_0 = mq/\hbar^2$ (derselbe Wert wie beim gebundenen Zustand!):

$$|T|^2 = \frac{k^2}{k^2 + \kappa_0^2}, \quad |R|^2 = \frac{\kappa_0^2}{k^2 + \kappa_0^2} \quad (|R|^2 + |T|^2 = 1).$$

$E \rightarrow 0$: $|T|^2 \rightarrow 0$ (totale Reflexion); $E \rightarrow \infty$: $|T|^2 \rightarrow 1$ (nahezu vollständige Transmission). Anders als bei der Barriere endlicher Breite (Abschnitt 14): **monotones**, nicht-resonantes Verhalten – dem δ -Potential fehlt die zweite Längenskala (a), die Interferenz/Resonanzen ermöglichen würde.

15 Symmetrien: Der Paritätsoperator

Definition: $\hat{P}|\vec{x}\rangle = |-\vec{x}\rangle$, $\hat{P}|\vec{p}\rangle = |-\vec{p}\rangle$.

$\hat{P}^2 = \mathbb{K}$ (zweimal spiegeln = Identität). Da $\hat{P}$ die (verallgemeinerte) Orts-ONB bijektiv auf sich selbst abbildet und $\langle -\vec{x} | -\vec{y} \rangle = \langle \vec{x} | \vec{y} \rangle$ erhält, ist $\hat{P}$ **unitär** (Blatt-1-Kriterium); mit $\hat{P}^2 = \mathbb{K}$ folgt $\hat{P}^\dagger = \hat{P}^\dagger \hat{P} \hat{P} = \hat{P}$: $\hat{P}$ ist **selbstadjungiert**. **Eigenwerte** ± 1 (aus $\hat{P}^2 = \mathbb{K}$, wie bei Projektoren aus $\hat{P}^2 = \hat{P}$, Abschnitt 4; auch direkt aus unitär+reell).

Antikommutiert mit Ort und Impuls: $\{\hat{P}, \hat{x}\} = \{\hat{P}, \hat{p}\} = 0$ (aus $\hat{P}\hat{x}|\vec{x}\rangle = \vec{x}|-\vec{x}\rangle = -\hat{x}\hat{P}|\vec{x}\rangle$, analog für $\hat{p}$). Für ein **symmetrisches Potential** $V(\hat{x}) = V(-\hat{x})$ gilt dann $[\hat{H}, \hat{P}] = 0$: der kinetische Term kommutiert automatisch (zweifaches Antikommutieren hebt sich auf), und $\hat{P}V(\hat{x}) = V(\hat{x})\hat{P}$ ist gerade die Aussage, dass V nur gerade Potenzen von $\hat{x}$ enthält.

Konsequenz: Da $\hat{H}, \hat{P}$ selbstadjungiert kommutieren (Abschnitt 4), können Energieeigenfunktionen bei symmetrischem Potential immer mit definierter Parität gewählt werden; bei nicht-entartetem Spektrum (häufig in 1D) **müssen** sie es sogar automatisch haben. Nützt man das aus ($\cos/\sin$ - statt $e^{\pm ikx}$ -Ansatz), sparen Integrale über ungerade $\times$ gerade Integranden sich von selbst weg (Symmetrieargument, Blatt 1).

16 Gebundene Zustände: Potentialtopf & harmonischer Oszillator

16.1 Unendlicher Potentialtopf

Grenzwertbildung für Randbedingungen: Bei endlicher Höhe $V_0 > E$ klingt ψ außerhalb exponentiell mit $\kappa = \sqrt{2m(V_0 - E)}/\hbar$ ab (Normierbarkeit verwirft die divergierende Lösung). Für $V_0 \rightarrow \infty$ geht $\kappa \rightarrow \infty$, die Abklinglänge $\rightarrow 0$: es bleibt die **Dirichlet-Randbedingung** $\psi(\pm a) = 0$ (aber ψ' ist bei einem echten unendlichen Sprung nicht mehr stetig).

Mit Parität (Abschnitt 15, symmetrischer Topf) getrennter Ansatz $\psi^{(+)} = A \cos(kx)$, $\psi^{(-)} = B \sin(kx)$; Randbedingung liefert $k_n^{(+)} = \frac{(2n+1)\pi}{2a}$, $k_n^{(-)} = \frac{(n+1)\pi}{a}$ ($n = 0, 1, 2, \dots$), also

$$E_n^{(+)} = \frac{\hbar^2 \pi^2 (2n+1)^2}{8ma^2}, \quad E_n^{(-)} = \frac{\hbar^2 \pi^2 (n+1)^2}{2ma^2}.$$

Kombiniert: $E_\ell \propto \ell^2$ für $\ell = 1, 2, 3, \dots$ (ungerade $\ell \rightarrow$ gerade Parität, gerade $\ell \rightarrow$ ungerade Parität) – **alle Energien verschieden, 1D gebundene Zustände sind nie entartet** (allgemeines Faktum, bestätigt Abschnitt 15: definierte Parität ist hier erzwungen, nicht nur möglich). Grundzustand: $\ell = 1$, gerade Parität.

16.2 Harmonischer Oszillator

$\hat{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(\hat{a} + \hat{a}^\dagger)$, $\hat{p} = i\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}(\hat{a}^\dagger - \hat{a})$, mit $[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1$.

Erwartungswerte in $|n\rangle$: Jeder Term linear in $\hat{a}$ oder $\hat{a}^\dagger$ allein hat Erwartungswert 0 in $|n\rangle$ (ändert Teilchenzahl um ± 1 , Orthogonalität killt ihn); nur der "diagonale" $\hat{a}^\dagger \hat{a} \rightarrow n$ -Term und Konstanten überleben in $\hat{x}^2, \hat{p}^2$.

$$\langle \hat{x} \rangle_n = \langle \hat{p} \rangle_n = 0,$$

$$\langle \hat{x}^2 \rangle_n = \frac{\hbar}{m\omega} \left(n + \frac{1}{2} \right), \quad \langle \hat{p}^2 \rangle_n = m\hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right).$$

Virialsatz: $\langle \hat{T} \rangle_n = \langle V \rangle_n = \frac{\hbar\omega}{2} \left(n + \frac{1}{2} \right) = \frac{1}{2} E_n$ – kinetische und potentielle Energie je exakt zur Hälfte. Unschärfeprodukt $\Delta x \Delta p = \hbar \left(n + \frac{1}{2} \right)$: der **Grundzustand** ($n = 0$) ist ein echtes Minimum-Unschärfe-Paket (er ist ein Gauß-Paket, Abschnitt 13), höhere n sättigen nicht mehr.

Heisenberg-Bild für $\hat{a}$: Aus $[\hat{H}, \hat{a}] = -\hbar\omega \hat{a}$ (mit $\hat{H} = \hbar\omega(\hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{1}{2})$) und $\frac{d\hat{a}_H}{dt} = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{a}_H]$ folgt $\hat{a}_H(t) = \hat{a} e^{-i\omega t}$ – Standardtechnik: Heisenberg-Gleichung für Erzeuger/Vernichter aufstellen, meist einfacher als für $\hat{x}, \hat{p}$ direkt.

Stationär vs. oszillierend: Für einen *reinen* Eigenzustand $|n\rangle$ ist $\langle \hat{x} \rangle_t = 0$ für *alle* t (stationärer Zustand, nur globale Phase). Erst eine **Überlagerung** $\alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$ liefert $\langle \hat{x} \rangle_t \propto \cos(\omega t)$ – oszillierend mit der "Bohr-Frequenz" $(E_1 - E_0)/\hbar$, exakt wie die klassische Bewegung (Ehrenfest, hier exakt wegen quadratischem Potential). Dasselbe Muster wie die Zwei-Niveau-Oszillation (Abschnitt 6), nur jetzt in $\langle \hat{x} \rangle$ statt einer Wahrscheinlichkeit sichtbar: **nur Überlagerungen verschiedener Energien zeigen zeitabhängige Erwartungswerte.**

16.3 Kohärente Zustände

Für $z \in \mathbb{C}$: $|z\rangle := e^{-|z|^2/2} \sum_n \frac{z^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle$.

Eigenzustand von $\hat{a}$: $\hat{a}|z\rangle = z|z\rangle$ (Eigenwert z i. A. komplex – $\hat{a}$ ist *nicht* selbstadjungiert, daher kein Widerspruch zu reellen Eigenwerten selbstadjungierter Operatoren, Abschnitt 4). Äquivalent: $|z\rangle = e^{-|z|^2/2} e^{z\hat{a}^\dagger} |0\rangle$ (aus $|n\rangle = (\hat{a}^\dagger)^n |0\rangle / \sqrt{n!}$). Normiert, $\langle z|z\rangle = 1$, aber **nicht orthogonal**: $\langle z_1|z_2\rangle = \exp(-\frac{1}{2}|z_1 - z_2|^2 + i \operatorname{Im}(z_1^* z_2)) \neq 0$ – kohärente Zustände sind übervollständig, keine ONB.

Minimum-Unschärfe für jedes z : $\langle \hat{x} \rangle = \sqrt{2\hbar/m\omega} \operatorname{Re}(z)$, $\langle \hat{p} \rangle = \sqrt{2m\hbar\omega} \operatorname{Im}(z)$, aber $(\Delta x)^2 = \hbar/2m\omega$, $(\Delta p)^2 = m\hbar\omega/2$ **unabhängig von z** (gleich den Grundzustandswerten!) $\Rightarrow \Delta x \Delta p = \hbar/2$ *immer*. Kohärente Zustände verallgemeinern das Grundzustands-Gaußpaket (Abschnitt 13) auf beliebige Ort/Impuls-Erwartungswerte, ohne die Minimalunschärfe zu verlieren.

Erzeugung via Verschiebungsoperator: $\hat{T}(a)|0\rangle = |z = \mu\rangle$ mit reellem $\mu = a\sqrt{m\omega/2\hbar}$ (BCH-Spezialfall auf $\hat{T}(a) = e^{\mu(\hat{a}^\dagger - \hat{a})}$ anwenden, da $[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1$ zentral ist, Abschnitt 5, dann $\hat{a}|0\rangle = 0$ ausnutzen) – der translatierte Grundzustand *ist* ein kohärenter Zustand mit reellem z , ein bei $x = a$ ruhendes Gauß-Paket ($\langle \hat{p} \rangle = 0$, da $\operatorname{Im}(\mu) = 0$).

Zeitentwicklung bleibt kohärent: $|z_0\rangle \rightarrow e^{-i\omega t/2} |z(t)\rangle$ mit $z(t) = z_0 e^{-i\omega t}$ (aus $E_n = \hbar\omega(n + \frac{1}{2})$, Phase pro Fock-Zustand). Mit $z_0 = \rho e^{i\phi}$: $\langle \hat{x} \rangle_t, \langle \hat{p} \rangle_t \propto \cos(\phi - \omega t), \sin(\phi - \omega t)$ – durchläuft *exakt* die klassische Phasenraumbahn, während $\Delta x, \Delta p$ konstant und minimal bleiben. Daher **"quasiklassischer Zustand"**: die bestmögliche Annäherung eines Quantenzustands an ein klassisches Teilchen im harmonischen Potential.

17 Drehimpuls

17.1 Rotationsgeneratoren ($\mathfrak{so}(3)$)

Für reell **antisymmetrisches** X ($X^T = -X$) ist $T = e^X$ **orthogonal** ($T^T T = \mathbb{1}$) – reelles Analogon zu Blatt 1: dort "hermitesch $\iff e^{i\alpha \hat{A}}$ unitär", hier "antisymmetrisch $\iff e^X$ orthogonal" (identischer Beweis: $T^T = e^{X^T} = e^{-X}$, dann $e^{-X} e^X = \mathbb{1}$ ohne BCH, da dieselbe Basis-Matrix X).

Generatoren $(T^a)_{bc} = -i\epsilon_{abc}$ erfüllen $\operatorname{Tr}(T^a T^b) = 2\delta^{ab}$ und $[T^a, T^b] = i\epsilon_{abc} T^c$ ($\mathfrak{so}(3)$ -Algebra). $e^{i\varphi T^a}$ ist die Drehmatrix um Winkel φ um die a -Achse.

17.2 Bahndrehimpuls

Mit $\hat{L} = \hat{x} \times \hat{p}$, $\hat{L}_i = \epsilon_{ikl} \hat{x}_k \hat{p}_l$:

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

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

$\hat{x}, \hat{p}$ transformieren als Vektoren unter $\hat{L}_i$. $[\hat{L}_i, \hat{L}_j]$ **hat dieselbe $\mathfrak{so}(3)$ -Struktur wie $[T^a, T^b]$** (Abschnitt 17.1) – kein Zufall: $\hat{L}_i/\hbar$ erzeugt Drehungen auf Zuständen, T^a auf Vektoren. **Achtung:** anders als $[\hat{x}_i, \hat{p}_j] = i\hbar \delta_{ij}$ (Zahl) ist $[\hat{L}_i, \hat{L}_j]$ selbst wieder ein *Operator* – Drehimpulskomponenten sind nie gleichzeitig scharf messbar (außer in Spezialfällen wie $\ell = 0$).

Leiteroperatoren $\hat{L}_\pm = \hat{L}_x \pm i\hat{L}_y$:

$$[\hat{L}^2, \hat{L}_k] = 0, \quad [\hat{L}^2, \hat{L}_\pm] = 0,$$

$$[\hat{L}_z, \hat{L}_\pm] = \pm \hbar \hat{L}_\pm, \quad [\hat{L}_+, \hat{L}_-] = 2\hbar \hat{L}_z$$

(direkt aus $[\hat{L}_i, \hat{L}_j] = i\hbar \epsilon_{ijk} \hat{L}_k$, Bilinearität). Wirkung: $\hat{L}_\pm |\ell, m\rangle = \hbar \sqrt{\ell(\ell+1) - m(m \pm 1)} |\ell, m \pm 1\rangle$ – identisches Rezept wie Leiteroperatoren des harmonischen Oszillators (Abschnitt 16), nur mit anderem Spektrum.

17.3 Unschärfe des Drehimpulses

Für einen simultanen Eigenzustand $|\ell, m\rangle$ von $\hat{L}^2, \hat{L}_z$: da $\hat{L}_\pm$ den Zustand auf $|\ell, m \pm 1\rangle \perp |\ell, m\rangle$ abbildet, gilt $\langle \hat{L}_x \rangle = \langle \hat{L}_y \rangle = 0$ und (aus $\hat{L}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2$)

$$(\Delta L_x)^2 = (\Delta L_y)^2 = \frac{\hbar^2}{2} [\ell(\ell+1) - m^2], \quad (\Delta L_z)^2 = 0.$$

(L_y, L_z) und (L_z, L_x) : beide Seiten der Unschärferelation sind Null ($\Delta L_z = 0$ und $\langle \hat{L}_x \rangle = \langle \hat{L}_y \rangle = 0$) – *triviale* Sättigung für *jeden* Zustand (wie Blatt 4). (L_x, L_y) : $(\Delta L_x)^2 (\Delta L_y)^2 \geq \frac{1}{4} \hbar^2 \langle \hat{L}_z \rangle^2$ ist eine *echte* Ungleichung, **gesättigt nur bei** $m = \pm \ell$ (Extremalzustände) – eine *nicht-triviale* Sättigung (beide Seiten $\neq 0$), analog zu den kohärenten Zuständen (Abschnitt 16.3): der "klassischste" Zustand bzgl. Rotation um die z -Achse.

17.4 Zentralpotentiale & Beispiel 3D-Oszillator

Rotationsskalare kommutieren mit $\hat{L}$: $\hat{p}^2 = \sum_j \hat{p}_j^2$ und jede Funktion $V(\hat{r})$ von $\hat{r} = |\hat{x}|$ sind Summen/Funktionen von Skalarprodukten – mit $[\hat{L}_i, \hat{p}_j] = i\hbar \epsilon_{ijk} \hat{p}_k$ liefert Kontraktion antisymmetrisch $\times$ symmetrisch = 0: $[\hat{L}_i, \hat{p}^2] = 0$, analog $[\hat{L}_i, \hat{x}^2] = 0$. Für **jedes Zentralpotential** $\hat{H} = \hat{p}^2/2m + V(\hat{r})$ also $[\hat{H}, \hat{L}_i] = 0 \forall i$, insbesondere $[\hat{H}, \hat{L}^2] = [\hat{H}, \hat{L}_z] = 0$: $\hat{H}, \hat{L}^2, \hat{L}_z$ bilden einen **VSKO** (Abschnitt 4), gemeinsame Eigenbasis $|n\ell m\rangle$ mit Eigenwerten $E_n, \hbar^2 \ell(\ell+1), \hbar m$.

3D-isotroper Oszillator als Beispiel: $\hat{L}_k = -i\hbar \epsilon_{kij} \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j$ (ein $\hat{a}^\dagger$, ein $\hat{a}$ pro Term $\Rightarrow$ erhält die Gesamtteilchenzahl $N = \sum n_i$). Um die $|n\ell m\rangle$ -Basis in einem entarteten N -Unterraum zu finden: $\hat{L}_z$ als Matrix *innerhalb* des Unterraums aufstellen und diagonalisieren (Standardrezept, Abschnitt 4) – die Eigenvektoren sind automatisch auch $\hat{L}^2$ -Eigenvektoren (VSKO-Garantie), oft sogar trivial, wenn $\hat{L}^2$ auf dem ganzen Unterraum proportional zur Identität ist. Liefert konkret die unitäre Transformation zwischen der kartesischen Basis $|n_1 n_2 n_3\rangle$ und der sphärischen Basis $|n\ell m\rangle$.

17.5 Vektoroperatoren als $\ell = 1$ -Kombinationen

x, y, z transformieren als Komponenten eines Vektors unter Drehungen und sind (mal r) genau die $\ell = 1$ -Kugelflächenfunktionen: $z \propto r Y_1^0, x \pm iy \propto r Y_1^{\mp 1}$. Jede reelle Linearkombination $ax + by + cz$ liegt daher *automatisch vollständig* im $\ell = 1$ -Unterraum – ohne Rechnung erkennbar.

m -Wahrscheinlichkeiten ablesen: Die sphärischen Komponenten eines Vektors $\vec{a} = (a_x, a_y, a_z)$, $a_0 = a_z, a_{\pm 1} = \mp \frac{1}{\sqrt{2}}(a_x \pm ia_y)$, bilden eine **unitäre** (normerhaltende) Transformation, $\sum_m |a_m|^2 = |\vec{a}|^2$ (Blatt 2/4-Muster). Für $\psi \propto (\vec{a} \cdot \hat{x}) f(r)$ ist $P(m) = |a_m|^2 / |\vec{a}|^2$ – direkt ablesbar, keine Kugelflächenfunktionen-Integrale nötig.

17.6 Addition von Drehimpulsen (Clebsch-Gordan)

Für zwei unabhängige Drehimpulse $\hat{S}_1 (s_1), \hat{S}_2 (s_2)$ und $\hat{J} = \hat{S}_1 + \hat{S}_2$ zerfällt der $(2s_1 + 1)(2s_2 + 1)$ -dimensionale Produktraum in $\hat{J}^2, \hat{J}_z$ -Multipletts mit

$$j \in \{|s_1 - s_2|, |s_1 - s_2| + 1, \dots, s_1 + s_2\}, \quad \dim = 2j + 1 \text{ pro } j$$

(**Clebsch-Gordan-Reihe**). Konsistenzcheck: $\sum_j (2j + 1) = (2s_1 + 1)(2s_2 + 1)$.

CG-Koeffizienten ohne Tabelle herleiten: (1) Der höchste Zustand $|j_{\max}, j_{\max}\rangle = |s_1, s_1; s_2, s_2\rangle$ ist *eindeutig* (einziger Produktbasiszustand mit $m = s_1 + s_2$) – reines Randargument, keine Rechnung. (2) Mit $\hat{J}_- = \hat{S}_{1-} + \hat{S}_{2-}$ heruntersteigen (Leiterformel $\hat{J}_- |j, m\rangle = \hbar \sqrt{j(j+1) - m(m-1)} |j, m-1\rangle$, Abschnitt 17) liefert sukzessive alle $|j_{\max}, m\rangle$. (3) Den nächsttieferen Multiplett-Zustand $|j_{\max} - 1, j_{\max} - 1\rangle$ findet man durch **Orthogonalität** zum (in Schritt 2 erzeugten) $|j_{\max}, j_{\max} - 1\rangle$ innerhalb desselben (i. A. mehrdimensionalen) m -Unterraums plus Normierung – dann wieder mit $\hat{J}_-$ heruntersteigen, usw.

Spin-Spin-Kopplung: Da $\hat{S}_{1i}$ und $\hat{S}_{2j}$ auf verschiedenen Faktoren wirken (kommutieren), gilt beim Ausquadrieren ohne Ordnungsproblem

$$\hat{S}_1 \cdot \hat{S}_2 = \frac{1}{2} (\hat{J}^2 - \hat{S}_1^2 - \hat{S}_2^2)$$

– diagonalisiert *exakt* in der $|j, m\rangle$ -Basis, ganz ohne Störungstheorie. Für zwei Spin- $\frac{1}{2}$: **Singulett** $j = 0$ (antisymmetrisch, $\frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle)$) und **Triplett** $j = 1$ (symmetrisch, 3-fach entartet). Jeder Hamiltonian $\hat{H} \propto \hat{S}_1 \cdot \hat{S}_2$ ist unter *allen* Drehungen skalar ($[\hat{H}, \hat{J}] = 0$, nicht nur $[\hat{H}, \hat{J}_z] = 0$), daher hängt E nur von j ab, nie von m – Standardstruktur der Heisenberg-Austauschwechselwirkung bzw. Hyperfeinstruktur.

18 Spin-1/2 & Pauli-Matrizen

Für $j = \frac{1}{2}$ ($\hat{J} = \hat{S} = \frac{\hbar}{2} \vec{\sigma}$) folgen die Pauli-Matrizen direkt aus der abstrakten Drehimpulsalgebra (Abschnitt 17) angewendet auf $|\uparrow\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, |\downarrow\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ (Wirkung von $\hat{J}_3, \hat{J}_\pm$ auswerten, dann $\hat{J}_1 = \frac{1}{2}(\hat{J}_+ + \hat{J}_-)$ etc.):

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

Kernidentität (aus $[\sigma_i, \sigma_j] = 2i\epsilon_{ijk}\sigma_k$, das direkt aus $[\hat{J}_i, \hat{J}_j] = i\hbar \epsilon_{ijk} \hat{J}_k$ folgt, plus $\{\sigma_i, \sigma_j\} = 2\delta_{ij}\mathbb{K}$, direkt an den Matrizen nachgerechnet):

$$\sigma_i \sigma_j = \delta_{ij} \mathbb{K} + i\epsilon_{ijk} \sigma_k.$$

Allgemeiner Trick dahinter: $AB = \frac{1}{2}\{A, B\} + \frac{1}{2}[A, B]$ – jedes Produkt zerfällt in (Anti-)Kommutator-Anteil.

Für Vektoren $\vec{a}, \vec{b} \in \mathbb{C}^3$:

$$(\vec{\sigma} \cdot \vec{a})(\vec{\sigma} \cdot \vec{b}) = (\vec{a} \cdot \vec{b})\mathbb{I} + i\vec{\sigma} \cdot (\vec{a} \times \vec{b}).$$

Mit $\vec{a} = \vec{b} = \vec{n}$ ($|\vec{n}| = 1$, reell): $(\vec{n} \cdot \vec{\sigma})^2 = \mathbb{I} - i(\vec{n} \cdot \vec{\sigma})$ verhält sich wie die imaginäre Einheit in der Potenzreihe (dieselbe Technik wie Blatt 9, Aufgabe 1c: $M^2 \propto \mathbb{I} \Rightarrow$ Exponentialreihe kollabiert auf $\cos/\sin$):

$$e^{i\alpha(\vec{n} \cdot \vec{\sigma})} = \mathbb{I} \cos \alpha + i(\vec{n} \cdot \vec{\sigma}) \sin \alpha.$$

Spin-Rotationsoperator $\hat{D}(\vec{n}, \alpha) = e^{-\frac{i}{\hbar} \alpha \vec{n} \cdot \vec{S}} = e^{-\frac{i\alpha}{2} \vec{n} \cdot \vec{\sigma}} = \mathbb{I} \cos \frac{\alpha}{2} - i(\vec{n} \cdot \vec{\sigma}) \sin \frac{\alpha}{2}$. **Berühmte 4π -Periodizität:** $\hat{D}(\vec{n}, 2\pi) = -\mathbb{I}$ (jeder Spin- $\frac{1}{2}$ -Zustand wechselt nach 360-Drehung das Vorzeichen!), $\hat{D}(\vec{n}, 4\pi) = +\mathbb{I}$ (erst nach 720 wieder der ursprüngliche Zustand) – Ursprung: $SU(2)$ überlagert $SO(3)$ zweifach.

19 Mehrteilchensysteme: Tensorprodukt & Verschränkung

Der Hilbertraum eines Zwei-Teilchen-Systems ist das **Tensorprodukt** $\mathcal{H} = \mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$, Basis $\{|i\rangle_A \otimes |j\rangle_B\}$. Ein Zustand $|\psi\rangle = \sum_{ij} c_{ij} |i\rangle_A |j\rangle_B$ heißt **separabel** (unverschränkt), wenn er sich als Produkt $|\psi\rangle = |\psi_A\rangle \otimes |\psi_B\rangle$ schreiben lässt – äquivalent: die Koeffizientenmatrix (c_{ij}) faktorisiert, $c_{ij} = a_i b_j$ (Rang 1). Sonst heißt $|\psi\rangle$ **verschränkt**.

Separabilitätstest ohne Umformen: Für einen 2×2 -Koeffizientenblock reicht das Rang-1-Kriterium $c_{\uparrow\uparrow} c_{\downarrow\downarrow} \stackrel{!}{=} c_{\uparrow\downarrow} c_{\downarrow\uparrow}$ (sonst Widerspruchsbeweis: $c_{ij} = a_i b_j$ ansetzen und alle vier Gleichungen gleichzeitig zu erfüllen versuchen). Beispiel: $\frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle \pm |\downarrow\uparrow\rangle)$ (Singulett bzw. eine Triplett-Komponente, Abschnitt 17.6) ist *immer* verschränkt, unabhängig vom relativen Vorzeichen.

Messung an verschränkten Zuständen (EPR): Misst Alice ihre Observable an einem verschränkten $|\psi\rangle$, kollabiert der *gesamte* Zustand (auch Bobs Faktor) – Bobs nachfolgende Messung ist dadurch perfekt (anti-)korreliert mit Alices Ergebnis, und zwar unabhängig von der Messreihenfolge. **Trotzdem keine überlichtschnelle Informationsübertragung möglich (No-Communication-Theorem):** Alices eigenes Ergebnis ist zufällig und nicht kontrollierbar; Bobs *marginale* Statistik (gemittelt über Alices unbekanntes Ergebnis, ohne klassische Mitteilung) ist identisch zu der eines unverschränkten Zustands – die Korrelation wird erst durch nachträglichen (lichtgeschwindigkeitsbegrenzten) Vergleich beider Messprotokolle sichtbar. Das löst das EPR-"Paradoxon" auf, ohne die Kausalität zu verletzen.

20 Hellmann-Feynman-Theorem & Virialsatz

Für $\hat{H}(\lambda) |n\rangle = E_n(\lambda) |n\rangle$ (normiert):

$$\frac{\partial E_n}{\partial \lambda} = \left\langle \frac{\partial \hat{H}}{\partial \lambda} \right\rangle_n.$$

Beweisidee: $E_n = \langle n | \hat{H} | n \rangle$ ableiten; die beiden Terme mit $|\partial_\lambda n\rangle$ kombinieren sich zu $E_n \partial_\lambda \langle n | n \rangle = 0$ (Normierung ist λ -unabhängig) – übrig bleibt nur die explizite λ -Abhängigkeit von $\hat{H}$.

Virialsatz für homogenes $V(\lambda \vec{x}) = \lambda^k V(\vec{x})$: Mit $\psi_\lambda(\vec{x}) := \lambda^{3/2} \psi(\lambda \vec{x})$ (normiert, Substitution $\vec{y} = \lambda \vec{x}$) ist ψ_λ Eigenfunktion von $H(\lambda) = -\frac{\hbar^2}{2m\lambda^2} \nabla^2 + \lambda^k V(\vec{x})$ zum *selben* (von λ unabhängigen!) Eigenwert E wie ψ . Hellmann-Feynman bei $\lambda = 1$ mit $\partial_\lambda E = 0$ liefert direkt

$$2 \langle \hat{T} \rangle = k \langle \hat{V} \rangle$$

($k = 2$: harmonischer Oszillator, $\langle T \rangle = \langle V \rangle$, Blatt 7; $k = -1$: Coulomb, $2 \langle T \rangle = -\langle V \rangle$).

Geschickte Parameterwahl: Um $\langle 1/\hat{r} \rangle$ oder $\langle \hat{T} \rangle$ direkt zu bekommen, den Hamiltonoperator nicht künstlich umparametrisieren, sondern eine *bereits vorhandene* Konstante als λ auffassen, die nur in einem Term auftaucht (z.B. $\lambda = \alpha$ für den Coulomb-Term, $\lambda = m$ für den kinetischen Term beim Wasserstoffatom) – Hellmann-Feynman liefert den Erwartungswert dann ohne jede Integration, nur durch Differenzieren der *bekannten* Energieformel $E_n(\lambda)$.

21 Zeitunabhängige Störungstheorie

Für $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}'$ mit bekannten $\hat{H}_0 |n\rangle = E_n^{(0)} |n\rangle$ und "kleinem" $\hat{H}'$:

$$E_n^{(1)} = \langle n | \hat{H}' | n \rangle,$$

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

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

Merkregel: Für den *Grundzustand* ($n = 0$) ist $E_0^{(2)}$ immer ≤ 0 (jeder Nenner $E_0^{(0)} - E_k^{(0)} < 0$, da alle $E_k^{(0)} > E_0^{(0)}$, bei nicht-negativem Zähler) – der Grundzustand wird durch *jede* Störung in 2. Ordnung nach unten gedrückt. Für angeregte Zustände hat $E_n^{(2)}$ i. A. kein festes Vorzeichen.

Entartete Störungstheorie: Sind mehrere $|n\rangle$ zum selben $E_n^{(0)}$ entartet, muss man zuerst $\hat{H}'$ *innerhalb* des entarteten Unterraums diagonalisieren (Standardrezept, Abschnitt 4), bevor man die obigen Formeln anwendet – sonst sind Energienenner $E_n^{(0)} - E_k^{(0)} = 0$ für entartete $k \neq n$ und die Formeln divergieren. **Glücksfall:** Kommutiert $\hat{H}'$ mit einer bereits bekannten Erhaltungsgröße, die die Entartung mit-charakterisiert (z.B. $[\hat{H}_0, \hat{L}_z] = 0$ beim Zeeman-Effekt, $\hat{H}' \propto \hat{L}_z$), ist $\hat{H}'$ automatisch diagonal in der bestehenden $|n\ell m\rangle$ -Basis – dann liefert Störungstheorie 1. Ordnung sogar das *exakte* Ergebnis (kein Mischen in andere Zustände auf jeder Ordnung, da $[\hat{H}_0, \hat{H}'] = 0$).

Minimale Kopplung ans Magnetfeld: $\vec{p} \rightarrow \vec{p} - e\vec{A}$, $H = \frac{1}{2m}(\vec{p} - e\vec{A})^2 - e\phi$. In **Coulomb-Eichung** ($\nabla \cdot \vec{A} = 0$) vertauschen $\vec{p}$ und $\vec{A}(\vec{x})$ effektiv, sodass sich die Kreuzterme sauber zusammenfassen: $H = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + \frac{i\hbar e}{m} \vec{A} \cdot \nabla + \frac{e^2}{2m} \vec{A}^2 - e\phi$. Für homogenes $\vec{B} = B\vec{e}_z$ ($\vec{A} = -\frac{1}{2} \vec{r} \times \vec{B}$) und ohne den (quadratisch in B kleinen, "diamagnetischen") $\vec{A}^2$ -Term: $\hat{H} = \hat{H}_0 - \frac{e}{2m} B \hat{L}_z$ – der **Zeeman-Term**, linear in B , hebt die m -Entartung äquidistant auf, $\Delta E = e\hbar B / 2m$.

Exakt lösbare Störungen als Konsistenzcheck: Eine lineare Störung $\hat{H}' = c\hat{x}$ am harmonischen Oszillator ist exakt lösbar (quadratisch ergänzen $\rightarrow$ verschobener Oszillator plus Konstante, Eigenzustände via Translationsoperator, Abschnitt 13/16.3). Störungstheorie **bricht hier exakt bei 2. Ordnung ab** ($E_n^{(1)} = 0$ da $\langle \hat{x} \rangle_n = 0$, $E_n^{(2)}$ reproduziert exakt die Verschiebungskonstante) – nützlicher Test, um die PT-Formeln an einem lösbaren Fall zu prüfen.

Größenordnung von Kernstruktur-/Kontakteffekten ohne volles Integral: Für eine Störung $\delta V(r)$, die nur für $r \leq R \ll a_B$ von Null verschieden ist und aus Dimensionsgründen (jedes vernünftige Ladungsverteilungsmodell der Größe R) die Form $\delta V(r) = \frac{Ze^2}{R} g(r/R)$ hat: Mit $|\psi_{n\ell m}(r)|^2 \propto r^{2\ell}$ für $r \rightarrow 0$ (Zentrifugalbarriere, Abschnitt 17) skaliert nach der Substitution $r = Ru$

$$E_n^{(1)} = \int_0^R |\psi_{n\ell m}|^2 \delta V(r) r^2 dr \propto Z^{2\ell+4} \left(\frac{R}{a_B}\right)^{2\ell+2} \frac{e^2}{a_B}$$

– die Potenz $2\ell + 2$ ist direkt aus der Substitution ablesbar, *ohne* das Integral tatsächlich auszurechnen. Für $R/a_B \sim 10^{-4}$ (Kern vs. Bohr-Radius) ist der $\ell = 1$ -Effekt gegenüber $\ell = 0$ bereits um $(R/a_B)^2 \sim 10^{-8}$ unterdrückt – **s-Zustände dominieren jede Kernstruktur-/Kontakt Korrektur** (analog beim Fermi-Kontaktterm der Hyperfeinstruktur) bei weitem.

22 Ritzsches Variationsprinzip

Für jeden Zustand $|\psi\rangle$ gilt

$$E_0 \leq \frac{\langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle}$$

mit Gleichheit genau dann, wenn $|\psi\rangle \propto$ Grundzustand. **Beweis:** $|\psi\rangle = \sum_n c_n |n\rangle$ (Spektralsatz) einsetzen – der Quotient ist ein gewichteter Mittelwert $\sum_n w_n E_n$ der Eigenwerte mit $w_n = |c_n|^2 / \sum_m |c_m|^2 \geq 0$, $\sum_n w_n = 1$; da jedes $E_n \geq E_0$, ist auch der Mittelwert $\geq E_0$. Gleichheit erzwingt $w_n = 0$ für alle $E_n > E_0$.

Praktische Anwendung: Trial-Zustand $|\psi(\mu)\rangle$ mit freiem Parameter μ wählen (physikalisch motiviert, z.B. eine "effektive/abgeschirmte" Ladung statt der echten), $E(\mu) = \langle \psi(\mu) | \hat{H} | \psi(\mu) \rangle / \langle \psi(\mu) | \psi(\mu) \rangle$ berechnen und über μ minimieren – liefert eine unter Kontrolle stehende obere Schranke an E_0 (Beispiel Helium: 1-Parameter-Produktansatz aus wasserstoffartigen 1s-Orbitalen mit effektiver Kernladung μ liefert $\mu^* = Z - \frac{5}{16}$, d.h. die Elektronen schirmen sich gegenseitig ab – physikalisch sinnvoll interpretierbares Ergebnis, nicht nur eine Zahl).

23 Allgemeine Beweistechniken (Übersicht)

- **Potenzreihe statt Exponentialgesetz:** Operatoridentitäten mit $e^{\hat{A}}$ immer über die Definition als Potenzreihe zeigen, nicht durch Kombinieren von Exponenten (nur bei kommutierenden Operatoren erlaubt).
- **Einsen einschieben** ($\sum_i |e_i\rangle \langle e_i| = \mathbb{K}$) zur Umrechnung zwischen abstrakter und Basisdarstellung.
- **Symmetrieargumente** sparen Integrale: gerade/ungerade Integranden, Spiegelsymmetrie der Wahrscheinlichkeitsdichte.
- **Ableiten vor Fourier-Transformation** bei stückweise linearen/polynomialen Funktionen.
- **Variable unter dem Integral erzeugen:** $\vec{x}$ bzw. $\vec{p}$ im Integranden durch Ableiten des Exponentialkerns nach der konjugierten Variablen erzeugen, dann partiell integrieren – liefert Operatoren in der jeweils anderen Darstellung.

- **Divergente Reihen/Integrale regularisieren:** Konvergenzfaktor ($e^{-\varepsilon|n|}$ o.ä.) einführen, exakt aufsummieren/integrieren, erst am Schluss $\varepsilon \rightarrow 0$; Ergebnis mit einer bekannten Delta-Folge (Kasten, Gauß, Lorentz) vergleichen.
- **Nicht neu beweisen, was schon feststeht:** Ist eine neue Basis/Größe durch eine unitäre Transformation mit einer bereits bekannten ONB/Erhaltungsgröße verknüpft, folgen Orthonormalität, Vollständigkeit bzw. Erhaltung automatisch (vgl. Fourier-Reihen $\rightarrow$ reelle trigonometrische Basis, Abschnitt 2.2).
- **Matrizelement zweimal auswerten:** Denselben Ausdruck $\langle a | \hat{A} | b \rangle$ einmal direkt (Eigenwertgleichung anwenden) und einmal über die Kernformel für Adjungierte (Abschnitt 3) auswerten und gleichsetzen – liefert praktisch alle Standardsätze über selbstadjungierte Operatoren (reelle Eigenwerte, Orthogonalität der Eigenzustände, Abschnitt 4).
- **Diagonalisieren + Hermitizitäts-Check:** Charakteristisches Polynom lösen, Eigenvektoren bestimmen, normieren; bei hermitescher Matrix müssen Eigenwerte reell und Eigenvektoren (versch. Eigenwerte) orthogonal sein – sonst Rechenfehler.
- **Widerspruchsbeweis bei Entartungsfragen:** Um zu zeigen, dass ein Operator entartet sein muss, das Gegenteil annehmen (nicht entartet) und einen Widerspruch zu einer gegebenen Eigenschaft (z.B. Nicht-Kommutativität zweier anderer Observablen, Abschnitt 4) herleiten.
- **Basiswechsel von Operatoren:** $O^{(b)} = U^\dagger O^{(a)} U$ mit den $|b_i\rangle$ als Spalten von U (Abschnitt 3) – Standardformel, keine neue Herleitung pro Aufgabe nötig.
- **Operatoridentität $\rightarrow$ skalare Parameter-DGL:** Bei Ausdrücken wie $e^{\lambda \hat{A}} \hat{B} e^{-\lambda \hat{A}}$ oder $e^{t \hat{A}} e^{t \hat{B}}$ die Ableitung nach dem Skalar λ bzw. t bilden, resultierende DGL lösen/Taylor entwickeln (Hadamard-Lemma/BCH, Abschnitt 5) – vor dem Lösen prüfen, ob die auftretenden Operatoren zu verschiedenen Parameterwerten kommutieren (sonst ist naives Integrieren nicht erlaubt).
- **Diagonalisieren + Rücktransformieren** für Operatorfunktionen (insbes. Zeitentwicklung, Abschnitt 6): $f(\hat{H}) = \hat{U} f(\hat{H}_d) \hat{U}^\dagger$ statt $f(\hat{H})$ direkt in der ursprünglichen Basis zu berechnen.
- **Anschlussbedingungen bei stückweisen Potentialen:** ψ, ψ' stetig an jedem endlichen Sprung von V (Abschnitt 14); liefert pro Grenzfläche zwei lineare Gleichungen – Standardrezept für Stufen/Töpfe/Barrieren.
- **Analytische Fortsetzung zwischen Fallunterscheidungen:** Statt $E < V_0$ und $E > V_0$ (oder gebunden/ungebunden) separat zu rechnen, eine Formel mit $k' \rightarrow i\kappa'$ substituieren und am Ende zurücksostituieren ($\sinh \leftrightarrow \sin$, Abschnitt 14) – spart die Hälfte der Rechnung.
- **Parität statt roher Integration:** Bei symmetrischem Potential/Integrand erst Parität bestimmen (Abschnitt 15) – Integrale über ungerade $\times$ gerade Kombinationen sind automatisch Null, keine Rechnung nötig.
- **Leiteroperator-Erwartungswerte:** In $\langle n | (\dots) | n \rangle$ überleben nur Terme, die die Teilchenzahl netto unverändert lassen (gleich viele $\hat{a}$ wie $\hat{a}^\dagger$); alles andere verschwindet durch Orthogonalität, ohne Integration.
- **Heisenberg- statt Schrödinger-Rechnung:** Bei Fragen zu Kommutatoren/Operatordynamik oft einfacher, die Heisenberg-Gleichung für Erzeuger/Vernichter (oder $\hat{x}, \hat{p}$) zu lösen (Abschnitt 7) als Zustände direkt zeitentwickeln – beide Bilder liefern dieselben Erwartungswerte.
- **ϵ -Tensor-Identität nutzen:** $\epsilon_{ijk} \epsilon_{imn} = \delta_{jm} \delta_{kn} - \delta_{jn} \delta_{km}$ (summierter Index zuerst durch zyklisches Vertauschen herstellen) verwandelt Doppelsummen über Levi-Civita-Symbole in Kronecker-Deltas – Standardwerkzeug für Drehimpuls-/Vektoralgebra (Abschnitt 17). Bei Unsicher-

heit: direkte Komponentenrechnung (explizite $\hat{L}_x, \hat{L}_y, \hat{L}_z$) ist langsamer, aber weniger fehleranfällig.

- **Antisymmetrisch $\times$ symmetrisch = 0:** Kontrahiert man einen in zwei Indizes antisymmetrischen Tensor (z.B. ϵ_{ijk}) mit einem in denselben Indizes symmetrischen Ausdruck, verschwindet die Summe identisch – oft der schnellste Weg zu zeigen, dass ein Kommutator/eine Kontraktion Null ist (Abschnitt 17).
- **Hellmann-Feynman statt direkter Integration:** Um $\langle \hat{O} \rangle$ für einen Operator $\hat{O} = \partial \hat{H} / \partial \lambda$ zu bestimmen, eine *bereits vorhandene* Konstante in $\hat{H}$ als Parameter λ auffassen und die bekannte Eigenwertformel $E_n(\lambda)$ differenzieren (Abschnitt 20) – oft schneller als das Integral direkt auszurechnen.
- $M^2 \propto \mathbb{K} \Rightarrow$ **Euler-Formel:** Erfüllt ein Operator $M^2 = c\mathbb{K}$, bricht seine Exponentialreihe auf $\cos / \sin$ (oder $\cosh / \sinh$) ab – wiederkehrendes Muster bei Rotationsgeneratoren (Blatt 9), Pauli-Matrizen (Abschnitt 18) und Translationsooperatoren.
- **Exakt lösbare Störungen als Konsistenzcheck:** Wo möglich (z.B. lineare Störung am harmonischen Oszillator, Abschnitt 21), das Problem exakt lösen und mit der Störungsreihe vergleichen – deckt Vorzeichen-/Faktor-Fehler in der allgemeinen PT-Formel auf, bevor man sie auf ein wirklich unlösbares Problem anwendet.
- **Störungstheorie vs. Variationsprinzip:** Störungstheorie braucht ein bekanntes, nahes $\hat{H}_0$ und liefert (i. A.) keine kontrollierte obere/untere Schranke; das Ritzsche Variationsprinzip (Abschnitt 22) liefert *immer* eine kontrollierte obere Schranke an E_0 , auch ganz ohne exakt lösbares $\hat{H}_0$ in der Nähe – komplementäre Werkzeuge, je nachdem was verfügbar ist.
- **Dimensions- und Plausibilitätschecks:** Ergebnisse an bekannten Größenordnungen (Fermi-Temperatur, Suprafluid-Übergang etc.) oder Grenzfällen (hier: Stetigkeit von ψ an Segmentgrenzen) gegenprüfen.