**MMP II – FS 2017 – PROF. DR. HORST KNÖRRER**
**MUSTERLÖSUNG ZU SERIE 8**

## 1. Aufgabe: Rechnen mit Pauli–Matrizen

Einsetzen und Rechnen.

## 2. Aufgabe: Kreuzprodukt und Kommutator

Die zu beweisende Gleichung ist linear in $x$ und linear in $y$. Also genügt es sie für die Standardbasisvektoren $e_1, e_2, e_3$ zu beweisen. Es gilt

$$e_i \times e_j = \sum_{k=1}^{3} \epsilon_{ijk} e_k,$$

also mit den Rechenregeln aus Aufgabe 1:

$$F(e_i \times e_j) = \sum_{k=1}^{3} \epsilon_{ijk} F(e_k) = \sum_{k=1}^{3} \epsilon_{ijk} \frac{\sigma_k}{2} = \frac{1}{4i}[\sigma_i, \sigma_j] = -i[F(e_i), F(e_j)].$$

## 3. Aufgabe: Spur, Exponentialfunktion und Tensorprodukt

Es gilt

$$e^{A\otimes I + I\otimes B} = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{1}{l!}(A\otimes I + I\otimes B)^l$$

Da $A\otimes I$ und $I\otimes B$ kommutieren, gilt

$$(A\otimes I + I\otimes B)^l = \sum_{k=0}^{l} \binom{l}{k} (A\otimes I)^k (I\otimes B)^{l-k} = \sum_{k=0}^{l} \binom{l}{k} A^k \otimes B^{l-k}.$$

Also

$$\begin{aligned} e^{A\otimes I + I\otimes B} &= \sum_{l=0}^{\infty} \frac{1}{l!} \sum_{k=0}^{l} \binom{l}{k} A^k \otimes B^{l-k} \\ &= \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{k=0}^{l} \frac{1}{k!} \frac{1}{(l-k)!} A^k \otimes B^{l-k}. \end{aligned}$$

Mit $d = l - k$ folgt

$$e^{A\otimes I + I\otimes B} = \sum_{k=1}^{\infty} \sum_{d=1}^{\infty} \frac{1}{k!} \frac{1}{d!} A^k \otimes B^d = e^A \otimes e^B.$$

Für allgemeine Quadratmatrizen gilt

$$\operatorname{tr}(C\otimes D) = \sum_{i,i'} (C\otimes D)_{(i,i'),(i,i')} = \sum_{i,i'} C_{i,i} D_{i',i'} = \operatorname{tr} C \ \operatorname{tr} D$$

also

$$\operatorname{tr} e^{A\otimes I + I\otimes B} = \operatorname{tr}(e^A \otimes e^B) = \operatorname{tr} e^A \ \operatorname{tr} e^B.$$

## 4. Aufgabe: Spin–Bahn–Kopplung

Wir setzen $S_x = \frac{1}{2}(S_+ + S_-)$, $S_y = \frac{1}{2i}(S_+ - S_-)$, $L_x = \frac{1}{2}(L_+ + L_-)$, $L_y = \frac{1}{2i}(L_+ - L_-)$ in $H$ ein und erhalten

$$H = \frac{1}{2}(S_+ \otimes L_- + S_- \otimes L_+) + S_z \otimes L_z.$$

Der Raum $\mathbb{C}^2$ hat die Basis

$$e_\uparrow = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \qquad e_\downarrow = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Wir berechnen

$$S_z e_\uparrow = \frac{\hbar}{2} e_\uparrow, \qquad S_z e_\downarrow = -\frac{\hbar}{2} e_\downarrow, \qquad L_z Y_{1,1} = \hbar Y_{1,1}, \qquad L_z Y_{1,0} = 0, \qquad L_z Y_{1,-1} = -\hbar Y_{1,-1}.$$

Dies motiviert, $H$ in der Basis

$$|\xi, m\rangle = e_\xi \otimes Y_{1,m}, \qquad \xi = \uparrow, \downarrow, \; m = -1, 0, 1$$

zu betrachten, da zumindest der letzte Summand in $H$ bereits diagonal in dieser Basis ist. Wir rechnen weiter:

$$\begin{array}{llll} L_+ Y_{1,1} = 0, & L_+ Y_{1,0} = \sqrt{2}\hbar Y_{1,1}, & L_+ Y_{1,-1} = \sqrt{2}\hbar Y_{1,0}, & \\ L_- Y_{1,1} = \sqrt{2}\hbar Y_{1,0}, & L_- Y_{1,0} = \sqrt{2}\hbar Y_{1,-1}, & L_- Y_{1,-1} = 0, & \\ S_+ e_\uparrow = 0, & S_+ e_\downarrow = \hbar e_\uparrow, & S_- e_\uparrow = \hbar e_\downarrow, & S_- e_\downarrow = 0 \end{array}$$

Es folgt

$$\begin{aligned} H|\uparrow, 1\rangle &= \frac{\hbar^2}{2} |\uparrow, 1\rangle, & H|\downarrow, -1\rangle &= \frac{\hbar^2}{2} |\downarrow, -1\rangle, \\ H|\uparrow, 0\rangle &= \frac{\hbar^2}{\sqrt{2}} |\downarrow, 1\rangle, & H|\downarrow, 1\rangle &= \frac{\hbar^2}{\sqrt{2}} |\uparrow, 0\rangle - \frac{\hbar^2}{2} |\downarrow, 1\rangle, \\ H|\uparrow, -1\rangle &= \frac{\hbar^2}{\sqrt{2}} |\downarrow, 0\rangle - \frac{\hbar^2}{2} |\uparrow, -1\rangle, & H|\downarrow, 0\rangle &= \frac{\hbar^2}{\sqrt{2}} |\uparrow, -1\rangle. \end{aligned}$$

In der Basis

$$|\uparrow, 1\rangle, |\downarrow, -1\rangle, |\uparrow, 0\rangle, |\downarrow, 1\rangle, |\uparrow, -1\rangle, |\downarrow, 0\rangle$$

hat $H$ also Blockdiagonalform:

$$\operatorname{diag}(\frac{\hbar^2}{2}, \frac{\hbar^2}{2}, \frac{\hbar^2}{2} A, \frac{\hbar^2}{2} B), \qquad A = \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{2} \\ \sqrt{2} & -1 \end{pmatrix}, B = \begin{pmatrix} -1 & \sqrt{2} \\ \sqrt{2} & 0 \end{pmatrix}.$$

Die Matrizen $A$ und $B$ haben beide die Eigenwerte $-2, 1$. Also hat $H$ die Eigenwerte

$$\frac{\hbar^2}{2}, -\hbar^2,$$

mit Multiplizität 4 und 2.

Interpretation: Der Hilbertraum eines Spin–$\frac{1}{2}$–Teilchens in $\mathbb{R}^3$ ist

$$\mathcal{H} = \mathbb{C}^2 \otimes L^2(\mathbb{R}^3).$$

Wir betrachten ein Elektron im Zentralpotential eines Protons. Sein Hamilton–Operator ist

$$H = I_{\mathbb{C}^2} \otimes \left( -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta - \frac{e^2}{|x|} \right) + \frac{a}{|x|^3}(S_x \otimes L_x + S_y \otimes L_y + S_z \otimes L_z)$$

Hier ist $\vec{S} = \frac{\hbar}{2}\vec{\sigma}$ der Spin Operator und $\vec{L} = -i\hbar x \times \vec{\nabla}$ der Bahndrehimpulsoperator. Im letzten Term in $H$ koppelt der Spin an den Bahndrehimpuls, daher der Name der Aufgabe. Die zeitunabhängige Schrödingergleichung ist $H\psi = E\psi$, d.h. die Eigenwertgleichung für $H$. Da $H$ Differentialoperatoren beinhaltet, eine Funktion $f \in L^2(\mathbb{R}^3)$ allerdings nicht differenzierbar sein muss, ist der Hamilton–Operator nicht auf ganz $\mathcal{H}$ definiert. Man kann ihn jedoch auf einer in $\mathcal{H}$ dichten Teilmenge definieren. Wir wollen dieses Problem hier ignorieren.

Wir führen Kugelkoordinaten ein:

$$H = I_{\mathbb{C}^2} \otimes \left( -\frac{\hbar^2}{2m}(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2}\Delta_{S^2}) - \frac{e^2}{r} \right) + \frac{a}{r^3}(S_x \otimes L_x + S_y \otimes L_y + S_z \otimes L_z)$$

wobei

$$L_x = i\hbar\left( \sin\phi\frac{\partial}{\partial\theta} + \cot\theta\cos\phi\frac{\partial}{\partial\phi} \right)$$
$$L_x = i\hbar\left( -\cos\phi\frac{\partial}{\partial\theta} + \cot\theta\sin\phi\frac{\partial}{\partial\phi} \right)$$
$$L_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\phi}$$

unabhängig von $r$ ist.

Die Kugelfunktionen bilden eine (topologische) Basis von $L^2(S^2)$. Es gilt

$$L^2(S^2) = \overline{\bigoplus_{l\geq 0} G_l}, \qquad G_l = \operatorname{span}\{Y_{l,m} : m = -l, \dots, l\}.$$

Auf $G_l$ ist $\Delta_{S^2} = -l(l+1)$. Auf dem Untervektorraum

$$\mathbb{C}^2 \otimes G_l \otimes L^2((0,\infty), r^2 dr) \subset \mathcal{H}$$

ist also

$$H = I_{\mathbb{C}^2} \otimes I_{G_l} \otimes \left( -\frac{\hbar^2}{2m}(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r} - l(l+1)\frac{1}{r^2}) - \frac{e^2}{r} \right) + (S_x \otimes L_x + S_y \otimes L_y + S_z \otimes L_z) \otimes \frac{a}{r^3} I_{L^2((0,\infty),r^2dr)}$$

Nach Separation der radialen Komponente bleibt die Eigenwertgleichung

$$(S_x \otimes L_x + S_y \otimes L_y + S_z \otimes L_z)u = \lambda u$$

für

$$u \in \mathbb{C}^2 \otimes G_l$$

übrig, die wir in der Aufgabe für $l = 1$ behandeln.