Beispiel 3: (TEST B: Beispiel 1 mit $V \Rightarrow U'$)

$$H = \underbrace{-t\sum_{\sigma=\uparrow\downarrow}\left(a^+_{1\sigma}a_{2\sigma} + a^+_{2\sigma}a_{1\sigma}\right)}_{H_t} + \underbrace{U\sum_{i=1}^{2} n_{i\uparrow}n_{i\downarrow}}_{H_U} + \underset{\underset{(\text{TEST B})}{U'}}{\underset{\parallel}{V}}\underbrace{(n_{1\uparrow}+n_{1\downarrow})(n_{2\uparrow}+n_{2\downarrow})}_{H_V}$$

a) System mit EINEM Elektron $\Rightarrow H_U = H_V = \emptyset$

H_t ist diagonal im Spin-Raum $\Rightarrow$

$$H_t = \begin{pmatrix} H_\uparrow^{(2\times2)} & \emptyset \\ \emptyset & H_\downarrow^{(2\times2)} \end{pmatrix} \quad \begin{array}{c} \text{Platz } 1,2 \\ |\uparrow,\emptyset\rangle \\ |\emptyset,\uparrow\rangle \\ |\downarrow,\emptyset\rangle \\ |\emptyset,\downarrow\rangle \end{array}$$

mit $H_\uparrow = H_\downarrow = \begin{pmatrix} \emptyset & -t \\ -t & \emptyset \end{pmatrix} \xRightarrow{\text{DIAGONALISIERUNG}} \det\begin{pmatrix} \lambda & -t \\ -t & \lambda \end{pmatrix} = \lambda^2 - t^2 = \emptyset \Rightarrow \lambda_\pm = \epsilon_\pm = \pm t$

Mögliche Grundzustände:

I) $+t$: leer; $-t$: $\uparrow$ II) $+t$: leer; $-t$: $\downarrow$

$E_{GS} = -t$; $2\times$ entartet

b) System mit ZWEI Elektronen, aber $U = V = \emptyset \Rightarrow$ nur $H_t \neq \emptyset$

H_t ist ein 1-Teilchen Operator $\Rightarrow$ Seine Eigenwerte sind berechenbar als Summe der Eigenwerte des 1-Teilchen Problems $\Rightarrow$

GS: $+t$: leer; $-t$: $\uparrow\downarrow$ $\Rightarrow E_{GS} = -2t$; nicht entartet

c) ZWEI Elektronen mit $t = \emptyset$ ($\Rightarrow H_t = \emptyset$)

H_U und H_V sind schon diagonal in der gegebenen Orts-Basis:

Mögliche Zustände:

	PLATZ 1	PLATZ 2		Eigenwerte:
1)	$\uparrow$	$\uparrow$	$\lvert e_1\rangle = a^+_{1\uparrow}a^+_{2\uparrow}\lvert vac\rangle$	$E = V$ (EIN Elektron pro Platz, keine Doppel-Besetzung)
2)	$\uparrow$	$\downarrow$	$\lvert e_2\rangle = a^+_{1\uparrow}a^+_{2\downarrow}\lvert vac\rangle$	
3)	$\downarrow$	$\uparrow$	$\lvert e_3\rangle = a^+_{1\downarrow}a^+_{2\uparrow}\lvert vac\rangle$	
4)	$\downarrow$	$\downarrow$	$\lvert e_4\rangle = a^+_{1\downarrow}a^+_{2\downarrow}\lvert vac\rangle$	
5)	$\uparrow\downarrow$	—	$\lvert e_5\rangle = a^+_{1\uparrow}a^+_{1\downarrow}\lvert vac\rangle$	$E = U$ (1 Doppel Besetzung)
6)	—	$\uparrow\downarrow$	$\lvert e_6\rangle = a^+_{2\uparrow}a^+_{2\downarrow}\lvert vac\rangle$	

Grundzustand:

- Wenn $V < U$: $E_{GS} = V$; $4\times$ entartet; $|\psi_{GS}\rangle = \{|e_1\rangle; |e_2\rangle; |e_3\rangle; |e_4\rangle\}$
- Wenn $V > U$: $E_{GS} = U$; $2\times$ entartet; $|\psi_{GS}\rangle = \{|e_5\rangle; |e_6\rangle\}$
- Wenn $V = U \Rightarrow E_{GS} = U = V$; $6\times$ entartet $= \{|e_1\rangle; \dots; |e_6\rangle\}$

d) Doppel-Besetzung

- für a) $\langle n_d\rangle = \emptyset$ ($\Rightarrow$ es gibt nun EIN Elektron)
- für b) $\langle n_d\rangle_{GS} = \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{2}\langle n_{i\uparrow}n_{i\downarrow}\rangle_{GS} = \frac{1}{2}\sum_i \langle n_{i\uparrow}\rangle_{GS}\langle n_{i\downarrow}\rangle_{GS}$ (NICHT KORRELIERTES SYSTEM ($U=V=\emptyset$)) $= \frac{1}{2}\left(\frac{1}{2}\cdot\frac{1}{2} + \frac{1}{2}\cdot\frac{1}{2}\right) = \frac{1}{4}$
- für c) wenn $V < U \Rightarrow \langle n_d\rangle = \emptyset$ (KEINE DOPPEL BESETZUNG IN GS); wenn $V > U \Rightarrow \langle n_d\rangle = \frac{1}{2}\cdot(1) = \frac{1}{2}$ (1 DOPPEL BESETZUNG IN GS)

A1 bzw B2 (α oder ξ)

a) Impulsbasis $|\psi\rangle = |p_x p_y 0\rangle \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$

Orts/Impuls-Komp ← Spin-Komp.

$$E|\psi\rangle \overset{!}{=} H|\psi\rangle = |p_x p_y 0\rangle \Big[\frac{p_x^2+p_y^2}{2m} + \alpha \underbrace{\begin{pmatrix} 0 & p_y+ip_x \\ p_y-ip_x & 0 \end{pmatrix}}_{=A} \Big] \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$$

da $\underset{\text{Operator}}{p_x} |p_x p_y 0\rangle = \underset{\text{Zahl}}{p_x} |p_x p_y 0\rangle$

Diagonalisieren von A:

$$\det(\omega - A) = \begin{vmatrix} \omega & -p_y - ip_x \\ -p_y+ip_x & \omega \end{vmatrix}$$

$$= \omega^2 + (p_y + ip_x)(-p_y + ip_x)$$

$$= \omega^2 - p_y^2 - p_x^2 \overset{!}{=} 0$$

$$\Rightarrow \omega_\pm = \pm\sqrt{p_x^2 + p_y^2} \Rightarrow E_\pm = \underbrace{\frac{p_x^2+p_y^2}{2m} \pm \alpha\sqrt{p_x^2+p_y^2}}_{\text{Eigenwerte}}$$

$$A\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \omega_\pm \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$$

$$\Rightarrow (+p_y + ip_x)\, b = \pm\sqrt{p_x^2+p_y^2} \cdot a$$

für $b = 1 \Rightarrow \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \pm \frac{p_y + ip_x}{\sqrt{p_x^2+p_y^2}} \\ 1 \end{pmatrix}$

$$\Rightarrow |\psi\rangle = |p_x p_y 0\rangle \begin{pmatrix} \pm \frac{p_y+ip_x}{\sqrt{p_x^2+p_y^2}} \\ 1 \end{pmatrix}$$

b) $\langle \psi | \vec{p}\,\vec{\sigma} | \psi \rangle \underset{\substack{\text{Normiert} \\ \text{im Impulsraum}}}{=} \frac{\hbar}{2} \left(\pm \frac{p_y - ip_x}{\sqrt{p_x^2 p_y^2}} \;\; 1 \right) \begin{pmatrix} 0 & p_x - ip_y \\ p_x + ip_y & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \pm \frac{p_y+ip_x}{\sqrt{p_x^2+p_y^2}} \\ 1 \end{pmatrix}$

$$= \frac{\hbar}{2} \left(\pm \frac{p_y - ip_x}{\sqrt{p_x^2+p_y^2}} \;\; 1 \right) \begin{pmatrix} p_x - ip_y \\ \pm (p_x+ip_y)(p_y+ip_x)/\sqrt{p_x^2+p_y^2} \end{pmatrix}$$

$$= \pm\frac{\hbar}{2} \frac{(p_y - ip_x)(p_x - ip_y) + (p_x+ip_y)(p_y+ip_x)}{\sqrt{p_x^2+p_y^2}}$$

$$= 0$$

A2 (B3) |

a) O_1 (O_3) kommutiert, da nur 2fache Zeitableitung in KG-Glg

O_2 (O_1) kommutiert, " und $-\square^* = -\square$

O_3 (O_2) kommutiert, " " und nur 2fache Orts-ableitung

O_4 (O_4) kommutiert nicht, da KG-Glg. nicht Gallilei-invariant

b) $\psi(\vec{r}, t+\tau) \approx \psi(\vec{r}, t) + \tau \dfrac{\partial \psi(\vec{r},t)}{\partial t}$ für $\tau \to 0$

$= \psi(\vec{r},t) + \tau \frac{1}{i\hbar} H \psi(\vec{r},t)$ S-Glg.

$= \left(1 - \frac{i}{\hbar} H \tau\right) \psi(\vec{r},t)$

$\uparrow$
generator für inf. Zeittranslat.

Jetzt beliebige Zeittranslation:

$$\psi(\vec{r}, t+\tau) = \left(1 - \frac{i}{\hbar} H \frac{\tau}{N}\right)^N \psi(\vec{r},t)$$

$$= \underbrace{e^{-i/\hbar \, H\tau}}_{T_\tau} \psi(\vec{r},t)$$

c) 1. Quantisierung:

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\left[\psi_{01}(\vec{r}_1)\,|\uparrow\rangle_1 \; \psi_{01}(\vec{r}_2)\,|\downarrow\rangle_2 - \psi_{01}(\vec{r}_2)\,|\uparrow_2\rangle \; \psi_{01}(\vec{r}_1)\,|\downarrow\rangle_1\right]$$

2. Quantisierung

Sei $c^+_{01\sigma}$ der Erzeugungsoperator eines Elektrons im Grundzustand ψ_{01} mit Spin σ

Dann ist die Slaterdet. in 2. Quantisierung

$c^+_{01\uparrow} \, c^+_{01\downarrow} \, |0\rangle$

a) • $\langle\psi|\psi\rangle = \int d^3r\, \psi^\dagger(\vec{r},\lambda)\cdot\psi(\vec{r},\lambda)$ 1.

$$= \underbrace{\int d^3r}_{V} \, (mc^2+E_p)\,\tfrac{1}{2}\cdot 2\cdot\left[1+\frac{c^2p^2}{(mc^2+E_p)^2}\right]$$

$$= V\left[mc^2+E_p+\frac{c^2p^2}{mc^2+E_p}\right]$$

$$= V\left[\frac{(mc^2)^2+E_p^2+2mc^2E_p+c^2p^2}{mc^2+E_p}\right]$$

$$= V\cdot 2E_p\,\frac{mc^2+E_p}{mc^2+E_p} = V\cdot 2E_p \underset{p=0}{=} V2mc^2$$

• $\langle\psi|\hat{\vec{S}}|\psi\rangle \Rightarrow$ ~~...~~ Wie für $\langle\psi|\psi\rangle$ ausser der Spinoranteil:

→ $\hat{S}^i$ ... block diagonal ⇒ Rechnung für 2-er Spinoren separat.

→ beide 2-er Spinoren: $\frac{1}{2}\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix}$

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix}^T \frac{\hbar}{2}\sigma^x \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix} = \frac{\hbar}{4}\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix}^T\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2}$$

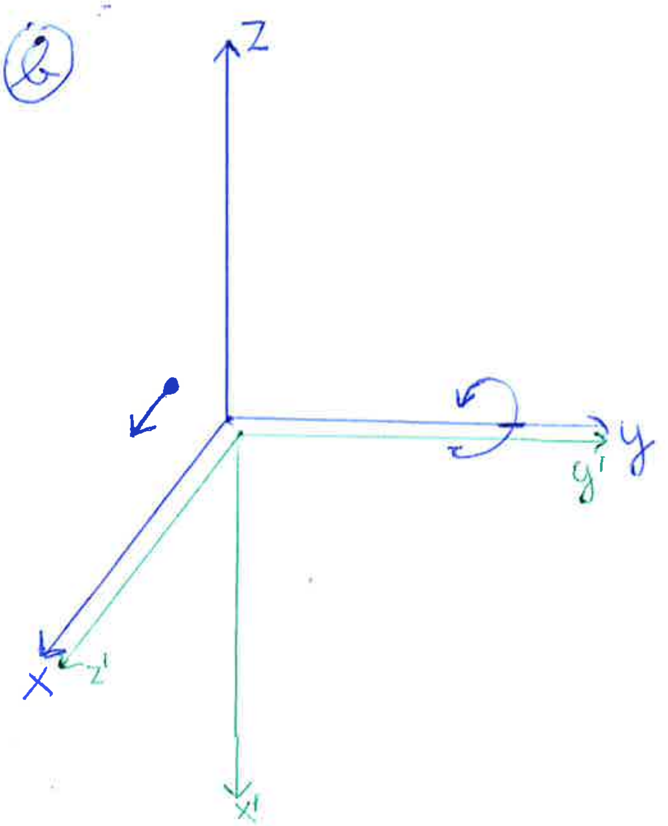
$$\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix}^T \frac{\hbar}{2}\sigma^y \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix} = \frac{\hbar}{4}\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix}^T\begin{pmatrix}0&-i\\i&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix} = 0$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix}^T \frac{\hbar}{2}\sigma^z \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix} = \frac{\hbar}{4}\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix}^T\begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix} = 0$$

$$\Rightarrow \langle\psi|\hat{\vec{S}}|\psi\rangle = V\cdot 2E_p\begin{pmatrix}\frac{\hbar}{2}\\0\\0\end{pmatrix} \underset{p=0}{=} V2mc^2\begin{pmatrix}\frac{\hbar}{2}\\0\\0\end{pmatrix}$$

$$\boxed{\frac{\langle\psi|\hat{\vec{S}}|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle} = \begin{pmatrix}\frac{\hbar}{2}\\0\\0\end{pmatrix}}$$

(b)



Ursprüngliches System(x,y,z)

Spinor beschreibt ein Teilchen, das sich mit Impuls p in x-Richtung bewegt und dessen Spin in x-Richtung zeigt.

Gedrehtes System (x', y', z')

Teilchen bewegt sich in z'-Richtung u. Spin zeigt ebenfalls in z'-Richtung.

($A = A'$ bei einer reinen Drehung)

$$\Rightarrow \quad \psi'(A', \vec{r}') = e^{-\frac{i}{\hbar}(E_p A' - p z')} \sqrt{mc^2 + E_p} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \frac{cp}{mc^2 + E_p} \\ 0 \end{pmatrix}$$

$\Rightarrow$ Spin zeigt im gedrehten System in z'-Richtung:

$$\frac{\langle \psi' | \vec{S} | \psi' \rangle}{\langle \psi' | \psi' \rangle} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \frac{\hbar}{2} \end{pmatrix}$$

(c) Drehmatrix für Drehung um die y-Achse:

$$\begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\varphi & 0 & -\sin\varphi \\ 0 & 1 & 0 \\ \sin\varphi & 0 & \cos\varphi \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} \xRightarrow{\varphi = \frac{\pi}{2}} \begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}$$

bzw. $\begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix}$

$$\left.\begin{array}{l} x = z' \\ y = y' \\ z = -x' \end{array}\right\} \Rightarrow \boxed{e^{-\frac{i}{\hbar}(E_p A - p x)} = e^{-\frac{i}{\hbar}(E_p A' - p z')}}$$

$A = A'$ für eine reine Drehung

(d) $\gamma^i = \begin{pmatrix} 0 & \sigma^i \\ -\sigma^i & 0 \end{pmatrix}$

$$\Rightarrow [\gamma^1, \gamma^3] = \left[\begin{pmatrix} 0 & \sigma^1 \\ -\sigma^1 & 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 & \sigma^3 \\ -\sigma^3 & 0 \end{pmatrix}\right]$$

$$= - \begin{pmatrix} [\sigma^1, \sigma^3] & 0 \\ 0 & [\sigma^1, \sigma^3] \end{pmatrix}$$

$$[\sigma^i, \sigma^j] = 2i\, \varepsilon^{ij}{}_k\, \sigma^k$$

$$\Rightarrow [\sigma^1, \sigma^3] = 2i \underbrace{\varepsilon^{13}{}_2}_{-1} \sigma^2 = -2i\sigma^2$$

$$\Rightarrow [\gamma^1, \gamma^3] = 2i \begin{pmatrix} \sigma^2 & 0 \\ 0 & \sigma^2 \end{pmatrix} = 2i\, \Sigma^y$$

$$\mathbb{L} = e^{i\frac{\varphi}{2}\begin{pmatrix} \sigma^2 & 0 \\ 0 & \sigma^2 \end{pmatrix}} \underset{\uparrow}{=} \begin{pmatrix} e^{i\frac{\varphi}{2}\sigma^2} & 0 \\ 0 & e^{i\frac{\varphi}{2}\sigma^2} \end{pmatrix} \left(= e^{\frac{i}{2}\varphi\Sigma^y}\right)$$

Matrix im Exponenten block diagonal

$$e^{i\frac{\varphi}{2}\sigma^2} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{(2n)!} \left(\frac{\varphi}{2}\right)^{2n} \underbrace{\overbrace{\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}}^{i\sigma^2}{}^{2n}}_{(-1)^n \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}}$$

$$+ \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{(2n+1)!} \left(\frac{\varphi}{2}\right)^{2n+1} \underbrace{\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}^{2n+1}}_{(-1)^n \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}}$$

$$= \cos\left(\frac{\varphi}{2}\right) \mathbb{I}_{2\times 2} + i \sin\left(\frac{\varphi}{2}\right) \sigma^2$$

$$\boxed{\mathbb{L} = \cos\left(\frac{\varphi}{2}\right) \mathbb{1}_{4\times4} + i \sin\left(\frac{\varphi}{2}\right) \Sigma^y}$$

e) For $\varphi = \frac{\pi}{2}$: $\mathbb{L} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\mathbb{1}_{4\times4} + i\Sigma^y\right)$

$$= \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 & 1 & & \\ -1 & 1 & \multicolumn{2}{c}{0} \\ \multicolumn{2}{c}{0} & 1 & 1 \\ & & -1 & 1 \end{pmatrix}$$

$\psi' = \mathbb{L}\,\psi$: $\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix}\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 2 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$

$$\Rightarrow \psi'(t', \vec{x}') = e^{-\frac{i}{\hbar}(E_p t' - p z')}\sqrt{mc^2 + E_p}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \frac{cp}{mc^2+E_p} \\ 0 \end{pmatrix}$$

$\langle \psi' | \hat{\vec{S}} | \psi' \rangle \Rightarrow$

$$\left.\begin{aligned} &\odot\ \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}^T \frac{\hbar}{2}\sigma^x \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = 0 \\ &\odot\ \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}^T \frac{\hbar}{2}\sigma^y \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = 0 \\ &\odot\ \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}^T \frac{\hbar}{2}\sigma^z \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \end{aligned}\right\} \quad \frac{\langle \psi' | \hat{\vec{S}} | \psi' \rangle}{\langle \psi' | \psi' \rangle} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \frac{\hbar}{2} \end{pmatrix}$$