Beispiel 1a) (Test B: Beispiel 3c)

Ion F^- $(Z=9)$ Elektronische Konfiguration: $\underbrace{\{1s^2, 2s^2, 2p^6\}}_{10\ \text{Elektronen}}$

(TEST B: Na^+, mit $Z=11$)

Falls die Elektronen Spin $= 7/2$ hätten,

wären 8 Werte von S_z eines Elektrons möglich: $\underbrace{-\tfrac{7}{2}, -\tfrac{5}{2}, \dots, +\tfrac{5}{2}, +\tfrac{7}{2}}_{8}$

Für den Grundzustand hätten wir:

1-Teilchen Energien	Energie Niveaus	2p			Besetzung im GS
$Z^2E_I/4$	2s, $m=\phi$	$m=-1$	$m=\phi$	$m=+1$	⇒ 2 Elektronen in 2s/2p
Z^2E_I	1s, $m=\phi$				⇒ 8 Elektronen in 1s

(TEST B: $E_I \to \varepsilon_0$)

↱ statt $E_{GS}^{(1/2)} = (2+8/4)Z^2E_I = 4Z^2E_I$

$$E_{GS}^{(7/2)} = 8Z^2E_I + \frac{\cancel{2}^{\,1} Z^2 E_I}{\cancel{4}\ 2} = \frac{17}{2} Z^2 E_I \quad (\text{mit } E_I = -13.6\,eV)$$

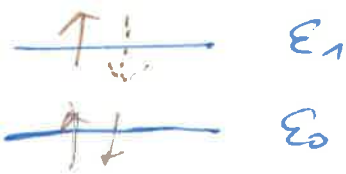
Entartung: Der 1s-Zustand ist komplett besetzt, deswegen kommt die Entartung von allen möglichen Verteilungen der bleibenden $K=2$ Elektronen auf die $N = 32 = \underset{2s/2p}{\hat{4}} \times \underset{S_z\text{-Werte}}{\hat{8}}$ Zustände mit Energie $-Z^2E_I/4$

Auch bekommt man eine hochgradige ENTARTUNG von $\binom{N}{K} = \binom{32}{2} = \frac{32!}{30!\,2!} = 16 \cdot 31 = 496$!

Beispiel 1d) (Test B: Beispiel 3d)

nicht-wechselwirkendes System ⇒ Einteilchenniveaus werden gefüllt:

unterscheidbar / bosonisch (Spin 0)	fermionisch (Spin 1/2)
i), ii)	→ Pauliprinzip iii)



$\Rightarrow E_{GS} = 3\varepsilon_0 \quad < \quad E_{GS} = 2\varepsilon_0 + \varepsilon_1$

im Allgemeinen

Musterlösung: Gruppe A → Beispiele 1b, 1d

Gruppe B → Beispiele 3a, 3b

1b) 3b)

- $e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{p}\vec{a}}\, e^{-\alpha|\vec{r}+a|} = e^{-\alpha|\vec{r}|}$
- $e^{-\frac{i}{\hbar}\frac{\pi}{2}\hat{L}_y}\, Y_{10}(\theta,\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(Y_{1-1}(\theta,\varphi) + Y_{11}(\theta,\varphi)\right)$
- $P\, e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}\vec{x}} = e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{p}\vec{x}}$
- $e^{-\frac{i}{\hbar}\frac{\pi}{2}L_y}\, e^{-\alpha|\vec{r}|} = e^{-\alpha|\vec{r}|}$] In sich selbst
- $P\, e^{-\alpha|\vec{r}|} = e^{-\alpha|\vec{r}|}$

1d) 3a) Allgemeine Lösung: $\psi(x) = e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}\vec{r}}\sqrt{\frac{E_p+mc^2}{2E_p}}\begin{pmatrix}\chi \\ \frac{\vec{\sigma}\vec{p}c}{E_p+mc^2}\chi\end{pmatrix}$

$\left(E_p = \sqrt{c^2\vec{p}^2+m^2c^4}\right)$ für $E = +E_p$

- $\vec{p} = (p,0,0)$
- $|\uparrow\rangle_y = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\uparrow\rangle_z + i\,|\downarrow\rangle_z\right) \mathrel{\hat{=}} \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\ i\end{pmatrix} = \chi$

$\vec{\sigma}\cdot\vec{p} = \sigma_x p = \begin{pmatrix}0 & p\\ p & 0\end{pmatrix} \rightarrow \vec{\sigma}\vec{p}\,\chi = \frac{1}{\sqrt{2}}p\begin{pmatrix}i\\ 1\end{pmatrix}$

$\Rightarrow \psi(\vec{r},t) = e^{\frac{i}{\hbar}px}\sqrt{\frac{\sqrt{c^2p^2+m^2c^4}+mc^2}{2\sqrt{c^2p^2+m^2c^4}}}\,\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}\begin{pmatrix}1\\ i\end{pmatrix} \\ \frac{cp}{E_p+mc^2}\begin{pmatrix}i\\ 1\end{pmatrix}\end{pmatrix}$

Musterlösung: Test A → Beispiel 2
Test B → Beispiel 1

(a)

Schritt 1: Transformation der Schrödingergl. in ein mit der Geschwindigkeit v (w) bewegtes System:

$$\Rightarrow \left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - \frac{\hat p^2}{2m} + \overset{C}{\alpha}\,\delta(\hat x - \overset{w}{v}t)\right)\psi(x,t) = 0$$

$G(v,t)$
$G(w,t)$

$G^+(v,t)\,G(v,t) = \mathbb{1}$
$G^+(w,t)\,G(w,t) = \mathbb{1}$

- $G(\overset{w}{v},t)\; i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\; G^+(\overset{w}{v},t) = e^{-i\frac{\overset{w}{v}}{\hbar}m\hat x}\, e^{+i\frac{\overset{w}{v}}{\hbar}t\hat p}\, e^{-\frac{i}{\hbar}\frac{m\overset{w}{v}^2}{2}t} \cdot i\hbar\frac{\partial}{\partial t} \cdot e^{\frac{i}{\hbar}\frac{m\overset{w}{v}^2}{2}t}\, e^{-i\frac{\overset{w}{v}}{\hbar}t\hat p}\, e^{+i\frac{\overset{w}{v}}{\hbar}m\hat x}$

$$= -\frac{m\overset{w}{v}^2}{2} + e^{-i\frac{\overset{w}{v}}{\hbar}m\hat x}\,\overset{w}{v}\overbrace{\hat p}^{\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}}\, e^{+i\frac{\overset{w}{v}}{\hbar}m\hat x}$$

$$= -\frac{m\overset{w}{v}^2}{2} + m\overset{w}{v}^2 + \overset{w}{v}\hat p = \frac{m\overset{w}{v}^2}{2} + \overset{w}{v}\hat p$$

- $G(\overset{w}{v},t)\,\frac{\hat p^2}{2m}\,G^+(\overset{w}{v},t) = e^{-i\frac{\overset{w}{v}}{\hbar}m\hat x}\left(\frac{\hat p^2}{2m}\right)e^{+i\frac{\overset{w}{v}}{\hbar}m\hat x}$

$$= \frac{(\hat p - \overset{w}{v}m)^2}{2m} = \frac{\hat p^2}{2m} - \overset{w}{v}\hat p + \frac{m\overset{w}{v}^2}{2}$$

- $G(\overset{w}{v},t)\,\overset{C}{\alpha}\delta(\hat x - \overset{w}{v}t)\,G^+(\overset{w}{v},t) = e^{i\frac{\overset{w}{v}}{\hbar}t\hat p}\left(\overset{C}{\alpha}\delta(\hat x - \overset{w}{v}t)\right)e^{-i\frac{\overset{w}{v}}{\hbar}t\hat p}$

$$= \overset{C}{\alpha}\delta(\hat x)$$

- $G(\overset{w}{v},t)\,\psi(x,t) = \psi'(x,t) \Rightarrow$ Wellenfunktion im bewegten System.

Schrödingergleichung im bewegten System: $\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - \frac{\hat p^2}{2m} + \overset{C}{\alpha}\delta(x)\right)\psi'(x,t) = 0$

Schritt 2

Transformation der Anfangsbedingung ins bewegte System:

$$\psi_0' = G(v, t=0)\,\psi_0 = e^{-i\frac{v}{\hbar} m\hat{x}} \sqrt{\frac{m\alpha}{\hbar^2}}\, e^{-\frac{m\alpha}{\hbar^2}|x|}\, e^{+\frac{i}{\hbar}vmx}$$

$$\Rightarrow \psi_0' = \sqrt{\frac{m\alpha}{\hbar^2}}\, e^{-\frac{m\alpha}{\hbar^2}|x|}$$

Schritt 3

Lösungsansatz: $\psi'(x,t) = e^{-\frac{i}{\hbar}E_0 t}\, e^{-\frac{m\alpha}{\hbar^2}|x|}\sqrt{\frac{m\alpha}{\hbar^2}}$

- $i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\psi'(x,t) = E_0\,\psi'(x,t)$
- $\left[\frac{\hat{p}^2}{2m} - \alpha\,\delta(x)\right]\psi'(x,t) =$ $-\frac{m\alpha^2}{2\hbar^2}\psi'(x,t)$

Schrödingerglg im bewegten System ist erfüllt wenn

$$E_0 = -\frac{m\alpha^2}{2\hbar^2}$$

Schritt 4

Rücktransformation von $\psi'(x,t)$ ins ursprüngliche System: $\psi(x,t) = G^+(v,t)\,\psi'(x,t)$

$$\Rightarrow \psi(x,t) = e^{+i\frac{mv^2}{2}t}\, e^{-i\frac{v}{\hbar}t\hat{p}}\, e^{+i\frac{v}{\hbar}m\hat{x}}\, e^{-\frac{i}{\hbar}E_0 t}\, e^{-\frac{m\alpha}{\hbar^2}|x|}\sqrt{\frac{m\alpha}{\hbar^2}}$$

$$= e^{+\frac{i}{\hbar}\frac{mv^2}{2}t}\, e^{-i\frac{v}{\hbar}t\hat{p}}\left[e^{i\frac{v}{\hbar}mx - \frac{m\alpha}{\hbar^2}|x|}\right] e^{-\frac{i}{\hbar}E_0 t}\sqrt{\frac{m\alpha}{\hbar^2}}$$

$$= e^{+\frac{i}{\hbar}\frac{mv^2}{2}t}\, e^{i\frac{v}{\hbar}m(x-vt)}\, e^{-\frac{m\alpha}{\hbar^2}|x-vt|}\, e^{-\frac{i}{\hbar}E_0 t}\sqrt{\frac{m\alpha}{\hbar^2}}$$

$$\psi(x,t) = e^{-\frac{i}{\hbar}\left(E_0+\frac{mv^2}{2}\right)t}\, e^{-\frac{m\alpha}{\hbar^2}|x-vt|}\sqrt{\frac{m\alpha}{\hbar^2}}\cdot e^{\frac{i}{\hbar}vmx}$$

2.

(b) ⊖ $$\underline{\underline{\langle \hat{x} \rangle (t)}} = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \; \psi^*(x,t)\, x \, \psi(x,t)$$

$$= \frac{m\overset{C}{\alpha}}{\hbar^2} \int_{-\infty}^{+\infty} dx \; x \; e^{-\frac{2m\overset{C}{\alpha}}{\hbar^2}|x-\overset{W}{v}t|}$$

$$= \left| \; x = y + \overset{W}{v}t \; \right| = \underbrace{\frac{m\overset{C}{\alpha}}{\hbar^2} \int_{-\infty}^{+\infty} dy \; y \; e^{-\frac{2m\overset{C}{\alpha}}{\hbar^2}|y|}}_{0}$$

$$+ \frac{m\overset{C}{\alpha}}{\hbar^2} \overset{W}{v}t \; 2 \int_{0}^{\infty} dy \; e^{-\frac{2m\overset{C}{\alpha}}{\hbar^2} y}$$

$$= \frac{m\overset{C}{\alpha}}{\hbar^2} \overset{W}{v}t \; 2 \; \frac{\hbar^2}{2m\underset{C}{\alpha}} = \underline{\underline{\overset{W}{v}t}}$$

⊖ $$\underline{\underline{\langle \hat{p} \rangle (t)}} = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \; \psi^*(x,t) \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \psi(x,t)$$

$$\left.\begin{aligned} &= \frac{m\overset{C}{\alpha}}{\hbar^2} \frac{\hbar}{i} \int_{-\infty}^{vt} dx \; \frac{m\overset{C}{\alpha}}{\hbar^2} \; e^{-\frac{2m\overset{C}{\alpha}}{\hbar^2}|x-\overset{W}{v}t|} \\ &+ \frac{m\overset{C}{\alpha}}{\hbar^2} \frac{\hbar}{i} \int_{vt}^{\infty} dx \left(-\frac{m\overset{C}{\alpha}}{\hbar^2}\right) e^{-\frac{2m\overset{C}{\alpha}}{\hbar^2}|x-\overset{W}{v}t|} \end{aligned}\right\} 0!$$

$$+ \frac{m\overset{C}{\alpha}}{\hbar^2} \cancel{\frac{\hbar}{i}} \, i\overset{W}{v}m \frac{1}{\cancel{\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} dx \; e^{-\frac{2m\overset{C}{\alpha}}{\hbar^2}|x-\overset{W}{v}t|}$$

$$= \underline{\underline{\overset{W}{v}m}}$$

(c) $\langle H(t) \rangle = E(t)$ setzt sich zusammen aus:

→ $E_0 = -\frac{m\overset{C^2}{\alpha^2}}{2\hbar^2}$ ... Grundzustandsenergie im Ruhesystem des δ-Potentials

→ $\frac{mv^2}{2}$ ... kinetische Energie des bewegten Potentials

Mögliche (einfache) Berechnungsmethode:

$$E(A) = \langle \psi(x,A) | \underset{\uparrow \atop G^+G}{} H(A) \underset{\uparrow \atop G^+G}{} | \psi(x,A) \rangle = \langle \psi'(x,A) | H' | \psi'(x,A) \rangle$$

wobei: $H' = G \; H \; G^+ = e^{-i\frac{w}{\hbar} m \hat{x}} \, e^{+i\frac{w}{\hbar} A \hat{p}} \, e^{-\frac{i}{\hbar}\frac{m w^2}{2} A}$

$$\left(\frac{\hat{p}^2}{2m} - \frac{c}{\alpha} \, \delta(\hat{x} - wA) \right)$$

$$e^{+\frac{i}{\hbar}\frac{m w^2}{2} A} \, e^{-i\frac{w}{\hbar} A \hat{p}} \, e^{+i\frac{w}{\hbar} m \hat{x}}$$

Siehe Beispiel a)

$$\stackrel{\downarrow}{=} \underbrace{\frac{\hat{p}^2}{2m} - \frac{c}{\alpha}\,\delta(x)} - \underbrace{w \hat{p}} + \underbrace{\frac{m w^2}{2}}$$

$$\langle H' \rangle \Rightarrow \quad E_0 \quad , \quad 0 \quad , \quad \frac{m v^2}{2}$$

$$\Rightarrow \quad \langle H(A) \rangle = E_0 + \frac{m w^2}{2}$$

Beispiel 3 : (TEST B : Beispiel 2 mit $V/2 \Rightarrow U'$)

$$H = \underbrace{-t\sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow}\left(\hat{c}^+_{1\sigma}\hat{c}_{2\sigma} + \hat{c}^+_{2\sigma}\hat{c}_{1\sigma}\right)}_{H_t} \underbrace{- U\sum_{i=1,2}\hat{n}_{i\uparrow}\hat{n}_{i\downarrow}}_{H_U} \underbrace{- \frac{V}{2}\left(\hat{n}_{1\uparrow}+\hat{n}_{1\downarrow}\right)\left(\hat{n}_{2\uparrow}+\hat{n}_{2\downarrow}\right)}_{H_V}$$

3

a) System mit EINEM Elektron $\Rightarrow$ $H_U|\cdot\rangle = H_V|\cdot\rangle = \phi$

H_t ist DIAGONAL in SPIN-RAUM $\Rightarrow$ $H_t = \begin{pmatrix} H_{\uparrow\uparrow} & \phi \\ \phi & H_{\downarrow\downarrow} \end{pmatrix}$

mit $H_{\uparrow\uparrow} = H_{\downarrow\downarrow} = \begin{pmatrix} \phi & -t \\ -t & \phi \end{pmatrix}$

- Diagonalisierung : $\lambda^2 - t^2 = \phi \Rightarrow \lambda = \pm t$
- Mögliche Grundzustände :

i) $+t$, $-t$ (↑) ; ii) (↓) $\Big\}$ $E^{(1)}_{GS} = -t$, 2x entartet

b) System mit VIER Elektronen (mit $t, U, V > \phi$)

Das System ist komplett besetzt $\Rightarrow$ ↑↓ ↑↓ — EINZIG MÖGLICHER ZUSTAND MIT 4 ELEKTRONEN

3

$H_t = \phi$ (PAULI PRINZIP $\Rightarrow$ KEIN HOPPING IST MÖGLICH !)

$|GS\rangle =$ ↑↓ ↑↓ $= c^+_{1\uparrow}c^+_{1\downarrow}c^+_{2\uparrow}c^+_{2\downarrow}|vac\rangle \Rightarrow E^{(4)}_{GS} = -2(U+V)$

(in der gegebenen, lokalen Basis) — NICHT ENTARTET !

5

c) ZWEI Elektronen mit $t = \phi$ $(H_t = \phi)$

H_U und H_V sind schon DIAGONAL in der gegebenen ORT-BASIS

Mögliche EIGENZUSTÄNDE

i)	↑ ↑	$= \lvert E_1\rangle =$	$c^+_{1\uparrow}c^+_{2\uparrow}\lvert vac\rangle$	$E = -\frac{V}{2}$, 4x fach entartet
ii)	↓ ↓	$= \lvert E_2\rangle =$	$c^+_{1\downarrow}c^+_{2\downarrow}\lvert vac\rangle$	
iii)	↑ ↓	$= \lvert E_3\rangle =$	$c^+_{1\uparrow}c^+_{2\downarrow}\lvert vac\rangle$	
iv)	↓ ↑	$= \lvert E_4\rangle =$	$c^+_{1\downarrow}c^+_{2\uparrow}\lvert vac\rangle$	
v)	↑↓ ◻	$= \lvert E_5\rangle =$	$c^+_{1\uparrow}c^+_{1\downarrow}\lvert vac\rangle$	$E = -U$, 2x fach ENTARTET
vi)	◻ ↑↓	$= \lvert E_6\rangle =$	$c^+_{2\uparrow}c^+_{2\downarrow}\lvert vac\rangle$	

GRUNDZUSTAND:

- Wenn $\frac{V}{2} > U \Rightarrow$
  $E^{(2)}_{GS} = -V/2$
  $|GS\rangle = \{|E_1\rangle, |E_2\rangle, |E_3\rangle, |E_4\rangle\}$
- Wenn $U > \frac{V}{2}$
  $E^{(2)}_{GS} = -U$; $|GS\rangle = \{|E_5\rangle, |E_6\rangle\}$

3*

d) Erwartungswert der Doppelbesetzung :

•) für a) $\langle \hat{n}_d \rangle_{GS} = \phi$ $\Leftrightarrow$ Es gibt NUR ein Elektron

••) für b) $\langle \hat{n}_d \rangle_{GS} = \frac{1}{2}\sum_i \langle \hat{n}_{i\uparrow}\hat{n}_{i\downarrow}\rangle_{GS} = \frac{1}{2}[1+1] = 1$ (ES GIBT EINE DOPPELBESETZUNG PRO PLATZ !)

•••) für c)

wenn $V/2 > U \Rightarrow \langle \hat{n}_d \rangle_{GS} = \phi$ (KEINE DOPPELBESETZUNG IN $|E_1\rangle, |E_2\rangle, |E_3\rangle, |E_4\rangle$)

wenn $U > V/2 \Rightarrow \langle \hat{n}_d \rangle_{GS} = \frac{1}{2}\times(1+0) = 0.5$ (IMMER EINE DOPPEL-BESETZUNG IN $|E_5\rangle$ ODER $|E_6\rangle$)

Musterlösung : Test A → Beispiel 4
Test B → Beispiel 4

(a) • $\vec{S}_D^{\,2} = \frac{\hbar^2}{4}\begin{pmatrix} \vec{\sigma}^{\,2} & 0 \\ 0 & \vec{\sigma}^{\,2} \end{pmatrix}$, $\vec{\sigma}^{\,2} = 3\,\mathbb{1}_{2\times2}$

$\left(\vec{\sigma}^{\,2} = \sigma_i \sigma_i = \frac{1}{2}\underbrace{[\sigma_i, \sigma_i]}_{0} + \frac{1}{2}\underbrace{\{\sigma_i, \sigma_i\}}_{2\delta_{ii}} \right)$ $\underline{3}$

$\Rightarrow \vec{S}_D^{\,2} = \frac{3\hbar^2}{4}\,\mathbb{1}_{4\times4}$

↓

kommutiert mit H_D

$\Rightarrow \boxed{[H_D, \vec{S}^{\,2}] = 0}$ ✓

• $[H_D, L_i] = [c\,\alpha_j p_j + \beta m c^2 + V(r), (\vec{r}\times\vec{p})_i]$

$= c\,\alpha_j\, \varepsilon_{ikl}[p_j, r_k p_l] + \underbrace{[\beta m c^2, (\vec{r}\times\vec{p})_i]}_{0}$

$+ \varepsilon_{ijk}[V(r), r_j p_k]$

$= c\,\alpha_j\, \varepsilon_{ikl}\underbrace{[p_j, r_k]}_{\frac{\hbar}{i}\delta_{jk}} p_l + c\,\alpha_j\, \varepsilon_{ikl} r_k \underbrace{[p_j, p_l]}_{0}$

$+ \varepsilon_{ijk}\underbrace{[V(r), r_j]}_{0} p_k + \varepsilon_{ijk} r_j \underbrace{[V(r), p_k]}_{-\frac{\hbar}{i}\frac{\partial V}{\partial r}\frac{1}{r} r_k}$

$= \frac{c\hbar}{i}\underbrace{\varepsilon_{ijl}\,\alpha_j p_l}_{(\vec{\alpha}\times\vec{p})_i} + \underbrace{\varepsilon_{ijk} r_j r_k}_{0}\left(-\frac{\hbar}{i}\frac{\partial V}{\partial r}\frac{1}{r}\right)$

$\boxed{[H_D, \vec{L}] = -ic\hbar\,(\vec{\alpha}\times\vec{p})}$ ✓

$$\odot\ \underline{[H_D, S_i]} = \left[c\alpha_j p_j + \beta mc^2 + V(r), \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} \sigma_i & 0 \\ 0 & \sigma_i \end{pmatrix}\right]$$

$$= c p_j \frac{\hbar}{2}\left[\begin{pmatrix} 0 & \sigma_j \\ \sigma_j & 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} \sigma_i & 0 \\ 0 & \sigma_i \end{pmatrix}\right] + \frac{\hbar}{2}mc^2 \underbrace{\left[\begin{pmatrix} \mathbb{1} & 0 \\ 0 & -\mathbb{1} \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} \sigma_i & 0 \\ 0 & \sigma_i \end{pmatrix}\right]}_{0}$$

$$+ \frac{\hbar}{2}\underbrace{\left[V(r)\,\mathbb{1}_{4\times 4}, \begin{pmatrix} \sigma_i & 0 \\ 0 & \sigma_i \end{pmatrix}\right]}_{0}$$

$$= c p_j \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & [\sigma_j, \sigma_i] \\ \underbrace{[\sigma_j, \sigma_i]}_{2i\varepsilon_{jik}\sigma_k} & 0 \end{pmatrix}$$

$$= c p_j \frac{\hbar}{\cancel{2}} \cancel{2} i \varepsilon_{jik} \underbrace{\begin{pmatrix} 0 & \sigma_k \\ \sigma_k & 0 \end{pmatrix}}_{\alpha_k}$$

$$= +i c\hbar\, \varepsilon_{ikj} \alpha_k p_j = +i c\hbar (\vec{\alpha} \times \vec{p})$$

$$\boxed{[H_D, S_i] = +i c\hbar (\vec{\alpha} \times \vec{p})_i}$$ ✓

$$\odot\ [H_D, \vec{L}^2] = [H_D, L_i L_i] = [H_D, L_i]L_i + L_i[H_D, L_i]$$

$$\boxed{= -i c\hbar \left(\vec{L}\cdot(\vec{\alpha}\times\vec{p}) + (\vec{\alpha}\times\vec{p})\cdot\vec{L}\right)}$$ ✓

$\Rightarrow$ Nur $\vec{S}_D^{\,2}$ ist bezüglich H_D eine Erhaltungsgröße

b) $$\left.\begin{aligned}[H_D, \vec{L}] &= -ic\hbar\,(\vec{\alpha}\times\vec{p})\\ [H_D, \vec{S}] &= +ic\hbar\,(\vec{\alpha}\times\vec{p})\end{aligned}\right\} [H_D, \vec{J} = \vec{L} + \vec{S}] = 0$$

$\Rightarrow$ Der Gesamtdrehimpuls $\vec{J}$ ist eine Erhaltungsgröße.

c) $\ominus$ $(\vec{p})^2 = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) - \frac{1}{r^2}\vec{L}^2$

$$\Rightarrow [\vec{L}, \vec{p}^{\,2}] = [\vec{L}, (\vec{p}^{\,2})^2] \equiv 0$$

$\ominus$ $[\vec{L}, V(r)] = 0$

$\hookrightarrow$ siehe Punkt a)

$\ominus$ $[\vec{L}, \underbrace{(\Delta V)(r)}] = 0$

$\hookrightarrow$ hängt wie $V(r)$ nur von der radialen Koordinate ab

$\ominus$ $\left[\vec{S}, \left(\frac{\vec{p}^{\,2}}{2m} + V(r) - \frac{(\vec{p}^{\,2})^2}{8m^3c^2} + \frac{\hbar^2}{8m^2c^2}\Delta V(r)\right)\mathbb{1}_{2\times2}\right] = 0$

Einheitsmatrix im Spinraum

$\Rightarrow$ Nur $H_{LS} = \frac{1}{2m^2c^2}\,\frac{1}{r}\frac{\partial V}{\partial r}\,\vec{L}\cdot\vec{S}$ kommutiert nicht mit $\vec{L}$ u. $\vec{S}$ separat:

$\rightarrow$ $[L_i, \vec{L}\cdot\vec{S}] = [L_i, L_j]\,S_j = i\,\varepsilon_{ijk}L_kS_j = i\,\vec{S}\times\vec{L}$

$\rightarrow$ $[S_i, \vec{L}\cdot\vec{S}] = [S_i, S_j]\,L_j = i\varepsilon_{ijk}S_kL_j = -i\,\vec{S}\times\vec{L}$

Aber: $[\vec{L}^2, \vec{S}\vec{L}] = [\vec{S}^2, \vec{S}\vec{L}] = 0$

$[\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}, \vec{S}\vec{L}] = 0$

$\Rightarrow \vec{L}^2, \vec{S}^2, \vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$ sind Erhaltungsgrößen!

d) Basiswechsel von $|l m_l; s m_s\rangle \rightarrow |l s; j m\rangle$
(Kopplung von Bahndrehimpuls und Spin) führt
auf Eigenfunktionen des $\vec{L}\vec{S}$ - Terms:

$$Y(\theta, \varphi) = CG_{\substack{j=l\pm 1/2 \\ m_l, s=+1/2}} Y_{l m_l} \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + CG_{\substack{j=l\pm 1/2 \\ m_l+1, s=-1/2}} Y_{l(m_l+1)} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$