

7 Addition von Drehimpulsen

Motivation:

- Elektronspin und Bahndrehimpuls sind im Wasserstoffatom dynamisch nicht unabhängig, sondern aneinander gekoppelt. Das Elektron bewegt sich im elektrostatischen Potential des Kernes mit einer Geschwindigkeit $\vec{v} = \frac{\vec{p}}{m}$. Gemäß der Elektrodynamik entspricht dem im Ruhesystem des Elektrons ein magnetisches Feld

$$\vec{B}' \approx -\frac{1}{c^2} \vec{v} \times \vec{E} \quad \left(\text{korrekt in Ordnung } \frac{v}{c} \right).$$

(\vec{B}' bezieht sich auf das Ruhesystem des Elektrons.)

- Die Energie des magnetischen Moments des Spins in diesem Magnetfeld ist

$$H_{LS} = -2\mu_B \vec{S} \cdot \vec{B}'$$

Das elektrostatische Feld im Ruhesystem des Atomkerns ist $\vec{E} = -\frac{1}{e} \frac{\partial V}{\partial r} \frac{\vec{x}}{r}$, also

$$\vec{B}' = \frac{1}{e m c^2 r} \frac{\partial V(\vec{r})}{\partial r} \vec{p} \times \vec{x}$$

und daher

$$H_{LS} = \frac{2\mu_B}{e m c^2 r} \frac{dV}{dr} \vec{L} \cdot \vec{S} \cdot \frac{1}{2}$$

(Der Faktor einhalb ist eine Korrektur, die sich in einer rigorosen Rechnung durch die Rücktransformation in das Ruhesystem des Kerns ergibt, der sog. "Thomas-Faktor").

- Der Hamiltonoperator des Wasserstoffs enthält also einen Term, der Spin und Bahndrehimpuls koppelt,

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(r) + H_{LS} \qquad H_{LS} = \frac{\mu_B}{e m c^2} \frac{1}{r} \frac{dV}{dr} \vec{L} \cdot \vec{S}$$

Was lauten die Eigenenergien und -zustände von H ?

- Was sind die Eigenzustände und -werte von $\vec{L} \cdot \vec{S}$? Wegen

$$(\vec{L} + \vec{S})^2 = \vec{L}^2 + \vec{S}^2 + 2\vec{L} \cdot \vec{S}$$

ist

$$\vec{L} \cdot \vec{S} = \frac{1}{2} \left\{ (\vec{L} + \vec{S})^2 - \vec{L}^2 - \vec{S}^2 \right\}$$

Wir kennen schon die Eigenzustände und Eigenwerte von \vec{L}^2 und \vec{S}^2 . Es gilt

$$\left[(\vec{L} + \vec{S})^2, \vec{L}^2 \right] = \left[(\vec{L} + \vec{S})^2, \vec{S}^2 \right] = 0$$

wegen $[L_i, \vec{L}^2] = [S_i, \vec{S}^2] = [L_i, S_i] = 0$.

Also gibt es gemeinsame Eigenvektoren von $\{(\vec{L} + \vec{S})^2, \vec{L}^2, \vec{S}^2\}$, die dann auch Eigenvektoren von $\vec{L} \cdot \vec{S}$ sind. Wie lauten die Eigenzustände von $(\vec{L} + \vec{S})^2$?

Dies führt auf das Problem der **Addition quantenmechanischer Drehimpulse**.

7.1 Gesamtdrehimpuls

- Für zwei Drehimpulsfreiheitsgrade $\vec{J}^{(1)}$ und $\vec{J}^{(2)}$ mit Eigenzuständen

$$\begin{aligned}(\vec{J}^{(\alpha)})^2 |j_\alpha, m_\alpha\rangle &= \hbar^2 j_\alpha(j_\alpha + 1) |j_\alpha, m_\alpha\rangle \\ J_z^{(\alpha)} |j_\alpha, m_\alpha\rangle &= \hbar m_\alpha |j_\alpha, m_\alpha\rangle\end{aligned}\quad (\alpha = 1, 2)$$

ist der Gesamtdrehimpuls

$$\vec{J} = \vec{J}^{(1)} + \vec{J}^{(2)}$$

Bemerkung: Dies ist die abgekürzte Schreibweise für $\vec{J} = \vec{J}^{(1)} \otimes \mathbb{1}^{(2)} + \mathbb{1}^{(1)} \otimes \vec{J}^{(2)}$.

- Eigenschaften des Gesamtdrehimpulses

- \vec{J} ist ein Drehimpuls

$$[J_i, J_j] = i\hbar \varepsilon_{ijk} J_k$$

- Es gilt

$$[J_z, (\vec{J}^{(\alpha)})^2] = 0 \quad (\alpha = 1, 2)$$

- Es gibt also gemeinsame Eigenzustände von \vec{J}^2 , J_z und $(\vec{J}^{(1)})^2$, $(\vec{J}^{(2)})^2$.

- Wir suchen nach den Eigenzuständen des Gesamtdrehimpulses, die die folgenden Eigenwertgleichungen erfüllen

$$\begin{aligned}\vec{J}^2 |j_1, j_2, j, m\rangle &= \hbar^2 j(j+1) |j_1, j_2, j, m\rangle \\ J_z |j_1, j_2, j, m\rangle &= \hbar m |j_1, j_2, j, m\rangle \\ (\vec{J}^{(1)})^2 |j_1, j_2, j, m\rangle &= \hbar^2 j_1(j_1+1) |j_1, j_2, j, m\rangle \\ (\vec{J}^{(2)})^2 |j_1, j_2, j, m\rangle &= \hbar^2 j_2(j_2+1) |j_1, j_2, j, m\rangle\end{aligned}$$

- Die Zustände $|j_1, j_2, j, m\rangle$ sind Elemente des Tensorprodukthilbertraumes $\mathcal{H} = \mathcal{H}^{(1)} \otimes \mathcal{H}^{(2)}$. Die Tensorproduktbasis in \mathcal{H} ist $\{|j_1, m_1\rangle \otimes |j_2, m_2\rangle\}$. Es gibt daher eine Darstellung der Zustände $|j_1, j_2, j, m\rangle$ in der Tensorproduktbasis

$$|j_1, j_2, j, m\rangle = \sum_{m_1=-j_1}^{j_1} \sum_{m_2=-j_2}^{j_2} c_{j_1 m_1, j_2 m_2}^{j m} |j_1, m_1\rangle \otimes |j_2, m_2\rangle$$

Die Amplituden

$$c_{j_1 m_1, j_2 m_2}^{j m} = \langle j_1, j_2, j, m | (|j_1, m_1\rangle \otimes |j_2, m_2\rangle)$$

werden als **Clebsch-Gordan-Koeffizienten** bezeichnet. Sie können aus den Eigenwertgleichungen konstriert werden.

- Die Werte j_1 und j_2 der individuellen Drehimpulse sind vorgegeben. Wir verwenden daher die Kurzschreibweise für die Tensorproduktzustände

$$|m_1; m_2\rangle := |j_1, m_1\rangle \otimes |j_2, m_2\rangle$$

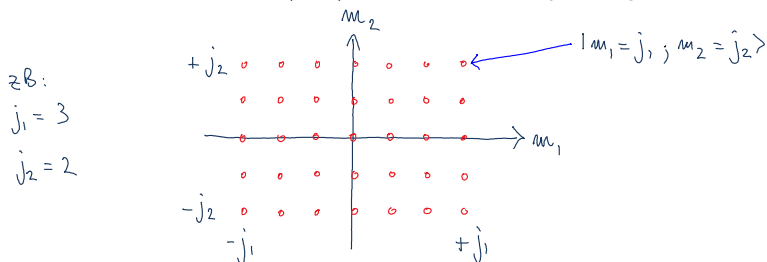
und für die Zustände des Gesamtdrehimpulses

$$|j, m\rangle := |j_1, j_2, j, m\rangle$$

- Die Dimension des Hilbertraumes $\mathcal{H}^{(1)}$ des ersten Drehimpulses ist $\dim \mathcal{H}_1 = 2j_1 + 1$ die Dimension von $\mathcal{H}^{(2)}$ ist $\dim \mathcal{H}_2 = 2j_2 + 1$. In der Tensorproduktbasis von $\mathcal{H} = \mathcal{H}^{(1)} \otimes \mathcal{H}^{(2)}$ gibt es daher $(2j_1 + 1)(2j_2 + 1)$ Zustände,

$$\dim \mathcal{H} = (2j_1 + 1)(2j_2 + 1)$$

Es muss daher ebensoviele Zustände $|j, m\rangle$ des Gesamtdrehimpulses geben.



- Die Zustände $|m_1; m_2\rangle$ der Tensorproduktbasis sind Eigenzustände der z -Komponente des Gesamtdrehimpulses J_z zum Eigenwert $\hbar m = \hbar(m_1 + m_2)$

$$J_z |m_1; m_2\rangle = (J_z^{(1)} + J_z^{(2)}) |m_1; m_2\rangle = \hbar(m_1 + m_2) |m_1; m_2\rangle$$

- Die maximalen Werte von m_1 bzw. m_2 sind j_1 bzw. j_2 . Daher kann m maximal den Wert $m = j_1 + j_2$ annehmen. Der zugehörige Eigenzustand ist eindeutig $|m_1 = j_1; m_2 = j_2\rangle$,

$$J_z |j_1; j_2\rangle = \hbar(j_1 + j_2) |j_1; j_2\rangle$$

- Der Zustand $|m_1 = j_1; m_2 = j_2\rangle$ ist auch ein Eigenzustand von \vec{J}^2 mit dem maximalen Eigenwert $j = (j_1 + j_2)$,

$$\vec{J}^2 |j_1; j_2\rangle = \hbar(j_1 + j_2)(j_1 + j_2 + 1) |j_1; j_2\rangle$$

Beweis:

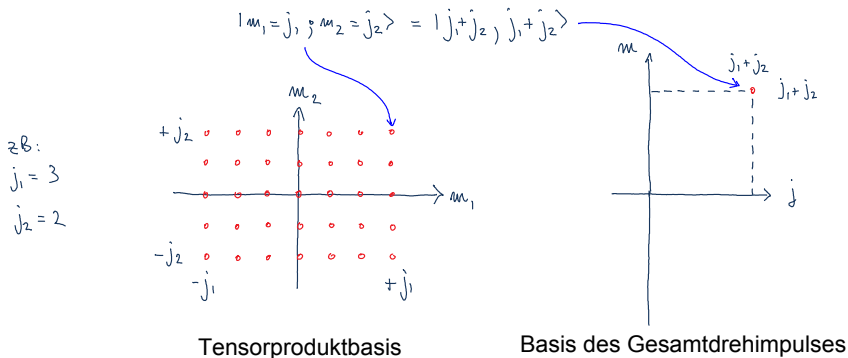
- $\vec{J}^2 = (\vec{J}^{(1)})^2 + (\vec{J}^{(2)})^2 + 2\vec{J}^{(1)} \cdot \vec{J}^{(2)}$
- $\vec{J}^{(1)} \cdot \vec{J}^{(2)} = J_z^{(1)} \cdot J_z^{(2)} + \frac{1}{2} \left(J_+^{(1)} J_-^{(2)} + J_-^{(1)} J_+^{(2)} \right)$ mit $J_{\pm}^{(\alpha)} = \left(J_x^{(\alpha)} \pm iJ_y^{(\alpha)} \right)$ und $\alpha = 1, 2$

- Daher ist wegen $J_+^{(\alpha)} |m_1 = j_1; m_2 = j_2\rangle = 0$

$$\begin{aligned}\vec{J}^2 |j_1; j_2\rangle &= \left[(\vec{J}^{(1)})^2 + (\vec{J}^{(2)})^2 + 2J_z^{(1)} J_z^{(2)} + J_+^{(1)} J_-^{(2)} + J_-^{(1)} J_+^{(2)} \right] |j_1; j_2\rangle \\ &= \hbar^2 [j_1(j_1 + 1) + j_2(j_2 + 1) + 2j_1 j_2] |j_1; j_2\rangle \\ &= \hbar^2 (j_1 + j_2)(j_1 + j_2 + 1) |j_1; j_2\rangle\end{aligned}$$

- Damit ist der Eigenzustand des Gesamtspins mit maximalem Wert von $j = j_1 + j_2$ und $m = j_1 + j_2$ gefunden,

$$|j_1 + j_2, j_1 + j_2\rangle = |j_1; j_2\rangle$$



- Aus dem Zustand $|j = j_1 + j_2, m = j_1 + j_2\rangle$ zu maximalem Wert $m = j_1 + j_2$ können mittels des Absteigeoperators alle Zustände $|j = j_1 + j_2, m\rangle$ zu kleineren Werten von m konstruiert werden: Einerseits gilt

$$\begin{aligned} J_- |j_1 + j_2, j_1 + j_2\rangle &= \sqrt{(j_1 + j_2)(j_1 + j_2 + 1) - (j_1 + j_2)(j_1 + j_2 - 1)} |j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 1\rangle \\ &= \sqrt{2(j_1 + j_2)} |j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 1\rangle \end{aligned}$$

andererseits ist

$$\begin{aligned} J_- |j_1 + j_2, j_1 + j_2\rangle &= (J_-^{(1)} + J_-^{(2)}) |j_1; j_2\rangle \\ &= \sqrt{j_1(j_1 + 1) - j_1(j_1 - 1)} |j_1 - 1; j_2\rangle + \sqrt{j_2(j_2 + 1) - j_2(j_2 - 1)} |j_1; j_2 - 1\rangle \\ &= \sqrt{2j_1} |j_1 - 1; j_2\rangle + \sqrt{2j_2} |j_1; j_2 - 1\rangle \end{aligned}$$

Daher ist

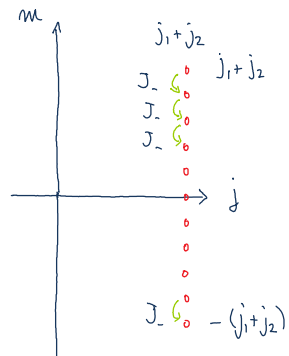
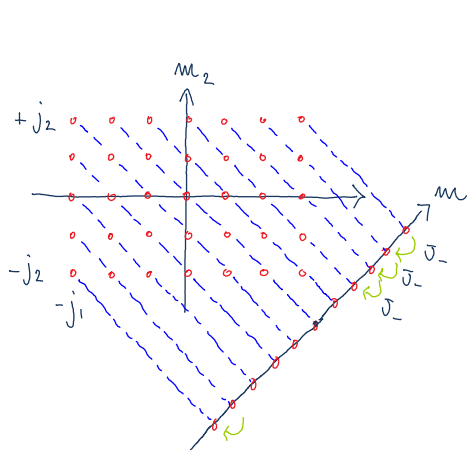
$$|j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 1\rangle = \sqrt{\frac{j_1}{j_1 + j_2}} |j_1 - 1; j_2\rangle + \sqrt{\frac{j_2}{j_1 + j_2}} |j_1; j_2 - 1\rangle$$

Durch wiederholtes Anwenden des Absteigeoperators J_- können alle Zustände $|j = j_1 + j_2, m\rangle$ mit

$$-j = -(j_1 + j_2) \leq m \leq j = j_1 + j_2$$

konstruiert werden.

- Damit erhalten wir $2(j_1 + j_2) + 1$ Elemente der Basis der Gesamtdrehimpulszustände.



Es fehlen also noch $(2j_1 + 1)(2j_2 + 1) - (2(j_1 + j_2) + 1) = 4j_1j_2$ Zustände.

- Eigenzustände des Gesamtdrehimpulses J_z zum Eigenwert $\hbar m = \hbar(j_1 + j_2 - 1)$ müssen aus den beiden Produktzuständen

$$\{|m_1 = j_1 - 1; m_2 = j_2\rangle, |m_1 = j_1; m_2 = j_2 - 1\rangle\}$$

aufgebaut sein, denn nur dann ist

$$m = m_1 + m_2 = j_1 + j_2 - 1.$$

Ein solcher Zustand ist schon bekannt, nämlich

$$|j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 1\rangle = \sqrt{\frac{j_1}{j_1 + j_2}} |j_1 - 1; j_2\rangle + \sqrt{\frac{j_2}{j_1 + j_2}} |j_1; j_2 - 1\rangle$$

Das bedeutet es gibt genau *einen* dazu orthogonalen Zustand zum selben Eigenwert $\hbar m = \hbar(j_1 + j_2 - 1)$ von J_z gibt und zwar

$$\sqrt{\frac{j_2}{j_1 + j_2}} |j_1 - 1; j_2\rangle - \sqrt{\frac{j_1}{j_1 + j_2}} |j_1; j_2 - 1\rangle$$

Der Zustand ist unbestimmt bis auf eine globale Phase. Phasenkonvention: Phase = +1.

- Der Zustand

$$\sqrt{\frac{j_2}{j_1+j_2}} |j_1-1; j_2\rangle - \sqrt{\frac{j_1}{j_1+j_2}} |j_1; j_2-1\rangle$$

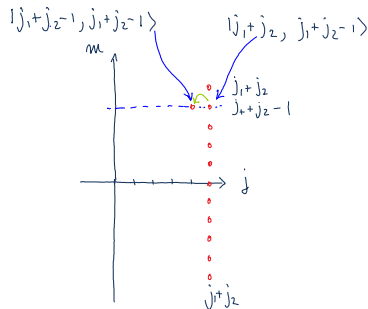
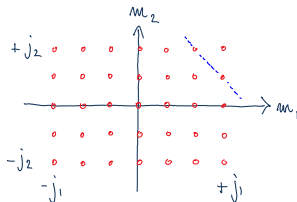
ist ein Eigenzustand von \vec{J}^2 zum Eigenwert $\hbar^2 j(j+1)$ mit $j = j_1 + j_2 - 1$.

Beweis: Man benützt $\vec{J}^2 = (\vec{J}^{(1)})^2 + (\vec{J}^{(2)})^2 + 2J_z^{(1)}J_z^{(2)} + J_+^{(1)}J_-^{(2)} + J_-^{(1)}J_+^{(2)}$ und die bekannte Wirkung der Operatoren auf der rechten Seite auf die Tensorproduktzustände.

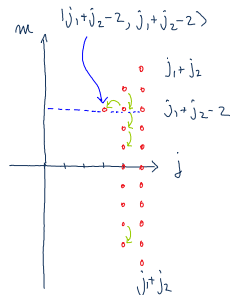
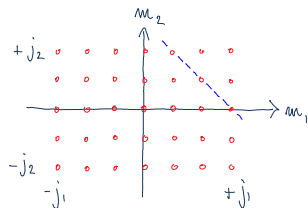
Daher ist

$$|j_1 + j_2 - 1, j_1 + j_2 - 1\rangle = \sqrt{\frac{j_2}{j_1+j_2}} |j_1-1; j_2\rangle - \sqrt{\frac{j_1}{j_1+j_2}} |j_1; j_2-1\rangle$$

z.B.:
 $j_1 = 3$
 $j_2 = 2$



z.B.:
 $j_1 = 3$
 $j_2 = 2$



- Durch Anwenden des Absteigeoperators J_- lassen sich aus $|j = j_1 + j_2 - 1, m = j_1 + j_2 - 1\rangle$ wieder alle Zustände mit $-(j_1 + j_2 - 1) \leq m \leq (j_1 + j_2 - 1)$ konstruieren.
- Im Unterraum von Tensorproduktzuständen zum Eigenwert $\hbar m = \hbar(j_1 + j_2 - 2)$ gibt es drei Zustände

$$\{|m_1 = j_1 - 2; m_2 = j_2\rangle, |m_1 = j_1 - 1; m_2 = j_2 - 1\rangle, |m_1 = j_1; m_2 = j_2 - 2\rangle\}$$

d.h. es gibt wieder genau einen zu

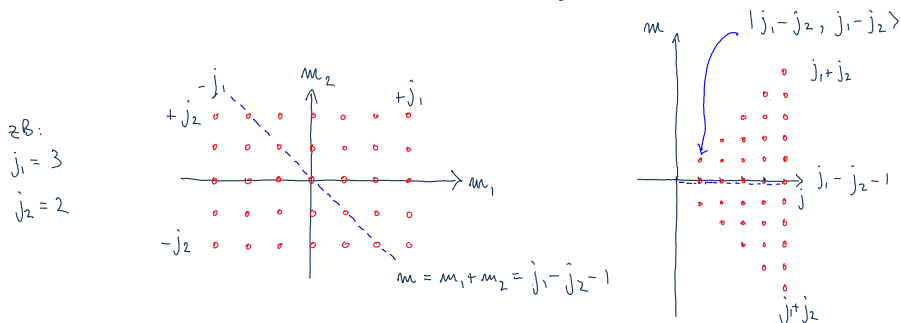
$$|j = j_1 + j_2 - 1, m = j_1 + j_2 - 2\rangle \quad \text{und} \quad |j = j_1 + j_2, m = j_1 + j_2 - 2\rangle$$

orthogonalen Zustand. Damit lässt sich der Gesamtdrehimpulszustand

$$|j = j_1 + j_2 - 2, m = j_1 + j_2 - 2\rangle$$

konstruieren. Durch Anwenden von J_- folgen alle Zustände $|j_1 + j_2 - 2, m\rangle$ etc.

- Mit dieser Methode können Zustände zu immer kleineren j -Werten konstruiert werden.



Es sei $j_1 \geq j_2$ (o.B.d.A.). Im Unterraum von Tensorproduktzuständen zum Eigenwert $\hbar m = \hbar(j_1 - j_2 - 1)$ gibt es $2j_2 + 1$ Zustände

$$\{|m_1 = j_1 - 2j_2 - 1; m_2 = j_2\rangle, |m_1 = j_1 - 2j_2; m_2 = j_2 - 1\rangle, \dots, |m_1 = j_1 - 1; m_2 = -j_2\rangle\}$$

Durch Anwendung des Absteigoperators können in diesem Unterraum die Zustände des Gesamtdrehimpulses

$$\{|j = j_1 + j_2, m = j_1 - j_2 - 1\rangle, |j = j_1 + j_2 - 1, m = j_1 - j_2 - 1\rangle, \dots, |j = j_1 - j_2, m = j_1 - j_2 - 1\rangle\}$$

konstruiert werden. Dies sind $j_1 + j_2 - (j_1 - j_2 - 1) = 2j_2 + 1$ Zustände. Daher kann *kein* weiterer Zustand durch Orthogonalisierung gefunden werden.

- Insgesamt ergeben sich die möglichen Werte für j und m

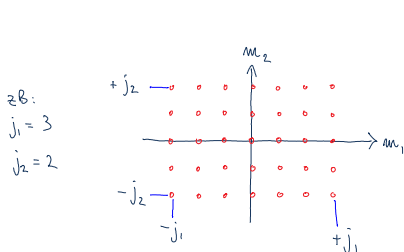
$$|j_1 - j_2| \leq j \leq j_1 + j_2$$

$$-j \leq m \leq j$$

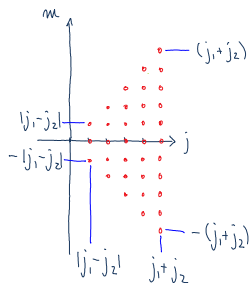
Es gibt also

$$\sum_{j=|j_1-j_2|}^{j_1+j_2} \sum_{m=-j}^j 1 = (2j_1 + 1)(2j_2 + 1)$$

Zustände des Gesamtdrehimpulses. Dies entspricht der Dimension des Tensorprodukt-Hilbertraumes $\dim \mathcal{H} = (2j_1 + 1)(2j_2 + 1)$.



Tensorproduktbasis



Basis der Gesamtdrehimpulszustände

Zusammenfassung

- **Gegeben:** Zwei Drehimpulse $\vec{J}^{(\alpha)}$ ($\alpha = 1, 2$) mit festem j_1 und j_2

$$\begin{aligned}(\vec{J}^{(\alpha)})^2 |j_\alpha, m_\alpha\rangle &= \hbar^2 j_\alpha(j_\alpha + 1) |j_\alpha, m_\alpha\rangle \\ J_z^{(\alpha)} |j_\alpha, m_\alpha\rangle &= \hbar m_\alpha |j_\alpha, m_\alpha\rangle\end{aligned}\quad (\alpha = 1, 2)$$

Die Hilberträume der einzelnen Drehimpulse sind $\mathcal{H}_\alpha = \mathbb{C}^{2j_\alpha+1}$.

- Der **Gesamtdrehimpuls** ist

$$\vec{J} = \vec{J}^{(1)} + \vec{J}^{(2)}$$

mit Eigenzuständen $|j_1, j_2, j, m\rangle =: |j, m\rangle$

$$\begin{aligned}\vec{J}^2 |j, m\rangle &= \hbar^2 j(j+1) |j, m\rangle \\ J_z |j, m\rangle &= \hbar m |j, m\rangle\end{aligned}$$

Die Zustände $|j, m\rangle$ sind Elemente des Tensorprodukthilbertraumes $\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ mit der Tensorproduktbasis

$$\{|j_1, m_1\rangle \otimes |j_2, m_2\rangle =: |m_1; m_2\rangle\}$$

Der Tensorprodukthilbertraum ist $\mathcal{H}_\alpha = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2 = \mathbb{C}^{(2j_1+1)(2j_2+1)}$

- **Problem:** Wie lautet die Darstellung der Eigenzustände $|j_1, j_2, j, m\rangle$ von $\{(\vec{J}^{(1)})^2, (\vec{J}^{(2)})^2, (\vec{J})^2, J_z\}$ in der Tensorproduktbasis?
- **Lösung:** Es gibt Gesamtdrehimpulszustände $|jm\rangle$ mit:

$$|j_1 - j_2| \leq j \leq j_1 + j_2 \qquad -j \leq m \leq +j$$

- **Konstruktion:**

- Der Zustand zu maximalen $j = j_1 + j_2$ und maximalen $m = j_1 + j_2$ ist

$$|j = j_1 + j_2, m = j_1 + j_2\rangle = |j_1, m_1 = j_1\rangle \otimes |j_2, m_2 = j_2\rangle$$

- Durch Anwenden von $J_- = J_-^{(1)} - J_-^{(2)}$ erhält man alle Zustände $|j = j_1 + j_2, m\rangle$ mit $-(j_1 + j_2) \leq m \leq j_1 + j_2$
- Den Zustand mit $j = j_1 + j_2 - 1$ und maximalen $m = j_1 + j_2 - 1$ ist eine Linearkombination von $|j_1, m_1 = j_1 - 1\rangle \otimes |j_2, m_2 = j_2\rangle$ und $|j_1, m_1 = j_1\rangle \otimes |j_2, m_2 = j_2 - 1\rangle$ und orthogonal zu $|j = j_1 + j_2, m = j_1 + j_2 - 1\rangle$ und damit eindeutig festgelegt.
- Durch Anwenden von J_- erhält man alle Zustände $|j = j_1 + j_2 - 1, m\rangle$
- Der Zustand $|j = j_1 + j_2 - 2, m = j_1 + j_2 - 2\rangle$ ist eine Linearkombination von

$$\{|j_1, j_1 - 2\rangle \otimes |j_2, j_2\rangle, \quad |j_1, j_1 - 1\rangle \otimes |j_2, j_2 - 1\rangle, \quad |j_1, j_1\rangle \otimes |j_2, j_2 - 2\rangle\}$$

und orthogonal zu $|j = j_1 + j_2, m = j_1 + j_2 - 2\rangle$ und $|j = j_1 + j_2 - 1, m = j_1 + j_2 - 2\rangle$ und damit wieder eindeutig bestimmt.

- usw.

• **Beispiel: Addition von zwei Spin- $\frac{1}{2}$ Systemen**

- $j_1 = \frac{1}{2}, j_2 = \frac{1}{2}$ also ist $j = 0, 1$
- $|j = 1, m = 1\rangle = |\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}\rangle \otimes |\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}\rangle =: |+; +\rangle$
- Einerseits $J_- |j = 1, m = 1\rangle = \hbar\sqrt{1(1+1) - 1(1-1)} |j = 1, m = 0\rangle = \sqrt{2}\hbar |j = 1, m = 0\rangle$
 andererseits $J_- |j = 1, m = 1\rangle = (J_-^{(1)} + J_-^{(2)}) |+; +\rangle = \hbar(|-; +\rangle + |+; -\rangle)$

Daher

$$|j = 1, m = 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|-; +\rangle + |+; -\rangle)$$

- Anwenden des Absteigeoperators ergibt einerseits $J_- |j = 1, m = 0\rangle = \sqrt{2}\hbar |j = 1, m = -1\rangle$
 und andererseits $J_- |j = 1, m = 0\rangle = (J_-^{(1)} + J_-^{(2)}) \frac{1}{\sqrt{2}}(|-; +\rangle + |+; -\rangle) = \sqrt{2}\hbar |-; -\rangle$ Da-
 her

$$|j = 1, m = -1\rangle = |-; -\rangle$$

- Um den Zustand $|j = 1, m = 0\rangle$ zu konstruieren suchen wir einen Superpositionszustand der Art $|j = 0, m = 0\rangle = c_1 |-; +\rangle + c_2 |+; -\rangle$ der zu $|j = 1, m = 0\rangle$ orthogonal ist. Resultat:

$$|j = 1, m = 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|-; +\rangle - |+; -\rangle)$$

7.2 Addition von Bahndrehimpuls und Spin des Elektrons

- Gegeben: Bahndrehimpuls mit $l = 0, 1, 2, \dots$ und Spin $s = \frac{1}{2}$
Gesucht: Eigenzustände $|l, s = \frac{1}{2}, j, m\rangle$ mit

$$\vec{L}^2 |l \frac{1}{2} j m\rangle = \hbar^2 l(l+1) |l \frac{1}{2} j m\rangle$$

$$\vec{S}^2 |l \frac{1}{2} j m\rangle = \hbar^2 \frac{1}{2} \cdot \frac{3}{2} |l \frac{1}{2} j m\rangle$$

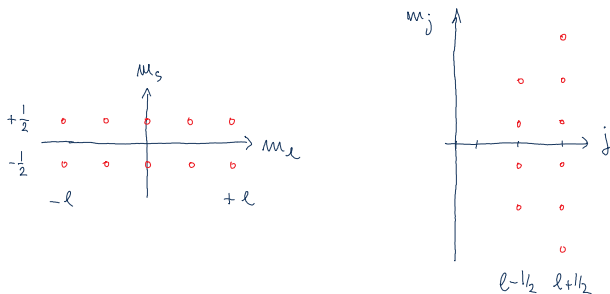
$$\vec{J}^2 |l \frac{1}{2} j m\rangle = \hbar^2 j(j+1) |l \frac{1}{2} j m\rangle$$

$$J_z |l \frac{1}{2} j m\rangle = \hbar m |l \frac{1}{2} j m\rangle$$

- Für gegebenes l ist $|l - \frac{1}{2}| \leq j \leq l + \frac{1}{2}$ also

$$j = \frac{1}{2} \quad \text{für } l = 0$$

$$j = l \pm \frac{1}{2} \quad \text{für } l \geq 1$$



- Die Eigenzustände sind

$$|l, \frac{1}{2}, j = l \pm \frac{1}{2}, m\rangle = \sqrt{\frac{l \mp m + \frac{1}{2}}{2l+1}} |l, m + \frac{1}{2}\rangle \otimes |\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle \pm \sqrt{\frac{l \pm m + \frac{1}{2}}{2l+1}} |l, m - \frac{1}{2}\rangle \otimes |\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}\rangle$$

In Ortsdarstellung und Spinorschreibweise ergeben sich die **Spinorkugelflächenfunktionen**

$$\langle \vec{x} | l, \frac{1}{2}, j = l + \frac{1}{2}, m \rangle = \frac{1}{\sqrt{2l+1}} \begin{pmatrix} \pm \sqrt{l \pm m + \frac{1}{2}} Y_l^{m-\frac{1}{2}}(\theta, \phi) \\ \sqrt{l \mp m + \frac{1}{2}} Y_l^{m+\frac{1}{2}}(\theta, \phi) \end{pmatrix} \cdot F(r) =: \mathcal{Y}_l^{j=l \pm \frac{1}{2}, m} \cdot F(r)$$

$F(r)$ ist eine beliebige Funktion, die nur von der radialen Koordinate abhängt.

- Anwendung auf das Wasserstoffatom:**

Bisher wurde das VSKO

$$\{H, \vec{L}^2, L_z, \vec{S}^2, S_z\}.$$

verwendet, um die elektronischen Zustände zu beschreiben. Die Eigenzustände dieses VSKOs sind Tensorprodukte von Bewegungs- und Spinzustand

$$|nlm_l\rangle \otimes |s = \frac{1}{2}, m_s\rangle = |nlm_l, sm_s\rangle$$

Alternativ können die Eigenzustände des VSKOs

$$\{H, \vec{L}^2, \vec{S}^2, \vec{J}^2, J_z\}$$

verwendet werden, also

$$|nls = \frac{1}{2}jm\rangle$$

In Ortsdarstellung und Spinorschreibweise

$$\Psi_{nlsjm}(\vec{x}) = \langle \vec{x} | nlsjm \rangle = \mathcal{Y}_l^{j=l\pm\frac{1}{2},m}(\theta, \phi) R_{nl}(r)$$

Der Hamiltonoperator des Wasserstoffatoms mit Spin-Bahn-Kopplung ist

$$H = H_0 + H_{LS} \qquad H_0 = \frac{p^2}{2m} + V(r) \qquad H_{LS} = \frac{\mu_B}{e m c^2} \frac{1}{r} \frac{dV}{dr} \vec{L} \cdot \vec{S}$$

Die Zustände $\Psi_{nlsjm}(\vec{x})$ sind Eigenzustände von H_0 und $\vec{L} \cdot \vec{S}$, aber nicht von H_{LS} .