

$$\Rightarrow \vec{B} = \frac{1}{ec^2} (\vec{r} \wedge \vec{p}) \frac{1}{r} \frac{dV}{dr}$$

$$= -\frac{1}{ec^2} (\vec{r} \wedge \vec{p}) \frac{1}{rm} \frac{dV}{dr}$$

$$= -\frac{1}{mc^2} \frac{1}{r} \frac{dV}{dr} \vec{L}$$

\leadsto Beitrag zur Energie

$$-\vec{m}_{int} \cdot \vec{B} = + \frac{g\hbar}{2M^2c^2} \frac{1}{r} \frac{dV}{dr} \vec{\sigma} \cdot \vec{L}$$

$$\hat{H} = \left(\frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m} + \hat{V}(\hat{r}) \right) \mathbb{1} + W(\hat{r}) (\vec{\sigma} \cdot \hat{\vec{L}})$$

$$W(r) := \frac{g-1}{2} \frac{\hbar}{Mc^2} \frac{1}{r} \frac{dV}{dr}$$

-1: Ergebnis
einer relativistischen
Rechnung

Der Term $W(r) (\vec{\sigma} \cdot \vec{L})$ ist die
Spin-Orbit Kopplung, und beschreibt
die Wechselwirkung des intrinsischen
magnetischen Moment mit dem durch
das Elektron erzeugten Magnetfeld.

Es gilt:

$$\vec{\sigma} \cdot \hat{\vec{L}} = \begin{pmatrix} \hat{L}_z & \hat{L}_x - i\hat{L}_y \\ \hat{L}_x + i\hat{L}_y & -\hat{L}_z \end{pmatrix}$$

$$[\vec{\sigma} \cdot \hat{\vec{L}}, \hat{L}_z] = \begin{pmatrix} \hat{L}_z & \hat{L}_x - i\hat{L}_y \\ \hat{L}_x + i\hat{L}_y & -\hat{L}_z \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{L}_z & 0 \\ 0 & \hat{L}_z \end{pmatrix}$$

$$- \begin{pmatrix} \hat{L}_z & 0 \\ 0 & \hat{L}_z \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{L}_z & \hat{L}_x - i\hat{L}_y \\ \hat{L}_x + i\hat{L}_y & -\hat{L}_z \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} \hat{L}_z^2 & \hat{L}_x \hat{L}_z - i\hat{L}_y \hat{L}_z \\ \hat{L}_x \hat{L}_z + i\hat{L}_y \hat{L}_z & -\hat{L}_z^2 \end{pmatrix}$$

$$- \begin{pmatrix} \hat{L}_z^2 & \hat{L}_z \hat{L}_x - i\hat{L}_z \hat{L}_y \\ \hat{L}_z \hat{L}_x + i\hat{L}_y & -\hat{L}_z^2 \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} 0 & [\hat{L}_x, \hat{L}_z] - i[\hat{L}_y, \hat{L}_z] \\ [\hat{L}_x, \hat{L}_z] + i[\hat{L}_y, \hat{L}_z] & 0 \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} 0 & -i\hat{L}_y + \hat{L}_x \\ -i\hat{L}_y - \hat{L}_x & 0 \end{pmatrix}$$

$\neq 0$!

Es gilt auch:

$$[\vec{\sigma} \cdot \hat{L}, \sigma_z]$$

$$= \begin{pmatrix} \hat{L}_z & \hat{L}_x - i\hat{L}_y \\ \hat{L}_x + i\hat{L}_y & -\hat{L}_z \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{L}_z & \hat{L}_x - i\hat{L}_y \\ \hat{L}_x + i\hat{L}_y & -\hat{L}_z \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} \hat{L}_z & -\hat{L}_x + i\hat{L}_y \\ \hat{L}_x + i\hat{L}_y & \hat{L}_z \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} \hat{L}_z & \hat{L}_x - i\hat{L}_y \\ -\hat{L}_x - i\hat{L}_y & \hat{L}_z \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} 0 & -2(\hat{L}_x - i\hat{L}_y) \\ 2(\hat{L}_x + i\hat{L}_y) & 0 \end{pmatrix}$$

$$\neq 0$$

Es folgt:

$$[\hat{H}, \hat{L}_z] = W(r) [\vec{\sigma} \cdot \hat{L}, \hat{L}_z] \neq 0$$

$$[\hat{H}, \hat{S}_z] = W(r) [\vec{\sigma} \cdot \hat{L}, \hat{S}_z] \neq 0$$

$$[\hat{H}, \hat{\vec{L}}] \neq 0$$

$$[\hat{H}, \hat{\vec{S}}] \neq 0$$

Weder der orbitale
Drehimpuls $\hat{\vec{L}}$
noch der Spin
Sind erhalten!

ABER: Sei

$$\hat{\vec{J}} = \hat{\vec{L}} + \hat{\vec{S}}$$

Totaler / Gesamt
Drehimpuls

Dann gilt

$$[\hat{H}, \hat{J}_z] = [\hat{H}, \hat{L}_z] + [\hat{H}, \hat{S}_z] = 0 \quad !$$

und allgemeiner

$$[\hat{H}, \hat{\vec{J}}] = 0$$

Der totale Drehimpuls
ist erhalten.

Kommutecons - Relationen:

$$[\hat{J}_x, \hat{J}_y] = i \hat{J}_z$$

$$[\hat{J}_y, \hat{J}_z] = i \hat{J}_x$$

$$[\hat{J}_z, \hat{J}_x] = i \hat{J}_y$$

Kommulations - Relationen
des Drehimpulsoperators.

Es gilt: $[\hat{J}, \hat{L}] = [\hat{J}, \hat{S}] = [\hat{L}, \hat{S}] = 0$

aber: $[\hat{J}^2, \hat{L}] \neq 0$

$[\hat{J}^2, \hat{S}] \neq 0$

dazu: $[\hat{J}^2, \hat{L}_z] = [\cancel{\hat{L}^2}, \hat{L}_z] + [\cancel{\hat{S}^2}, \hat{L}_z] + 2 \underbrace{[\hat{L} \cdot \hat{S}, \hat{L}_z]}_{\neq 0}$

Frage: Was ist das Spektrum von $\hat{L} \cdot \hat{S}$?

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

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

Nehmen wir an wir kennen den ℓ -Wert für \hat{L} .

$$\rightsquigarrow \begin{cases} \hat{L}^2 = \hbar^2 \ell(\ell+1) \\ \hat{S}^2 = \hbar^2 \frac{3}{4} \end{cases}$$

Was ist der Wert von \hat{J}^2 .

\rightsquigarrow muss von der Form $\hbar^2 j(j+1)$ sein

\rightsquigarrow Was ist j ?

Addition von Drehimpulsen

Wiederholung: Eigenvektoren von \hat{L}_z und \hat{L}^2 .

Sei $|l, m\rangle$ eine ONB aus Eigenvektoren für \hat{L}_z und \hat{L}^2 :

$$\langle l, m | l', m' \rangle = \delta_{ll'} \delta_{mm'}$$

$$\hat{L}_z |l, m\rangle = \hbar m |l, m\rangle$$

$$\hat{L}^2 |l, m\rangle = \hbar^2 l(l+1) |l, m\rangle$$

Auf- und Absteigoperatoren

$$\hat{L}_{\pm} = \hat{L}_x \pm i \hat{L}_y = \hat{L}_{\mp}^{+}$$

$$[\hat{L}_z, \hat{L}_{\pm}] = \pm \hbar \hat{L}_{\pm}$$

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

$$\hat{L}_{\pm} |l, m\rangle = \hbar \sqrt{(l \mp m)(l \pm m + 1)} |l, m \pm 1\rangle$$

Genauso: Sei $\{|+\rangle, |-\rangle\}$ eine ONB für \vec{S} :

$$\langle +|+\rangle = \langle -|-\rangle = 1, \quad \langle +|- \rangle = 0$$

$$\hat{S}_z | \pm \rangle = \pm \frac{\hbar}{2} | \pm \rangle$$

$$\hat{S}^2 | \pm \rangle = \hbar^2 \frac{3}{4} | \pm \rangle$$

$$\hat{S}_{\pm} = \hat{S}_x \pm i \hat{S}_y$$

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

$$\hat{S}_+ |+\rangle = \hat{S}_- |-\rangle = 0$$

$$\hat{S}_- |+\rangle = \hbar |-\rangle$$

$$\hat{S}_+ |-\rangle = \hbar |+\rangle$$

Setup für \hat{S} :

* Unser Hilbertraum ist

$$\mathcal{H} = L^2(R_+, r^2 dr) \otimes L^2(S^2, d\Omega) \otimes \mathbb{C}^2$$

Radial Anteil
invariant unter
 \hat{L} und \hat{S}

Hier agiert
 \hat{L} , aber
nicht \hat{S}
ONB

Hier agiert \hat{S} ,
aber nicht \hat{L}
ONB: $|+\rangle, |-\rangle$

$$Y_l^m(\theta, \phi) \leftrightarrow |l, m\rangle$$

* Für festes l brauchen wir nur einen $2l+1$ -dim Unterraum von $L^2(S^2, d\Omega)$; mit ONB $|l, m\rangle$.

* Es reicht dann für unsere Diskussion sich den Hilbertraum

$$\mathcal{H}' = \mathbb{C}^{2l+1} \otimes \mathbb{C}^2$$

Hier agiert \hat{L} , aber
nicht \hat{S} ; $m = -l, \dots, l$
ONB

Hier agiert \hat{S} ,
aber nicht \hat{L} , ONB; $|+\rangle, |-\rangle$

* Eine ONB für \mathcal{H}' ist

$$\{|e,m\rangle \otimes |s\rangle : -e \leq m \leq e, s = \pm\}$$

Notation: $|e,m\rangle \otimes |s\rangle =: |e,m\rangle |s\rangle$

* $\hat{\vec{J}}^2$ und \hat{J}_z sind Hermitische Operatoren auf \mathcal{H}' :

$$\hat{J}_z = \hat{L}_z \otimes \mathbb{1} + \mathbb{1} \otimes \hat{S}_z$$

* Da $[\hat{J}_z, \hat{L}_z] = [\hat{J}_z, \hat{S}_z] = 0$, \hat{J}_z ist diagonal in der obigen ONB:

$$\begin{aligned}\hat{J}_z |e,m\rangle |s\rangle &= (\hat{L}_z |e,m\rangle) |s\rangle + |e,m\rangle (\hat{S}_z |s\rangle) \\ &= \hbar \left(m + \frac{s}{2}\right) |e,m\rangle |s\rangle\end{aligned}$$

* Da $[\hat{\vec{J}}^2, \hat{L}_z] \neq 0$ und $[\hat{\vec{J}}^2, \hat{S}_z] \neq 0$, $\hat{\vec{J}}^2$ ist NICHT diagonal in dieser Basis!

→ Es gibt eine andere ONB
in der $\hat{\vec{J}}^2$ und \hat{J}_z diagonal sind

→ Basiswechsel?

Notation: $|J, M\rangle \in \mathcal{H}^1$

$$\hat{\vec{J}}^2 |J, M\rangle = \hbar^2 J(J+1) |J, M\rangle$$

$$\hat{J}_z |J, M\rangle = \hbar M |J, M\rangle$$

→ Wir können $|J, M\rangle$ in der ONB schreiben:

→ Aber: Welche Werte für J

(Für gegebenes J , $M = -J, \dots, J$.)

FAKT: • $\hat{J}_+ |J, J\rangle = \hat{J}_- |J, -J\rangle = 0$

• Falls $\hat{J}_+ |J, M\rangle = 0$ und $|J, M\rangle \neq 0$, dann $M = J$.

* Es gilt

$$\hat{J}_z |\ell, \ell\rangle |+\rangle = (\ell + \frac{1}{2})\hbar |\ell, \ell\rangle |+\rangle$$

und

$$\hat{J}_+ |\ell, \ell\rangle |+\rangle = 0$$

$$\Rightarrow |\ell + \frac{1}{2}, \ell + \frac{1}{2}\rangle = |\ell, \ell\rangle |+\rangle$$

* $\hat{J}_- |\ell + \frac{1}{2}, \ell + \frac{1}{2}\rangle = \hbar \sqrt{2\ell+1} |\ell + \frac{1}{2}, \ell - \frac{1}{2}\rangle$

"
 $(\hat{L}_- |\ell, \ell\rangle) |+\rangle + |\ell, \ell\rangle (\hat{S}_- |+\rangle)$

$$= \hbar \sqrt{2\ell} |\ell, \ell-1\rangle |+\rangle + \hbar |\ell, \ell\rangle |->$$

$$\Rightarrow |\ell + \frac{1}{2}, \ell - \frac{1}{2}\rangle = \sqrt{\frac{2\ell}{2\ell+1}} |\ell, \ell-1\rangle |+\rangle + \frac{1}{\sqrt{2\ell+1}} |\ell, \ell\rangle |->$$

* Wir können so weitermachen, und
 $2(\ell + \frac{1}{2}) + 1 = 2\ell + 2$ Vektoren $|\ell + \frac{1}{2}, M\rangle$, mit
 $M = -\ell - \frac{1}{2}, \dots, \ell + \frac{1}{2}$, finden.

* Es gibt eine 2te Linear kombination mit \hat{J}_z Eigenwert $\ell - \frac{1}{2}$ □

$$|v\rangle := \frac{-1}{\sqrt{2e+1}} |\ell, \ell-1\rangle |+\rangle + \sqrt{\frac{2e}{2e+1}} |\ell, \ell\rangle |- \rangle$$

$$\langle v|v\rangle = 1$$

$$\langle v|\ell^{+\frac{1}{2}}, \ell - \frac{1}{2}\rangle = 0$$

$$\hat{J}_z|v\rangle = \left(\ell - \frac{1}{2}\right)|v\rangle$$

$$\hat{J}^2(v) = \hbar^2 \left(\ell - \frac{1}{2}\right)\left(\ell + \frac{1}{2}\right)|v\rangle$$

$$\Rightarrow |v\rangle = |\ell - \frac{1}{2}, \ell - \frac{1}{2}\rangle \quad \square$$

$$|\ell - \frac{1}{2}, \ell - \frac{1}{2}\rangle =$$

$$= \frac{-1}{\sqrt{2e+1}} |\ell, \ell-1\rangle |+\rangle + \sqrt{\frac{2e}{2e+1}} |\ell, \ell\rangle |- \rangle$$

* Wir können mit $\hat{J}_-, \hat{L}_-, \hat{S}_-$ $2(\ell - \frac{1}{2}) + 1 = 2e$ weitere Vektoren $|\ell - \frac{1}{2}, M\rangle$, mit $-2e \leq M \leq 2e$ finden

* Wir haben nun $(2l+2) + (2l) = 2(2l+1)$ linear unabhängige Vektoren (wieso?)

$$|l+\frac{1}{2}, l+\frac{1}{2}\rangle$$

$$|l+\frac{1}{2}, l-\frac{1}{2}\rangle$$

⋮

$$|l+\frac{1}{2}, -l+\frac{1}{2}\rangle$$

$$|l+\frac{1}{2}, -l-\frac{1}{2}\rangle$$

$$|l-\frac{1}{2}, l-\frac{1}{2}\rangle$$

$$|l-\frac{1}{2}, l-\frac{3}{2}\rangle$$

⋮

$$|l-\frac{1}{2}, -l+\frac{3}{2}\rangle$$

$$|l-\frac{1}{2}, -l+\frac{1}{2}\rangle$$

$$\mathcal{J} = l + \frac{1}{2}$$

$$\mathcal{J} = l - \frac{1}{2}$$

* Da $\dim \mathcal{H}^1 = 2(2l+1)$ haben wir eine ONB. In dieser ONB sind $\hat{\mathcal{J}}_z$ und $\hat{\mathcal{J}}^2$ diagonal (Nicht aber $\hat{\mathcal{L}}^1$ und $\hat{\mathcal{S}}^2$!)

* Schlussfolgerung:

Für gegebenes l sind die einzigen Eigenwerte von $\hat{\mathcal{J}}^2$ $l \pm \frac{1}{2}$!

Allgemeine Lösung:

$$|J = \ell + \frac{1}{2}, M\rangle$$

$$= \sqrt{\frac{\ell + \frac{1}{2} + M}{2\ell + 1}} |\ell, M - \frac{1}{2}\rangle |+\rangle + \sqrt{\frac{\ell + \frac{1}{2} - M}{2\ell + 1}} |\ell, M + \frac{1}{2}\rangle |- \rangle$$

$$|J = \ell - \frac{1}{2}, M\rangle$$

$$= - \sqrt{\frac{\ell + \frac{1}{2} - M}{2\ell + 1}} |\ell, M - \frac{1}{2}\rangle |+\rangle + \sqrt{\frac{\ell + \frac{1}{2} + M}{2\ell + 1}} |\ell, M + \frac{1}{2}\rangle |- \rangle$$