Kap 8. Addition von Drehimpulsen

Allgemeine Fragestellung:

Sei $|l_1, m_1\rangle, \quad m_1 = -l_1, \cdots, l_1 \qquad \hat{\mathbf{L}}^2 |l_1, m_1\rangle = \hbar^2 l_1(l_1+1)|l_1, m_1\rangle, \quad \hat{L}_z |l_1, m_1\rangle = \hbar m_1 |l_1, m_1\rangle$

Basis von $\mathcal{H}_{l_1}$. Es gilt: $\dim(\mathcal{H}_{l_1}) = 2l_1 + 1, \qquad l_1 = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2, \ldots\ldots, \qquad \hat{\mathbf{L}} : \mathcal{H}_{l_1} \to \mathcal{H}_{l_1}$

Sei: $\mathcal{H} = \mathcal{H}_{l_1} \otimes \mathcal{H}_{l_2}, \quad \dim(\mathcal{H}) = (2l_1+1)(2l_2+1)$

Basis von $\mathcal{H}$: $|l_1, m_1\rangle \otimes |l_2, m_2\rangle$ so dass, $\sum_{m_1=-l_1}^{l_1} \sum_{m_2=-l_2}^{l_2} \left(|l_1, m_1\rangle \otimes |l_2, m_2\rangle\right)\left(\langle l_1, m_1| \otimes \langle l_2, m_2|\right) = \hat{1}$

Gesamt Drehimpuls:

$$\hat{\mathbf{J}} = \hat{\mathbf{L}}^{(1)} + \hat{\mathbf{L}}^{(2)}, \quad \text{mit } \hat{\mathbf{L}}^{(1)} = \hat{\mathbf{L}} \otimes \hat{1} \text{ und } \hat{\mathbf{L}}^{(2)} = \hat{1} \otimes \hat{\mathbf{L}}$$

$$\hat{\mathbf{J}}: \mathcal{H} \to \mathcal{H}$$

Da: $\left[\hat{L}_i, \hat{L}_j\right] = i\hbar \sum_{k=1}^{3} \varepsilon^{i,j,k} \hat{L}_k$ gilt: $\left[\hat{J}_i, \hat{J}_j\right] = i\hbar \sum_{k=1}^{3} \varepsilon^{i,j,k} \hat{J}_k$

$$\exists\, |j,m\rangle \in \mathcal{H} = \mathcal{H}_l \otimes \mathcal{H}_{l_1} \;|\; \hat{\mathbf{J}}^2 |j,m\rangle = \hbar^2 j(j+1)|j,m\rangle, \quad \hat{J}_z |j,m\rangle = \hbar m |j,m\rangle$$

d.h. wir wollen eine Basis von $\mathcal{H}$ finden so dass, $\hat{\mathbf{J}}^2$ und $\hat{J}_z$ diagonal sind !

$$|j,m\rangle \in \mathcal{H} \quad \Rightarrow \quad |j,m\rangle = \underbrace{\sum_{m_1=-l_1}^{l_1} \sum_{m_2=-l_2}^{l_2} \Big(|l_1,m_1\rangle \otimes |l_2,m_2\rangle \Big) \Big(\langle l_1,m_1| \otimes \langle l_2,m_2| \Big)}_{=1} \overbrace{}^{\text{Clebsch-Gordan Koeffizienten}} |j,m\rangle$$

Es gilt: $\Big(\langle l_1,m_1| \otimes \langle l_2,m_2| \Big) |j,m\rangle \neq 0$ nur falls: $m = m_1 + m_2$

da: $\hat{J}_z |j,m\rangle = \hbar m |j,m\rangle$ und $\hat{J}_z |l_1,m_1\rangle \otimes |l_2,m_2\rangle = \hbar(m_1+m_2) |l_1,m_1\rangle \otimes |l_2,m_2\rangle$

<u>Fragen:</u> Clebsch-Gordan Koeffizienten?

Welche werte von j sind überhaupt erlaubt ?

Beispiel. Addition von zwei Spin ½ Freiheitsgraden:

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_{1/2} \otimes \mathcal{H}_{1/2}, \quad \dim(\mathcal{H}) = 4,$$

$$\text{Basis}: \ |\uparrow\rangle \otimes |\uparrow\rangle, \quad |\uparrow\rangle \otimes |\downarrow\rangle, \quad |\downarrow\rangle \otimes |\uparrow\rangle, \quad |\downarrow\rangle \otimes |\downarrow\rangle$$

$$\mathbf{J} = \hat{\mathbf{S}}^{(1)} + \hat{\mathbf{S}}^{(2)}, \quad \text{mit } \hat{\mathbf{S}}^{(1)} = \hat{\mathbf{S}} \otimes \hat{1} \text{ und } \hat{\mathbf{S}}^{(2)} = \hat{1} \otimes \hat{\mathbf{S}},$$

$$\left[\hat{J}_i, \hat{J}_j\right] = i\hbar \sum_{k=1}^{3} \varepsilon^{i,j,k} \hat{J}_k$$

Gesucht: $|j,m\rangle \in \mathcal{H}$ mit $\hat{\mathbf{J}}^2 |j,m\rangle = \hbar^2 j(j+1) |j,m\rangle, \quad \hat{J}_z |j,m\rangle = \hbar m |j,m\rangle$

Es gilt: $\hat{\mathbf{J}}^2 |\uparrow\rangle \otimes |\uparrow\rangle = 2\hbar^2 |\uparrow\rangle \otimes |\uparrow\rangle, \quad \hat{J}_z |\uparrow\rangle \otimes |\uparrow\rangle = \hbar |\uparrow\rangle \otimes |\uparrow\rangle$

=> $|1,1\rangle = |\uparrow\rangle \otimes |\uparrow\rangle$ da: $\hat{J}_- |1,1\rangle = \left(\hat{J}_x - i\hat{J}_y\right) |1,1\rangle = \hbar\sqrt{2}\, |1,0\rangle$ ist:

$|1,0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\uparrow\rangle \otimes |\downarrow\rangle + |\downarrow\rangle \otimes |\uparrow\rangle\right)$ $\hat{J}_- |1,0\rangle = \hbar\sqrt{2}\, |1,-1\rangle$ =>

$|1,-1\rangle = |\downarrow\rangle \otimes |\downarrow\rangle$ $\hat{S}_-^{tot} |1,-1\rangle = 0$

dim($\mathcal{H}$) =4. d.h. Es fehlt eine Zustand!

Im ursprüngliche Basis:

$$\left.\begin{aligned} \hat{J}_z \left|\uparrow\right\rangle \otimes \left|\uparrow\right\rangle &= \hbar\left|\uparrow\right\rangle \otimes \left|\uparrow\right\rangle \\ \hat{J}_z \left|\uparrow\right\rangle \otimes \left|\downarrow\right\rangle &= 0 \\ \hat{J}_z \left|\downarrow\right\rangle \otimes \left|\uparrow\right\rangle &= 0 \\ \hat{J}_z \left|\downarrow\right\rangle \otimes \left|\downarrow\right\rangle &= -\hbar\left|\downarrow\right\rangle \otimes \left|\downarrow\right\rangle \end{aligned}\right\}$$

=>Zwei Zustände mit $m = 0$

Im |j,m> basis:

$$\hat{J}_z \left|1,m\right\rangle = \hbar m \left|1,m\right\rangle, \quad m = -1,0,1$$

Ein Zustand mit $m = 0$

=> Es fehlt eine Zustand mit $m = 0$ und die Orthogonal zu |1,0> sein muss.

Einzige Möglichkeit (bis auf eine Phase) :

$$\boxed{\left|0,0\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\Big(\left|\uparrow\right\rangle\otimes\left|\downarrow\right\rangle - \left|\downarrow\right\rangle\otimes\left|\uparrow\right\rangle\Big)}$$

$$\boxed{\hat{\mathbf{J}}^2 \left|0,0\right\rangle = 0 \;, \quad \hat{J}_z \left|0,0\right\rangle = 0}$$

Basis von $\mathcal{H}$ so dass, $\hat{\mathbf{J}}^2$ und $\hat{J}_z$ diagonal sind:

$$\mathcal{H}_{1/2} \otimes \mathcal{H}_{1/2} = \left\{ \underbrace{|0,0\rangle}_{\mathcal{H}_0},\ \underbrace{|1,1\rangle,\ |1,0\rangle,\ |1,-1\rangle}_{\mathcal{H}_1} \right\} = \mathcal{H}_0 \oplus \mathcal{H}_1$$

d.h. Kombination von zwei Spin ½ ergibt eine Drehimpuls 0 (Singulett) und drei Drehimpuls 1 (Triplett) Zustände.

Clebsch-Gordan Koeffizienten.

<u>Bem:</u>

$$\begin{pmatrix} |0,0\rangle \\ |1,0\rangle \\ |1,1\rangle \\ |1,-1\rangle \end{pmatrix} = \underbrace{\begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & 0 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}} \begin{pmatrix} |\uparrow\rangle \otimes |\downarrow\rangle \\ |\downarrow\rangle \otimes |\uparrow\rangle \\ |\uparrow\rangle \otimes |\uparrow\rangle \\ |\downarrow\rangle \otimes |\downarrow\rangle \end{pmatrix}$$

Orthogonale Matrix. => Alles was wir gemacht haben ist eine Basis Transformation !

Allgemein gilt:

$$\mathcal{H}_{l_1} \otimes \mathcal{H}_{l_2} = \mathcal{H}_{l_1+l_2} \oplus \mathcal{H}_{l_1+l_2-1} \oplus \cdots \oplus \mathcal{H}_{|l_1-l_2|}$$

Dimensionen stimmen da:

$$\dim(\mathcal{H}_l \otimes \mathcal{H}_{l_1}) = (2l+1)(2l_1+1)$$

$$\dim(\mathcal{H}_{l_1+l_2} \oplus \mathcal{H}_{l_1+l_2-1} \oplus \cdots \oplus \mathcal{H}_{|l_1-l_2|}) = \sum_{n=|l_1-l_2|}^{l_1+l_2} (2n+1) = (2l_1+1)(2l_2+1)$$

Clebsch-Gordan Koeffizienten bilden $(2l_1+1)(2l_2+1) \times (2l_1+1)(2l_2+1)$ Unitär

Matrix. $\left(\langle l_1, m_1| \otimes \langle l_2, m_2|\right)|j, m\rangle = U^{(l_1,l_2)}_{(m,m_1),(j,m)}$

$m_1 : -l_1 \cdots l_1, \quad m_2 = -l_2 \cdots l_2$ => $(2l_1+1)(2l_2+1)$ Mögliche *Werte.*

$j : |l_1 - l_2| \cdots l_2 + l_1, \quad m = -j \cdots j$ => $(2l_1+1)(2l_2+1)$ Mögliche *Werte.*

Besip. <u>Feinstruktur Aufspaltung</u>.

a) Addition von Drehimpuls: $\mathcal{H}_l \otimes \mathcal{H}_{1/2} = \mathcal{H}_{l+1/2} \oplus \mathcal{H}_{l-1/2}$ (*l* ganzzahlig)

<u>Gesucht:</u> Basis so dass, $\hat{\mathbf{J}}^2$ und $\hat{J}_z$ diagonal sind. $\hat{\mathbf{J}} = \hat{\mathbf{L}} \otimes \hat{1} + \hat{1} \otimes \hat{\mathbf{S}}$

gesamt Drehimpuls

<u>$\mathcal{H}_{l+1/2}$ Hilbertraum:</u>

Es gilt:

$$\hat{\mathbf{J}}^2 \left|l,l\right\rangle \otimes \left|\uparrow\right\rangle = \hbar^2 j(j+1)\left|l,l\right\rangle \otimes \left|\uparrow\right\rangle$$

$$\hat{J}_z \left|l,l\right\rangle \otimes \left|\uparrow\right\rangle = \hbar\, j \left|l,l\right\rangle \otimes \left|\uparrow\right\rangle, \qquad j = l + 1/2$$

=> $$\left| j = l + 1/2,\ m = l + 1/2 \right\rangle = \left|l,l\right\rangle \otimes \left|\uparrow\right\rangle$$

Mit: $$\hat{J}_- \left| j,m \right\rangle = \hbar\sqrt{j(j+1) - m(m-1)}\left| j,m-1 \right\rangle$$

erzeugt man rekursiv die Zustände: $\left| j = l + 1/2,\ m \right\rangle$

$$\left| j = l + 1/2,\ m \right\rangle = \sqrt{\frac{l+m+1/2}{2l+1}}\left|l,m-1/2\right\rangle \otimes \left|\uparrow\right\rangle + \sqrt{\frac{l-m+1/2}{2l+1}}\left|l,m+1/2\right\rangle \otimes \left|\downarrow\right\rangle$$

Analog : $\mathcal{H}_{l-1/2}$ Hilbertraum:

$$\left| j = l-1/2,\ m \right\rangle = -\sqrt{\frac{l-m+1/2}{2l+1}}\,\left| l, m-1/2 \right\rangle \otimes \left|\uparrow\right\rangle + \sqrt{\frac{l+m+1/2}{2l+1}}\,\left| l, m+1/2 \right\rangle \otimes \left|\downarrow\right\rangle$$

Wasserstoff Atom mit Spin-Bahn Kopplung.

$$\hat{H} = \overbrace{\left[\frac{\hat{\mathbf{P}}^2}{2m} - \frac{Ze^2}{|\hat{\mathbf{X}}|} \right] \otimes \hat{1}_{spin}}^{H_0} + \alpha \left(\hat{\mathbf{L}} \otimes \hat{1}_{spin} \right) \bullet \left(\hat{1}_{Orb} \otimes \hat{\mathbf{S}} \right)$$

Eigenzustände bei α = 0: $|n,l,m\rangle \otimes |s\rangle$ Energie: $E_n = -\dfrac{Z^2 Ry}{n^2}$, $Ry = \dfrac{me^4}{2\hbar^2} \approx 13.6eV$

Bem: Ohne Spin-Bahn Kopplung ist l eine gute Quanten Zahl.

Eigenzustände bei $\alpha \neq 0$

Bem: Mit Spin-Bahn Kopplung ist j (gesamt Drehimpuls) eine gute Quanten Zahl.

Da: $(\hat{\mathbf{L}} \otimes \hat{1}) \bullet (\hat{1} \otimes \hat{\mathbf{S}}) = \dfrac{1}{2}\left(\hat{\mathbf{J}}^2 - (\hat{\mathbf{L}} \otimes \hat{1})^2 - (\hat{1} \otimes \hat{\mathbf{S}})^2 \right)$ ist:

$$(\hat{\mathbf{L}} \otimes \hat{1}) \bullet (\hat{1} \otimes \hat{\mathbf{S}}) \,| j,m \rangle = \frac{\hbar^2}{2}\left(j(j+1) - l(l+1) - 3/4 \right) | j,m \rangle$$

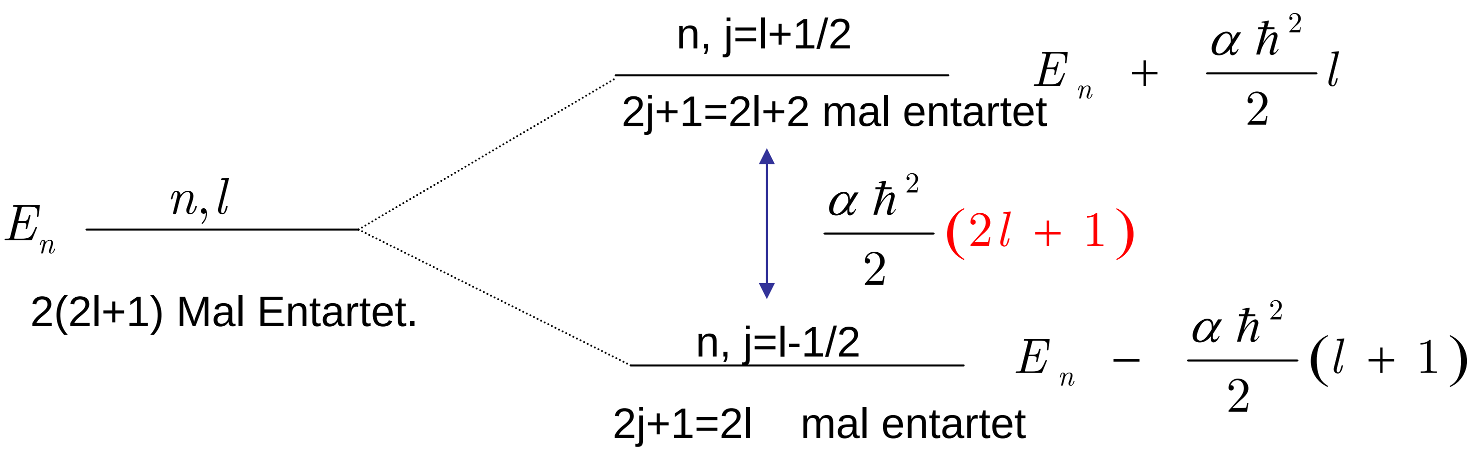
Eigenzustände mit Spin-Bahn Kopplung:

- $$\left|n, j = l + 1/2,\ m\right\rangle = \sqrt{\frac{l+m+1/2}{2l+1}}\left|n,l,m-1/2\right\rangle \otimes \left|\uparrow\right\rangle + \sqrt{\frac{l-m+1/2}{2l+1}}\left|n,l,m+1/2\right\rangle \otimes \left|\downarrow\right\rangle$$

Mit Energie $E_n + \frac{\alpha\hbar^2}{2} l$

- $$\left|n, j = l - 1/2,\ m\right\rangle = -\sqrt{\frac{l-m+1/2}{2l+1}}\left|n,l,m-1/2\right\rangle \otimes \left|\uparrow\right\rangle + \sqrt{\frac{l+m+1/2}{2l+1}}\left|n,l,m+1/2\right\rangle \otimes \left|\downarrow\right\rangle$$

Mit Energie $E_n - \frac{\alpha\hbar^2}{2}(l+1)$



Größenordnung von α

Nur Dimensionen Berücksichtigen.

$$a = \frac{\hbar^2}{me^2}$$ Bohrsche Radius.

$$\frac{1}{2}\frac{g\mu_B}{cm}\underbrace{\left\langle \frac{1}{|\hat{\mathbf{X}}|}\frac{\partial\phi}{\partial r}\bigg|_{\mathbf{x}=\hat{\mathbf{X}}}\right\rangle_{n,l}}_{Ze/a^3} / \hbar, \qquad \phi = Ze/r$$

So dass, $$\alpha = \frac{1}{2}\frac{e^2 Z}{m^2 c^2 a^3}$$

=> $$\frac{\alpha\hbar^2(2l+1)/2}{Ry} = \frac{Z}{2}(2l+1)\left(\frac{e^2}{c\hbar}\right)^2, \qquad \left(\frac{e^2}{c\hbar}\right) \simeq \left(\frac{1}{137}\right)$$

Feinstrukturkonstante.

Feinstruktur Aufspaltung ist *klein* gegenüber Balmer Aufspaltung (Ry).