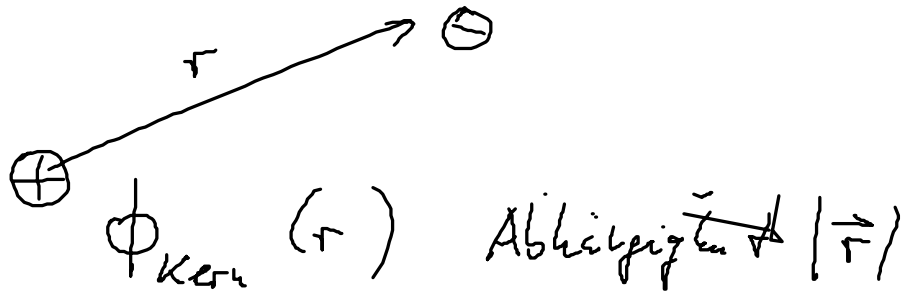


2. Der Gesamtdrehimpuls $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$

Wo wir sind:



früher: H-Atom

jetzt: über Dirac 1 Elektron im Kernpotential
Systeme mit 1 Außen electron

$$\underline{H} = \underbrace{\underline{H}_0(\vec{p}, \phi_{\text{Kern}}(r), r)}_{\text{ähnlich wie H-Atom oder Spin}} + \underline{H}_{S-B}(\vec{L} \cdot \vec{S})$$

neue

Ziel: $(n, l, s, m_l, m_s) \longrightarrow (n, l, s, j, m_j)$
 neue?
 kommen von EF
 von \underline{L}_3 und \hat{S}_3
 neue QZ werden
 bestimmt mit

$\underline{L}_3, \hat{S}_3$ vertauscht nicht mehr
 mit H_{S-B} , daher sind
 die Quantenzahlen m_l, m_s
 nicht mehr Anzeiger um die
 Eigenzustände von \underline{H} zu

den Eigenfunktionen
 des Gesamtdrehimpuls
 wird dieser mit
 \underline{H} vertauscht und
 daher $\underline{H}, \underline{J}_3$

klassifizieren

Gemeinsame FF haben

$$H_{S-B} = \frac{q \partial_r \phi_{\text{Kern}}}{2m^2 c^2 r} \vec{\hat{s}} \cdot \vec{\ell}$$

2.1. Was ist der Gesamtdrehimpuls \vec{J} für Objekt?

$$\vec{J} = \hat{1} \vec{\ell} + \vec{\hat{s}} \quad \begin{array}{l} \text{Vektor aus} \\ \text{Maximalwert auf } \vec{\psi}_1 \equiv \vec{\psi} = (\psi_1, \psi_2) \\ \text{als 2er Vektor} \end{array}$$

$$J_i = \hat{1} \ell_i + \hat{s}_i, \quad \ell_i = (\vec{r} \times \vec{p})_i, \quad \hat{s}_i = \frac{\hbar}{2} \hat{\sigma}_i$$

Vertauschungsregeln zwischen den Komponenten:

$$\begin{array}{l} \left[\ell_i, \ell_j \right] = i \hbar \ell_k \varepsilon_{ijk} \quad \text{u.} \quad \left[\hat{s}_i, \hat{s}_j \right] = i \hbar \hat{s}_k \varepsilon_{ijk} \\ \rightarrow \left[J_i, J_j \right] = i \hbar J_k \varepsilon_{ijk} \quad \text{denn addieren} \\ \rightarrow \left[\vec{\ell}^2, \ell_3 \right] = 0 \quad (\text{H-Atom}) \end{array}$$

$$\text{analog: } \left[\vec{J}^2, J_3 \right] = 0$$

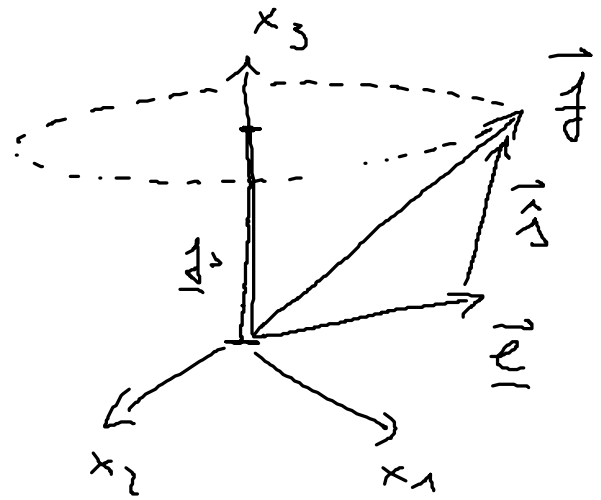
Gesamtdrehimpuls: man kann eine Komponente

(hier f_3) und Betragsguadrat gleichzeitig
scharf messen

klass. Vektormodell

f auf Kreisbogen

f_2, f_1 unbestimmt



f_3 und f^2 vertauschen mit H (H_{S-B})

$$\text{z.B.: } [f^2, \hat{s} \cdot \underline{e}] = [(\underline{e}^2 + 2\underline{e} \cdot \hat{s} + \hat{s}^2), \hat{s} \cdot \underline{e}]$$

$$= 0, \text{ weil}$$

$$[f_3, \hat{s} \cdot \underline{e}] = 0 \text{ (schon gezeigt)}$$

Suche

$$\left. \begin{aligned} f_3 \vec{\varphi} &= f_3 \vec{\varphi} \\ f^2 \vec{\varphi} &= f^2 \vec{\varphi} \end{aligned} \right\} \begin{array}{l} \text{Eigenwerte,} \\ \text{Eigenfunktionen} \\ \text{(dieselben EF} \\ \text{die auch } H \text{ hat)} \end{array}$$

f^2, f_3 sind Zahlen, $\vec{\varphi}$ sind Eigenfunktionen

2.2. Eigenwertproblem von $f_3 = \hat{1} \underline{e}_3 + \frac{\hbar}{2} \hat{\sigma}_3$

$$\left(\hat{1} \underline{e}_3 + \frac{\hbar}{2} \hat{\sigma}_3 \right) \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} = f_3 \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix}$$

$$\left(\underline{e}_3 \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} + \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \right) \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} = f_3 \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} \left(\underline{e}_3 + \frac{\hbar}{2} \right) \psi_1 + 0 \psi_2 \\ \left(\underline{e}_3 - \frac{\hbar}{2} \right) \psi_2 + 0 \psi_1 \end{pmatrix} = f_3 \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix}$$

2 Lösungen (2 Vektoren, 2 Eigenwerte)

$$\psi_1 = a_1 \gamma_{\underline{e}_{m_e}}(\mathcal{D}_1 \psi), \quad \psi_2 = a_2 \gamma_{\underline{e}_{m_e+1}}(\mathcal{D}_1 \psi)$$

$$\psi_1' = a_1' \gamma_{\underline{e}_{m_e-1}}(\mathcal{D}_1 \psi), \quad \psi_2' = a_2' \gamma_{\underline{e}_{m_e}}(\mathcal{D}_1 \psi)$$

diese Notation entspricht:

$$\vec{\varphi} = \begin{pmatrix} a_1 Y_{l, m_j - \frac{1}{2}} \\ a_2 Y_{l, m_j + \frac{1}{2}} \end{pmatrix}$$

$$m_e = m_j \pm \frac{1}{2}$$

$$l = \text{fest}$$

↑
Funktion von Ort r , $(?)$

$$m_j = \pm \frac{1}{2}, \pm \frac{3}{2}, \dots, \pm \left(l + \frac{1}{2} \right)$$

Bemerkung: Die neuen Eigenfunktionen mit HS-D sind nach der alten entwickelt worden:

$$|n, l, s, m_j\rangle = \sum_{m_s, m_e} \alpha(n, l, s, m_s, m_e) |l, m_e\rangle |m_s\rangle$$

$\underbrace{\alpha(n, l, s, m_s, m_e)}_{\text{Clebsch-Gordan Koeffizienten (tabelliert)}} \quad \underbrace{|l, m_e\rangle}_{Y_{lm_e}} \quad \underbrace{|m_s\rangle}_{\chi_{m_s}}$

E Wigner: effektiv Rede umher zu Bestimmung der Clebsch-Gordan Koeffizienten

2.3. Eigenwertproblem für $\vec{J}^2 = \left(\hat{1} \vec{L} + \frac{1}{2} \vec{S} \right)^2$

$$\begin{aligned} \vec{J}^2 &= \left(\hat{l} \vec{e} + \frac{\hbar}{2} \hat{\sigma} \right)^2 = \hat{l} \vec{e}^2 + \frac{\hbar^2}{4} \hat{\sigma}^2 + 2 \vec{e}_i \cdot \hat{\sigma}_i \frac{\hbar}{2} \\ &= \vec{e}^2 \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} + \frac{3}{4} \hbar^2 \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} + \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} + \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \\ &\quad \quad \quad \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

kenne die Eigenvektoren schon weil

$$[\vec{J}^2, J_3] = 0, \text{ sind also dieselben wie } J_3$$

$$\vec{J}^2 \begin{pmatrix} a_1 Y_{l m_e} \\ a_2 Y_{l m_e + 1} \end{pmatrix} =$$

$$\begin{pmatrix} \frac{\hbar^2}{2} \left(l(l+1) + \frac{3}{4} + m_e \right) Y_{l m_e} & \frac{\hbar^2}{2} \left((l+m_e+1)(l-m_e) \right)^{1/2} Y_{l m_e} \\ \frac{\hbar^2}{2} \left((l-m_e)(l+m_e+1) \right)^{1/2} Y_{l m_e+1} & \frac{\hbar^2}{2} \left(l(l+1) + \frac{3}{4} - m_e - 1 \right) Y_{l m_e+1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix}$$

$$\text{mit } \left(\underline{e}_1 \pm i \underline{e}_2 \right) Y_{l m_e} = \frac{\hbar}{2} \left[(l \pm m_e + 1)(l \mp m_e) \right]^{1/2} Y_{l m_e \pm 1}$$

(Übungsaufgabe)

$$= \lambda \begin{pmatrix} a_1 Y_{l, m_e} \\ a_2 Y_{l, m_e+1} \end{pmatrix}$$

↑

Eigenwert von \hat{J}^2

→ charakteristisches Polynom berechnen,
 Koeffizienten determinante des Gleichungssystems muß
 verschwinden (homogenes Gleichungssystem)

≙ Bedingung für λ

$$\lambda_{1/2} = \hbar^2 \begin{cases} (l + \frac{1}{2})(l + \frac{3}{2}) \\ (l + \frac{1}{2})(l - \frac{1}{2}) \end{cases} \quad (2 \text{ Lösungen für } \lambda)$$

||

$$\hat{J}^2 = \hbar^2 j(j+1) \quad \text{mit } j = (l + \frac{1}{2}), (l - \frac{1}{2})$$

↑
 (Zahl) Eigenwert von \hat{J}^2

$$\hat{J}^2 |u, l, s, j, m_j\rangle = \hbar^2 j(j+1) |u, l, s, j, m_j\rangle$$

$$\hat{J}_3 |u, l, s, j, m_j\rangle = \hbar m_j |u, l, s, j, m_j\rangle$$

komplette Analogie 2. Bahndalinput,

allerdings: $j = l \pm \frac{1}{2}$

$$m_j = -j \dots + j \text{ in Eierschritten}$$

Die Eigenfunktion können festgelegt werden über a_1, a_2
indem $\lambda = j^2$ in die Matrixgleichg. eingesetzt wird
(das gibt das Verhältnis von a_1/a_2 für $\lambda_{1/2}$)

$j = l + \frac{1}{2}$

$$\vec{\varphi} = \begin{pmatrix} \left(\frac{l+m_e+1}{2l+1}\right)^{1/2} Y_{lm_e} \\ -\left(\frac{l-m_e}{2l+1}\right)^{1/2} Y_{lm_e+1} \end{pmatrix} a(r)$$

$j = l - \frac{1}{2}$

$$\vec{\varphi}' = \begin{pmatrix} \left(\frac{l-m_e+1}{2l+1}\right)^{1/2} Y_{lm_e-1} \\ \left(\frac{l+m_e}{2l+1}\right)^{1/2} Y_{lm_e} \end{pmatrix} a(r)$$

in der Wellen QZ m_j, j :

$$\vec{\varphi} = \begin{pmatrix} \left(\frac{\ell + m_j + \frac{1}{2}}{2\ell + 1} \right)^{1/2} Y_{\ell m_j - \frac{1}{2}} \\ - \left(\frac{\ell - m_j + \frac{1}{2}}{2\ell + 1} \right)^{1/2} Y_{\ell m_j + \frac{1}{2}} \end{pmatrix} \quad a(\ell)$$

$$\vec{\varphi}' = \begin{pmatrix} \left(\frac{\ell - m_j + \frac{1}{2}}{2\ell + 1} \right)^{1/2} Y_{\ell m_j - \frac{1}{2}} \\ \left(\frac{\ell - m_j + \frac{1}{2}}{2\ell + 1} \right)^{1/2} Y_{\ell m_j + \frac{1}{2}} \end{pmatrix} \quad a(\ell)$$

2.4. Zusammenfassg. der Ergebnisse

- Gesamtdrehimpuls ist als Summe von Bahndrehimpuls und Spin definiert

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

- Die Bedeutung von \vec{f} ergibt sich aus der Vertauschbarkeit mit H_{S-R} , und \underline{H} , deshalb hat man die EF von \underline{H} gefunden wenn man die EF von f^2 bzw. f_3 bestimmt.
- Es zeigt sich daß f. das H-Atom / Alkali

$$E(n) \xrightarrow{H_{S-R}} E(n, j)$$
also wird die Entartung die beim naive behandelte H-Atom vorlag aufgehoben (zum Teil).
- mit H_{S-R} bilde die Operatoren

\hat{H}	$\xrightarrow{\text{Orbital}}$	n	}	$ n, l, m_l, m_s\rangle$
\vec{L}^2	\longrightarrow	l		
\vec{J}^2	\longrightarrow	j		
J_3	\longrightarrow	m_j		
\hat{S}_z	\longrightarrow	$s = \frac{1}{2}$		

$\equiv | \rangle$

like vollständige Satz von Observablen

$(L_3, \hat{S}_3 \text{ taugen nicht})$

Damit kann man ein Zustand mit den entsprechenden QZ beschreiben

- es gilt

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

$$J_3 | \rangle = \hbar m_j | \rangle, \quad m_j = -j, \dots, -\frac{1}{2}, \dots, +j$$