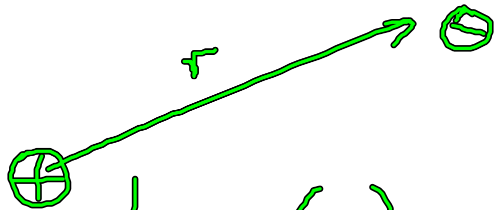
2. Der Gesamtdrehimpuls $\vec{j} = \vec{\ell} + \vec{\hat{s}}$

Wo wir sind:



$\Phi_{Kern}(r)$ Abhängigkeit $|\vec{r}|$

früher: H-Atom

jetzt: über Dirac 1 Elektron im Kernpotential

Systeme mit 1 Außenelektron

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

Ziel: $|n, \ell, s, \underbrace{m_\ell, m_s}_{\text{kommen von EF von } \underline{\ell}_3 \text{ und } \hat{s}_3}\rangle \xrightarrow[\text{neue?}]{} |n, \ell, s, \underbrace{?, ?}\rangle$

$\underline{\ell}_3, \hat{\underline{s}}_3$ vertauschen nicht mehr mit H_{S-B}, daher sind die Quantenzahlen m_ℓ, m_s nicht mehr tauglich um die Eigenzustände von $\underline{H}$ zu

neue QZ werden bestimmt mit den Eigenfunktionen des Gesamtdrehimpulses weil dieser mit $\underline{H}$ vertauscht und daher $\underline{H}, \vec{\underline{j}}^2, \underline{j}_3$

klassifizieren

gemeinsame EF haben

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

2.1. Was ist der Gesamtdrehimpuls f. ein Objekt?

$\vec{J} = \hat{1}\vec{\ell} + \hat{\vec{s}}$ Vektor aus Matrizen wirkt auf $\vec{\varphi}_1 \equiv \vec{\varphi} = (\varphi_1, \varphi_2)$ als 2er Vektor

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

Vertauschungsregeln zwischen den Komponenten:

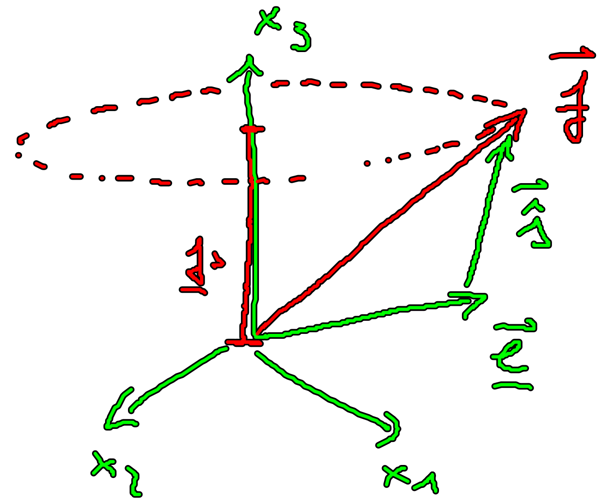
$[\underline{\ell}_i, \underline{\ell}_j] = i\hbar\,\underline{\ell}_k\,\varepsilon_{ijk}$ u. $[\hat{s}_i, \hat{s}_j] = i\hbar\,\hat{s}_k\,\varepsilon_{ijk}$

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

$\longrightarrow$ $[\underline{\vec{\ell}}^2, \ell_3] = 0$ (H-Atom)

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

Gesamtdrehimpuls: man kann eine Komponente (hier J_3) und Betragsquadrat gleichzeitig scharf messen



__naiv__ Vektormodell

J auf Kreiskegel

J_2, J_1 unbestimmt

J_3 und $\vec{J}^2$ vertauschen mit $\underline{H}$ ($\underline{H}_{S-B}$)

z.B.: $\left[\vec{J}^2, \vec{\hat{s}}\cdot\vec{\ell}\right] = \left[\left(\vec{\underline{\ell}}^2 + 2\underline{\underline{\vec{\underline{\ell}}\cdot\vec{\hat{s}}}} + \vec{\hat{s}}^2\right), \underline{\underline{\vec{\hat{s}}\cdot\vec{\ell}}}\right]$

$= 0$, weil

$\left[J_3, \vec{\hat{s}}\cdot\vec{\ell}\right] = 0$ (schon gezeigt)

__Suche__
$$\left.\begin{aligned} J_3\,\vec{\varphi} &= J_3\,\vec{\varphi} \\ \vec{J}^2\,\vec{\varphi} &= J^2\,\vec{\varphi} \end{aligned}\right\}$$
Eigenwerte, Eigenfunktionen (dieselben EF die auch $\underline{H}$ hat)

J^2, J_3 sind Zahlen, $\vec{\varphi}$ sind Eigenfunktionen

2.2. Eigenwertproblem von $j_3 = \hat{1}\,\underline{l}_3 + \frac{\hbar}{2}\hat{\sigma}_3$

$$\left(\hat{1}\,\underline{l}_3 + \frac{\hbar}{2}\hat{\sigma}_3\right)\begin{pmatrix}\varphi_1\\ \varphi_2\end{pmatrix} \overset{!}{=} j_3\begin{pmatrix}\varphi_1\\ \varphi_2\end{pmatrix}$$

$$\left(\underline{l}_3\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\end{pmatrix} + \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}\right)\begin{pmatrix}\varphi_1\\ \varphi_2\end{pmatrix} = j_3\begin{pmatrix}\varphi_1\\ \varphi_2\end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix}\left(\underline{l}_3 + \frac{\hbar}{2}\right)\varphi_1 + 0\,\varphi_2\\ \left(\underline{l}_3 - \frac{\hbar}{2}\right)\varphi_2 + 0\,\varphi_1\end{pmatrix} = j_3\begin{pmatrix}\varphi_1\\ \varphi_2\end{pmatrix}$$

2 Lösungen (2 Vektoren, 2 Eigenwerte)

$$\varphi_1 = a_1\,Y_{l m_l}(\vartheta,\varphi)\,,\quad \varphi_2 = a_2\,Y_{l\,m_l+1}(\vartheta,\varphi)$$

$$\varphi_1' = a_1'\,Y_{l\,m_l-1}(\vartheta,\varphi)\,,\quad \varphi_2' = a_2'\,Y_{l m_l}(\vartheta,\varphi)$$

einsetzen bestimmt j_3 als Zahl

$\vec{\varphi}$

$$\begin{pmatrix} \left(\hbar m_e + \frac{\hbar}{2}\right) & a_1 Y_{e m_e} \\ \left(\hbar(m_e+1) - \frac{\hbar}{2}\right) & a_2 Y_{e m_e+1} \end{pmatrix} = j_3 \begin{pmatrix} a_1 Y_{e m_e} \\ a_2 Y_{e m_e+1} \end{pmatrix}$$

$$\rightarrow j_3 = \hbar m_e + \frac{\hbar}{2} = \hbar\left(m_e + \frac{1}{2}\right)$$

$\vec{\varphi}\,'$

$$\rightarrow j_3' = \hbar m_e - \frac{\hbar}{2} = \hbar\left(m_e - \frac{1}{2}\right)$$

nehmen die beiden Sätze j_3, j_3' zusammen mit neuer Quantenzahl $m_j = m_e + \frac{1}{2}, m_e - \frac{1}{2}$

m_j stellt eine Quantenzahl dar mit den mgl. Werten $m_e + \frac{1}{2}$, $m_e - \frac{1}{2}$, m_e wird dabei durch festes ℓ festgelegt

$$j_3 \, | n, \ell, s, ?, m_j \rangle = \hbar m_j \, | n, \ell, s, ?, m_j \rangle$$

Ortsanteil (r) — interne — $s = \frac{1}{2}$ — bekannt diese Notation entspricht:

$$\vec{\psi} = \begin{pmatrix} a_1 \, Y_{l m_j - \frac{1}{2}} \\ a_2 \, Y_{l m_j + \frac{1}{2}} \end{pmatrix} \qquad \begin{array}{l} m_l = m_j \pm \frac{1}{2} \\ l = \text{fest} \end{array}$$

Funktion vom Ort r, ?

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

<u>Bemerkung:</u> Die <u>neuen</u> Eigenfunktionen mit H_{S-B} sind nach den alten entwickelt worden:

$$|n, l, s, ?, m_j\rangle = \sum_{m_s m_l} \underbrace{\alpha(n, l, s, m_s, m_l)}_{\text{Clebsch-Gordon Koeffizienten (tabelliert)}} \underbrace{|l, m_l\rangle}_{Y_{l m_l}} \underbrace{|m_s\rangle}_{\vec{\chi}_m}$$

E. Wigner: effektive Rechenmethode zur Bestimmung der Clebsch-Gordon Koeffizienten

<u>2.3. Eigenwertproblem</u> für $\vec{J}^2 = \left(\hat{1} \vec{L} + \frac{\hbar}{2} \vec{\sigma} \right)^2$

$$\vec{J}^2 = \left(\hat{1}\,\vec{\underline{l}} + \frac{\hbar}{2}\,\hat{\vec{\sigma}}\right)^2 = \hat{1}\,\vec{\underline{l}}^2 + \frac{\hbar^2}{4}\hat{\vec{\sigma}}^2 + 2\,\underline{l}_i \cdot \hat{\sigma}_i \frac{\hbar}{2}$$

$$= \vec{\underline{l}}^2 \begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\end{pmatrix} + \frac{3}{4}\hbar^2 \begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\end{pmatrix} + \underline{l}_3 \hbar \begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix} + \underline{l}_1 \hbar \begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix}$$
$$\underline{l}_2 \hbar \begin{pmatrix}0 & -i\\ i & 0\end{pmatrix}$$

kennen die Eigenvektoren schon weil

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

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

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

mit $(\underline{l}_1 \pm i\,\underline{l}_2)\, Y_{l m_l} = \hbar\left((l \pm m_l + 1)(l \mp m_l)\right]^{1/2} Y_{l m_l \pm 1}$

(Übungsaufgabe)

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

Eigenwert von $\vec{J}^2$

$\longrightarrow$ charakteristisches Polynom berechnen, Koeffizientendeterminante des Gleichungssystems muß verschwinden (homogenes Gleichungssystem)

$\hat{=}$ Bedingg. für λ

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

$$\| $$

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

(Zahl) Eigenwert von $\vec{J}^2$

$$J^2 \, |n, l, s, j, m_j\rangle = \hbar^2 j(j+1) \, |n, l, s, j, m_j\rangle$$

$$J_3 \, |n, l, s, j, m_j\rangle = \hbar m_j \, |n, l, s, j, m_j\rangle$$

komplette Analogie z. Bahndrehimpuls,

<u>allerdings:</u> $j = \ell \pm \frac{1}{2}$

$m_j = -j \cdots +j$ in Einerschritten

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 $\lambda_{1/2}$)

<u>$j = \ell + \frac{1}{2}$</u>

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

<u>$j = \ell - \frac{1}{2}$</u>

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

in den neuen QZ m_j, j:

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

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

2.4. Zusammenfassg. der Ergebnisse

- Gesamtdrehimpuls ist als Summe von Bahndrehimpuls und Spin definiert

$$\vec{j} = \vec{l} + \vec{s}$$

- Die Bedeutung von $\vec{J}$ ergibt sich aus der Vertauschbarkeit mit H_{S-B}, und $\underline{H}$, deshalb hat man die EF von $\underline{H}$ gefunden wenn man die EF von J^2 bzw J_3 bestimmt.

- Es zeigt sich daß f. das H-Atom / Alkalis

$$E(n) \xrightarrow{H_{S-B}} E(n,j)$$

also wird die Entartung die beim naiv behandelten H-Atom vorlag aufgehoben (zum Teil).

- mit H_{S-B} bilde die Operatoren

$$\underline{H} \xrightarrow{\text{Ortsanteil}} n$$

$$\underline{\vec{\ell}}^2 \longrightarrow \ell$$

$$\vec{J}^2 \longrightarrow j$$

$$J_3 \longrightarrow m_j$$

$$\hat{s}^2 \longrightarrow s = \frac{1}{2}$$

$$\left.\right\} \; |n, \ell, s, j, m_j\rangle \equiv |\,\rangle$$

eine vollständige Satz von Observablen

(ℓ_3, $\hat{s}_3$ taugen nicht)

Damit kann man ein Zustand mit

den entsprechenden QZ beschreiben

- es gilt

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

$$J_3 |\,\rangle = \hbar m_j |\,\rangle \quad , \; m_j : -j \ldots, \pm\frac{1}{2}, \ldots +j$$