15. Addition von Drehimpulsen, Feinstrukturaufspaltung

<u>Vorbem.</u> • für $\vec{L}\cdot\vec{S}$ Kopplung geht das bisherige Schema mit Eigenfunktionen zu $H_0, \vec{L}^2, L_3, \vec{S}^2, S_3$ <u>nicht</u> mehr, da $\vec{L}\cdot\vec{S}$ nicht mit L_3, S_3 vertauscht

• kann Produkt von Kugelflächenfunktionen wieder nach Kugelflächenfunktionen entwickeln

$$\int d\Omega\, Y^*_{l''m''}(\vartheta,\varphi)\, Y_{l'm'}(\vartheta,\varphi)\, Y_{lm}(\vartheta,\varphi) = ?$$

15.1 Vollständiger Satz von Operatoren für $\vec{L}\cdot\vec{S}$ (Zusatz) Kopplung

Drehinvariant: $\boxed{\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}}$ ist Erzeuger der Drehung im System mit Spin ($e^{i\vec{\varphi}\cdot(\vec{L}+\vec{S})}$ Drehung)

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

Vertauschen (i) $\left[\vec{L}\cdot\vec{S}, \begin{matrix}\vec{L}^2\\ \vec{S}^2\end{matrix}\right] = 0$

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

$\rightarrow$ (ii) $[\vec{L}\cdot\vec{S}, \vec{J}^2] = 0$

(iii) $[\vec{L}\cdot\vec{S}, J_3] = 0$

wir haben also einen vollständigen Satz von vertauschbaren Operatoren
$$H(\text{inklusive } \vec{L}\cdot\vec{S}),\ \vec{J}^2, \vec{L}^2, \vec{S}^2, J_3$$

ohne r-Abhängigkeit: $\boxed{\vec{L}^2, L_3, \vec{S}^2 S_3 \leftrightarrow \vec{J}^2, \vec{L}^2, \vec{S}^2, J_3}$

Es gibt auf beiden Seiten simultane Eigenvektoren:
diese sollte sich ineinander umrechnen können

E.V. $\quad |l, m, s, m_s\rangle \longleftrightarrow |j, l, s, m_j\rangle$

kurz: $\quad |m, m_s\rangle \longleftrightarrow |j, m_j\rangle$

bei festem $l, s \ (= \frac{1}{2})$

zunächst seien l, s irgendwelche
irreduziblen Darstellungsräume

5.2 Konstruktion der Basis $|j, m_j\rangle$

(i) Beh. $\quad |j = l+s, m_j = l+s\rangle = |m_l = l, m_s = s\rangle$

("highest weight state")

Bew. $\quad J_3 |m_l = l, m_s = s\rangle = (L_3 + S_3)|\ldots\rangle$

$\quad = (l+s)|\ldots\rangle$

$J_+ |m_l = l, m_s = s\rangle = (L_+ + S_+)|\ldots\rangle = 0$

("highest...")

$\vec{J}^2 = J_- J_+ + J_3^2 + J_3$

$\vec{J}^2 |m_l = l, m_s = s\rangle = (0 + (\underbrace{l+s}_{j})^2 + (l+s))|\ldots\rangle$

erinnere $\quad J_\pm |j, m\rangle = \{(j \pm m + 1)(j \mp m)\}^{1/2} |j, m \pm 1\rangle$

Auf-Absteiger

Absteiger gibt den ganzen irreduziblen Teilraum

(ii) Ansatz

$$|j=\ell+s-k,\ m_j=j\rangle = \sum_{\nu=0}^{k} c_\nu L_-^{k-\nu} S_-^{\nu} |m_\ell=\ell, m_s=s\rangle$$

hat richtigen J_3-Eigenwert j!

$$J_+|j=\ell+s-k, j\rangle = \sum_{\nu=0}^{k} c_\nu \Big[L_+ L_-^{k-\nu} S_-^{\nu} |\ell,s\rangle$$

$$+ L_-^{k-\nu} S_+ S_-^{\nu} |\ell,s\rangle\Big]$$

$$= \sum_{\nu=0}^{k} c_\nu \Big[A_\nu |\ell-k+\nu+1, s-\nu\rangle$$

$$+ B_\nu |\ell-k+\nu, s-\nu+1\rangle \stackrel{!}{=} 0$$

berechne A_ν, B_ν:

$$L_+ L_-^{k-\nu} = L_-^{k-\nu} L_+ + 2 L_3 L_-^{k-\nu-1} + \dots$$

$$(L_+L_- - L_-L_+ = 2L_3)$$

$$S_+ S_-^{\nu} = \dots \quad [L_3, L_\pm] = \pm L_\pm$$ benutze

$A_k = B_0 = 0$ erhalte:

$$0 = \sum_{\nu=0}^{k-1} (c_\nu A_\nu + c_{\nu+1} B_{\nu+1}) |\ell-k+\nu+1, s-\nu\rangle$$

$\rightarrow \boxed{c_\nu A_\nu + c_{\nu+1} B_{\nu+1}}$ Rekursionsformel

$\nu = 0, \dots, k-1$ $\quad c_0 \to c_1 \to c_2 \to \dots$

$$A_{\bar{\nu} \le k-2l-1} = B_{\bar{\nu} \ge 2s+1} = 0$$, da Absteiger nach $(2l+1)$ bzw. $(2s+1)$ Schritten auf Null führen

$k-\bar{\nu} \ge (2l+1)$ $\qquad$ $\bar{\nu} \ge (2s+1)$

falls einer dieser $\bar{\nu}$-Koeff. im Summationsbereich verschwindet, verschwinden die c_ν via Rekursion.

d.h. $0 \le k-2l-1 \le k-1$

 $0 \le 2s \le k-1$ verboten für nichttriviale Lsg.

$\rightarrow$ $k \ge 2l+1$, $k \ge 2s+1$ nicht erlaubt

$\boxed{k \le \mathrm{Min}(2l, 2s)}$ erlaubt

$$j = l+s,\ l+s-1,\ \ldots\ \underbrace{l+s-\mathrm{Min}(2l,2s)}_{|l-s|}$$

Abzählen: <u>Anzahl</u> der Zustandsvektoren

$$(2l+1)(2s+1) = \sum_{j=\underbrace{|l-s|}_{j_1}}^{\overbrace{l+s}^{j_2}} (2j+1) = 2\,\frac{j_1+j_2}{2}(j_2-j_1+1) + j_2 - j_1 + 1$$

$$\left(\sum_{j=0}^{N} j = \frac{N(N+1)}{2}\right) \qquad = \ldots \quad \text{o.k.} \checkmark$$

Übergang zwischen normierten Basissystemen ist unitär

$$|j, m_j, (l, s)\rangle = \sum_{m_l, m_s} |l, m_l, s, m_s\rangle \underbrace{\langle l, m_l, s, m_s | j, m_j (l, s)\rangle}$$

üblich:

"Clebsch-Gordan-Koeff.
(reell nach Phasenkonvention)

$$\left(\begin{matrix} l & s \\ m_l & m_s \end{matrix} \middle| \begin{matrix} j \\ m_j \end{matrix}\right)$$

$\rightarrow$ Tabelle

üben!

---

z.B. Spin 1 $\otimes$ Spin 1
Drehimpuls Drehimpuls

$$\underline{1} \otimes \underline{1} = \underline{2} \oplus \underline{1} \oplus \underline{0}$$

$$x_i y_k = \frac{x_i y_k + x_k y_i}{2} - \frac{\delta_{ik}}{3} x_j y_j$$ symm. spurloser Tensor $r^2 Y_{2m}$

$$+ \frac{x_i y_k - x_k y_i}{2}$$ Kreuzprodukt $r^2 Y_{1m}$

$$+ \frac{\delta_{ik}}{3} x_j y_j$$ Skalarprodukt $r^2 Y_{00}$

nach Einführung von sphärischen Koord. ϑ, φ

$$x_\pm = r \sin\vartheta (\cos\varphi \pm i \sin\varphi)$$

$$x_3 = r \cos\vartheta$$

$$\underline{\tfrac{1}{2}} \otimes \underline{\tfrac{1}{2}} = \underline{1} \oplus \underline{0}$$

$\underline{1}$: $\left(\tfrac{1}{2}, \tfrac{1}{2}\right)$, $\dfrac{\left(\tfrac{1}{2}, -\tfrac{1}{2}\right) + \left(-\tfrac{1}{2}, \tfrac{1}{2}\right)}{\sqrt{2}}$, $\left(-\tfrac{1}{2}, \tfrac{1}{2}\right)$ ← symm

$\underline{0}$ $\left(\left(\tfrac{1}{2}, -\tfrac{1}{2}\right) - \left(-\tfrac{1}{2}, \tfrac{1}{2}\right)\right)/\sqrt{2}$ antisym.

$$\int d\Omega \, Y^*_{lm}(\vartheta,\varphi) \, Y^*_{l'm'}(\vartheta,\varphi) \, Y_{l''m''}(\vartheta,\varphi)$$

$$= \left(\begin{matrix} l & l' \\ m & m' \end{matrix} \middle| \begin{matrix} l'' \\ m'' \end{matrix}\right)$$

CLEBSCH-GORDAN COEFFICIENTS, SPHERICAL HARMONICS, AND D FUNCTIONS

Note: A $\sqrt{\ }$ is to be understood over every coefficient; e.g., for -8/15 read $-\sqrt{8/15}$.

Notation:

		J	J	...
		M	M	...
m_1	m_2	Coefficients		
m_1	m_2			
.	.			
.	.			

$$Y_1^0 = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta$$

$$Y_1^1 = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta\, e^{i\phi}$$

$$Y_2^0 = \sqrt{\frac{5}{4\pi}}\left(\frac{3}{2}\cos^2\theta - \frac{1}{2}\right)$$

$$Y_2^1 = -\sqrt{\frac{15}{8\pi}}\sin\theta\cos\theta\, e^{i\phi}$$

$$Y_2^2 = \frac{1}{4}\sqrt{\frac{15}{2\pi}}\sin^2\theta\, e^{2i\phi}$$

$$Y_\ell^{-m} = (-1)^m Y_\ell^{m*}$$

$$d^\ell_{m,0} = \sqrt{\frac{4\pi}{2\ell+1}}\, Y_\ell^m e^{-im\phi}$$

$$(j_1 j_2 m_1 m_2 | j_1 j_2 J M) = (-1)^{J-j_1-j_2}(j_2 j_1 m_2 m_1 | j_2 j_1 J M)$$

1/2 × 1/2

m_1	m_2	J = 1
		M = +1
+1/2	+1/2	1

m_1	m_2	1	0
		0	0
+1/2	-1/2	1/2	1/2
-1/2	+1/2	1/2	-1/2

m_1	m_2	1
		-1
-1/2	-1/2	1

1 × 1/2

m_1	m_2	3/2
		+3/2
+1	+1/2	1

m_1	m_2	3/2	1/2
		+1/2	+1/2
+1	-1/2	1/3	2/3
0	+1/2	2/3	-1/3

m_1	m_2	3/2	1/2
		-1/2	-1/2
0	-1/2	2/3	1/3
-1	+1/2	1/3	-2/3

m_1	m_2	3/2
		-3/2
-1	-1/2	1

2 × 1/2

m_1	m_2	5/2
		+5/2
+2	1/2	1

m_1	m_2	5/2	3/2
		3/2	+3/2
+2	-1/2	1/5	4/5
+1	+1/2	4/5	-1/5

m_1	m_2	5/2	3/2
		+1/2	+1/2
+1	-1/2	2/5	3/5
0	+1/2	3/5	-2/5

m_1	m_2	5/2	3/2
		-1/2	-1/2
0	-1/2	3/5	2/5
-1	+1/2	2/5	-3/5

m_1	m_2	5/2	3/2
		-3/2	-3/2
-1	-1/2	4/5	1/5
-2	+1/2	1/5	-4/5

m_1	m_2	5/2
		-5/2
-2	-1/2	1

3/2 × 1/2

m_1	m_2	2
		+2
+3/2	+1/2	1

m_1	m_2	2	1
		+1	+1
+3/2	-1/2	1/4	3/4
+1/2	+1/2	3/4	-1/4

m_1	m_2	2	1
		0	0
+1/2	-1/2	1/2	1/2
-1/2	+1/2	1/2	-1/2

m_1	m_2	2	1
		-1	-1
-1/2	-1/2	3/4	1/4
-3/2	+1/2	1/4	-3/4

m_1	m_2	2
		-2
-3/2	-1/2	1

2 × 1

m_1	m_2	3
		+3
+2	+1	1

m_1	m_2	3	2
		+2	+2
+2	0	1/3	2/3
+1	+1	2/3	-1/3

m_1	m_2	3	2	1
		+1	+1	+1
+2	-1	1/15	1/3	3/5
+1	0	8/15	1/6	-3/10
0	+1	6/15	-1/2	1/10

m_1	m_2	3	2	1
		0	0	0
+1	-1	1/5	1/2	3/10
0	0	3/5	0	-2/5
-1	+1	1/5	-1/2	3/10

m_1	m_2	3	2	1
		-1	-1	-1
0	-1	6/15	1/2	1/10
-1	0	8/15	-1/6	-3/10
-2	+1	1/15	-1/3	3/5

m_1	m_2	3	2
		-2	-2
-1	-1	2/3	1/3
-2	0	1/3	-2/3

m_1	m_2	3
		-3
-2	-1	1

3/2 × 1

m_1	m_2	5/2
		+5/2
+3/2	+1	1

m_1	m_2	5/2	3/2
		+3/2	+3/2
+3/2	0	2/5	3/5
+1/2	+1	3/5	-2/5

m_1	m_2	5/2	3/2	1/2
		+1/2	+1/2	+1/2
+3/2	-1	1/10	2/5	1/2
+1/2	0	3/5	1/15	-1/3
-1/2	+1	3/10	-8/15	1/6

m_1	m_2	5/2	3/2	1/2
		-1/2	-1/2	-1/2
+1/2	-1	3/10	8/15	1/6
-1/2	0	3/5	-1/15	-1/3
-3/2	+1	1/10	-2/5	1/2

m_1	m_2	5/2	3/2
		-3/2	-3/2
-1/2	-1	3/5	2/5
-3/2	0	2/5	-3/5

m_1	m_2	5/2
		-5/2
-3/2	-1	1

1 × 1

m_1	m_2	2
		+2
+1	+1	1

m_1	m_2	2	1
		+1	+1
+1	0	1/2	1/2
0	+1	1/2	-1/2

m_1	m_2	2	1	0
		0	0	0
+1	-1	1/6	1/2	1/3
0	0	2/3	0	-1/3
-1	+1	1/6	-1/2	1/3

m_1	m_2	2	1
		-1	-1
0	-1	1/2	1/2
-1	0	1/2	-1/2

m_1	m_2	2
		-2
-1	-1	1

15.3 endliche Drehungen

$$U(\vec\varphi)\,|l,m_l,s,m_s\rangle = e^{i/\hbar\,\vec\varphi\cdot(\vec L+\vec S)}\,|l,m_l,s,m_s\rangle$$

$$=\sum_{m_l',m_s'}|l,m_l',s,m_s'\rangle\, D^l_{m_l'm_l}(\vec\varphi)\, D^s_{m_s'm_s}(\vec\varphi)$$

$$U(\vec\varphi)\,|j,m_j,(l,s)\rangle = e^{i/\hbar\,\vec\varphi\cdot\vec J}\,|j,m_j,(l,s)\rangle$$

$$=\sum_{m_j'}|j,m_j',(l,s)\rangle\, D^j_{m_j'm_j}$$

(vgl. Drehungen in $\mathbb{R}_3$: $\vec r_{abs} = x_i\vec e_i = x_j'\vec e_j'$ $(\sim l=1!)$
mit $\vec e_j' = \vec e_i D^{3\times3}_{ij}$ $\rightarrow$ $\vec r = x_j'\,\vec e_i\, D^{3\times3}_{ij} \overset{!}{=} x_i\vec e_i$
$\rightarrow$ $x_i = D_{ij}\,x_j'$)

Die Clebsch-Gordan Koeff.

$$\langle l,m_l,s,m_s|j,m_j,(l,s)\rangle = \langle\ldots\ U^+U|\ldots\rangle$$

$$=\sum_{m_l',m_s',m_j'}\langle l,m_l',s,m_s'|j,m_j',(l,s)\rangle\,\underbrace{D^{*l}_{m_l'm_l}\,D^{*s}_{m_s'm_s}}_{D^{+l}_{m_lm_l'}\,D^{+s}_{m_sm_s'}}\,D^j_{m_j'm_j}$$

ist drehinvariant!

15.4 Schrödingergl. mit $\vec{L}\cdot\vec{S}$-Kopplung für Wasserstoffatom

$$H = H_0 + \frac{1}{2m^2c^2}\frac{e^2}{r^3}\vec{L}\cdot\vec{S}$$

"alte" Wasserstoff-Ham.

Ansatz $\psi_{spinor}(\vec{x},E) = \varphi(r)\, W_{spinor}(\vartheta,\varphi)$

mit W_{spinor} Eigenvektor zu $\underbrace{\vec{J}^2}_{j}, \underbrace{\vec{L}^2}_{l}, \underbrace{\vec{S}^2}_{s}, \underbrace{J_3}_{m_j}$

$l,\ s = \frac{1}{2} \quad\rightarrow\quad j = l + \frac{1}{2},\ j = l - \frac{1}{2}\ (l \neq 0)$

(z.B. $j = \frac{3}{2} \rightarrow l = 1,2$

festes j : $l = j \mp \frac{1}{2} \quad (j = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \ldots)$

gibt gerade bzw. ungerade Wellenf. bzg Spiegelungen (entgegengesetzte Parität $(-1)^l$)

in neuer Basis

$$W^{j,l,s}_{spinor}(\vartheta,\varphi) = \sum_{m_l m_s} \begin{pmatrix} l & s & j \\ m_l & m_s & m_j \end{pmatrix} Y_{l m_l}(\vartheta,\varphi)\,\chi_{m_s}$$

$(m_l + m_s = m_j$ (otherwise $= 0$))

Einsetzen in Schrödingergl.

115

$$\Big[\Big\{-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\partial_r^2+\frac{2}{r}\partial_r\right)-\frac{e^2}{r}+\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2}+\frac{1}{2m^2c^2}\frac{e^2}{r^3}\frac{\hbar^2}{2}\left(j(j+1)-l(l+1)-s(s+1)\right)\Big\}$$

$$\times\sum_{m_l,m_s}\begin{pmatrix} l & s & j \\ m_l & m_s & \underbrace{m_j}_{\text{fest}}\end{pmatrix} Y_{l m_l}(\vartheta,\varphi)\,\chi_{m_s}\Big]\,\varphi_{E,j,l,s,m_j}(r)$$

$$= E\Big[\sum_{m_l,m_s}\begin{pmatrix} l & s & j \\ m_l & m_s & m_j\end{pmatrix} Y_{l m_l}(\vartheta,\varphi)\,\chi_{m_s}\Big]\varphi_{E,j,l,s,m_j}(r)$$

$\rightarrow$ DGL für $\varphi(r)$

Behandlung mit Hilfe der (stationären) Störungsrechnung im nächsten Kapitel