

Kapitel 6

Matrixdarstellung von Operatoren

6.1 Matrizen in der Quantenmechanik

Die Entdeckung der Quantenmechanik geht auf Werner Heisenberg zurück. Er assoziierte physikalische Größen wie x und p mit Feldern von Zahlen und schlug für diese Multiplikationsregeln vor, aus denen sich weitere Felder wie x^2 ergeben. Max Born erkannte diese Felder als Matrizen. Die Formulierung der Quantenmechanik mit Hilfe von Matrizen ist sehr nützlich, da sie es ermöglicht mit Größen zu arbeiten, die kein klassisches Analogon haben, wie z.B. der *intrinsische* Spin von Teilchen.

Wir haben schon gesehen, dass wir den harmonischen Oszillator mit Hilfe der Operatormethode lösen können:

$$H |n\rangle = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) |n\rangle \quad \text{mit} \quad |n\rangle = \sqrt{\frac{1}{n!}} (A^+)^n |0\rangle$$

Weiterhin konnten wir zeigen:

$$A^+ |n\rangle = \sqrt{n+1} |n+1\rangle \quad \text{und} \quad A |n\rangle = \sqrt{n} |n-1\rangle$$

Diese Eigenzustände bilden ein vollständiges Orthonormalsystem. Es liegt daher nahe jeden Eigenzustand $|n\rangle$ ($\langle n|$) mit einem Einheitsvektor in Zeilen-(Spalten)-Form zu identifizieren, mit dem Eintrag 1 in der n-ten Zeile (Spalte). Alle anderen Einträge sind 0.

$$|n\rangle = \begin{pmatrix} \vdots \\ 0 \\ 1 \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix} \begin{matrix} \vdots \\ \leftarrow n-1 \text{ te Zeile} \\ \leftarrow n \text{ te Zeile} \\ \leftarrow n+1 \text{ te Zeile} \\ \vdots \end{matrix} \quad (6.1)$$

Man sieht hier sofort, dass mit dieser Definition die Orthonormalität erfüllt ist ($\langle m|n\rangle = \delta_{n,m}$). Außerdem kann jeder beliebige Zustand als Vektor geschrieben werden:

$$|\Phi\rangle = \sum_n \underbrace{\langle n|\Phi\rangle}_{=\alpha_n} |n\rangle \Rightarrow |\Phi\rangle = \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \alpha_3 \\ \vdots \end{pmatrix} \quad (6.2)$$

Man muss sich allerdings immer bewusst sein, bzgl. welcher Basis man hier Vektoren und im folgenden auch Matrizen angibt.

Betrachten wir wieder den harmonische Oszillator. Die $|n\rangle$'s sind Eigenzustände zum entsprechenden Hamiltonoperator. Es ergeben sich folgende Relationen:

$$\begin{aligned}\langle m|H|n\rangle &= \hbar\omega\delta_{m,n} \\ \langle m|A^+|n\rangle &= \sqrt{n+1}\delta_{m,n+1} \\ \langle m|A|n\rangle &= \sqrt{n}\delta_{m,n-1}\end{aligned}$$

Wir können diese Größen in Matrizen anordnen und erhalten dann z.B. für den Hamiltonoperator H :

$$H = \hbar\omega \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & \frac{3}{2} & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & \frac{5}{2} & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \frac{7}{2} & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \quad (6.3)$$

Die Operatoren A^+ und A haben dagegen nur Einträge in einer der beiden Nebendiagonalen. (s.z.B. Gasiorowicz S.192). Wir müssen diese Betrachtung nicht auf den harmonischen Oszillator beschränken. Vielmehr können wir jeden Operator \hat{O} bzgl. einer beliebigen vollständigen und orthonormierten Basis $|j\rangle$ angeben. Das Matrixelement in der i -ten Zeile und j -ten Spalte O_{ij} ist dann:

$$O_{ij} = \langle i|\hat{O}|j\rangle \quad (6.4)$$

Folglich ist

$$(FG)_{ij} = \langle i|FG|j\rangle = \sum_n \langle i|F|n\rangle \langle n|G|j\rangle = \sum_n F_{in}G_{nj} \quad (6.5)$$

Was den üblichen Rechenregeln für Matrizenmultiplikation entspricht. Weiterhin gilt:

$$\langle i|\hat{O}|j\rangle^* = \langle \hat{O}(j)|i\rangle = \langle j|\hat{O}^+|i\rangle \quad (6.6)$$

und

$$(O^+)_{ji} = O_{ij}^* \quad (6.7)$$

Wenn das vollständige System von Kets die Eigenkets irgendeines Operators \hat{A} sind, dann lautet die Matrixdarstellung dieses Operators:

$$\langle n|\hat{A}|m\rangle = a_m \langle n|m\rangle = a_m\delta_{nm} \quad (6.8)$$

wie es bei dem harmonischen Oszillator der Fall ist. Immer, wenn man als Basis die Eigenzustände eines Operators \hat{A} definiert, so ist die Matrixdarstellung diese Operators diagonal mit den entsprechenden Eigenwerten in den Diagonaleinträgen. Wir können aber auch jeden anderen Operator in dieser Basis ausdrücken, wobei die Matrixdarstellung dann im allgemeinen nicht diagonal ist. Beispielsweise könnte man sich vorstellen als Basis die Wasserstoffeigenfunktionen $|w_n\rangle$ zu verwenden. Den Hamiltonoperator des radialsymmetrischen harmonischen Oszillators können wir dann bzgl. dieser Basis in Matrixdarstellung schreiben wobei diese Matrix sicher nicht diagonal ist. Wir können diese Matrix aber prinzipiell diagonalisieren, indem wir die Eigenwerte suchen. Durch anschließende Berechnung der normierten Eigenvektoren $|h_n\rangle$ findet man die Eigenzustände zum harmonischen Oszillator. Natürlich sind die neuen Eigenvektoren $|h_n\rangle$ orthonormal zueinander, sie sind aber keine Einheitsvektoren, denn wir befinden uns nach wie vor in der Basis des Wasserstoffatoms. Die neuen Eigenvektoren $|h\rangle$ sind somit eine Linearkombination der Wasserstoffeigenzustände $|w_n\rangle$. Das gerade Beschriebene Verfahren sollte euch aus der Analysis bekannt sein. Man löst auf diese Art z.B. gekoppelte Oszillatoren in der klassische Mechanik. Trotzdem soll es hier nochmal verdeutlicht werden.

Angenommen wir kennen die Matrixdarstellung des Hamiltonoperators \hat{H} des harmonischen Oszillators in der Basis des Wasserstoffatoms. Die Matrixelemente sind die die Erwartungswerte des Operators:

$$H_{mn} = \langle w_m|\hat{H}|w_n\rangle \quad (6.9)$$

Wir wissen, dass wegen der Vollständigkeit der Basis $|w_n\rangle$ jedes Eigenket $|h_n\rangle$ als Linearkombination der $|w_n\rangle$ geschrieben werden kann:

$$|h_n\rangle = \sum_k \langle w_k|h_n\rangle |w_k\rangle \quad \text{bzw.} \quad \langle h_n| = \sum_l \langle h_n|w_l\rangle \langle w_l| \quad (6.10)$$

Es folgt:

$$\langle h_m|\hat{H}|h_n\rangle = E_m\delta_{mn} = \sum_{l,k} \langle h_m|w_l\rangle \langle w_l|\hat{H}|w_k\rangle \langle w_k|h_n\rangle \quad (6.11)$$

Wir definieren nun die Matrix U durch ihre Elemente

$$U_{kn} \equiv \langle w_k|h_n\rangle \quad (6.12)$$

Damit ist:

$$\langle h_m|w_l\rangle = \langle h_m|w_l\rangle \langle w_l|h_n\rangle^* = U_{lm} = (U^+)_{ml} \quad (6.13)$$

In Matrixform lautet die Gleichung 6.11 also

$$E_m\delta_{mn} = \sum_{k,l} (U^+)_{ml} H_{lk} U_{kn} \quad (6.14)$$

Die Matrix U ist dabei unitär ($U^+U = 1$). Sie diagonalisiert die Matrix H .

Diese Matrix zu finden verlangt im endlich dimensionalen Raum das Lösen algebraischer Gleichungen (s.Übung). Für unendlichdimensionale Matrizen ist die Aufgabenstellung gleichbedeutend mit dem Lösen der Schrödingergleichung.

6.2 Matrixdarstellung des Drehimpulsoperators

Es wird sich bei einigen Problemen (z.B. Störungstheoretische Behandlung der Spin-Bahn-Kopplung im Wasserstoffatom, Starkeffekt) zeigen, dass es günstig ist die Drehimpulsoperatoren durch Matrizen darzustellen. Betrachten wir den reinen Bahndrehimpuls. Dann wissen wir:

$$[\mathbf{L}^2, L_z] = 0 \quad (6.15)$$

Wir können dann schreiben:

$$\begin{aligned} 0 &= \langle lm| [\mathbf{L}^2, L_z] |lm\rangle \\ &= \langle \mathbf{L}^2(lm)|L_z|lm\rangle - \langle lm|L_z\mathbf{L}^2|lm\rangle \\ &= \hbar^2 \{l(l+1) - l(l+1)\} \langle lm|L_z|lm\rangle \end{aligned} \quad (6.16)$$

Folglich muss die Größe $\langle lm|L_z|lm\rangle$ immer dann verschwinden, wenn $l \neq l$. Dies gilt auch für alle anderen Operatoren, die mit \mathbf{L}^2 kommutieren. D.h. aber weiterhin, dass all diese Operatoren nur Matrixelemente zwischen Zuständen, die zur gleichen Gesamtdrehimpulsquantenzahl gehören, haben. Wie schon gesehen gilt:

$$\langle lm|L_z|lm\rangle = \hbar m\delta_{m'm} \quad (6.17)$$

$$\langle lm|L_{\pm}|lm\rangle = \hbar [l(l+1) - m(m \pm 1)]^{\frac{1}{2}} \delta_{m',m \pm 1} \quad (6.18)$$

So könne wir z.B. für $l = 1$ schreiben

$$L_z = \hbar \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (6.19)$$

und

$$L_+ = \hbar \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{2} & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{2} \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (6.20)$$

$$L_- = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ \sqrt{2} & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{2} & 0 \end{pmatrix} \quad (6.21)$$

Hier sieht man eine Problematik. Die Quantenzahl m entspricht in der üblichen Definition nicht der Zeile, indem der Eintrag (1) des Vektors steht:

$$|1, 1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad |1, 0\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad |1, -1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (6.22)$$

Bei der Erstellung der Matrizen aus den Relationen 6.17 und 6.18 muss deshalb besonders aufgepasst werden.

Kapitel 7

Der Spin

Im Stern-Gerlach-Experiment wurde entdeckt, dass Elektronen einen intrinsischen Drehimpuls besitzen. Dieser existiert auch im Ruhesystem, wenn der Bahndrehimpuls l null ist. Man stellte fest, dass dieser Eigendrehimpuls des Elektrons, der mit dem Begriff Spin s bezeichnet wird, bei einer Messung nur zwei Werte annehmen kann. Wenn wir den Spin als quantisierten Drehimpuls betrachten und uns daran erinnern, dass es $2l + 1$ Eigenwerte zu \hat{L}_z gibt können wir schnell folgern, dass die Quantenzahl s des Spins $\frac{1}{2}$ betragen muss. Da ein Elektron punktförmig ist, dürfen wir uns diesen Spin nicht wie eine drehende Kugel o.Ä. vorstellen, sondern müssen ihn als eine Eigenschaft des Elektrons auffassen, wie z.B. die Masse.

7.1 Darstellung des Spins

Um also eine vollständige Basis unseres Hilbertraums zu bekommen, müssen auch noch die Spinquantenzahlen s und s_z (bzw. bzgl. einer beliebigen Quantisierungsachse) festgelegt werden. Analog zu den Drehimpulsoperatoren, können Spinoperatoren eingeführt werden, die nur auf den Spinanteil der Wellenfunktion wirken. Es ist sehr wichtig zu verstehen, dass der Spinraum zunächst nichts mit dem Ortsraum zu tun hat sondern einfach eine Erweiterung des Hilbertraums darstellt. Alle bisher bekannten Operatoren vertauschen deshalb auch mit den Spinoperatoren. Wie gesagt hat der Spin Drehimpulseigenschaften:

$$\hat{\mathbf{S}} = \begin{pmatrix} \hat{S}_x \\ \hat{S}_y \\ \hat{S}_z \end{pmatrix}; \quad [\hat{S}_i, \hat{S}_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}\hat{S}_k \quad (7.1)$$

Es wurde empirisch festgestellt, dass die Spinquantenzahl des Elektrons $s = 1/2$ ist. Wir haben also zwei mögliche Messwerte s_z (Eigenwerte) für \hat{S}_z : $s_z = \pm 1/2$. Man sagt auch Spin-Up /-Down. Die Darstellung hat sich wie folgt eingebürgert:

$$\begin{aligned} |\uparrow\rangle &= \left| s = \frac{1}{2}, s_z = +\frac{1}{2} \right\rangle = \chi_{s=1/2, m_s=+1/2} \\ |\downarrow\rangle &= \left| s = \frac{1}{2}, s_z = -\frac{1}{2} \right\rangle = \chi_{s=1/2, m_s=-1/2} \end{aligned} \quad (7.2)$$

Diese zwei Freiheitsgrade bilden eine Basis des Spinraums, einem zweidimensionalen Vektorraum. Wir können 7.2 also darstellen durch:

$$|\uparrow\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad |\downarrow\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (7.3)$$

In dieser Basis (sog. Pauli-Spinoren) können wir die Spinoperatoren als Matrizen darstellen. Dazu benutzt man die Paulimatrizen $\hat{\sigma}_i$:

$$\hat{S}_i = \frac{\hbar}{2} \sigma_i \quad (7.4)$$

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (7.5)$$

Diese haben folgende Eigenschaften:

$$\sigma_i^2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \mathbf{1} \quad (7.6)$$

$$[\sigma_i, \sigma_j] = 2i\sigma_k \epsilon_{ijk} \quad (7.7)$$

$$\{\sigma_i, \sigma_j\} = 0 \quad (7.8)$$

$$Sp \sigma_i = 0 \quad (7.9)$$

$$\det \sigma_i = -1 \quad (7.10)$$

Wir erkennen sofort:

$$\hat{S}_z \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}; \quad \hat{S}_z \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = -\frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (7.11)$$

$$\hat{S}^2 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{3\hbar^2}{4} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}; \quad \hat{S}^2 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{3\hbar^2}{4} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (7.12)$$

7.2 Magnetisches Moment des Elektrons

Der Spin erzeugt bei Teilchen immer ein magnetisches Dipolmoment $\vec{\mu}_s$. Dieses ergibt sich bei einem Teilchen, dessen einziger Freiheitsgrad der Spin ist, zu:

$$\hat{\vec{\mu}}_s = -\frac{eg}{2m} \hat{\vec{S}} \quad (7.13)$$

g ist dabei der gyromagnetische Koeffizient, der für Elektronen nahe bei zwei liegt. Es ist nun offensichtlich, dass der Spin den Hamiltonoperator verändert, weil nun dieses magnetische Dipolmoment in der Schrödingergleichung berücksichtigt werden muss. Die Energie eines Dipols im Magnetfeld ist:

$$E = -\vec{\mu} \cdot \vec{B} \quad (7.14)$$

Dies hat Auswirkungen bei externen Magnetfeldern \vec{B} als auch z.B. bei der Berechnung des Wasserstoffatoms, wo nun das intrinsische magnetische Moment des Elektrons mit dem \vec{A} -Feld des Protons wechselwirkt, und umgekehrt (Proton hat auch $s = 1/2$).

Hier ist allerdings das gesamte Dipolmoment $\vec{\mu}$ zu berücksichtigen, das sich aus Bahndrehimpuls als auch Spin ergibt:

$$\vec{\mu} = \vec{\mu}_l + \vec{\mu}_s = -\frac{e}{2mc} \left(\hat{\vec{L}} + g\hat{\vec{S}} \right) \quad (7.15)$$

Betrachten wir z.B. ein freies Elektron im Magnetfeld, dann ist der Hamiltonian:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_{mag} = \hat{H}_0 - \vec{\mu} \vec{B} = \hat{H}_0 + \mu_b \left(\frac{1}{\hbar} \hat{\vec{L}} + \vec{\sigma} \right) \cdot \vec{B} \quad (7.16)$$

mit dem Bohrschen Magneton $\mu_b = \frac{e\hbar}{2mc}$. Da \hat{H} , $\hat{\vec{L}}$ und $\hat{\vec{S}}$ paarweise vertauschen, sind die Eigenzustände einfach die schon bekannten für das freie Elektron, multipliziert (einfach anhängen) mit den Spineigenzuständen. Für ein radialsymmetrisches Problem z.B.:

$$\psi = R_{n,l}(r) Y_{l,m_l}(\theta, \phi) \chi_{s,m_s} \quad (7.17)$$

7.3 Spin-Bahn-Kopplung

Betrachten wir den Hamilton-Operator eines Wasserstoffatoms nun mit der Eigenschaft Spin. Betrachten wir das klassische Elektron, das sich im elektrischen Feld des Protons bewegt. Dann „spürt“ das Elektron das magnetische Feld:

$$\vec{B} = -\frac{1}{c} (\vec{v} \times \vec{E}); \quad \vec{E} = -\nabla\Phi = -\frac{\vec{r}}{r} \frac{\partial}{\partial r} \Phi \quad (7.18)$$

Wir haben dabei ausgenutzt, dass Φ nur vom Betrag r abhängt. Mit $\Phi(r) = -\frac{1}{e}V(r)$ und $(\vec{v} \times \frac{\vec{r}}{r}) = \frac{1}{mr}(\vec{p} \times \vec{r}) = -\frac{1}{mr}\vec{L}$. Um den quantenmechanischen Operator zu erhalten, müssen wir nur noch ein $\hat{\cdot}$ über L setzen. Allerdings haben wir nicht berücksichtigt, dass das Wasserstoffatom in Relativkoordinaten berechnet wird. Die Korrektur liefert einen Faktor $1/2$. Zum normalen Hamilton des Wasserstoffatoms müssen wir nun die WW mit diesem Magnetfeld hinzufügen:

$$\Delta\hat{H}_{LS} = -\hat{\mu}\hat{B} = \frac{e}{2mc} (\hat{L} + 2\hat{S}) \cdot \hat{B} \approx \frac{1}{2m^2c^2r} \frac{dV(r)}{dr} \hat{L} \cdot \hat{S} \quad (7.19)$$

Dabei würde der in L quadratische Term nicht berücksichtigt. Nun ist die Frage, wie sich dieser neue Hamiltonoperator lösen lässt. Wir betrachten im folgenden nicht den Radialanteil (vgl. 7.17), sondern nur den Spin und Drehimpulsanteil der Wellenfunktion.

Definieren wir zunächst den Gesamtdrehimpuls $\hat{J} = \hat{L} + \hat{S}$. Man kann zeigen, dass nun folgende Relationen gelten (Übungsaufgabe):

$$[\hat{H}, \hat{L}_z] \neq 0; \quad [\hat{H}, \hat{L}^2] = 0 \quad (7.20)$$

$$[\hat{H}, \hat{S}_z] \neq 0; \quad [\hat{H}, \hat{S}^2] = 0 \quad (7.21)$$

$$[\hat{H}, \hat{J}_z] = 0; \quad [\hat{H}, \hat{J}^2] = 0 \quad (7.22)$$

Eigenfunktionen von \hat{H} sind also auch Eigenfunktionen zu \hat{J}_z und \hat{J}^2 . Und s und l sind erhalten (gute Quantenzahlen), m_s und m_l nicht.

$$\psi_{n,l,s,j,m_j} = R_{n,l,j}(r)Y_{l,s,j,m_j}(\theta, \phi) \quad (7.23)$$

$Y_{l,s,j,m_j}(\theta, \phi)$ sind die sog. Spin-Kugelfunktionen. Wir wollen diese im folgenden etwas weiter untersuchen.

7.4 Spinkugelfunktionen

Es ist bekannt, dass die Eigenzustände zum quantenmechanischen Drehimpuls quantisiert sind. Sie sind definiert durch $|l, m_l\rangle$. Ebenso die Eigenzustände des Spins $|s, m_s\rangle$. Wir wissen dass die Eigenzustände eine Basis bilden, also vollständig sind. Jeder Zustand kann durch Linearkombination von Zuständen $|l, m_l\rangle |s, m_s\rangle$ dargestellt werden. Also auch die Eigenzustände des Gesamtdrehimpulses \hat{J} . \hat{J} soll wieder die Drehimpulseigenschaften haben, entsprechend die Eigenzustände folgende Eigenschaften:

$$\hat{J}_z |j, m_j\rangle = m_j \hbar |j, m_j\rangle \quad (7.24)$$

$$\hat{J}^2 |j, m_j\rangle = j(j+1)\hbar^2 |j, m_j\rangle \quad (7.25)$$

Wir können eine allgemeine Linearkombination ansetzen. Wie oben gezeigt nehmen wir l und s immer noch als gute Quantenzahlen an:

$$|j, m_j(l s)\rangle = \sum_{m_l, m_s} C_{l m_l s m_s}^{j m_j} |l, m_l\rangle |s, m_s\rangle \quad (7.26)$$

Die Koeffizienten $C_{lm_l m_s}^{jm_j} = \langle l, m_l, s, m_s | j, m_j \rangle$ heißen Clebsch-Gordan-Koeffizienten. Sie beinhalten die Dreiecksrelationen:

$$\begin{aligned} m_l + m_s &= m_j \\ |l - s| &\leq j \leq l + s \end{aligned}$$

Bsp: Für den Spin $s = 1/2$ und l ist also $j = l \pm 1/2$.

Für $l = 0$: $j = 1/2$; $m_j = m_s$ und deshalb $C_{l=0, m_l=0, s=1/2, m_s=m_j}^{j=1/2, m_j} = 1$ ist einziger CG-Koeffizient.

Für beliebiges l : Die Bedingung $m_l = m_j - m_s$ führt dazu, dass nur 2 CG-Koeffizienten ungleich 0 sein können, bzw. nur über zwei m_l, m_s -Paare summiert wird. Die Darstellung der Zustände $|j, m_j(l s)\rangle$ im Orts-Spin-Raum nennt man Spin-Kugelfunktionen $Y_{l, j, m_j}(\theta, \Phi)$:

$$\begin{aligned} Y_{l, j, m_j}(\theta, \phi) &= \langle \theta, \phi | j, m_j(l s = 1/2) \rangle \\ &= \sum_{m_l, m_s} C_{lm_l m_s}^{jm_j} \langle \theta, \phi | l, m_l \rangle |s, m_s\rangle \\ &= \sum_{m_l, m_s} C_{lm_l m_s}^{jm_j} Y_{l, m_l}(\theta, \phi) \chi_{1/2, m_s} \end{aligned}$$

7.5 Drehimpulskopplungen

So wie oben explizit für den Spin eines Spin-1/2-Teilchens und den Bahndrehimpuls herausgearbeitet, können allg. Drehimpulse und Spins, oder auch Spins und Spins zu einem Gesamtdrehimpuls/-spin nach Formel 7.26 gekoppelt werden. Die CG-Koeffizienten sind aus rein gruppentheoretischen Überlegungen bestimmt. Eine Spin-Spin Kopplung tritt z.B. beim Helium-Atom mit zwei Elektronen auf. Der WW-Operator ist in erster Näherung $\Delta \hat{H} = A \hat{S}_1 \cdot \hat{S}_2$. Dies erinnert sehr an den Spin-Bahnkopplungsterm in 7.19. Es ist also nur logisch den Gesamtspin $\hat{S} = \hat{S}_1 + \hat{S}_2$ einzuführen. Es ergibt sich dann eine Singulettlösung:

$$|S = 0, M_S = 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \{ |\uparrow_1\rangle |\downarrow_2\rangle - |\downarrow_1\rangle |\uparrow_2\rangle \} \quad (7.27)$$

Und das Triplett:

$$|S = 1, M_S\rangle = \begin{cases} |S = 1, M_S = 1\rangle &= |\uparrow_1\rangle |\uparrow_2\rangle \\ |S = 1, M_S = 0\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \{ |\uparrow_1\rangle |\downarrow_2\rangle + |\downarrow_1\rangle |\uparrow_2\rangle \} \\ |S = 1, M_S = -1\rangle &= |\downarrow_1\rangle |\downarrow_2\rangle \end{cases} \quad (7.28)$$