

Theoretical Biophysics

-

Quantum Theory and Molecular Dynamics

9. Vorlesung

Pawel Romanczuk
WS 2017/18

<http://lab.romanczuk.de/teaching>

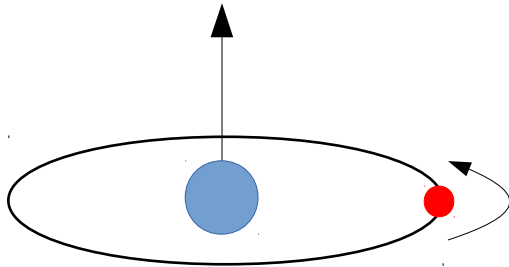
Zusammenfassung letzte VL

- **Wasserstoffatom**
 - Quantenmechanisches Zweikörperproblem
 - Zerlegung in Radial- und Winkelgleichung
 - Winkelgleichung → Lösung aus VL 7
 - Radialgleichung
 - Wellenfunktionen & Spektren

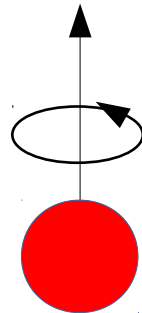
Der Spin

Klassische Mechanik

- Bahndrehimpuls



- Eigendrehimpuls („Spin“)



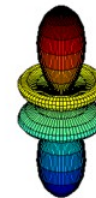
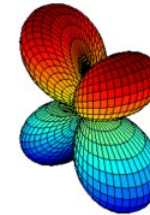
**Physikalisch equivalent:
Rotation einer Masse-
verteilung um eine Drehachse**

Quantenmechanik

- Drehimpulsoperatoren \hat{L}^2, \hat{L}_z
- Diskrete Zustände $l = 0, 1, 2, 3, \dots$
- Eigenfunktionen \rightarrow Kugelflächen-Fkt.

$${}^s Y_2^1 = \cos\theta \sin\theta \sin\phi$$

$$Y_3^0 = 5\cos^3\theta - 3\cos\theta$$



- Spinoperatoren \hat{S}^2, \hat{S}_z
- Keine direkte Analogie zur klass. Mechanik!
- Punkt-Teilchen ohne innere Struktur \rightarrow Keine Eigenfunktionen in ϑ, φ
- Zusätzl. QM-Freiheitsgrad relevant für Atom-, Molekülphysik und WW Strahlung-Materie (Spektroskopie)

Der Spin

Algebraische Theorie identisch zum Bahndrehimpuls:

- Vertauschungsrelationen:

$$[\hat{S}_x, \hat{S}_y] = i\hbar\hat{S}_z \quad [\hat{S}_y, \hat{S}_z] = i\hbar\hat{S}_x \quad [\hat{S}_z, \hat{S}_x] = i\hbar\hat{S}_y$$

- Eigenwertgleichungen:

$$\hat{S}^2 |s m_s\rangle = \hbar^2 s(s+1) |s m_s\rangle \quad \hat{S}_z |s m_s\rangle = \hbar m |s m_s\rangle$$

- Auf-/Absteigeoperatoren:

$$\hat{S}_{\pm} = \hat{S}_x \pm i\hat{S}_y$$

Wobei die Eigenzustände folgende Gleichung erfüllen:

$$\hat{S}_{\pm} |s m_s\rangle = \hbar\sqrt{s(s+1) - m_s(m_s \pm 1)} |s m_s \pm 1\rangle$$

Der Spin

Da die Eigenvektoren keine Kugelflächenfunktionen sind die 2π - periodisch sein müssen, entfällt die Einschränkung auf ganzzahlige Quantenzahlen:

$$s = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2, \frac{5}{2} \dots \quad m_s = -s, -s + 1, \dots, s - 1, s$$

Die Spin s eines Teilches ist unveränderlich \rightarrow Jedes Elementarteilchen hat einen bestimmten festen Wert:

- Fermionen (Proton, Neutron, Elektron): $s = 1/2$
- Photon: $s = 1$

relevant für Atom- und Molekülphysik

- π -Mesonen: $s = 0$
- Δ -Baryonen: $s = 3/2$ und weitere... \rightarrow Herleitung aus Quantenfeldtheorie, Standardmodell

Spin 1/2

Beim wichtigstes Fall des halbzahligen Spins (Elektronen, Protonen, Neutronen), gibt es nur zwei mögliche Eigenzustände:

$$s = \frac{1}{2} \quad \rightarrow \quad m_s = -\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}$$

Man bezeichnet diese typischer weise als *spin-up* und *spin-down*:

$$|m_s = +1/2\rangle \equiv |\uparrow\rangle \rightarrow \chi_+ \quad |m_s = -1/2\rangle \equiv |\downarrow\rangle \rightarrow \chi_-$$

Den allgemeinen Spin-Zustand eines $s=1/2$ Teilchens kann als Überlagerung der Eigenzustände in form eines Spaltenvektors (Spinors) dargestellt werden:

$$\chi = \begin{pmatrix} c_+ \\ c_- \end{pmatrix} = c_+ \chi_+ + c_- \chi_- \quad \text{mit} \quad \chi_+ = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \chi_- = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Spinoperatoren - Matrixdarstellung

Für $s=1/2$ gilt: $\hat{S}^2 \chi_+ = \frac{3}{4} \hbar^2 \chi_+$ $\hat{S}^2 \chi_- = \frac{3}{4} \hbar^2 \chi_-$

Aus $\hat{S}^2 \chi_{\pm} = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} \chi_{\pm}$ folgt $\hat{S}^2 = \frac{3}{4} \hbar^2 \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$

Analog: $\hat{S}_z \chi_+ = \frac{\hbar}{2} \chi_+$ $\hat{S}_z \chi_- = -\frac{\hbar}{2} \chi_-$

$$\hat{S}_z = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Spinoperatoren - Matrixdarstellung

Für Auf- Absteigeoperatoren gilt:

$$\hat{S}_+ \chi_- = \hbar \chi_+ \quad \hat{S}_- \chi_+ = \hbar \chi_- \quad \hat{S}_- \chi_- = \hat{S}_+ \chi_+ = 0$$

somit:
$$\hat{S}_+ = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \quad \hat{S}_- = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

Des weiteren gilt:

$$\hat{S}_\pm = \hat{S}_x \pm i\hat{S}_y \quad \longrightarrow \quad \left\{ \begin{array}{l} \hat{S}_x = \frac{1}{2}(\hat{S}_+ + \hat{S}_-) \\ \hat{S}_y = \frac{1}{2i}(\hat{S}_+ - \hat{S}_-) \end{array} \right.$$

$$\hat{S}_x = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \hat{S}_y = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$$

Pauli-Matrizen

Da die Spinoperatormatrizen für alle Komponenten den gleichen konstanten Faktor haben, kann man auch allgemein schreiben:

$$\hat{S}_i = \frac{\hbar}{2} \hat{\sigma}_i$$

Pauli Matrizen

mit

$$\hat{\sigma}_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \hat{\sigma}_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad \hat{\sigma}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

- \hat{S}_i, \hat{S}^2 sind hermitesch (\rightarrow Observable), im Gegensatz zu \hat{S}_{\pm} .
- $[\hat{S}_i, \hat{S}^2] = 0$ (\rightarrow verträgliche Observablen)
- $[\hat{S}_i, \hat{S}_j] = i\hbar S_k \epsilon_{ijk}$ (\rightarrow Drehimpuls-Kommutatorrelationen, nicht verträglich, nicht gleichzeitig messbar)

Normierung

Eigenspinoren von \hat{S}_z : $\chi_+^{(z)} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ $\chi_-^{(z)} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$

Allgemeiner Zustand: $\chi = \begin{pmatrix} c_+ \\ c_- \end{pmatrix} = c_+ \chi_+^{(z)} + c_- \chi_-^{(z)}$

Für den obigen allgemeinen Zustand haben wir die Wahrscheinlichkeit $|c_+|^2$ *spin-up* zu messen, und die Wahrscheinlichkeit $|c_-|^2$ *spin-down* zu messen.

Normierung: Beide Wahrscheinlichkeiten müssen sich zu 1 aufaddieren:

$$|c_+|^2 + |c_-|^2 = 1$$

Eigenwerte und Eigenspinoren zu \hat{S}_x

- Bestimmung der Eigenwerte (charakteristische Gleichung, Lin. Alg):

$$\left| \hat{S}_x - \lambda \hat{I} \right| = 0 \quad \rightarrow \quad \begin{vmatrix} -\lambda & \hbar/2 \\ \hbar/2 & -\lambda \end{vmatrix} = 0 \quad \rightarrow \quad \lambda^2 = \left(\frac{\hbar}{2} \right)^2$$

$$\rightarrow \quad \boxed{\lambda = \pm \frac{\hbar}{2}} \quad \rightarrow \quad \text{EW identisch zu } \hat{S}_z.$$

- Bestimmung der Eigenvektoren:

$$\frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \pm \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} \quad \rightarrow \quad \begin{pmatrix} b \\ a \end{pmatrix} = \pm \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$$

$$\boxed{\chi_+^{(x)} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \quad \chi_-^{(x)} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}} \quad \rightarrow \quad \chi = \frac{c_1 + c_2}{\sqrt{2}} \chi_+^{(x)} + \frac{c_1 - c_2}{\sqrt{2}} \chi_-^{(x)}$$

(allg. Zustand vorige Folie)

Elektronen im Magnetfeld

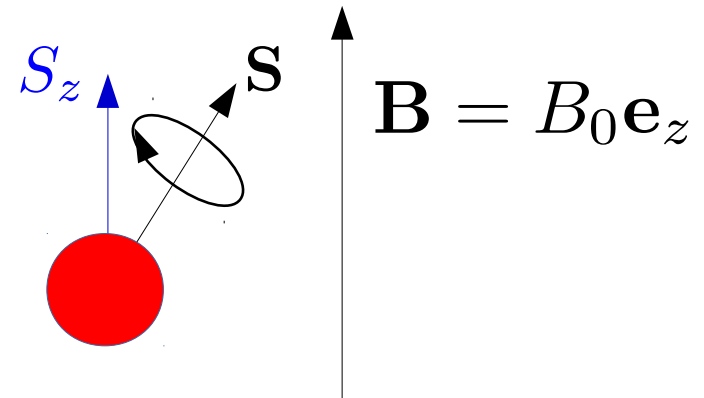
- Analogie zur klassischen Elektrodynamik: Ein rotierendes geladenes Teilchen entspricht einem magnetischen Dipol mit dem Dipolmoment μ proportional zum Eigendrehimpuls \mathbf{S} .

$$\mu = \gamma \mathbf{S} \quad (\gamma: \text{gyromagnetische Konstante})$$

- Die Energie (Hamilton-Funktion) eines unbewegten magnetischen Dipols in einem externen Magnetfeld ist gegeben durch:

$$H = -\mu \cdot \mathbf{B} = -\gamma \mathbf{B} \cdot \mathbf{S}$$

- Nehmen wir an es ist ein homogenes Feld parallel zur z-Achse



Elektronen im Magnetfeld

- QM: Der Hamilton-Operator in Matrixschreibweise:

$$\hat{H} = -\gamma B_0 \hat{S}_z = -\frac{\hbar\gamma B_0}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

- Eigenzustände von \hat{H} sind die gleichen wie von \hat{S}_z (Eigenspinoren)

- *Spin-up*: χ_+ mit der Energie $E_+ = -\frac{\hbar\gamma B_0}{2}$
- *Spin-down*: χ_- mit der Energie $E_- = +\frac{\hbar\gamma B_0}{2}$

→ Energie minimal wenn Spin parallel zum Magnetfeld

Elektronen im Magnetfeld

- Der Hamilton-Operator ist zeitunabhängig, d.h. wir können direkt auch die Lösung der zeitabhängigen Schrödinger-Gl.

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \chi + \hat{H} \chi$$

mit den stationären Lösungen bestimmen:

$$\chi(t) = c_+ \chi_+ e^{-i \frac{E_+}{\hbar} t} + c_- \chi_- e^{-i \frac{E_-}{\hbar} t}$$

Anfangsbedingung bestimmt die Konstanten: $\chi(t=0) = \begin{pmatrix} c_+ \\ c_- \end{pmatrix}$

Mit $|c_+|^2 + |c_-|^2 = 1 \quad \longrightarrow \quad \cos^2(\alpha) + \sin^2(\alpha) = 1$

Vgl.
Einheitskreis

Elektronen im Magnetfeld

- Ansatz (Bedeutung wird gleich klar):
 $c_+ = \cos(\theta/2)$
 $c_- = \sin(\theta/2)$

liefert:
$$\chi(t) = \begin{pmatrix} \cos(\theta/2)e^{+i\gamma B_0 t/2} \\ \sin(\theta/2)e^{-i\gamma B_0 t/2} \end{pmatrix}$$

Die Erwartungswerte für die einzelnen Komponenten erhalten wir aus:

$$\langle S_i(t) \rangle = \langle \chi(t) | \hat{S}_i | \chi(t) \rangle = \chi^\dagger(t) \hat{S}_i \chi(t)$$

z.B.:
$$\langle S_x(t) \rangle = \chi^\dagger(t) \hat{S}_x \chi(t)$$

$$= (\cos(\theta/2)e^{-i\gamma B_0 t/2} + \sin(\theta/2)e^{+i\gamma B_0 t/2}) \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos(\theta/2)e^{+i\gamma B_0 t/2} \\ \sin(\theta/2)e^{-i\gamma B_0 t/2} \end{pmatrix}$$

$$\langle \hat{S}_x \rangle = \frac{\hbar}{2} \sin \theta \cos(\gamma B_0 t)$$

Larmorprazession

- Erwartungswerte der Komponenten:

$$\langle \hat{S}_x \rangle = \frac{\hbar}{2} \sin \theta \cos(\gamma B_0 t)$$

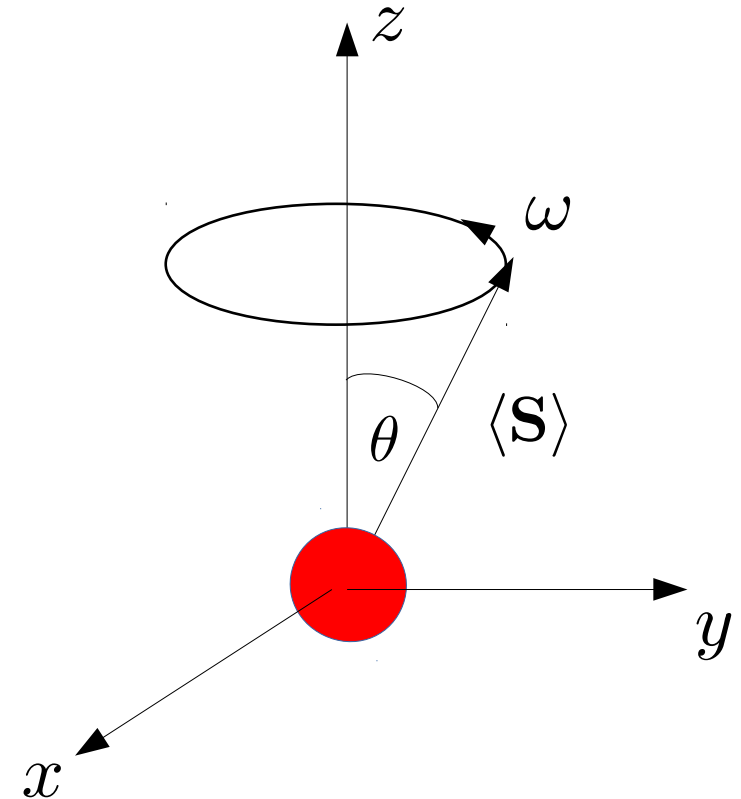
$$\langle \hat{S}_y \rangle = -\frac{\hbar}{2} \sin \theta \sin(\gamma B_0 t)$$

$$\langle \hat{S}_z \rangle = \frac{\hbar}{2} \cos \theta$$

→ $\langle \mathbf{S} \rangle$ ist um einen festen Winkel θ zur z-Achse gekippt und prazidiert mit der sogenannten Larmorfrequenz um die Feldrichtung:

$$\omega = \gamma B_0$$

Die Spinabhangigkeit der Energie in homog. Magnetfeldern & Larmorprazession bilden die Grundlage fur Magnet-Resonanz (Kernspinresonanz, Magnetresonanztomographie)

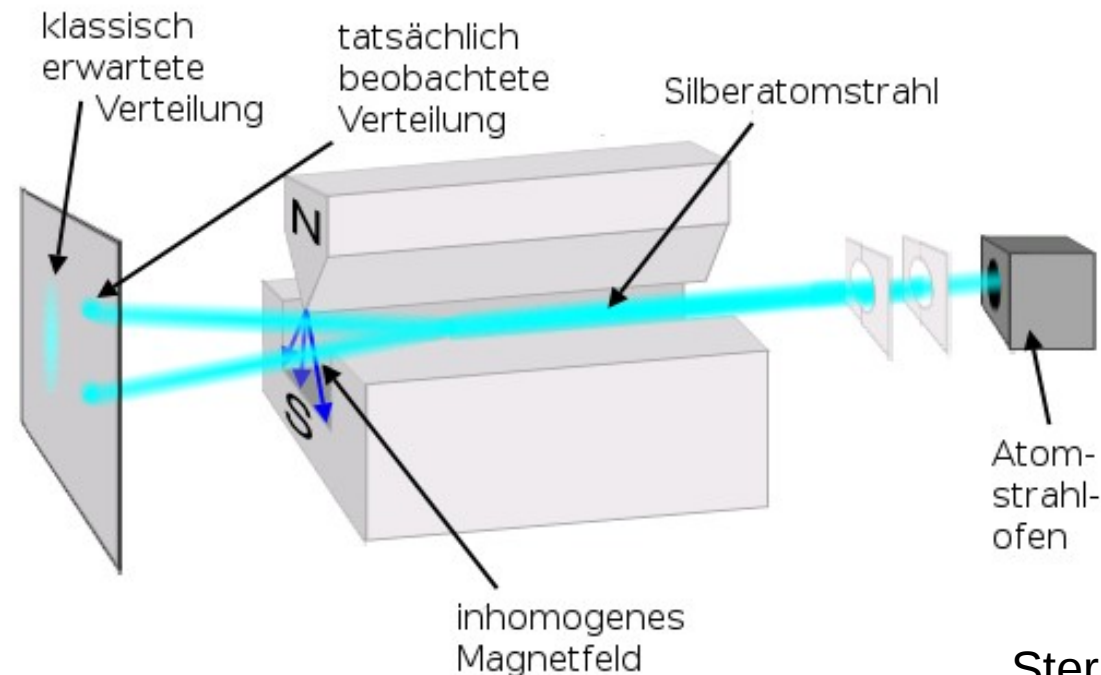


Stern-Gerlach Versuch

- Auf ein magn. Moment Im inhomogenen Magnetfeld, wirkt neben dem Drehmoment (Ausrichtung) auch eine Kraft:

$$\mathbf{F} = \nabla(\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B})$$

Diese Kraft kann dazu genutzt werden Teilchen mit unterschiedlichen Spin zu trennen → Ein Strahl von Teilchen mit $s=1/2$ spaltet sich im inhomogenen Magnetfeld in zwei Strahlen (spin-up & spin-down).



Spin-Bahn Wechselwirkung

- Analogie zur klassischen Elektrodynamik:
Durch die Orbitalbewegung des Elektrons (Bahndrehimpuls) wird im Ruhesystem des Elektrons durch den geladenen Kern ein magnetisches Feld parallel zum Bahndrehimpuls erzeugt (Biot-Savart-Gesetz) welcher auf das magnetische Spinmoment des Elektrons wirkt.
- Ein einzelnes Energieniveau spaltet wegen der zwei möglichen entgegengesetzten Spinorientierung in zwei leicht verschobene Energieniveaus auf bzw. die entsprechenden Spektrallinien weisen eine entsprechende zusätzliche **Feinstruktur** auf.
- „Kleiner“ Effekt, z.B. für Wasserstoff 2p Zustand ($n=2, l=1$)

Zustandsenergie $E_2 = -3.4eV$

Energieaufspaltung $\Delta E_{SL} \sim 10^{-5}eV$

Addition von Drehimpulsen

- Wir betrachten zwei $s=1/2$ Teilchen, z.B. Proton und Elektron eines Wasserstoffatoms im Grundzustand (kein Bahndrehimpuls, $l=0$), oder zwei Elektronen auf einem Atomorbital.
- Die zwei Spinzustände spin-up und spin-down ermöglichen insgesamt vier mögliche Kombinationen:

$$\uparrow\uparrow, \uparrow\downarrow, \downarrow\uparrow, \downarrow\downarrow$$

- Der Gesamtspin ergibt sich einfach aus der Addition:

$$\begin{aligned}\hat{S}_z \chi_1 \chi_2 &= (\hat{S}_z^{(1)} \chi_1 \chi_2 + \chi_1 \hat{S}_z^{(2)} \chi_2) = (\hat{S}_z^{(1)} \chi_1) \chi_2 + \chi_1 (\hat{S}_z^{(2)} \chi_2) \\ &= \hbar(m_1 + m_2) \chi_1 \chi_2\end{aligned}$$

$$\uparrow\uparrow: \quad m = +1$$

$$\uparrow\downarrow: \quad m = 0$$

$$\downarrow\uparrow: \quad m = 0$$

$$\downarrow\downarrow: \quad m = -1$$

- Aber m soll sich doch ganzzahlig ändern!

$$s = 1 \rightarrow m = -1, 0, +1$$

Lösung: $\uparrow\downarrow$ & $\downarrow\uparrow$ sind nicht „unterscheidbar“ und entsprechen einem Zustand.

Singulett und Tripletzustände

- Wir wenden den Absteigeoperator $\hat{S}_- = \hat{S}_-^{(1)} + \hat{S}_-^{(2)}$ auf $\uparrow\uparrow$ an:

$$\hat{S}_- \uparrow\uparrow = (\hat{S}_-^{(1)} \uparrow) \uparrow + \uparrow (\hat{S}_-^{(2)} \uparrow) = \hbar(\downarrow\uparrow + \uparrow\downarrow)$$

- Hieraus erhalten wir drei Zustände $|s m\rangle$ für $s=1$:

$$\left. \begin{aligned} |1 1\rangle &= \uparrow\uparrow \\ |1 0\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\uparrow\downarrow + \downarrow\uparrow) \\ |1 -1\rangle &= \downarrow\downarrow \end{aligned} \right\} s=1, \text{ Triplet}$$

- Allerdings können wir alternativ mit einem Minuszeichen eine orthogonale Konfiguration komplett ohne Spin, mit nur einem möglichen EZ, definieren:

$$|0 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(\uparrow\downarrow - \downarrow\uparrow) \quad s=0, \text{ Singulett}$$

Man kann leicht zeigen, dass $s=0$ aus der Anwendung von \hat{S}_+ bzw. \hat{S}_- auf $|0 0\rangle_{20}$

Singulett & Tripletzustände: Eigenzustände von \hat{S}^2

→ Die Kombination aus zwei Spin $\frac{1}{2}$ Teilchen kann einen Gesamtspin $s=0$ oder $s=1$ tragen, da beides Eigenvektoren von \hat{S}^2 sind:

$$\hat{S}^2 = (\mathbf{S}^{(1)} + \mathbf{S}^{(2)})^2 = (S^{(1)})^2 + (S^{(2)})^2 + 2\mathbf{S}^{(1)} \cdot \mathbf{S}^{(2)}$$

mit $\mathbf{S}^{(1)} \cdot \mathbf{S}^{(2)} (\uparrow\downarrow) = (S_x^{(1)} \uparrow)(S_x^{(2)} \downarrow) + (S_y^{(1)} \uparrow)(S_y^{(2)} \downarrow) + (S_z^{(1)} \uparrow)(S_z^{(2)} \downarrow)$

$$= \left(\frac{\hbar}{2} \uparrow\right) \left(\frac{\hbar}{2} \downarrow\right) + \left(\frac{i\hbar}{2} \uparrow\right) \left(\frac{-i\hbar}{2} \downarrow\right) + \left(\frac{\hbar}{2} \uparrow\right) \left(\frac{-\hbar}{2} \downarrow\right)$$
$$= \frac{\hbar^2}{4} (2 \uparrow\downarrow - \downarrow\uparrow)$$

erhält man nach kurzer Rechnung:

$$\hat{S}^2 |1, 0\rangle = 2\hbar^2 |1, 0\rangle \rightarrow \text{EV mit EW } \lambda = 2\hbar$$

$$\hat{S}^2 |0, 0\rangle = 0 \rightarrow \text{EV mit EW } \lambda = 0$$

Beide Spinzustände sind möglich aus der Addition zweier Spin $\frac{1}{2}$ Teilchen, Welcher vorliegt hängt von der Konfiguration der beiden Teilchen ab.

Multiplizität des Elektronspins

- **1-Elektron-Systeme:** (einzelnes H-Atom): *spin-up*, *spin-down* → Dublett
- **Mehrelektron-Systeme:**

System	Beispiel	Elektronen im Grundzustand		Gesamtspin-Quantenzahl S	Multiplizität $2S + 1$	Grundzustand
		gepaart	ungepaart			
die meisten Moleküle	Wasserstoff-Molekül H-H	alle (hier 1x2)	0	$0/2 = 0$	$2 \times 0 + 1 = 1$	Singulett
Radikale	Stickstoffmonoxid •N=O bzw. N-O•	hier 5x2	1	$1/2$	$2 \times (1/2) + 1 = 2$	Dublett
Biradikale	Sauerstoff-Molekül •O-O•	hier 5x2	2	$2/2 = 1$	$2 \times 1 + 1 = 3$	Triplet
Metallionen, vor allem der Nebengruppe, und Komplexe		...x2	≥ 2	≥ 1	≥ 3	Triplet, Quartett, ...

Quelle: Wikipedia

- Ein Zustand $|n l m\rangle$ kann maximal zwei Elektronen mit entgegengesetzten Spin besetzt sein („gepaart“) → Pauli-Prinzip (nächste VL),
- „gepaarte“ Elektronen tragen nicht zum Gesamtspin bei,
- Die meisten stabilen Moleküle haben komplette Schalen, daher einen Singulett Grundzustand. Ausnahme z.B. Sauerstoff O₂ (Triplet),
- Wichtig für Auswahlregeln bei elektronischen Übergängen (Spektroskopie)

Addition - Allgemeiner Fall

- Wir haben ein spezielles Beispiel mit zwei Spin $\frac{1}{2}$ Teilchen durchgespielt, für ein grundlegendes Problem: Welche möglichen Gesamtspin-Werte ergeben sich wenn man zwei Spins s_1 und s_2 kombiniert.

$$s_1 = 1/2 \quad s_2 = 1/2 \quad \longrightarrow \quad s = 0, 1$$

Für beliebige Spins mit $s_1 \geq s_2$ gilt:

$$s = (s_1 + s_2), (s_1 + s_2 - 1), (s_1 + s_2 - 2), \dots, |s_1 - s_2|$$

Es gilt für Addition aller Drehimpulse, nicht nur von Spins!

Beispiel H-Atom im Zustand $|n l m\rangle$:

Summe aus Bahndrehimpuls+Elektronspin: $l + \frac{1}{2}, l - \frac{1}{2}$

Zusammen mit dem Spin des Protons ($\frac{1}{2}$) erhalten wir für den Gesamtdrehimpuls drei mögliche Konfigurationen: $j = l + 1, l, l - 1$

Glebsch-Gordan-Koeffizienten

- Der kombinierte Zustand $|s m\rangle$ kann als eine lineare Kombination von Einzelspinzuständen dargestellt werden:

$$|s m\rangle = \sum_{m_1+m_2=m} C_{m_1, m_2, m}^{s_1, s_2, s} |s_1 m_1\rangle |s_2 m_2\rangle$$

- In unserem einfachen Fall für die Triplett-Konfiguration haben wir:

$$|1, 1\rangle = \uparrow\uparrow \equiv \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \longrightarrow C_{\frac{1}{2} \frac{1}{2} 1}^{\frac{1}{2} \frac{1}{2} 1} = 1$$

$$|1, -1\rangle = \downarrow\downarrow \equiv \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \longrightarrow C_{-\frac{1}{2} -\frac{1}{2} 1}^{\frac{1}{2} \frac{1}{2} 1} = 1$$

$$|1, 0\rangle = \frac{\downarrow\uparrow + \uparrow\downarrow}{\sqrt{2}} \equiv \frac{\left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \left| \frac{1}{2}, +\frac{1}{2} \right\rangle + \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \left| -\frac{1}{2}, +\frac{1}{2} \right\rangle}{\sqrt{2}}$$

$\nearrow C_{\frac{1}{2} \frac{1}{2} 1}^{\frac{1}{2} \frac{1}{2} 1} = \frac{1}{\sqrt{2}}$
 $\searrow C_{-\frac{1}{2} \frac{1}{2} 1}^{\frac{1}{2} \frac{1}{2} 1} = \frac{1}{\sqrt{2}}$

- Gruppentheorie → Berechnung beliebiger G.-G.-Koeffizienten;
 Praxis → Nachschlagen der G.G.-Koeffizienten in entsprechenden Tabellen.