

Drehimpuls und Spin

1 Drehimpuls

In der **Mechanik** kann der Drehimpuls \vec{L} definiert werden durch

$$\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}. \quad (\text{Q1})$$

Nach dieser Definition verläuft die Richtung des Vektors \vec{L} senkrecht zu der durch den Ortsvektor \vec{r} und den Impulsvektor \vec{p} aufgespannten Ebene A . Wenn diese Ebene den Normaleneinheitsvektor \vec{n}_A besitzt, dann ergibt sich für den Drehimpuls eines Körpers oder eines Teilchens der Masse m auf einer Kreisbahn mit Radius r in der Ebene A nach (1.164) und (1.27)

$$\vec{L} = m \cdot r^2 \cdot \dot{\phi} \cdot \vec{n}_A = m \cdot r^2 \cdot \omega \cdot \vec{n}_A. \quad (\text{Q2})$$

Unter Anwendung des Korrespondenzprinzips wird in der **Quantenmechanik** der Bahndrehimpuls definiert durch

$$\vec{L} = \hat{r} \times \vec{p}. \quad (\text{Q3})$$

2 Magnetisches Moment

Bewegt sich ein Teilchen der Masse m und Ladung q auf einer Kreisbahn mit Radius r , Flächeninhalt A und Normaleneinheitsvektor \vec{n}_A mit der Umlaufzeit T , dann wird diesem Kreisstrom I in der **Elektrodynamik** ein magnetisches Moment $\vec{\mu}$ zugeordnet, s. Abb. Q1:

$$\vec{\mu} = I \cdot \vec{A} = I \cdot A \cdot \vec{n}_A = \frac{q}{T} \cdot (\pi \cdot r^2) \cdot \vec{n}_A. \quad (\text{Q4})$$

Mithilfe von $\omega = \frac{2 \cdot \pi}{T}$ und (Q2) kann (Q4) umgeschrieben werden zu

$$\vec{\mu} = \frac{q}{T} \cdot \pi \cdot r^2 \cdot \vec{n}_A = \frac{q}{2 \cdot m} \cdot m \cdot r^2 \cdot \frac{2 \cdot \pi}{T} \cdot \vec{n}_A = \frac{q}{2 \cdot m} \cdot m \cdot r^2 \cdot \omega \cdot \vec{n}_A = \frac{q}{2 \cdot m} \cdot \vec{L}. \quad (\text{Q5})$$

Der Faktor $\gamma := \frac{q}{2 \cdot m}$ wird **gyromagnetisches Verhältnis** genannt.

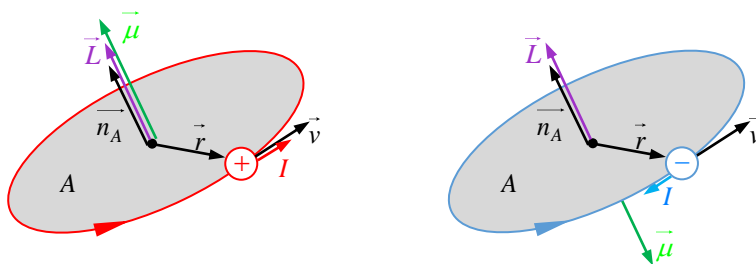


Abb. Q1 Magnetisches Moment eines Kreisstroms

Bemerkung

Die Definition des magnetischen Moments $\vec{\mu}$ ist analog zur Definition des Dipolmoments $d\vec{p} = q \cdot d\vec{\ell}$ in (2.38). Es wird jeweils die Ursache des Moments (q bzw. I) mit einer die Geometrie beschreibenden Größe ($\vec{\ell}$ bzw. \vec{A}) multipliziert.

In der **Quantenmechanik** ist zu berücksichtigen, dass der Drehimpuls der räumlichen Bewegung (Bahndrehimpuls) nur ganzzahlige Vielfache des Planck'schen Wirkungsquantums betragen kann, s. Abschn. 3 dieses Bonusmaterials. Das kleinste magnetische Moment wird als **Magneton** μ bezeichnet, das Magneton des Elektrons als Bohr'sches Magneton μ_B :

$$\mu = \frac{q \cdot \hbar}{2 \cdot m} \quad \text{und} \quad \mu_B = \frac{e \cdot \hbar}{2 \cdot m_e}. \quad (\text{Q6})$$

Der Operator für das magnetische Moment des Bahndrehimpulses eines Elektrons berücksichtigt das Vorzeichen der Ladung:

$$\vec{\mu}_\ell = -\frac{e}{2 \cdot m} \cdot \vec{L} = -\frac{\mu_B}{\hbar} \cdot \vec{L} = -\frac{\mu_B}{\hbar} \cdot \begin{pmatrix} L_x \\ L_y \\ L_z \end{pmatrix}. \quad (\text{Q7})$$

Bemerkung

Es gehört zu den Besonderheiten der Quantenmechanik, dass dort das magnetische Moment des Bahndrehimpulses eines Elektrons Verwendung findet, obwohl nicht von der Kreisbewegung des Elektrons um den Atomkern ausgegangen wird (in den meisten Interpretationen wird sogar auf den Bahnbegriff verzichtet).

3 Theorie des Bahndrehimpulses

Ausgangspunkt der Betrachtungen sind folgende Beziehungen, deren Nachweis ich in Anhang 1 und Anhang 2 dieses Bonusmaterials auslagere:

$$[L_i, L_j] = i \cdot \hbar \cdot \varepsilon_{ijk} \cdot L_k \quad (\text{Q8})$$

und

$$[L_i, \vec{L}^2] = 0. \quad (\text{Q9})$$

In (Q8) ist über den doppelt vorkommenden Index k zu summieren (Variante der Einstein'schen Summenkonvention).

Wegen der Gültigkeit der Beziehung (Q9) gibt es ein **gemeinsames System von Eigenzuständen (ein vollständiges Orthonormalsystem)** für die i -te Komponente des Bahndrehimpulses und das Quadrat des Bahndrehimpulses. Vereinbarungsgemäß wird die dritte Komponente $L_3 = L_z$ des Bahndrehimpulses ausgewählt. Wir werden in der folgenden Herleitung erkennen, dass sich \vec{L}^2 mithilfe einer reellwertigen Funktion $c(l) = c_l$ und L_z mittels einer reellen Zahl m darstellen lassen. Deshalb wird das gemeinsame System von normierten Eigenzuständen für \vec{L}^2 und L_z durch $|lm\rangle$ gekennzeichnet. Der Bahndrehimpuls hat dieselbe Einheit wie die Wirkung und damit wie das Planck'sche Wirkungsquantum \hbar . Damit c_l und m tatsächlich als dimensionslose reelle Funktion bzw. Zahl verwendet werden können, sind folgende Ansätze für die **Eigenwertgleichungen** der betrachteten Operatoren zweckmäßig:

$$\vec{L}|lm\rangle = \hbar \cdot a_l \cdot |lm\rangle \Rightarrow \vec{L}\vec{L}|lm\rangle = \vec{L}^2|lm\rangle = \hbar \cdot a_l \cdot \vec{L}|lm\rangle = \hbar^2 \cdot a_l^2 \cdot |lm\rangle \quad |a_l^2| =: c_l \geq 0, \quad \vec{L}^2|lm\rangle = \hbar^2 \cdot c_l \cdot |lm\rangle \quad \text{mit } c_l \geq 0; \quad (\text{Q10})$$

$$L_z|lm\rangle = \hbar \cdot m \cdot |lm\rangle. \quad (\text{Q11})$$

Die Bestimmung von c_l und m erfolgt mithilfe zweier **Leiteroperatoren** L_+ und L_- (das Vorgehen ist analog zur algebraischen Lösung der Differenzialgleichung für den harmonischen Oszillator in Abschn. 4.4.3 des hier betrachteten Buchs):

$$L_{\pm} = L_x \pm i \cdot L_y. \quad (\text{Q12})$$

Um mit den Leiteroperatoren effektiv rechnen zu können, werden im Anhang 3 dieses Bonusmaterials einige Beziehungen hergeleitet.

Wie erkennen die Wirkung der Leiteroperatoren, wenn wir \vec{L}^2 bzw. L_z auf den Zustand $(L_{\pm}|lm\rangle)$ anwenden.

Dabei verwenden wir (Q77), (Q10), (Q76) und (Q11), d. h. $L^2 L_{\pm} = L_{\pm} L^2$, $\vec{L}^2 |lm\rangle = \hbar^2 \cdot c_l \cdot |lm\rangle$, $L_{\pm} L_z - L_z L_{\pm} = \mp \hbar \cdot L_{\pm}$ und $L_z |lm\rangle = \hbar \cdot m \cdot |lm\rangle$:

$$L^2 (L_{\pm} |lm\rangle) = L_{\pm} L^2 |lm\rangle = L_{\pm} (\hbar^2 \cdot c_l \cdot |lm\rangle) = \hbar^2 \cdot c_l \cdot (L_{\pm} |lm\rangle); \quad (\text{Q13})$$

$$L_z (L_{\pm} |lm\rangle) = (L_{\pm} L_z \pm \hbar \cdot L_{\pm}) |lm\rangle = L_{\pm} (L_z |lm\rangle \pm \hbar |lm\rangle) \quad |L_z |lm\rangle = \hbar \cdot m \cdot |lm\rangle, \\ = L_{\pm} (\hbar \cdot m \cdot |lm\rangle \pm \hbar |lm\rangle),$$

$$L_z (L_{\pm} |lm\rangle) = \hbar \cdot (m \pm 1) \cdot (L_{\pm} |lm\rangle). \quad (\text{Q14})$$

Ergebnis:

Der Eigenwert von \vec{L}^2 im Zustand $(L_{\pm} |lm\rangle)$ ist der gleiche wie im Zustand $|lm\rangle$.

Die Anwendung von L_+ erhöht den Eigenwert von L_z um \hbar und die Anwendung von L_- erniedrigt den Eigenwert von L_z um \hbar . Deshalb werden die Leiteroperatoren auch als **Aufsteige- bzw. Absteigeoperator** bezeichnet.

Berechnung von c_l und m

Da Skalarprodukte positiv definit sind, gelten $\langle lm | L_x^2 | lm \rangle \geq 0$ und $\langle lm | L_y^2 | lm \rangle \geq 0$. Damit ergibt sich:

$$\langle lm | L_x^2 | lm \rangle + \langle lm | L_y^2 | lm \rangle = \langle lm | (L_x^2 + L_y^2) | lm \rangle \geq 0 \quad \left| L_x^2 + L_y^2 = \vec{L}^2 - L_z^2 = \vec{L}^2 - L_z L_z \right.,$$

$$\langle lm | (\vec{L}^2 - L_z L_z) | lm \rangle = \langle lm | (\vec{L}^2 | lm \rangle) - \langle lm | L_z (L_z | lm \rangle) \geq 0,$$

$$\hbar^2 \cdot c_l \cdot \langle lm | lm \rangle - \hbar \cdot m \cdot \langle lm | (L_z | lm \rangle) = \hbar^2 \cdot c_l \cdot \underbrace{\langle lm | lm \rangle}_1 - \hbar^2 \cdot m^2 \cdot \underbrace{\langle lm | lm \rangle}_1 \geq 0,$$

$$c_l - m^2 \geq 0 \quad |c_l \geq 0 \text{ nach (Q10)},$$

$$|m| \leq \sqrt{c_l},$$

$$-\sqrt{c_l} \leq m \leq \sqrt{c_l}. \quad (\text{Q15})$$

(Q15) zeigt, dass m nach oben und unten beschränkt ist.

Da der Aufsteigeoperator L_+ den Eigenwert $\hbar \cdot m$ von L_z um \hbar erhöht und da m nach oben durch $\sqrt{c_l}$ beschränkt ist, muss es ein maximales $m_{\max} \geq 0$ geben mit

$$L_+ |m_{\max}\rangle = 0. \quad (\text{Q16})$$

Analog muss es ein minimales m_{\min} geben mit

$$L_- |l m_{\min}\rangle = 0. \quad (\text{Q17})$$

Damit können die in (Q15) formulierten Schranken für m auch dargestellt werden durch

$$m_{\min} \leq m \leq m_{\max}. \quad (\text{Q18})$$

Wird vom Zustand $|l m_{\min}\rangle$ ausgegangen, dann führt eine n -malige Anwendung des Aufsteigeoperators L_+ dazu, dass der Zustand $|l m_{\max}\rangle$ erreicht wird. Deshalb gilt die Beziehung

$$m_{\min} + n = m_{\max} \text{ mit } n \in \mathbb{N}. \quad (\text{Q19})$$

Analog gilt: Wird vom Zustand $|l m_{\max}\rangle$ ausgegangen, dann führt eine n -malige Anwendung des Absteigeoperators L_- dazu, dass der Zustand $|l m_{\min}\rangle$ erreicht wird. Deshalb gilt die zu (Q19) analoge Beziehung

$$m_{\max} - n = m_{\min} \text{ mit } n \in \mathbb{N}.$$

Aus (Q16), d. h. $L_+ |l m_{\max}\rangle = 0$, folgern wir, dass $0 = L_- (L_+ |l m_{\max}\rangle) = L_- L_+ |l m_{\max}\rangle$ gilt. An dieser Stelle können wir (Q79) nutzen, d. h. $L_- L_+ = L^2 - L_z^2 - \hbar \cdot L_z$:

$$\begin{aligned} 0 &= L_- L_+ |l m_{\max}\rangle \quad |L_- L_+ = L^2 - L_z^2 - \hbar \cdot L_z, \\ 0 &= (L^2 - L_z^2 - \hbar \cdot L_z) |l m_{\max}\rangle = L^2 |l m_{\max}\rangle - L_z L_z |l m_{\max}\rangle - \hbar \cdot L_z |l m_{\max}\rangle, \\ 0 &= \hbar^2 \cdot c_l \cdot |l m_{\max}\rangle - \hbar \cdot m_{\max} \cdot L_z |l m_{\max}\rangle - \hbar^2 \cdot m_{\max} \cdot |l m_{\max}\rangle, \\ &= \hbar^2 \cdot c_l \cdot |l m_{\max}\rangle - \hbar^2 \cdot m_{\max}^2 \cdot |l m_{\max}\rangle - \hbar^2 \cdot m_{\max} \cdot |l m_{\max}\rangle, \\ &= \hbar^2 \cdot (c_l - m_{\max}^2 - m_{\max}) \cdot |l m_{\max}\rangle, \\ 0 &= c_l - m_{\max}^2 - m_{\max} \quad \text{bzw.} \quad c_l = m_{\max}^2 + m_{\max} = m_{\max} \cdot (m_{\max} + 1). \end{aligned} \quad (\text{Q20})$$

Analog schließen wir aus (Q17), d. h. $L_- |l m_{\min}\rangle = 0$ auf $0 = L_+ (L_- |l m_{\min}\rangle) = L_+ L_- |l m_{\min}\rangle$. Mit (Q78), d. h. $L_+ L_- = L^2 - L_z^2 + \hbar \cdot L_z$, ergibt sich:

$$\begin{aligned} 0 &= L_+ (L_- |l m_{\min}\rangle) = L_+ L_- |l m_{\min}\rangle \quad |L_+ L_- = L^2 - L_z^2 + \hbar \cdot L_z, \\ &= (L^2 - L_z^2 + \hbar \cdot L_z) |l m_{\min}\rangle = L^2 |l m_{\min}\rangle - L_z L_z |l m_{\min}\rangle + \hbar \cdot L_z |l m_{\min}\rangle, \\ &= (\hbar^2 \cdot c_l - \hbar^2 \cdot m_{\min}^2 + \hbar^2 \cdot m_{\min}) |l m_{\min}\rangle = \hbar^2 \cdot (c_l - m_{\min}^2 + m_{\min}) \cdot |l m_{\min}\rangle, \\ 0 &= c_l - m_{\min}^2 + m_{\min} \quad \text{bzw.} \quad c_l = m_{\min}^2 - m_{\min} = m_{\min} \cdot (m_{\min} - 1). \end{aligned} \quad (\text{Q21})$$

Durch Subtraktion von (Q20) und (Q21) erhalten wir eine Beziehung zwischen m_{\min} und m_{\max} :

$$\begin{aligned} 0 &= m_{\min}^2 - m_{\min} - (m_{\max}^2 + m_{\max}), \\ m_{\min 1,2} &= \frac{1}{2} \pm \sqrt{\frac{1}{4} + m_{\max}^2 + m_{\max}} = \frac{1}{2} \cdot (1 \pm \sqrt{4 \cdot m_{\max}^2 + 4 \cdot m_{\max} + 1}) = \frac{1}{2} \cdot (1 \pm \sqrt{(2 \cdot m_{\max} + 1)^2}) = \frac{1}{2} \cdot (1 \pm (2 \cdot m_{\max} + 1)). \end{aligned}$$

Damit $m_{\min} \leq m_{\max}$ gilt, muss das untere Vorzeichen verwendet werden:

$$m_{\min} = \frac{1}{2} \cdot (1 - 2 \cdot m_{\max} - 1) = -m_{\max}. \quad (\text{Q22})$$

Aus (Q19) und (Q22) folgt

$$n = m_{\max} - m_{\min} = 2 \cdot m_{\max} \in \mathbb{N} \text{ mit } n \in \mathbb{N}. \quad (\text{Q23})$$

Wegen (Q23) kann m_{\max} nur positiv ganzzahlig, positiv halbzahlig oder null sein.

Nach der **Umbenennung** $m_{\max} =: l$ erhalten wir aus (Q23) die Quantenzahl für einen allgemeinen Drehimpuls:

$$l = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2, \frac{5}{2}, 3, \dots \quad (\text{Q24})$$

Aus (Q18) und (Q22) ergibt sich die Quantenzahl für die dritte Komponente des Drehimpulses zu

$$-l \leq m \leq l \text{ d. h. } m = -l, -l+1, \dots, l-1, l. \quad (\text{Q25})$$

Aus (Q10), (Q20) und $m_{\max} = l$ erhalten wir für die Eigenwertgleichung des Operators \vec{L}^2

$$\vec{L}^2 |lm\rangle = \hbar^2 \cdot l \cdot (l+1) \cdot |lm\rangle. \quad (\text{Q26})$$

Besonderheit für den Bahndrehimpuls

Aus dem Zustandsvektor $|lm\rangle$ kann die Zustandsfunktion in Ortsdarstellung wie üblich mittels $\langle \vec{r} | lm \rangle$ bestimmt werden. Bei Verwendung von Kugelkoordinaten ergeben sich für die Winkelanteile der Zustandsfunktion die normierten Kugelflächenfunktionen $Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$, d. h., (Q26) und (Q11) gehen in die Eigenwertgleichungen (4.190) über:

$$\vec{L}^2 Y_{lm}(\vartheta, \varphi) = \hbar^2 \cdot l \cdot (l+1) \cdot Y_{lm}(\vartheta, \varphi), \quad (\text{Q27})$$

$$L_z Y_{lm}(\vartheta, \varphi) = \hbar \cdot m \cdot Y_{lm}(\vartheta, \varphi). \quad (\text{Q28})$$

Die Kugelflächenfunktionen $Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$ enthalten die Terme $\cos \vartheta$ und $e^{i \cdot m \cdot \varphi}$. Für die Zustandsfunktion des **Bahndrehimpulses** wird die **Symmetrieforderung** erhoben, dass sie invariant gegenüber einer Drehung um $2 \cdot \pi$ sein soll. Bezüglich des Polarwinkels ϑ ist dies unproblematisch, da $\cos(\vartheta + 2 \cdot \pi) = \cos \vartheta$ gilt. Für den Azimutwinkel φ ergibt sich bei dieser Transformation

$$e^{i \cdot m \cdot \varphi} \rightarrow e^{i \cdot m \cdot (\varphi + 2 \cdot \pi)} = e^{i \cdot 2 \cdot \pi \cdot m} \cdot e^{i \cdot m \cdot \varphi}.$$

Wenn m einen halbzahlgigen Wert besitzen würde, d. h. bei $m = (2 \cdot k + 1)/2$ mit $k \in \mathbb{Z}$, dann würde der transformierte Term nicht mit $e^{i \cdot m \cdot \varphi}$ übereinstimmen, da sich mit (6.2)

$e^{i \cdot 2 \cdot \pi \cdot m} = e^{i \cdot 2 \cdot \pi \cdot (2 \cdot k + 1)/2} = (e^{i \cdot \pi})^{2 \cdot k + 1} = (-1)^{2 \cdot k + 1} = -1$ ergibt. Deshalb darf beim **Bahndrehimpuls** die Variable m und damit auch l nur ganzzahlige Werte annehmen. Wir werden noch kennenlernen, dass beim **Spin** diese Einschränkung nicht gilt, da dort keine entsprechende Symmetrieforderung erhoben wird.

In Tab. 1 fassen wir die Ergebnisse zusammen.

Tab. 1 Eigenwertgleichungen und Quantenzahlen für den Bahndrehimpuls

Item	Beziehungen
Eigenwertgleichung für \vec{L}^2	$\vec{L}^2 lm\rangle = \hbar^2 \cdot l \cdot (l+1) \cdot lm\rangle$
Quantenzahl für einen allgemeinen Drehimpuls (z. B. Spin)	$l = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2, \frac{5}{2}, 3, \dots$
Quantenzahl für den Bahndrehimpuls	$l = 0, 1, 2, 3, \dots$
Eigenwertgleichung für L_z	$L_z lm\rangle = \hbar \cdot m \cdot lm\rangle$
Quantenzahl für die dritte Komponente des Drehimpulses	$-l \leq m \leq l, \text{ d. h. } m \in \{-l, -l+1, \dots, l-1, l\}$

Die zu einem festen Wert der Quantenzahl l gehörenden $(2 \cdot l + 1)$ Zustände, die sich in der Quantenzahl m unterscheiden, bilden ein **Multiplett**, z. B.

- Singulett für $l = 0$ mit $|l, m_l\rangle = |0, 0\rangle = 0$,
- Duplett für $l = \frac{1}{2}$: Die möglichen Zustände $|l, m_l\rangle$ bilden das Tupel $\left(\left|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right\rangle, \left|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle\right)$,
- Triplett für $l = 1$: Die möglichen Zustände $|l, m_l\rangle$ bilden das Tupel $\left(|1, 1\rangle, |1, 0\rangle, |1, -1\rangle\right)$,
- Quadruplett für $l = \frac{3}{2}$: Die möglichen Zustände $|l, m_l\rangle$ bilden das Tupel $\left(\left|\frac{3}{2}, \frac{3}{2}\right\rangle, \left|\frac{3}{2}, \frac{1}{2}\right\rangle, \left|\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle, \left|\frac{3}{2}, -\frac{3}{2}\right\rangle\right)$.

Beispielsweise ist der Stern-Gerlach-Versuch im Rahmen der Bohr'schen Quantenmechanik deshalb unverständlich, da das Valenzelektron des Silberatoms ein 5s-Elektron mit $l = 0$ ist und deshalb der Bahndrehimpuls kein magnetisches Moment besitzt.

Werden die Drehimpulsvektoren \vec{L} für einen festen Wert der Quantenzahl l in ein kartesisches L_x - L_y - L_z -Koordinatensystem eingezeichnet, dann liegen wegen $\vec{L}^2 |lm\rangle = \hbar^2 \cdot l \cdot (l+1) \cdot |lm\rangle$ die Spitzen dieser Vektoren auf einer Kugel mit Radius $r = \hbar \cdot \sqrt{l \cdot (l+1)}$. Da für einen festen Wert der Quantenzahl l wegen $L_z |lm\rangle = \hbar \cdot m \cdot |lm\rangle$ mit $m \in \{-l, -l+1, \dots, l-1, l\}$ nur einige diskrete L_z -Werte existieren, kommt es zur **Richtungsquantelung** mit $L_z = \{-l \cdot \hbar, (-l+1) \cdot \hbar, \dots, (l-1) \cdot \hbar, l \cdot \hbar\}$.

Beispiel 1

Veranschaulichen Sie die Richtungsquantelung des Drehimpulsvektors \vec{L} für ein Duplett, Triplet und Quartett.

Lösung:

Duplett: Es gelten $l = \frac{1}{2}$ und deshalb $r = \hbar \cdot \sqrt{\frac{1}{2} \cdot \left(\frac{1}{2} + 1\right)} = \frac{\sqrt{3}}{2} \cdot \hbar$ sowie $L_z = \left\{ \frac{1}{2} \cdot \hbar, -\frac{1}{2} \cdot \hbar \right\}$.

Einige der möglichen Drehimpulsvektoren \vec{L} werden in Abb. Q2 in einem Schrägbild und in Abb. Q3 in der L_x - L_z -Ebene dargestellt. Für die anderen Multipletts verwende ich Abbildungen in der L_x - L_z -Ebene.

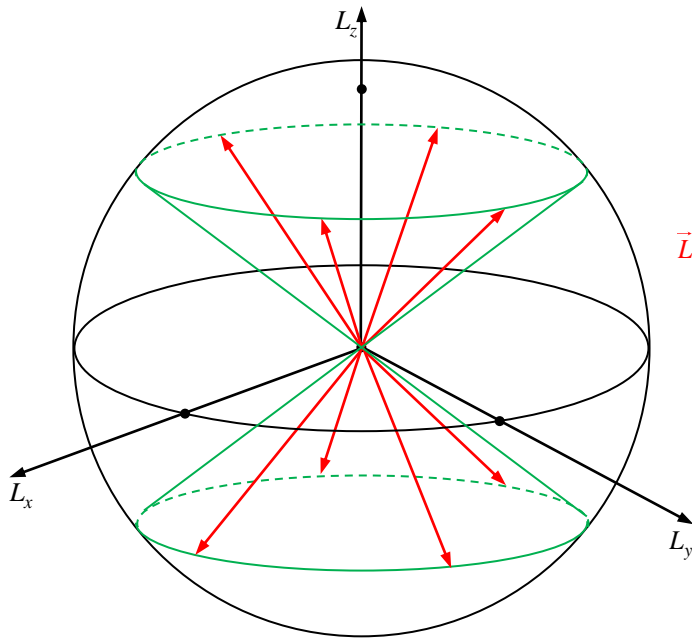


Abb. Q2 Darstellung der Richtungsquantelung des Drehimpulses für $l = \frac{1}{2}$ als Schrägbild

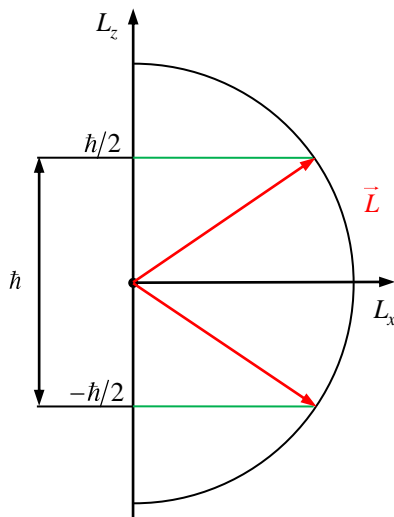


Abb. Q3 Darstellung der Richtungsquantelung des Drehimpulses für $l = \frac{1}{2}$ in der L_x - L_z -Ebene

Triplet: Es gelten $l = 1$ und deshalb $r = \hbar \cdot \sqrt{1 \cdot (1+1)} = \sqrt{2} \cdot \hbar$ sowie $L_z = \{\hbar, 0, -\hbar\}$.

Abb. Q4 veranschaulicht diesen Sachverhalt.

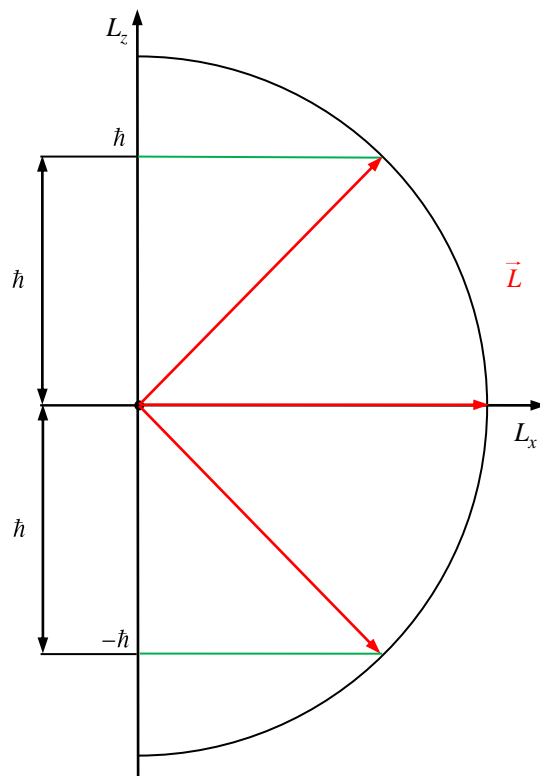


Abb. Q4 Darstellung der Richtungsquantelung des Drehimpulses für $l = 1$ in der L_x - L_z -Ebene

Quadruplett: Es gelten $l = \frac{3}{2}$ und deshalb $r = \hbar \cdot \sqrt{\frac{3}{2} \cdot \left(\frac{3}{2} + 1\right)} = \frac{\sqrt{15}}{2} \cdot \hbar$ sowie $L_z = \left\{ \frac{3}{2} \cdot \hbar, \frac{1}{2} \cdot \hbar, -\frac{1}{2} \cdot \hbar, -\frac{3}{2} \cdot \hbar \right\}$.

Abb. Q5 veranschaulicht diesen Sachverhalt.

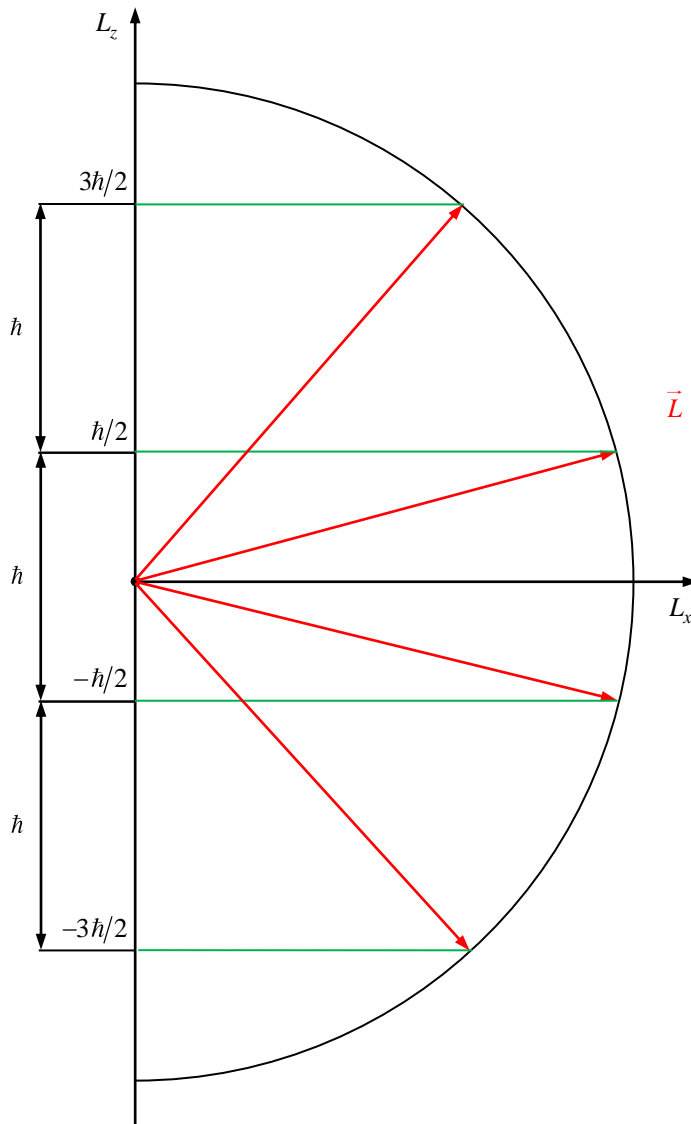


Abb. Q5 Darstellung der Richtungsquantelung des Drehimpulses für $l = \frac{3}{2}$ in der L_x - L_z -Ebene

Fazit:

Werden die Drehimpulsvektoren \vec{L} für einen festen Wert der Quantenzahl l in ein kartesisches L_x - L_y - L_z -Koordinatensystem eingezeichnet, dann liegen diese Vektoren auf geraden Kegelmänteln. Die Kegel haben ihre Spitze jeweils im Ursprung und ihre Achse verläuft längs der z -Achse. Außerdem liegen alle Kegel innerhalb einer Kugel mit Radius $r = \hbar \cdot \sqrt{l \cdot (l + 1)}$.

Matrixdarstellung der Operatoren L_z und \vec{L}^2

Wir verwenden (Q11) und (Q26), d. h. $L_z |lm\rangle = \hbar \cdot m \cdot |lm\rangle$ und $\vec{L}^2 |lm\rangle = \hbar^2 \cdot l \cdot (l+1) \cdot |lm\rangle$, um die Matrixdarstellung der Operatoren L_z und \vec{L}^2 zu bestimmen:

$$\langle l', m' | L_z | l, m \rangle = \langle l', m' | (L_z | l, m \rangle) = \hbar \cdot m \cdot \langle l', m' | l, m \rangle, \quad (\text{Q29})$$

$$\langle l', m' | \vec{L}^2 | l, m \rangle = \langle l', m' | (\vec{L}^2 | lm \rangle) = \hbar^2 \cdot l \cdot (l+1) \cdot \langle l', m' | l, m \rangle. \quad (\text{Q30})$$

Der in (Q29) und (Q30) vorkommende Term $\langle l', m' | l, m \rangle$ wird mit den in (6.95) und (6.188) angegebenen Definitionen ausgewertet, d. h. mit $|a\rangle \otimes |b\rangle =: |ab\rangle = |a, b\rangle$ und $(A \otimes B)^\dagger = A^\dagger \otimes B^\dagger$:

- $|l, m\rangle = |l\rangle \otimes |m\rangle$,
- $(|l'\rangle \otimes |m'\rangle)^\dagger = |l'\rangle^\dagger \otimes |m'\rangle^\dagger = \langle l' | \otimes \langle m' | = \langle l', m' |$,
- $\langle l', m' | l, m \rangle = \langle l', m' | \bullet | l, m \rangle = (\langle l' | \otimes \langle m' |) \bullet (|l\rangle \otimes |m\rangle) = \langle l' | \bullet |l\rangle \otimes \langle m' | \bullet |m\rangle = \langle l' | l \rangle \cdot \langle m' | m \rangle$,
 $\langle l', m' | l, m \rangle = \delta_{ll'} \cdot \delta_{mm'}.$ (Q31)

Bei der Herleitung von (Q31) wurde die „gemischte“ Multiplikation so ausgeführt wie in Beispiel 4.7 des Abschn. 4.3.6 und es wurde beachtet, dass die Zustände $|l\rangle$ und $|m\rangle$ orthonormiert sind. Mit (Q31) gehen (Q29) und (Q30) über in

$$\langle l', m' | L_z | l, m \rangle = \hbar \cdot m \cdot \delta_{ll'} \cdot \delta_{mm'}, \quad (\text{Q32})$$

$$\langle l', m' | \vec{L}^2 | l, m \rangle = \hbar^2 \cdot l \cdot (l+1) \cdot \delta_{ll'} \cdot \delta_{mm'}. \quad (\text{Q33})$$

Es ist ersichtlich, dass es sich um Diagonalmatrizen handelt. In Kap. 4 dieses Bonusmaterials werden u. a. beide Beziehungen für den Spin eines Elektrons ausgewertet.

Bemerkung

In Anhang 4 dieses Bonusmaterials wird nachgewiesen, dass die Wirkung der Leiteroperatoren folgendermaßen dargestellt werden kann

$$L_\pm |l, m\rangle = \hbar \cdot \sqrt{l \cdot (l+1) - m \cdot (m \pm 1)} \cdot |l, m \pm 1\rangle = \hbar \cdot \sqrt{(l \mp m) \cdot (l \pm m + 1)} \cdot |l, m \pm 1\rangle. \quad (\text{Q34})$$

Aus (Q34) ergibt sich, dass L_+ ausschließlich für $m = m_{\max} = l$ die Bedingung $L_+ |l, m_{\max}\rangle = L_+ |l, l\rangle = 0$ erfüllt, s. (Q16). Analog gilt ausschließlich für $m = m_{\min} = -l$ die Beziehung (Q17), d. h. $L_- |l, m_{\min}\rangle = L_- |l, -l\rangle = 0$.

Beispiel 2

Ermitteln Sie für einen allgemeinen Drehimpuls mit $l = l' = 3/2$ die Matrixdarstellung von L_x .

Lösung:

Die Matricelemente ergeben sich aus (6.203), d. h. mittels $A_{ij} = \langle \varphi_i | \hat{A} | \varphi_j \rangle$. Damit die Position der Matricelemente festgelegt wird, verwenden wir für die Zustände $\langle l', m' |$ bzw. $|l, m\rangle$ die Tupel

$$\left(\left\langle \frac{3}{2}, \frac{3}{2} \right|, \left\langle \frac{3}{2}, \frac{1}{2} \right|, \left\langle \frac{3}{2}, -\frac{1}{2} \right|, \left\langle \frac{3}{2}, -\frac{3}{2} \right| \right) \text{ bzw. } \left(\left| \frac{3}{2}, \frac{3}{2} \right\rangle, \left| \frac{3}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle, \left| \frac{3}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle, \left| \frac{3}{2}, -\frac{3}{2} \right\rangle \right).$$

L_x ergibt sich aus (Q12), d. h. $L_{\pm} = L_x \pm i \cdot L_y$:

$$L_x = \frac{1}{2} \cdot (L_+ + L_-) .$$

Die Matrixdarstellung erhalten wir mit (Q34):

$$L_x |l, m\rangle = \frac{1}{2} \cdot \left(\hbar \cdot \sqrt{l \cdot (l+1) - m \cdot (m+1)} \cdot |l, m+1\rangle + \hbar \cdot \sqrt{l \cdot (l+1) - m \cdot (m-1)} \cdot |l, m-1\rangle \right) ,$$

$$\langle l', m' | L_x | l, m \rangle = \frac{1}{2} \cdot \left(\hbar \cdot \sqrt{l \cdot (l+1) - m \cdot (m+1)} \cdot \langle l', m' | l, m+1 \rangle + \hbar \cdot \sqrt{l \cdot (l+1) - m \cdot (m-1)} \cdot \langle l', m' | l, m-1 \rangle \right) ,$$

$$\langle l', m' | L_x | l, m \rangle = \frac{\hbar}{2} \cdot \left(\sqrt{l \cdot (l+1) - m \cdot (m+1)} \cdot \delta_{l', l} \cdot \delta_{m', m+1} + \sqrt{l \cdot (l+1) - m \cdot (m-1)} \cdot \delta_{l', l} \cdot \delta_{m', m-1} \right) .$$

Mit $l' = l = \frac{3}{2}$ ergibt sich speziell:

$$\left\langle \frac{3}{2}, m' \left| L_x \right| \frac{3}{2}, m \right\rangle = \frac{\hbar}{2} \cdot \left(\sqrt{\frac{3}{2} \cdot \left(\frac{3}{2} + 1 \right) - m \cdot (m+1)} \cdot \delta_{m', m+1} + \sqrt{\frac{3}{2} \cdot \left(\frac{3}{2} + 1 \right) - m \cdot (m-1)} \cdot \delta_{m', m-1} \right) ,$$

$$\left\langle \frac{3}{2}, m' \left| L_x \right| \frac{3}{2}, m \right\rangle = \frac{\hbar}{2} \cdot \left(\sqrt{\frac{15}{4} - m \cdot (m+1)} \cdot \delta_{m', m+1} + \sqrt{\frac{15}{4} - m \cdot (m-1)} \cdot \delta_{m', m-1} \right) ;$$

$$L_{x,11} = \left\langle \frac{3}{2}, \frac{3}{2} \left| L_x \right| \frac{3}{2}, \frac{3}{2} \right\rangle = \frac{\hbar}{2} \cdot \left(\sqrt{\frac{15}{4} - \frac{3}{2} \cdot \frac{5}{2}} \cdot \delta_{\frac{3}{2}, \frac{5}{2}} + \sqrt{\frac{15}{4} - \frac{3}{2} \cdot \frac{1}{2}} \cdot \delta_{\frac{3}{2}, \frac{1}{2}} \right) = 0 ,$$

$$L_{x,12} = \left\langle \frac{3}{2}, \frac{3}{2} \left| L_x \right| \frac{3}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle = \frac{\hbar}{2} \cdot \left(\sqrt{\frac{15}{4} - \frac{1}{2} \cdot \frac{3}{2}} \cdot \delta_{\frac{3}{2}, \frac{3}{2}} + \sqrt{\frac{15}{4} - \frac{1}{2} \cdot \left(-\frac{1}{2} \right)} \cdot \delta_{\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}} \right) = \frac{\sqrt{3}}{2} \cdot \hbar ,$$

$$L_{x,13} = \left\langle \frac{3}{2}, \frac{3}{2} \left| L_x \right| \frac{3}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle = 0 , \text{ da } \delta_{\frac{3}{2}, \frac{1}{2}} = \delta_{\frac{3}{2}, -\frac{3}{2}} = 0 ,$$

$$L_{x,14} = \left\langle \frac{3}{2}, \frac{3}{2} \left| L_x \right| \frac{3}{2}, -\frac{3}{2} \right\rangle = 0 , \text{ da } \delta_{\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}} = \delta_{\frac{3}{2}, -\frac{5}{2}} = 0 ,$$

$$L_{x,21} = \left\langle \frac{3}{2}, \frac{1}{2} \left| L_x \right| \frac{3}{2}, \frac{3}{2} \right\rangle = \frac{\hbar}{2} \cdot \left(\sqrt{\frac{15}{4} - \frac{3}{2} \cdot \frac{5}{2}} \cdot \delta_{\frac{1}{2}, \frac{5}{2}} + \sqrt{\frac{15}{4} - \frac{3}{2} \cdot \frac{1}{2}} \cdot \delta_{\frac{1}{2}, \frac{1}{2}} \right) = \frac{\sqrt{3}}{2} \cdot \hbar ,$$

$$L_{x,22} = \left\langle \frac{3}{2}, \frac{1}{2} \left| L_x \right| \frac{3}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle = 0 , \text{ da } \delta_{\frac{1}{2}, \frac{3}{2}} = \delta_{\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}} = 0 ,$$

$$L_{x,23} = \left\langle \frac{3}{2}, \frac{1}{2} \left| L_x \right| \frac{3}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle = \frac{\hbar}{2} \cdot \left(\sqrt{\frac{15}{4} - \left(-\frac{1}{2} \right) \cdot \frac{1}{2}} \cdot \delta_{\frac{1}{2}, \frac{1}{2}} + \sqrt{\frac{15}{4} - \left(-\frac{1}{2} \right) \cdot \left(-\frac{3}{2} \right)} \cdot \delta_{\frac{1}{2}, -\frac{3}{2}} \right) = \hbar ,$$

$$\widehat{L_{x,24}} = \left\langle \frac{3}{2}, \frac{1}{2} \left| L_x \right| \frac{3}{2}, -\frac{3}{2} \right\rangle = 0 , \text{ da } \delta_{\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}} = \delta_{\frac{1}{2}, -\frac{5}{2}} = 0 \text{ usw.}$$

Ergebnis: $L_x = \hbar \cdot \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{3}/2 & 0 & 0 \\ \sqrt{3}/2 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & \sqrt{3}/2 \\ 0 & 0 & \sqrt{3}/2 & 0 \end{pmatrix} .$

4 Spin

4.1 Einführung des Spins

Um das experimentelle Ergebnis des Stern-Gerlach-Versuchs in der Modellierung berücksichtigen zu können, wurde zunächst angenommen, dass gebundene Elektronen neben dem durch den Bahndrehimpuls bedingten magnetischen Dipolmoment $\vec{\mu}_\ell$ ein weiteres magnetisches Dipolmoment $\vec{\mu}_s$ besitzen, das durch eine als **Spin** bezeichnete Rotation dieser geladenen Teilchen bedingt ist. Erst später wurde nachgewiesen, dass sich mit dieser Vorstellung die Größe des beobachteten Effekts nicht erklären lässt und dass neben dem Elektron auch andere Elementarteilchen einen Spin besitzen.

Deshalb gilt der **Spin als intrinsische Eigenschaft** von Elementarteilchen, die klassisch nicht verstanden werden kann. Von der ursprünglichen Interpretation blieb nur der Begriff Spin übrig.

Um das gesamte magnetische Dipolmoment eines Elektrons erfassen zu können, wird (Q7) erweitert zu

$$\vec{\mu} = \vec{\mu}_\ell + \vec{\mu}_s = -\frac{e}{2 \cdot m} \cdot (\vec{L} + g \cdot \vec{S}) = -\frac{\mu_B}{\hbar} \cdot (\vec{L} + g \cdot \vec{S}). \quad (\text{Q35})$$

\vec{S} wird **Spin-Operator** genannt, der Faktor g wird nach Alfred Landé (1888-1976) als Landé-Faktor bezeichnet. Der für Elektronen im Rahmen der Quantenelektrodynamik berechnete Wert $g_{\text{theor}} = 2,002\,319\,304\,363\,22(46)$ wird experimentell durch $g_{\text{exp}} = 2,002\,319\,304\,362\,56(35)$ hervorragend bestätigt.¹

Die **Modellierung des Spins** erfolgt in Analogie zum Bahndrehimpuls. Dabei wird der Bahndrehimpuls-Operator \vec{L} durch den Spin-Operator \vec{S} sowie die Bahndrehimpulsquantenzahl l durch die Spinquantenzahl s (kurz Spin s) ersetzt. Außerdem wird in Analogie zu (Q8), (Q9), (Q26), (Q24), (Q11), (Q25), (Q12), (Q32), (Q33), (Q76) und (Q34) die Gültigkeit folgender Beziehungen gefordert:

$$[S_i, S_j] = i \cdot \hbar \cdot \varepsilon_{ijk} \cdot S_k, \quad (\text{Q36})$$

$$[S_i, \vec{S}^2] = 0, \quad (\text{Q37})$$

$$\vec{S}^2 |s, m_s\rangle = \hbar^2 \cdot s \cdot (s+1) \cdot |s, m_s\rangle, \quad (\text{Q38})$$

$$s = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2, \frac{5}{2}, 3, \dots, \quad (\text{Q39})$$

$$S_z |s, m_s\rangle = \hbar \cdot m_s \cdot |s, m_s\rangle, \quad (\text{Q40})$$

$$-s \leq m_s \leq s \text{ d. h. } m_s = -s, -s+1, \dots, s-1, s, \quad (\text{Q41})$$

$$S_\pm = S_x \pm i \cdot S_y, \quad (\text{Q42})$$

$$\langle s', m'_s | S_z |s, m_s\rangle = \hbar \cdot m_s \cdot \delta_{ss'} \cdot \delta_{m_s m'_s}, \quad (\text{Q43})$$

$$\langle s', m'_s | \vec{S}^2 |s, m_s\rangle = \hbar^2 \cdot s \cdot (s+1) \cdot \delta_{ss'} \cdot \delta_{m_s m'_s}, \quad (\text{Q44})$$

$$[S_\pm, S_z] = \mp \hbar \cdot S_\pm \text{ bzw. } S_\pm S_z - S_z S_\pm = \mp \hbar \cdot S_\pm, \quad (\text{Q45})$$

$$S_\pm |s, m_s\rangle = \hbar \cdot \sqrt{s \cdot (s+1) - m_s \cdot (m_s \pm 1)} \cdot |s, m_s \pm 1\rangle = \hbar \cdot \sqrt{(s \mp m_s) \cdot (s \pm m_s + 1)} \cdot |s, m_s \pm 1\rangle. \quad (\text{Q46})$$

Die Gültigkeit von (Q39) ergibt sich daraus, dass für den Spin nicht die Symmetrieforderung bezüglich der Rotation um $2 \cdot \pi$ erhoben wird wie beim Bahndrehimpuls, die dort zu den angegebenen Einschränkungen führte.

¹ Quelle: <https://de.wikipedia.org/wiki/Landé-Faktor>. Zugriffen: 11.05.2023.

Da sich die Elemente im $(2 \cdot s + 1)$ -dimensionalen Hilbertraum des Spins bei einer Drehung um $2 \cdot \pi$ anders transformieren als die Elemente im „ursprünglichen“ Hilbertraum (in dem z. B. die Bahnbewegung des Teilchens beschrieben wird), ist eine begriffliche Differenzierung sinnvoll:

Die Elemente des „ursprünglichen“ Hilbertraums werden als Vektoren bezeichnet, die Elemente des Hilbertraums des Spins als **Spinoren**, der Hilbertraum des Spins heißt auch **Spinorraum**. In der hier betrachteten nichtrelativistischen Quantenmechanik besitzen die Spinoren zwei Komponenten, die Dirac-Spinoren der relativistischen Dirac-Theorie besitzen vier Komponenten (je zwei für Teilchen und Antiteilchen).

Merkregel:

Ein Vektor geht bei einer Drehung um $2 \cdot \pi$ in sich selbst über, ein Spinor in sein Entgegengesetztes.

4.2 Spin des Elektrons

Um die beim Stern-Gerlach-Versuch beobachtete Aufspaltung des Strahls der Silberatome in zwei unterschiedliche Teilstrahlen erklären zu können, muss angenommen werden, dass Elektronen zwei unterschiedliche Zustände bezüglich des magnetischen Dipolmoments einnehmen können. Deshalb müssen die Spinoren \vec{S} der Elektronen ein Duplett bilden, d. h., es muss $s = \frac{1}{2}$ gelten, damit S_z bzw. m_s jeweils zwei

unterschiedliche Werte besitzen: $S_z = \pm \frac{\hbar}{2}$ bzw. $m_s = \pm \frac{1}{2}$.

Fazit: Elektronen sind Fermionen, da sie den Spin $\frac{1}{2}$ besitzen.

Da alle Elektronen den gleichen Spin besitzen, kann der Spinor als $|s, m_s\rangle = \left| \frac{1}{2}, m_s \right\rangle$ geschrieben werden. Die beiden möglichen Spinzustände des Elektrons werden folgendermaßen gekennzeichnet:

$$\left| \frac{1}{2}, +\frac{1}{2} \right\rangle = |\uparrow\rangle = |+\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \dots \text{Spin up,} \quad (\text{Q47})$$

$$\left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle = |\downarrow\rangle = |-\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad \dots \text{Spin down,} \quad (\text{Q48})$$

$$|\pm\rangle \quad \dots \text{beliebiger Spinzustand.} \quad (\text{Q49})$$

Bei den folgenden Berechnungen verwenden wir die aus (Q47) und (Q48) folgenden Beziehungen

$$\langle \pm | \pm \rangle = 1 \text{ und } \langle \pm | \mp \rangle = 0. \quad (\text{Q50})$$

Wir ermitteln die **Matrixdarstellungen** für die Operatoren S_z , \vec{S}^2 , S_+ , S_- , S_x , S_y und \vec{S} .

Damit die Position der Matrixelemente festgelegt wird, verwenden wir für die Zustände $\langle s', m'_s |$ bzw. $|s, m_s\rangle$ die Tupel $\left(\left\langle \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right|, \left\langle \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right| \right)$ bzw. $\left(\left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle, \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \right)$. Außerdem berücksichtigen wir, dass $s = s' = 1/2$ gilt.

Matrixdarstellung für S_z

Aus (Q43), d. h. $\langle s', m'_s | S_z | s, m_s \rangle = \hbar \cdot m_s \cdot \delta_{ss'} \cdot \delta_{m_s m'_s}$, erhalten wir:

$$\langle s', m'_s | S_z | s, m_s \rangle = \hbar \cdot m_s \cdot \delta_{ss'} \cdot \delta_{m_s m'_s} \quad |s = s' = 1/2,$$

$$\left\langle \frac{1}{2}, m'_s \right| S_z \left| \frac{1}{2}, m_s \right\rangle = \hbar \cdot m_s \cdot \delta_{m_s m'_s}.$$

Damit ergibt sich z. B. die Komponente $S_{z,11}$:

$$S_{z,11} = \left\langle \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \left| S_z \right| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle = \frac{\hbar}{2} \cdot \delta_{\frac{1}{2}\frac{1}{2}} = \frac{\hbar}{2}.$$

Lösungsweg für die Komponente $S_{z,11}$ mit (Q50):

$$S_{z,11} = \left\langle \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \left| S_z \right| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle = \left\langle \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \left| \left(S_z \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \right) \right\rangle = \hbar \cdot \frac{1}{2} \cdot \left\langle \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle = \frac{\hbar}{2} \cdot \langle + | + \rangle = \frac{\hbar}{2}.$$

Die anderen Komponenten werden mittels (Q50) bestimmt:

$$S_{z,12} = \left\langle \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \left| S_z \right| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle = \hbar \cdot \left(-\frac{1}{2} \right) \cdot \langle + | - \rangle = 0,$$

$$S_{z,21} = \left\langle \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \left| S_z \right| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle = \hbar \cdot \frac{1}{2} \cdot \langle - | + \rangle = 0,$$

$$S_{z,22} = \left\langle \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \left| S_z \right| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle = \hbar \cdot \left(-\frac{1}{2} \right) \cdot \langle - | - \rangle = -\frac{\hbar}{2}.$$

$$\textbf{Ergebnis: } S_z = \begin{pmatrix} \hbar/2 & 0 \\ 0 & -\hbar/2 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \cdot \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} =: \frac{\hbar}{2} \cdot \sigma_3. \quad (\text{Q51})$$

Matrixdarstellung für \vec{S}^2

Aus (Q44), d. h. $\langle s', m'_s | \vec{S}^2 | s, m_s \rangle = \hbar^2 \cdot s \cdot (s+1) \cdot \delta_{ss'} \cdot \delta_{m_s m'_s}$, erhalten wir:

$$\langle s', m'_s | \vec{S}^2 | s, m_s \rangle = \hbar^2 \cdot s \cdot (s+1) \cdot \delta_{ss'} \cdot \delta_{m_s m'_s} \quad |s = s' = 1/2,$$

$$\left\langle \frac{1}{2}, m'_s \left| \vec{S}^2 \right| \frac{1}{2}, m_s \right\rangle = \frac{3}{4} \cdot \hbar^2 \cdot \delta_{m_s m'_s}.$$

Damit erhalten wir die Matrixdarstellung:

$$\vec{S}_{11}^2 = \left\langle \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \left| \vec{S}^2 \right| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle = \frac{3}{4} \cdot \hbar^2 \cdot \delta_{\frac{1}{2}\frac{1}{2}} = \frac{3}{4} \cdot \hbar^2,$$

$$\vec{S}_{12}^2 = \left\langle \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \left| \vec{S}^2 \right| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle = 0, \quad \vec{S}_{21}^2 = \left\langle \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \left| \vec{S}^2 \right| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle = 0,$$

$$\vec{S}_{22}^2 = \left\langle \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \left| \vec{S}^2 \right| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle = \frac{3}{4} \cdot \hbar^2 \cdot \delta_{-\frac{1}{2}-\frac{1}{2}} = \frac{3}{4} \cdot \hbar^2.$$

$$\textbf{Ergebnis: } \vec{S}^2 = \begin{pmatrix} 3 \cdot \hbar^2/4 & 0 \\ 0 & 3 \cdot \hbar^2/4 \end{pmatrix} = \frac{3}{4} \cdot \hbar^2 \cdot \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \frac{3}{4} \cdot \hbar^2 \cdot \hat{1}_{2 \times 2}. \quad (\text{Q52})$$

Matrixdarstellung für S_+

Mit (Q46), d. h. $S_{\pm} |s, m_s\rangle = \hbar \cdot \sqrt{s \cdot (s+1) - m_s \cdot (m_s \pm 1)} \cdot |s, m_s \pm 1\rangle$, erhalten wir:

$$\langle s', m'_s | S_+ |s, m_s\rangle = \hbar \cdot \sqrt{s \cdot (s+1) - m_s \cdot (m_s + 1)} \cdot \langle s', m'_s |s, m_s + 1\rangle,$$

$$\langle s', m'_s | S_+ |s, m_s\rangle = \hbar \cdot \sqrt{s \cdot (s+1) - m_s \cdot (m_s + 1)} \cdot \delta_{s',s} \cdot \delta_{m'_s, m_s+1} \quad |s = s' = 1/2,$$

$$\left\langle \frac{1}{2}, m'_s \left| S_+ \right| \frac{1}{2}, m_s \right\rangle = \hbar \cdot \sqrt{\frac{3}{4} - m_s \cdot (m_s + 1)} \cdot \delta_{m'_s, m_s+1};$$

$$S_{+,11} = \left\langle \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \left| S_+ \right| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle = \hbar \cdot \sqrt{\frac{3}{4} - \frac{1}{2} \cdot \frac{3}{2}} \cdot \delta_{\frac{1}{2}, \frac{3}{2}} = 0,$$

$$S_{+,12} = \left\langle \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \left| S_+ \right| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle = \hbar \cdot \sqrt{\frac{3}{4} - \left(-\frac{1}{2}\right) \cdot \left(-\frac{1}{2} + 1\right)} \cdot \delta_{\frac{1}{2}, \frac{1}{2}} = \hbar,$$

$$S_{+,21} = \left\langle \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \left| S_+ \right| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle = \hbar \cdot \sqrt{\frac{3}{4} - \frac{1}{2} \cdot \frac{3}{2}} \cdot \delta_{-\frac{1}{2}, \frac{3}{2}} = 0,$$

$$S_{+,22} = \left\langle \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \left| S_+ \right| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle = \hbar \cdot \sqrt{\frac{3}{4} - \left(-\frac{1}{2}\right) \cdot \frac{1}{2}} \cdot \delta_{-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}} = 0.$$

$$\text{Ergebnis: } S_+ = \begin{pmatrix} 0 & \hbar \\ 0 & 0 \end{pmatrix} = \hbar \cdot \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (\text{Q53})$$

Matrixdarstellung für S_-

S_- wird analog bestimmt wie S_+ .

Mit (Q46), d. h. $S_{\pm} |s, m_s\rangle = \hbar \cdot \sqrt{s \cdot (s+1) - m_s \cdot (m_s \pm 1)} \cdot |s, m_s \pm 1\rangle$, erhalten wir:

$$\langle s', m'_s | S_- |s, m_s\rangle = \hbar \cdot \sqrt{s \cdot (s+1) - m_s \cdot (m_s - 1)} \cdot \langle s', m'_s |s, m_s - 1\rangle,$$

$$\langle s', m'_s | S_- |s, m_s\rangle = \hbar \cdot \sqrt{s \cdot (s+1) - m_s \cdot (m_s - 1)} \cdot \delta_{s',s} \cdot \delta_{m'_s, m_s-1} \quad |s = s' = 1/2,$$

$$\left\langle \frac{1}{2}, m'_s \left| S_- \right| \frac{1}{2}, m_s \right\rangle = \hbar \cdot \sqrt{\frac{3}{4} - m_s \cdot (m_s - 1)} \cdot \delta_{m'_s, m_s-1};$$

$$S_{-,11} = \left\langle \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \left| S_- \right| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle = \hbar \cdot \sqrt{\frac{3}{4} - \frac{1}{2} \cdot \left(-\frac{1}{2}\right)} \cdot \delta_{\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}} = 0,$$

$$S_{-,12} = \left\langle \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \left| S_- \right| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle = \hbar \cdot \sqrt{\frac{3}{4} - \left(-\frac{1}{2}\right) \cdot \left(-\frac{1}{2} - 1\right)} \cdot \delta_{\frac{1}{2}, -\frac{3}{2}} = 0,$$

$$S_{-,21} = \left\langle \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \left| S_- \right| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle = \hbar \cdot \sqrt{\frac{3}{4} - \frac{1}{2} \cdot \left(-\frac{1}{2}\right)} \cdot \delta_{-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}} = \hbar,$$

$$S_{-,22} = \left\langle \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \left| S_- \right| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle = \hbar \cdot \sqrt{\frac{3}{4} - \left(-\frac{1}{2}\right) \cdot \left(-\frac{3}{2}\right)} \cdot \delta_{-\frac{1}{2}, -\frac{3}{2}} = 0.$$

$$\text{Ergebnis: } S_- = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ \hbar & 0 \end{pmatrix} = \hbar \cdot \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (\text{Q54})$$

Matrixdarstellung für S_x

Wir verwenden (Q42), d. h. $S_{\pm} = S_x \pm i \cdot S_y$ in den Darstellungen $S_+ = S_x + i \cdot S_y$ und $S_- = S_x - i \cdot S_y$, um S_x zu bestimmen:

$$S_x = \frac{1}{2} \cdot (S_+ + S_-) \quad \left| \begin{array}{l} S_+ = \begin{pmatrix} 0 & \hbar \\ 0 & 0 \end{pmatrix}; S_- = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ \hbar & 0 \end{pmatrix}, \end{array} \right.$$

$$\text{Ergebnis: } S_x = \frac{1}{2} \cdot \begin{pmatrix} 0 & \hbar \\ \hbar & 0 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \cdot \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} =: \frac{\hbar}{2} \cdot \sigma_1. \quad (\text{Q55})$$

Matrixdarstellung für S_y

S_y wird analog aus $S_+ = S_x + i \cdot S_y$ und $S_- = S_x - i \cdot S_y$ bestimmt wie S_x :

$$S_y = \frac{1}{2 \cdot i} \cdot (S_+ - S_-) \quad \left| \begin{array}{l} S_+ = \begin{pmatrix} 0 & \hbar \\ 0 & 0 \end{pmatrix}; S_- = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ \hbar & 0 \end{pmatrix}, \end{array} \right.$$

$$\text{Ergebnis: } S_y = \frac{1}{2 \cdot i} \cdot \begin{pmatrix} 0 & \hbar \\ -\hbar & 0 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2 \cdot i} \cdot \frac{-i}{-i} \cdot \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \cdot \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} =: \frac{\hbar}{2} \cdot \sigma_2. \quad (\text{Q56})$$

Matrixdarstellung für \vec{S}

Mit (Q55), (Q56) und (Q51) erhalten wir eine Darstellung von \vec{S} :

$$\vec{S} = \begin{pmatrix} S_x \\ S_y \\ S_z \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \cdot \begin{pmatrix} \sigma_1 \\ \sigma_2 \\ \sigma_3 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \cdot \vec{\sigma}. \quad (\text{Q57})$$

(Q57) enthält die drei **Pauli-Matrizen** $\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$, $\sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$ und $\sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$. Diese sind spurfrei und

wegen $\sigma_i^\dagger = \sigma_i$ auch hermitesch. Die **Vertauschungsrelation** der Pauli-Matrizen ergibt sich aus (Q36):

$$\begin{aligned} [S_i, S_j] &= i \cdot \hbar \cdot \varepsilon_{ijk} \cdot S_k \quad \left| \begin{array}{l} S_i = \frac{\hbar}{2} \cdot \sigma_i, \end{array} \right. \\ \left[\frac{\hbar}{2} \cdot \sigma_i, \frac{\hbar}{2} \cdot \sigma_j \right] &= \frac{\hbar^2}{4} \cdot \sigma_i \cdot \sigma_j - \frac{\hbar^2}{4} \cdot \sigma_j \cdot \sigma_i = \frac{\hbar^2}{4} \cdot [\sigma_i, \sigma_j] \stackrel{!}{=} i \cdot \hbar \cdot \varepsilon_{ijk} \cdot \frac{\hbar}{2} \cdot \sigma_k, \\ [\sigma_i, \sigma_j] &= 2 \cdot i \cdot \varepsilon_{ijk} \cdot \sigma_k. \end{aligned} \quad (\text{Q58})$$

Für den Antikommutator der Pauli-Matrizen gilt

$$\{\sigma_i, \sigma_j\} = \sigma_i \cdot \sigma_j + \sigma_j \cdot \sigma_i = 2 \cdot \delta_{ij} \cdot \hat{1}_{2 \times 2}. \quad (\text{Q59})$$

Die Begründung von (Q59) erfolgt durch Nachrechnen, z. B.

$$\begin{aligned} \{\sigma_1, \sigma_2\} &= \sigma_1 \cdot \sigma_2 + \sigma_2 \cdot \sigma_1, \\ \{\sigma_1, \sigma_2\} &= \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} i & 0 \\ 0 & -i \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} -i & 0 \\ 0 & i \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}; \\ \{\sigma_2, \sigma_2\} &= \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = 2 \cdot \hat{1}_{2 \times 2}. \end{aligned}$$

Mit (Q57), d. h. $\vec{S} = \begin{pmatrix} S_x \\ S_y \\ S_z \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \cdot \begin{pmatrix} \sigma_1 \\ \sigma_2 \\ \sigma_3 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \cdot \vec{\sigma}$, kann (Q52), d. h. $\vec{S}^2 = \frac{3}{4} \cdot \hbar^2 \cdot \hat{1}_{2 \times 2}$, überprüft werden:

$$\begin{aligned} \vec{S}^2 &= \frac{\hbar^2}{4} \cdot \sum_{i=1}^3 \sigma_i^\dagger \cdot \sigma_i, \\ &= \frac{\hbar^2}{4} \cdot \left(\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \right), \\ &= \frac{\hbar^2}{4} \cdot \left(\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \right), \\ \vec{S}^2 &= \frac{3 \cdot \hbar^2}{4} \cdot \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \frac{3 \cdot \hbar^2}{4} \cdot \hat{1}_{2 \times 2}. \end{aligned}$$

Die Probe geht auf.

In Tab. 2 fassen wir die Matrixdarstellungen für die Spin-Operatoren des Elektrons zusammen.

Tab. 2 Matrixdarstellungen für die Spin-Operatoren des Elektrons

Gleichungen	Matrixdarstellungen
$\vec{S}^2 s, m_s\rangle = \hbar^2 \cdot s \cdot (s+1) \cdot s, m_s\rangle$ $S_z s, m_s\rangle = \hbar \cdot m_s \cdot s, m_s\rangle$	$\vec{S}^2 = \frac{3}{4} \cdot \hbar^2 \cdot \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \frac{3}{4} \cdot \hbar^2 \cdot \hat{1}_{2 \times 2}$ $\vec{S} = \begin{pmatrix} S_x \\ S_y \\ S_z \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \cdot \begin{pmatrix} \sigma_1 \\ \sigma_2 \\ \sigma_3 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \cdot \vec{\sigma}$ $\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$
$S_{\pm} = S_x \pm i \cdot S_y$	$S_+ = \hbar \cdot \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$ $S_- = \hbar \cdot \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$

Erklärung des Stern-Gerlach-Versuchs

Unter Berücksichtigung der in Abschn. 4.3.5 meines hier betrachteten Buchs angegebenen Beziehung $A|\psi\rangle = \langle A \rangle \cdot |\psi\rangle$ (Erwartungswert = Eigenwert = messbare Größe) ergibt sich aus (Q35), d. h.

$\vec{\mu} = \vec{\mu}_\ell + \vec{\mu}_s = -\frac{e}{2 \cdot m} \cdot \left(\vec{L} + g \cdot \vec{S} \right) = -\frac{\mu_B}{\hbar} \cdot \left(\vec{L} + g \cdot \vec{S} \right)$, dass ein in z-Richtung abgelenktes 5s-Elektron, das kein magnetisches Dipolmoment $\vec{\mu}_\ell$ besitzt, dennoch ein magnetisches Dipolmoment hat:

$$\vec{\mu} = \vec{\mu}_s = -\frac{\mu_B}{\hbar} \cdot g \cdot \langle S_z \rangle \cdot \vec{e}_z = \frac{\mu_B}{\hbar} \cdot g \cdot \left(\pm \frac{\hbar}{2} \right) \cdot \vec{e}_z \approx \pm \mu_B \cdot \vec{e}_z.$$

Fazit: Der Spin des Elektrons führt zur beobachteten Aufspaltung des Strahls der Silberatome.

5 Bemerkungen zur Erweiterung des Hilbertraums

Um den Spin in die Quantenmechanik mit einzubeziehen, muss der ursprüngliche Hilbertraum, der z. B. durch die Eigenzustände $|\vec{r}\rangle$ des Ortsoperators oder die Eigenzustände $|\vec{p}\rangle$ des Impulsoperators aufgespannt wird, um den $(2 \cdot S + 1)$ -dimensionalen Hilbertraum des Spins erweitert werden. Wenn der ursprüngliche Hilbertraum mit \mathcal{H}_B (der Index B weist darauf hin, dass in diesem Hilbertraum die Bahnbewegung des Teilchens beschrieben wird) und der Hilbertraum des Spins mit \mathcal{H}_S bezeichnet werden, dann ist der erweiterte Hilbertraum \mathcal{H} der **Produktraum** $\mathcal{H} = \mathcal{H}_B \otimes \mathcal{H}_S$.

Die Zustände des Produktraums sind **direkte Produkte** (dieser Begriff kennzeichnet den Umstand, dass die Faktoren aus unterschiedlichen Hilberträumen stammen) aus den Zuständen der Unterräume

$$|\psi; \varphi\rangle = |\psi\rangle_B |\varphi\rangle_S \quad \text{mit} \quad |\psi; \varphi\rangle \in \mathcal{H}, |\psi\rangle_B \in \mathcal{H}_B, |\varphi\rangle_S \in \mathcal{H}_S.$$

Das direkte Produkt ist

- kommutativ, d. h., es gilt $|\psi\rangle_B |\varphi\rangle_S = |\varphi\rangle_S |\psi\rangle_B$,
- distributiv, d. h., für $|\bar{\psi}\rangle_B = \alpha_1 |\psi_1\rangle_B + \alpha_2 |\psi_2\rangle_B$ und $|\bar{\varphi}\rangle_S = \beta_1 |\varphi_1\rangle_S + \beta_2 |\varphi_2\rangle_S$ gelten
 $|\bar{\psi}; \bar{\varphi}\rangle = \alpha_1 |\psi_1; \varphi\rangle + \alpha_2 |\psi_2; \varphi\rangle$ und $|\bar{\psi}; \bar{\varphi}\rangle = \beta_1 |\psi; \varphi_1\rangle + \beta_2 |\psi; \varphi_2\rangle$.

Definition des **Skalarprodukts** auf dem Produktraum \mathcal{H} :

$$\langle \psi'; \varphi' | \psi; \varphi \rangle = {}_B \langle \psi' | \psi \rangle_B \cdot {}_S \langle \varphi' | \varphi \rangle_S.$$

Definition einer **Basis** des Produktraums \mathcal{H} :

Wenn $\{|\alpha_i\rangle_B\}$ eine Orthonormalbasis (ONB) von \mathcal{H}_B und $\{|\beta_m\rangle_S\}$ eine ONB von \mathcal{H}_S sind, dann ist $\{|\alpha_i; \beta_m\rangle\}$ eine ONB von \mathcal{H} . Deshalb sind jeweils die Bedingungen der Orthonormalität und Vollständigkeit erfüllt (dabei kann der Hilbertraum \mathcal{H}_B uneigentliche Zustandsvektoren enthalten und deshalb unendlich-dimensional sein, während der Hilbertraum \mathcal{H}_S aus $(2 \cdot S + 1)$ eigentlichen Zuständen besteht):

- Aus ${}_B \langle \alpha_j | \alpha_i \rangle_B = \delta(i, j)$ und ${}_S \langle \beta_n | \beta_m \rangle_S = \delta_{mn}$ ergibt sich
 $\langle \alpha_j; \beta_n | \alpha_i; \beta_m \rangle = {}_B \langle \alpha_j | \alpha_i \rangle_B \cdot {}_S \langle \beta_n | \beta_m \rangle_S = \delta(i, j) \cdot \delta_{mn}.$
- Aus $\sum_i \int |\alpha_i\rangle_B {}_B \langle \alpha_i| = \hat{1}_B$ und $\sum_m |\beta_m\rangle_S {}_S \langle \beta_m| = \hat{1}_S$ ergibt sich
 $\sum_i \int \sum_m |\alpha_i; \beta_m\rangle_B {}_B \langle \alpha_i; \beta_m| = \sum_i \int |\alpha_i\rangle_B {}_B \langle \alpha_i| \otimes \sum_m |\beta_m\rangle_S {}_S \langle \beta_m| = \hat{1}_B \otimes \hat{1}_S = \hat{1}.$

Entwicklung eines Zustands $|\psi; \varphi\rangle$ des Produktraums nach Zuständen der ONB $\{|\alpha_i; \beta_m\rangle\}$:

Analog zu (6.200), d. h. $|\psi(t)\rangle = \sum_n c_n(t) \cdot |\varphi_n\rangle = \sum_n \langle \varphi_n | \psi(t) \rangle \cdot |\varphi_n\rangle$ gilt hier

$$|\psi; \varphi\rangle = \sum_i \int \sum_m |\alpha_i; \beta_m\rangle \langle \alpha_i; \beta_m | \psi; \varphi \rangle.$$

Analog zu (6.204), d. h. $A = \hat{1} \cdot A \cdot \hat{1} = \sum_{i,j} |\varphi_i\rangle \langle \varphi_i | A | \varphi_j \rangle \langle \varphi_j| = \sum_{i,j} A_{ij} \cdot |\varphi_i\rangle \langle \varphi_j|$, ergibt sich die **algebraische**

Darstellung bzw. Spektralzerlegung eines Operators A auf \mathcal{H} :

$$A = \hat{1} \cdot A \cdot \hat{1} = \sum_i \int \sum_m \sum_j \int |\alpha_i; \beta_m\rangle \langle \alpha_i; \beta_m | A | \alpha_j; \beta_n \rangle \langle \alpha_j; \beta_n|.$$

Operatoren, die nur auf den Unterraum \mathcal{H}_B oder nur auf den Unterraum \mathcal{H}_S wirken

Wenn der Operator A_B nur auf dem Unterraum \mathcal{H}_B und der Operator B_S nur auf dem Unterraum \mathcal{H}_S wirkt, dann lassen sich Operatoren A und B bilden, die auf dem Hilbertraum \mathcal{H} wirken:

$$A = A_B \hat{1}_S \quad \text{bzw.} \quad B = \hat{1}_B B_S .$$

Für diese Operatoren gilt:

- Matrixdarstellung:

$$\langle \alpha_i; \beta_m | A | \alpha_j; \beta_n \rangle = {}_B \langle \alpha_i | A | \alpha_j \rangle_B \cdot {}_S \langle \beta_m | \hat{1}_S | \beta_n \rangle_S = {}_B \langle \alpha_i | A | \alpha_j \rangle_B \cdot {}_S \langle \beta_m | \beta_n \rangle_S = {}_B \langle \alpha_i | A | \alpha_j \rangle_B \cdot \delta_{mn} ,$$

$$\langle \alpha_i; \beta_m | B | \alpha_j; \beta_n \rangle = {}_B \langle \alpha_i | \hat{1}_B | \alpha_j \rangle_B \cdot {}_S \langle \beta_m | B_S | \beta_n \rangle_S = \delta(i, j) \cdot {}_S \langle \beta_m | B_S | \beta_n \rangle_S ;$$
- Spektraldarstellung:

$$A = \left(\sum_{i,j} | \alpha_i \rangle_B {}_B \langle \alpha_i | A_B | \alpha_j \rangle_B {}_B \langle \alpha_j | \right) \hat{1}_S ,$$

$$B = \hat{1}_B \left(\sum_{m,n} | \beta_m \rangle_S {}_S \langle \beta_m | B_S | \beta_n \rangle_S {}_S \langle \beta_n | \right) ;$$
- Wirkung auf Produktzustände:

$$A | \psi; \varphi \rangle = A_B | \psi \rangle_B | \varphi \rangle_S = | \bar{\psi} \rangle_B | \varphi \rangle_S = | \bar{\psi}; \varphi \rangle ,$$

$$B | \psi; \varphi \rangle = | \psi \rangle_B B_S | \varphi \rangle_S = | \psi \rangle_B | \bar{\varphi} \rangle_S = | \psi; \bar{\varphi} \rangle .$$

Wegen der Wirkung auf Produktzustände vertauschen A und B im Produktraum, d. h., es gilt

$$[A, B] = 0 .$$

$$\text{Begründung: } [A, B] | \psi; \varphi \rangle = AB | \psi; \varphi \rangle - BA | \psi; \varphi \rangle = A | \psi; \bar{\varphi} \rangle - B | \bar{\psi}; \varphi \rangle = | \bar{\psi}; \bar{\varphi} \rangle - | \bar{\psi}; \bar{\varphi} \rangle = 0 .$$

$$\text{Deshalb gelten u. a. folgende Beziehungen: } [\vec{S}, \hat{r}] = [\vec{S}, \vec{p}] = [\vec{S}, \vec{L}] = 0 .$$

Der Hilbertraum des Spins \mathcal{H}_S

Die Eigenzustände $|S, m_S\rangle$ zu \vec{S}^2 und S_z bilden eine zweckmäßige Basis für den Hilbertraum des Spins \mathcal{H}_S .

Für einen beliebigen Zustand $|\alpha\rangle_S \in \mathcal{H}_S$ gilt

$$|\alpha\rangle_S = \sum_{m_S=-S}^S |S, m_S\rangle \cdot \langle S, m_S | \alpha \rangle_S =: \sum_{m_S=-S}^S |S, m_S\rangle \cdot \alpha_{m_S} .$$

Die $(2 \cdot S + 1)$ Komponenten $\langle S, m_S | \alpha \rangle_S = \alpha_{m_S}$ des Zustands $|\alpha\rangle_S \in \mathcal{H}_S$ lassen sich in einem $(2 \cdot S + 1)$ -komponentigen Spinor anordnen:

$$(\alpha_{m_S}) = \begin{pmatrix} \langle S, S | \alpha \rangle_S \\ \langle S, S-1 | \alpha \rangle_S \\ \vdots \\ \langle S, -S | \alpha \rangle_S \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha_S \\ \alpha_{S-1} \\ \vdots \\ \alpha_{-S} \end{pmatrix} .$$

Wegen $\langle S, m_S | S, m'_S \rangle = \delta_{m_S m'_S}$ ist dem Basiszustand $|S, m_S\rangle$ der Spinor zugeordnet, dessen einzige von null verschiedene Komponente in der m_S -Komponente steht:

$$\begin{pmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \\ 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} \leftarrow m_S.$$

Anhang 1 Nachweis der Beziehung $[L_i, L_j] = i \cdot \hbar \cdot \varepsilon_{ijk} \cdot L_k$

Es werden folgende Kommutatorbeziehungen verwendet, die wie in Beispiel 4.6 des Abschnitts 4.3.5 nachgewiesen werden können:

$$[x_i, p_j] = x_i \cdot p_j - p_j \cdot x_i = i \cdot \hbar \cdot \delta_{ij}, \quad (\text{Q60})$$

$$[x_i, x_j] = x_i \cdot x_j - x_j \cdot x_i = 0, \quad (\text{Q61})$$

$$[p_i, p_j] = p_i \cdot p_j - p_j \cdot p_i = 0. \quad (\text{Q62})$$

Aus (Q3), d. h. $\vec{L} = \hat{r} \times \vec{p}$, werden die Komponenten des Bahndrehimpulsoperators mithilfe des Epsilon-Symbols dargestellt. An anderer Stelle² habe ich nachgewiesen, dass bei Berechnungen im euklidischen Anschauungsraum die Beziehungen $\varepsilon^{ijk} = \varepsilon_{ijk}$ und $D = \vec{e}_1 \cdot (\vec{e}_2 \times \vec{e}_3) = 1$ gelten. Im Folgenden wird durchgängig mit kovarianten Koordinaten (tiefstehenden Indizes) gerechnet. Dabei ist über doppelt vorkommende Indizes zu summieren (Variante der Einstein'schen Summenkonvention). Laut (4.71) der in Fußnote 2 angegebenen Quelle gilt:

$$L_k = \frac{1}{D} \cdot \varepsilon_{kln} \cdot x_l \cdot p_n = \varepsilon_{kln} \cdot x_l \cdot p_n. \quad (\text{Q63})$$

In der folgenden Berechnung werden $p_l \cdot x_m$ und $p_n \cdot x_k$ mit (Q60) umgeformt, außerdem wird (Q61) angewendet, die Symmetrie des Epsilon-Symbols genutzt und es werden stumme Indizes vertauscht:

² Wagner, J.: Einstieg in die Hochschulmathematik, Springer Spektrum, 2016.

$$\begin{aligned}
 [L_i, L_j] &= L_i \cdot L_j - L_j \cdot L_i = \varepsilon_{ikl} \cdot x_k \cdot p_l \cdot \varepsilon_{jmn} \cdot x_m \cdot p_n - \varepsilon_{jmn} \cdot x_m \cdot p_n \cdot \varepsilon_{ikl} \cdot x_k \cdot p_l, \\
 &= \varepsilon_{ikl} \cdot \varepsilon_{jmn} \cdot \left(x_k \cdot \left(p_l \cdot x_m \right) \cdot p_n - x_m \cdot \left(p_n \cdot x_k \right) \cdot p_l \right) \quad \left| p_l \cdot x_m = -i \cdot \hbar \cdot \delta_{lm} + x_m \cdot p_l, \right. \\
 &= \varepsilon_{ikl} \cdot \varepsilon_{jmn} \cdot \left(-i \cdot \hbar \cdot \delta_{lm} \cdot x_k \cdot p_n + x_k \cdot x_m \cdot p_l \cdot p_n + i \cdot \hbar \cdot \delta_{nk} \cdot x_m \cdot p_l - \left(x_m \cdot x_k \right) \cdot \left(p_n \cdot p_l \right) \right), \\
 &= \varepsilon_{ikl} \cdot \varepsilon_{jmn} \cdot \left(-i \cdot \hbar \cdot \delta_{lm} \cdot \widehat{x_k \cdot p_n} + \widehat{x_k \cdot x_m \cdot p_l \cdot p_n} + i \cdot \hbar \cdot \delta_{nk} \cdot \widehat{x_m \cdot p_l} - \widehat{x_k \cdot x_m \cdot p_l \cdot p_n} \right), \\
 &= -i \cdot \hbar \cdot \varepsilon_{ikl} \cdot \varepsilon_{jmn} \cdot \left(\widehat{\delta_{lm} \cdot x_k \cdot p_n} - \widehat{\delta_{nk} \cdot x_m \cdot p_l} \right), \\
 &= -i \cdot \hbar \cdot \left(\varepsilon_{ikl} \cdot \varepsilon_{jln} \cdot \widehat{x_k \cdot p_n} - \varepsilon_{ikl} \cdot \varepsilon_{jmk} \cdot \widehat{x_m \cdot p_l} \right), \\
 &= i \cdot \hbar \cdot \left(\varepsilon_{ikl} \cdot \varepsilon_{ljn} \cdot \widehat{x_k \cdot p_n} - \varepsilon_{ilk} \cdot \varepsilon_{jmk} \cdot \widehat{x_m \cdot p_l} \right) \quad \left| \text{vorn } k \leftrightarrow l, \text{ hinten } l \leftrightarrow n, \right. \\
 &= i \cdot \hbar \cdot \left(\varepsilon_{ilk} \cdot \varepsilon_{kjn} \cdot \widehat{x_l \cdot p_n} - \varepsilon_{ink} \cdot \varepsilon_{jmk} \cdot \widehat{x_m \cdot p_n} \right) \quad \left| \text{hinten } m \leftrightarrow l, \right. \\
 &= i \cdot \hbar \cdot \left(\varepsilon_{ilk} \cdot \varepsilon_{kjn} \cdot \widehat{x_l \cdot p_n} - \varepsilon_{ink} \cdot \varepsilon_{jlk} \cdot \widehat{x_l \cdot p_n} \right), \\
 [L_i, L_j] &= i \cdot \hbar \cdot \left(\varepsilon_{ilk} \cdot \varepsilon_{kjn} - \varepsilon_{ink} \cdot \varepsilon_{jlk} \right) \cdot \widehat{x_l \cdot p_n}.
 \end{aligned}$$

Mit (4.195) der in Fußnote 2 angegebenen Quelle kann der Term in der Klammer umgeformt werden:

$$\begin{aligned}
 \varepsilon_{ilk} \cdot \varepsilon_{kjn} - \varepsilon_{ink} \cdot \varepsilon_{jlk} &= \varepsilon_{kil} \cdot \varepsilon_{kjn} - \varepsilon_{kin} \cdot \varepsilon_{kjl}, \\
 &= \left(\delta_{ji} \cdot \delta_{nl} - \delta_{jl} \cdot \delta_{ni} \right) - \left(\delta_{ji} \cdot \delta_{ln} - \delta_{jn} \cdot \delta_{li} \right), \\
 &= \delta_{jn} \cdot \delta_{li} - \delta_{jl} \cdot \delta_{ni} = \delta_{li} \cdot \delta_{nj} - \delta_{jl} \cdot \delta_{ni}, \\
 &= \varepsilon_{kij} \cdot \varepsilon_{kln}, \\
 \varepsilon_{ilk} \cdot \varepsilon_{kjn} - \varepsilon_{ink} \cdot \varepsilon_{jlk} &= \varepsilon_{ijk} \cdot \varepsilon_{kln}.
 \end{aligned}$$

Einsetzen dieses Ergebnisses in die Hauptrechnung ergibt mit (Q63) die Behauptung:

$$[L_i, L_j] = i \cdot \hbar \cdot \varepsilon_{ijk} \cdot \left(\varepsilon_{kln} \cdot x_l \cdot p_n \right) = i \cdot \hbar \cdot \varepsilon_{ijk} \cdot L_k. \quad (\text{Q64})$$

Anhang 2 Nachweis der Beziehung $\left[L_i, \vec{L}^2 \right] = 0$

Um $\left[L_i, \vec{L}^2 \right] = 0$ nachweisen zu können wird zunächst \vec{L}^2 bestimmt:

$$\vec{L}^2 = \sum_{i=1}^3 L_i^2 = L_1^2 + L_2^2 + L_3^2 = L_x^2 + L_y^2 + L_z^2.$$

Lösungsweg 1: Nutzen der Kommutator-Algebra³

Unter Verwendung von (Q64), d. h. $\left[L_i, L_j \right] = i \cdot \hbar \cdot \varepsilon_{ijk} \cdot L_k$, gilt:

$$\begin{aligned} \left[L_x, \vec{L}^2 \right] &= \left[L_x, L_x^2 \right] + \left[L_x, L_y^2 \right] + \left[L_x, L_z^2 \right] \quad | [a, b \cdot c] = [a, b]c + b[a, c], \\ &= \left(\underbrace{\left[L_x, L_x \right]}_0 L_x + L_x \underbrace{\left[L_x, L_x \right]}_0 \right) + \left(\underbrace{\left[L_x, L_y \right]}_{i \cdot \hbar \cdot L_z} L_y + L_y \underbrace{\left[L_x, L_y \right]}_{i \cdot \hbar \cdot L_z} \right) + \left(\underbrace{\left[L_x, L_z \right]}_{-i \cdot \hbar \cdot L_y} L_z + L_z \underbrace{\left[L_x, L_z \right]}_{-i \cdot \hbar \cdot L_y} \right), \\ \left[L_x, \vec{L}^2 \right] &= i \cdot \hbar \cdot \widehat{L_z L_y} + i \cdot \hbar \cdot \widehat{L_y L_z} - i \cdot \hbar \cdot \widehat{L_y L_z} - i \cdot \hbar \cdot \widehat{L_z L_y} = 0. \end{aligned}$$

Die Beziehungen $\left[L_y, \vec{L}^2 \right] = 0$ und $\left[L_z, \vec{L}^2 \right] = 0$ ergeben sich analog.

Lösungsweg 2: Rechnen mit dem Epsilon-Symbol⁴

Der zweite Lösungsweg ist wesentlich umfangreicher als der erste. Ich führe ihn dennoch an, da er lehrreich ist und weitere nützliche Zwischenergebnisse liefert.

Mit (Q63) und den eingangs genannten Beziehungen ergibt sich (im Ansatz wird auch über die Variable i summiert, da sie doppelt vorkommt):

$$\begin{aligned} \vec{L}^2 &= \varepsilon_{ijk} \cdot x_j \cdot p_k \cdot \varepsilon_{ilm} \cdot x_l \cdot p_m \quad | \varepsilon_{ijk} \cdot \varepsilon_{ilm} = \delta_{lj} \cdot \delta_{mk} - \delta_{lk} \cdot \delta_{mj}, \\ &= x_j \cdot \left(p_k \cdot x_j \right) \cdot p_k - x_j \cdot p_k \cdot x_k \cdot p_j \quad | p_k \cdot x_j = -i \cdot \hbar \cdot \delta_{kj} + x_j \cdot p_k, \\ &= -i \cdot \hbar \cdot \delta_{kj} \cdot x_j \cdot p_k + x_j \cdot x_j \cdot p_k \cdot p_k - x_j \cdot \left(p_k \cdot x_k \right) \cdot p_j \quad | p_k \cdot x_k = -i \cdot \hbar \cdot \delta_{kk} + x_k \cdot p_k, \\ &= -i \cdot \hbar \cdot x_j \cdot p_j + x_j \cdot x_j \cdot p_k \cdot p_k + i \cdot \hbar \cdot \delta_{kk} \cdot x_j \cdot p_j - x_j \cdot x_k \cdot \left(p_k \cdot p_j \right) \quad | \delta_{kk} = 3, \\ &= 2 \cdot i \cdot \hbar \cdot \widehat{x_j \cdot p_j} + \widehat{x_j \cdot x_j \cdot p_k \cdot p_k} - \widehat{x_j \cdot \left(x_k \cdot p_j \right) \cdot p_k} \quad | \widehat{x_k \cdot p_j} = i \cdot \hbar \cdot \delta_{jk} + p_j \cdot x_k, \\ &= 2 \cdot i \cdot \hbar \cdot \widehat{x_j \cdot p_j} + \widehat{x_j \cdot x_j \cdot p_k \cdot p_k} - i \cdot \hbar \cdot \delta_{jk} \cdot x_j \cdot p_k - x_j \cdot p_j \cdot x_k \cdot p_k, \\ &= i \cdot \hbar \cdot \widehat{x_j \cdot p_j} + \widehat{x_j \cdot x_j \cdot p_k \cdot p_k} - x_j \cdot p_j \cdot x_k \cdot p_k, \\ \vec{L}^2 &= i \cdot \hbar \cdot \widehat{r \cdot p} + \widehat{r \cdot p}^2 - \left(\widehat{r \cdot p} \right)^2. \end{aligned}$$

³ Die Ausführungen orientieren sich an folgender Quelle der TU Dresden: Timm, C.: Vorlesungsskript Quantentheorie I. [Skript QT1.pdf \(tu-dresden.de\)](https://tu-dresden.de/physik/quantenphysik/quantenmechanik/quantenmechanik-1/skript-qt1.pdf) (2023). Zugriffen: 11.05.2023.

⁴ Die Ausführungen orientieren sich an folgender Quelle der Uni Frankfurt: Rischke, D.: Vorlesungsskript Quantenmechanik I. [Skript QM I.pdf \(uni-frankfurt.de\)](https://www.uni-frankfurt.de/14444444/Skript_QM_I.pdf) (2011). Zugriffen: 11.05.2023.

Zur Berechnung des Kommutators $\left[L_i, \vec{L}^2 \right]$ ist Kommutator-Algebra erforderlich:

$$\begin{aligned} \left[L_i, \vec{L}^2 \right] &= \left[L_i, \hat{\mathbf{i}} \cdot \hat{\mathbf{h}} \cdot \hat{\mathbf{r}} \cdot \vec{p} + \hat{\mathbf{r}} \cdot \vec{p}^2 - \left(\hat{\mathbf{r}} \cdot \vec{p} \right)^2 \right], \\ &= \hat{\mathbf{i}} \cdot \hat{\mathbf{h}} \cdot \left[L_i, \hat{\mathbf{r}} \cdot \vec{p} \right] + \left[L_i, \hat{\mathbf{r}} \cdot \vec{p}^2 \right] - \left[L_i, \left(\hat{\mathbf{r}} \cdot \vec{p} \right)^2 \right] \quad | [a, b \cdot c] = [a, b]c + b[a, c], \\ \left[L_i, \vec{L}^2 \right] &= \hat{\mathbf{i}} \cdot \hat{\mathbf{h}} \cdot \left[L_i, \hat{\mathbf{r}} \cdot \vec{p} \right] + \left[L_i, \hat{\mathbf{r}} \cdot \vec{p}^2 \right] + \hat{\mathbf{r}} \cdot \left[L_i, \vec{p}^2 \right] - \left[L_i, \hat{\mathbf{r}} \cdot \vec{p} \right] \cdot \hat{\mathbf{r}} \cdot \vec{p} - \hat{\mathbf{r}} \cdot \vec{p} \cdot \left[L_i, \hat{\mathbf{r}} \cdot \vec{p} \right]. \end{aligned} \quad (\text{Q65})$$

Die verbleibenden Kommutatoren werden in Nebenrechnungen bestimmt.

$$\text{NR1: } \left[L_i, \hat{\mathbf{r}} \cdot \vec{p} \right]$$

Zunächst ergibt sich

$$\left[L_i, \hat{\mathbf{r}} \cdot \vec{p} \right] = \left[L_i, x_j \cdot p_j \right] = \left[L_i, x_j \right] \cdot p_j + x_j \cdot \left[L_i, p_j \right]. \quad (\text{Q66})$$

Die soeben erhaltenen Kommutatoren bestimmen wir separat:

$$\text{NR1.1: } \left[L_i, x_j \right]$$

$$\begin{aligned} \left[L_i, x_j \right] &= \left[\varepsilon_{ikl} \cdot x_k \cdot p_l, x_j \right] = \varepsilon_{ikl} \cdot \left(x_k \cdot \left(p_l \cdot x_j \right) - x_j \cdot x_k \cdot p_l \right) \quad | p_l \cdot x_j = -\hat{\mathbf{i}} \cdot \hat{\mathbf{h}} \cdot \delta_{lj} + x_j \cdot p_l, \\ &= \varepsilon_{ikl} \cdot \left(-\hat{\mathbf{i}} \cdot \hat{\mathbf{h}} \cdot \delta_{lj} \cdot x_k + x_k \cdot x_j \cdot p_l - \left(x_j \cdot x_k \right) \cdot p_l \right) \quad | x_j \cdot x_k = x_k \cdot x_j, \\ &= -\hat{\mathbf{i}} \cdot \hat{\mathbf{h}} \cdot \delta_{lj} \cdot \varepsilon_{ikl} \cdot x_k = -\hat{\mathbf{i}} \cdot \hat{\mathbf{h}} \cdot \varepsilon_{ikj} \cdot x_k, \\ \left[L_i, x_j \right] &= \hat{\mathbf{i}} \cdot \hat{\mathbf{h}} \cdot \varepsilon_{ijk} \cdot x_k; \end{aligned} \quad (\text{Q67})$$

$$\text{NR1.2: } \left[L_i, p_j \right]$$

$$\begin{aligned} \left[L_i, p_j \right] &= \left[\varepsilon_{ikl} \cdot x_k \cdot p_l, p_j \right] = \varepsilon_{ikl} \cdot \left(x_k \cdot p_l \cdot p_j - \left(p_j \cdot x_k \right) \cdot p_l \right) \quad | p_j \cdot x_k = -\hat{\mathbf{i}} \cdot \hat{\mathbf{h}} \cdot \delta_{jk} + x_k \cdot p_j, \\ &= \varepsilon_{ikl} \cdot \left(x_k \cdot p_l \cdot p_j + \hat{\mathbf{i}} \cdot \hat{\mathbf{h}} \cdot \delta_{jk} \cdot p_l - x_k \cdot \left(p_j \cdot p_l \right) \right) \quad | p_j \cdot p_l = p_l \cdot p_j, \\ &= \hat{\mathbf{i}} \cdot \hat{\mathbf{h}} \cdot \delta_{jk} \cdot \varepsilon_{ikl} \cdot p_l = \hat{\mathbf{i}} \cdot \hat{\mathbf{h}} \cdot \varepsilon_{ijl} \cdot p_l, \\ \left[L_i, p_j \right] &= \hat{\mathbf{i}} \cdot \hat{\mathbf{h}} \cdot \varepsilon_{ijk} \cdot p_k. \end{aligned} \quad (\text{Q68})$$

Einsetzen von (Q67) und (Q68) in (Q66) ergibt

$$\begin{aligned} \left[L_i, \hat{\mathbf{r}} \cdot \vec{p} \right] &= \left[L_i, x_j \right] \cdot p_j + x_j \cdot \left[L_i, p_j \right], \\ &= \hat{\mathbf{i}} \cdot \hat{\mathbf{h}} \cdot \varepsilon_{ijk} \cdot x_k \cdot p_j + \hat{\mathbf{i}} \cdot \hat{\mathbf{h}} \cdot \varepsilon_{ijk} \cdot x_j \cdot p_k = \hat{\mathbf{i}} \cdot \hat{\mathbf{h}} \cdot \varepsilon_{ijk} \cdot x_k \cdot p_j + \hat{\mathbf{i}} \cdot \hat{\mathbf{h}} \cdot \varepsilon_{ikj} \cdot x_k \cdot p_j = \hat{\mathbf{i}} \cdot \hat{\mathbf{h}} \cdot \underbrace{\left(\varepsilon_{ijk} + \varepsilon_{ikj} \right)}_0 \cdot x_k \cdot p_j, \\ \left[L_i, \hat{\mathbf{r}} \cdot \vec{p} \right] &= 0. \end{aligned} \quad (\text{Q69})$$

$$\text{NR2: } \left[L_i, \hat{r}^2 \right]$$

Es wird (Q67) verwendet, d. h. $\left[L_i, x_j \right] = L_i \cdot x_j - x_j \cdot L_i = \mathbf{i} \cdot \hbar \cdot \varepsilon_{ijk} \cdot x_k$:

$$\begin{aligned} \left[L_i, \hat{r}^2 \right] &= (L_i \cdot x_j) \cdot x_j - x_j \cdot (x_j \cdot L_i), \\ &= \mathbf{i} \cdot \hbar \cdot \varepsilon_{ijk} \cdot x_k \cdot x_j + x_j \cdot L_i \cdot x_j + \mathbf{i} \cdot \hbar \cdot \varepsilon_{ijk} \cdot x_j \cdot x_k - x_j \cdot L_i \cdot x_j, \\ &= \mathbf{i} \cdot \hbar \cdot \varepsilon_{ijk} \cdot x_k \cdot x_j + \mathbf{i} \cdot \hbar \cdot \varepsilon_{ikj} \cdot x_k \cdot x_j = \mathbf{i} \cdot \hbar \cdot \underbrace{(\varepsilon_{ijk} + \varepsilon_{ikj})}_0 \cdot x_k \cdot x_j, \end{aligned}$$

$$\left[L_i, \hat{r}^2 \right] = 0. \quad (\text{Q70})$$

$$\text{NR3: } \left[L_i, \vec{p}^2 \right]$$

Es wird (Q68) verwendet, d. h. $\left[L_i, p_j \right] = L_i p_j - p_j L_i = \mathbf{i} \cdot \hbar \cdot \varepsilon_{ijk} \cdot p_k$:

$$\begin{aligned} \left[L_i, \vec{p}^2 \right] &= (L_i \cdot p_j) \cdot p_j - p_j \cdot (p_j \cdot L_i), \\ &= \mathbf{i} \cdot \hbar \cdot \varepsilon_{ijk} \cdot p_k \cdot p_j + p_j \cdot L_i \cdot p_j + \mathbf{i} \cdot \hbar \cdot \varepsilon_{ijk} \cdot p_j \cdot p_k - p_j \cdot L_i \cdot p_j, \\ &= \mathbf{i} \cdot \hbar \cdot \varepsilon_{ijk} \cdot p_k \cdot p_j + \mathbf{i} \cdot \hbar \cdot \varepsilon_{ikj} \cdot p_k \cdot p_j = \mathbf{i} \cdot \hbar \cdot \underbrace{(\varepsilon_{ijk} + \varepsilon_{ikj})}_0 \cdot p_k \cdot p_j, \end{aligned}$$

$$\left[L_i, \vec{p}^2 \right] = 0. \quad (\text{Q71})$$

Mit (Q69), (Q70) und (Q71) ergibt sich aus (Q65) tatsächlich

$$\left[L_i, \vec{L}^2 \right] = 0. \quad (\text{Q72})$$

Anhang 3 Beziehungen für die Leiteroperatoren

Aus der Definition der Leiteroperatoren

$$L_{\pm} = L_x \pm \mathbf{i} \cdot L_y \quad (\text{Q73})$$

ergeben sich

$$\left(L_+ \right)^{\dagger} = L_- \quad \text{und} \quad \left(L_- \right)^{\dagger} = L_+. \quad (\text{Q74})$$

Mit (Q64), d. h. $\left[L_i, L_j \right] = \mathbf{i} \cdot \hbar \cdot \varepsilon_{ijk} \cdot L_k$, erhalten wir $\left[L_x, L_x \right] = \left[L_y, L_y \right] = 0$ und $\left[L_x, L_y \right] = \mathbf{i} \cdot \hbar \cdot L_z$. Damit lassen sich unter Nutzung der Kommutator-Algebra nützliche Vertauschungsrelationen und Produktdarstellungen herleiten:

$$\begin{aligned} \left[L_+, L_- \right] &= \left[L_x + \mathbf{i} \cdot L_y, L_x - \mathbf{i} \cdot L_y \right], \\ &= \left[L_x, L_x \right] - \mathbf{i} \cdot \left[L_x, L_y \right] + \mathbf{i} \cdot \left[L_y, L_x \right] + \left[L_y, L_y \right], \\ &= -2 \cdot \mathbf{i} \cdot \left[L_x, L_y \right] \quad \left[\left[L_x, L_y \right] = \mathbf{i} \cdot \hbar \cdot L_z \right], \end{aligned}$$

$$\left[L_+, L_- \right] = 2 \cdot \hbar \cdot L_z ; \quad (Q75)$$

$$\begin{aligned} \left[L_{\pm}, L_z \right] &= \left[L_x \pm i \cdot L_y, L_z \right] = \left[L_x, L_z \right] \pm i \cdot \left[L_y, L_z \right], \\ &= -i \cdot \hbar \cdot L_y \pm i \cdot \left(i \cdot \hbar \cdot L_x \right) = -i \cdot \hbar \cdot L_y \mp \hbar \cdot L_x = \mp \hbar \cdot \left(L_x \pm i \cdot L_y \right), \end{aligned}$$

$$\left[L_{\pm}, L_z \right] = \mp \hbar \cdot L_{\pm} \quad \text{bzw.} \quad L_{\pm} L_z - L_z L_{\pm} = \mp \hbar \cdot L_{\pm} ; \quad (Q76)$$

$$\begin{aligned} \left[L_{\pm}, L^2 \right] &= \left[L_x \pm i \cdot L_y, L^2 \right], \\ &= \left[L_x, L^2 \right] \pm i \cdot \left[L_y, L^2 \right] \quad \left[L_i, L^2 \right] = 0 \quad \text{wegen (Q72),} \end{aligned}$$

$$\left[L_{\pm}, L^2 \right] = 0 \quad \text{bzw.} \quad L_{\pm} L^2 - L^2 L_{\pm} = 0 ; \quad (Q77)$$

$$\begin{aligned} L_+ L_- &= \left(L_x + i \cdot L_y \right) \cdot \left(L_x - i \cdot L_y \right), \\ &= L_x^2 - i \cdot L_x \cdot L_y + i \cdot L_y \cdot L_x + L_y^2, \\ &= L_x^2 + L_y^2 - i \cdot \left(L_x \cdot L_y - L_y \cdot L_x \right), \\ &= L_x^2 + L_y^2 - i \cdot \left[L_x, L_y \right] \quad \left[L_x, L_y \right] = i \cdot \hbar \cdot L_z \quad \text{wegen (Q64),} \end{aligned}$$

$$L_+ L_- = L_x^2 + L_y^2 + \hbar \cdot L_z = L^2 - L_z^2 + \hbar \cdot L_z ; \quad (Q78)$$

$$\begin{aligned} L_- L_+ &= \left(L_x - i \cdot L_y \right) \cdot \left(L_x + i \cdot L_y \right), \\ &= L_x^2 + i \cdot L_x \cdot L_y - i \cdot L_y \cdot L_x + L_y^2, \\ &= L_x^2 + L_y^2 + i \cdot \left(L_x \cdot L_y - L_y \cdot L_x \right), \\ &= L_x^2 + L_y^2 + i \cdot \left[L_x, L_y \right] \quad \left[L_x, L_y \right] = i \cdot \hbar \cdot L_z \quad \text{wegen (Q64),} \end{aligned}$$

$$L_- L_+ = L_x^2 + L_y^2 - \hbar \cdot L_z = L^2 - L_z^2 - \hbar \cdot L_z . \quad (Q79)$$

Anhang 4 Wirkung der Leiteroperatoren

Ansatz 1: $L_+ |l, m\rangle = f_+(m, l) \cdot |l, m+1\rangle$ mit einer reellwertigen Funktion f_+ (Q80)

Durch Adjungieren ergibt sich unter Nutzung von (Q74), d. h. $L_+^\dagger = L_-$, und Beachtung, dass f_+ eine reellwertige Funktion ist:

$$\begin{aligned} \langle l, m | L_+^\dagger &= \langle l, m+1 | \cdot f_+^\dagger(m, l) \quad | L_+^\dagger = L_- ; f_+^\dagger = f_+ , \\ \langle l, m | L_- &= \langle l, m+1 | \cdot f_+(m, l) . \end{aligned} \quad (Q81)$$

Die Multiplikation von (Q81) und (Q80) ergibt

$$\begin{aligned} \langle l, m | L_- L_+ | l, m \rangle &= \langle l, m+1 | \cdot f_+^2(m, l) \cdot | l, m+1 \rangle = f_+^2(m, l) \cdot \underbrace{\langle l, m+1 | l, m+1 \rangle}_1, \\ \langle l, m | L_- L_+ | l, m \rangle &= f_+^2(m, l) . \end{aligned} \quad (Q82)$$

Mit (Q79), d. h. $L_- L_+ = L^2 - L_z^2 - \hbar \cdot L_z$ ergibt sich unter Nutzung von (Q26), d. h. $\bar{L}^2 |lm\rangle = \hbar^2 \cdot l \cdot (l+1) \cdot |lm\rangle$,
und (Q11), d. h. $L_z |lm\rangle = \hbar \cdot m \cdot |lm\rangle$:

$$\begin{aligned} \langle l, m | L_- L_+ | l, m \rangle &= \langle l, m | (L^2 - L_z^2 - \hbar \cdot L_z) | l, m \rangle, \\ &= \langle l, m | (L^2 | l, m \rangle) - \langle l, m | (L_z L_z | l, m \rangle) - \hbar \cdot \langle l, m | (L_z | l, m \rangle), \\ &= \hbar^2 \cdot l \cdot (l+1) \cdot \underbrace{\langle l, m | l, m \rangle}_1 - \hbar^2 \cdot m^2 \cdot \underbrace{\langle l, m | l, m \rangle}_1 - \hbar^2 \cdot m \cdot \underbrace{\langle l, m | l, m \rangle}_1, \\ \langle l, m | L_- L_+ | l, m \rangle &= \hbar^2 \cdot (l \cdot (l+1) - m \cdot (m+1)). \end{aligned} \quad (\text{Q83})$$

Durch Gleichsetzen von (Q82) und (Q83) und Radizieren ergibt sich

$$f_+(m, l) = \hbar \cdot \sqrt{l \cdot (l+1) - m \cdot (m+1)}. \quad (\text{Q84})$$

Ansatz 2: $L_- |l, m\rangle = f_-(m, l) \cdot |l, m-1\rangle$ mit einer reellwertigen Funktion f_- (Q85)

Eine analoge Betrachtung ergibt f_- :

$$\begin{aligned} \langle l, m | L_-^\dagger &= \langle l, m-1 | \cdot f_-^\dagger(m, l) \quad |L_-^\dagger = L_+; f_-^\dagger = f_-, \\ \langle l, m | L_+ &= \langle l, m-1 | \cdot f_-(m, l). \end{aligned} \quad (\text{Q86})$$

Die Multiplikation von (Q85) und (Q86) ergibt:

$$\begin{aligned} \langle l, m | L_+ L_- | l, m \rangle &= \langle l, m-1 | \cdot f_-^2(m, l) \cdot |l, m-1\rangle = f_-^2(m, l) \cdot \underbrace{\langle l, m-1 | l, m-1 \rangle}_1, \\ \langle l, m | L_+ L_- | l, m \rangle &= f_-^2(m, l). \end{aligned} \quad (\text{Q87})$$

Mit (Q78), d. h. $L_+ L_- = L^2 - L_z^2 + \hbar \cdot L_z$ ergibt sich unter Nutzung von (Q26), d. h. $\bar{L}^2 |lm\rangle = \hbar^2 \cdot l \cdot (l+1) \cdot |lm\rangle$,
und (Q11), d. h. $L_z |lm\rangle = \hbar \cdot m \cdot |lm\rangle$:

$$\begin{aligned} \langle l, m | L_+ L_- | l, m \rangle &= \langle l, m | (L^2 - L_z^2 + \hbar \cdot L_z) | l, m \rangle, \\ &= \langle l, m | (L^2 | l, m \rangle) - \langle l, m | (L_z L_z | l, m \rangle) + \hbar \cdot \langle l, m | (L_z | l, m \rangle), \\ &= \hbar^2 \cdot l \cdot (l+1) \cdot \underbrace{\langle l, m | l, m \rangle}_1 - \hbar^2 \cdot m^2 \cdot \underbrace{\langle l, m | l, m \rangle}_1 + \hbar^2 \cdot m \cdot \underbrace{\langle l, m | l, m \rangle}_1, \\ \langle l, m | L_+ L_- | l, m \rangle &= \hbar^2 \cdot (l \cdot (l+1) - m \cdot (m-1)). \end{aligned} \quad (\text{Q88})$$

Durch Gleichsetzen von (Q87) und (Q88) und Radizieren erhalten wir

$$f_-(m, l) = \hbar \cdot \sqrt{l \cdot (l+1) - m \cdot (m-1)}. \quad (\text{Q89})$$

(Q84) und (Q89) lassen sich zusammenfassen zu

$$f_\pm(m, l) = \hbar \cdot \sqrt{l \cdot (l+1) - m \cdot (m \pm 1)} = \hbar \cdot \sqrt{(l \mp m) \cdot (l \pm m + 1)}. \quad (\text{Q90})$$

Ergebnis: $L_\pm |l, m\rangle = \hbar \cdot \sqrt{l \cdot (l+1) - m \cdot (m \pm 1)} \cdot |l, m \pm 1\rangle = \hbar \cdot \sqrt{(l \mp m) \cdot (l \pm m + 1)} \cdot |l, m \pm 1\rangle$.