§2 Über den Spin

a) Rüblick auf die Drehimpulsalgebra

Die drei Drehimpulsoperatoren $\vec{L} = \big(L_x,\, L_y,\, L_z\big)$, die durch $\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$ definiert sind, haben mit

$$\vec{p} = \frac{\hbar}{i}\left(\frac{\partial}{\partial x}\,,\,\frac{\partial}{\partial y}\,,\,\frac{\partial}{\partial z}\right)$$

die folgende Gestalt

$$\vec{L} \;=\; \frac{\hbar}{i}\left(y\,\frac{\partial}{\partial z} - z\,\frac{\partial}{\partial y}\,,\, z\,\frac{\partial}{\partial x} - x\,\frac{\partial}{\partial z}\,,\, x\,\frac{\partial}{\partial y} - y\,\frac{\partial}{\partial x}\right)\ . \tag{1}$$

Ihre Vertauschungsrelationen

$$[L_x,\, L_y] = i\,\hbar L_z\ ,\quad [L_y,\, L_z] = i\,\hbar L_x\ ,\quad [L_z,\, L_x] = i\,\hbar L_y \tag{2}$$

kann man einfach mit (1) durch Nachrechnen verifizieren. Das Quadrat des Drehimpulses

$$\vec{L}^{\,2} = L_x^2 + L_y^2 + L_z^2 \tag{3}$$

vertauscht mit allen seinen Komponenten

$$[\vec{L}^{\,2},\, L_x] = [\vec{L}^{\,2},\, L_y] = [\vec{L}^{\,2},\, L_z] = 0 \tag{4}$$

wie man ebenfalls leicht nachrechnet. Man benutzt zunächst die Rechenregel (sie erinnert an die Produktregel der Differentiation) $[A\cdot B,\, C] = [A,\, C]\cdot B + A\cdot[B,\, C]$, so daß vier Terme entstehen

$$\begin{aligned}[\vec{L}^{\,2},\, L_z] = [L_x^2,\, L_z] + [L_y^2,\, L_z] &= [L_x,\, L_z]\, L_x + L_x\,[L_x,\, L_z] + [L_y,\, L_z]\, L_y + L_y\,[L_y,\, L_z] \\ &= -\,i\,\hbar\, L_y\, L_x \;-\; i\,\hbar L_x\, L_y \;+\; i\,\hbar\, L_x\, L_y \;+\; i\,\hbar\, L_y\, L_x\ ,\end{aligned}$$

die sich mit Hilfe der Vertauschungsrelationen (1) gegenseitig wegheben. Zu jeden Drehimpulsproblem lassen sich somit Zustände definieren, die gleichzeitig Eigenzustände zu $\vec{L}^{\,2}$ und L_z sind. Wie man weiß sind die Eigenwerte $\hbar^2\, l(l+1)$ bzw. $\hbar\, m$ mit ganzen Zahlen für l und m und $-l \le m \le l$. Dies findet man beim Lösen einer SCHRÖDINGERgleichung mit einem sphärisch symmetrischen Potential wie das COULOMB)potential heraus. Hier soll dieselbe Information nur mit den Kommutatoren (2) und (4) gewonnen werden.

Wie beim Oszillatorproblem führt man “Leiteroperatoren” ein

$$L_+ \;=\; L_x + i\, L_y\ ,\qquad L_- \;=\; L_x - i\, L_y \tag{5}$$

wobei L_z die Rolle eines HALTONoperators zufällt. Statt (2) gelten die folgenden Vertauschungsrelationen

$$[L_z,\, L_\pm] \;=\pm\hbar\, L_\pm\ , \tag{6a}$$

vergleichbar mit $[\hbar\omega\, a^+a,\, a^+] = \hbar\omega\, a^+$ und $[\,\hbar\omega\, a^+a,\, a] = -\hbar\omega\, a$ beim harmonischen Oszilator mit dem HAMILTONoperator $\hbar\omega\, a^+a$. Es gilt weiter, wie man mit $[L_x,\, L_y] = i\,\hbar L_z$ leicht sehen kann,

$$[L_+,\, L_-] \;= 2\,\hbar\, L_z\ , \tag{6b}$$

entsprechend der Vertauschungsrelation zwischen den Erzeugungs– und Vernichtungsoperatoren a^+ und a, d.h. $[\,a,\, a^+] \;= 1$. Die Analogie ist nicht perfekt. Kann sie auch nicht sein, denn man hat mit dem HAMILTONoperator $\mathcal{H} = -\mu\, H\, L_z$, der die ZEEMANaufspaltung eines Multipletts im Magnetfeld H gibt, nur $2\,l+1$ Niveaus statt unendlich vieler beim harmonischen Oszillator.

b) Darstellung der Drehimpulsalgebra

Im folgenden soll eine *Darstellung* der Vertauschungsrelationen (6a) und (6b) durch Matritzen konstruiert werden. Es werden $(2l+1)\times(2l+1)$–Matrizen sein, aber wie bereits gesagt, muß sich dies ergeben. Es wird sich dabei herausstellen, daß l halbzahlig sein kann. Für die SCHRÖDINGERgleichung mit *Bahn*drehimpulsen ist $l = 1/2,\, 3/2,\, \ldots$ unmöglich. aber für die Analyse des sogenannten anomalen ZEEMAN braucht gerade diese mit j bezeichneten halbzahligen Werte, die sich aus dem Bahnanteil l und dem Spin mit $s = 1/2$ zusammensetzen.

Geht man von irgendeiner Eigenfunktion $\varphi_{l,m}$ von L_z und $\vec{L}^{\,2}$ aus, dann ist $L_+\,\varphi_{l,m}$ und $L_-\,\varphi_{l,m}$ mit (6a)

$$L_z\,\varphi_{l,m} = \hbar\, m\,\varphi_{l,m} \quad \longrightarrow \quad L_z\,L_\pm\,\varphi_{l,m} = \hbar\,(m\pm 1)\,L_\pm\,\varphi_{l,m}\ , \tag{7}$$

so daß die Operatoren $L_\pm$ tatsächlich benachbarten Zuständen mit Eigenfunktionen $\varphi_{l,m\pm1}$ erzeugen. Um die Matrix für L_+ zu konstruieren, braucht man noch die Normierung von $L_+\,\varphi_{l,m}$. Mit (7) weiß man nur, daß nur in die oberen Nebendiagonalen von Null verschiedene Matrixelemente sind. Für L_- ist es die untere Nebendiagonale. Weil L_- zu L_+ adjungiert ist, kann man die Norm von $L_+\,\varphi_{l,m}$ am *Diagonal*matrixelementen von $L_-\,L_+$ ablesen

$$\begin{aligned} L_-\,L_+ &= (L_x - i\,L_y)\,(L_x + i\,L_y) = L_x^2 + L_y^2 - \hbar\,L_z \\ &= \vec{L}^{\,2} - L_z^2 - \hbar\,L_z \end{aligned} \tag{8a}$$

$$L_+\,L_- = \vec{L}^{\,2} - L_z^2 + \hbar\,L_z\ , \tag{8b}$$

wobei die Norm von $L_-\,\varphi_{l,m}$ entsprechend durch $L_+\,L_-$ bestimmt ist[†]. Diese Operatorprodukte bzw. Matrixprodukte haben offenbar nur Diagonalmetrixelemente, da sie sich durch L_z und $\vec{L}^{\,2}$ ausdrücken lassen. Das ist leicht zu verstehen, denn $L_\pm$ verschiebt den Zustand m zu $(m\pm1)$ und $L_\mp$ von $(m\pm1)$ wieder zu m zurück. Setzt man für den Eigenwert von $\vec{L}^{\,2}$ "versuchsweise" $l(l+1)$, d.h. , es soll $\vec{L}^{\,2}\,\varphi_{l,m} = l(l+1)\,\varphi_{l,m}$ sein, dann ist die Norm von $L_\pm\,\varphi_{l,m}$ nach (8)

$$\|\, L_\pm\,\varphi_{l,m}\,\| = \sqrt{l(l+1) - m(m\pm1)}\ . \tag{9}$$

Man sieht sofort, daß $m > l$ und $m < -l$ nicht möglich. Damit man mit (7) nicht in diesen verbotenen Bereich kommt, muß das größte zulässige m_{max} gleich l sein, so daß mit (9) die Norm von $\|\, L_+\,\varphi_{\,l,l}\,\|$ verschwindet. Entsprechend muß nach (9) der kleinste zulässige m_{min} gleich $-l$ sein. Die Differenz $m_{max} - m_{min} = 2l$ muß eine ganze Zahl sein, was sowohl für ganze l als auch für halbzahlige l–Werte der Fall ist.

Es ist also möglich sowohl ganzzahlige Drehimpulse mit $l = 0,\, 1,\, 2\,\ldots$ als auch halbzahlige mit $j = 1/2,\, 3/2\,\ldots$ mit der Matrixmethode methodisch gleich zu behandeln. Wie sehen nun diese Matrizen aus? Es ist von Vorteil (9) in $\|\, L_+\,\varphi_{l,m}\,\| = \sqrt{(l-m)(l+m+1)}$ umzuschreiben. Für $l = 2$ sind es 5×5–Matrizen und L_+ und die transponierte Matrix $L_- = (L_+)^T$ haben die Gestalt

$$L_+ = \hbar\begin{pmatrix} 0 & \sqrt{4\cdot1} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{3\cdot2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{2\cdot3} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \sqrt{1\cdot4} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}\ ,\quad L_- = \hbar\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \sqrt{4\cdot1} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{3\cdot2} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{2\cdot3} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{1\cdot4} & 0 \end{pmatrix} \tag{10}$$

[†] Die Norm mit Kugelfunktionen $\varphi_{lm}(\theta,\phi)$ wäre $\int_0^{2\pi}\!d\phi \int_0^{\pi}\!\sin\theta\,d\theta\,(L_+\varphi_{lm})^*\,L_+\,\varphi_{lm} = \int_0^{2\pi}\!d\phi \int_0^{\pi}\!\sin\theta\,d\theta\,\varphi_{lm}^*\,L_-\,L_+\,\varphi_{lm}$.

während L_z Diagonalgestalt hat

$$L_z = \hbar \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -2 \end{pmatrix}$$

Die Produkt $L_- \, L+$ und $L_+ \, L-$ sollten nach Gl.(8a), (8b) und (9) ebenfalls diagonal sein, was sie auch sind, wenn man die Matrizen L_- und L_+ von (10) miteinander multipliziert

$$L_- L_+ = \hbar^2 \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 4{\cdot}1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 3{\cdot}2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2{\cdot}3 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1{\cdot}4 \end{pmatrix} \; , \qquad L_+ L_- = \hbar^2 \begin{pmatrix} 4{\cdot}1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 3{\cdot}2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2{\cdot}3 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1{\cdot}4 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Die Matritzen $L_\pm$ in (10) sind gewissermaßen die Quadratwurzeln der beiden letzten Matrizen, weshalb auch in $L_\pm$ nur die Wurzeln von (8a) oder von (8b), d.h. von $l(l+1) - m(m \pm 1) = (l + 1 \mp m)(l \pm m)$ auftreten mit $m = 2, 1, 0, -1, -2$.

c) Zu Spin–1/2

Die einfachsten Matrizen, die nach dem vorher erläuteren Schema konstruiert werden können, sind 2×2–Matrizen. Für diesen Fall ist l oder besser $s = 1/2$ und die *Leiter*operatoren S_+ und S_- haben die einfache Form

$$S_+ = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \; , \quad S_- = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \; . \tag{11a}$$

Mit $S_x = \frac{1}{2}(S_+ + S_-)$ und $S_y = \frac{1}{2\,i}(S_+ - S_-)$ zusammen mit dem *diagonalen* S_z sind die drei Spinmatrizen

$$S_x = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \; , \quad S_y = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \; , \quad S_z = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \; . \tag{11b}$$

Diese Matrizen haben genau dieselben Vertauschungsrelationen (2) wie die Drehimpulse L_x, L_y, L_z. Die Spinmatrizen $\vec{S}$ sind mit den Paulimatrizen $\vec{\sigma}$

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \; , \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \; , \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \; . \tag{12}$$

verknüpft, d.h. $\vec{S} = \frac{\hbar}{2}\,\vec{\sigma}$. Es ist leicht nachzurechnen, daß $\sigma_x \sigma_y - \sigma_y \sigma_x = 2\,i\sigma_z$, was $[S_x, \, S_y] = i\,\hbar\,S_z$ entspricht. Es gilt aber auch

$$\begin{aligned} \sigma_x\,\sigma_y &= \;\; i\sigma_z \\ \sigma_y\,\sigma_x &= -i\sigma_z \\ \hline \Rightarrow \; \sigma_x\,\sigma_y + \sigma_y\,\sigma_x &= \;\; 0 \end{aligned} \tag{13}$$

und damit ebenfalls $\sigma_y\,\sigma_z + \sigma_z\,\sigma_y = 0$ und $\sigma_z\,\sigma_x + \sigma_x\,\sigma_z = 0$. Außerdem ist

$$\sigma_x^2 = \sigma_y^2 = \sigma_z^2 = 1 \; , \tag{14}$$

so daß

$$(a\,\sigma_x + b\,\sigma_y + c\,\sigma_z)^2 \; = \; a^2 + b^2 + c^2 \tag{15}$$

ist. Dies bedeutet, daß die *gemischten* Terme wegen $a\,b\,(\sigma_x\,\sigma_y + \sigma_y\,\sigma_x) = 0$ sich wegheben. Die letzte Beziehung (15) ist wesentlich für das Verständnis der Diracgleichung.