
1 Drehimpuls

Wir werden im folgenden dreidimensionale Probleme der Quantenmechanik behandeln. Ein wichtiger Begriff dabei ist der Drehimpuls. Wir werden zuerst die Definition des quantenmechanischen Drehimpulses anhand der Definition des Bahndrehimpulses begründen. Danach betrachten wir algebraische Eigenschaften des allgemeinen Drehimpulsoperators, die nicht nur für den Bahndrehimpuls gelten.

1.1 Motivation für die Definition des Drehimpulses

In der klassischen Mechanik ist der Bahndrehimpuls eines Teilchens bezüglich des Koordinatenursprungs gegeben durch

$$\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}$$

Aufgrund des Korrespondenzprinzips ist es naheliegend, den quantenmechanischen Bahndrehimpuls folgendermaßen zu definieren:

$$\hat{\mathbf{L}} = \hat{\mathbf{r}} \times \hat{\mathbf{p}}$$

Das heißt

$$\hat{L}_x = \hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y \quad \hat{L}_y = \hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z \quad \hat{L}_z = \hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x$$

Aus Übersichtlichkeitsgründen (bzw. Faulheitsgründen) lassen wir im folgenden $\hat{}$ für Operatoren weg. Mit Hilfe der Vertauschungsrelationen $[x_i, p_j] = i\hbar\delta_{ij}$ lassen sich die fundamentalen Vertauschungsrelationen für den Bahndrehimpuls herleiten:

$$[L_x, L_y] = i\hbar L_z \quad [L_y, L_z] = i\hbar L_x \quad [L_z, L_x] = i\hbar L_y \quad \text{Merkregel: } \mathbf{L} \times \mathbf{L} = i\hbar\mathbf{L} \quad (1)$$

1.2 Algebraische Eigenschaften des Drehimpulses

Nun betrachten wir allgemeine Eigenschaften von Drehimpulsoperatoren. Diese Eigenschaften werden wir später an Beispielen und Übungsaufgaben veranschaulichen. Die in diesem Abschnitt betrachteten Eigenschaften beruhen auf die algebraische Eigenschaften des Drehimpulses und gelten deshalb nicht nur für den Bahndrehimpuls, sondern -wie wir bald sehen werden- für jeden Drehimpuls (z.B. Spin, Gesamtdrehimpuls)

Allgemein versteht man unter einem Drehimpulsoperator einen vektorwertigen Operator $\mathbf{L} = (L_x, L_y, L_z)^T$, dessen Komponenten folgenden Vertauschungsrelationen genügen:

$$[L_x, L_y] = i\hbar L_z \quad [L_y, L_z] = i\hbar L_x \quad [L_z, L_x] = i\hbar L_y \quad (2)$$

Außerdem werden wir aus praktischen Gründen noch folgende Operatoren definieren:

$$\text{Drehimpulsquadrat: } \mathbf{L}^2 = L_x^2 + L_y^2 + L_z^2 \quad (3)$$

$$\text{Leiteroperatoren: } L_{\pm} = L_x \pm iL_y \quad (4)$$

Es gelten folgende wichtige Kommutatorrelationen:

$$[\mathbf{L}^2, L_i] = 0 \quad \text{für } i \in \{x, y, z\} \quad (5)$$

$$[\mathbf{L}^2, L_{\pm}] = 0 \quad [L_z, L_{\pm}] = \pm\hbar L_{\pm} \quad [L_+, L_-] = 2\hbar L_z \quad (6)$$

Die Gleichungen (5) bedeutet physikalisch, dass das Quadrat des Drehimpulses (d.h. sein absoluter Betrag) gleichzeitig mit einer Komponente messbar sind. O.B.d.A betrachten wir die z -Komponente (wir hätten genauso so x oder y wählen können, aber in den meisten Lehrbüchern wählt man standardmäßig die z -Komponente). Wegen $[\mathbf{L}^2, L_z] = 0$ existieren gemeinsame Eigenzustände von \mathbf{L}^2 und L_z . Sei nun $|\psi\rangle$ ein gemeinsamer Eigenzustand von \mathbf{L}^2 und L_z , d.h.

$$\mathbf{L}^2|\psi\rangle = \lambda|\psi\rangle \quad L_z|\psi\rangle = \mu|\psi\rangle$$

Man kann allein aus den oben aufgelisteten Vertauschungsrelationen zeigen (siehe Anhang), dass $\lambda = \hbar^2 l(l+1)$ und $\mu = \hbar m$ gilt. Wir halten also folgendes fest:

1. Die drei Komponenten des quantenmechanischen Drehimpulses sind nicht gleichzeitig messbar. Der Drehimpuls unterscheidet sich in dieser Hinsicht wesentlich vom Impuls, dessen drei Komponenten gleichzeitig messbar sind.
2. Während in der klassischen Mechanik der Drehimpuls eines Teilchens, das sich in einem kugelsymmetrischen Potential (Zentralkraftfeld) bewegt, nach Betrag und Richtung zeitlich konstant ist und daher alle drei Komponenten wohldefinierte Werte haben, sagt die quantenmechanische Beschreibung, dass zwar das Betragsquadrat des Drehimpulses zeitlich konstant ist, dass aber von seinen drei Komponenten nur eine einen zeitlich konstanten Messwert hat, während die beiden anderen Komponenten einzeln nicht gleichzeitig messbar und daher nicht exakt bestimmbar sind.
3. Die gemeinsamen Eigenzustände $|l, m\rangle := |\psi_{lm}\rangle$ von \mathbf{L}^2 und L_z sind durch die Drehimpulsquantenzahl l und die Azimutal- bzw. magnetische Quantenzahl m charakterisiert, es gilt

$$\mathbf{L}^2|l, m\rangle = \hbar^2 l(l+1)|l, m\rangle \quad L_z|l, m\rangle = \hbar m|l, m\rangle \quad (7)$$

4. Aus den fundamentalen Vertauschungsrelationen für Drehimpulse $[L_x, L_y] = i\hbar L_z$ (und zyklisch) lässt sich herleiten, dass $2l+1$ eine ganze Zahl und somit l ein nicht-negatives Vielfaches von $\frac{1}{2}$ ist. Für jeden Wert von l gibt es $2l+1$ erlaubte Werte für m , die von $-l$ bis l in ganzzahligen Schritten variieren. D.h.:

$$l \in \left\{ 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2, \dots \right\} \quad \text{für jedes } l: \quad m = (-l), (-l+1), \dots, l-1, l \quad (8)$$

5. Sei $|l, m\rangle := |\psi_{lm}\rangle$ ein gemeinsamer Eigenzustand von \mathbf{L}^2 und L_z mit den zugehörigen Eigenwerten $\hbar^2 l(l+1)$ und $\hbar m$, dann gilt mit $L_{\pm} = L_x \pm iL_y$:

$$L_{\pm}|l, m\rangle = \hbar \sqrt{l(l+1) - m(m \pm 1)}|l, m \pm 1\rangle \quad (9)$$

Beachte, dass diese Eigenschaften allein aus den fundamentalen Vertauschungsrelationen des Drehimpulses (2) folgen. Dabei sind $|l, m\rangle$ (abstrakte) gemeinsame Eigenzustände von \mathbf{L}^2 und L_z . Die Eigenfunktionen selbst können aus den Kommutatorrelationen nicht hergeleitet werden, da wir nicht einmal spezifiziert haben, um welchen Drehimpuls es sich handelt. Es ist zu beachten, dass die z -Achse von vornherein durch nichts ausgezeichnet ist. Daher ist es klar, dass man die gleichen Eigenwerte für L_x, L_y und überhaupt für die Projektion $\mathbf{n} \cdot \mathbf{S}$ des Drehimpulses auf einen beliebigen Richtungseinheitsvektor \mathbf{n} erhält. Im folgenden werden wir wichtige Spezialfälle betrachten.

1.3 Bahndrehimpuls

Nun kommen wir zum Bahndrehimpuls des Motivationskapitels zurück. Mit dem Impulsoperator im Ortsraum $\mathbf{p} = -i\hbar\nabla$ hat der Bahndrehimpulsoperator $\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}$ folgende Darstellung:

$$L_x = \frac{\hbar}{i} \left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right) \quad L_y = \frac{\hbar}{i} \left(z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right) \quad L_z = \frac{\hbar}{i} \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right)$$

in Kugelkoordinaten

$$\begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} r \sin \theta \cos \varphi \\ r \sin \theta \sin \varphi \\ r \cos \theta \end{pmatrix}$$

ist der Bahndrehimpulsoperator gegeben durch:

$$L_x = i\hbar \left(\sin \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} + \cot \theta \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \quad L_y = i\hbar \left(-\cos \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} + \cot \theta \sin \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \quad L_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi} \quad (10)$$

Die Leiteroperatoren und das Drehimpulsquadrat haben folgende Darstellung in Kugelkoordinaten:

$$L_{\pm} = L_x \pm iL_y = \hbar \exp(\pm i\varphi) \left(\pm \frac{\partial}{\partial \theta} + i \cot \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \quad (11)$$

$$\mathbf{L}^2 = -\hbar^2 \left(\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right) = -\hbar^2 \Delta_{\theta, \varphi} \quad (12)$$

d.h. $\mathbf{L}^2 / (-\hbar^2)$ entspricht in Ortsdarstellung gerade dem Winkelanteil des dreidimensionalen Laplace-Operators:

$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \left(\frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \frac{\cos \theta}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right) = \Delta_r + \frac{1}{r^2} \Delta_{\theta, \varphi}$$

Das heißt, dass die Eigenfunktionen des Bahndrehimpulsoperators gerade die Kugelflächenfunktionen sind:

$$Y_{lm}(\theta, \varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sqrt{\frac{2l+1}{2} \cdot \frac{(l-m)!}{(l+m)!}} P_{lm}(\cos \theta) \exp(im\varphi) \quad l \in \{0, 1, \dots\}, m = -l, \dots, l \quad (13)$$

Es gilt:

$$\mathbf{L}^2 Y_{l,m}(\theta, \varphi) = \hbar^2 l(l+1) Y_{l,m}(\theta, \varphi) \quad L_z Y_{l,m}(\theta, \varphi) = \hbar m Y_{l,m}(\theta, \varphi) \quad (14)$$

Wir sehen also, dass die Parameter l und m , die in den Eigenwertgleichungen

$$\mathbf{L}^2 |l, m\rangle = \hbar^2 l(l+1) |l, m\rangle \quad L_z |l, m\rangle = \hbar m |l, m\rangle$$

die abstrakten Eigenzustände charakterisierenden, im Fall des Bahndrehimpulses gerade die Parameter l und m der Kugelflächenfunktionen sind. Daher sind für den speziellen Bahndrehimpuls nur ganzzahlige Werte für die Bahndrehimpulsquantenzahl l und m zulässig. (Allein nach den algebraischen Eigenschaften des Drehimpulses sind prinzipiell auch halbzahlige Werte für l erlaubt). Für L_z gelten noch folgende Kommutatorbeziehungen (entsprechende Relationen für L_x und L_y erhält man durch zyklische Vertauschung):

$$\begin{aligned} [L_z, x] &= i\hbar y & [L_z, y] &= -i\hbar x & [L_z, z] &= 0 \\ [L_z, p_x] &= i\hbar p_y & [L_z, p_y] &= -i\hbar p_x & [L_z, p_z] &= 0 \end{aligned}$$

1.4 Spin

In der klassischen Mechanik besitzt ein starrer Körper zwei verschiedene "Arten" von Drehimpulsen. Während der Bahndrehimpuls $\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}$ mit der Bewegung des Massenmittelpunktes verknüpft ist, ist der Eigendrehimpuls verbunden mit der Rotationsbewegung eines starren Körpers um den Massenmittelpunkt. In der Quantenmechanik hat ein Elektron eines Atoms zusätzlich zum Bahndrehimpuls auch einen Eigendrehimpuls, der aber nur bedingt als Analogon des klassischen Eigendrehimpulses eines starren Körpers betrachtet werden kann. Denn ein Elektron ist, so weit wir wissen, ein strukturloses, punktförmiges Teilchen und der Eigendrehimpuls kann nicht auf Rotation der "Bestandteile" eines Elektrons um den Schwerpunkt betrachtet werden. Den experimentellen Hinweis auf die Existenz eines intrinsischen Drehimpulses (Spin) der Elektronen lieferte historisch das Stern-Gerlach-Experiment.

Aufgrund der Tatsache, dass der Spin genau so ein Drehimpuls ist, hat der Spin-Operator \mathbf{S} die gleichen algebraischen Eigenschaften eines allgemeinen Drehimpulses:

$$\text{Fundamentale Kommutatorrelationen:} \quad [S_x, S_y] = i\hbar S_z \quad [S_y, S_z] = i\hbar S_x \quad [S_z, S_x] = i\hbar S_y \quad (15)$$

$$\text{Quadrat des Spin-Operators:} \quad \mathbf{S}^2 = S_x^2 + S_y^2 + S_z^2 \quad (16)$$

$$\text{Leiteroperatoren:} \quad S_{\pm} = S_x \pm iS_y \quad (17)$$

Wichtige Kommutatorrelationen:

$$[\mathbf{S}^2, S_i] = 0 \quad \text{für } i \in \{x, y, z\} \quad (18)$$

$$[\mathbf{S}^2, S_{\pm}] = 0 \quad [S_z, S_{\pm}] = \pm \hbar S_{\pm} \quad [S_+, S_-] = 2\hbar S_z \quad (19)$$

$$\text{Eigenwerte: } \mathbf{S}^2|s, m\rangle = \hbar^2 s(s+1)|s, m\rangle \quad S_z|sm\rangle = \hbar m|s, m\rangle \quad (20)$$

$$\text{Quantenzahlen: } s \in \left\{0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2, \dots\right\} \quad \text{für jedes } s: m = (-s), (-s+1), \dots, s-1, s \quad (21)$$

$$\text{Eigenschaften der Leiteroperatoren: } S_{\pm}|s, m\rangle = \hbar\sqrt{s(s+1) - m(m \pm 1)}|s, m \pm 1\rangle \quad (22)$$

Beispiel 1 (Spin- $\frac{1}{2}$ -System) Gegeben sei ein Teilchen mit $s = 1/2$.

1. Bestimmen Sie die Matrixdarstellung von $\mathbf{S}^2, S_x, S_y, S_z, S_+$ und S_- in der Basis $\{|\uparrow\rangle = |\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle, |\downarrow\rangle = |\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle\}$ der gemeinsamen Eigenzustände von \mathbf{S}^2 und S_z an.
2. Welche Eigenwerte erhalten Sie, wenn Sie S_x messen?
3. Ein Elektron befindet sich in einem allgemeinen Zustand $|\chi\rangle = a|\uparrow\rangle + b|\downarrow\rangle$ mit $a, b \in \mathbb{C}$. Wie groß sind die Wahrscheinlichkeiten, bei Messungen von S_z und S_x die jeweiligen Eigenwerte zu erhalten?
4. Bestimmen Sie die Erwartungswerte $\langle S_x \rangle, \langle S_y \rangle, \langle S_z \rangle, \langle S_x^2 \rangle, \langle S_y^2 \rangle$ und $\langle S_z^2 \rangle$, falls das Elektron sich im oben angegebenen Zustand befindet.

LÖSUNG:

1. Strategie: Da die Basisvektoren Eigenzustände von \mathbf{S}^2 und S_z sind, ist deren Matrix diagonal. Die Diagonaleinträge erhalten wir aus der Beziehung (20)

Wir bestimmen nun die Matrixdarstellung der Operatoren S_+ und S_- , da deren Wirkung auf die Basisvektoren durch die Gleichung (22) gegeben sind. Um die Matrixelemente eines Operators A zu bestimmen, verwenden wir

$$(A)_{i,j} = \langle i|A|j\rangle$$

Daher lautet die Matrixdarstellung:

Zum Schluss können wir mit der Beziehung zwischen S_x , S_y und S_{\pm} auch die Matrixdarstellung von S_x und S_y bestimmen.

2. Wir bestimmen die Eigenwerte des Operators S_x durch Bestimmung der Nullstellen des charakteristischen Polynoms der Matrix:

3. Die Wahrscheinlichkeiten, bei einer Messung von S_z den Messwert $\frac{1}{2}\hbar$ bzw. $-\frac{1}{2}\hbar$ zu erhalten, sind gegeben durch $|a|^2$ bzw. $|b|^2$. Um die entsprechenden Wahrscheinlichkeiten für eine Messung von S_x zu erhalten, müssen die Eigenzustände von S_x bestimmt werden.

Wir stellen nun den Zustand $|\chi\rangle$ als Linearkombination der Eigenzustände von S_x dar.

Die gesuchten Wahrscheinlichkeiten für das Erhalten der Eigenwerte bei einer Messung von S_x sind somit:

Wahrscheinlichkeit für Eigenwert $+\frac{\hbar}{2}$:

Wahrscheinlichkeit für Eigenwert $-\frac{\hbar}{2}$:

4. Am schnellsten lässt sich diese Aufgabe lösen, indem wir die Matrixdarstellungen der Operatoren und den Koordinatenvektor des Zustands $|\chi\rangle$ bezüglich der Basis benutzen.

Teilt man die in der Teilaufgabe (a) erhaltenen Matrizen durch $\frac{\hbar}{2}$, erhält man die PAULI'schen Spinmatrizen:

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

Wir stellen noch die Eigenschaften der PAULI'schen Spinmatrizen zusammen:

$$\sigma_x^2 = \sigma_y^2 = \sigma_z^2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \mathbb{I} \quad (23)$$

$$\det(\sigma_i) = -1 \quad (24)$$

$$\text{Tr}(\sigma_i) = 0 \quad \text{für } i = x, y, z$$

$$[\sigma_x, \sigma_y] = 2i\sigma_z \quad \text{und zyklisch} \quad (25)$$

$$\{\sigma_x, \sigma_y\} = 0 \quad \text{und zyklisch} \quad (26)$$

$$\sigma_x\sigma_y = -\sigma_y\sigma_x = i\sigma_z \quad \text{und zyklisch} \quad (27)$$

$$\text{für mit } \sigma \text{ vertauschbaren Vektoren } \mathbf{a}, \mathbf{b}: \quad (\sigma \cdot \mathbf{a})(\sigma \cdot \mathbf{b}) = \mathbf{a} \cdot \mathbf{b}\mathbb{I} + i\sigma \cdot (\mathbf{a} \times \mathbf{b}) \quad (28)$$

1.5 Magnetisches Moment

Eine klassische Ladung $-e$, die sich mit dem Bahndrehimpuls \mathbf{L} auf einer Kreisbahn bewegt, bildet eine Stromschleife mit dem magnetischen Moment $\mathbf{M} = -\frac{e}{2m}\mathbf{L}$. Da es für den Spin keinen "klassischen Grenzfall" gibt (wie Stromschleife für Bahndrehimpuls), muss die Beziehung zwischen (Spin-)Drehimpuls und das mit ihm verbundenen magnetische Moment aus anderen Argumenten bezogen werden. Die relativistische Dirac-Gleichung liefert das Ergebnis

$$\mathbf{M} = -g\frac{e}{2m}\mathbf{S} \quad g = 2 \quad (29)$$

Tatsächlich liefert die quantenelektrodynamische Korrektur den Wert $g = 2.0023193$ für ein freies Elektron. In Materie kann der effektive g -Faktor (auch gyromagnetischer Koeffizient) von der Umgebung des Elektrons abhängen. Das magnetische Moment kann an ein äußeres Magnetfeld koppeln. In Anwesenheit eines Magnetfeldes \mathbf{B} ist der Hamiltonoperator gegeben durch

$$\mathcal{H} = -\mathbf{M} \cdot \mathbf{B} = g\frac{e}{2m}\mathbf{S} \cdot \mathbf{B} = \frac{g\mu_B}{\hbar}\mathbf{S} \cdot \mathbf{B} \quad \text{mit dem Bohr'sche Magneton: } \mu_B = \frac{e\hbar}{2m}$$

1.6 Räumliche Freiheitsgrade und Spin

Der Spin ist ein zusätzlicher Freiheitsgrad, der unabhängig von den räumlichen Freiheitsgraden ist. Spin und Ort bzw. Spin und Impuls können gleichzeitig und unabhängig voneinander scharfe Werte haben. D.h.:

$$[S_i, x_j] = 0 \quad [S_i, p_j] = 0 \quad [S_i, L_j] = 0$$

Der Gesamtzustand wird aus dem Produkt von Orts- und Spineigenzuständen aufgebaut. Um für ein Spin- $\frac{1}{2}$ -Teilchen den allgemeinen Zustand $|\psi\rangle$ zu bilden, kann man als Basis $\{|\mathbf{x}\rangle|\chi\rangle; \mathbf{x} \in \mathbb{R}^3, \chi \in \{\uparrow, \downarrow\}\}$ wählen. Meistens verwendet man die Projektion auf den Ortsraum:

$$\langle \mathbf{x} | \psi \rangle = \psi_+(\mathbf{x})|\uparrow\rangle + \psi_-(\mathbf{x})|\downarrow\rangle$$

Die Größe $|\psi_+(\mathbf{x})|^2$ gibt die Wahrscheinlichkeitsdichte für ein spin-up Teilchen an der Stelle \mathbf{x} an.

1.7 Addition von Drehimpulsen

Um das Verhalten von einem Elektron mit Bahndrehimpuls \mathbf{L} und Spin \mathbf{S} , oder zwei Elektronen mit den zugehörigen Spins \mathbf{S}_1 und \mathbf{S}_2 zu untersuchen, muss man den Begriff des Gesamtdrehimpulses einführen. Generell stellt sich das Problem, ausgehend von zwei Drehimpulsoperatoren \mathbf{J}_1 und \mathbf{J}_2 die Größe $\mathbf{J} = \mathbf{J}_1 + \mathbf{J}_2$ zu untersuchen.

Seien \mathbf{J}_1 und \mathbf{J}_2 miteinander kommutierende Drehimpulsoperatoren, d.h.

1. Für jeden Operator gelten die fundamentalen Kommutatorbeziehungen $[J_{1x}, J_{1y}] = i\hbar J_{1z}$ usw.
2. Die Operatoren kommutieren untereinander: $[J_{1\alpha}, J_{2\beta}] = 0 \quad \alpha, \beta \in \{x, y, z\}$

Dann gilt

1. $\mathbf{J} = \mathbf{J}_1 + \mathbf{J}_2$ ist ebenfalls ein Drehimpulsoperator und erfüllt die fundamentalen Vertauschungsrelationen (und somit sämtliche Eigenschaften aus Abschnitt 2).
2. Der Produktzustand $|j_1, m_1\rangle|j_2, m_2\rangle$ ist ein gemeinsamer Eigenzustand von $\mathbf{J}_1^2, J_{1z}, \mathbf{J}_2^2$ und J_{2z} mit den Eigenwerten $\hbar^2 j_1(j_1 + 1), \hbar m_1, \hbar^2 j_2(j_2 + 1)$ und $\hbar m_2$.
3. Der Produktzustand $|j_1, m_1\rangle|j_2, m_2\rangle$ ist ein Eigenzustand von $J_z = J_{1z} + J_{2z}$ zum Eigenwert $\hbar(m_1 + m_2)$, jedoch kein Eigenzustand von \mathbf{J}^2 .
4. Das gesamte System wird vollständig beschrieben durch die untereinander kommutierenden Operatoren $\mathbf{J}^2, J_z, \mathbf{J}_1^2$ und \mathbf{J}_2^2 mit den gemeinsamen Eigenzuständen $|j, m, j_1, j_2\rangle$.

5. Für den Wertebereich von j gilt: $j=|j_1 - j_2|, |j_1 - j_2| + 1, \dots, j_1 + j_2 - 1, j_1 + j_2$.

Beispiel 2 Kopplung zweier Spin- $\frac{1}{2}$ -Teilchen (DVP 2000, 2003)

Gegeben sei ein System aus zwei Spin- $\frac{1}{2}$ -Teilchen. Bestimmen Sie die normierten gemeinsamen Eigenzustände von \mathbf{S}^2 und S_z und geben Sie die Eigenwerte an.

Lösung

Wir koppeln \mathbf{S}_1 und \mathbf{S}_2 mit $S_1 = \frac{1}{2}$ und $S_2 = \frac{1}{2}$ zum Gesamtspin $\mathbf{S} = \mathbf{S}_1 + \mathbf{S}_2$. Für die Spinquantenzahl S des Gesamtspins gilt nach Punkt 5:

\mathbf{S}^2 lässt sich ausdrücken durch

$$\mathbf{S}^2 = \mathbf{S}_1^2 + \mathbf{S}_2^2 + 2\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2 = \mathbf{S}_1^2 + \mathbf{S}_2^2 + 2S_{1z}S_{2z} + S_{1+}S_{2-} + S_{1-}S_{2+}$$

Wir erinnern uns an die Gleichungen

$$\mathbf{S}^2|l, m\rangle = \hbar s(s+1)|s, m\rangle \quad S_z|sm\rangle = \hbar m|s, m\rangle \quad \text{und} \quad S_{\pm}|s, m\rangle = \hbar\sqrt{s(s+1) - m(m \pm 1)}|s, m \pm 1\rangle$$

für einen einzelnen Spin, dessen Eigenzustände von S_z wir folgendermaßen abkürzen:

Wir betrachten die Wirkung von o.B.d.A \mathbf{S}_1^2 , S_{1z} und $S_{1\pm}$ auf einen einzelnen Spin:

Wir bilden nun die Produktzustände $|s_1, m_1\rangle|s_2, m_2\rangle$, von denen wir insgesamt 4 Stück haben und für welche wir folgende Notation verwenden:

Nun berechnen wir die Wirkung von \mathbf{S}^2 auf jeden dieser 4 Produktzustände. Dabei ist zu beachten, dass Operatoren, die z.B. einen Index 1 haben, nur auf den 1. Spin Auswirkungen haben.

Das heißt, die Matrixdarstellung von \mathbf{S}^2 bezüglich der Produktbasis ist gegeben durch:

Wir sehen, dass $|\uparrow\rangle|\uparrow\rangle$ und $|\downarrow\rangle|\downarrow\rangle$ bereits Eigenzustände von \mathbf{S}^2 zum Eigenwert $2\hbar^2$ sind. Das heißt, ihre Spinquantenzahl ist $S = 1$ wegen $2\hbar^2 = \hbar^2 1(1 + 1)$. $|\uparrow\rangle|\downarrow\rangle$ und $|\downarrow\rangle|\uparrow\rangle$ sind jedoch keine Eigenzustände von \mathbf{S}^2 . Wir bestimmen nun eine Linearkombinationen aus den letzteren Zuständen, die jeweils Eigenzustände von \mathbf{S}^2 sind. Dazu diagonalisieren wir die Teilmatrix:

Wir bestimmen noch die Eigenwerte der neu gewonnenen Eigenzustände bezüglich S_z

Wir fassen noch das Ergebnis zusammen:

2 Vielteilchensysteme

In diesem Kapitel werden wir grundlegende Eigenschaften von quantenmechanischen Vielteilchensystemen kennenlernen. Betrachten wir beispielsweise ein nichtwechselwirkendes Zweiteilchensystem. Stellen wir uns vor, dass das Teilchen 1 im **Einteilchenzustand** $|\psi_a\rangle$ und das Teilchen im **Einteilchenzustand** $|\psi_b\rangle$ befindet. Die Wellenfunktion $\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$, die das Gesamtsystem beschreibt, ist aufgrund der Separierbarkeit der Schrödinger-Gleichung ein einfaches Produkt:

$$\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \psi_a(\mathbf{r}_1)\psi_b(\mathbf{r}_2)$$

Dies setzt jedoch voraus, dass die beiden Teilchen voneinander unterscheidbar sind. Sind diese nicht voneinander unterscheidbar, so können wir nur sagen, dass eines von den beiden Teilchen im Zustand $|\psi_a\rangle$ und das andere im Zustand $|\psi_b\rangle$ befindet. Das heißt, dass die Wahrscheinlichkeit einen Gesamtzustand zu realisieren mit einem Teilchen im **Einteilchenzustand** $|\psi_a\rangle$ und einem Teilchen im **Einteilchenzustand** $|\psi_b\rangle$ unabhängig davon ist, „welches“ Teilchen in welchem Zustand befindet, d.h.:

$$|\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)|^2 = |\psi(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1)|^2 \quad \Rightarrow \quad \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = e^{i\varphi}\psi(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1)$$

Aufgrund der Tatsache, dass zweimäßige Vertauschung Wellenfunktion wieder die ursprüngliche Form überführt, muss $\varphi = 0$ oder $\varphi = \pi$ sein. Wir erhalten also zwei unterschiedliche Arten von Zweiteilchenwellenfunktionen

$$\psi_{\pm}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \pm\psi(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1)$$

Diese Eigenschaft der Wellenfunktion nennt man Austauschsymmetrie. Die Theorie besagt, dass es zwei Arten von identischen Teilchen gibt: die Bosonen, deren Austauschsymmetrie der Wellenfunktion durch „+“ beschrieben wird und Fermionen, deren Austauschsymmetrie der Wellenfunktion durch „-“ beschrieben wird. Mit Hilfe der Produktwellenfunktionen können solche Zweiteilchenwellenfunktionen konstruiert werden:

$$\psi_{\pm}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = A [\psi_a(\mathbf{r}_1)\psi_b(\mathbf{r}_2) \pm \psi_b(\mathbf{r}_1)\psi_a(\mathbf{r}_2)]$$

Eine wichtige Folgerung ist, dass zwei identische Fermionen sich nicht im gleichen Einteilchenzustand befinden können. Denn:

$$\psi_{-}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = A [\psi_a(\mathbf{r}_1)\psi_a(\mathbf{r}_2) - \psi_a(\mathbf{r}_1)\psi_a(\mathbf{r}_2)] = 0$$

Dies ist das berühmte Pauli-Prinzip. Allerdings haben wir in der obigen Betrachtung den Spin nicht berücksichtigt. Berücksichtigt man den Spinfreiheitsgrad, so ist die Gesamtwellenfunktion ein Produkt aus Orts- und Spinwellenfunktion. Ausschlaggebend ist dabei die Austauschsymmetrie der Gesamtwellenfunktion. Für identische Fermionen muss die Gesamtwellenfunktion antisymmetrisch bezüglich Vertauschung der Teilchen sein. Ist z.B. die Ortswellenfunktion symmetrisch, so muss die Spinwellenfunktion antisymmetrisch sein.