

QUANTEN

EIN LEHRBUCH DER THEORETISCHEN PHYSIK

VON

PROF. DR. WILHELM MACKE

DIREKTOR DES INSTITUTS FÜR THEORETISCHE PHYSIK
AN DER TECHNISCHEN HOCHSCHULE DRESDEN

MIT 127 ABBILDUNGEN



LEIPZIG 1959

AKADEMISCHE VERLAGSGESELLSCHAFT
GEEST & PORTIG K.-G.

gewisse Schwierigkeiten. Dafür wurde Teil 3 so aufgebaut, daß zu seinem Studium das Verständnis von Teil 2 nicht unbedingt erforderlich ist. Wegen der in der Einleitung erwähnten Symmetrie der Quantentheorie gegenüber den Begriffen „Teilchen“ und „Wellen“ sollte das vorstehende Pfeilschema eigentlich „rechts-links-symmetrisch“ sein. Dies ist aber nicht der Fall, weil sich der Wellenbegriff wegen seiner starken Anschaulichkeit zur Lösung spezieller quantenmechanischer Probleme als fruchtbarer erwiesen hat.

Geschrieben wurde das Buch in erster Linie für den lernenden Theoretiker und experimentierenden Physiker, aber auch für den theoretisch interessierten Ingenieur und Techniker, der sich über Herkunft und Grundlagen der von ihm verwendeten Formeln informieren möchte. Im übrigen ist hinsichtlich der Darstellung und Übersichtlichkeit alles versucht, um das Werk auch dem Fachkollegen, der es nicht systematisch durcharbeitet, sondern an beliebiger Stelle aufschlägt, so zugänglich wie möglich zu machen. Für die Darlegung des Inhalts galt der Grundsatz, lieber eine Erklärung zuviel als zuwenig zu geben. Trotzdem liegt es in der Natur des behandelten Stoffes, daß sein Inhalt nur dem aktiv mitarbeitenden Leser verständlich wird, der mit Bleistift und Papier die mathematisch formulierten Gedankengänge selbst verfolgt.

Konsequent wird in allen Gleichungen das internationale **Maßsystem** verwendet, aber gleichzeitig durch eine geeignete Schreibweise dafür gesorgt, daß die Gleichungen von den in der Atomtheorie gewohnten Formelnbildern „optisch“ nicht abweichen. Gelegentliche Hinweise auf den Band „Wellen“ werden kurz mit „W“ bezeichnet.

Das **Manuskript** ist in langjähriger Tätigkeit des Unterzeichneten aus Vorlesungen sowie aus dem ständigen Kontakt mit dem Lernenden und seiner Kritik hervorgegangen. Bei der endgültigen Zusammenstellung des Manuskripts leistete Herr P. ZIESCHE durch wertvolle Anregungen und Kritiken in unermüdlicher Tätigkeit wichtige Hilfe, für die ihm an dieser Stelle sehr herzlich gedankt sei. Unter seiner Leitung und Verantwortung wurden auch die Korrekturen von einem Mitarbeiterkollektiv in dankenswerter Weise durchgeführt, das sich aus den Herren G. BESSNER, H. J. KAISER, W. KOLBE, R. LENK, D. NETZBAND, P. RENNERT, K. SCHMIDT und H. J. SIX zusammensetzte. Herrn B. PEGEL danke ich für die sorgfältige Anfertigung der Abbildungen. Dem Verlag sei für sein verständnisvolles Entgegenkommen gedankt, mit dem er bereitwillig auf alle Wünsche des Verfassers eingegangen ist.

Dresden, den 10. Februar 1959

WILHELM MACKE

INHALT

Einleitung	X
1. Vorgeschichte der Quantentheorie	1
11. <i>Quantelung von Masse und Ladung</i>	1
111 Antike Atomtheorie	1
112 Atomtheorie der Neuzeit	2
113 LOSCHMIDTSche Zahl	3
114 Elementarladung	7
115 Aufbau der Materie	9
116 RUTHERFORDSche Streuformel	12
12. <i>Quantelung der Energie</i>	17
121 Das PLANCKSche Wirkungsquantum	17
122 Theorie der Hohlraumstrahlung	18
123 Hypothese der Energiequanten	20
124 Spezifische Wärme fester Körper nach EINSTEIN	24
125 DEBYESche Theorie der spezifischen Wärme	26
13. <i>Quantelung der Wellen</i>	31
131 Photoeffekt	32
132 COMPTONEffekt	33
133 Atomspektren	35
134 Atomanregung durch Elektronenstoß	37
14. <i>Quantelung des Phasenraums</i>	39
141 Oszillator im Phasenraum	39
142 Verallgemeinerte Quantenbedingungen von BOHR und SOMMERFELD	41
143 Das BOHRsche Wasserstoffatom	44
15. <i>Ausblick auf die neuere Theorie</i>	47
151 Versagen der älteren Quantentheorie	47
152 Die neuere Quantentheorie	48
153 Grenzen der Anwendbarkeit	51
2. Teilchenquantelung	52
21. <i>Zusammenfassung der Teilchentheorie</i>	53
211 Darstellung atomarer Teilchensysteme	53
212 Erhaltungssätze	54
213 Der LAGRANGESche Formalismus	57
214 Kanonische Bewegungsgleichungen	60
215 Invarianzeigenschaften und Erhaltungsgrößen	62

22. Die HEISENBERGSche Matrixmechanik	66
221 Ungequantelte theoretische Strahlung des Elektrons	67
222 Beobachtete Strahlung des Elektrons	69
223 HEISENBERGSche Matrizen	71
224 Das BOHRsche Korrespondenzprinzip	73
23. Vollständige Quantentheorie mechanischer Systeme	76
231 Rechnen mit Matrizen	77
232 Energievertauschungen	82
233 Kanonische Vertauschungen	84
24. Quantelung des harmonischen Oszillators	88
241 Anwendung der Quantenbedingungen	89
242 Lösung der Bewegungsgleichungen	90
243 Berechnung der meßbaren Größen	91
244 Physikalische Bedeutung der Matrizen	93
245 Die HEISENBERGSche Unbestimmtheitsrelation	97
3. Wellenquantelung	100
31. Materiewellen	101
311 DE BROGLIESche Materiewellen	102
312 SCHRÖDINGERSche Materiewellen	105
313 Erhaltungsgrößen der Wellentheorie	107
314 Schwerpunktbewegung	112
315 Vergleich mit der Erfahrung	113
316* Allgemeines Schema der Wellenquantelung	116
317* Übergang zur klassischen Theorie (Elektronenoptik und WKB-Methode)	120
32. Eindimensionale Bewegung eines freien Teilchens	123
321 Wellenpaket als Lösung	123
322 Ortsverteilung und Zeitablauf	127
323 GAUSSkurve als Spektralverteilung	130
324 Stoß eines Wellenpakets	131
33. Eindimensionale Bewegung eines gebundenen Teilchens	135
331 Teilchen im begrenzten Volumen	135
332 Verhalten der Wellenfunktion	136
333 Gesamtheit der gebundenen Zustände	140
334 Die HEISENBERGSche Unbestimmtheitsrelation	144
335* Quasistationäre Zustände	147
336* Unbestimmtheit von Energie und Zeit	153
34. Zusammenhang mit der Matrixmechanik	157
341 Wellenmechanische Behandlung des Oszillators	157
342 Vergleich mit der Matrixmechanik	161
343 Allgemeine Ableitung der Matrixmechanik	164
344 SCHRÖDINGERSGleichung für mehrere Teilchen	166

4. Gebundene Zustände	168
41. Die SCHRÖDINGERSGleichung und ihre Eigenschaften	169
411 Grundgleichungen	169
412 Erhaltungsgrößen	173
413 Symmetrieeigenschaften	176
414 Minimaleigenschaften der Energie	178
42. Näherungsverfahren	181
421 Das RIRZSche Variationsverfahren	181
422 Abschätzungen mit der Unbestimmtheitsrelation	183
423 SCHRÖDINGERSche Störungsrechnung	186
424* Störungsrechnung bei Entartung	189
43. Eigenzustände des Drehimpulses	191
431 Separation der SCHRÖDINGERSGleichung	191
432 Behandlung der Drehimpulse	195
433 LAGENDRESsche Polynome	198
44. Das Elektron im kugelsymmetrischen Potential	202
441 Der Radialteil	203
442 Wechselwirkung mit Strahlung	206
443 Das Wasserstoffatom	209
444 Der dreidimensionale Oszillator	213
45. Das Elektron im elektromagnetischen Feld	215
451 Das Elektron im Viererpotential	215
452* Paramagnetismus und Diamagnetismus	218
453 Der Elektronenspin	223
454 Die σ -Matrizen	226
455 Der ZERMANEFFECT	229
456* Feinstruktur des Wasserstoffs	231
457 Gesamtspin zweier Elektronen	234
5. Aufbau der Atome und Moleküle	237
51. Aufbau der Atomhülle	238
511 Periodische Atomeigenschaften	239
512 PAULIprinzip und Schalenstruktur	241
513 RÖNTGENspektren	244
514 Alkalispektren	246
515 Das SLATERSche Atommodell	249
516 Das HARTREEsche Näherungsverfahren	251
52. Wechselwirkung mehrerer Elektronen	255
521 Grundzustand des Heliums	255
522 Berechnung des Grundzustands	257
523 Termschema des Heliums	260
524 Elektronenspin und PAULIprinzip	264
525 Das HARTREE-FOCKsche Näherungsverfahren	267
53. Systeme mit großer Teilchenzahl	270
531 Das Ferrnigas	271
532 Das statistische Atommodell	273
533 Austauschenergie und gemischte Dichte	278

54. <i>Chemische Bindung</i>	281
541 Übersicht	282
542 Metallische Bindung	285
543 Bändertheorie der Metalle	287
544 Das Wasserstoffmolekül	290
545 Das zweiatomige Molekül	293
546 Das Wasserstoffmolekül nach HEITLER und LONDON	295
6. Streu- und Stoßprobleme	299
61. <i>Eindimensionale Streuprobleme</i>	299
611 Stoß eines Wellenpakets	300
612 Streuung am Potentialwall	301
613 Streuung am δ -Potential	304
614 Komplexes Potential	305
62. <i>Näherungsverfahren</i>	306
621 Integralgleichung der Streuung	307
622 Bornsche Näherung	310
623 WKB-Methode und Tunneleffekt	313
624 Berechnung des Reflexionskoeffizienten durch Variation	315
63. <i>Das dreidimensionale Streuproblem</i>	317
631 Streuung an einem Störzentrum	317
632 Der totale Wirkungsquerschnitt	321
633 Dreidimensionale Integralgleichung	324
634 Bornsche Näherung	325
635 Anwendungen der Bornschen Näherung	326
64. <i>Elastische Streuung und Entwicklung nach Drehimpulsen</i>	330
641 Eigenzustände des Drehimpulses	331
642 Streuamplitude und Wirkungsquerschnitte	334
643 Potentiale mit begrenzter Reichweite	338
644 Genäherte Berechnung der Streuphasen δ_l	341
645 Das SCHWINGERSCHE Variationsverfahren	344
65*. <i>Nichtelastische Stoßprozesse</i>	345
651 Allgemeiner Stoßprozeß	346
652 Quantenmechanische Beschreibung	347
653 Verallgemeinerte BORNSCHE Näherung	350
654 Resonanz	353
7. Darstellung der Quantentheorie im HILBERTRAUM	355
71. <i>Darstellung physikalischer Größen</i>	356
711 Quantelung physikalischer Systeme	357
712 Geometrische Bedeutung der Matrizen und ihrer Eigenwerte	359
713 Der N -dimensionale Vektorraum	364
714 Die Metrik eines Vektorraums	367
715 Orthogonalsysteme im Vektorraum	369
716 Operatoren im HILBERTRAUM	371
717 Operatordarstellung physikalischer Größen	375

72. <i>Der physikalische Anfangszustand</i>	377
721 Eigenwerte einer Observablen	378
722 Beziehungen zwischen vertauschbaren Observablen	381
723 Unvertauschbare Observable	384
724 Konstruktion von Zustandsvektoren	387
725 Die Zustandsvektoren von Ort und Impuls	391
73. <i>Zeitablauf eines physikalischen Systems</i>	397
731 Transformation der Zeitabhängigkeit	398
732 Die SCHRÖDINGERGLEICHUNG	401
733 DIRACSCHE Störungsrechnung	405
734 SCHRÖDINGERSCHE Störungsrechnung	411
74. <i>Wellenquantelung</i>	415
741 Klassische Materiewellen	415
742 Quantelung der Wellentheorie	419
743 Orthogonalsystem der Ortszustände	421
744 Operatorenanwendung auf Ortszustände	426
745 Spin und Statistik der Elektronen	430
746 Das Eintheilchenproblem	432
747 Äquivalenz von Teilchen und Wellen	435
748 Selbstwechselwirkung von Elektronenwellen	438
75. <i>Invarianz des HAMILTONOPERATORS</i>	440
751 Invarianzeigenschaften und Erhaltungsgrößen	440
752 Translationen der Zeit	443
753 Eindimensionale Translationen des Orts	446
754 Die dreidimensionale Translationsgruppe	449
755 Die dreidimensionale Drehgruppe	452
Lösungen zu den Übungsaufgaben	456
Verzeichnis der verwendeten Formelzeichen	487
Sach- und Namenverzeichnis	489
Literaturhinweise für weiterführende Studien	494
Naturkonstanten, Atomare Einheiten	495

dynamik ist $\vec{\mu}_P$ das Produkt aus Strom und umlaufener Fläche, die im gedrehten Koordinatensystem durch

$$\begin{aligned} \vec{\mu}_P &= I \vec{F} = \frac{e}{\tau} \int \frac{1}{2} \vec{r} \times d\vec{r} = \frac{e}{\tau} \int \frac{1}{2} (\vec{r} \times \dot{\vec{r}}) dt \\ &= \frac{e}{2} \vec{r} \times \dot{\vec{r}} = \frac{e}{2m} \vec{r} \times \vec{p} = \frac{e}{2m} \mathcal{L} \end{aligned} \quad (17)$$

beschrieben wird und zum Drehimpuls \mathcal{L} unmittelbar proportional ist.

Die durch die Zusatzrotation ω entstehenden Besonderheiten enthält der Term (15), der insbesondere dann eine Rolle spielt, wenn (14) verschwindet, wenn also beim Atom zum Beispiel der resultierende Gesamtdrehimpuls der Elektronen verschwindet. μ_D ist das **diamagnetische Moment**, das erst beim Anlegen eines äußeren Feldes \mathfrak{H} induziert wird. Liegt das Magnetfeld in Richtung der z -Achse, so gilt

$$\mu_D = -\frac{e^2}{4m} |\mathfrak{H}|^2 \int \overline{x^2 + y^2} \quad (18)$$

woraus bei rotationsymmetrischer Ladungsverteilung

$$\mu_D = -\frac{e^2 |\mathfrak{H}|^2}{6m} \sum_i \overline{r_i^2} \quad (19)$$

wird. In der Quantenmechanik sind die Bahnmittel über das i -te Teilchen durch die entsprechenden quantenmechanischen Erwartungswerte zu ersetzen.

Bei der **quantenmechanischen Behandlung** des Problems geht E aus (12) zunächst in den HAMILTONOPERATOR (451.16) über. Im Vergleich zwischen jener Formel und (12) enthalten die ersten beiden Terme die Energie im gedrehten System. In diesem gedrehten System ist der Drehimpuls \mathcal{L} wegen (11) eine Erhaltungsgröße, denn er rotiert mit der gleichen Geschwindigkeit um die Drehachse wie das Koordinatensystem selbst, jedenfalls in der Näherung $\omega^2 \approx 0$. Betrachtet man also die ersten beiden Terme von (12) als ungestörten HAMILTONOPERATOR und behandelt den Einfluß der übrigen beiden als kleine Störung, so beeinflußt der paramagnetische, gemäß (14) nur von \mathcal{L}_z abhängige Anteil die Wellenfunktion nicht. Eine Beeinflussung der Wellenfunktion findet erst bei Berücksichtigung des diamagnetischen Anteils (15) statt, die aber hinsichtlich ω von zweiter Ordnung ist und daher zu Abweichungen in der Energie bei der Entwicklung des Störungsverfahrens erst in vierter Ordnung führt. Es ist daher bis einschließlich zu Gliedern mit ω^2 korrekt, die Energie eines solchen Systems so zu berechnen, daß man die ersten beiden Terme von (12) bzw. von (451.16) allein zum Aufsuchen der Wellenfunktion benutzt und mit dieser Wellenfunktion die Erwartungswerte der übrigen beiden Terme hinzufügt.

453 Der Elektronenspin

STERN und GERLACH erhielten bei Versuchen über die magnetischen Eigenschaften des Elektrons Ergebnisse, die sich im Rahmen der bislang entwickelten Vorstellungen über den Einfluß von Magnetfeldern auf Elektronen nicht ohne weiteres verstehen lassen. Ein Atomstrahl wird, wie das Abb. 453 schematisch zeigt, durch ein inhomogenes Magnetfeld \mathfrak{H} geführt, in dem die magnetischen Momente $\vec{\mu}$ der einzelnen Atome die Wechselwirkungsenergie

$$E = -\vec{\mu} \mathfrak{H} \quad (1)$$

besitzen. Diese magnetischen Momente werden praktisch durch die Elektronen allein bestimmt, da die Momente der einige tausendmal schwereren Kerne wegen $\mu \sim 1/m$ in diesem Zusammenhang vernachlässigt werden können. Speziell beim Wasserstoffatom ist $\vec{\mu}$ gleich dem magnetischen Moment des Wasserstoffelektrons.

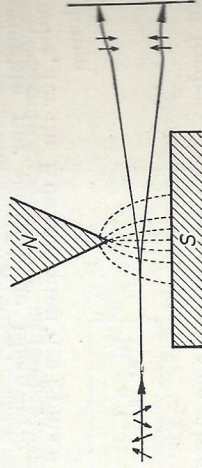


Abb. 453. STERN-GERLACH-Versuch. Aufspaltung eines Atomstrahls im inhomogenen Magnetfeld. Die Pfeile längs des Atomstrahls charakterisieren die magnetischen Momente der einzelnen Atome

Während ein homogenes Magnetfeld auf einen magnetischen Dipol keine Kraft, sondern lediglich ein Drehmoment ausübt, wirkt auf den Dipol im inhomogenen Felde \mathfrak{H} eine Kraft, und zwar je nach der Richtung von $\vec{\mu}$ in Richtung zunehmender Feldstärke oder entgegengesetzt. Die einzelnen Elektronen des Atomstrahls besitzen je nach ihrem Drehimpulszustand, der die Werte $l=0, 1, 2, \dots$ aufweisen kann, verschiedene **Orientierungsmöglichkeiten** in Richtung der Feldstärke, wobei ihre Wechselwirkungsenergie im Felde die Werte

$$E = -\frac{e\hbar}{2m} m_l \mathfrak{H} \quad m_l = -l, -l+1, \dots, +l \quad (2)$$

annimmt. m_l wird daher auch als magnetische Quantenzahl bezeichnet und kann im Drehimpulszustand l genau $2l+1$ Werte annehmen. Entsprechend sollte ein Strahl neutraler Wasserstoffatome beim STERN-GERLACH-Versuch in $2l+1$ Komponenten aufgespalten werden.

Der Grundzustand des Elektrons im Wasserstoffatom hat den Drehimpuls $l=0$. Trotzdem wird beim Versuch der Abb. 453 eine Aufspaltung in zwei Linien beobachtet, die sich nur so deuten läßt, daß das Elektron des einzelnen Wasserstoffatoms neben seinem Bahndrehimpuls \mathcal{L} noch einen als

Spin bezeichneten **Eigendrehimpuls** \hat{s} besitzen muß mit den Werten (gemessen in Einheiten \hbar)

$$m_s = \pm s \quad s = \frac{1}{2}. \quad (3)$$

Nur für $s = 1/2$ nämlich entstehen gerade zwei Orientierungsmöglichkeiten, die den Atomstrahl in die beobachteten zwei Komponenten aufspalten.

Der Zusammenhang zwischen dem Operator des Bahndrehimpulses und seinen Eigenwerten wurde in Abschnitt 432 allgemein aus den **Vertauschungsrelationen**

$$[\hat{s}_x, \hat{s}_y] = -\frac{\hbar}{i} \hat{s}_z \quad (4)$$

für die Drehimpulskomponenten abgeleitet. Sie ließen für die Eigenwerte l und m ganze und halbe Zahlen zu. Lediglich die spezielle Form $l = r \times p$ erlaubte nur ganzzahlige Eigenwerte für die Quantenzahl l . Es liegt nahe, für die Komponenten des Spins $\hat{s} = e_x \hat{s}_x + e_y \hat{s}_y + e_z \hat{s}_z$ analoge Relationen

$$[\hat{s}_x, \hat{s}_y] = -\frac{\hbar}{i} \hat{s}_z \quad (5)$$

zu fordern. Die Überlegungen von Abschnitt 432 sind dann auch für den Spindrehimpuls gültig, und die beobachteten Spinwerte $m_s = \pm 1/2$ stehen mit den dort als zulässig erkannten Drehimpulseeigenwerten für $s = 1/2$ in Einklang.

Eine genaue Untersuchung der Aufspaltung bei bekannter magnetischer Feldverteilung gestattet eine quantitative Bestimmung der magnetischen Momente. Speziell beim Wasserstoffstrahl entspricht die Aufspaltung im Magnetfeld B der Wechselwirkungsenergie

$$E = \pm \frac{e\hbar}{2m} B. \quad (6)$$

Daraus folgt mit $g_s = 2$ der Ausdruck

$$\vec{\mu}_s \equiv \frac{e}{2m} g_s \hat{s} \quad \hat{s}_z = \hbar m_s \quad m_s = \pm \frac{1}{2} \quad (7)$$

für das magnetische Spinmoment. Der Vergleich von (7) und (1) zeigt, daß beim Spin das Verhältnis von magnetischem Moment zu zugehörigem Drehimpuls doppelt so groß ist wie beim Bahnanteil. Dieses Verhältnis wird in dimensionsloser Form durch die in (7) eingeführte Größe g beschrieben, die als **gyromagnetischer Faktor** bezeichnet wird. Beim Bahndrehimpuls ist $g_l = 1$, wie aus der klassischen Elektronentheorie und auch aus der SCHRÖDINGERSchen Wellengleichung im Magnetfeld abgeleitet

wurde. Der Wert $g_s = 2$ für den Elektronenspin ergibt sich nicht aus dieser Theorie, sondern muß ihr als experimentelle Erfahrung hinzugefügt werden. Erst die relativistische DIRACSche Theorie des Elektrons liefert diesen Wert von g_s automatisch. Die Quantenelektrodynamik schließlich hat gezeigt, daß der Wert 2 nicht genau gilt, sondern durch eine Potenzreihe ersetzt werden muß:

$$g_s = 2 \left[1 + \frac{\alpha}{2\pi} - \frac{2,973}{\pi^2} \alpha^2 + \dots \right]. \quad (8)$$

Hierbei ist $\alpha \equiv e^2/\hbar c = 1/137,04$ die sogenannte SOMMERFELDSche Feinstrukturkonstante. Das Glied mit α^2 ist noch umstritten.

Eine vollständige Beschreibung des Elektrons im magnetischen Feld erfordert demnach noch die Berücksichtigung des Elektronenspins, der formal wie folgt eingeführt werden kann: Die zwei Zustände $m_s = \pm 1/2$ werden durch verschiedene **Wellenfunktionen mit zwei Komponenten** beschrieben:

$$\psi_+ = \begin{pmatrix} u \\ 0 \end{pmatrix} \quad \psi_- = \begin{pmatrix} 0 \\ v \end{pmatrix}. \quad (9)$$

Die Normierungsbedingungen für diese Wellenfunktionen lauten

$$\int dx \psi_+^\dagger \psi_+ = \int dx (u^* 0) \begin{pmatrix} u \\ 0 \end{pmatrix} = \int dx |u|^2 = 1 \\ \int dx \psi_-^\dagger \psi_- = \int dx (0 v^*) \begin{pmatrix} 0 \\ v \end{pmatrix} = \int dx |v|^2 = 1. \quad (10)$$

Hier ist also ψ^\dagger aus ψ durch Spiegelung und Übergang zum Konjugiert-Komplexen entstanden, und zur Integrationsvorschrift tritt noch die Matrixmultiplikation zwischen der einzeiligen Matrix ψ^\dagger und der einzeiligen Matrix ψ hinzu. Eine etwas andere Schreibungsform für diese Wellenfunktionen lautet:

$$\psi_\pm = \chi_\pm \varphi_\pm \quad \varphi_+ = u \quad \varphi_- = v \\ \chi_+ = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \chi_- = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (11)$$

Dabei stellen die Funktionen φ den Ortsanteil dar, und die Funktionen χ_+ und χ_- sind die sogenannten Spinfunktionen.

Der **Operator \hat{s} des Elektronenspins** sowie sein zugehöriges Moment $\vec{\mu}_s$ werden zunächst durch

$$\hat{s} = \frac{\hbar}{2} \vec{\sigma} \quad \vec{\mu}_s = \frac{e\hbar}{2m} \vec{\sigma} \quad (12)$$

mit einem dimensionslosen Operator $\vec{\sigma}$ dargestellt, dessen Komponenten unter der Voraussetzung (9) Matrizen sind. Wenn nämlich die beiden in (9)

eingeführten Funktionen ψ_+ und ψ_- Eigenfunktionen der z -Komponente σ_z des Drehimpulses sein sollen, so muß

$$\sigma_z \psi_{\pm} = \pm \psi_{\pm} \quad (13)$$

gelten. Diese Eigenschaften (13) von ψ_{\pm} sind unabhängig vom Ortsverlauf φ_{\pm} und werden von den Spinfunktionen allein in der Form

$$\sigma_z \chi_{\pm} = \pm \chi_{\pm} \quad (14)$$

erfüllt, was nur möglich ist, wenn σ_z die Matrixform

$$\sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (15)$$

besitzt. Man überzeugt sich von der Richtigkeit der Gleichungen (14) und (15) durch Ausmultiplikation der Matrizen:

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (16) \\ \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ -1 \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Die Gültigkeit von (13) ist aber notwendig, wenn gemäß (3) $m_s = \pm 1/2$ werden soll. Eine vollständige Untersuchung dieser σ -Matrizen erfolgt im nächsten Abschnitt.

Die Funktionen χ_+ und χ_- und mit ihnen auch ψ_+ und ψ_- sind normiert und zueinander orthogonal, denn es gilt

$$\chi_+^{\dagger} \chi_+ = (1 \ 0) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = 1 \quad \chi_-^{\dagger} \chi_- = (0 \ 1) \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = 1 \quad (17) \\ \chi_+^{\dagger} \chi_- = (1 \ 0) \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = 0.$$

Demnach gilt auch bei diesen erweiterten Eigenfunktionen der von (333.2) her bekannte Satz, daß Eigenfunktionen zu verschiedenen Eigenwerten, hier nämlich des Operators $\vec{\sigma}$, zueinander orthogonal sind.

454 Die σ -Matrizen

In (453.12) ist ein aus drei Matrizen bestehender Vektor $\vec{\sigma}$ eingeführt, dessen Eigenschaften nunmehr genau untersucht werden müssen. Infolge der Definitionsgleichungen (mit $g_s = 2$)

$$\hat{s} = \frac{\hbar}{2} \vec{\sigma} \quad \vec{\mu}_s = \frac{e\hbar}{2m} \vec{\sigma} \quad (1)$$

und weil für die z -Komponente $\hat{s}_z = \hbar m_s = \pm \hbar/2$ gelten muß, kann σ_z nur die Eigenwerte $+1$ und -1 besitzen, und es gilt $\sigma_z^2 = 1$. Da ferner alle

Raumrichtungen prinzipiell gleichwertig sind, muß auch $\sigma_x^2 = 1$ und $\sigma_y^2 = 1$ gelten, zusammengefaßt also

$$\sigma_x^2 = \sigma_y^2 = \sigma_z^2 = 1. \quad (2)$$

Jede der Komponenten von $\vec{\sigma}$ muß hermitisch sein, also muß $\vec{\sigma}$ die Bedingung

$$\vec{\sigma}^{\dagger} = \vec{\sigma} \quad (3)$$

erfüllen. Dabei wird unter der hermitisch konjugierten Matrix $\vec{\sigma}^{\dagger}$ die in Abschnitt 231 eingeführte Matrix verstanden, die aus $\vec{\sigma}$ hervorgeht durch Spiegelung an der Diagonalen und Übergang zu den konjugiert-komplexen Matrixelementen. Diese Bedingung ist notwendig, weil $\vec{\sigma}$ in (1) bis auf eine Konstante das magnetische Moment und damit eine beobachtbare Größe repräsentiert, deren Erwartungswerte reell sein müssen.

Da der Spinvektor \hat{s} eine Drehimpulsgröße repräsentiert, müssen zwischen seinen Komponenten die **Vertauschungsrelationen** (453.5) gelten. Wegen (1) folgt daraus für die Komponenten von $\vec{\sigma}$ die Gültigkeit der Vertauschungsrelationen

$$[\sigma_x, \sigma_y] = \sigma_x \sigma_y - \sigma_y \sigma_x = 2i \sigma_z. \quad (4)$$

Wegen (2) und (4) müssen die Komponenten von $\vec{\sigma}$ „antivertauschbar“ sein:

$$[\sigma_x, \sigma_y] = \sigma_x \sigma_y - \sigma_y \sigma_x = \sigma_x \frac{1}{2i} (\sigma_z \sigma_x - \sigma_x \sigma_z) + \frac{1}{2i} (\sigma_z \sigma_x - \sigma_x \sigma_z) \sigma_x \\ = -\frac{1}{2i} (\sigma_x^2 \sigma_z - \sigma_z \sigma_x^2) = -\frac{1}{2i} (\sigma_z - \sigma_z) = 0. \quad (5)$$

Bei Addition von (4) und (5) ergeben sich für die σ -Matrizen zusammenfassend die etwas einfacheren Eigenschaften

$$\boxed{\sigma_x \sigma_y = -\sigma_y \sigma_x = i \sigma_z \quad \sigma_x^2 = 1 \quad \sigma_x^{\dagger} = \sigma_x} \quad (6)$$

sowie entsprechende Gleichungen, bei denen x , y und z zyklisch vertauscht sind.

Grundsätzlich können für die Beschreibung des Spins Matrizen mit beliebigen Komponenten gewählt werden, wenn sie nur die Bedingungen (6) erfüllen. Erst die Forderung, daß ψ_+ und ψ_- wie in (453.13) dargestellt, Eigenfunktionen der z -Komponente des Spins werden sollen, legt für die Matrix σ_z eine spezielle **Komponentendarstellung**, nämlich (453.15) fest. Die zu dieser Komponentendarstellung gehörigen Matrizen σ_x und σ_y sollen berechnet werden.

Zunächst wird für σ_x der Ansatz

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} \quad \sigma_x^{\dagger} = \begin{pmatrix} a^* & c^* \\ b^* & d^* \end{pmatrix} \quad (7)$$