

2. Quantentheorie

In der Quantentheorie verlangen wir zur Erreichung endlicher Selbstenergie, daß die Operatoren in der „richtigen“² Reihenfolge $\bar{\psi} \psi \psi \psi$ stehen.

Wegen

$$\frac{\partial}{\partial x_\nu} [\bar{\psi} \gamma_\nu \psi]_m = \frac{i e}{2} \bar{\psi} [A_m^{\text{av.}} + A_m^{\text{ret.}}] \psi,$$

was sich mit (7) leicht beweist, sieht man Gl. (13) unmittelbar an, daß im zweiten Integral von (13) die „richtige“ Reihenfolge nicht zu $\frac{\delta G}{\delta \sigma} = 0$ führt. Wir können den Vektor (13) aber so umformen, daß sich diese Forderung erfüllen läßt.

Zunächst ist

$$\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\sigma} = \int_{\sigma}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} - \int_{\sigma}^{\infty} \int_{\sigma}^{\infty}.$$

Der Integrand ist (nur klassisch!) antisymmetrisch in den Variablen x_1 und x_2 . Für einen solchen Integranden aber wird

$$\int_{\sigma}^{\infty} \int_{\sigma}^{\infty} J(x_1, x_2) dx_1 dx_2 = - \int_{\sigma}^{\infty} \int_{\sigma}^{\infty} J(x_2, x_1) dx_2 dx_1 = 0.$$

Daher wird aus (13):

$$G_m(\sigma) = \int_{\sigma}^{\infty} \bar{\psi} \gamma_\nu \psi]_m d\sigma_\nu + \frac{1}{2} \int_{\sigma}^{\infty} i_\nu(x_1) [A_{\nu|m}^{\text{av.}}(x_1) + A_{\nu|m}^{\text{ret.}}(x_1)] dx_1. \quad (14)$$

Ebenso kann man einen entsprechenden Vektor mit

$- \int_{-\infty}^{\sigma}$ statt $+ \int_{\sigma}^{\infty}$ herleiten. Die symmetrische Form ist dann

$$G_m(\sigma) = \int_{\sigma}^{\infty} \bar{\psi} \gamma_\nu \psi]_m d\sigma_\nu + \frac{1}{4} \left\{ \int_{\sigma}^{\infty} - \int_{-\infty}^{\sigma} \right\} [A_{\nu|m}^{\text{av.}} + A_{\nu|m}^{\text{ret.}}] j_\nu(x) dx. \quad (15)$$

Diese Form ist für die Quantentheorie brauchbar. Man schreibt nämlich hierfür:

$$G_m(\sigma) = \int_{\sigma}^{\infty} \bar{\psi} \gamma_\nu \psi]_m d\sigma_\nu + \frac{i e}{4} \left\{ \int_{\sigma}^{\infty} - \int_{-\infty}^{\sigma} \right\} \bar{\psi}(x) \gamma_\nu [A_{\nu|m}^{\text{av.}} + A_{\nu|m}^{\text{ret.}}] \psi(x) dx. \quad (16)$$

Dieser Operator liefert die verlangte verschwindende Selbstenergie. Wendet man ihn nämlich auf den Zustand Φ_1 („ein Elektron“) an, so wird wegen (1):

$$G_m(\sigma) \Phi_1 = \int_{\sigma}^{\infty} \bar{\psi}_0 \gamma_\nu \psi_0]_m d\sigma_\nu \Phi_1;$$

die Wechselwirkung mit dem Felde A_ν ist also nicht mehr enthalten.

Ich bin Hrn. Prof. Dr. Ludwig für die Anregung zu dieser Arbeit und zahlreiche fruchtbare und klärende Diskussionen sowie für die Ermöglichung dieser und damit zusammenhängender weiterer Untersuchungen zu besonderem Dank verpflichtet. Ich danke auch Hrn. G. Süssmann für kritische Bemerkungen und manchen Hinweis.

Über die Möglichkeit von Spinmodellen

Von FRITZ BOPP und RUDOLF HAAG*

Aus dem Institut für theoretische Physik der Universität München

(Z. Naturforschg. 5 a, 644—653 [1950]; eingegangen am 1. Dezember 1950)

Es wird gezeigt, daß sich die Zustände des Spins in völliger Analogie zu denen anderer quantenmechanischer Größen durch stetige Eigenfunktionen gewisser Differentialoperatoren beschreiben lassen. Während die Kugelfunktionen mit halbzahligem Index hierfür bekanntlich wegen ihrer Transformationseigenschaften nicht in Frage kommen, besitzt bereits der Schrödingersche Drehimpulsoperator des Zweikörperproblems (echte) Eigenfunktionen zu halbzahligen Eigenwerten. Das Modell von Goudsmit-Uhlenbeck und das feldmechanische Modell des Spins werden unter diesem neuen Gesichtspunkt diskutiert.

Es ist eine weitverbreitete Ansicht, der Spin der Elementarteilchen sei grundsätzlich modellfremd, d. h. ein Phänomen, das im Bereich der klassischen Physik kein Analogon besitzt. Diese Meinung hat ihren Ursprung darin, daß der Schrödingersche Drehimpulsoperator nur ganzzahlige Eigenwerte liefert.

Die gelegentlich unternommenen Versuche, die Kugelfunktionen mit halbzahligem Index zur Darstellung des Spin-Phänomens heranzuziehen, sind gescheitert, und es schien, daß man zur Wiedergabe der halb-

* Vorgetragen auf der Tagung des Verbandes deutscher physikalischer Gesellschaften, Bad Nauheim, Oktober 1950.



Dieses Werk wurde im Jahr 2013 vom Verlag Zeitschrift für Naturforschung in Zusammenarbeit mit der Max-Planck-Gesellschaft zur Förderung der Wissenschaften e.V. digitalisiert und unter folgender Lizenz veröffentlicht: Creative Commons Namensnennung-Keine Bearbeitung 3.0 Deutschland Lizenz.

Zum 01.01.2015 ist eine Anpassung der Lizenzbedingungen (Entfall der Creative Commons Lizenzbedingung „Keine Bearbeitung“) beabsichtigt, um eine Nachnutzung auch im Rahmen zukünftiger wissenschaftlicher Nutzungsformen zu ermöglichen.

This work has been digitized and published in 2013 by Verlag Zeitschrift für Naturforschung in cooperation with the Max Planck Society for the Advancement of Science under a Creative Commons Attribution-NoDerivs 3.0 Germany License.

On 01.01.2015 it is planned to change the License Conditions (the removal of the Creative Commons License condition "no derivative works"). This is to allow reuse in the area of future scientific usage.

zahligen Darstellungen der Drehgruppe notwendig auf Matrixoperatoren in einem diskreten „Spinraum“ zurückgreifen müsse.

Nun haben Hönl und Papapetrou¹ schon 1939 ein klassisches Modell angegeben, das bis in feine Einzelheiten das Verhalten des Dirac-Elektrons wiedergibt; es läßt sich zeigen, daß eine konsequent durchgeführte Feldtheorie zwangsläufig auf dieses Modell führt und daß die in der Hamilton-Funktion auftretenden Größen Poisson-Klammer-Relationen erfüllen, die genau identisch sind mit den Vertauschungsrelationen, die Bhabha, Madhavarao u. a.² durch Verallgemeinerung der Dirac-Gleichung auf Elementarteilchen mit beliebigem Spin gewonnen haben³. Wenn man die Zuordnung von Vertauschungsrelationen zu den klassischen Poisson-Klammern im Auge hat, so ist also die Korrespondenz hier genau so eng wie an irgendeiner anderen Stelle. Allerdings könnte man beim Spin im Zweifel sein, ob man mit dieser Zuordnung sich nicht gerade über die wesentliche Schwierigkeit hinwegtäuscht. Denn wir wissen: solange man nur die Vertauschungsrelationen der Drehimpulsoperatoren betrachtet, sind halbzahlige Eigenwerte durchaus zugelassen. Erst die Wiedergabe des Drehimpulses durch die Operatoren $\frac{\hbar}{i} \mathbf{r} \times \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}}$ schließt sie aus.

Wir wollen nun zeigen, daß die Vertauschungsrelationen nicht allgemeiner sind als ihre Realisierung durch geeignete Differentialoperatoren in einem Vektorraum. Speziell wird in § 1 gezeigt, daß schon der gewöhnliche Drehimpulsoperator des Schrödinger-schen 2-Körperproblems reguläre Eigenfunktionen zu halbzahligen Eigenwerten besitzt. Allerdings läßt die Schrödinger-Gleichung des Mehrkörperproblems trotzdem keine regulären Lösungen dieser Art zu, obgleich der Hamilton-Operator mit dem Drehimpuls vertauschbar ist (§ 2). In § 3 werden unter den gewonnenen Gesichtspunkten einige spezielle Modelle diskutiert.

§ 1. Drehimpulseigenfunktionen zu halbzahligen Eigenwerten

Wir betrachten n unabhängige Vektoren im dreidimensionalen Raum — eine bestimmte physikalische Vorstellung wollen wir vorerst nicht damit verbinden — und untersuchen den Drehimpulsoperator im

¹ H. Hönl u. A. Papapetrou, Z. Physik **112**, 512 [1939].

² s. z. B. H. Bhabha, Rev. mod. Physics **17**, 200 [1945]; für weitere Zitate vgl. Anm. 3.

Konfigurationsraum

$$\mathfrak{M} = -i \left(\mathbf{r}_1 \times \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_1} + \mathbf{r}_2 \times \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_2} + \dots + \mathbf{r}_n \times \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_n} \right). \quad (1)$$

Seine Komponenten genügen für beliebiges n denselben Vertauschungsrelationen:

$$[M_x, M_y] = i M_z \quad (2)$$

und zyklisch weiter.

Trotzdem stellt der Operator für $n > 1$ eine Verallgemeinerung dar gegenüber dem einfachen Drehimpulsoperator ($n = 1$). Denn die Zahl der *unabhängigen* Invarianten gegen die durch (1) definierten infinitesimalen Transformationen (Beträge und Skalarprodukte der Vektoren \mathbf{r}_i) ist für $n > 1$ gleich $3n - 3$;

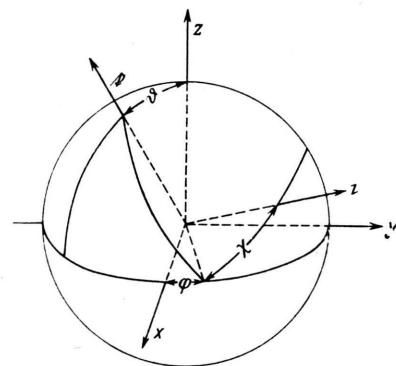


Abb. 1.

für $n = 1$ dagegen 1. Führt man diese Invarianten als Koordinaten ein, so fallen sie ganz aus dem Drehimpulsoperator heraus. Für $n > 1$ bleiben 3 Koordinaten übrig, etwa die Eulerschen Winkel eines Dreibeins, das durch die Vektoren \mathbf{r}_i in geeigneter Weise definiert wird. Für $n = 1$ enthält der Drehimpulsoperator die *zwei* Kugelflächenkoordinaten ϑ, φ .

Zunächst erkennt man, daß nichts an Allgemeinheit gewonnen wird, wenn man $n > 2$ wählt. Wir beschränken uns daher auf 2 Vektoren. Als ihre Koordinaten wählen wir die beiden Beträge r_1, r_2 , den Winkel γ zwischen den Vektoren und in üblicher Weise (s. Abb. 1) die 3 Eulerschen Winkel ϑ, φ, χ eines Dreibeins (i, j, f), das in bestimmter Weise (s. Anhang) mit den beiden Vektoren $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2$ verbunden ist.

Die bekannte Umrechnung von (1) auf ϑ, φ, χ ergibt⁴

³ F. Bopp u. F. L. Bauer, Z. Naturforschg. **4a**, 611 [1949] (im folgenden als A zitiert).

⁴ s. z. B. A. Sommerfeld, Atombau und Spektrallinien, Braunschweig 1944.

$$\begin{aligned} m &= M_x + i M_y \\ &= e^{i\varphi} \left[-i \frac{\partial}{\partial \vartheta} + \operatorname{ctg} \vartheta \frac{\partial}{\partial \varphi} - \frac{1}{\sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \chi} \right], \quad (3) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} m^+ &= M_x - i M_y \\ &= e^{-i\varphi} \left[-i \frac{\partial}{\partial \vartheta} - \operatorname{ctg} \vartheta \frac{\partial}{\partial \varphi} + \frac{1}{\sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \chi} \right], \end{aligned}$$

$$M_z = -i \frac{\partial}{\partial \varphi}, \quad (4)$$

$$\begin{aligned} M^2 &= M_x^2 + M_y^2 + M_z^2 \\ &= -\frac{\partial^2}{\partial \vartheta^2} - \operatorname{ctg} \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} - \frac{1}{\sin^2 \vartheta} \left(\frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \frac{\partial^2}{\partial \chi^2} \right) \\ &\quad + \frac{2 \operatorname{ctg} \vartheta}{\sin \vartheta} \frac{\partial^2}{\partial \chi \partial \varphi}. \quad (5) \end{aligned}$$

Wir wollen nun die Eigenfunktionen dieser Operatoren untersuchen.

Unter einem *irreduziblen Eigenfunktionssatz* der Operatoren eines Lie'schen Rings⁵ versteht man eine (endliche) Anzahl von Funktionen, die durch die Operatoren des Rings linear in sich transformiert werden und aus denen sich durch Linearkombination keine kleinere Anzahl von Funktionen gewinnen läßt, die dieselbe Eigenschaft haben. Zu ihrer Bestimmung kann man — wie im Fall der Kugelfunktionen — von der Bemerkung ausgehen, daß M^2 mit allen Operatoren des Rings vertauschbar ist. Daher müssen bekanntlich alle Funktionen eines solchen Satzes Eigenfunktionen im engeren Sinn⁶ von M^2 sein, die zum gleichen Eigenwert gehören. Das Eigenwertproblem

$$M^2 \psi = \lambda \psi \quad (6)$$

ist nun ebenfalls schon früher diskutiert worden. Die Schrödinger-Gleichung des Kugelkreisels ist damit äquivalent. Der Separationsansatz

$$\psi = e^{i(\mu \varphi + \nu \chi)} \Phi(\vartheta) \quad (7)$$

⁵ Eine Anzahl von Differentialoperatoren 1. Ordnung X_α bildet einen Lie'schen Ring, wenn der Kommutator je zweier von ihnen wieder eine Linearkombination der Operatoren ist: $[X_\alpha, X_\beta] = \sum c_\gamma^{\alpha\beta} X_\gamma$. Die Bedeutung eines solchen Lie'schen Rings ist, daß seine Operatoren als infinitesimale Transformationen einer Gruppe aufgefaßt werden können.

⁶ Wir werden im folgenden öfters nebeneinander die soeben definierten Eigenfunktionssätze eines Lie'schen Rings und die gewöhnlichen Eigenfunktionen eines einzelnen Operators betrachten. Wir nennen die letzteren daher Eigenfunktionen im engeren Sinn.

führt auf die verallgemeinerte hypergeometrische Differentialgleichung in $z = \sin^2 \vartheta/2$:

$$\begin{aligned} z(1-z) \frac{d^2 \Phi}{dz^2} + (1-2z) \frac{d\Phi}{dz} \\ + \left(\frac{\mu\nu}{z} - \frac{(\mu+\nu)^2}{4z(1-z)} + \lambda \right) \Phi = 0. \quad (8) \end{aligned}$$

Man erhält die Lösungen

$$\Phi = z^{m_2} (1-z)^{m_1} {}_2F_1(m_1 + m_2 - j, m_1 + m_2 + j + 1; 1 + 2m_2; z) \quad (9)$$

mit

$$m_1 = \left| \frac{\mu + \nu}{2} \right|; \quad m_2 = \left| \frac{\mu - \nu}{2} \right|; \quad j(j+1) = \lambda.$$

Die Funktionen sind regulär, wenn

$$m_1 + m_2 - j = 0, -1, -2 \dots \quad (10)$$

Dann bricht die hypergeometrische Reihe ab und führt auf die Jacobischen Polynome. Die Bedingung (10) bedeutet, daß die Beträge von μ und ν beide kleiner oder gleich j sein müssen, und daß die Differenz zwischen j und der absolut größeren der beiden ganzzahlig sein muß. Fordert man außer der Regularität der Funktionen auch noch ihre Eindeutigkeit, so werden μ , ν und j auf ganze Zahlen beschränkt.

Nun hat man aber bereits früher darauf hingewiesen, daß zweideutige Wellenfunktionen in der Quantenmechanik durchaus sinnvoll sein können, da alle physikalischen Aussagen an quadratische Ausdrücke gebunden sind, bei denen eine Unbestimmtheit des Vorzeichens von ψ nichts ändert. Damit wären zunächst auch halbzahlig Werte von μ , ν und j möglich. Betrachtet man jedoch die Transformationseigenschaften der Funktionen bei Anwendung des Drehimpulsoperators, so werden die Möglichkeiten weiter eingeschränkt durch die Forderung, daß auch dabei keine Funktionen mit Unendlichkeitsstellen entstehen dürfen. Zum Beispiel werden hierdurch im Fall der Kugelfunktionen — die aus den allgemeinen Lösungen (7) durch die Spezialisierung $\nu = 0$ hervorgehen — die zu halbzahligem μ und j gehörigen ausgeschlossen. Allgemein findet man für die zulässigen Funktionen die Bedingung, daß μ , ν und j zugleich ganz oder halbganz sein müssen.

Wir wollen nun die letzten Ergebnisse ableiten mit einer Methode, die unmittelbar von der Definition der Eigenfunktionssätze ausgeht. Dabei wird sich insbesondere zeigen, daß diese Definition bereits zu ihrer Bestimmung ausreicht, ohne daß man von den Funktionen Regularität oder Ein- bzw. Zweideutig-

keit verlangen müßte. Diese Eigenschaften ergeben sich von selbst.

Zunächst ist klar, daß wir die Funktionen eines Satzes als Eigenfunktionen im engeren Sinn⁶ einer maximalen Anzahl miteinander vertauschbarer Operatoren des Lie'schen Ringes ansetzen können. Die Eigenwerte dieser Operatoren numerieren dann die Funktionen des Satzes. In unserem Fall können wir etwa M_z diagonal wählen und setzen an

$$\psi_\mu = e^{i\mu\varphi} \Phi_\mu(\vartheta, \chi). \quad (11)$$

Anwendung von m und m^+ liefert

$$\begin{aligned} m, \psi_\mu &= e^{i(\mu+1)\varphi} \left[-i \frac{\partial}{\partial \vartheta} + i\mu \operatorname{ctg} \vartheta - \frac{1}{\sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \chi} \right], \Phi_\mu, \\ m^+, \psi_\mu &= e^{i(\mu-1)\varphi} \left[-i \frac{\partial}{\partial \vartheta} - i\mu \operatorname{ctg} \vartheta + \frac{1}{\sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \chi} \right], \Phi_\mu. \end{aligned} \quad (12)$$

Nun müssen die rechten Seiten der Gln. (12) wieder die Form $\sum_\mu A_\mu \psi_\mu$ haben. Daher kann man schließen

$$\begin{aligned} m, \psi_\mu &= a_\mu \psi_{\mu+1}, \\ m^+, \psi_\mu &= b_{\mu-1} \psi_{\mu-1}. \end{aligned} \quad (13)$$

Mit Rücksicht auf

$$[m^+, m] = -2 M_z \quad (14)$$

folgt also aus (13)

$$a_\mu b_\mu - a_{\mu-1} b_{\mu-1} = -2\mu. \quad (15)$$

Wir machen nun davon Gebrauch, daß der Funktionssatz nur eine endliche Anzahl von Funktionen enthalten soll. Es muß also zwei Zahlen j' und j'' geben, so daß

$$m, \psi_{j'} = 0 \quad m^+, \psi_{j''} = 0 \quad (16)$$

ist.

Dies ist formal gleichwertig mit der Festsetzung

$$a_{j'} = 0; \quad b_{j''-1} = 0. \quad (16a)$$

Ausgehend von der zweiten Randbedingung erhält man aus der Rekursionsformel (15)

$$a_{j''+n} b_{j''+n} = -(n+1)(2j''+n). \quad (17)$$

Die andere Randbedingung (für $n = j' - j''$) liefert damit

$$j' + j'' = 0. \quad (18)$$

Da die Differenz ganzzahlig sein muß, ist also

$$j \equiv j' = -j'' \quad (19)$$

eine ganze oder halbganze Zahl.

Zur Bestimmung der Funktionen gehen wir von (16) aus. Die Gln. haben bei Berücksichtigung von (11) das allgemeine Integral

$$\begin{aligned} \Phi_j &= f_1 \left(e^{iz} \operatorname{ctg} \frac{\vartheta}{2} \right) \cdot \sin^j \vartheta, \\ \Phi_{-j} &= f_2 \left(e^{iz} \operatorname{tg} \frac{\vartheta}{2} \right) \cdot \sin^j \vartheta. \end{aligned} \quad (20)$$

Die zunächst willkürlichen Funktionen f_1 und f_2 bestimmen sich daraus, daß nach $(2j)$ -facher Transformation von Φ_{-j} mittels m die Funktion Φ_j entstehen muß. Denken wir uns f_1 und f_2 als Potenzreihe entwickelt, so muß — da der Operator m die Funktionen $e^{iv\chi}$ nicht ändert — nach der Transformation jedes Glied von f_1 in das entsprechende Glied von f_2 übergehen. Wir können uns also ohne Einschränkung der Allgemeinheit auf Potenzfunktionen beschränken:

$$\Phi_{-j} = e^{iv\chi} \sin^{(j+v)} \left(\frac{\vartheta}{2} \right) \cos^{(j-v)} \left(\frac{\vartheta}{2} \right). \quad (21)$$

Setzen wir zur Abkürzung

$$u(a, \beta, \mu, v; \vartheta) = e^{i(\mu\varphi + v\chi)} \sin^a \left(\frac{\vartheta}{2} \right) \cos^\beta \left(\frac{\vartheta}{2} \right), \quad (22)$$

so gilt

$$\begin{aligned} m, u(a, \beta, \mu, v; \vartheta) &= \frac{a+v-\mu}{2i} u(a-1, \beta+1, \mu+1, v; \vartheta) \\ &\quad - \frac{\beta-v-\mu}{2i} u(a+1, \beta-1, \mu+1, v; \vartheta). \end{aligned} \quad (23)$$

Durch n -fache Anwendung des Operators m entstehen aus

$$\psi_{-j} = u(j+v, j-v, -j, v; \vartheta)$$

Linearkombinationen der Funktionen

$$u(j+v-n+2k, j-v+n-2k, -j+n, v; \vartheta), \quad (24)$$

wobei k alle Werte $0, 1, \dots, n$ annimmt. Für $n = 2j$ muß darunter nach (20) die Funktion

$$\psi_j = u(j-v, j+v, j, v; \vartheta)$$

enthalten sein. Dies liefert

$$v-j+2k'=j-v, \quad 3j-v-2k'=j+v.$$

Beide Bedingungen sind erfüllt für

$$k'=j-v.$$

Da k' aber eine positive ganze Zahl zwischen 0 und $2j$ ist, muß also v zugleich mit j ganz- oder halbzahlig sein und

$$|v| \leq j. \quad (25)$$

Der Ansatz führt mit jedem v , das den eben formulierten Bedingungen genügt, zu einem Funktionssatz *regulärer* Funktionen.

Beweis: Aus der Transformationsformel (23) liest man ab, daß durch wiederholte Anwendung von m auf $u(a, \beta, \mu, v; \vartheta)$ Polynome entstehen, deren Koeffizienten die Form

$$(-i)^{\mu} \cdot a(a-1)(a-2)\dots b(b-1)(b-2)\dots$$

haben mit

$$a = \frac{a + v - \mu}{2}; \quad b = \frac{\beta - v - \mu}{2}.$$

Sind für die Ausgangsfunktion a und b positiv ganzzahlig, so können also aus ihnen durch Transformation mit m keine Funktionen erzeugt werden, die zu negativen a - und b -Werten gehören. Diese Bedingung ist aber für Φ_{-j} erfüllt ($a = j + v; b = j - v$). Würde nun durch mehrmalige Transformation mit m aus Φ_{-j} eine singuläre Funktion (negatives a oder β) erzeugt werden, so müßte für die vorhergehende a oder β verschwinden, d. h. es müßte nach (24)

entweder für ($a = 0$): $j + v - n + 2k = 0$;

oder für ($\beta = 0$): $j - v + n - 2k = 0$;

gelten.

Da $\mu = n - j$ ist, folgt im ersten Fall $a = -k \leq 0$, im zweiten $b = k - n \leq 0$.

Eigenfunktionen zu $j = 1$

v	1	0	-1
$\mu = 1$	$-\cos^2 \frac{\vartheta}{2}$	$\sqrt{2} \sin \frac{\vartheta}{2} \cos \frac{\vartheta}{2}$	$-\sin^2 \frac{\vartheta}{2}$
$\mu = 0$	$i\sqrt{2} \sin \frac{\vartheta}{2} \cos \frac{\vartheta}{2}$	$i \left(\cos^2 \frac{\vartheta}{2} - \sin^2 \frac{\vartheta}{2} \right)$	$-i\sqrt{2} \sin \frac{\vartheta}{2} \cos \frac{\vartheta}{2}$
$\mu = -1$	$\sin^2 \frac{\vartheta}{2}$	$\sqrt{2} \sin \frac{\vartheta}{2} \cos \frac{\vartheta}{2}$	$\cos^2 \frac{\vartheta}{2}$

Diese Matrixschemata von Funktionen sind genau identisch mit dem allgemeinen Element der Darstellungen $D_{1/2}$ und D_1 der Drehgruppe, wenn man ϑ, φ, χ als Parameter der Drehung deutet⁷. Dies war nach allgemeinen gruppentheoretischen Sätzen von vornherein zu erwarten, denn die einzelnen Matrixelemente der irreduziblen Darstellungen einer Gruppe bilden als Funktion der Gruppenparameter stets ein

⁷ s. z. B. E. F u e s s, Einführung in die Quantenmechanik, Leipzig 1935, S. 234 und S. 264.

Also können nach dem obigen keine singulären Funktionen auftreten.

Die Bedingungen $a, b \geq 0$ liefern für die wirklich auftretenden Funktionen in (24) die Einschränkung

$$j + v - n + k \geq 0 \quad \text{und} \quad j - v - k \geq 0$$

oder

$$n - v - j \leq k \leq j - v. \quad (26)$$

Für $n = 2j$ gibt es speziell nur ein einziges, mit diesen Ungleichungen verträgliches k , nämlich $k = j - v$. Es ist also

$$\Phi_j = n(j - v, j + v, j, v; \vartheta)$$

in Übereinstimmung mit (20).

Damit sind alle eingangs erwähnten Eigenschaften des Funktionssatzes aufgewiesen.

Wir wollen die zu $j = 1/2$ und $j = 1$ gehörenden Eigenfunktionen explizit anschreiben. Sie lauten bei geeigneter Normierung, wenn wir der besseren Übersicht wegen den Faktor $e^{i(\mu\varphi + v\chi)}$ weglassen:

Eigenfunktionen zu $j = 1/2$

v	1/2	-1/2
$\mu = 1/2$	$i \cos \frac{\vartheta}{2}$	$-i \sin \frac{\vartheta}{2}$
$\mu = -1/2$	$\sin \frac{\vartheta}{2}$	$\cos \frac{\vartheta}{2}$

vollständiges orthogonales Funktionensystem, wobei sich bei einer Transformation dieser Funktionen durch die Elemente der Gruppe jeweils die Spalten⁸ der einzelnen irreduziblen Darstellungsmatrizen in sich transformieren. Durch diese Beziehungen zwischen Gruppentheorie und Analysis werden zwei Punkte beleuchtet, die hier an einem Spezialfall ausführlich

⁸ Selbstverständlich sind die Spalten nicht ausgezeichnet. Man kann durch eine Ähnlichkeitstransformation z. B. die Rolle der Spalten und Zeilen vertauschen.

diskutiert wurden. Erstens: Wenn wir die Operatoren eines Lie'schen Rings (d. h. die infinitesimalen Transformationen einer abstrakten Gruppe) als Differentialoperatoren im Gruppenraum selbst⁹ darstellen, so entspricht dies genau einer Übertragung des — bei endlichen Gruppen geläufigen Begriffs der „regulären Darstellung“ auf kontinuierliche Gruppen. Unser Verfahren zur Bestimmung der irreduziblen Eigenfunktionssätze des Lie'schen Rings ist also genau analog der Ausreduktion der regulären Darstellung einer endlichen Gruppe. Von der regulären Darstellung ist aber bekannt, daß sie sämtliche irreduziblen Darstellungen der Gruppe enthält. Dagegen erschöpft der einfache Drehimpulsoperator $-i\mathbf{r} \times \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}}$ noch nicht die volle Parameterzahl der Drehgruppe. Dies ist der Grund, weshalb bei den Kugelfunktionen nicht sämtliche Darstellungen der Drehgruppe auftreten.

Der zweite Punkt betrifft die oben schon betonte Bemerkung, daß wir bei der Bestimmung des Eigenfunktionssatzes ohne Regularitätsforderung auskamen. Auch dies ist kein Zufall. Man könnte es, grob gesprochen, so ausdrücken: ein Lie'scher Ring schafft sich seinen Hilbert-Raum selbst. Dies ist insofern von Interesse, als die genaue Formulierung der Bedingungen, denen die Eigenfunktionen genügen sollen, gelegentlich Schwierigkeiten macht. Es zeigt sich auch hier, wie sehr die algebraische Methode dem Wesen der Quantenphysik angemessen ist.

§ 2. Die Lösungen des Schrödinger-schen Zweikörperproblems

Der Hamilton-Operator mehrerer Teilchen in einem Zentralfeld ist bekanntlich mit den Drehimpulskomponenten (l) und mit M^2 vertauschbar. Wir wissen aber nun, daß diese Operatoren Eigenfunktionen zu halbzahligen Eigenwerten besitzen. Damit drängen sich zwei Fragen auf. Erstens: Erzwingen die experimentellen Erfahrungen trotzdem die Einführung des Spins als innerem Freiheitsgrad des Elektrons? Zweitens: Besitzt auch schon die Schrödinger-Gleichung des Mehrteilchenproblems Lösungen zu halbzahligem Drehimpuls, die seither nicht beachtet wurden?

Die zweite Frage ist rein mathematischer Natur und wird weiter unten negativ beantwortet werden. In bezug auf die erste lehrt der Stern-Gerlach-Versuch, daß z. B. das freie Wasserstoffatom den Drehimpuls $1/2$ haben muß. Da die Schwerpunktslage für

⁹ Der Raum, dessen Punkte den Gruppenelementen eindeutig zugeordnet werden können.

das Problem un wesentlich ist, so haben wir — wenn wir von inneren Freiheitsgraden der Elementarteilchen absehen — nur einen Vektor (die Relativkoordinaten), der in das Problem eingeht, und können daher nach obigem auf keine halbzahligen Drehimpulse kommen. Noch direkter wird die Existenz des Spins durch Polarisationsversuche freier Elementarteilchen bewiesen, die allerdings im Fall des Elektrons anscheinend noch nicht zu einem klaren Ergebnis geführt haben.

Wir wollen nun den Beweis dafür nachtragen, daß die Schrödinger-Gleichung keine regulären Lösungen zu halbzahligem Drehimpuls zuläßt. Wir betrachten den Fall zweier Teilchen im gemeinsamen Zentralfeld, der Einfachheit halber ohne gegenseitige Wechselwirkung¹⁰

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{1}{r_1^2} \left(\frac{\partial}{\partial r_1} r_1^2 \frac{\partial}{\partial r_1} - M_1^2 \right) + \frac{1}{r_2^2} \left(\frac{\partial}{\partial r_2} r_2^2 \frac{\partial}{\partial r_2} - M_2^2 \right) \right] + V(r_1) + V(r_2), \quad (27)$$

$$\mathfrak{M}_1 = -i\mathbf{r}_1 \times \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_1}; \quad \mathfrak{M}_2 = -i\mathbf{r}_2 \times \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_2}.$$

Hier sind H , M_1^2 und M_2^2 untereinander vertauschbar. Bezeichnen wir die (endlich vielen) Eigenfunktionen von H zu irgendeinem Eigenwert E' mit ψ_a , so können wir fordern, daß etwa die Funktionen

$$\psi_a' = M_1^2, \psi_a$$

im Hilbert-Raum definiert, d. h. quadratisch integrierbar, seien. Sonst wäre der Erwartungswert des Drehimpulses eines Teilchens nicht definiert. Unter dieser Voraussetzung folgt aber sofort aus der Vertauschbarkeit, daß sich die ψ_a so wählen lassen, daß sie gleichzeitig Eigenfunktionen von M_1^2 (und M_2^2) sind. Von diesen Operatoren wissen wir bereits, daß sie nur Eigenfunktionen zu ganzzahligem Drehimpuls besitzen, aus denen sich — durch Zusammensetzen nach den Regeln des Vektorgests — niemals halbzahlige Drehimpulse gewinnen lassen. Es macht übrigens keine Schwierigkeiten, direkt nachzuweisen, daß keine simultanen Eigenfunktionen von M_1^2 und M_2^2 im halbzahligem Fall existieren. Der Weg ist im Anhang skizziert. Die dort angegebene Methode zur Abseparation der Eigenfunktionen des Gesamtdrehimpulses könnte auch bei anderen Untersuchungen gelegentlich nützlich sein.

¹⁰ Dies ist, solange man den Einfluß der Wechselwirkung durch Störungsrechnung erfassen kann, keine Einschränkung der Allgemeingültigkeit des Beweises.

Was ist nun der Grund für den eben geschilderten Tatbestand? Wir haben schon erwähnt, daß nach allgemeinen gruppentheoretischen Sätzen die Drehimpulseigenfunktionen $\psi_{\mu\nu}^j$ ein vollständiges Orthogonalsystem bilden. Diese Aussage bezieht sich jedoch auf die Gesamtheit aller (quadratisch integrierbarer) Funktionen von ϑ, φ, χ in dem Variabilitätsbereich $0 \leq \vartheta \leq \pi, 0 \leq \varphi, \chi < 4\pi$, die wir abkürzungsweise den „Hilbert-Raum der 2-deutigen Funktionen“ nennen wollen im Gegensatz zu dem „Hilbert-Raum der eindeutigen Funktionen“, in dem der Variabilitätsbereich von φ und χ auf das Intervall zwischen 0 und 2π eingeschränkt ist. In dem letzteren bilden bereits die ganzzahligen $\psi_{\mu\nu}^j$ ein vollständiges Orthogonalsystem. Wir betonen aber, daß die Forderungen, die wir an die Elemente des Hilbert-Raums stellen, nicht willkürlich von uns gesetzt wurden, um eine Beschreibungsmöglichkeit für den Spin zu gewinnen, sondern daß sie in der Struktur der Drehgruppe verankert liegen.

Das Ergebnis dieses Paragraphen können wir damit so formulieren: Der Hamilton-Operator (27) besitzt zwar im Hilbert-Raum der eindeutigen Funktionen ein vollständiges Eigenfunktionssystem, nicht aber im Hilbert-Raum der zweideutigen Funktionen. Für das letztere wäre offenbar notwendig, daß nicht \mathfrak{M}_1 und \mathfrak{M}_2 getrennt in H eingehen, sondern nur die Kombination $\mathfrak{M} = \mathfrak{M}_1 + \mathfrak{M}_2$.

Hieran wollen wir noch eine Bemerkung anknüpfen: In der Theorie der Rotationsspektren werden die Moleküle als starre Kreisel behandelt. Der Hamilton-Operator ist im wesentlichen identisch mit dem Operator (5). Man könnte versucht sein zu glauben, daß sich hier die Existenz der halbzahligen Drehimpuls-eigenfunktionen äußern müßte. Hält man sich aber vor Augen, daß die Starrheit eine Idealisierung ist, während in Wirklichkeit ein Schrödingersches Vielkörperproblem vorliegt, so erkennt man, daß auch hier die Ausführungen dieses Paragraphen ihre Gültigkeit behalten. Die halbzahligen Drehimpulse sind ausgeschlossen, weil zu ihnen keine regulären Eigenfunktionen in den inneren Koordinaten des Moleküls gefunden werden können.

§ 3. Diskussion von Modellen

Wir wollen nun die in § 1 gewonnenen Gesichtspunkte auf zwei Modellvorstellungen anwenden, die zur Erklärung des Spinphänomens vorgeschlagen worden sind:

- a) Das Elektron als starre, geladene Kugel,
- b) das feldmechanische Modell.

Das Ziel ist dabei nicht eine Diskussion der Verdienste bzw. Unzulänglichkeiten dieser speziellen Vorstellungen oder gar eine Wiederbelebung des Goudsmit-Uhlenbeckschen Modells. Es geht uns hier nur darum, zu zeigen, daß das Phänomen des halbzahligen Spins sich bei der quantenmechanischen Behandlung der oben erwähnten Probleme ergibt ohne Zuhilfenahme von eventuell nicht ganz durchsichtigen mathematischen Kunstgriffen.

a) Das Modell von Goudsmit-Uhlenbeck. Wir betrachten die Bewegung einer geladenen Kugel vom Radius a in einem elektromagnetischen Feld. Die Verteilung von Ladung und Masse sei kugelsymmetrisch und ideal starr¹¹, im übrigen aber zunächst nicht näher spezifiziert. Denken wir uns in der Kugel ein (körperfestes) Dreibein markiert, so können wir ihre Lage im Raum charakterisieren durch den Ortsvektor r des Mittelpunkts und die Dreibeinkoordinaten ϑ, φ, χ . Kraft und Drehmoment auf das Teilchen sind gegeben durch

$$\mathfrak{R} = e \left(\mathfrak{E} + \frac{\dot{r}}{c} \times \mathfrak{H} \right) + \frac{I}{c} \operatorname{grad} (\mathfrak{w} \mathfrak{H}), \quad (28)$$

$$\begin{aligned} \mathfrak{N} &= I \operatorname{rot} \mathfrak{E} - \frac{I}{c} (\dot{r} \operatorname{grad}) \mathfrak{H} + \frac{I}{c} \mathfrak{w} \times \mathfrak{H} \\ &= \frac{I}{c} \left(\mathfrak{w} \times \mathfrak{H} - \frac{d\mathfrak{H}}{dt} \right), \end{aligned} \quad (29)$$

wenn man die äußeren Feldstärken am Ort des Schwerpunkts bis zu Gliedern 1. Ordnung entwickelt. Dabei ist \mathfrak{w} der Vektor der momentanen Winkelgeschwindigkeit und

$$I = \frac{1}{3} \int R^2 de, \quad (30)$$

wenn R den Abstand des Ladungselementes de vom Schwerpunkt bedeutet.

$m = \frac{I}{c} \mathfrak{w}$ ist das momentane magnetische Moment.

Die Lagrange-Funktion

$$\mathfrak{L} = \frac{m}{2} \dot{r}^2 - e \Phi + \frac{e}{c} (\dot{r} \mathfrak{A}) + \frac{\Theta}{2} m^2 + \frac{I}{c} (\mathfrak{w} \mathfrak{H}) \quad (31)$$

¹¹ Dies ist der wesentliche Unterschied gegenüber dem am Ende des letzten Paragraphen erwähnten Kreiselmolekül. Von der Behandlung des Problems durch H. A. Kramers (Quantentheorie des Elektrons und der Strahlung, Leipzig 1938, S. 227 ff.) unterscheidet sich unsere Betrachtung vor allem dadurch, daß dort eine einfache relativistisch invariante Erweiterung der Bewegungsgleichung eines magnetischen Dipols angestrebt wird, während wir die nichtrelativistische Mechanik des starren Kugelkreisels diskutieren.

liefert gerade die richtigen Ausdrücke für Kraft und Drehmoment¹². Daraus folgt die Hamilton-Funktion

$$H = \frac{1}{2m} \left(\mathfrak{p} - \frac{e}{c} \mathfrak{A} \right)^2 + e \Phi + \frac{\Theta}{2} \mathfrak{w}^2, \quad (32)$$

wobei \mathfrak{w}^2 noch in den Winkelimpulsen auszudrücken ist. Aus (31) und

$$\begin{aligned} w_x &= \cos \varphi \dot{\vartheta} + \sin \varphi \sin \vartheta \dot{\chi}, \\ w_y &= \sin \varphi \dot{\vartheta} - \cos \varphi \sin \vartheta \dot{\chi}, \\ w_z &= \dot{\varphi} + \cos \vartheta \dot{\chi} \end{aligned} \quad (33)$$

folgen die Winkelimpulse

$$\begin{aligned} p_\vartheta &= \Theta \dot{\vartheta} + \frac{I}{c} (\cos \varphi H_x + \sin \varphi H_y), \\ p_\varphi &= \Theta (\dot{\varphi} + \cos \vartheta \dot{\chi}) + \frac{I}{c} H_z, \\ p_\chi &= \Theta (\dot{\chi} + \cos \vartheta \dot{\varphi}) \\ &\quad + \frac{I}{c} (\sin \vartheta \sin \varphi H_x - \sin \vartheta \cos \varphi H_y - \cos \vartheta H_z). \end{aligned} \quad (34)$$

Für den Drehimpuls um den Schwerpunkt ergibt sich

$$\begin{aligned} M_x &= \cos \varphi p_\vartheta - \sin \varphi (\operatorname{ctg} \vartheta p_\varphi - \frac{1}{\sin \vartheta} p_\chi), \\ M_y &= \sin \varphi p_\vartheta + \cos \varphi (\operatorname{ctg} \vartheta p_\varphi - \frac{1}{\sin \vartheta} p_\chi), \\ M_z &= p_\varphi. \end{aligned} \quad (35)$$

Er setzt sich — ebenso wie der lineare Impuls und die Winkelimpulse (34) — zusammen aus einem kinetischen Anteil $\bar{\mathfrak{M}}$ und dem feldbedingten Anteil \mathfrak{M} . Aus (34) und (35) findet man

$$\mathfrak{M} = \bar{\mathfrak{M}} + \mathfrak{M}' = \Theta \mathfrak{w} + \frac{I}{c} \mathfrak{H}. \quad (36)$$

Damit erhält man endlich als Hamilton-Funktion

$$\begin{aligned} H &= \frac{1}{2m} \left(\mathfrak{p} - \frac{e}{c} \mathfrak{A} \right)^2 + e \Phi + \frac{1}{2\Theta} \mathfrak{M}^2 \\ &\quad - \frac{I}{c\Theta} (\mathfrak{M} \mathfrak{H}) + \frac{I^2}{2\Theta c^2} \mathfrak{H}^2. \end{aligned} \quad (37)$$

Der Übergang zum Hamilton-Operator erfolgt in gewohnter Weise, indem \mathfrak{p} und \mathfrak{M} bzw. durch die Differentialoperatoren $\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial r}$ und (5) ersetzt werden. Die Reihenfolge der Faktoren \mathfrak{M} und \mathfrak{H} ist unproble-

¹² Φ und \mathfrak{A} skalares bzw. Vektor-Potential, Θ Trägheitsmoment.

matisch, da sie vertauschbar sind. \mathfrak{M}^2 ist ein universelles Integral der Bewegung. Spezialisieren wir es auf den Eigenwert $\frac{3}{4} \hbar^2$, so führt die im Anhang geschilderte Abseparation der Winkelkoordinaten auf den Hamilton-Operator für die Schwerpunktsbewegung:

$$\begin{aligned} H &= \frac{1}{2m} \left(\mathfrak{p} - \frac{e}{c} \mathfrak{A} \right)^2 + e \Theta - \frac{\hbar I}{2c\Theta} (\vec{\sigma} \cdot \vec{\mathfrak{H}}) \\ &\quad + \frac{I^2}{2c^2\Theta} \mathfrak{H}^2 + \frac{3\hbar^2}{8\Theta}, \end{aligned} \quad (37a)$$

in dem $\vec{\sigma}$ die Pauli-Matrizen bedeuten. Das letzte Glied ist belanglos, da es nur die Energienormierung betrifft. Das zweitletzte ist zu vernachlässigen. Es ist um den Faktor $\frac{1}{137} \frac{H a^2}{e}$ kleiner als das vorhergehende (a Teilchenhalbmesser). Der Rest stimmt mit der Pauli-Gleichung überein, wenn man noch den gyromagnetischen Faktor $\eta = I/c\Theta$ gleich e/mc setzt. Wären Masse und Ladung gleichartig in der Kugel verteilt, so würde bekanntlich $\eta = e/2mc$ resultieren. Dies macht jedoch bei dem Modell keine Schwierigkeiten. Nehmen wir z. B. die ganze Ladung als Oberflächenladung, die Masse dagegen mit der Dichte $\rho \sim 1/R$ über die Kugel verteilt an, so kommt das gyromagnetische Verhältnis in Ordnung. Selbstverständlich ist diese Darstellung des gyromagnetischen Faktors nicht zu wörtlich verstehen. Doch dürfen wir wahrscheinlich aus ihr lernen, daß die gyromagnetische Anomalie auf Massenanteile hinweist, die der Ladung nicht proportional sind.

b) Das feldmechanische Modell. Es handelt sich hier um ein punktförmiges Teilchen, dessen Bewegungsgleichung jedoch infolge von Emissions-Reabsorptionsprozessen höhere Zeitableitungen enthält. Der erste über die Lorentzsche Näherung hinausgehende Schritt, der bislang allein diskutiert wurde, geht von einer Lagrange-Funktion aus, die neben der Geschwindigkeit noch die Beschleunigung enthält, und führt auf die kanonische Funktion:

$$K = g_a \left(p_a - \frac{e}{c} A_a \right) + F(g_{\alpha\beta}) \quad (38)$$

mit

$$g_a = \sqrt{s_a^{-2}} u_a; \quad g_{\alpha\beta} = u_\alpha s_\beta - u_\beta s_\alpha. \quad (39)$$

Dabei sind x_α , p_α einerseits, u_α , s_α andererseits, Paare kanonisch konjugierter Variablen. Man überzeugt sich sofort von den Poisson-Klammer-Relationen

$$\begin{aligned} \{g_a, g_\beta\} &= g_{a\beta}; \quad \{g_{a\beta}, g_\gamma\} = g_{a\gamma}; \quad \{g_{a\beta}, g_{\beta\gamma}\} \\ &= g_{a\gamma} (a \neq \gamma) \quad (40) \end{aligned}$$

(keine Summation über gleiche Indizes!).

Die übrigen Klammerausdrücke der g -Größen untereinander und natürlich auch die mit x_a oder mit p_a verschwinden. Die zu (38) korrespondierende Wellengleichung lautet

$$K, \psi = 0,$$

wobei in K die Größen $g_a, g_{a\beta}$ durch Operatoren darzustellen sind, deren Vertauschungsrelationen durch (40) vorgezeichnet werden. Sämtliche möglichen Darstellungen des Kommutatorrings (40) sind in A (siehe Anm. 3) untersucht. Jede ist durch zwei Indizes charakterisiert, die ganz oder halbganz sein müssen. Darunter befinden sich insbesondere die Darstellungen der g_a durch Dirac-Matrizen $D^{(1/2, 1/2)}$ und Kemmer-Matrizen $D(1, 1)$, bzw. $D(1, 0)$.

In unserem Zusammenhang interessiert nun die Frage: Welche Darstellungen können auftreten, wenn wir gemäß (39)

$$g_a = \frac{\hbar}{i} \sqrt{s_\mu^2} \frac{\partial}{\partial s_a}; \quad g_{a\beta} = \frac{\hbar}{i} \left(s_\beta \frac{\partial}{\partial s_a} - s_a \frac{\partial}{\partial s_\beta} \right) \quad (39 \text{ a})$$

setzen? Die Antwort erhält man, wenn man die in § 1 benutzte Methode zur Bestimmung der Eigenfunktionsätze der Drehgruppe auf den Lie'schen Ring (39 a) anwendet. Das Ergebnis: In (39 a) sind nur die Darstellungen $D(j, 0)$ enthalten (j beliebig ganzzahlig), also insbesondere nicht die Diracsche.

Nach dem Vorangehenden ist dies nicht verwunderlich, denn die 10 Operatoren (39 a) wirken in einem 4-dimensionalen Vektorraum, und wir können nicht erwarten, daß dadurch alle Darstellungsmöglichkeiten erfaßt sind. Es liegt aber die Vermutung nahe, daß diese Unvollständigkeit behoben wird, sowie man in der Lagrange-Funktion nicht nur die Beschleunigung, sondern noch höhere Zeitableitungen zuläßt, die ja in den feldmechanischen Bewegungsgleichungen wirklich vorkommen, bisher aber vernachlässigt worden sind.

A n h a n g

Wir gehen aus von dem Hamilton-Operator (27) in § 2. Da M_1^2 und M_2^2 mit $\mathfrak{M} = \mathfrak{M}_1 + \mathfrak{M}_2$ vertauschbar sind, können wir uns — wie üblich — auf bestimmte Eigenwerte μ und j von M_z und M^2 fest-

legen. Zu diesen gibt es dann noch die $(2j+1)$ möglichen Drehimpulseigenfunktionen $\psi_{\mu\nu}^j$, die durch die Eigenwerte ν unterschieden sind (die Zeilen des Matrixschemas in § 1). Der Lösungsansatz für die Schrödinger-Gleichung

$$H, \Psi = E \Psi \quad (41)$$

lautet also

$$\Psi = \sum_\nu \psi_{\mu\nu}^j (\vartheta, \varphi, \chi) \cdot F_\nu (\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \gamma).$$

Fassen wir die F_ν zu einem Funktionsvektor F zusammen, so können wir in (41) statt Ψ direkt F schreiben, wenn wir in H die Operatoren M_1^2 und M_2^2 durch die entsprechenden Matrizen ersetzen, die die Zeilen der Drehimpulseigenfunktionen transfor-

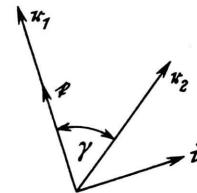


Abb. 2.

mieren. Diese Darstellung von M_1^2 und M_2^2 soll nun bestimmt werden.

Das Dreibein i, j, f sei in der folgenden Weise durch die Vektoren $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2$ definiert (Abb. 2):

f habe die Richtung von \mathbf{r}_1 ; i liege in der Ebene von $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2$; $j = f \times i$. Da im folgenden die Beträge von \mathbf{r}_1 und \mathbf{r}_2 keine Rolle spielen, wollen wir sie als Einheitsvektoren auffassen.

Die langwierigen, elementaren Rechnungen lassen sich wesentlich abkürzen durch Einführung der Operatoren M_i, M_j, M_k , die infinitesimale Drehungen um die Dreibeinachsen darstellen:

$$M_i = (i \mathfrak{M}) \text{ usw.} \quad (42)$$

Entsprechend bedeute M_{1i} die Drehung um i des Vektors \mathbf{r}_1 bei Festhalten von \mathbf{r}_2 usw.

Man kann sich zunächst überzeugen, daß M_i und M_k aus M_x und M_z hervorgehen, indem man die Winkel φ und χ vertauscht. M_j geht aus M_y durch denselben Prozeß hervor, wobei jedoch das Vorzeichen noch umgekehrt werden muß. Die Vertauschungsrelationen dieser Operatoren sind also

$$[M_i, M_j] = -i M_k \quad (43) \quad \text{Also}$$

und zyklisch weiter¹³.

Ebenso wie M_x usw. die Spalten des Matrixschemas der Drehimpulseigenfunktionen $\psi_{\mu\nu}^j$ in sich transformieren, so transformieren die M_i usw. die Zeilen dieses Schemas. Die Transformationsmatrizen sind sofort anzugeben, nämlich — bis auf das Vorzeichen von M_j — die Darstellungsmatrizen der infinitesimalen Drehungen in der Darstellung D_j . Die Kombinationen $(M_i + i M_j)$ und $(M_i - i M_j)$ besitzen nur Elemente in der oberen bzw. unteren Nebendiagonale, M_k ist diagonal. Die Matrixelemente sind:

$$\begin{aligned} (M_i + i M_j)_{r-1, r} &= \sqrt{(j+v)(j-v+1)}, \\ (M_i - i M_j)_{r+1, r} &= \sqrt{(j-v)(j+v+1)}, \\ (M_k)_{r, r} &= v. \end{aligned} \quad (44)$$

Unsere Aufgabe wird also sein, M_1^2 und M_2^2 durch die M_i , M_j , M_k auszudrücken. Dies gelingt in folgender Weise. Aus Abb. 2 liest man die Veränderungen ab, die die einzelnen Drehungen zufolge haben:

$$\begin{aligned} M_{1k} &= 0, \\ M_{2i}: \quad \delta f &= 0; \quad \delta i = -j \operatorname{ctg} \gamma; \quad \delta \gamma = 0, \\ M_{2j}: \quad \delta f &= 0; \quad \delta i = 0; \quad \delta \gamma = 1, \\ M_{2k}: \quad \delta f &= 0; \quad \delta i = j; \quad \delta \gamma = 0. \end{aligned}$$

Also

$$M_{1k} = 0, \quad M_{2j} = -i \frac{\partial}{\partial \gamma}, \quad M_{2i} + \operatorname{ctg} \gamma M_{2k} = 0.$$

Da andererseits

$$M_{1i} + M_{2i} = M_i \text{ usw.}$$

folgt

$$M_{2k} = M_k, \quad M_{1j} = M_j + i \frac{\partial}{\partial \gamma},$$

$$M_{2i} = -\operatorname{ctg} \gamma M_k, \quad M_{1i} = M_i + \operatorname{ctg} \gamma M_k.$$

$$\begin{aligned} \mathfrak{M}_1 &= i(M_i + \operatorname{ctg} \gamma M_k) + j\left((M_j + i \frac{\partial}{\partial \gamma})\right), \\ \mathfrak{M}_2 &= -i \operatorname{ctg} \gamma M_k - j i \frac{\partial}{\partial \gamma} + f M_k. \end{aligned} \quad (45)$$

Die Ausdrücke haben die Form $\Sigma n_r O_r$, wobei n_r einer der Basisvektoren i, j, f und O_r den dahinterstehenden *nicht vertauschbaren* Faktor darstellt. Bei der Quadratur dieser Ausdrücke erhält man

$$(\sum_r n_r O_r)^2 = \sum_{r,s} n_r O_r n_s O_s = \sum_r O_r^2 + \sum_{r,s} [O_r n_s] O_s.$$

Die hier auftretenden Kommutatoren sind aber leicht anzugeben. Es sind die Veränderungen der Basisvektoren durch die Drehung O_r . Stellt r einen der Indizes i, j, k dar, so ist

$$[M_r, n_s] = -i n_r \times n_s.$$

Damit ergibt die Quadratur von (45):

$$\begin{aligned} M_1^2 &= (M_i + \operatorname{ctg} \gamma M_k)^2 + \left(M_j + i \frac{\partial}{\partial \gamma}\right)^2 \\ &\quad + i \operatorname{ctg} \gamma \left(M_j + i \frac{\partial}{\partial \gamma}\right), \quad (46) \\ M_2^2 &= M_k^2 (1 + \operatorname{ctg}^2 \gamma) - \frac{\partial^2}{\partial \gamma^2} - \operatorname{ctg} \gamma \frac{\partial}{\partial \gamma}. \end{aligned}$$

¹³ Die Vorzeichenumkehr in den V.R. kommt auf folgende Weise zustande (ein Punkt bedeutet skalares Produkt, ein Strichpunkt dyadiisches Produkt):

$$\begin{aligned} [M_k, M_i] &= [f \cdot \mathfrak{M}, i \cdot \mathfrak{M}] = f \cdot [\mathfrak{M}, i \mathfrak{M}] + [f, i \mathfrak{M}] \cdot \mathfrak{M} \\ &= f; i \dots [\mathfrak{M}, \mathfrak{M}] + f \cdot [\mathfrak{M}, i] \cdot \mathfrak{M} + [f, M_i] \cdot \mathfrak{M}. \end{aligned}$$

Der erste Term liefert, wie man in Komponentenschreibweise sofort sieht, den üblichen Ausdruck $i(j \cdot \mathfrak{M}) = i M_j$. Der zweite Term gibt $[M_k, i] \cdot \mathfrak{M} = -i M_j$. Dasselbe liefert der dritte, so daß insgesamt $-i M_j$ resultiert. Da i, j, f immer mitgedreht werden, sind auch die V.R. zwischen den Größen $M_{1i} \dots M_{2k}$ gänzlich verschieden von denen der $M_{1x} \dots M_{2z}$ oder auch denen der Gl. (43). Zum Glück interessieren sie hier nicht.