

Die Pauli-Gleichung mit Differentialoperatoren für den Spin

Eberhard Kern

Z. Naturforsch. **33a**, 1133–1150 (1978); eingegangen am 1. Juli 1978*

The Pauli Equation with Differential Operators for the Spin

The spin operator $\mathbf{s} = (\hbar/2) \boldsymbol{\sigma}$ in the Pauli equation fulfills the commutation relation of the angular momentum and leads to half-integer eigenvalues of the eigenfunctions for \mathbf{s} . If one tries to express \mathbf{s} by canonically conjugated operators Φ and $\pi = (\hbar/i) \partial/\partial\Phi$ the formal angular momentum term $\mathbf{s} = \Phi \times \pi$ fails because it leads only to whole-integer eigenvalues. However, the modification of this term in the form $\mathbf{s} = \frac{1}{2} \{ \pi + \Phi(\Phi \pi) + \Phi \times \pi \}$ leads to the required result.

The eigenfunction system belonging to this differential operator $\mathbf{s}(\Phi, \pi)$ consists of $(2s + 1)$ spin eigenfunctions $\xi_m(\Phi)$ which are given explicitly. They form a basis for the wave functions of a particle of spin s . Applying this formalism to particles with $s = 1/2$, agreement is reached with Pauli's spin theory.

The function $\mathbf{s}(\Phi, \pi)$ follows from the theory of rotating rigid bodies. The continuous spin-variable $\Phi = (\Phi_x, \Phi_y, \Phi_z)$ can be interpreted classically as a "turning vector" which defines the orientation in space of a rigid body. Φ is the positioning coordinate of the rigid body or the spin coordinate of the particle in analogy to the cartesian coordinate \mathbf{x} . The spin \mathbf{s} is a vector fixed to the body.

Bezeichnungen. Vektorprodukt $\mathbf{a} \times \mathbf{b}$, Skalarprodukt $(\mathbf{a} \mathbf{b})$, Quadrat $\mathbf{a}^2 = (\mathbf{a} \mathbf{a})$, Hilbert-Raumprodukt $\langle \chi | \psi \rangle$, Poisson-Produkt $[f, g]$, Kommutationsprodukt (f, g) , Gruppenprodukt $\Phi^a \circ \Phi^b$. Indizes nehmen, wenn nichts anderes gesagt wird, die Werte x, y, z an; über zweifach auftretende Indizes wird summiert. χ^* : komplex konjugiert zu χ . Zeitableitung $\dot{\Phi} = d\Phi/dt$.

Die Bewegung eines spinlosen Teilchens im äußeren Feld — wir behandeln den nichtrelativistischen Fall — läßt sich klassisch durch eine Hamilton-Funktion, quantenmechanisch durch den korrespondierenden Differentialoperator, der auf die Ortskoordinate \mathbf{x} einer Wellenfunktion $\psi(\mathbf{x})$ wirkt, beschreiben. Versucht man, dieses Korrespondenzschema auf ein Teilchen mit Spin zu übertragen, so steht man vor dem Problem, eine kontinuierliche Spinvariable Φ für die Wellenfunktion $\psi(\mathbf{x}, \Phi)$ und einen entsprechenden Spindifferentialoperator \mathbf{s} (Drehimpulsoperator), der auf Φ wirkt, zu definieren. Üblicherweise wird die Auffassung vertreten, daß Drehimpulsoperatoren für halbzahlige Werte des Drehimpulses nicht als Differentialoperatoren im Konfigurationsraum ausgedrückt werden können, vgl. Edmonds [1] (S. 68), während das für ganzzahlige Werte des Drehimpulses — z.B. für den Bahndrehimpuls — möglich ist.

Wir werden diese Lücke schließen und beide Größen Φ, \mathbf{s} explizit angeben. Für Spin-1/2-Teilchen

stimmen die Ergebnisse des Φ -Formalismus mit denen der Paulischen Spintheorie überein, wie es sein muß. Auf Teilchen mit Spin $s > 1/2$ läßt sich der Formalismus zwanglos erweitern. Die neu auftretenden Aspekte werden diskutiert.

1. Korrespondenz für Teilchen ohne Spin

Das System eines Teilchens — zunächst ohne Spin — im äußeren Feld sei charakterisiert durch die Hamilton-Funktion $H(\mathbf{x}, \mathbf{p})$ mit $\mathbf{x} = (x, y, z)$: kartesische Ortskoordinate, $\mathbf{p} = (p_x, p_y, p_z)$: kanonischer Impuls. Um die Formeln zu vereinfachen, lassen wir in H eine explizite Zeitabhängigkeit zunächst (in den Abschnitten 1 und 2) außer Betracht. Für die weiteren Überlegungen bedeutet das keine Einschränkung der Allgemeinheit. Die beiden Korrespondenzschemata A und B in Tab. 1 sind einander äquivalent. In der rechten Spalte ist die Gl. (A.2b) für die zeitabhängige Zustandsfunktion $\psi(\mathbf{x}, t)$ das Bewegungsgesetz im Schrödinger-Bild, während das Gleichungspaar (B.3b) für die zeitabhängigen Operatoren $\mathbf{x}^H, \mathbf{p}^H$ — der Index H wird in der Tabelle fortgelassen — das Bewegungsgesetz im Heisenberg-Bild liefert.

An den Operator H hat man, ebenso wie an die beliebigen Operatoren f, g, h , zwei Forderungen zu stellen: Sie müssen hermitesch sein und sich durch Potenzreihen in \mathbf{x}, \mathbf{p} darstellen lassen. Die erste Forderung läßt sich durch geeignete Symmetrisierung der klassischen Hamilton-Funktion erfüllen. Um der zweiten Forderung zu genügen, schränken wir den Bereich der klassischen Hamilton-Funk-

* Eingang der 1. Fassung am 18. Juli 1974.

Sonderdruckerfordernungen an Dr. E. Kern, Schubertstr. 6, D-4300 Essen.



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 digitalized 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.

tionen auf analytische Funktionen ein, was für unsere Zwecke ausreichend ist. Gewisse Komplikationen, die infolge der Nichtvertauschbarkeit der Operatoren auftreten können, vgl. Fick [2], spielen für die Anwendbarkeit des Formalismus auf die Pauli-Gleichung, für die wir uns interessieren, keine Rolle. Unter diesen Voraussetzungen liefern die Schemata A und B eine im wesentlichen umkehrbar eindeutige Korrespondenz zwischen klassischer Mechanik und Quantenmechanik.

Das Korrespondenzschema B läßt sich, wie Falk [3, 4, 5] im einzelnen ausgeführt hat, in eine

algebraisch-axiomatische Form bringen, in der die im Poisson-Produkt (B.1a) auftretenden partiellen Differentialquotienten eliminiert sind: Schema C. Die Erzeugenden \mathbf{x}, \mathbf{p} definieren zusammen mit den Klammerprodukten (PP) und (KP) einen kommutativen bzw. nichtkommutativen Potenzreihenring, innerhalb derer die Bewegung des mechanischen Systems dargestellt wird.

Das Schema C ist äquivalent mit den Schemata A und B und bringt insofern nichts Neues. Es spielt aber eine besondere Rolle bei der Übertragung auf Hamilton-Funktionen für Teilchen mit Spin.

Tab. 1. Korrespondenzschemata A, B, C für Teilchen ohne Spin.

a	b	a, b
Klassische Mechanik	Quantenmechanik	
Hamilton- Funktion $H(\mathbf{x}, \mathbf{p})$	Hamilton- Operator $H(\mathbf{x}, \mathbf{p})$	
\mathbf{p} : kanonischer Impuls	$\mathbf{p} = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}}$: Differentialoperator	(A. 1)
Hamilton-Gleichungen: $\frac{dx_k}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p_k}, \quad \frac{dp_k}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial x_k}$	Schrödinger-Gleichung: $-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{x}, t) = H \psi(\mathbf{x}, t)$	(A. 2)
Poisson-Produkt (PP) für zwei Funktionen $f(\mathbf{x}, \mathbf{p})$, $g(\mathbf{x}, \mathbf{p}): [f, g] = \frac{\partial f}{\partial p_k} \frac{\partial g}{\partial x_k} - \frac{\partial g}{\partial p_k} \frac{\partial f}{\partial x_k}$	Kommutationsprodukt (KP) für zwei Operatoren $f(\mathbf{x}, \mathbf{p}), g(\mathbf{x}, \mathbf{p}): (f, g) = fg - gf$	(B. 1)
PP für das kanonisch konjugierte Variablenpaar (Folge aus (B. 1a)): $[x_i, x_k] = [p_i, p_k] = 0$ $[p_i, x_k] = \delta_{ik}$	KP für das kanonisch konjugierte Operatorenpaar: $(x_i, x_k) = (p_i, p_k) = 0$ $(p_i, x_k) = \frac{\hbar}{i} \delta_{ik}$	(B. 2)
Hamilton-Gleichungen: $\frac{dx_k}{dt} = [H, x_k], \quad \frac{dp_k}{dt} = [H, p_k]$	Heisenbergsche Bewegungsgleichungen: $\frac{dx_k}{dt} = \frac{i}{\hbar} (H, x_k), \quad \frac{dp_k}{dt} = \frac{i}{\hbar} (H, p_k)$	(B. 3)
Klammerprodukte (PP) für drei Elemente $f(\mathbf{x}, \mathbf{p})$, $g(\mathbf{x}, \mathbf{p}), h(\mathbf{x}, \mathbf{p})$: $[f, g] = -[g, f]$ $[f, g + h] = [f, g] + [f, h]$ $[f, gh] = [f, g]h + g[f, h]$ $[f, \varkappa g] = \varkappa[f, g] \quad \varkappa: \text{Zahl}$ $[f, \varkappa] = 0$ $[f, [g, h]] + [g, [h, f]] + [h, [f, g]] = 0$	Klammerprodukte (KP) für drei Elemente $f(\mathbf{x}, \mathbf{p})$, $g(\mathbf{x}, \mathbf{p}), h(\mathbf{x}, \mathbf{p})$: $(f, g) = -(g, f)$ $(f, g + h) = (f, g) + (f, h)$ $(f, gh) = (f, g)h + g(f, h)$ $(f, \varkappa g) = \varkappa(f, g) \quad \varkappa: \text{c-Zahl}$ $(f, \varkappa) = 0$ $(f, (g, h)) + (g, (h, f)) + (h, (f, g)) = 0$	(C. 1)
PP für die Erzeugenden: $[x_i, x_k] = [p_i, p_k] = 0$ $[p_i, x_k] = \delta_{ik}$	KP für die Erzeugenden: $(x_i, x_k) = (p_i, p_k) = 0$ $(p_i, x_k) = \frac{\hbar}{i} \delta_{ik}$	(C. 2)
Bewegungsgleichungen: $\frac{dx_k}{dt} = [H, x_k], \quad \frac{dp_k}{dt} = [H, p_k]$	Bewegungsgleichungen: $\frac{dx_k}{dt} = \frac{i}{\hbar} (H, x_k), \quad \frac{dp_k}{dt} = \frac{i}{\hbar} (H, p_k)$	(C. 3)

Tab. 1'. Korrespondenzschemata A', B', C' für Teilchen mit Spin (zusätzliche Gleichungen, die zu denen der Tabelle 1 hinzutreten).

a	b	a, b
Klassische Mechanik	Quantenmechanik	
Hamilton-Funktion $H(\mathbf{x}, \mathbf{p}, \mathbf{s})$	Hamilton-Operator $H(\mathbf{x}, \mathbf{p}, \mathbf{s})$	
Spindrehimpuls: $\mathbf{s}(\Phi, \pi)$, Gl. (3)	Spindifferentialoperator: $\mathbf{s}(\Phi, \pi)$, Gl. (3)	
π : kanonischer Spinimpuls	$\pi = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \Phi}$: Differentialoperator	(A'. 1)
Hamilton-Gleichungen: $\frac{d\Phi_k}{dt} = \frac{\partial H}{\partial \pi_k}, \quad \frac{d\pi_k}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial \Phi_k}$	Schrödinger-Gleichung: $-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{x}, \Phi, t) = H \psi(\mathbf{x}, \Phi, t)$	(A'. 2)
Spinfunktion: $\mathbf{s}(\Phi, \pi)$, Gl. (3)	Spinoperator: $\mathbf{s}(\Phi, \pi)$, Gl. (3)	
PP für zwei Funktionen $f(\mathbf{x}, \mathbf{p}; \Phi, \pi), g(\mathbf{x}, \mathbf{p}; \Phi, \pi)$:	KP für zwei Operatoren $f(\mathbf{x}, \mathbf{p}; \Phi, \pi), g(\mathbf{x}, \mathbf{p}; \Phi, \pi)$:	
$[f, g] = \frac{\partial f}{\partial p_k} \frac{\partial g}{\partial x_k} - \frac{\partial g}{\partial p_k} \frac{\partial f}{\partial x_k} + \frac{\partial f}{\partial \pi_k} \frac{\partial g}{\partial \Phi_k} - \frac{\partial g}{\partial \pi_k} \frac{\partial f}{\partial \Phi_k}$	$(f, g) = f g - g f$	(B'. 1)
PP für die kanonisch konjugierten Variablenpaare (Folge aus (B'. 1a)):	KP für die kanonisch konjugierten Operatorenpaare:	
$[\Phi_i, x_k] = [\Phi_i, p_k] = 0$	$(\Phi_i, x_k) = (\Phi_i, p_k) = 0$	
$[\pi_i, x_k] = [\pi_i, p_k] = 0$	$(\pi_i, x_k) = (\pi_i, p_k) = 0$	
$[\Phi_i, \Phi_k] = [\pi_i, \pi_k] = 0$	$(\Phi_i, \Phi_k) = (\pi_i, \pi_k) = 0$	
$[\pi_i, \Phi_k] = \delta_{ik}$	$(\pi_i, \Phi_k) = \frac{\hbar}{i} \delta_{ik}$	(B'. 2)
Hamilton-Gleichungen: $\frac{d\Phi_k}{dt} = [H, \Phi_k], \quad \frac{d\pi_k}{dt} = [H, \pi_k]$	Heisenbergsche Bewegungsgleichungen: $\frac{d\Phi_k}{dt} = \frac{i}{\hbar} (H, \Phi_k), \quad \frac{d\pi_k}{dt} = \frac{i}{\hbar} (H, \pi_k)$	(B'. 3)
Klammerprodukte (PP) für drei Elemente $f(\mathbf{x}, \mathbf{p}, \mathbf{s}), g(\mathbf{x}, \mathbf{p}, \mathbf{s}), h(\mathbf{x}, \mathbf{p}, \mathbf{s})$: Gln. (C. 1a)	Klammerprodukte (KP) für drei Elemente $f(\mathbf{x}, \mathbf{p}, \mathbf{s}), g(\mathbf{x}, \mathbf{p}, \mathbf{s}), h(\mathbf{x}, \mathbf{p}, \mathbf{s})$: Gln. (C. 1b)	(C'. 1)
PP für die Erzeugenden: $[s_i, x_k] = [s_i, p_k] = 0$	KP für die Erzeugenden: $(s_i, x_k) = (s_i, p_k) = 0$	
$[s_i, s_k] = -\varepsilon_{ikl} s_l$	$(s_i, s_k) = -\frac{\hbar}{i} \varepsilon_{ikl} s_l$	(C'. 2)
Bewegungsgleichung: $\frac{ds_k}{dt} = [H, s_k]$	Bewegungsgleichung: $\frac{ds_k}{dt} = \frac{i}{\hbar} (H, s_k)$	(C'. 3)

2. Korrespondenz für Teilchen mit Spin

Ein Teilchen mit Spin $s = 1/2$ (Masse m , Ladung q , gyromagnetisches Verhältnis $\alpha = (g/2) \cdot q/mc$, sei durch die Pauli-Gleichung mit dem Hamilton-Operator

$$H(\mathbf{x}, \mathbf{p}, \mathbf{s}) = \frac{1}{2m} \left(\mathbf{p} + \frac{q}{c} \mathbf{A} \right)^2 - qV - \alpha(\mathbf{s} \mathbf{B}) \quad (1)$$

beschrieben. $V(\mathbf{x})$ und $\mathbf{A}(\mathbf{x})$ sind das skalare bzw. vektorielle Potential, $\mathbf{B}(\mathbf{x}) = \text{rot } \mathbf{A}(\mathbf{x})$ das Magnet-

feld. Für das Elektron beispielsweise gilt: $m_e, q_e = -e$ mit $e > 0$, $g_e = 2,0023$, vgl. Donner und Süßmann [6].

In dem Operator (1) ist der Spindrehimpuls \mathbf{s} nicht als Funktion eines kanonisch konjugierten Paares von Spinvariablen Φ, π dargestellt, weil diese — jedenfalls üblicherweise — nicht eingeführt sind. Daher ist das klassisch-korrespondenzmäßige Analogon eines Hamilton-Operators vom Typ $H(\mathbf{x}, \mathbf{p}, \mathbf{s})$ keine eigentliche Hamilton-Funktion; diese müßte nämlich die Form $H(\mathbf{x}, \mathbf{p}; \Phi, \pi)$ haben. Aus diesem Grunde läßt sich keines der

Korrespondenzschemata A, B, C anwenden, wenn man $H(\mathbf{x}, \mathbf{p}, \mathbf{s})$ als Ausgangspunkt nehmen wollte. In Abschnitt 4.3 werden wir Hamilton-Funktionen dieses Typs mit \tilde{H} bezeichnen und sie von den eigentlichen Hamilton-Funktionen H abgrenzen.

2.1. Korrespondenzschema C'

Das Korrespondenzschema C läßt sich jedoch, da in ihm keine partiellen Ableitungen nach den kanonischen Variablen auftreten, derart modifizieren, daß es auch auf Hamilton-Funktionen bzw. -Operatoren vom Typ $H(\mathbf{x}, \mathbf{p}, \mathbf{s})$ angewendet werden kann: man definiert für den Spindrehimpuls \mathbf{s} zusätzlich ein Poisson- bzw. Kommutationsprodukt vom Drehimpulstyp, ohne explizit kanonische Spinvariable einführen zu müssen: Schema C' in Tab. 1'. Es enthält (ebenso wie die später diskutierten Schemata A', B') nur die Modifikationen und Beziehungen, die zu dem Schema C (bzw. zu den Schemata A, B) hinzutreten.

Damit ist für die Paulische Spingleichung entsprechend (1) bereits eine umkehrbar eindeutige Korrespondenz zwischen klassischer und quantenmechanischer Beschreibung erreicht. Klassisch beschreibt die Hamilton-Funktion (1) einen Kugelkreis mit den translatorischen Freiheitsgraden \mathbf{x}_k und den rotatorischen (bzw. inneren) Freiheitsgraden des Eigendrehimpulses s_k , vgl. Falk [7]. Insbesondere bekommt man aus (1), (C'.3a) als Bewegungsgleichung für den Spin die Präzessionsgleichung

$$d\mathbf{s}/dt = -\alpha \mathbf{B} \times \mathbf{s}, \quad (2)$$

die wir in Abschnitt 5.3 näher diskutieren werden. Der quantenmechanische Erwartungswert für die zeitliche Änderung des Spins folgt derselben Gleichung. Haben die in (1) auftretenden elektromagnetischen Felder die Eigenschaft, daß bei Abwesenheit des Spinterms ($\alpha=0$) ein Erhaltungssatz für den Bahndrehimpuls $\mathbf{l} = \mathbf{x} \times \mathbf{p}$ resultiert, so gilt für ein Teilchen mit magnetischem Moment ($\alpha \neq 0$) ein Erhaltungssatz nur für den Gesamtdrehimpuls $\mathbf{j} = \mathbf{l} + \mathbf{s}$. Diese Folgerung ergibt sich bereits im Rahmen der klassischen Beschreibung.

2.2. Korrespondenzschemata A' und B'

Um auch die Schemata A und B auf Teilchen mit Spin zu erweitern, benötigt man eine explizite Darstellung des Spindrehimpulses \mathbf{s} als Funktion geeigneter, kanonisch konjugierter Spinvariablen

Φ, π . In formaler Analogie zum Bahndrehimpuls $\mathbf{l} = \mathbf{x} \times \mathbf{p}$ kann man zunächst den fiktiven Ansatz $\mathbf{s} = \Phi \times \pi$ versuchen. Dieser erfüllt zwar die Drehimpulsrelationen (C'.2), ist aber nicht brauchbar, da er nur ganzzahlige Eigenwerte für die Eigenfunktionen der z -Komponente des Vektoroperators \mathbf{s} liefert. Eine sachgemäße Darstellung erhält man aber, wenn man den Ansatz folgendermaßen modifiziert:

$$\mathbf{s} = \frac{1}{2} \{ \pi + \Phi (\Phi \pi) + \Phi \times \pi \}. \quad (3)$$

Dieser in den $\pi_k = (\hbar/i) \partial/\partial \Phi_k$ lineare Operator besitzt nun alle Eigenschaften, die man von den Spin-komponenten s_k zu fordern hat: sie erfüllen die Drehimpulsvertauschungsrelationen (C'.2b), sie sind hermitesch, und die z -Komponente s_z besitzt halbzahlige Eigenwerte $0, \pm \hbar/2, \pm \hbar, \pm 3\hbar/2$ usw. Die beiden zuletzt genannten Eigenschaften werden in den Abschnitten 6 und 7 bewiesen. Damit lassen sich nun auch die Korrespondenzschemata A und B auf Teilchen mit Spin übertragen: Schema A' und B'.

Wir werden in Abschnitt 4.1 zeigen, daß der in (3) zunächst rein formal eingeführte Ansatz $\mathbf{s}(\Phi, \pi)$ aus der Kreiseltheorie folgt. Der in Abschnitt 3.1 definierte Drehvektor Φ , der die Kreiselorientierung im Raum charakterisiert, hat eine anschauliche Bedeutung. Er ist die Lagekoordinate des Kreisels bzw. Spinkoordinate des Teilchens in Analogie zur kartesischen Ortskoordinate \mathbf{x} des Teilchens. Die Beziehung (3) vermittelt somit einen nahtlosen Übergang zwischen (klassischer) Kreiseltheorie und (quantenmechanischer) Spintheorie. Damit ist die Sonderstellung des Spins, vgl. Edmonds [1] (S. 35 und 68), jedenfalls für den nichtrelativistischen Bereich, beseitigt.

2.3. Gemischtes Korrespondenzschema aus A' und C'

Alle drei Schemata A', B', C' sind (in Verbindung mit den Schemata A, B, C) einander äquivalent. In der rechten Spalte des Korrespondenzschemas A' erscheint die Pauli-Gleichung (A'.2b) als Schrödinger-Gleichung für die Zustandsfunktion $\psi(\mathbf{x}, \Phi, t)$ in Koordinatendarstellung. Der Paulische Hamilton-Operator (1) ist hier ein Differentialoperator, der mit den Operatoren $\mathbf{p} = (\hbar/i) \partial/\partial \mathbf{x}$ und $\pi = (\hbar/i) \partial/\partial \Phi$ auf die Orts- bzw. Spinkoordinaten wirkt.

Üblicherweise wird die Pauli-Gleichung in einem aus A und C' gemischten Schema formuliert: bezüglich des kanonisch konjugierten Variablenpaares

$\mathbf{x}, \mathbf{p} = (\hbar/i) \partial/\partial \mathbf{x}$ nach dem Schema A, bezüglich des Spinoperators \mathbf{s} nach dem Schema C'. Der Paulische Hamilton-Operator (1) erscheint dann als zweireihige Matrix, in der die Komponenten $s_k = (\hbar/2) \sigma_k$ durch die Paulischen Spinmatrizen σ_k dargestellt werden. Er wirkt auf die zweikomponentige Zustandsfunktion (Spinor)

$$\Psi = (\psi_1(\mathbf{x}, t), \psi_2(\mathbf{x}, t)).$$

Wesentlich ist, daß in diesem gemischten Formalismus (ebenso wie in dem nach Schema C') die Spinvariablen Φ, π nicht mehr explizit auftreten. Sie rangieren hier als komplementäre Parameter. Diese Darstellung ist an Hamilton-Funktionen bzw. -Operatoren vom Typ $H(\mathbf{x}, \mathbf{p}, \mathbf{s})$ gebunden.

2.4. Spin-s-Teilchen

In den Hamilton-Funktionen vom Typ $H(\mathbf{x}, \mathbf{p}, \mathbf{s})$ kommen die kanonisch konjugierten Spinvariablen Φ, π nur in der speziellen Kombination (3) vor, und zwar explizit in den Korrespondenzschemata A' und B', implizit im Schema C' und im gemischten Schema. Diese Hamilton-Funktionen bilden eine spezielle Funktionsklasse innerhalb der allgemeinen Hamilton-Funktionen $H(\mathbf{x}, \mathbf{p}; \Phi, \pi)$. Genau diese Funktionsklasse $H(\mathbf{x}, \mathbf{p}, \mathbf{s})$, die den Korrespondenzschemata A', B', C' zugrunde liegt, bildet den Ausgangspunkt für „allgemeine Spinprobleme“ zur Beschreibung von Spin-s-Teilchen. Wir werden in Abschnitt 5 auf diese Zusammenhänge näher eingehen.

Es ist bemerkenswert, daß man zu den Hamilton-Funktionen $H(\mathbf{x}, \mathbf{p}, \mathbf{s})$ keine Lagrange-Funktionen L konstruieren kann, wenn man von dem Hamilton-Formalismus des Schemas C' oder von dem des gemischten Schemas aus A und C' ausgeht. Erst wenn man eine Spinkoordinate Φ explizit einführt, läßt sich der Übergang von H zu L vollziehen, indem man wie üblich

$$L(\mathbf{x}, \dot{\mathbf{x}}; \Phi, \dot{\Phi}) \\ = (\dot{\mathbf{x}} \mathbf{p}) + (\dot{\Phi} \pi) - H(\mathbf{x}, \mathbf{p}; \Phi, \pi)$$

setzt. Näheres in Abschnitt 5.4.

3. Drehvektor Φ als Lagekoordinate eines Kreisels

Von den translatorischen und rotatorischen (bzw. inneren) Freiheitsgraden \mathbf{x}, Φ eines Teilchens mit Spin spielen für die folgenden Überlegungen die

translatorischen keine Rolle. Wir denken sie uns festgehalten und betrachten das Teilchen zunächst formal als Kreisel mit festem Drehpunkt. Die Abschnitte 3 und 4 bringen die klassische Kreiseltheorie in eine Form, die für eine direkte Übertragung auf die Beschreibung des Spins angemessen ist. In Abschnitt 5.5 werden wir uns von dem naiv-klassischen Bild einer rotierenden Kugel befreien und das Spin-s-Teilchen, z.B. das Elektron, wieder als punktförmiges (oder nahezu punktförmiges) Teilchen behandeln, das der Pauli-Gleichung bzw. einer allgemeineren Spingleichung genügt.

Üblicherweise wird die Lage (Orientierung) eines Kreisels durch die drei Eulerschen Winkel α, β, γ charakterisiert. Sie bringen eine unvermeidbare, bis zu einem gewissen Grade willkürliche Unsymmetrie in die Gleichungen, was die Harmonie und Übersichtlichkeit bei allgemeinen Untersuchungen stört. Eine ähnliche Unsymmetrie weisen die stereographischen Parameter p, q (komplex) und die Cayley-Kleinschen Parameter a, b, c, d (komplex), mit $d = a^*, c = -b^*$ auf. Demgegenüber sind die Eulerschen Parameter $\lambda, \mu, \nu, \varrho$ (reell) und die aus ihnen abgeleiteten Quaternionen

$$Q = \lambda \tau_x + \mu \tau_y + \nu \tau_z + \varrho$$

(τ_k : Quaternioneneinheiten) und unitären Matrizen

$$T = -i(\lambda \sigma_x + \mu \sigma_y + \nu \sigma_z) + \varrho 1$$

(σ_k : Paulische Spinmatrizen) symmetrisch bezüglich der den drei räumlichen Koordinatenachsen zugeordneten Parameter λ, μ, ν . Aber bei allen diesen Kreiselparametern, vgl. Sygne [8], tritt noch eine überzählige Variable auf, so daß bei der Lagrange- und Hamilton-Funktion eine lästige Nebenbedingung zu berücksichtigen wäre.

Diese Nachteile vermeidet der im folgenden definierte reelle Drehvektor $\Phi = (\Phi_x, \Phi_y, \Phi_z)$ mit symmetrischen Komponenten bezüglich der Koordinatenachsen. Daher sind sämtliche aus der Lagrange- und Hamilton-Funktion abgeleitete Gleichungen dreidimensionale Vektor- bzw. Tensorgleichungen.

3.1. Definition des Drehvektors Φ

Die Orientierung des Kreisels sei durch ein körperfestes Dreibein $\{I', J', K'\}$ gegenüber dem raumfesten Koordinatendreibein $\{I, J, K\}$ mit $I = (1, 0, 0)$, $J = (0, 1, 0)$, $K = (0, 0, 1)$ festgelegt. Die Nullpunkte beider Dreibeine mögen im Drehpunkt 0 des Kreisels zusammenfallen. Wir führen

den Drehtensor D ein, der das ruhende in das bewegte Dreibein überführt:

$$\begin{aligned} I_k' &= D_{kl} I_l = D_{kx}, & J_k' &= D_{kl} J_l = D_{ky}, \\ K_k' &= D_{kl} K_l = D_{kz}. \end{aligned} \quad (4)$$

Er erfüllt die Orthogonalitäts- und Orientierungsrelationen:

$$D_{kl} D_{km} = D_{lk} D_{mk} = \delta_{lm}, \quad \det(D) = 1. \quad (5)$$

Jedem geordneten Satz von 3×3 Komponenten D_{kl} , welche die Nebenbedingungen (5) erfüllen, ist umkehrbar eindeutig eine Orientierung des Kreisels zugeordnet. Der Drehtensor, der nur drei unabhängige Komponenten besitzt, läßt sich durch einen geeignet normierten Eigenvektor Φ , mit $D_{kl} \Phi_l = D_{lk} \Phi_l = \Phi_k$, explizit ausdrücken:

$$D_{kl} = \frac{2}{1 + \Phi^2} \cdot \left\{ \frac{1 - \Phi^2}{2} \delta_{kl} + \Phi_k \Phi_l - \varepsilon_{klm} \Phi_m \right\}. \quad (6)$$

Die Auflösung dieser Funktion $D(\Phi)$ nach Φ ergibt:

$$\Phi_k = - \frac{1}{1 + D_{rr}} \varepsilon_{klm} D_{lm}. \quad (7)$$

Die rechte Seite von (6) erfüllt von selbst die Nebenbedingungen (5), der Vektor Φ ist seinerseits also keinerlei Nebenbedingungen unterworfen.

Um die geometrische Bedeutung des Vektors Φ klarzumachen, spalten wir ihn in Betrag

$$|\Phi| = \pm \operatorname{tg}(\varphi/2)$$

und Richtung \mathbf{n} (Einheitsvektor) auf:

$$\Phi = \operatorname{tg}(\varphi/2) \mathbf{n}. \quad (8)$$

Gleichung (6) kann dann in der Form

$$\begin{aligned} D_{kl} &= \cos \varphi \cdot \delta_{kl} + (1 - \cos \varphi) n_k n_l \\ &\quad - \sin \varphi \cdot \varepsilon_{klm} n_m \end{aligned} \quad (9)$$

geschrieben werden. Demnach ist φ der Drehwinkel und \mathbf{n} die Drehachse bei der Drehung D , vgl. Duschek und Hochrainer [9]. Die Beziehung (8) kann ebenso wie (7) als Definitionsgleichung (oder Meßvorschrift) für den Drehvektor Φ genommen werden.

Wir schränken zunächst die zulässigen Werte von φ auf den Bereich $0 \leq \varphi \leq \pi$ ein und lassen für \mathbf{n} den gesamten Wertebereich (Oberfläche der Einheitskugel) zu. Auf diese Weise erfaßt man sämt-

liche möglichen Orientierungen des Kreisels, und zwar — bis auf den Rand $\varphi = \pi$ — umkehrbar eindeutig. Für $\varphi = \pi$ entsprechen ein und derselben Kreisorientierung die beiden Richtungen \mathbf{n} und $-\mathbf{n}$.

Mit diesem Wertebereich für φ, \mathbf{n} erfaßt man nach (8) den gesamten Vektorraum von Φ , einschließlich seiner unendlich fernen Punkte. Es besteht also eine umkehrbar eindeutige Zuordnung zwischen den Drehvektoren Φ und den Orientierungen des Kreisels, wenn man die antipodischen Endpunkte ($\varphi = \pi, \mathbf{n}$) und ($\varphi = \pi, -\mathbf{n}$), die auf den durch die Richtung $\mathbf{n} = \Phi/|\Phi|$ definierten Nullpunktsgerechten liegen, jeweils miteinander identifiziert. Daher kann man Φ als Lagekoordinate (Winkelkoordinate) des Kreisels verwenden. Diese Eindeutigkeit zwischen Φ und Kreisorientierung bleibt erhalten, wenn man in (8) für den Winkel φ beliebige reelle Werte zuläßt.

3.2. Winkelgeschwindigkeit Ω

Um den Zusammenhang zwischen der Lagekoordinate Φ und der Winkelgeschwindigkeit des Kreisels herzustellen, betrachten wir einen beliebigen körperfesten Vektor \mathbf{q} . Seine Komponenten q_k beziehen sich — ebenso wie alle folgenden ungestrichenen Vektor- und Tensorkomponenten — auf das raumfeste kartesische Koordinatensystem $\{\mathbf{I}, \mathbf{J}, \mathbf{K}\}$. Die Kreisdrehung $D(t)$ führt den Vektor aus seiner Ausgangslage mit den Komponenten $q_k' = \text{const}$ in die jeweilige Lage $\mathbf{q}(t)$ mit den Komponenten

$$q_k(t) = D_{kl}(t) \cdot q_l' \quad (10)$$

über. q_l' sind die körperfesten Komponenten des Vektors $\mathbf{q}(t)$. Differentiation nach der Zeit ergibt:

$$\dot{q}_k = \dot{D}_{kl} q_l' = \dot{D}_{kl} D_{ml} q_m = -\Omega_{km} q_m, \quad (11)$$

wobei wir die Bezeichnung

$$\Omega_{ab} = D_{ac} \dot{D}_{bc} = -\Omega_{ba} \quad (12)$$

eingeführt haben. Die Antimetrie des Tensors Ω_{ab} folgt aus (5) durch Differentiation. Geht man von Ω_{ab} wie üblich zu dem zugehörigen axialen Vektor Ω über gemäß

$$\Omega_k = \frac{1}{2} \varepsilon_{kab} \Omega_{ab} \quad \text{mit} \quad \Omega_{ab} = \varepsilon_{abk} \Omega_k, \quad (13)$$

so läßt sich Gl. (11) in der Form

$$\dot{\mathbf{q}} = \Omega \times \mathbf{q} \quad (14)$$

schreiben. Das bedeutet: der beliebige körperfeste Vektor \mathbf{q} macht eine Präzessionsbewegung um die momentane Drehachse $\mathbf{\Omega}/|\mathbf{\Omega}|$ mit der Winkelgeschwindigkeit $|\mathbf{\Omega}|$. Die Präzessionsgleichung (14) kann direkt als Definitionsgleichung für die vektorielle Winkelgeschwindigkeit $\mathbf{\Omega}$ des Kreisels aufgefaßt werden. Mithin ist die in (12) eingeführte Matrix Ω_{ab} eine tensorielle Darstellung der Winkelgeschwindigkeit des Kreisels.

Aus (6), (12) und (13) erhält man die Winkelgeschwindigkeit $\mathbf{\Omega}$ als Funktion des Drehvektors $\mathbf{\Phi}$ und der zugehörigen Geschwindigkeit $\dot{\mathbf{\Phi}}$ in der Form

$$\mathbf{\Omega} = \frac{2}{1 + \mathbf{\Phi}^2} \{ \dot{\mathbf{\Phi}} + \mathbf{\Phi} \times \dot{\mathbf{\Phi}} \} \quad (15)$$

mit der Auflösung

$$\dot{\mathbf{\Phi}} = \frac{1}{2} \{ \mathbf{\Omega} + (\mathbf{\Phi} \mathbf{\Omega}) \mathbf{\Phi} - \mathbf{\Phi} \times \mathbf{\Omega} \}. \quad (16)$$

Die entsprechende Auflösung der Gl. (12) lautet:

$$\dot{D}_{ab} = \Omega_{ca} D_{cb}.$$

4. Allgemeine Kreiselprobleme

4.1. Die Lagrange-Funktionen L und \bar{L}

Die Kreiselbewegung sei beschrieben durch eine Lagrange-Funktion $L(\mathbf{\Phi}, \dot{\mathbf{\Phi}}, t)$. Das Schema des Lagrange-Formalismus ist in der linken Spalte von Tab. 2 zusammengestellt. Daneben führen wir eine modifizierte Lagrange-Funktion $\bar{L}(\mathbf{\Phi}, \mathbf{\Omega}, t)$ ein, indem wir in $L(\mathbf{\Phi}, \dot{\mathbf{\Phi}}, t)$ die Geschwindigkeit $\dot{\mathbf{\Phi}}$ gemäß (16) durch die Winkelgeschwindigkeit $\mathbf{\Omega}$ ersetzen. Dem Werte nach stimmen beide Funktionen überein: $\bar{L} = L$. Sie unterscheiden sich lediglich in ihrer funktionellen Abhängigkeit von den Variablen $\mathbf{\Phi}, \mathbf{\Omega}, t$ bzw. $\mathbf{\Phi}, \dot{\mathbf{\Phi}}, t$.

Analog zur Definition

$$\boldsymbol{\pi} = \partial L / \partial \dot{\mathbf{\Phi}} \quad (17)$$

des kanonischen Impulses $\boldsymbol{\pi}$ führen wir eine durch die Gleichung

$$\mathbf{s} = \partial \bar{L} / \partial \mathbf{\Omega} \quad (18)$$

Tab. 2. Lagrange-Formalismus für allgemeine Kreiselprobleme mit dem Drehvektor $\mathbf{\Phi}$ als Lagekoordinate des Kreisels.

a	b	a, b
Ausgangspunkt Lagrange-Funktion: $L(\mathbf{\Phi}, \dot{\mathbf{\Phi}}, t)$	Ausgangspunkt (modifizierte) Lagrange-Funktion: $\bar{L}(\mathbf{\Phi}, \mathbf{\Omega}, t)$	(II. 1)
Zusammenhang mit der rechten Spalte: $L = \bar{L}$, Geschwindigkeit:	Zusammenhang mit der linken Spalte: $\bar{L} = L$, Winkelgeschwindigkeit:	
$\dot{\mathbf{\Phi}} := \frac{1}{2} \{ \mathbf{\Omega} + (\mathbf{\Phi} \mathbf{\Omega}) \mathbf{\Phi} - \mathbf{\Phi} \times \mathbf{\Omega} \}$	$\mathbf{\Omega} := \frac{2}{1 + \mathbf{\Phi}^2} \{ \dot{\mathbf{\Phi}} + \mathbf{\Phi} \times \dot{\mathbf{\Phi}} \}$	(II. 2)
kanonischer Impuls: $\boldsymbol{\pi} := \frac{\partial L}{\partial \dot{\mathbf{\Phi}}}$	kanonischer Drehimpuls: $\mathbf{s} := \frac{\partial \bar{L}}{\partial \mathbf{\Omega}}$	(II. 3)
kanonisches Drehmoment: $\frac{\partial L}{\partial \mathbf{\Phi}}$	modifizierte Drehmomente: $\mathbf{G} := \frac{\partial \bar{L}}{\partial \mathbf{\Phi}}$ mit $\mathbf{G} = \frac{2}{1 + \mathbf{\Phi}^2} \{ \mathbf{F} - \mathbf{\Phi} \times \mathbf{F} \}$ $\mathbf{F} := \frac{1}{2} \{ \mathbf{G} + (\mathbf{\Phi} \mathbf{G}) \mathbf{\Phi} + \mathbf{\Phi} \times \mathbf{G} \}$	(II. 4) (II. 5)
Eulersche Differentialgl. (Dgl. II. Ordnung in $\mathbf{\Phi}$): $\dot{\boldsymbol{\pi}} = \frac{\partial L}{\partial \mathbf{\Phi}}$	Bewegungsgleichung (Dgl. II. Ordnung in $\mathbf{\Phi}$): $\dot{\mathbf{s}} = \mathbf{\Omega} \times \mathbf{s} + \mathbf{F}$	(II. 6)
Energie: $E := (\dot{\mathbf{\Phi}} \boldsymbol{\pi}) - L$	Energie: $E := (\mathbf{\Omega} \mathbf{s}) - \bar{L}$	(II. 7)
Energiegleichung (Folge): $\dot{E} = - \frac{\partial L}{\partial t}$	Energiegleichung (Folge): $\dot{E} = - \frac{\partial \bar{L}}{\partial t}$	(II. 8)

definierte Größe \mathbf{s} ein, die wir „kanonischen Drehimpuls“ nennen. Um den Zusammenhang zwischen $\boldsymbol{\pi}$ und \mathbf{s} herzustellen, schreiben wir

$$\frac{\partial L}{\partial \dot{\Phi}_k} = \frac{\partial \bar{L}}{\partial \Omega_l} \frac{\partial \Omega_l}{\partial \dot{\Phi}_k}, \quad (19)$$

d.h. unter Verwendung von Gl. (15)

$$\pi_k = s_l \cdot \frac{2}{1 + \Phi^2} \{ \delta_{kl} + \varepsilon_{klm} \Phi_m \}, \quad (20)$$

oder in indexfreier Schreibweise

$$\boldsymbol{\pi} = \frac{2}{1 + \Phi^2} \{ \mathbf{s} - \boldsymbol{\Phi} \times \mathbf{s} \} \quad (21)$$

mit der Umkehrung

$$\mathbf{s} = \frac{1}{2} \{ \boldsymbol{\pi} + (\boldsymbol{\Phi} \boldsymbol{\pi}) \boldsymbol{\Phi} + \boldsymbol{\Phi} \times \boldsymbol{\pi} \}. \quad (22)$$

Dies ist bereits — bis auf die Reihenfolge der Faktoren — die grundlegende Beziehung (3), die den Zusammenhang zwischen klassischer Kreiseltheorie und quantenmechanischer Spintheorie vermittelt.

In entsprechender Weise führen wir anstelle des kanonischen Drehmoments $\partial L / \partial \dot{\Phi}$, Gl. (II.4a), das modifizierte Drehmoment $\mathbf{G} = \partial \bar{L} / \partial \dot{\Phi}$, Gl. (II.4b), ein. Zwischen beiden besteht der Zusammenhang

$$\frac{\partial L}{\partial \dot{\Phi}_k} = \frac{\partial \bar{L}}{\partial \dot{\Phi}_k} + \frac{\partial \bar{L}}{\partial \Omega_l} \frac{\partial \Omega_l}{\partial \dot{\Phi}_k}. \quad (23)$$

Unser Ziel ist es, analog zur Eulerschen Differentialgleichung (II.6a), in der $\dot{\boldsymbol{\pi}}$ als Funktion von $\boldsymbol{\Phi}, \dot{\boldsymbol{\Phi}}, t$ erscheint, $\dot{\mathbf{s}}$ als Funktion von $\boldsymbol{\Phi}, \boldsymbol{\Omega}, t$ auszudrücken. Das Ergebnis ist in der rechten Spalte von Tab. 2 zusammengestellt.

Der Formalismus der rechten Spalte ist mit dem der linken Spalte gleichwertig. Zwischen beiden besteht ein umkehrbar eindeutiger Zusammenhang. Die Gleichungen der rechten Spalte bilden den sachgemäßen Lagrange-Formalismus der Kreiseltheorie. Der Grund dafür liegt darin, daß es mit Hilfe der Lagrange-Funktion \bar{L} gelingt, die anholonome Winkelgeschwindigkeit $\boldsymbol{\Omega}$ des Kreisels explizit in den Lagrange-Formalismus einzuführen. Die in der rechten Spalte vorkommenden Vektoren $\boldsymbol{\Omega}, \mathbf{s}, \mathbf{F}$ sind die physikalisch wesentlichen Größen, während die entsprechenden Vektoren in der linken Spalte, also $\dot{\boldsymbol{\Phi}}, \boldsymbol{\pi}, \partial L / \partial \dot{\Phi}$, den Charakter von Hilfsgrößen haben.

4.2. Anwendung auf den freien Kugelkreisel

Als einfachstes Beispiel betrachten wir den freien Kreisel mit einem kugelsymmetrischen Trägheitstensor (Kugelkreisel), charakterisiert durch das skalare Trägheitsmoment I . Die beiden gleichwertigen Lagrange-Funktionen (II.1a, b) lauten:

$$L(\boldsymbol{\Phi}, \dot{\boldsymbol{\Phi}}) = \frac{I}{2} \left(\frac{2}{1 + \Phi^2} \right)^2 \cdot \{ (1 + \Phi^2) \dot{\Phi}^2 - (\boldsymbol{\Phi}, \dot{\boldsymbol{\Phi}})^2 \}, \quad (24a)$$

$$\bar{L}(\boldsymbol{\Omega}) = \frac{I}{2} \boldsymbol{\Omega}^2. \quad (24b)$$

Der kanonische Drehimpuls \mathbf{s} wird hier gleich dem kinetischen Drehimpuls $I \boldsymbol{\Omega}$, woraus die zentrale Bedeutung der Größe \mathbf{s} — im Gegensatz zur Hilfsgröße $\boldsymbol{\pi}$ — hervorgeht:

$$\boldsymbol{\pi} = I \frac{2}{1 + \Phi^2} \left\{ 2 \dot{\boldsymbol{\Phi}} - \frac{2}{1 + \Phi^2} (\boldsymbol{\Phi} \dot{\boldsymbol{\Phi}}) \boldsymbol{\Phi} \right\}, \quad (25a)$$

$$\mathbf{s} = I \boldsymbol{\Omega}. \quad (25b)$$

Während die Drehmomente \mathbf{G}, \mathbf{F} bei dem von \bar{L} ausgehenden Lagrange-Formalismus verschwinden, ist das für das Drehmoment $\partial L / \partial \dot{\Phi}$ nicht der Fall. Daher liefert auch die Eulersche Differentialgleichung (II.6a) keinen Erhaltungssatz für den kanonischen Impuls $\boldsymbol{\pi}$. Andererseits folgt aus der Bewegungsgleichung (II.6b) im \bar{L} -Formalismus, $\dot{\mathbf{s}} = 0$, unmittelbar die Konstanz des Drehimpulses $\mathbf{s} = I \boldsymbol{\Omega}$. Das gleiche Ergebnis erhält man natürlich auch, wenn auch auf komplizierte Weise, aus der Bewegungsgleichung (II.6a).

4.3. Die Hamilton-Funktionen H und \bar{H}

Von der Lagrange-Funktion $L(\boldsymbol{\Phi}, \dot{\boldsymbol{\Phi}}, t)$ gehen wir mittels der Beziehung $H = (\dot{\boldsymbol{\Phi}} \boldsymbol{\pi}) - L$ wie üblich zur Hamilton-Funktion $H(\boldsymbol{\Phi}, \boldsymbol{\pi}, t)$ über. Indem wir in $H(\boldsymbol{\Phi}, \boldsymbol{\pi}, t)$ den kanonischen Impuls $\boldsymbol{\pi}$ durch den kanonischen Drehimpuls \mathbf{s} gemäß Gl. (21) ersetzen, bekommen wir die modifizierte Hamilton-Funktion $\bar{H}(\boldsymbol{\Phi}, \mathbf{s}, t)$, die den sachgemäßen Ausgangspunkt für Kreiselprobleme bildet. Entsprechend der ersten Hamilton-Gleichung

$$\dot{\boldsymbol{\Phi}} = \partial H / \partial \boldsymbol{\pi},$$

die zur Definition der Geschwindigkeit $\dot{\boldsymbol{\Phi}}$ dient, definieren wir durch die Gleichung

$$\boldsymbol{\Omega} = \partial \bar{H} / \partial \mathbf{s} \quad (26)$$

die Winkelgeschwindigkeit Ω . Gl. (26) ist das Pendant zu Gleichung (18).

Der eigentliche, von H ausgehende Hamilton-Formalismus und der von \bar{H} ausgehende modifizierte Hamilton-Formalismus sind in der linken bzw. rechten Spalte von Tab. 3 zusammengestellt. Beide Formelsysteme sind — genau wie beim Lagrange-Formalismus — einander gleichwertig. Sie gehen umkehrbar eindeutig auseinander hervor, wovon man sich durch Nachrechnen überzeugen kann.

Für den freien Kugelkreisel lauten die beiden Hamilton-Funktionen (III.1 a, b):

$$H(\Phi, \pi) = \frac{1}{2I} \frac{1 + \Phi^2}{4} \{ \pi^2 + (\Phi \pi)^2 \}, \quad (27a)$$

$$\bar{H}(s) = \frac{1}{2I} s^2, \quad (27b)$$

und für die beiden Geschwindigkeiten (III.3 a, b) findet man

$$\dot{\Phi} = \frac{1}{I} \frac{1 + \Phi^2}{4} \{ \pi + (\Phi \pi) \Phi \}, \quad (28a)$$

$$\Omega = \frac{1}{I} s. \quad (28b)$$

In Abschnitt 5.3 werden wir Gl. (27 b) als Ausgangspunkt für die Beschreibung des freien Spinelektrons nehmen.

5. Allgemeine Spinprobleme

5.1. Lagrange- und Hamilton-Funktionen vom Typ $L(\Omega, t)$ und $\bar{H}(s, t)$

Wir haben bisher „allgemeine Kreiselprobleme“ behandelt, die durch Lagrange-Funktionen $L(\Phi, \Omega, t)$ oder durch Hamilton-Funktionen $\bar{H}(\Phi, s, t)$ charakterisiert sind. In diesen Funktionen tritt neben der Winkelgeschwindigkeit Ω bzw. dem kanonischen Drehimpuls s noch die Lagekoordinate Φ explizit auf. Beispiele hierfür sind der freie asymmetrische Kreisel, der freie symmetrische Kreisel und der schwere Kugelkreisel.

Von besonderer Bedeutung sind Kreiselprobleme, bei denen das Bewegungsgesetz des Kreisels unabhängig von seiner momentanen Orientierung $\Phi(t)$ ist. Sie werden durch Lagrange- oder Hamilton-Funktionen vom Typ $L(\Omega, t)$, $\bar{H}(s, t)$ beschrieben: Tabelle 4. In den zugehörigen eigentlichen Lagrange- oder Hamilton-Funktionen $L(\Phi, \dot{\Phi}, t)$, $H(\Phi, \pi, t)$

Tab. 3. Hamilton-Formalismus für allgemeine Kreiselprobleme mit dem Drehvektor Φ als Lagekoordinate des Kreisels.

a	b	a, b
Ausgangspunkt Hamilton-Funktion: $H(\Phi, \pi, t)$	Ausgangspunkt (modifizierte) Hamilton-Funktion: $\bar{H}(\Phi, s, t)$	(III. 1)
Zusammenhang mit der rechten Spalte: $H = \bar{H}$, kanonischer Impuls:	Zusammenhang mit der linken Spalte: $\bar{H} = H$, kanonischer Drehimpuls:	
$\pi := \frac{2}{1 + \Phi^2} \{ s - \Phi \times s \}$	$s := \frac{1}{2} \{ \pi + (\Phi \pi) \Phi + \Phi \times \pi \}$	(III. 2)
Geschwindigkeit (1. Hamilton-Gleichung): $\dot{\Phi} := \frac{\partial H}{\partial \pi}$	Winkelgeschwindigkeit: $\Omega := \frac{\partial \bar{H}}{\partial s}$	(III. 3)
kanonisches Drehmoment: $\frac{\partial H}{\partial \Phi}$	modifizierte Drehmomente: $G := -\frac{\partial \bar{H}}{\partial \Phi}$ mit $G = \frac{2}{1 + \Phi^2} \{ F - \Phi \times F \}$	(III. 4)
	$F := \frac{1}{2} \{ G + (\Phi G) \Phi + \Phi \times G \}$	(III. 5)
Bewegungsgleichung (2. Hamilton-Gleichung): $\dot{\pi} = -\frac{\partial H}{\partial \Phi}$	Bewegungsgleichung: $\dot{s} = \Omega \times s + F$	(III. 6)
Energie: $E := H$	Energie: $E := \bar{H}$	(III. 7)
Energiegleichung (Folge): $\dot{E} = \frac{\partial H}{\partial t}$	Energiegleichung (Folge): $\dot{E} = \frac{\partial \bar{H}}{\partial t}$	(III. 8)

Tab. 4. Lagrange- Formalismus und Hamilton- Formalismus für allgemeine Spinprobleme (die Lagrange- und Hamilton-Funktionen hängen nicht explizit vom Drehvektor Φ ab).

a	b	a, b
Lagrange- Funktion: $\bar{L}(\Omega, t)$	Hamilton-Funktion: $\bar{H}(\mathbf{s}, t)$	(IV. 1)
Zusammenhang mit der rechten Spalte: $\bar{L} = (\Omega \mathbf{s}) - \bar{H}$	Zusammenhang mit der linken Spalte: $\bar{H} = (\Omega \mathbf{s}) - \bar{L}$	(IV. 2)
Spindrehimpuls: $\mathbf{s} := \frac{\partial \bar{L}}{\partial \Omega}$	Winkelgeschwindigkeit: $\Omega := \frac{\partial \bar{H}}{\partial \mathbf{s}}$	(IV. 3)
Bewegungsgleichung (Dgl. I. Ordnung in Ω): $\dot{\mathbf{s}} = \Omega \times \mathbf{s}$ mit $\mathbf{s}(\Omega, t)$	Bewegungsgleichung (Dgl. I. Ordnung in \mathbf{s}): $\dot{\mathbf{s}} = \Omega \times \mathbf{s}$ mit $\Omega(\mathbf{s}, t)$	(IV. 4)
Erhaltungssatz (Folge): $\mathbf{s}^2 = \text{const}$	Erhaltungssatz (Folge): $\mathbf{s}^2 = \text{const}$	(IV. 5)
Energie: $E := (\Omega \mathbf{s}) - \bar{L}$	Energie: $E := \bar{H}$	(IV. 6)
Energiegleichung (Folge): $\dot{E} = - \frac{\partial \bar{L}}{\partial t}$	Energiegleichung (Folge): $\dot{E} = \frac{\partial \bar{H}}{\partial t}$	(IV. 7)

kommen die Variablen $\Phi, \dot{\Phi}$ bzw. das kanonisch konjugierte Variablenpaar Φ, π nur in der speziellen Kombination (II.2b) bzw. (III.2b) vor. Ein Beispiel ist der freie Kugelkreisel (24), (27).

Während für allgemeine Kreiselprobleme die Bewegungsgleichung (II.6a, b) eine Differentialgleichung II. Ordnung in Φ ist, bekommt man für die Kreiselprobleme vom Typ $L(\Omega, t)$, $\bar{H}(\mathbf{s}, t)$ gemäß (IV.4a, b) eine Bewegungsgleichung I. Ordnung in Ω bzw. \mathbf{s} . Sie ist eine Präzessionsgleichung für den Vektor \mathbf{s} , die den Erhaltungssatz $\mathbf{s}^2 = \text{const}$ zur Folge hat. Genau diese Eigenschaft, in Verbindung mit den aus der Beziehung (3) folgenden, in Abschnitt 2.2 diskutierten Eigenschaften von \mathbf{s} , ist charakteristisch für den Spin eines Teilchens. Daher bildet die Funktionsklasse $\bar{L}(\Omega, t)$, $\bar{H}(\mathbf{s}, t)$ den Ausgangspunkt für „allgemeine Spinprobleme“, und innerhalb dieser Funktionsklasse ist es berechtigt, den kanonischen Drehimpuls \mathbf{s} als *Spindrehimpuls* zu bezeichnen. Der Übergang von der klassischen zur quantenmechanischen Spintheorie geschieht nach den Korrespondenzschemata A', B', C' von Abschnitt 2.

5.2. Zusammenhang mit den Korrespondenzschemata A', B', C'

In Abschnitt 2.1 hatten wir die modifizierte Hamilton-Funktion $\bar{H}(\mathbf{s})$, die dem Korrespondenz-

schema C' zugrunde liegt, mit $H(\mathbf{x}, \mathbf{p}, \mathbf{s})$ — ohne Querstrich — bezeichnet. Bemerkenswert ist, daß der von \bar{L} , \bar{H} ausgehende Lagrange- und Hamilton-Formalismus für allgemeine Spinprobleme nicht mehr von der Lagekoordinate des Kreisels (Spin-koordinate des Teilchens) abhängt, da der Drehvektor Φ in den beiden Gleichungssystemen, Spalte (a) und (b), der Tab. 4 überhaupt nicht auftritt. Dies verleiht dem Korrespondenzschema C' und dem gemischten Korrespondenzschema aus A und C' eine Sonderstellung, die bereits in den Abschnitten 2.1, 2.3 und 2.4 diskutiert wurde.

Auch im Korrespondenzschema A' lassen sich die beiden zu H , mit $H(\mathbf{x}, \mathbf{p}; \Phi, \pi) = \bar{H}(\mathbf{x}, \mathbf{p}, \mathbf{s}(\Phi, \pi))$, gehörigen Hamilton-Gleichungen $\dot{\Phi} = \partial H / \partial \pi$ und $\dot{\pi} = -\partial H / \partial \Phi$ durch ein äquivalentes Gleichungspaar, in welchem der Vektor Φ eliminiert ist, ersetzen, nämlich — indem man von $H(\mathbf{x}, \mathbf{p}; \Phi, \pi)$ zu $\bar{H}(\mathbf{x}, \mathbf{p}, \mathbf{s})$ übergeht — durch die modifizierten Hamilton-Gleichungen $\Omega = \partial \bar{H} / \partial \mathbf{s}$ und $\dot{\mathbf{s}} = \Omega \times \mathbf{s}$, vgl. (IV.3b) und (IV.4b).

5.3. Anwendung auf das Elektron

Ausgehend von Tab. 4 ist es nun leicht, eine Hamilton-Funktion $\bar{H}(\mathbf{s}, t)$ zu finden, die die richtige Bewegungsgleichung (2) für den Spin eines (in den Ortskoordinaten \mathbf{x} festgehaltenen) Elektrons in einem äußeren Magnetfeld $\mathbf{B}(t)$ liefert:

$$\text{Ansatz (a): } \hat{H}(\mathbf{s}, t) = -\alpha(\mathbf{s} \cdot \mathbf{B}(t)), \quad (29a)$$

$$\text{Ansatz (b): } \hat{H}(\mathbf{s}, t) = \frac{1}{2I} \mathbf{s}^2 - \alpha(\mathbf{s} \cdot \mathbf{B}(t)). \quad (29b)$$

Der Ansatz (a) für \hat{H} stimmt mit dem Spinterm des Paulischen Hamilton-Operators (1) überein. Aber auch der Ansatz (b) kann als Spinterm für den Hamilton-Operator genommen werden, denn die Addition der in (27b) eingeführten Größe $(1/2I)\mathbf{s}^2$, die eine Konstante der Bewegung ist, ändert nichts an der resultierenden Bewegungsgleichung

$$\dot{\mathbf{s}} = -\alpha \mathbf{B} \times \mathbf{s}. \quad (30)$$

Demnach kann jede der beiden Hamilton-Funktionen (29a, b) als klassisches Analogon zum Paulischen Hamilton-Operator bezeichnet werden.

Die gemäß Gl. (IV.6b) durch $E = \hat{H}$ definierten Energien des Systems sind für die Ansätze (a) und (b) verschieden. Die Frage, ob der im Ansatz (b) auftretende kinetische Energiebeitrag $(1/2I)\mathbf{s}^2$ eine physikalische Bedeutung hat und ob er experimentell bestimmbar ist, lassen wir offen.

Auch die gemäß (IV.3b) gebildeten partiellen Ableitungen $\boldsymbol{\Omega} = \partial \hat{H} / \partial \mathbf{s}$ unterscheiden sich für die Ansätze (a) und (b):

$$\text{Ansatz (a): } \boldsymbol{\Omega} = -\alpha \mathbf{B}, \quad (31a)$$

$$\text{Ansatz (b): } \boldsymbol{\Omega} = \frac{1}{I} \mathbf{s} - \alpha \mathbf{B}. \quad (31b)$$

Der Ansatz (b) hat die vom physikalischen Standpunkt aus befriedigende Eigenschaft, daß neben \hat{H} auch die zugehörige Lagrange-Funktion

$$L = (\boldsymbol{\Omega} \cdot \mathbf{s}) - \hat{H}$$

gemäß (IV.2a) existiert, während sie für den Ansatz (a) identisch Null wird:

$$\text{Ansatz (a): } L = 0, \quad (32a)$$

$$\text{Ansatz (b): } L(\boldsymbol{\Omega}, t) = \frac{I}{2} (\boldsymbol{\Omega} + \alpha \mathbf{B}(t))^2. \quad (32b)$$

Außerdem kann man den Ansatz (b) insofern als physikalisch sinnvoll betrachten, als er — im Gegensatz zu Ansatz (a) — auch für das freie Spinelektron ($\mathbf{B} = 0$) verwendbar ist. In diesem Falle stimmen L und \hat{H} mit den entsprechenden Funktionen (24b), (27b) des freien Kugelkreisel überein.

5.4. Die Lagrange-Funktion $L(\mathbf{x}, \dot{\mathbf{x}}, \boldsymbol{\Omega})$ für das Elektron

Nimmt man die vollständige Hamilton-Funktion $\hat{H}(\mathbf{x}, \mathbf{p}, \mathbf{s})$, die die \mathbf{x} -Abhängigkeit des Systems berücksichtigt, als Ausgangspunkt, um die zugehörige Lagrange-Funktion des Elektrons $L(\mathbf{x}, \dot{\mathbf{x}}, \boldsymbol{\Omega})$ zu konstruieren, so hat man zunächst, wie in Gl. (29b), den Term $(1/2I)\mathbf{s}^2$ zum Paulischen Hamilton-Operator (1), der formal mit der Hamilton-Funktion übereinstimmt, hinzuzufügen

$$\begin{aligned} \hat{H}(\mathbf{x}, \mathbf{p}, \mathbf{s}) = & \frac{1}{2m} \left(\mathbf{p} + \frac{q}{c} \mathbf{A} \right)^2 \\ & - qV + \frac{1}{2I} \mathbf{s}^2 - \alpha(\mathbf{s} \cdot \mathbf{B}), \end{aligned} \quad (29bb)$$

was an den Bewegungsgleichungen $\dot{\mathbf{p}} = -\partial \hat{H} / \partial \mathbf{x}$ und $\dot{\mathbf{s}} = \boldsymbol{\Omega} \times \mathbf{s}$ nichts ändert. Sodann hat man, in Verallgemeinerung von Gl. (IV.2a), zu setzen:

$$L(\mathbf{x}, \dot{\mathbf{x}}, \boldsymbol{\Omega}) = (\dot{\mathbf{x}} \cdot \mathbf{p}) + (\boldsymbol{\Omega} \cdot \mathbf{s}) - \hat{H}(\mathbf{x}, \mathbf{p}, \mathbf{s}).$$

Auf der rechten Seite sind die Impulse \mathbf{p}, \mathbf{s} mit Hilfe der Hamilton-Gleichungen $\dot{\mathbf{x}} = \partial \hat{H} / \partial \mathbf{p}$ und $\boldsymbol{\Omega} = \partial \hat{H} / \partial \mathbf{s}$ durch die Geschwindigkeiten $\dot{\mathbf{x}}, \boldsymbol{\Omega}$ auszudrücken. Man erhält, in Verallgemeinerung von (32b), als Lagrange-Funktion für das Elektron

$$\begin{aligned} L(\mathbf{x}, \dot{\mathbf{x}}, \boldsymbol{\Omega}) = & \frac{m}{2} \dot{\mathbf{x}}^2 - \frac{q}{c} (\dot{\mathbf{x}} \cdot \mathbf{A}) \\ & + qV + \frac{I}{2} (\boldsymbol{\Omega} + \alpha \mathbf{B})^2. \end{aligned} \quad (32bb)$$

Die Bewegungsgleichungen lauten $\dot{\mathbf{p}} = \partial L / \partial \mathbf{x}$ und $\dot{\mathbf{s}} = \boldsymbol{\Omega} \times \mathbf{s}$ mit den Impulsdefinitionen $\mathbf{p} = \partial L / \partial \dot{\mathbf{x}}$ und $\mathbf{s} = \partial L / \partial \boldsymbol{\Omega}$.

In Abschnitt 2.4 hatten wir darauf hingewiesen, daß erst die Einführung einer Spinvariablen Φ die Möglichkeit schafft, von der Hamilton-Funktion $\hat{H}(\mathbf{x}, \mathbf{p}, \mathbf{s})$ zu der Lagrange-Funktion $L(\mathbf{x}, \dot{\mathbf{x}}, \boldsymbol{\Omega})$ überzugehen. Die Spinvariable Φ ist in den Vektoren $\mathbf{s}(\Phi, \boldsymbol{\pi})$ und $\boldsymbol{\Omega}(\Phi, \dot{\Phi})$ gemäß den Gln. (III.2b) und (II.2b) implizit enthalten.

5.5. Der Spindrehimpuls \mathbf{s} als körperfester Vektor

Aus (32b) oder (32bb) folgt durch partielle Differentiation gemäß (IV.3a) für die Größe $\mathbf{s} = \partial L / \partial \boldsymbol{\Omega}$ die Beziehung

$$\mathbf{s} = I(\boldsymbol{\Omega} + \alpha \mathbf{B}). \quad (33)$$

Sie gilt für den Ansatz (b), während beim Ansatz (a) der Vektor \mathbf{s} im Rahmen des Lagrange-Formalismus

wegen $\vec{L}=0$, nicht existiert. Im Hinblick auf (33) kann man demnach den „kanonischen Drehimpuls“ \mathbf{s} , nicht aber den kinetischen Drehimpuls $I\vec{\Omega}$ oder den kanonischen Impuls $\boldsymbol{\pi}$, als klassisches Analogon zum Spindrehimpuls der Quantenmechanik betrachten.

Der Vektor \mathbf{s} (nicht aber die Vektoren $I\vec{\Omega}$ oder $\boldsymbol{\pi}$) führt gemäß (30) eine Präzessionsbewegung um die momentane Achse $\mathbf{B}(t)$ aus. Schreibt man die Präzessionsgleichung (30) gemäß (IV.4) in der Form

$$\dot{\mathbf{s}} = \vec{\Omega} \times \mathbf{s}, \quad (34)$$

so folgt nach den Bemerkungen zu Gl. (14), daß der Spindrehimpuls \mathbf{s} , ebenso wie das magnetische Spinnmoment $\boldsymbol{\mu} = \alpha \mathbf{s}$, *körperfeste Vektoren* sind. Wenn man will, kann man sich das Elektron als rotierende Kugel vorstellen, in die der Spinvektor \mathbf{s} – und (wegen $\alpha < 0$) entgegengesetzt zu ihm der Vektor des magnetischen Spinnmoments $\boldsymbol{\mu}$ – wie eine Stricknadel eingesteckt ist.

In der Bewegungsgleichung (30) kommen die aus der Kreiseltheorie stammenden Modellgrößen I (Trägheitsmoment), Φ (Lagekoordinate), $\vec{\Omega}$ (Winkelgeschwindigkeit) nicht mehr vor. Man kann sich also von der Vorstellung einer rotierenden Kugel befreien und das Elektron – was physikalisch befriedigend ist, etwa im Hinblick auf eine relativistische Verallgemeinerung – als punktförmiges Teilchen auffassen, charakterisiert durch den Spindrehimpuls \mathbf{s} und das entgegengesetzt gerichtete magnetische Spinnmoment $\boldsymbol{\mu}$. Die Beträge beider Vektoren sind Konstante. Hinzu kommen als Bestimmungsgrößen des Punktelektrons der Ortsvektor \mathbf{x} und die Geschwindigkeit $\dot{\mathbf{x}}$ sowie die Konstanten m_e (Masse) und e (Ladung). Bei dieser Auffassung sind die Kreiselgrößen I , Φ , $\vec{\Omega}$ als komplementäre Parameter bzw. als formale Größen zu betrachten.

6. Konstruktion des Spinoperators \mathbf{s}

Wir müssen noch den hermiteschen Spinoperator \mathbf{s} konstruieren, der der in Gl. (22) definierten klassischen Spinfunktion $\mathbf{s}(\Phi, \boldsymbol{\pi})$, deren Komponenten die Poissonklammer-Relation (C'.2a) für Drehimpulse erfüllen, korrespondenzmäßig zugeordnet ist.

Zu dem Zweck betrachten wir zunächst das Hilbert-Raumprodukt

$$\langle \chi | \psi \rangle = \int \chi^* \psi dV. \quad (35)$$

Das Integral ist über den dreidimensionalen Raum der Φ_k , d. h. über den Bereich $-\infty \leq \Phi_k \leq \infty$, mit einem Volumenelement

$$dV = g(\Phi_x, \Phi_y, \Phi_z) d\Phi_x d\Phi_y d\Phi_z \quad (36)$$

zu erstrecken. $\chi(\Phi)$ und $\psi(\Phi)$ sind quadratisch integrierbare Funktionen der Spinvariablen Φ . Der in (36) auftretende Gewichtungsfaktor $g(\Phi)$ ist so zu bestimmen, daß das Skalarprodukt (35) ein invariantes Integral auf der Drehgruppe wird, vgl. Gelfand, Minlos und Shapiro [10]. Diese Bedingung liefert für $g(\Phi)$ explizit den Ausdruck

$$g(\Phi) = 8/(1 + \Phi^2)^2, \quad (37)$$

der im Anhang hergeleitet wird, vgl. (89), (91).

Da im Volumenelement (36) ein Gewichtungsfaktor auftritt, ist der in (3) bzw. (A'.1b) eingeführte Differentialoperator $\boldsymbol{\pi} = (\hbar/i) \partial/\partial \Phi$, der den Vertauschungsrelationen (B'.2b) genügt, nicht hermitesch. Man kann aber dem Operator $\boldsymbol{\pi}$ einen hermiteschen Operator $\tilde{\boldsymbol{\pi}}$, der dieselben Vertauschungsrelationen wie $\boldsymbol{\pi}$ erfüllt, zuordnen, indem man setzt (vgl. Pauli [11]):

$$\tilde{\boldsymbol{\pi}} = \boldsymbol{\pi} + \frac{\hbar}{i} \frac{1}{\sqrt{g}} \frac{\partial \sqrt{g}}{\partial \Phi}, \quad (38)$$

also, unter Berücksichtigung von (37) explizit:

$$\tilde{\boldsymbol{\pi}} = \boldsymbol{\pi} - \frac{\hbar}{i} \frac{2\Phi}{1 + \Phi^2}$$

mit

$$\boldsymbol{\pi} = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \Phi}. \quad (39)$$

Nach diesen Vorbereitungen läßt sich aus der klassischen Spinfunktion $\mathbf{s}(\Phi, \boldsymbol{\pi})$, Gl. (22), der korrespondenzmäßig zugeordnete hermitesche Spinoperator zwanglos konstruieren, indem man die Funktion (22) symmetrisiert und an Stelle von $\boldsymbol{\pi}$ den hermiteschen Operator $\tilde{\boldsymbol{\pi}}$ einführt:

$$\mathbf{s} = \frac{1}{2} \{ \tilde{\boldsymbol{\pi}} + \frac{1}{2} \{ (\Phi \tilde{\boldsymbol{\pi}} \Phi + \Phi (\tilde{\boldsymbol{\pi}} \Phi) + \Phi \times \tilde{\boldsymbol{\pi}} \} \}. \quad (40)$$

Drückt man $\tilde{\boldsymbol{\pi}}$ gemäß (39) als Funktion von $\boldsymbol{\pi}$ und Φ aus, so erhält man unter Verwendung der Vertauschungsrelationen (B'.2b) für $\boldsymbol{\pi}$, Φ nach kurzer Umformung einen Ausdruck für $\mathbf{s}(\Phi, \boldsymbol{\pi})$, der mit Gl. (3) identisch ist. Insbesondere folgt, daß der durch Gl. (3) definierte Spinoperator mit der dort angegebenen Reihenfolge der Faktoren hermitesch ist, wie in Abschnitt 2.2 behauptet wurde.

7. Eigenfunktionen $\psi_{mm'}^{(s)}(\Phi)$ des Spinoperators \mathbf{s}

Die zum Operator \mathbf{s} gehörigen Eigenfunktionen $\psi(\Phi)$ sind nach den Überlegungen des Abschnitts 5 nichts anderes als die Eigenfunktionen des Kugels, vgl. Bopp und Haag [12]. Diese Funktionen stimmen bis auf einen Normierungsfaktor mit den Matrixelementen der $(2s+1)$ -dimensionalen irreduziblen Darstellung $\mathcal{D}^{(s)}$ der Drehgruppe überein, vgl. Casimir [13].

Üblicherweise werden die Matrixelemente $\mathcal{D}_{mm'}^{(s)}(\alpha, \beta, \gamma)$ als Funktionen der Eulerschen Winkel α, β, γ ausgedrückt. Im folgenden beziehen wir uns auf die bei Edmonds [1] verwendete Definition der α, β, γ . Um den Zusammenhang zwischen den Lagekoordinaten Φ_x, Φ_y, Φ_z und α, β, γ des Kreiselherzustellen, drückt man am besten die Komponenten D_{kl} des Drehtensors gemäß Gl. (6) oder die Komponenten $I_{k'}, J_{k'}, K_{k'}$ der Kreiselachsen gemäß Gl. (4) durch die beiden Koordinatentripel aus. Der Vergleich liefert die Beziehungen

$$\begin{aligned}\Phi_x &= \operatorname{tg} \frac{\beta}{2} \cdot \frac{\sin \frac{\gamma - \alpha}{2}}{\cos \frac{\gamma + \alpha}{2}}, & \Phi_y &= \operatorname{tg} \frac{\beta}{2} \cdot \frac{\cos \frac{\gamma - \alpha}{2}}{\cos \frac{\gamma + \alpha}{2}}, \\ \Phi_z &= \operatorname{tg} \frac{\gamma + \alpha}{2}.\end{aligned}\quad (41)$$

Nunmehr können wir die Eigenfunktionen explizit angeben, indem wir setzen:

$$\psi_{mm'}^{(s)}(\Phi_x, \Phi_y, \Phi_z) = \sqrt{\frac{2s+1}{8\pi^2}} \mathcal{D}_{mm'}^{(s)}(\alpha, \beta, \gamma) \quad (42)$$

für $s = 0, 1/2, 1, 3/2, \dots$ und $m, m' = s, s-1, \dots, -s$. Es gelten die Orthonormierungsrelationen

$$\langle \psi_{m_1 m_1'}^{(s_1)} | \psi_{m_2 m_2'}^{(s_2)} \rangle = \delta^{s_1 s_2} \delta_{m_1 m_2} \delta_{m_1' m_2'}. \quad (43)$$

Der Normierungsfaktor in (42) wurde unter Berücksichtigung der Gln. (90), (91) des Anhangs bestimmt.

Speziell für $s=1/2$ bekommt man als orthonormiertes Eigenfunktionssystem:

$$\begin{aligned}\psi_{\frac{1}{2}\frac{1}{2}}^{(\frac{1}{2})}(\Phi) &= \frac{-i - \Phi_z + i}{2\pi \sqrt{1 + \Phi^2}}, & \psi_{\frac{1}{2}-\frac{1}{2}}^{(\frac{1}{2})}(\Phi) &= \frac{-i \Phi_x + i \Phi_y}{2\pi \sqrt{1 + \Phi^2}}, \\ \psi_{-\frac{1}{2}\frac{1}{2}}^{(\frac{1}{2})}(\Phi) &= \frac{-i \Phi_x - i \Phi_y}{2\pi \sqrt{1 + \Phi^2}}, & \psi_{-\frac{1}{2}-\frac{1}{2}}^{(\frac{1}{2})}(\Phi) &= \frac{-i \Phi_z + i}{2\pi \sqrt{1 + \Phi^2}},\end{aligned}\quad (44)$$

wobei die Wurzeln mit Doppelvorzeichen zu verstehen sind.

Die Funktionen $\psi_{mm'}^{(s)}(\Phi)$ sind simultane Eigenfunktionen zu den drei miteinander vertauschbaren Differentialoperatoren \mathbf{s}^2, s_z und s_z' :

$$\mathbf{s}^2 \psi_{mm'}^{(s)} = \hbar^2 s(s+1) \psi_{mm'}^{(s)} \quad (45)$$

$$s_z \psi_{mm'}^{(s)} = \hbar m \psi_{mm'}^{(s)} \quad (46)$$

$$s_z' \psi_{mm'}^{(s)} = \hbar m' \psi_{mm'}^{(s)} \quad (47)$$

mit $s = 0, 1/2, 1, 3/2, \dots$ und $m, m' = s, s-1, \dots, -s$. In Gl. (47) haben wir die z -Komponente eines Operators \mathbf{s}' eingeführt, der sich von \mathbf{s} , Gl. (3), durch das Vorzeichen im letzten Term unterscheidet:

$$\mathbf{s}' = \frac{1}{2} \{ \boldsymbol{\pi} + \Phi(\Phi \boldsymbol{\pi}) - \Phi \times \boldsymbol{\pi} \}. \quad (48)$$

Er ist ebenso wie \mathbf{s} hermitesch und erfüllt die Drehimpulsvertauschungsrelation (C'.2b), jedoch mit umgekehrtem Vorzeichen:

$$(s_i', s_k') = + (\hbar/i) \varepsilon_{ikl} s_l'. \quad (49)$$

Aus den Definitionsgleichungen (3), (48) für die Operatoren \mathbf{s} und \mathbf{s}' folgen die Beziehungen

$$\mathbf{s}^2 = \mathbf{s}'^2, (s_i, s_k') = 0. \quad (50), (51)$$

Um die physikalische Bedeutung des dem Operator (48) korrespondenzmäßig zugeordneten klassischen Vektors \mathbf{s}' klarzulegen, drücken wir in (48) den Vektor $\boldsymbol{\pi}$ gemäß (21) durch Φ, \mathbf{s} aus und erhalten \mathbf{s}' als Funktion von Φ, \mathbf{s} :

$$s_l' = D_{kl}(\Phi) s_k \quad (52)$$

mit $D_{kl}(\Phi)$ gemäß Gl. (6). Das bedeutet nach den Überlegungen in Abschnitt 3, daß s_l' die auf das körperfeste Koordinatensystem $\{\mathbf{I}', \mathbf{J}', \mathbf{K}'\}$ des Kreisels bezogenen Komponenten des Vektors \mathbf{s} sind. Insbesondere ist s_z' , mit $s_z' = D_{kz} s_k = K_{k'} s_k = (\mathbf{K}' \mathbf{s})$, die Projektion des Vektors \mathbf{s} auf die körperfeste \mathbf{K}' -Achse, siehe Gleichung (4). Entsprechend gilt $s_x' = (\mathbf{I}' \mathbf{s})$ und $s_y' = (\mathbf{J}' \mathbf{s})$, vgl. Casimir [13].

Da der kanonische Drehimpuls $\mathbf{s}(t)$ für allgemeine Spinprobleme, wie in Abschnitt 5.5 gezeigt, ein körperfester Vektor ist, folgt für diese Probleme — nicht aber für allgemeine Kreiselprobleme — aus Gl. (10), daß die Komponenten s_l' zeitunabhängig sind, d.h. $s_l' = \text{const.}$ Diese Beziehung läßt sich natürlich auch aus der Darstellung $s_l'(\Phi, \mathbf{s})$ gemäß Gl. (52) herleiten, wenn man diese Gleichung nach der Zeit differenziert und die für allgemeine

Spinprobleme gültige Bewegungsgleichung (IV.4b) für \mathbf{s} sowie den Zusammenhang zwischen $\dot{\Phi}$ und Φ, Ω gemäß (16) berücksichtigt.

Die Gln. (45), (46) zeigen insbesondere, daß der Differentialoperator \mathbf{s} — wie in Abschnitt 2.2 behauptet — Eigenfunktionen mit halbzahligen Eigenwerten besitzt. Damit ist auch das weitverbreitete Vorurteil, Drehimpulsoperatoren ließen sich in den halbzahligen Darstellungen nicht als Differentialoperatoren im Konfigurationsraum ausdrücken, vgl. Edmonds [1] (S. 35 und 68), ausgeräumt.

8. Basisfunktionen $\xi_m^{(s)}(\Phi)$ für allgemeine Spinprobleme

Für ein Spin-1/2-Teilchen gibt es nach (44) vier unabhängige Eigenfunktionen, allgemein für ein Spin- s -Teilchen $(2s+1)^2$ unabhängige Eigenfunktionen $\psi_{mm'}^{(s)}(\Phi)$ mit $m, m' = s, s-1, \dots, -s$. Der Paulische Hamilton-Operator (1) oder auch die Hamilton-Operatoren (29a, b), die im Rahmen des Φ -Formalismus direkt auf Teilchen mit beliebigem Spin $s = 0, 1/2, 1, 3/2, \dots$ angewendet werden können, führen demnach auf Wellenfunktionen, die mehr als $(2s+1)$ Komponenten besitzen, was physikalisch nicht sinnvoll erscheint oder zumindest problematisch ist.

Mit den überzähligen Komponenten ist eine Entartung der Energieniveaus verbunden. Der Paulische Hamilton-Operator (29a) beispielsweise, $H(\mathbf{s}) = -\alpha(\mathbf{s} \cdot \mathbf{B})$ (wir lassen von jetzt ab den Querstrich bei H fort), liefert mit den vier Eigenfunktionen (44) für das Elektron eine Energieaufspaltung in zwei Terme $E = |\alpha| \hbar m \cdot B$, $m = \pm 1/2$, entsprechend einer zum Magnetfeld $\mathbf{B} = (0, 0, B)$ gleichsinnigen oder gegensinnigen Einstellung des magnetischen Momentes $\boldsymbol{\mu} = \alpha \mathbf{s}$. Jeder der beiden Energiewerte ist zweifach entartet, nämlich jeweils gemäß der Quantenzahl $m' = \pm 1/2$. Für Teilchen mit höherem Spin s liegt eine $(2s+1)$ -fache Entartung vor.

Diese Entartung hat für Elementarteilchen keine physikalische Bedeutung, es sei denn, daß man neben dem Spin eine weitere innere Eigenschaft des Teilchens mit der Quantenzahl m' charakterisiert. Im folgenden lassen wir diese Möglichkeit außer Betracht. Wir werden statt dessen zeigen, daß sich die überzähligen Eigenfunktionen und die damit verbundene Entartung für Spin- s -Teilchen zwanglos beseitigen lassen.

8.1. Große und kleine Basis

Zu dem Zweck ergänzen wir die Eigenwertgleichungen (45), (46), (47) um zwei Doppelgleichungen, die die Wirkung der x - und y -Komponenten der Operatoren \mathbf{s} und \mathbf{s}' auf die Eigenfunktionen $\psi_{mm'}^{(s)}(\Phi)$ beschreiben:

$$\begin{aligned} (s_x \pm i s_y) \psi_{mm'}^{(s)} \\ = \hbar \sqrt{(s \mp m)(s \pm m + 1)} \psi_{m \pm 1, m'}^{(s)}, \end{aligned} \quad (53)$$

$$\begin{aligned} (s_x' \pm i s_y') \psi_{mm'}^{(s)} \\ = \hbar \sqrt{(s \mp m')(s \pm m' + 1)} \psi_{m, m' \pm 1}^{(s)}. \end{aligned} \quad (54)$$

Diese Beziehungen folgen in bekannter Weise aus den Eigenwertgleichungen und den Vertauschungsrelationen für \mathbf{s} und \mathbf{s}' .

Denken wir uns das System der Eigenfunktionen $\psi_{mm'}^{(s)}(\Phi)$ mit $m, m' = s, s-1, \dots, -s$ bei vorgegebenem s , in einem quadratischen Schema gemäß (44) angeordnet (m = Zeilenindex, m' = Spaltenindex), so können wir aufgrund der Gln. (46), (53) und (47), (54) sagen, daß der Operator \mathbf{s} nur innerhalb einer Spalte, der Operator \mathbf{s}' nur innerhalb einer Zeile wirkt.

Die Gesamtheit $\psi_{mm'}^{(s)}(\Phi)$ der $(2s+1)^2$ orthonormierten Eigenfunktionen (42) wollen wir — für ein vorgegebenes s — die „große Basis“ nennen. Sie definiert den von den Operatoren \mathbf{s} und \mathbf{s}' aufgespannten, zu s gehörigen unitären Raum.

Die Gesamtheit der in einer (beliebig herausgegriffenen) Spalte stehenden orthonormierten Eigenfunktionen

$$\xi_m^{(s)}(\Phi) = \psi_{mm'}^{(s)}(\Phi), \quad (55)$$

mit $m = s, s-1, \dots, -s$ und festem Index m' , soll eine „kleine Basis“ heißen. Die Funktionen $\xi_m^{(s)}(\Phi)$ erfüllen die Eigenwertgleichungen

$$\begin{aligned} \mathbf{s}^2 \xi_m^{(s)} &= \hbar^2 s(s+1) \xi_m^{(s)}, \\ s_z \xi_m^{(s)} &= \hbar m \xi_m^{(s)} \end{aligned} \quad (56)$$

und die Doppelgleichung

$$\begin{aligned} (s_x \pm i s_y) \xi_m^{(s)} \\ = \hbar \sqrt{(s \mp m)(s \pm m + 1)} \xi_{m \pm 1}^{(s)}. \end{aligned} \quad (57)$$

Es gibt insgesamt $(2s+1)$ verschiedene, voneinander unabhängige kleine Basen.

8.2. Basis für allgemeine Spinprobleme

Wir betrachten zunächst die Situation bei allgemeinen Spinproblemen, charakterisiert durch Ha-

Hamilton-Operatoren $H(\mathbf{s})$ und Observable $Q(\mathbf{s})$, die von der Spinvariablen Φ unabhängig sind.

Nehmen wir als vollständiges Eigenfunktionssystem die große Basis, so läßt der Differentialoperator \mathbf{s} bei Anwendung auf die Basisfunktionen jeweils einen $(2s+1)$ -dimensionalen Unterraum des unitären Raumes invariant. Die Unterräume sind durch die kleinen Basen definiert.

Demnach können wir für allgemeine Spinprobleme eine kleine Basis (55) auswählen (indem wir einen Index m' herausgreifen und festhalten) und diese als vollständiges Spineigenfunktionssystem nehmen. Es besteht aus $(2s+1)$ orthonormierten Funktionen $\xi_m^{(s)}(\Phi)$ mit $m=s, s-1, \dots, -s$. Überzählige Komponenten der Wellenfunktion treten bei dieser Basiswahl nicht auf, was physikalisch befriedigend ist.

Wir haben also das Ergebnis: Aus physikalischen Gründen ist es die kleine Basis $\xi_m^{(s)}(\Phi)$ gemäß (55), die den $(2s+1)$ -dimensionalen unitären Raum für allgemeine Spinprobleme aufspannt.

Die Tatsache, daß $(2s+1)$ verschiedene, zu einander orthogonale kleine Basen existieren und zur Auswahl zur Verfügung stehen, eröffnet die Möglichkeit, eine „verallgemeinerte Spinbasis“ $\chi_m^{(s)}(\Phi)$ als Linearkombination der $(2s+1)$ kleinen Basen zukonstruieren (wir schreiben die Summen künftig mit Summenzeichen):

$$\chi_m^{(s)}(\Phi) = \sum_{m'} \psi_{mm'}^{(s)}(\Phi) C_{m'}^{(s)} \quad (58)$$

mit $m, m' = s, s-1, \dots, -s$. Die Spineigenfunktionen $\chi_m^{(s)}(\Phi)$ erfüllen dieselben Gln. (56), (57) wie $\xi_m^{(s)}(\Phi)$. Damit die $\chi_m^{(s)}(\Phi)$ ein orthonormiertes Funktionssystem bilden, müssen die Koeffizienten $C_{m'}^{(s)}$ die Bedingung $\sum_{m'} C_{m'}^{(s)*} C_{m'}^{(s)} = 1$ erfüllen.

Ob die $(2s+1)$ Koeffizienten $C_{m'}^{(s)}$ eine physikalische Bedeutung haben, d. h. ob man mit ihnen eine zusätzliche innere Eigenschaft des Elementarteilchens — neben seinem Spin — beschreiben kann, ist eine Frage, die wir offenlassen.

8.3. Basis für allgemeine Kreiselprobleme

Anders ist die Situation bei allgemeinen Kreiselproblemen, die durch Hamilton-Operatoren $H(\Phi, \mathbf{s})$ und Observable $Q(\Phi, \mathbf{s})$ charakterisiert sind, in denen die Lagekoordinate Φ des Kreisels explizit auftritt, z. B. bei der quantenmechanischen Behandlung des asymmetrischen Kreisels. In diesem Fall benötigt man für das vollständige Eigen-

funktionssystem des Kreisels sämtliche $(2s+1)^2$ -Funktionen $\psi_{mm'}^{(s)}(\Phi)$ der großen Basis, vgl. Casimir [13].

9. Spin-s-Teilchen im Φ -Formalismus

9.1. Allgemeine Spinprobleme mit Hamilton-Operatoren $H(\mathbf{s})$

Wir beginnen mit dem Fall $s=1/2$ und legen den Paulischen Hamilton-Operator $H(\mathbf{s}) = -\alpha(\mathbf{s}\mathbf{B})$ gemäß (29a) zugrunde. Als vollständiges Spineigenfunktionssystem $\xi_m(\Phi)$ — wir lassen jetzt in (55) den Index s an ξ_m fort — nehmen wir die erste Spalte von (44), also die kleine Basis

$$\xi_m(\Phi) = \psi_{m\frac{1}{2}}^{(\frac{1}{2})}(\Phi)$$

mit $m = 1/2, -1/2$:

$$\xi_{\frac{1}{2}}(\Phi) = \frac{-i - \Phi_z + i}{2\pi \sqrt{1 + \Phi^2}}, \quad (59a)$$

$$\xi_{-\frac{1}{2}}(\Phi) = \frac{-i \Phi_x - i \Phi_y}{2\pi \sqrt{1 + \Phi^2}}. \quad (59b)$$

Die zu dieser Basis gehörenden Matrixelemente $\mathbf{s}_{m_1 m_2} = \langle \xi_{m_1} | \mathbf{s} | \xi_{m_2} \rangle$ des Spinoperators \mathbf{s} lassen sich nach (56), (57) durch die zweireihigen Paulischen Spinmatrizen $\sigma_{m_1 m_2}$ darstellen: $\mathbf{s}_{m_1 m_2} = (\hbar/2) \sigma_{m_1 m_2}$. Es besteht also Übereinstimmung mit der Paulischen Theorie für Spin-1/2-Teilchen.

Die Funktionen (59a, b) bilden auch für allgemeine Spin-1/2-Probleme, charakterisiert durch einen beliebigen Hamilton-Operator $H(\mathbf{s})$, eine Basis. An Stelle von (59a, b) hätte man auch die zweite Spalte von (44), $\eta_m(\Phi) = \psi_{m-\frac{1}{2}}^{(\frac{1}{2})}(\Phi)$ mit $m=1/2, -1/2$, als vollständiges Spineigenfunktionssystem nehmen können. Es würden dieselben Ergebnisse resultieren.

Für ein Spin-s-Teilchen läßt sich die Wellenfunktion $v(\Phi)$ gemäß (55) nach der $(2s+1)$ -dimensionalen Basis $\xi_m(\Phi)$, die von den Operatoren \mathbf{s}^2 und s_z aufgespannt wird, entwickeln:

$$v(\Phi) = \sum_m \xi_m(\Phi) \cdot v_m \quad (60)$$

mit $m = s, s-1, \dots, -s$. Bemerkenswert ist, daß die Spineigenfunktionen $\xi_m(\Phi)$ nach Abschnitt 8 explizit bekannt sind. Die Komponenten $v_m = \langle \xi_m | v \rangle$ der Wellenfunktion bezüglich der Basis $\xi_m(\Phi)$ sind die Wahrscheinlichkeitsamplituden für die $(s+1)$ möglichen Spineinstellungen zur z-Achse.

Ist die Wellenfunktion $v(\Phi)$ speziell ein stationärer Zustand des Systems, so ist sie Eigenfunktion des Hamilton-Operators $H(s)$:

$$H(s)v(\Phi) = E \cdot v(\Phi), \quad (61)$$

wobei s der Differentialoperator (3) ist.

Die zu den Energieeigenwerten E_k gehörigen Lösungen $v_k(\Phi)$ der Schrödinger-Gleichung (61) bilden ihrerseits eine Basis $v_k(\Phi)$, sofern die Eigenwerte nicht entartet sind. Der Zusammenhang zwischen beiden Basissystemen, $v_k(\Phi) = \sum_m \xi_m(\Phi) \cdot v_{mk}$, wird dann durch die unitäre Matrix $v_{mk} = \langle \xi_m | v_k \rangle$ vermittelt ($m, k = s, s-1, \dots, -s$).

Zur Lösung der Differentialgleichung (61) bilden wir das Skalarprodukt $\langle \xi_n | H v \rangle = E \cdot \langle \xi_n | v \rangle$ und formen mit (60) um:

$$\sum_m H_{nm} v_m = E \cdot v_n. \quad (62)$$

Die Matricelemente des Operators H bezüglich der Basis $\xi_m(\Phi)$, also

$$H_{nm} = \langle \xi_n | H \xi_m \rangle = H(s_{nm}), \quad (63)$$

erhält man explizit, indem man in der Funktion $H(s)$, die sich, wie in Abschnitt 1 vorausgesetzt, als Potenzreihe in s_1, s_2, s_3 darstellen läßt, die Operatoren s_k (und entsprechend ihre Produkte) durch die Matrizen $s_{k,nm} = \langle \xi_n | s_k | \xi_m \rangle$ ersetzt. Aus der algebraischen Gleichung (62) können die Lösungen E_k und v_{mk} ($m, k = s, s-1, \dots, -s$) elementar bestimmt werden.

Mit den Gln. (62), (63) haben wir einen Φ -freien Formalismus gewonnen, der für einen Vergleich mit dem üblichen Spinformalismus geeignet ist. Üblicherweise wird ein Spin- s -Teilchen durch einen symmetrischen Spinor $V_{\mu_1 \dots \mu_{2s}}$ der Stufe $2s$ beschrieben, der ebenso wie v_m in Gl. (60) $(2s+1)$ unabhängige Komponenten besitzt (vgl. Landau und Lifschitz [14]):

$$|V\rangle = \sum_{\mu_q} |\Xi_{\mu_1 \dots \mu_{2s}}\rangle \cdot V_{\mu_1 \dots \mu_{2s}} \quad (64)$$

mit $\mu_q = 1, 2$. Der Zustandsvektor $|V\rangle$ wird hier nach einem System formal eingeführter Basisvektoren $|\Xi_{\mu_1 \dots \mu_{2s}}\rangle$ entwickelt. Entsprechend ist in (62) v_m durch den Spinor $V_{\mu_1 \dots \mu_{2s}}$ zu ersetzen, und der Operator H wird ein konstanter Matrixoperator im Raum der Spinoren.

Speziell für $s=1/2$ bekommt (64) die Form $|V\rangle = \sum_{\mu} |\Xi_{\mu}\rangle \cdot V_{\mu}$ mit $\mu=1, 2$, so daß in diesem

Fall, der bereits im Anschluß an die Gln. (59a, b) diskutiert wurde, beide Beschreibungen (60) und (64) formal übereinstimmen.

9.2. Allgemeine Spinprobleme mit Hamilton-Operatoren $H(\mathbf{x}, \mathbf{p}, \mathbf{s})$

Nimmt man zur Beschreibung eines Spin- s -Teilchens im Rahmen des Φ -Formalismus noch die Ortskoordinate \mathbf{x} hinzu, indem man einen Hamilton-Operator $H(\mathbf{x}, \mathbf{p}, \mathbf{s})$, z.B. den Paulischen Operator (1), zugrunde legt, so kann man, da die Operatoren \mathbf{x}, \mathbf{p} mit dem Operator \mathbf{s} vertauschbar sind, den unitären Raum R als direkten Produktraum $R = R_x \times R_{\Phi}$ konstruieren. Er besteht aus dem unitären Ortseigenraum R_x und dem unitären Spineigenraum R_{Φ} . Die Basisfunktionen können demnach in Produkte $\zeta_{\varrho}(\mathbf{x}) \xi_m(\Phi)$ aufgespalten werden.

Wir führen in den Räumen R, R_x, R_{Φ} drei Skalarprodukte von Funktionen $f(\mathbf{x}, \Phi), g(\mathbf{x}, \Phi)$ ein:

$$\langle f | g \rangle = \int_{\mathbf{x}} \int_{\Phi} dV_x dV_{\Phi} f^* g, \quad (65a)$$

$$\langle f | g \rangle_x = \int_{\mathbf{x}} dV_x f^* g, \quad (65b)$$

$$\langle f | g \rangle_{\Phi} = \int_{\Phi} dV_{\Phi} f^* g \quad (65c)$$

mit $dV_x = dx dy dz$ und $dV_{\Phi} = \bar{g}(\Phi) d\Phi_x d\Phi_y d\Phi_z$ gemäß (36). Die Orthonormierungsrelationen für die Basisfunktionen lauten dann: $\langle \zeta_{\alpha} | \zeta_{\varrho} \rangle_x = \delta_{\alpha\varrho}$ und $\langle \xi_k | \xi_m \rangle_{\Phi} = \delta_{km}$.

In Verallgemeinerung von (60) läßt sich die Wellenfunktion $v(\mathbf{x}, \Phi)$ eines Spin- s -Teilchens folgendermaßen entwickeln:

$$v(\mathbf{x}, \Phi) = \sum_{\varrho, m} \zeta_{\varrho}(\mathbf{x}) \xi_m(\Phi) \cdot v_{\varrho m}. \quad (66)$$

Die Spinquantenzahl m nimmt die Werte $m = s, s-1, \dots, -s$ an, die Bahnquantenzahl ϱ numeriert die Basisfunktionen im unitären Ortsraum R_x . Für kontinuierliche Werte von ϱ ist die Summe über ϱ durch ein Integral zu ersetzen. Die Komponenten $v_{\varrho m} = \langle \zeta_{\varrho} \xi_m | v \rangle$ der Wellenfunktion bezüglich der Basis $\zeta_{\varrho}(\mathbf{x}) \xi_m(\Phi)$ sind die Wahrscheinlichkeitsamplituden dafür, das Teilchen im Bahnzustand ϱ und im Spinzustand m anzutreffen.

Mit den aus (66) abgeleiteten Funktionen

$$v_m(\mathbf{x}) = \langle \xi_m | v \rangle_{\Phi} = \sum_{\varrho} \zeta_{\varrho}(\mathbf{x}) \cdot v_{\varrho m} \quad (67)$$

läßt sich Gl. (66) analog zu (60) schreiben:

$$v(\mathbf{x}, \Phi) = \sum_m \xi_m(\Phi) \cdot v_m(\mathbf{x}). \quad (68)$$

Wenn $\nu(\mathbf{x}, \Phi)$ speziell ein stationärer Zustand ist, so ist er eine Lösung der Schrödinger-Gleichung

$$H(\mathbf{x}, \mathbf{p}, \mathbf{s}) \nu(\mathbf{x}, \Phi) = E \cdot \nu(\mathbf{x}, \Phi), \quad (69)$$

in der \mathbf{p} und \mathbf{s} beides Differentialoperatoren sind.

Multipliziert man (69) im R_Φ -Raum skalar mit $\xi_n(\Phi)$, $\langle \xi_n | H \nu \rangle_\Phi = E \cdot \langle \xi_n | \nu \rangle_\Phi$, so nimmt die Schrödinger-Gleichung in Verallgemeinerung von (62) die Form

$$\sum_m H_{nm}(\mathbf{x}, \mathbf{p}) \nu_m(\mathbf{x}) = E \cdot \nu_n(\mathbf{x}) \quad (70)$$

an, in der die Spinkoordinate Φ eliminiert ist. Der Differentialoperator

$$H_{nm}(\mathbf{x}, \mathbf{p}) = \langle \xi_n | H \xi_m \rangle_\Phi = H(\mathbf{x}, \mathbf{p}, \mathbf{s}_{nm}) \quad (71)$$

ist wieder analog zu (63) definiert.

Im Φ -freien, üblichen Formalismus wird der Spinor $V_{\mu_1 \dots \mu_{2s}}$ ebenso wie $|V\rangle$ in Gl. (64) eine Fnnktion von \mathbf{x} :

$$|V(\mathbf{x})\rangle = \sum_{\mu_Q} |\Xi_{\mu_1 \dots \mu_{2s}}\rangle \cdot V_{\mu_1 \dots \mu_{2s}}(\mathbf{x}). \quad (72)$$

Gl. (72) ist das Pendant zu (68). Entsprechend tritt in (70) an die Stelle der Funktion $\nu_m(\mathbf{x})$ der Spinor $V_{\mu_1 \dots \mu_{2s}}(\mathbf{x})$. Der Hamilton-Operator (71) ist durch einen geeigneten Matrixoperator im Spinorraum zu ersetzen.

10. Zusammenfassung

Der von dem Spindifferentialoperator $\mathbf{s}(\Phi, \pi)$ gemäß Gl. (3) ausgehende Spinformalismus läßt sich im Rahmen der nichtrelativistischen Quantenmechanik in konsistenter Weise auf Teilchen mit beliebigem Spin $s=0, 1/2, 1, 3/2, \dots$ anwenden. Er führt auf $(2s+1)$ -komponentige Wellenfunktionen. Überzählige Komponenten treten — auch bei Anwesenheit äußerer Felder — nicht auf. Damit entfallen auch die Komplikationen, die bei der Eliminierung überzähliger Komponenten entstehen, vgl. Lévy-Leblond [15], Hagen und Hurley [16].

Der Φ -Formalismus vermittelt einen korrespondenzmäßigen Übergang von der klassischen Kreiseltheorie (Φ als Drehvektor, der die Orientierung des Kreisels festlegt) zur quantenmechanischen Spintheorie (Φ als kontinuierliche Spinvariable). Der Formalismus stimmt für Spin-1/2-Teilchen mit der Paulischen Spintheorie überein.

Herrn Prof. Dr. Georg Süßmann (München) danke ich für viele Anregungen und klärende Diskussionen.

Anhang

Ergänzend sollen noch einige gruppentheoretische Aspekte des Φ -Formalismus erörtert werden.

Es seien D^a, D^b, D Elemente der dreidimensionalen reellen Drehgruppe G_D mit $G = \text{SO}(3)$. Dem Zusammensetzen zweier Drehungen D^a und D^b zu einer resultierenden D entspricht das Produkt der in (5) eingeführten Drehmatrizen

$$D_{kl} = D_{km}^a D_{ml}^b. \quad (73)$$

Bei der Parametrisierung der Drehgruppe G_D durch die Drehvektoren Φ bekommt Gl. (73) unter Verwendung der Zuordnung $D \leftrightarrow \Phi$, $D^a \leftrightarrow \Phi^a$, $D^b \leftrightarrow \Phi^b$ gemäß (6), (7) die Gestalt

$$\Phi = \frac{\Phi^a + \Phi^b + \Phi^a \times \Phi^b}{1 - (\Phi^a \Phi^b)}, \quad (74)$$

aus der die Beziehung

$$1 + \Phi^2 = \frac{(1 + \Phi^{a2})(1 + \Phi^{b2})}{\{1 - (\Phi^a \Phi^b)\}^2} \quad (75)$$

folgt.

Die Parameter $\Phi = (\Phi_x, \Phi_y, \Phi_z)$ bilden ihrerseits eine Gruppe G_Φ :

1. Die Gruppenmultiplikation $\Phi = \Phi^a \circ \Phi^b$ ist definiert gemäß (74):

$$\Phi^a \circ \Phi^b = \frac{\Phi^a + \Phi^b + \Phi^a \times \Phi^b}{1 - (\Phi^a \Phi^b)}. \quad (76)$$

2. Die Gruppenmultiplikation ist assoziativ:

$$(\Phi^a \circ \Phi^b) \circ \Phi^c = \Phi^a \circ (\Phi^b \circ \Phi^c). \quad (77)$$

3. Es gibt ein Einselement Φ^e mit

$$\Phi^e = 0, \quad (78)$$

so daß $\Phi^e \circ \Phi = \Phi \circ \Phi^e = \Phi$ gilt.

4. Es gibt zu jedem Element Φ ein inverses Φ^{-1} mit

$$\Phi^{-1} = -\Phi, \quad (79)$$

so daß $\Phi^{-1} \circ \Phi = \Phi \circ \Phi^{-1} = \Phi^e$ gilt.

Die Parametergruppe G_Φ und die Dreigruppe G_D sind isomorph.

Das in (35), (36) definierte Hilbertraumprodukt

$$\langle \chi | \psi \rangle = \int F(\Phi) g(\Phi) d\Phi_x d\Phi_y d\Phi_z, \quad (80)$$

mit $F(\Phi) = \chi^*(\Phi) \psi(\Phi)$, muß ein invariantes Integral der Funktion $F(\Phi)$ auf der Drehgruppe

sein, das heißt (vgl. Gelfand, Minlos und Shapiro [10]), es muß die Bedingung

$$\int F(\Phi \circ \Phi^a) g(\Phi) d\Phi_x d\Phi_y d\Phi_z = \int F(\Phi) g(\Phi) d\Phi_x d\Phi_y d\Phi_z \quad (81)$$

für einen beliebigen konstanten Parameter Φ^a erfüllt sein. Das Integral ist über den gesamten Parameterbereich $-\infty \leq \Phi_k \leq \infty$ zu erstrecken. Aus der Bedingung (81) läßt sich der Gewichtsfaktor $g(\Phi)$ des invarianten Volumenelements $dV = g(\Phi) d\Phi_x d\Phi_y d\Phi_z$ bis auf einen Zahlenfaktor eindeutig bestimmen.

Gleichung (81) bedeutet die Rechtsinvarianz des Skalarproduktes (80). Ersetzt man in (81) $F(\Phi \circ \Phi^a)$ durch $F(\Phi^a \circ \Phi)$, so erhält man die Bedingung für die Linksinvarianz. Beide Bedingungen führen auf denselben Ausdruck für $g(\Phi)$, wie es sein muß.

Um $g(\Phi)$ zu bestimmen, führen wir auf der linken Seite von (81) eine neue Integrationsvariable $\bar{\Phi}$ mit $\bar{\Phi} = \Phi \circ \Phi^a$ ein:

$$\int F(\bar{\Phi}) g(\bar{\Phi} \circ (\Phi^a)^{-1}) \cdot \frac{\partial(\Phi_x, \Phi_y, \Phi_z)}{\partial(\bar{\Phi}_x, \bar{\Phi}_y, \bar{\Phi}_z)} d\bar{\Phi}_x d\bar{\Phi}_y d\bar{\Phi}_z = \int F(\Phi) g(\Phi) d\Phi_x d\Phi_y d\Phi_z. \quad (82)$$

Zwischen Φ und $\bar{\Phi}$ besteht der Zusammenhang

$$\Phi = \bar{\Phi} \circ (\Phi^a)^{-1} = \frac{\bar{\Phi} - \Phi^a - \bar{\Phi} \times \Phi^a}{1 + (\bar{\Phi} \Phi^a)}, \quad (83)$$

aus dem sich die Funktionaldeterminante berechnen läßt:

$$\frac{\partial(\Phi_x, \Phi_y, \Phi_z)}{\partial(\bar{\Phi}_x, \bar{\Phi}_y, \bar{\Phi}_z)} = \left(\frac{1 + \Phi^a{}^2}{\{1 + (\bar{\Phi} \Phi^a)\}^2} \right)^2. \quad (84)$$

Unter Berücksichtigung von (74), (75) folgt aus (83) die Beziehung

$$1 + (\bar{\Phi} \circ (\Phi^a)^{-1})^2 = \frac{(1 + \bar{\Phi}^2)(1 + \Phi^a{}^2)}{\{1 - (\bar{\Phi} \Phi^a)\}^2}. \quad (85)$$

Damit läßt sich (84) auf die Form

$$\frac{\partial(\Phi_x, \Phi_y, \Phi_z)}{\partial(\bar{\Phi}_x, \bar{\Phi}_y, \bar{\Phi}_z)} = \left(\frac{1 + (\bar{\Phi} \circ (\Phi^a)^{-1})^2}{1 + \bar{\Phi}^2} \right)^2 \quad (86)$$

bringen. Wir setzen (86) in (82) ein und ändern die Bezeichnung der Integrationsvariablen auf der linken Seite, indem wir Φ anstelle von $\bar{\Phi}$ schreiben:

$$\int F(\Phi) \frac{g(\Phi \circ (\Phi^a)^{-1}) \cdot \{1 + (\Phi \circ (\Phi^a)^{-1})^2\}^2}{\{1 + \Phi^2\}^2} \cdot d\Phi_x d\Phi_y d\Phi_z = \int F(\Phi) g(\Phi) d\Phi_x d\Phi_y d\Phi_z. \quad (87)$$

Da $F(\Phi)$ eine willkürliche (integrierbare) Funktion ist, folgt

$$g(\Phi \circ (\Phi^a)^{-1}) \cdot \{1 + (\Phi \circ (\Phi^a)^{-1})^2\}^2 = g(\Phi) \cdot \{1 + \Phi^2\}^2. \quad (88)$$

Diese Gleichung muß für einen beliebigen Drehvektor Φ^a erfüllt sein, so daß man endgültig als Gewichtsfaktor, bis auf einen Zahlenfaktor ϱ , den Ausdruck

$$g(\Phi) = \varrho \cdot \frac{1}{(1 + \Phi^2)^2}. \quad (89)$$

bekommt. Für das Gesamtvolumen des Parameter-raumes ergibt sich

$$V = \int dV = \int g(\Phi) d\Phi_x d\Phi_y d\Phi_z = \varrho \cdot \pi^2. \quad (90)$$

Um einen bequemen Anschluß an die Parametrisierung der Drehgruppe G_D durch die Eulerschen Winkel α, β, γ zu gewinnen, setzen wir

$$\varrho = 8. \quad (91)$$

Dann folgt $V = 8\pi^2$ in Übereinstimmung mit der häufig verwendeten Normierung des invarianten Volumenelements $dV = g(\alpha, \beta, \gamma) d\alpha d\beta d\gamma$ mit dem Gewichtsfaktor $g(\alpha, \beta, \gamma) = \sin \beta$ und dem Integrationsbereich $0 \leq \alpha \leq 2\pi, 0 \leq \beta \leq \pi, 0 \leq \gamma \leq 2\pi$, vgl. Edmonds [1]. Die Gln. (89), (90), (91) werden in den Abschnitten 6 und 7 benötigt.

- [1] A. R. Edmonds, Drehimpulse in der Quantenmechanik, Mannheim 1964.
- [2] E. Fick, Einführung in die Grundlagen der Quantentheorie, Frankfurt a. M. 1968.
- [3] G. Falk, Z. Phys. **130**, 51 [1951].
- [4] G. Falk, Z. Phys. **131**, 470 [1952].
- [5] G. Falk, Math. Ann. **123**, 379 [1951].
- [6] W. Donner u. G. Süßmann, Erg. exakt. Naturwiss. **37**, 1 [1964].
- [7] G. Falk, Z. Phys. **135**, 431 [1953].
- [8] J. L. Synge, Classical Dynamics, in Handb. d. Physik (Herausg. S. Flügge), Springer-Verlag Berlin 1960, Bd. III/1.
- [9] A. Duschek u. A. Hochrainer, Tensorrechnung in analytischer Darstellung, Wien 1960, Bd. I.

- [10] I. M. Gelfand, R. A. Minlos u. Z. Ya. Shapiro, Representations of the Rotation and Lorentz Groups and their Applications, Oxford, London, New York, Paris 1963.
- [11] W. Pauli, Die allg. Prinzipien der Wellenmechanik, in Handb. d. Physik (Herausg. S. Flügge), Springer-Verlag 1958, Bd. V/1.
- [12] F. Bopp u. R. Haag, Z. Naturforsch. **5a**, 644 (1950).
- [13] H. B. G. Casimir, Rotation of a Rigid Body in Quantum Mechanics, Diss., Leyden 1931.
- [14] L. D. Landau u. E. M. Lifschitz, Lehrb. d. theor. Physik, Berlin 1965, Bd. III.
- [15] J.-M. Lévy-Leblond, Commun. Math. Phys. **6**, 286 (1967).
- [16] C. R. Hagen u. W. J. Hurley, Phys. Rev. Lett. **24**, 1381 (1970).