VII.2.2 Beispiel: Addition von zwei Spins $\frac{1}{2}$

Zur Illustration der Ergebnisse des vorigen Abschnitts betrachten wir nun die Addition der Drehimpulsoperatoren $\hat{\vec{S}}^{(1)}$, $\hat{\vec{S}}^{(2)}$ zweier Spin-$\frac{1}{2}$-Teilchen.

Sei $\hat{\vec{S}}$ der Gesamtspinoperator des Systems:

$$\hat{\vec{S}} = \hat{\vec{S}}^{(1)} + \hat{\vec{S}}^{(2)}, \tag{VII.27}$$

der auf einem Hilbert-Raum $\mathscr{H} = \mathscr{H}_1 \otimes \mathscr{H}_2$ von Dimension 4 wirkt. Hiernach wollen wir die gemeinsamen Eigenzustände von $\hat{\vec{S}}^2$ und $\hat{S}_z$ in Abhängigkeit von solchen von $\hat{S}_z^{(1)}$ und $\hat{S}_z^{(2)}$ bestimmen.

VII.2.2 a Eigenvektoren von $\hat{S}_z^{(1)}$ und $\hat{S}_z^{(2)}$

Den ganzen Abschnitt hindurch nehmen die mit $\big[\hat{\vec{S}}^{(1)}\big]^2$ und $\big[\hat{\vec{S}}^{(2)}\big]^2$ assoziierten Quantenzahlen s_1, s_2 immer den gleichen Wert $\frac{1}{2}$ an. Deshalb werden die gemeinsamen Eigenzustände zu den kommutierenden Operatoren

$$\Big\{\big[\hat{\vec{S}}^{(1)}\big]^2, \hat{S}_z^{(1)}, \big[\hat{\vec{S}}^{(2)}\big]^2, \hat{S}_z^{(2)}\Big\} \tag{VII.28}$$

nur durch die mit $\hat{S}_z^{(1)}$ und $\hat{S}_z^{(2)}$ assoziierten Quantenzahlen $m_{s_1} = \pm\frac{1}{2}$ und $m_{s_2} = \pm\frac{1}{2}$ gekennzeichnet. Für diese Eigenzustände wird eine neue Notation eingeführt. Anstelle der im Abschn. VII.2.1 benutzten Bezeichnung $\{|m_{s_1}; m_{s_2}\rangle = |m_{s_1}\rangle \otimes |m_{s_2}\rangle\}$ — unter Weglassung der unnötigen Quantenzahlen s_1, s_2 — wird eine „Spin-up, Spin-down" bzw. „Spin-rauf, Spin-runter"-Schreibweise benutzt, in der $\uparrow$ für $m_{s_j} = +\frac{1}{2}$ und $\downarrow$ für $m_{s_j} = -\frac{1}{2}$ steht. Somit gelten in jedem Ein-Teilchen-Hilbert-Raum $\mathscr{H}_j$ die Gleichungen[(38)]

$$\hat{S}_z^{(j)}|\uparrow\rangle_j = \frac{\hbar}{2}|\uparrow\rangle_j \quad \text{und} \quad \hat{S}_z^{(j)}|\downarrow\rangle_j = -\frac{\hbar}{2}|\downarrow\rangle_j, \tag{VII.29}$$

wobei die tiefgestellten Indizes j an das Label des Teilchens erinnern. Für spätere Berechnungen lohnt es sich auch, die Wirkung der Auf- und Absteigeoperatoren zu schreiben:

$$\hat{S}_+^{(j)}|\uparrow\rangle_j = |\varnothing\rangle \quad , \quad \hat{S}_+^{(j)}|\downarrow\rangle_j = \hbar|\uparrow\rangle_j, \tag{VII.30a}$$

und

$$\hat{S}_-^{(j)}|\uparrow\rangle_j = \hbar|\downarrow\rangle_j \quad , \quad \hat{S}_+^{(j)}|\downarrow\rangle_j = |\varnothing\rangle. \tag{VII.30b}$$

Dann werden die Zwei-Teilchen-Zustände, die Eigenzustände zu den kompatiblen Observablen des Satzes (VII.28) sind, mit

$$\big\{|\uparrow\uparrow\rangle, |\uparrow\downarrow\rangle, |\downarrow\uparrow\rangle, |\downarrow\downarrow\rangle\big\} \tag{VII.31}$$

bezeichnet, wobei $|\uparrow\uparrow\rangle \equiv |\uparrow\rangle_1 \otimes |\uparrow\rangle_2$, $|\uparrow\downarrow\rangle \equiv |\uparrow\rangle_1 \otimes |\downarrow\rangle_2$, $|\downarrow\uparrow\rangle \equiv |\downarrow\rangle_1 \otimes |\uparrow\rangle_2$, und $|\uparrow\downarrow\rangle \equiv |\downarrow\rangle_1 \otimes |\downarrow\rangle_2$.

Angewandt auf diese Zustände führen die Gl. (VII.29) mit $j = 1$ oder 2 zu

$$\hat{S}_z^{(1)}|\uparrow\uparrow\rangle = \frac{\hbar}{2}|\uparrow\uparrow\rangle \quad , \quad \hat{S}_z^{(1)}|\uparrow\downarrow\rangle = \frac{\hbar}{2}|\uparrow\downarrow\rangle \quad , \quad \hat{S}_z^{(1)}|\downarrow\uparrow\rangle = -\frac{\hbar}{2}|\downarrow\uparrow\rangle \quad , \quad \hat{S}_z^{(1)}|\downarrow\downarrow\rangle = -\frac{\hbar}{2}|\downarrow\downarrow\rangle \tag{VII.32a}$$

und

$$\hat{S}_z^{(2)}|\uparrow\uparrow\rangle = \frac{\hbar}{2}|\uparrow\uparrow\rangle \quad , \quad \hat{S}_z^{(2)}|\uparrow\downarrow\rangle = -\frac{\hbar}{2}|\uparrow\downarrow\rangle \quad , \quad \hat{S}_z^{(2)}|\downarrow\uparrow\rangle = \frac{\hbar}{2}|\downarrow\uparrow\rangle \quad , \quad \hat{S}_z^{(2)}|\downarrow\downarrow\rangle = -\frac{\hbar}{2}|\downarrow\downarrow\rangle, \tag{VII.32b}$$

weil $\hat{S}_z^{(1)}$ bzw. $\hat{S}_z^{(2)}$ nur den Spin-Zustand des ersten bzw. zweiten Teilchens „sieht".[(39)]

Bemerkung: Im Abschn. II.3 wurden $|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle$ jeweils mit $|S_z^+\rangle, |S_z^-\rangle$ bezeichnet. Eine weitere, oft benutzte Notation ist $|+\rangle, |-\rangle$.

(38) Hier ist $\hat{S}_z^{(j)}$ der Ein-Teilchen-Operator auf $\mathscr{H}_j$, nicht der Zwei-Teilchen-Operator auf $\mathscr{H}$ mit einem nichtgeschriebenen Identitätsoperator auf dem Hilbert-Raum des anderen Spins.

(39) Weniger salopp gesagt stehen $\hat{S}_z^{(1)}$ und $\hat{S}_z^{(2)}$ hier wieder für $\hat{S}_z^{(1)} \otimes \hat{\mathbb{1}}_{\mathscr{H}_2}$ und $\hat{\mathbb{1}}_{\mathscr{H}_1} \otimes \hat{S}_z^{(2)}$.

VII.2.2 b Eigenwerte und Eigenvektoren von $\hat{\vec{S}}^2$ und $\hat{S}_z$

Laut der Regel (VII.26) sind die Eigenwerte von $\hat{\vec{S}}^2$ und $\hat{S}_z$ jeweils der Form $S(S+1)\hbar^2$ bzw. $M\hbar$ mit $S \in \{0,1\}$ und $M \in \{-S,\dots,S\}$ bei gegebener S. Dementsprechend existieren vier paarweise orthogonale normierte Zustände

$$\big\{|S,M\rangle\big\} = \big\{|1,1\rangle, |1,0\rangle, |1,-1\rangle, |0,0\rangle\big\}, \tag{VII.33}$$

die gemeinsame Eigenzustände zu den kommutierenden Operatoren

$$\Big\{\big[\hat{\vec{S}}^{(1)}\big]^2, \big[\hat{\vec{S}}^{(2)}\big]^2, \hat{\vec{S}}^2, \hat{S}_z\Big\} \tag{VII.34}$$

sind:

$$\hat{\vec{S}}^2|1,1\rangle = 2\hbar^2|1,1\rangle \ \ , \ \ \hat{\vec{S}}^2|1,0\rangle = 2\hbar^2|1,0\rangle \ \ , \ \ \hat{\vec{S}}^2|1,-1\rangle = 2\hbar^2|1,-1\rangle \ \ , \ \ \hat{\vec{S}}^2|0,0\rangle = |\varnothing\rangle \tag{VII.35a}$$

und

$$\hat{S}_z|1,1\rangle = \hbar|1,1\rangle \ \ , \ \ \hat{S}_z|1,0\rangle = |\varnothing\rangle \ \ , \ \ \hat{S}_z|1,-1\rangle = -\hbar|1,1\rangle \ \ , \ \ \hat{S}_z|0,0\rangle = |\varnothing\rangle. \tag{VII.35b}$$

Dabei bedeutet die Anwesenheit des Null-Vektors $|\varnothing\rangle$ auf der rechten Seite einer Gleichung, dass der Vektor $|S,M\rangle$ auf der linken Seite der Gleichung Eigenvektor des darauf angewandten Operators mit dem Eigenwert 0 ist.

Im Folgenden werden die Eigenzustände (VII.33) durch die Basisvektoren (VII.31) ausgedrückt.

Bemerkung: Laut der Gl. (VII.22) gilt $|1,1\rangle = |\uparrow\uparrow\rangle$: dies werden wir hiernach wiederfinden.

Wirkung von $\hat{S}_z$ auf die Eigenzustände von $\hat{S}_z^{(1)}$ und $\hat{S}_z^{(2)}$

Die simultanen Eigenzustände (VII.31) von $\hat{S}_z^{(1)}$ und $\hat{S}_z^{(2)}$ sind eigentlich auch Eigenzustände des Operators $\hat{S}_z$.

Dank der Gl. (VII.32) gilt nämlich $\hat{S}_z|\uparrow\uparrow\rangle = \hat{S}_z^{(1)}|\uparrow\uparrow\rangle + \hat{S}_z^{(2)}|\uparrow\uparrow\rangle = \frac{\hbar}{2}|\uparrow\uparrow\rangle + \frac{\hbar}{2}|\uparrow\uparrow\rangle$, d.h.

$$\hat{S}_z|\uparrow\uparrow\rangle = \hbar|\uparrow\uparrow\rangle, \tag{VII.36a}$$

und auf ähnliche Weise

$$\hat{S}_z|\downarrow\downarrow\rangle = -\hbar|\downarrow\downarrow\rangle. \tag{VII.36b}$$

Dann ergibt sich $\hat{S}_z|\uparrow\downarrow\rangle = \hat{S}_z^{(1)}|\uparrow\downarrow\rangle + \hat{S}_z^{(2)}|\uparrow\downarrow\rangle = \frac{\hbar}{2}|\uparrow\downarrow\rangle - \frac{\hbar}{2}|\uparrow\downarrow\rangle$, d.h.

$$\hat{S}_z|\uparrow\downarrow\rangle = |\varnothing\rangle = 0|\uparrow\downarrow\rangle \tag{VII.36c}$$

und noch

$$\hat{S}_z|\downarrow\uparrow\rangle = |\varnothing\rangle = 0|\downarrow\uparrow\rangle. \tag{VII.36d}$$

Dabei haben wir gefunden, dass die Eigenwerte von $\hat{S}_z$, wie erwartet, $\{+\hbar, 0, -\hbar\}$ sind, wobei der Eigenwert 0 zweimal entartet ist.

Wirkung von $\hat{\vec{S}}^2$ auf die Eigenzustände von $\hat{S}_z^{(1)}$ und $\hat{S}_z^{(2)}$

Um die Wirkung des quadrierten Gesamtspinoperators $\hat{\vec{S}}^2$ auf die Eigenzustände von $\hat{S}_z^{(1)}$ und $\hat{S}_z^{(2)}$ zu bestimmen, lohnt es sich, $\hat{\vec{S}}^2$ ein wenig umzuschreiben. Man kann nämlich erstens

$$\hat{\vec{S}}^2 = \big[\hat{\vec{S}}^{(1)} + \hat{\vec{S}}^{(2)}\big]^2 = \big[\hat{\vec{S}}^{(1)}\big]^2 + \big[\hat{\vec{S}}^{(2)}\big]^2 + 2\hat{\vec{S}}^{(1)}\cdot\hat{\vec{S}}^{(2)}$$

schreiben, und dann die Gleichungen $\big[\hat{\vec{S}}^{(1)}\big]^2 = \big[\hat{\vec{S}}^{(2)}\big]^2 = \frac{3}{4}\hbar^2\hat{\mathbb{1}}_{\mathscr{H}}$ und die Identität

$$2\hat{\vec{S}}^{(1)}\cdot\hat{\vec{S}}^{(2)} = 2\hat{S}_x^{(1)}\hat{S}_x^{(2)} + 2\hat{S}_y^{(1)}\hat{S}_y^{(2)} + 2\hat{S}_z^{(1)}\hat{S}_z^{(2)} = \hat{S}_+^{(1)}\hat{S}_-^{(2)} + \hat{S}_-^{(1)}\hat{S}_+^{(2)} + 2\hat{S}_z^{(1)}\hat{S}_z^{(2)}$$

mit den Auf- und Absteigeoperatoren für den ersten oder den zweiten Spin benutzen. Insgesamt gilt

$$\hat{\vec{S}}^2 = \frac{3}{2}\hbar^2\hat{\mathbb{1}}_{\mathscr{H}} + \hat{S}_+^{(1)}\hat{S}_-^{(2)} + \hat{S}_-^{(1)}\hat{S}_+^{(2)} + 2\hat{S}_z^{(1)}\hat{S}_z^{(2)}. \tag{VII.37}$$

Unter Nutzung der Gl. (VII.30) und (VII.31) erhält man dann

$$\begin{aligned}\hat{\vec{S}}^{\,2}|\uparrow\uparrow\rangle &= \frac{3}{2}\hbar^2|\uparrow\uparrow\rangle + \hat{S}_+^{(1)}\hat{S}_-^{(2)}|\uparrow\uparrow\rangle + \hat{S}_-^{(1)}\hat{S}_+^{(2)}|\uparrow\uparrow\rangle + 2\hat{S}_z^{(1)}\hat{S}_z^{(2)}|\uparrow\uparrow\rangle\\ &= \frac{3}{2}\hbar^2|\uparrow\uparrow\rangle + |\varnothing\rangle + |\varnothing\rangle + 2\frac{\hbar}{2}\frac{\hbar}{2}|\uparrow\uparrow\rangle,\end{aligned}$$

wobei die zwei Null-Vektoren aus der Wirkung der Aufsteigeoperatoren auf die Spin-up-Zustände folgen, d.h. insgesamt

$$\hat{\vec{S}}^{\,2}|\uparrow\uparrow\rangle = 2\hbar^2|\uparrow\uparrow\rangle. \tag{VII.38a}$$

Auf die gleiche Weise findet man

$$\hat{\vec{S}}^{\,2}|\downarrow\downarrow\rangle = 2\hbar^2|\downarrow\downarrow\rangle, \tag{VII.38b}$$

d.h. $|\uparrow\uparrow\rangle$ und $|\downarrow\downarrow\rangle$ sind beide Eigenvektoren von $\hat{\vec{S}}^{\,2}$ mit dem Eigenwert $2\hbar^2$, entsprechend $S = 1$.

Dann gilt

$$\begin{aligned}\hat{\vec{S}}^{\,2}|\uparrow\downarrow\rangle &= \frac{3}{2}\hbar^2|\uparrow\downarrow\rangle + \hat{S}_+^{(1)}\hat{S}_-^{(2)}|\uparrow\downarrow\rangle + \hat{S}_-^{(1)}\hat{S}_+^{(2)}|\uparrow\downarrow\rangle + 2\hat{S}_z^{(1)}\hat{S}_z^{(2)}|\uparrow\downarrow\rangle\\ &= \frac{3}{2}\hbar^2|\uparrow\downarrow\rangle + |\varnothing\rangle + \hbar^2|\downarrow\uparrow\rangle + 2\frac{\hbar}{2}\left(-\frac{\hbar}{2}\right)|\uparrow\downarrow\rangle,\end{aligned}$$

d.h.

$$\hat{\vec{S}}^{\,2}|\uparrow\downarrow\rangle = \hbar^2(|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle). \tag{VII.38c}$$

Schließlich findet man auch mit einer ähnlichen Berechnung

$$\hat{\vec{S}}^{\,2}|\downarrow\uparrow\rangle = \hbar^2(|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle). \tag{VII.38d}$$

Laut den letzten beiden Ergebnissen sind weder $|\uparrow\downarrow\rangle$ noch $|\downarrow\uparrow\rangle$ Eigenzustände von $\hat{\vec{S}}^{\,2}$. Man sieht aber leicht, dass deren Summe und deren Differenz Eigenzustände sein werden. Unter Einführung eines Faktors $1/\sqrt{2}$, um normierte Zustände zu erhalten, gelten in der Tat

$$\hat{\vec{S}}^{\,2}\left(\frac{|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle}{\sqrt{2}}\right) = 2\hbar^2\,\frac{|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle}{\sqrt{2}} \tag{VII.39a}$$

und

$$\hat{\vec{S}}^{\,2}\left(\frac{|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle}{\sqrt{2}}\right) = |\varnothing\rangle. \tag{VII.39b}$$

Eigenvektoren von $\hat{\vec{S}}^{\,2}$ und $\hat{S}_z$

Laut den Gl. (VII.36c)–(VII.36d) sind die Linearkombinationen der Gl. (VII.39) auch Eigenzustände von $\hat{S}_z$ mit dem gleichen Eigenwert 0. Daher gelten insgesamt

$$|0,0\rangle = \frac{|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle}{\sqrt{2}} \tag{VII.40a}$$

und

$$|1,0\rangle = \frac{|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle}{\sqrt{2}}. \tag{VII.40b}$$

Dann führen Gl. (VII.36a) und (VII.38a) zur Identifizierung

$$|1,1\rangle = |\uparrow\uparrow\rangle \tag{VII.40c}$$

und die Gl. (VII.36b) und (VII.38b) zu

$$|1,-1\rangle = |\downarrow\downarrow\rangle. \tag{VII.40d}$$

Bemerkungen:

∗ Gleichung (VII.40b) kann auch gefunden werden, indem der Absteigeoperator für den Gesamtspin, $\hat{S}_- = \hat{S}_-^{(1)} + \hat{S}_-^{(2)}$, auf den Zustand $|1,1\rangle = |\uparrow\uparrow\rangle$ angewandt wird.

$*$ Die drei Eigenzustände mit Gesamtspin 1, Gl. (VII.40b)–(VII.40d), werden kollektiv *Triplett-Zustand* genannt, während der Eigenzustand mit Spin 0, Gl. (VII.40a), *Singulett-Zustand* heißt.

VII.2.3 Kopplung von Drehimpulsen

Zur Beschreibung der Wechselwirkung zwischen zwei Drehimpulsen $\hat{\vec{J}}^{(1)}$, $\hat{\vec{J}}^{(2)}$ werden meistens Terme der Form

$$\hat{V} = g\hat{\vec{J}}^{(1)} \cdot \hat{\vec{J}}^{(2)} \tag{VII.41}$$

zum Hamilton-Operator $\hat{H}$ hinzugefügt, wobei g eine Kopplungskonstante ist, die sowohl positiv als auch negativ sein kann.

In Anwesenheit eines solchen Terms kommutieren die Observablen $\hat{J}_z^{(1)}$ und $\hat{J}_z^{(2)}$ im Allgemeinen nicht mit $\hat{H}$, während dagegen die mit dem Gesamtdrehimpuls assoziierten Operatoren

$$\left\{\hat{\vec{J}}^2, \hat{J}_z\right\} \quad \text{mit} \quad \hat{\vec{J}} = \hat{\vec{J}}^{(1)} + \hat{\vec{J}}^{(2)} \tag{VII.42}$$

oft mit $\hat{H}$ vertauschen. Man prüft nämlich, dass die gemeinsamen Eigenzustände $\{|J,M\rangle\}$ zu diesen Observablen auch Eigenzustände zum Wechselwirkungsterm (VII.41) sind.

In der Tat kann man das Produkt $\hat{\vec{J}}^{(1)} \cdot \hat{\vec{J}}^{(2)}$ als

$$\boxed{\hat{\vec{J}}^{(1)} \cdot \hat{\vec{J}}^{(2)} = \frac{1}{2}\Big(\big[\hat{\vec{J}}^{(1)} + \hat{\vec{J}}^{(2)}\big]^2 - \big[\hat{\vec{J}}^{(1)}\big]^2 - \big[\hat{\vec{J}}^{(2)}\big]^2\Big)} \tag{VII.43}$$

umschreiben, wobei der erste Term auf der rechten Seite genau $\hat{\vec{J}}^2$ ist. Angewandt auf den Eigenket $|J,M\rangle$, der auch Eigenzustand von $\big[\hat{\vec{J}}^{(1)}\big]^2$ und $\big[\hat{\vec{J}}^{(2)}\big]^2$ ist, ergibt diese Gleichung

$$\hat{\vec{J}}^{(1)} \cdot \hat{\vec{J}}^{(2)}|J,M\rangle = \frac{J(J+1)}{2}\hbar^2|J,M\rangle - \frac{j_1(j_1+1)}{2}\hbar^2|J,M\rangle - \frac{j_2(j_2+1)}{2}\hbar^2|J,M\rangle$$

d.h.

$$\hat{\vec{J}}^{(1)} \cdot \hat{\vec{J}}^{(2)}|J,M\rangle = \frac{J(J+1) - j_1(j_1+1) - j_2(j_2+1)}{2}\hbar^2|J,M\rangle, \tag{VII.44}$$

was zeigt, dass $|J,M\rangle$ Eigenzustand von $\hat{\vec{J}}^{(1)} \cdot \hat{\vec{J}}^{(2)}$ ist. Dabei soll man nicht vergessen, dass der Wert von J nicht ganz unabhängig von jenen von j_1 und j_2 ist, sondern durch die Drehimpulsadditionsregel (VII.26) eingeschränkt wird.

Beispiel: Kopplung zweier Spins $\frac{1}{2}$

Falls $j_1 = j_2 = \frac{1}{2}$ gilt, kann J nur die Werte 0 oder 1 annehmen. Dann ergibt sich für den Singulett-Zustand

$$\hat{\vec{J}}^{(1)} \cdot \hat{\vec{J}}^{(2)}|0,0\rangle = -\frac{3}{4}\hbar^2|0,0\rangle$$

und für den Triplett-Zustand

$$\hat{\vec{J}}^{(1)} \cdot \hat{\vec{J}}^{(2)}|1,M\rangle = \frac{1}{4}\hbar^2|1,M\rangle,$$

unabhängig von M. Dies gibt für den Erwartungswert des Wechselwirkungsterms (VII.41) in einem Eigenzustand des Gesamtspins

$$\langle\hat{V}\rangle = \begin{cases} -\dfrac{3}{4}\hbar^2 g & \text{im Singulett-Zustand } |0,0\rangle \\ \dfrac{1}{4}\hbar^2 g & \text{im Triplett-Zustand } |1,M\rangle, \end{cases}$$

d.h. die entsprechenden Energieeigenwerte sind unterschiedlich: ein solcher Kopplungsterm kann zur Aufspaltung von sonst entarteten Energieniveaus führen.

Bemerkung: Je nach dem Vorzeichen von g liegt entweder der Singulett-Zustand (für $g < 0$) oder der Triplett-Zustand (für $g > 0$) tiefer.