

Kapitel 8

Der Spin des Elektrons

Lernziele: Der Spin des Elektrons wurde in unserer Vorlesung bisher nicht berücksichtigt, erweist sich aber als notwendig zur Beschreibung von grundlegenden Experimenten. Wir müssen den Hilbertraum erweitern, um in den Zustandsvektor des Elektrons den Spin aufzunehmen. Wir lernen die Spinoperatoren und ihre Darstellung auf dem \mathbb{C}^2 kennen. Die Schrödinger-Gleichung muss zur Pauli-Gleichung erweitert werden, um die Dynamik des Spins beschreiben zu können.

8.1 Motivation

Lektüre: Schwabl, Kap. 9.1, Gasiorowicz, Kap. 10.1

Der Spin des Elektrons als zusätzlicher, nicht-klassischer Freiheitsgrad wurde 1925 von den Physikern George E. Uhlenbeck und Samuel Goudsmit postuliert. Der Anlass dazu waren im wesentlichen zwei experimentelle Befunde:

- anomaler Zeeman-Effekt

Beim Einschalten eines Magnetfeldes spalten manche Spektrallinien von manchen Atomen in eine *gerade* Anzahl von Linien auf. Wenn es sich einfach um eine Aufhebung der Entartung bzgl. des Bahndrehimpulses handeln würde, dann würde man eine Aufspaltung in eine ungerade Anzahl von Linien erwarten, denn der Entartungsgrad beträgt $2l + 1$, wobei l eine ganze Zahl ist. Man beachte, dass die Algebra der Drehimpulsoperatoren (also die Auf- und Absteigeoperatoren) auch Darstellungen mit geradzahlgiger Dimension und somit mit einer halbzahligen Drehimpulsquantenzahl zulassen würden. Erst die Interpretation dieser Zahl als *Bahndrehimpuls* verlangt die Ganzzahligkeit von l . Man kann die beobachtete Aufspaltung, den sog. anomalen Zeeman-Effekt, also erklären, indem man einen *halbzahligen Gesamtdrehimpuls* j zulässt.

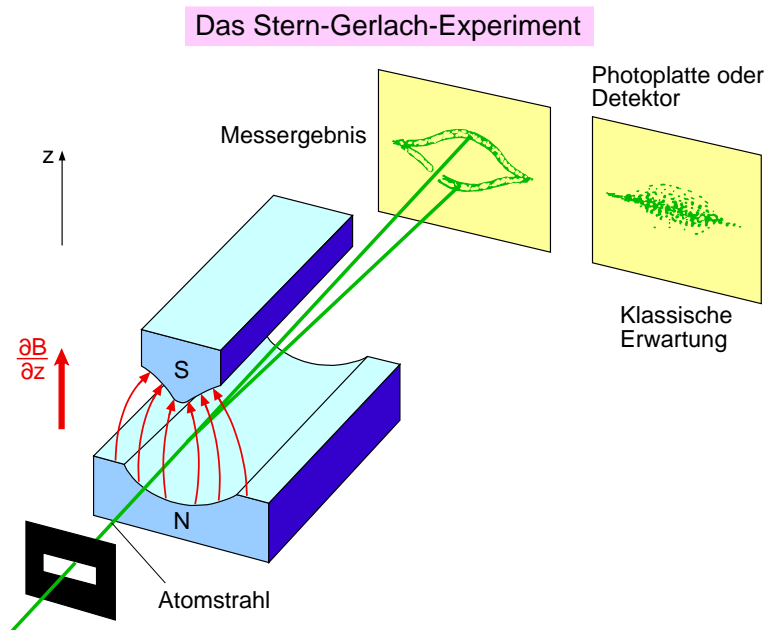


Abbildung 8.1: Schematische Darstellung des Stern-Gerlach-Experiments. Das inhomogene Magnetfeld übt eine Kraft auf das magnetische Moment des Atoms auf. Dies führt zu einer Aufspaltung in zwei Teilstrahlen; ein Hinweis auf die Existenz einer neuartigen physikalischen Größe, die offenbar zwei Einstellungsmöglichkeiten hat.

- Stern-Gerlach Experiment

Bei diesem Experiment werden neutrale Silber-Atome durch ein inhomogenes Magnetfeld geschickt. Der Atomstrahl spaltet sich dabei in zwei Teilstrahlen auf. Das Ag-Atom hat vollständig gefüllte Rumpfschalen sowie ein Elektron in der $5s$ -Schale, das keinen Bahndrehimpuls hat. Die Ablenkung des Strahls zeigt aber an, dass ein magnetisches Moment vorhanden ist, das direkt vom Spin des Elektrons stammt. Dieser Elektronenspin hat offenbar zwei Einstellungsmöglichkeiten gegenüber einer vorgegebene Achse (die per Konvention als z -Achse bezeichnet wird). Der Spinoperator S_z hat die beiden Eigenwerte $\pm\hbar/2$.

8.2 Zustandsvektor des Spin („Spinwellenfunktion“)

Der Spin ist eine „neues“, nur quantentheoretisch verstehbares Merkmal des Elektrons, zu dem es kein klassisches Analogon gibt. Die Beschreibung des Spin ist innerhalb der allgemeinen Axiomatik, die in Kap. 4 dargestellt wurde, möglich; wir müssen aber einen Hilbertraum betrachten, der das äußere Produkt aus dem Hilbertraum der Funktionen im Ortsraum und dem Hilbertraum \mathbb{C}^2 ist. Der Hilbertraum \mathbb{C}^2 ist dabei einfach der

Vektorraum, der durch zwei komplexe Basisvektoren aufgespannt wird:

$$\chi = \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}$$

oder, in Dirac-Schreibweise

$$\chi = \alpha \chi^\uparrow + \beta \chi^\downarrow = \alpha |\uparrow\rangle + \beta |\downarrow\rangle, \quad \alpha, \beta \in \mathbb{C}$$

wobei

$$\chi^\uparrow = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \chi^\downarrow = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Man bezeichnet χ als Zweierspinor (im Unterschied zum Viererspinor in der relativistischen Quantentheorie), oder einfach als Spinor. Die gewählten Basisfunktionen sind Eigenfunktionen von S_z :

$$S_z \chi^\uparrow = \hbar/2 \chi^\uparrow; \quad S_z \chi^\downarrow = -\hbar/2 \chi^\downarrow. \quad (8.1)$$

Es gibt noch weitere Spinkomponenten S_x und S_y ; bezüglich einer Basistransformation im dreidimensionalen Ortsraum müssen sich die Spinkomponenten wie ein Vektor transformieren. Man kann daher schreiben

$$\vec{S} = \begin{pmatrix} S_x \\ S_y \\ S_z \end{pmatrix}$$

Wir betrachten den allgemeinen Fall, dass der Zustandsvektor des Elektrons sowohl eine räumliche als auch eine Spinabhängigkeit hat:

$$|\Psi\rangle = \psi_\uparrow(r, t) |\chi^\uparrow\rangle + \psi_\downarrow(r, t) |\chi^\downarrow\rangle$$

oder in der äquivalenten Schreibweise

$$\Psi = \begin{pmatrix} \psi_\uparrow(r, t) \\ \psi_\downarrow(r, t) \end{pmatrix}. \quad (8.2)$$

Wenn Erwartungswerte berechnet werden, muss nun sowohl über den Ortsraum integriert als auch über die Spinorkomponenten summiert werden. Man erhält z.B. Ausdrücke von der folgenden Form

$$\begin{aligned} \langle S_z \rangle(t) &= \langle \Psi | S_z | \Psi \rangle \\ &= \int d^3r \begin{pmatrix} \psi_\uparrow(\vec{r}, t) \\ \psi_\downarrow(\vec{r}, t) \end{pmatrix}^\dagger S_z \begin{pmatrix} \psi_\uparrow(\vec{r}, t) \\ \psi_\downarrow(\vec{r}, t) \end{pmatrix} \\ &= \frac{\hbar}{2} \int d^3r (|\psi_\uparrow(\vec{r}, t)|^2 - |\psi_\downarrow(\vec{r}, t)|^2) \end{aligned}$$

wobei der Zustandsvektor normiert sein muss:

$$\langle \Psi | \Psi \rangle = \int d^3r \begin{pmatrix} \psi_\uparrow(\vec{r}, t) \\ \psi_\downarrow(\vec{r}, t) \end{pmatrix}^\dagger \begin{pmatrix} \psi_\uparrow(\vec{r}, t) \\ \psi_\downarrow(\vec{r}, t) \end{pmatrix} = \int d^3r (|\psi_\uparrow(\vec{r}, t)|^2 + |\psi_\downarrow(\vec{r}, t)|^2) = 1$$

8.3 Spin als Drehimpuls

Damit der Spin physikalisch einem Eigendrehimpuls entspricht, müssen wir mathematisch fordern, dass die Operatoren S_x , S_y und S_z den gleichen Vertauschungsrelationen unterliegen wie die Drehimpulsoperatoren L_x , L_y und L_z aus Kap. 5.

$$\begin{aligned}[S_x, S_y] &= i\hbar S_z \\ [S_z, S_x] &= i\hbar S_y \\ [S_y, S_z] &= i\hbar S_x\end{aligned}$$

Die mathematische Realisierung muss durch komplexe (2×2) -Matrizen erfolgen, die auf die Spinoren anzuwenden sind.¹ Man definiert

$$S_z = \frac{\hbar}{2}\sigma_z, \quad S_x = \frac{\hbar}{2}\sigma_x, \quad S_y = \frac{\hbar}{2}\sigma_y \quad (8.3)$$

mit den **Pauli-Matrizen**

$$\sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad \sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad (8.4)$$

Die erste Gl. von Zeile (8.3) folgt dabei direkt aus der Definition von S_z in Gl. (8.1).

Eigenschaften der Pauli-Matrizen

1. $\{\mathbb{1}_1, \sigma_x, \sigma_y, \sigma_z\}$ bilden eine Basis des Vektorraums der (2×2) -Matrizen, wobei $\mathbb{1}_2$ die (2×2) -Einheitsmatrix bezeichnet.
2. Alle σ_i sind hermitesch.
3. $\sigma_i^2 = 1$ für alle $i \in \{x, y, z\}$; alle σ_i haben die Eigenwerte $+1$ und -1 .
4. $[\sigma_i, \sigma_j] = 2i\epsilon_{ijk}\sigma_k$, $\{i, j, k\} = \{1, 2, 3\}$ und zyklische Vertauschungen
5. Aus der Umformung

$$\begin{aligned}2i(\sigma_x\sigma_y + \sigma_y\sigma_x) &= (\sigma_y\sigma_z - \sigma_z\sigma_y)\sigma_y + \sigma_y(\sigma_y\sigma_z - \sigma_z\sigma_y) \\ &= \sigma_y^2\sigma_z - \sigma_z\sigma_y^2 = 0\end{aligned}$$

erhalten wir eine Aussage über den Antikommutator,

$$\begin{aligned}[\sigma_x, \sigma_y]_+ &:= \sigma_x\sigma_y + \sigma_y\sigma_x = 0 \\ [\sigma_x, \sigma_z]_+ &:= \sigma_x\sigma_z + \sigma_z\sigma_x = 0 \\ [\sigma_y, \sigma_z]_+ &:= \sigma_y\sigma_z + \sigma_z\sigma_y = 0\end{aligned}$$

Man sagt, die Pauli-Matrizen sind antikommutierende Matrizen; sie bilden eine antikommutierende Algebra. (Beachte: Es ist ein Unterschied, ob zwei Größen *nicht kommutieren*, oder ob sie *antikommutieren*.)

¹Aufgrund der Halbzahligkeit der Spin-Eigenwerte haben wir hier *nicht* die Möglichkeit der Realisierung über Differentialoperatoren zur Verfügung, die Ableitungen auf dem Ortsraum sind. Der Spin kann nicht mit dem Ortsraum in Verbindung gebracht werden.

Für den Operator \vec{S}^2 gilt $\vec{S}^2 = \frac{\hbar^2}{4}(\sigma_x^2 + \sigma_y^2 + \sigma_z^2)$. Zusammen mit der Eigenschaft 3. ergibt sich sofort, dass \vec{S}^2 die beiden entarteten Eigenwerte $\frac{3}{4}\hbar^2$ hat. Allgemein können wir sagen, dass $\vec{S}^2\chi = \hbar^2 s(s+1)\chi$, wobei s die Spinquantenzahl ist, welche beim Elektron den Wert $s = 1/2$ hat. Die z -Komponente des Spins hat die Eigenwerte $+\hbar s$ und $-\hbar s$. Es besteht also eine völlige Analogie zu den Operatoren \vec{L}^2 und L_z und der Quantenzahl l , nur dass s im Gegensatz zu l halbzahlig ist.

Man kann aus den obigen Eigenschaften die spezielle Form der Matrizen σ_x und σ_y ableiten: Da σ_x und σ_y mit der Diagonalmatrix σ_z antikommutieren sollen (Eigenschaft 5.), müssen sie auf der Diagonale Nullen haben. Ferner müssen sie hermitesch sein (Eigenschaft 2.) und die Determinante -1 besitzen, und daher folgende Gestalt haben,

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & e^{i\alpha} \\ e^{-i\alpha} & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & e^{i\beta} \\ e^{-i\beta} & 0 \end{pmatrix},$$

mit reellen Zahlen α, β . Aus $\sigma_x\sigma_y = -\sigma_y\sigma_x$ folgt $\exp(i(\alpha - \beta)) = -\exp(i(\beta - \alpha))$, und damit $\alpha - \beta = \pi/2$. Wenn man nun die Konvention wählt $\alpha = 0, \beta = -\pi/2$, so erhält man die üblichen Pauli-Matrizen. (Es gibt aber auch andere mögliche Konventionen.)

Eine andere Herleitung baut auf die Aufsteige- und Absteige-Operatoren auf, die wir bereits im Zusammenhang mit dem Bahndrehimpuls kennengelernt haben. Man schreibt

$$\begin{aligned} \frac{\hbar}{2}\sigma_x &= S_x = \frac{1}{2}(S_+ + S_-) \\ \frac{\hbar}{2}\sigma_y &= S_y = \frac{1}{2i}(S_+ - S_-) \end{aligned}$$

Aus den zu fordernden Eigenschaften der Auf- und Absteiger, nämlich

$$\begin{aligned} S_+|\uparrow\rangle &= 0 & S_-|\uparrow\rangle &= \hbar|\downarrow\rangle \\ S_+|\downarrow\rangle &= \hbar|\uparrow\rangle & S_-|\downarrow\rangle &= 0, \end{aligned}$$

ergibt sich bei (2×2) -Matrizen zwangsläufig $S_+^2 = 0, S_-^2 = 0$ und damit die Form

$$S_+ = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad S_- = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

Daraus folgt dann die Gestalt (8.4) der Pauli-Matrizen.

Der Spinoperator vertauscht mit allen Operatoren, die auf den Ortsraum wirken, z.B.

$$[\vec{S}, \vec{x}] = 0, \quad [\vec{S}, \vec{p}] = 0, \quad [\vec{S}, \vec{L}] = 0$$

Die Vertauschbarkeit hat ihren Ursprung darin, dass der Spin einerseits und die Ortsraumoperatoren andererseits jeweils in verschiedenen Unterräumen des Hilbertraums wirken. Außerdem hat man

$$[H, \vec{S}^2] = 0$$

Das bedeutet, auch wenn z.B. eine zeitliche Evolution des Systems (beschrieben durch den Hamiltonoperator H) stattfindet, so bleiben wir doch in *einer* Darstellung des Spins. Es ist z.B. *nicht* möglich, eine lineare Superposition der Zustandsvektoren von Spin- $\frac{1}{2}$ und Spin-1-Teilchen zu bilden. Dies ist ein Beispiel einer sog. Superauswahlregel.

Wenn wir eine Drehung des Koordinatensystems im Ortsraum vornehmen, müssen wir auch zu einer geänderten Basis im Spinorraum übergehen. Dabei handelt es sich wieder um eine unitäre Transformation $\chi \mapsto \chi' = U^\dagger \chi$, wie schon in Abschnitt 5.3., mit

$$U = e^{i\phi \vec{n} \vec{S}/\hbar}, \quad U^\dagger = e^{-i\phi \vec{n} \vec{S}/\hbar}$$

Hier ist \vec{n} ein Einheitsvektor, der die Orientierung der Achse anzeigt, um die wir das Koordinatensystem um den Winkel ϕ drehen. Auch die Spin-Operatoren sind dabei zu transformieren nach der allgemeinen Regel $S_i \mapsto S'_i = U^\dagger S_i U$, $i \in \{x, y, z\}$. Beim praktischen Rechnen ist es nützlich, dass man U auch so schreiben kann:

$$U = \mathbb{1}_2 \cos(\phi/2) + i(\vec{n} \cdot \vec{\sigma}) \sin(\phi/2)$$

Wir benutzen dabei die Kurzschreibweise $\vec{n} \cdot \vec{\sigma} := n_x \sigma_x + n_y \sigma_y + n_z \sigma_z$, d.h. wir setzen die drei σ -Matrizen zu einem Vektor $\vec{\sigma}$ zusammen. Somit können wir mit einem anderen Vektor aus dem \mathbb{R}^3 ein „Skalarprodukt“ bilden, dessen Ergebnis allerdings eine (2×2) -Matrix ist. Diese Notation tritt auch im folgenden Abschnitt auf.

8.4 Pauli-Gleichung

Für das Elektron als einem geladenen Teilchen ergibt sich aus der Tatsache, dass es einen Spin besitzt, die Eigenschaft eines magnetischen Moments. Die Größe dieses magnetischen Moments ist

$$\vec{m}_{\text{Spin}} = g \frac{e}{2mc} \vec{S} = -g \mu_B \vec{S}/\hbar$$

Die nur aus Naturkonstanten zusammengesetzte Größe $\mu_B = -e/(2mc) > 0$ ist das sog. Bohr-Magneton. Der dimensionslose Faktor g wird als Landé-Faktor oder gyromagnetischer Faktor bezeichnet. Für ein freies Elektron erhält man aus Messungen den Zahlenwert $g = 2.002319304718 \dots$. Aus der relativistischen Quantenmechanik (Dirac-Gleichung) erhält man $g = 2$. Die Nachkommastellen kann man mit Hilfe von Quantenfeldtheorie berechnen.

Das Analogon zur Schrödinger-Gleichung für ein Elektron unter Berücksichtigung des Spins ist die **Pauli-Gleichung**. Sie beschreibt die zeitliche Entwicklung des Zustandsvektors Ψ (siehe Gl. 8.2) unter der Wirkung von elektromagnetischen Feldern (Magnetfeld $\vec{B}(\vec{r}, t)$, ein evtl. vorhandenes elektrisches Feld ist in den Potentialen $\Phi(\vec{r}, t)$ und $\vec{A}(\vec{r}, t)$ enthalten):

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \left(\frac{1}{2m} \left(\vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 + e\Phi \right) \mathbb{1}_2 \Psi - \vec{m}_{\text{Spin}} \vec{B} \Psi$$

wobei $\vec{m}_{\text{Spin}} = -g\mu_B\vec{S}/\hbar = -\frac{g}{2}\mu_B\vec{\sigma}$. Der letzte Term in der Pauli-Gleichung koppelt also die beiden Spinorkomponenten über die Pauli-Matrizen, während der erste Term gleichermaßen auf jede der beiden Spinkomponenten wirkt. (Natürlich ist $\vec{p} = -i\hbar\vec{\nabla}$ als Differentialoperator aufzufassen, die Pauli-Gleichung ist damit ein System gekoppelter partieller Differentialgleichungen für den Zweierspinor Ψ .)

Für viele Anwendungen kann man eine vereinfachte Näherungsform der Pauli-Gleichung verwenden. Dabei werden zwei Annahmen gemacht: $g \approx 2$ und Vernachlässigung des quadratischen Terms in \vec{A} , d.h. schwaches Magnetfeld. Mit Hilfe von $\vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A}$ kann man \vec{A} eliminieren und erhält dann

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = \left(\frac{p^2}{2m} + e\Phi\right)\mathbb{1}_2\Psi + \mu_B\left(\vec{L}/\hbar\mathbb{1}_2 + \vec{\sigma}\right) \cdot \vec{B}\Psi$$

Die physikalische Interpretation dieser Gleichung lautet: Das Elektron tritt in Wechselwirkung mit einem Magnetfeld über ein magnetisches Moment, das teilweise von seinem Spin und teilweise von seinem Bahndrehimpuls herrührt.

Wenn kein Magnetfeld (und auch kein Vektorpotential \vec{A})² vorhanden sind, entkoppelt die Pauli-Gleichung zu zwei Schrödinger-Gleichungen für jede der beiden Spinkomponenten des Zustandsvektors.

Wenn man die relativistische Quantenmechanik kennt, kann man die Pauli-Gleichung ableiten, indem man die Dirac-Gleichung im Falle niedriger Energien und schwach veränderlicher Felder entkoppelt in zwei Gleichungen (eine für Elektronen und eine für Positronen). Vor diesem theoretischen Hintergrund kann man auch verstehen, warum mit dem Spin des Elektrons ein magnetisches Moment einhergehen muss. Auf dem Kenntnisstand unserer Vorlesung müssen wir einfach annehmen, dass ein magnetisches Moment vorhanden ist (und können das aus der experimentellen Beobachtung, z.B. dem Stern-Gerlach-Experiment, motivieren).

Sowohl der anomale Zeeman-Effekt als auch der normale Zeeman-Effekt (siehe Kapitel 6.3) sind in der Pauli-Gleichung als Spezialfälle enthalten. Ein weiterer Spezialfall der Pauli-Gleichung ist ein als ortsfest angenommenes Elektron, das sich in einem (homogenen) Magnetfeld befindet. In diesem Fall kann der Ortsanteil der Wellenfunktion weggelassen werden und wir können nur mit der Spinfunktion $\chi(t)$ arbeiten. Die Pauli-Gleichung vereinfacht sich dann zu

$$i\hbar\frac{\partial\chi}{\partial t} = \mu_B\begin{pmatrix} B_z & B_x - iB_y \\ B_x + iB_y & -B_z \end{pmatrix}\chi$$

Wenn wir die Richtung des \vec{B} -Feldes als die z -Achse wählen, können wir die Lösung sofort angeben

$$\chi(t) = e^{-i\mu_B B_z t/\hbar}\chi^\uparrow + e^{+i\mu_B B_z t/\hbar}\chi^\downarrow$$

²Es ist eine interessante Frage, ob es den Fall gibt, dass wir ein Vektorpotential, aber kein Magnetfeld (in einem bestimmten Raumgebiet) haben. Dieser Fall kann eintreten, wenn das Raumgebiet nicht einfach zusammenhängend ist, und zeigt sich im Aharanov-Bohm-Effekt, siehe Schwabl, Kap. 7.5

Falls die Quantisierungsrichtung des Spins und die Magnetfeldrichtung *nicht* übereinstimmen, beschreibt die Pauli-Gleichung die Präzession des Spins, d.h. die Richtung des Spins scheint um die Achse des Magnetfeldes zu rotieren. Jedenfalls verhalten sich die Erwartungswerte der Spinkomponenten als Funktion der Zeit so, wie man es von einem klassischen Kreisel, der eine Präzessionsbewegung ausführt, erwarten würde. Man darf aber die anschauliche Vorstellung des Kreisels nicht wörtlich nehmen, denn aufgrund der Vertauschungsrelationen und der daraus folgenden Unschärfebeziehungen ist nur *eine* räumliche Komponente des Spins scharf messbar. D.h. wir können nicht sicher wissen, wie die momentane Drehachse des „Kreisels“ im Raum orientiert ist.

8.5 Addition von Drehimpulsen

Lektüre: Schwabl, Kap. 10, Gasiorowicz, Kap. 10.4 und 10.5

Wir betrachten nun zusammengesetzte Objekte mit mehreren Elektronenspins, oder mit einem Bahndrehimpuls und einem Spin. Da die drehimpulsartigen Größen Vektoren sind, müssen wir vektoriell addieren:

$$\begin{aligned}\vec{J} &= \vec{L} + \vec{S} \\ J_z &= L_z + S_z\end{aligned}\tag{8.5}$$

Dabei ist \vec{J} der Gesamtdrehimpuls und J_z dessen z -Komponente. (Man kann auch mehrere Bahndrehimpulse oder mehrere Gesamtdrehimpulse addieren, und stellt dazu analoge Überlegungen an, aber darauf gehen wir hier nicht ein.) Die für den Drehimpuls charakteristischen Vertauschungsrelationen müssen auch für \vec{J} gelten:

$$[J_i, J_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}J_k$$

Die Darstellung des Gesamtdrehimpulses findet in einem Hilbertraum statt, der das äußere Produkt der Hilberträume der beiden Darstellungen (hier von \vec{L} und \vec{S}) ist. Dieser Produktraum hat als Dimension das Produkt der Dimensionen der beiden Faktorräume, also hier $(2l+1) \cdot 2$. Gesucht ist nun eine Basis dieses Produktraums, bestehend aus Eigenfunktionen sowohl von J^2 und von J_z . Die Eigenwertgleichungen lauten

$$\begin{aligned}J^2|j m_j l\rangle &= \hbar^2 j(j+1)|j m_j l\rangle \\ J_z|j m_j l\rangle &= \hbar m_j|j m_j l\rangle\end{aligned}$$

Es ist aufgrund von Gl 8.5 klar, dass m_j die Werte $l \pm 1/2$ annehmen kann. Die Faktorräume werden durch die Orthonormalbasissätze $|l m_l\rangle$, $m_l = -l, \dots, +l$ bzw. $\{|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle\}$ aufgespannt. Ferner kann man auch nachprüfen, dass die Zustände

$$|j j l\rangle := |l l\rangle \otimes |\uparrow\rangle \text{ und } |j -j l\rangle := |l -l\rangle \otimes |\downarrow\rangle$$

den Gesamtdrehimpuls $j = l+1/2$ bzw. $j = l-1/2$ haben. Damit haben wir bereits zwei Basisvektoren des Produktraums gefunden. Um die weiteren Basisfunktionen zu finden,

müssen wir allerdings Linearkombinationen bilden aus den „alten“ Basisfunktionen der Faktorräume. Wir erhalten so eine Basis eines $2l + 2$ -dimensionalen Unterraums zu dem Eigenwert $j = l + 1/2$ des Operators J ,

$$|j m_j l\rangle = \sqrt{\frac{l + m_j + 1/2}{2l + 1}} |l m_j - 1/2\rangle \otimes |\uparrow\rangle + \sqrt{\frac{l - m_j + 1/2}{2l + 1}} |l m_j + 1/2\rangle \otimes |\downarrow\rangle \quad (8.6)$$

sowie eine Basis eines $2l$ -dimensionalen Unterraums zum Eigenwert $j = l - 1/2$,

$$|j m_j l\rangle = -\sqrt{\frac{l - m_j + 1/2}{2l + 1}} |l m_j - 1/2\rangle \otimes |\uparrow\rangle + \sqrt{\frac{l + m_j + 1/2}{2l + 1}} |l m_j + 1/2\rangle \otimes |\downarrow\rangle. \quad (8.7)$$

Die so gefundenen Basisfunktion bilden im Produktraum wiederum eine orthogonale und normierte Basis, jetzt aber mit definierten Eigenwerten von J^2 . Die auftretenden Koeffizienten werden als Clebsch-Gordan-Koeffizienten bezeichnet und sind in der Literatur tabelliert. Die Relationen (8.6) und (8.7) erlauben uns, einen Zustand mit definertem Gesamtspin in die Anteile zu den verschiedenen Bahndrehimpulsen zu zerlegen.

Ein Spezialfall der Regeln für die Drehimpulsaddition ist die Addition zweier Spins, z.B. $\vec{S} = \vec{S}^{(1)} + \vec{S}^{(2)}$. (Die hochgestellten Indices beziehen sich auf zwei Elektronen.) Der Gesamtspin \vec{S} ist dann in einem vierdimensionalen Spinor-Raum \mathbb{C}^4 darzustellen. Eine Basis dieses vierdimensionalen Raumes könnte gebildet werden durch Produktzustände

$$\begin{aligned} |\uparrow\uparrow\rangle &:= |\uparrow^{(1)}\rangle \otimes |\uparrow^{(2)}\rangle & |\uparrow\downarrow\rangle &:= |\uparrow^{(1)}\rangle \otimes |\downarrow^{(2)}\rangle \\ |\downarrow\uparrow\rangle &:= |\downarrow^{(1)}\rangle \otimes |\uparrow^{(2)}\rangle & |\downarrow\downarrow\rangle &:= |\downarrow^{(1)}\rangle \otimes |\downarrow^{(2)}\rangle \end{aligned}$$

Diese sind jedoch im Allgemeinen keine Eigenzustände des Gesamtspins. Nur für die parallelen und antiparrallelen Produktzustände (die maximales bzw. minimales m_s besitzen) gilt, dass sie Eigenzustände sind:

$$\begin{aligned} S^2 |\uparrow\uparrow\rangle &= \hbar^2 |\uparrow\uparrow\rangle, & S_z |\uparrow\uparrow\rangle &= \hbar |\uparrow\uparrow\rangle, \\ S^2 |\downarrow\downarrow\rangle &= \hbar^2 |\downarrow\downarrow\rangle, & S_z |\downarrow\downarrow\rangle &= -\hbar |\downarrow\downarrow\rangle, \end{aligned}$$

Die volle Basis aus Eigenzuständen erhalten wir, wenn wir den vierdimensionalen Raum in den dreidimensionalen Raum der Triplett-Zustände

$$\begin{aligned} |1, 1\rangle &:= |\uparrow\uparrow\rangle \\ |1, 0\rangle &:= \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle) \\ |1, -1\rangle &:= |\downarrow\downarrow\rangle \end{aligned}$$

und den eindimensionalen Raum des Singulett-Zustandes

$$|0, 0\rangle := \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle)$$

zerlegen. Die Bezeichnungsweise der Zustandsvektoren $|1, 0\rangle, |0, 0\rangle$ etc. erfolgt durch die Quantenzahlen des Gesamtspins $|s, m_s\rangle$. Es gilt dann $S^2 |s, m_s\rangle = \hbar^2 s(s + 1) |s, m_s\rangle$ und

$S_z|s, m_s\rangle = \hbar m_s|s, m_s\rangle$. Die Triplett-Zustände haben Gesamtspin \hbar ($s = 1$) und der Singulett-Zustand hat Gesamtspin Null ($s = 0$).

Wenn wir Systeme aus mehr als zwei Elektronen betrachten, erhalten wir höhere Multipletts. Für $2N$ Elektronen können wir z.B. jeden Gesamtspin zwischen 0 und $N\hbar$ erhalten; d.h. alle Multipletts vom Singulett bis zum $(2N+1)$ -plett. Das $(2N+1)$ -plett hat den Entartungsgrad $2N+1$ (solange es sich um freie Elektronen handelt, also keine Felder anliegen, die die Entartung aufheben können).

Die beiden Zustände $|1, 0\rangle$ und $|0, 0\rangle$ sind Linearkombinationen von Produktzuständen, die sich nicht reduzieren lassen auf nur *einen* Produktzustand. Wenn wir an einem derartigen Zustand eine Messung durchführen, wird das Ergebnis vom Zustand *beider* Teilchen abhängen (auch wenn der Messoperator, z.B. $\vec{S}^{(1)}$, nur an *einem* Teilchen „angreift“). Man sagt, es handelt sich um einen verschränkten Zustand der beiden Teilchen.