Über ein Kriterium für Ein- oder Zweiwertigkeit der Eigenfunktionen in der Wellenmechanik

Über ein Kriterium für Ein- oder Zweiwertigkeit der Eigenfunktionen in der Wellenmechanik

von **W. Pauli.**

(22. XII. 38.)

In der vorliegenden Note wird folgendes Kriterium vorgeschlagen zur Entscheidung der Frage, ob bei einer bestimmten Wellengleichung eindeutige oder zweideutige Lösungen physikalisch zulässig seien: Die einmalige Anwendung der Drehimpulsoperatoren auf ein gegebenes System regulärer bzw. quadratisch integrierbarer Eigenlösungen zum gleichen Wert der Gesamtimpulsquantenzahl j darf nicht aus diesem System herausführen, d. h. die so erhaltenen neuen Lösungen sollen sich linear durch die ursprünglichen ausdrücken lassen. Zur Begründung des Kriteriums wird gezeigt, dass bei seiner Nichterfüllung kein eindeutiger Zusammenhang zwischen Operatorkalkül und Matrixkalkül bei den Drehimpulsgrössen mehr bestehen würde. Die Anwendung auf die skalare Wellengleichung ergibt die Notwendigkeit eindeutiger Wellenfunktionen, während bei der Schrödinger'schen Form der Dirac'schen Gleichungen in Polarkoordinaten das Kriterium zur Notwendigkeit zweiwertiger Lösungen führt. Beide Ergebnisse sind im Einklang mit der Erfahrung. Die Verallgemeinerung der Formulierung des Kriteriums für endliche Drehungen wird angegeben und diejenige für die umfassendere Drehgruppe des sphärischen Raumes wird erwähnt.

1. Problemstellung. Formulierung des Kriteriums.

Wie vom Verfasser bereits bei einer früheren Gelegenheit[1]) betont wurde, gibt es kein a priori gültiges Argument dafür, dass die Lösungen der Wellengleichung, welche das physikalische Verhalten eines Systems quantentheoretisch beschreiben, notwendig eindeutig sein müssten. Für die Eindeutigkeit der physikalischen Grössen, die stets bilinear in der Wellenfunktion und ihrem konjugiert komplexen sind, genügt es nämlich, wenn alle zugelassenen Eigenlösungen sich bei Durchlaufen gewisser geschlossener Wege mit einem Faktor $e^{i\alpha}$ vom Betrag 1 multiplizieren, der nur abhängig ist vom betreffenden Weg, aber unabhängig von der gerade herausgegriffenen Eigenlösung. Die weitere Behandlung dieser Frage a. a. O. stellte sich aber bald als ungenügend heraus, da es unter den mehrdeutigen Eigenlösungen im allgemeinen auch solche gibt, die allen Regularitätsforderungen genügen. Dies trifft auch zu bei den l. c. behandelten mehrdeutigen Kugelfunktionen als Lösungen der gewöhnlichen unrelativistischen Wellengleichung eines Teilchens.

[1]) Vgl. Handbuch d. Physik, Bd. XXIV/1, 2. Aufl. Berlin 1933. S. 126.

Inzwischen wurde das in Rede stehende Problem verschiedentlich in der Literatur behandelt[1]), insbesondere gelang es E. SCHRÖDINGER wesentliche Fortschritte hiebei zu erzielen. Er bemerkte zunächst, dass die Gleichberechtigung von Vergangenheit und Zukunft (Umkehrbarkeit der Zeit) für den Verlauf physikalischer Grössen nur gewahrt ist, wenn die Wellenfunktionen speziell einwertig oder zweiwertig sind, von denen die zweiwertigen bei den erwähnten Umläufen einfach ihr Vorzeichen ändern. Wir werden deshalb sowie auch aus Einfachheitsgründen im folgenden hauptsächlich nur diese beiden Möglichkeiten diskutieren. Weiter konnte SCHRÖDINGER, ausgehend von seiner früheren Formulierung der Dirac'schen Gleichungen des Elektrons in beliebigen Koordinaten[2]), einen Fall auffinden, wo die Lösungen der Wellengleichung notwendig als zweideutig angenommen werden müssen, damit die Ergebnisse im Einklang mit der Erfahrung bleiben; und zwar handelt es sich hierbei zunächst um eine neue Darstellungsweise der Dirac'schen relativistischen Wellengleichung des Elektrons in Polarkoordinaten im gewöhnlichen flachen Raum. Diese Sachlage liess ernstliche Zweifel entstehen, ob für die Entscheidung der Frage nach der Ein- oder Zweiwertigkeit der Lösungen einer gegebenen Wellengleichung sich überhaupt ein zureichender physikalischer Grund auffinden lasse.

Demgegenüber soll in dieser Note gezeigt werden, dass solchen Zweifeln kein Raum gegeben werden darf und (anders als bei den Symmetrieklassen des Vielelektronenproblems) ein theoretisches Kriterium für die Entscheidung der Frage im einen oder im anderen Sinn sich in der Tat angeben lässt. Hiefür genügt es freilich nicht, die Regularität der Eigenlösungen allein zu untersuchen, sondern es ist der Umstand wesentlich, dass der Hamiltonoperator eine Transformationsgruppe gestattet. Wir beschränken die vorliegende Untersuchung auf die Gruppe der gewöhnlichen Drehungen im flachen Raum und zwar einerseits für die un-

---

[1]) A. S. EDDINGTON, Relativity Theory of Protons and Electrons, Cambridge 1936, S. 60 und 150, dort auch ältere Literatur. Über zweideutige Kugelfunktionen als Lösungen der unrelativistischen Wellengleichungen vgl. auch F. MÖGLICH, ZS. f. Phys. **110**, 1, 1938. Die Gl. (2a) dieser Arbeit enthält jedoch ein wesentliches Versehen, indem die aus den Integralen über die Kugelfläche berechneten Matrixelemente der Drehimpulskomponenten, wie im § 2 dieser Note gezeigt wird, nicht mehr der Forderung genügen, mit der Matrix des Quadrates des totalen Drehimpulsvektors vertauschbar zu sein.

Über die Frage der Umkehrbarkeit der Zeit vgl. E. SCHRÖDINGER, Ann. d. Phys. (5), **32**, 49, 1938, über eine ausführliche Diskussion mehrdeutiger Lösungen der relativistischen Wellengleichung des Elektrons, derselbe Commentationes Pontificia Academia Scientiarum, **2**, 321, 1938. Im folgenden zitiert als „P. A."

[2]) E. SCHRÖDINGER, Berl. Ber. phys. u. math. Klasse, S. 105, 1932.

relativistische skalare Wellengleichung eines Teilchens, andererseits für die relativistische Wellengleichung des Spinelektrons. Diese Gruppe gibt bekanntlich Anlass zur Existenz der drei Drehimpuls-Operatoren P_1, P_2, P_3, die bei einem zentralsymmetrischen Problem eine Eigenlösung stets wieder in eine Eigenlösung überführen, da sie dann mit dem Hamilton-Operator vertauschbar sind. Ferner ist jede der drei Grössen P_k $(k = 1,2,3)$ vertauschbar mit dem totalen Quadrat

$$P^2 = P_1{}^2 + P_2{}^2 + P_3{}^2 \tag{1}$$

des Drehimpulses, das bekanntlich die Eigenwerte $j(j+1)$ besitzt, worin eben besonders untersucht werden soll, wann die halbzahligen und wann die ganzzahligen Werte von j auszuschliessen sind. Zu diesem Zweck gehen wir aus von einem System regulärer Eigenlösungen $u_{j,m}$ des Operators P^2, für die also gilt

$$P^2 u_{j,m} = j(j+1)\, u_{j,m} \tag{1a}$$

(Eventuell vorhandene Spinindices schreiben wir, wie üblich, nicht explizite an.) Zu einem gegebenen Wert von j gibt es stets nur endlich viele reguläre Eigenlösungen und es ist übrigens für die Anwendung des Kriteriums nicht wesentlich, ob man eventuell vorhandene, nicht mehr reguläre, aber noch quadratisch integrierbare Eigenlösungen mit zum betrachteten System zählt oder nicht. Betrachten wir jedoch alle möglichen (entweder ganzzahligen oder halbzahligen) Werte von j, so möge in letzterem Falle das System der Eigenlösungen so gewählt sein, dass die zu verschiedenen j-Werten gehörigen Funktionen des Systems die Bedingung der Orthogonalität erfüllen.

Wir wollen nun folgende zusätzliche physikalische Forderung aufstellen: *Die Anwendung der Drehimpuls-Operatoren P_k auf ein vorgegebenes endliches System regulärer (oder nur quadratisch integrierbarer) Eigenlösungen von P^2 mit demselben Wert von j soll aus diesem System nicht herausführen.*

Oder positiv ausgedrückt, die neuen Eigenfunktionen $P_k u_{j,m}$ sollen sich linear durch die alten ausdrücken lassen:

$$P_k u_{j,m} = \sum_{m'} c^k_{m\,m'}\, u_{m',j}\,. \tag{2}$$

Offenbar ist in unserer Forderung eingeschlossen, dass auch die neuen Eigenlösungen regulär bzw. quadratisch integrierbar sein sollen. Dass in (2) links und rechts nur Eigenfunktionen mit gleichem j-Wert erscheinen, hängt damit zusammen, dass die P_k alle mit P^2 vertauschbar sind.

Wählt man übrigens die Eigenfunktionen $u_{j,m}$ speziell so, dass auch eine der Drehimpulskomponenten, sagen wir P_3, auf Diagonalform gebracht ist, so gelten die bekannten Auswahlregeln für P_k und von den Termen auf der rechten Seite von (2) sind dann im allgemeinen höchstens zwei von Null verschieden. (Wären die Eigenfunktionen normiert, so würden ja die $c^k_{m\,m'}$ direkt die Matrixelemente von P_k darstellen.)

Im folgenden § 2 soll zunächst gezeigt werden, dass das angegebene Kriterium sowohl im Falle der skalaren als auch im Falle der Spinorwellengleichung (Dirac-Gleichung) ausreichend ist, um die Alternative, ob ein- oder zweiwertige Wellenfunktionen zuzulassen sind, jeweils eindeutig zu entscheiden. Ein wichtiges Resultat (§ 2) ist ferner, dass im Falle das Kriterium nicht erfüllt ist, *gewisse unter den neuen Eigenfunktionen* $P_k\, u_{j,m}$ *nicht mehr orthogonal sind auf einer Schar der ursprünglichen* $u_{j',m'}$ mit festem m' und variablem j', obwohl $j \neq j'$. Hieraus ergibt sich die physikalische Notwendigkeit der Erfüllung unseres Kriteriums. Denn die in der üblichen Weise durch Integrale berechneten Matrixelemente von P_k wären sonst nicht mehr alle diagonal in bezug auf j unter Verletzung der Vertauschbarkeit aller P_k mit P^2. Man kann daher das Ergebnis auch so formulieren, dass bei Verletzung unseres Kriteriums der übliche Zusammenhang zwischen Matrizen und Operatoren für die Drehimpuls-Komponenten unterbrochen wird, was physikalisch offenbar unzulässig ist.

Eine andere mit der ursprünglichen äquivalente Formulierung unseres Kriteriums, die vielleicht anschaulicher, aber für die praktische Durchrechnung weniger geeignet ist, wird im § 3 gegeben. Sie beruht darauf, dass die Drehimpuls-Operatoren den infinitesimalen Drehungen zugeordnet sind und dass durch ihre Iteration eine Operation entstehen muss, die bei einer *endlichen* Drehung des Koordinatensystems aus einer Eigenlösung der Wellengleichung eine neue zu erhalten gestattet. Infolge der Willkürlichkeit der Wahl der Achsen des Polarkoordinatensystems sind alle diese Eigenlösungen physikalisch gleichberechtigt. Die Fassung unseres Kriteriums, die durch Übergang von den infinitesimalen Drehungen zu den endlichen entsteht — sie ist in Wahrheit äquivalent der ursprünglichen Fassung und enthält keine stärkere Forderung — besagt aber eben, dass auch hier die neuen Eigenlösungen $v_{j,m}(x)$ sich durch die alten $u_{j,m}(x)$, die zum gleichen j gehören, linear ausdrücken lassen sollen.

Die Definition der Operation aber, die aus den $u_{j,m}(x)$ die $v_{j,m}(x)$ erzeugt, erfordert eine etwas eingehendere Überlegung. Sie ist zunächst sehr einfach bei der skalaren Wellengleichung, da diese direkt invariant gegenüber Drehungen der Koordinatenachsen ist. Man erhält also die $v_{j,m}$ aus den $u_{j,m}$, indem man zunächst bei unveränderter Funktionsform von $u_{j,m}$ die alten Polarwinkel ϑ, φ durch die neuen ϑ', φ' ersetzt und dann diese durch die alten ϑ, φ und die drei Drehungsparameter (z. B. die 3 Euler'schen Winkel), die hier kurz mit a bezeichnet werden mögen, ausdrückt:

$$v_{j,m}(\vartheta, \varphi; a) = u_{j,m}(\vartheta', \varphi'). \tag{3}$$

Durch unser Kriterium wird hier gefordert, dass

$$u_{j,m}(\vartheta', \varphi') = \sum_{m'} C_{m\,m'}(a) \cdot u_{j,m}(\vartheta, \varphi) \tag{4}$$

und dies ist offenbar nur für einwertige Wellenfunktionen u erfüllbar. Die zweiwertigen Kugelfunktionen $u_{j,m}(\vartheta', \varphi')$ lassen sich dagegen offenbar nicht durch die $u_{j,m}(\vartheta, \varphi)$ mit gleichem j und konstanten Koeffizienten linear ausdrücken, da die $u_{j,m}(\vartheta, \varphi)$ beim Umlauf um den Punkt $\vartheta = 0$, die $u_{j,m}(\vartheta', \varphi')$ aber beim Umlauf um den von diesem verschiedenen Punkt $\vartheta' = 0$ ihr Vorzeichen ändern; für die zweiwertigen Kugelfunktionen gibt es kein „Additionstheorem".

Aus dem gleichen Grunde führt die Anwendung unseres Kriteriums auf die gewöhnlichen Dirac'schen Wellengleichungen des Elektrons zwangsläufig zu den eindeutigen Lösungen. Man muss hier nämlich, um von den $u_{j,m}$ zu den $v_{j,m}$ zu gelangen, ausser der Substitution der ϑ', φ' durch ϑ, φ nur noch eine S-Transformation der Spinindizes mit konstanten Koeffizienten ausführen.

Anders liegen jedoch die Verhältnisse bei der von Schrödinger aufgestellten Form der Dirac'schen Gleichungen in Polarkoordinaten. Diese Gleichungen sind nicht einfach invariant beim Übergang von einem Achsensystem zum andern, sondern, um die ursprüngliche Form der Wellengleichung in den neuen Koordinaten wieder herzustellen, muss noch eine *von ϑ, φ abhängige* S-Transformation der Spinindizes hinzugefügt werden. (Nebenbei bemerkt ist dies charakteristisch für die von Schrödinger aufgestellte allgemein kovariante Form der Dirac-Gleichungen.) Man erhält daher in diesem Fall aus einer beliebigen Lösung $\psi(\vartheta, \varphi)$ der Wellengleichung eine neue $\chi(\vartheta, \varphi, a)$ gemäss

$$\chi(\vartheta, \varphi, a) = S(\vartheta, \varphi, a) \cdot \psi(\vartheta', \varphi') \tag{3a}$$

worin die S-Matrix in der üblichen Weise auf die (hier nicht explizite angegebenen) Spinindizes wirkt. Statt (4) besagt dann unser Kriterium

$$S(\vartheta, \varphi; a)\, u_{j,m}(\vartheta', \varphi') = \sum_{m'} C_{m\,m'}(a)\, u_{j,m}(\vartheta, \varphi). \tag{4a}$$

Wie in § 3 gezeigt wird, hängt im Schrödinger'schen Fall die Matrix S in solcher Weise von ϑ, φ ab, dass sie sowohl für einen geschlossenen Weg auf der Kugel, der $\vartheta=0$ umschliesst und $\vartheta'=0$ ausserhalb lässt, als auch für einen geschlossenen Weg, der $\vartheta'=0$ umschliesst und $\vartheta=0$ ausserhalb lässt, ihr Vorzeichen ändert. Daher ist in diesem Fall die Gl. (4a) nur möglich, wenn $u_{j,m}(\vartheta, \varphi)$ zweiwertig ist, dagegen unmöglich, wenn $u_{j,m}(\vartheta, \varphi)$ einwertig ist.

Bei Kenntnis der Matrix $S(\vartheta, \varphi; a)$ wäre also die Rechnung mit den Drehimpulsoperatoren P_k (die übrigens aus S durch Spezialisierung der a für infinitesimale Drehungen hervorgehen) gewissermassen überflüssig. Die Durchführung des Kriteriums für infinitesimale Drehungen scheint uns jedoch aus verschiedenen Gründen ihre selbständige Bedeutung zu behalten. Erstens tritt nur bei der letzteren Fassung die Wichtigkeit des Kriteriums für den widerspruchsfreien Zusammenhang zwischen Operatorkalkül und Matrixkalkül deutlich zu Tage. Ferner scheint, namentlich bei allgemeineren Gruppen, eine direkte Ermittlung der S-Matrix, ohne auf andere Formen der Wellengleichung zu rekurrieren, bei endlichen Transformationen der Gruppe recht unübersichtlich zu werden.

Wie bereits erwähnt, beschränken wir uns hier auf den Fall des flachen Raumes und der gewöhnlichen dreidimensionalen Drehgruppe, da das Prinzipielle unserer Überlegungen schon in diesem Fall deutlich wird. Diese Überlegungen lassen sich jedoch leicht verallgemeinern auf die Wellengleichungen des sphärischen Raumes, wobei dann die sechs parametrige Drehgruppe mit den 6 Operatoren M_k, N_k $(k = 1,2,3)$ an die Stelle der drei parametrigen Drehgruppe mit den drei P_k, die Eigenwerte von $\sum_k (M_k^2 + N_k^2)$ an Stelle derjenigen von $\sum_k P_k^2$ und zwei Quantenzahlen an die Stelle von m treten[1]). Unser Kriterium in der infinitesimalen Fassung sagt dann wieder aus, dass die $(M_k u)$ $(N_k u)$ sich linear durch diejenigen unter den ursprünglichen regulären Eigenfunktionen (von denen eine u ist) ausdrücken lassen, die zum gleichen Eigenwert von

$$\sum_{k=1}^{3} (M_k^2 + N_k^2)$$

gehören wie u. Und es sind gerade die von SCHRÖDINGER schliesslich ermittelten Eigenfunktionen des sphärischen Raumes[2]), die diesem Kriterium gegenüber standhalten. Auch bei anderer Wahl der Koordinaten im sphärischen Raum scheint sich dieses Kriterium zur Ermittelung der richtigen Eigenfunktionen zu bewähren.

[1]) Siehe SCHRÖDINGER, P. A. § 4. [2]) „P. A.", § 8.

§ 2. Die Anwendung der Drehimpuls-Operatoren auf die Eigenfunktionen.

a) *Die skalare Wellengleichung.*

Wir betrachten ein zentralsymmetrisches Potential und denken uns in der Wellenfunktion den von den Polarkoordinaten abhängigen Faktor $u(\vartheta, \varphi)$ absepariert. Er genügt bekanntlich der Wellengleichung

$$P^2 u \equiv -\frac{1}{\sin\vartheta}\frac{\partial}{\partial\vartheta}\left(\sin\vartheta\,\frac{\partial u}{\partial\vartheta}\right) - \frac{1}{\sin^2\vartheta}\frac{\partial^2 u}{\partial\varphi^2} = j(j+1)\,u \tag{5}$$

worin wir den Eigenwert von P^2 mit $j(j+1)$ bezeichnen. Es ist bequem, die folgenden Linearkombinationen der Drehimpulskomponenten zu betrachten

$$P_+ = P_1 + i\,P_2 = e^{i\varphi}\left(\frac{\partial}{\partial\vartheta} + i\,\frac{\cos\vartheta}{\sin\vartheta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right) \tag{6a}$$

$$P_- = P_1 - i\,P_2 = e^{-i\varphi}\left(-\frac{\partial}{\partial\vartheta} + i\,\frac{\cos\vartheta}{\sin\vartheta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right) \tag{6b}$$

$$P_3 = -i\,\frac{\partial}{\partial\varphi}. \tag{6c}$$

Wie üblich betrachten wir die Eigenlösungen von P_3, dessen Eigenwerte sich nur durch eine gemeinsame Konstante von ganzen Zahlen unterscheiden. Der Deutlichkeit halber verstehen wir im folgenden unter m stets eine nicht negative Zahl und unterscheiden die Eigenlösungen

$$u^+_{j,m}(\vartheta, \varphi) = f_{j,m}(\cos\vartheta)\,e^{im\varphi}. \tag{7a}$$

$$u^-_{j,m}(\vartheta, \varphi) = f_{j,m}(\cos\vartheta)\,e^{-im\varphi}. \tag{7b}$$

Damit $f_{j,m}$ für $\vartheta = 0$ und $\vartheta = \pi$ regulär ist, muss notwendig

$$j - m \text{ ganz und nicht negativ} \tag{8}$$

sein.

Die bekannten Darstellungen der Kugelfunktionen ergeben in diesem Fall mit

$$z = \cos\vartheta \tag{9}$$

$$f_{j,m}(z) = (1-z^2)^{-\frac{m}{2}}\left(\frac{d}{dz}\right)^{j-m}(1-z^2)^j \tag{10}$$

$$m = \alpha + \text{ganze Zahl},\ 0 \leq \alpha < 1 \tag{11a}$$

$$\alpha \leq m \leq j. \tag{11b}$$

Eine Normierung dieser Eigenlösungen wird für das Folgende nicht erforderlich sein. Man erhält auf diese Weise alle *regulären* Lösungen der aus (9) folgenden Differentialgleichung

$$-\frac{d}{dz}\left[(1-z^2)\frac{df}{dz}\right]+\frac{m^2}{1-z^2}f=j(j+1)f. \tag{12}$$

Für das Folgende wird von besonderem Interesse sein der Fall $\alpha=0$ (ganzes j und m) und der Fall $\alpha=\frac{1}{2}$ (halbzahliges j und m). Für $\alpha=\frac{1}{2}$ sind die Lösungen

$$f_{j,-m}(z)=(1-z^2)^{\frac{m}{2}}\left(\frac{d}{dz}\right)^{j+m}(1-z^2)^j \tag{13}$$

singulär. Der Fall j und m ganz ist dagegen dadurch besonders ausgezeichnet, dass

$$f_{j,-m}(z)=\text{const.}\, f_{j,m}(z),\quad \text{für } j, m \text{ ganz}, \tag{14}$$

während für m unganz schon aus der Singularität von $f_{j,-m}$ an den Stellen $z=\pm 1$ zu ersehen ist, dass $f_{j,-m}$ eine von $f_{j,m}$ völlig verschiedene Lösung sein muss.

Zum Beweise von (14) für ganzes j und m können wir die aus (10) unmittelbar folgende Darstellung von $f_{j,m}$ durch ein komplexes Integral heranziehen, die auch sonst nützlich ist.

$$f_{j,m}(z)=(1-z^2)^{-\frac{m}{2}}\frac{(j-m)!}{2\pi i}\int\limits_{K_0}\frac{[1-(z+t)^2]^j}{t^{j-m+1}}\,dt. \tag{15}$$

Der Integrationsweg K_0 ist hier ein Kreis um den Nullpunkt. Da für unganzes j (und m) der Integrand noch Verzweigungsstellen bei $t=1-z$ und $t=-(1+z)$ besitzt, muss in diesem Fall ausdrücklich hinzugefügt werden, dass diese ausserhalb des Kreises K_0 liegen sollen:

$$|t|<|1-z| \text{ und } |t|<|1+z| \text{ auf } K_0 \text{ für } j, m \text{ nicht ganz}; \tag{15a}$$

nur für j, m ganz ist die Grösse des Kreises K_0 gleichgültig. Der Ausdruck für $f_{j,-m}(z)$

$$f_{j,-m}(z)=(1-z^2)^{\frac{m}{2}}\frac{(j+m)!}{2\pi i}\int\limits_{K_0}\frac{[1-(z+t)^2]^j}{t^{j+m+1}}\,dt \tag{16}$$

lässt nun eine Umformung zu durch die Substitution

$$t\to -\frac{1-z^2}{t}$$

die ergibt

$$f_{j,-m}(z)=(1-z^2)^{-\frac{m}{2}}e^{-2\pi i m}\frac{(j+m)!}{2\pi i}\int\limits_{K_1}\frac{[1-(z+t)^2]^j}{t^{j-m+1}}\,dt \tag{16a}$$

wobei nun

$$|t| > |1-z|, |t| > |1+z| \text{ auf } K_1 \tag{16b}$$

Nur für ganze j und m lässt sich der Kreis K_1 auf den Kreis K_0 zusammenziehen und es gilt die Relation (14).

Wir zeigen ferner, dass die reguläre Eigenfunktion

$$u^+_{j,\frac{1}{2}}(\vartheta, \varphi) = f_{j,\frac{1}{2}}(z)\, e^{\frac{1}{2} i \varphi}$$

auf der singulären, (aber wie leicht aus (10) zu sehen noch quadratisch integrierbaren) Eigenfunktion

$$u^+_{j',-\frac{1}{2}}(\vartheta, \varphi) = f_{j',-\frac{1}{2}}(z)\, e^{\frac{1}{2} i \varphi}$$

im allgemeinen nicht orthogonal ist (gleiches gilt natürlich von $u^-_{j,\frac{1}{2}}$, und $u^-_{j',-\frac{1}{2}}$). Zunächst gilt

$$\frac{1}{4\pi}\int (u^+_{j,\frac{1}{2}})^* u^+_{j',-\frac{1}{2}} \sin\vartheta\, d\vartheta\, d\varphi = \tfrac{1}{2}\int_{-1}^{+1} f_{j,\frac{1}{2}} f_{j',-\frac{1}{2}}\, dz.$$

Aus (12) folgt ferner

$$[j(j+1) - j'(j'+1)]\ \tfrac{1}{2}\int_{-1}^{+1} f_{j,\frac{1}{2}} f_{j',-\frac{1}{2}}\, dz$$

$$= \tfrac{1}{2}\left| (1-z^2)\left(f_{j',-\frac{1}{2}}\frac{df_{j,\frac{1}{2}}}{dz} - f_{j,\frac{1}{2}}\frac{df_{j',-\frac{1}{2}}}{dz}\right)\right|_{-1}^{+1}$$

Die rechte Seite ist nun gerade endlich an jeder der Grenzen $z = +1$ und $z = -1$ und die Beiträge dieser beiden Grenzen haben dann dasselbe Vorzeichen, wenn $j - j'$ ungerade ist, während sie sich andernfalls aufheben. In der Tat sind bei halbzahligem m und j nur für ungerades $j - j'$ die Funktionen $f_{j,\frac{1}{2}}$ und $f_{j',-\frac{1}{2}}$ zugleich gerade oder ungerade in z. Unser Resultat ist also

$$\int (u^\pm_{j,\frac{1}{2}})^* u^\pm_{j',-\frac{1}{2}} \sin\vartheta\, d\vartheta\, d\varphi \neq 0 \quad \begin{array}{c}\text{für } j - j' \text{ ungerade}\\ j, j' \text{ halbzahlig.}\end{array} \tag{17}$$

Wir wenden nun die Operatoren P_+ und P_- auf die Eigenlösungen an und zeigen

$$P_+(f_{j,m}\, e^{i m \varphi}) = \text{const}\, f_{j,m+1}\, e^{i(m+1)\varphi};$$

$$P_-(f_{j,m}\, e^{i m \varphi}) = \text{const}\, f_{j,m-1}\, e^{i(m-1)\varphi} \tag{18a}$$

$$P_+(f_{j,m}\, e^{-i m \varphi}) = \text{const.}\, f_{j,m-1}\, e^{-i(m-1)\varphi};$$

$$P_-(f_{i,m}\, e^{-i m \varphi}) = \text{const}\, f_{j,m+1}\, e^{-i(m+1)\varphi}. \tag{18b}$$

Hierin ist übrigens für den Randwert $j = m$ stets $f_{j,\,j+1}$ identisch Null zu setzen. In der Tat ergibt sich aus (6) und (15) z. B.

$$P_+ f_{j,\,m}\, e^{i\,m\,\varphi} = e^{i\,(m+1)\,\varphi}\left[-(1-z^2)\frac{d f_{j,\,m}}{dz} - \frac{m\,z}{(1-z^2)^{\frac{1}{2}}} f_{j,\,m}\right]$$

$$= e^{i\,(m+1)\,\varphi}(1-z^2)^{-\frac{m+1}{2}}\frac{(j-m)!}{2\pi i}\int\limits_{K_0}\{2j(1-z^2)(z+t)[1-(z+t)^2]^{j-1}$$

$$-2\,m\,z\,[1-(z+t)^2]^j\}\frac{dt}{t^{j-m+1}}\,.$$

Der Integrand lässt sich umformen zu

$$(j+m+1)\,[1-(z+t)^2]^j\, t^{-(j-m)} - \frac{d}{dt}\{[1-(z+t)^2]^j\,(2z+t)\, t^{-(j-m)}\}.$$

Der zweite Term verschwindet bei Integration über den Kreis K_0 und es ergibt sich

$$P_+ f_{j,\,m}\, e^{i\,m\,\varphi} = (j+m+1)(j-m)\, f_{j,\,m+1}\, e^{i\,(m+1)\,\varphi}\,.$$

Weiter findet man in etwas einfacherer Weise

$$P_- f_{j,\,m}\, e^{i\,m\,\varphi} = e^{i\,(m-1)\,\varphi}\left[(1-z^2)\frac{d f_{j,\,m}}{dz} - \frac{m\,z}{(1-z^2)^{\frac{1}{2}}} f_{j,\,m}\right]$$

$$= e^{i\,(m-1)\,\varphi}(1-z^2)^{-\frac{m-1}{2}}\frac{d}{dz}\left[f_{j,\,m}(1-z^2)^{\frac{m}{2}}\right]$$

$$= e^{i\,(m-1)\,\varphi}(1-z^2)^{-\frac{m-1}{2}}\left(\frac{d}{dz}\right)^{j-m+1}(1-z^2)^j$$

$$= e^{i\,(m-1)\,\varphi} f_{j,\,m-1}\,.$$

Die Relationen (18b) berechnen sich ganz analog. Für uns ist nun wichtig, dass insbesondere in den Relationen

$$P_-\left(f_{j,\frac{1}{2}}\, e^{\frac{i\varphi}{2}}\right) = \text{const}\, f_{j,\,-\frac{1}{2}}\, e^{-\frac{i\varphi}{2}}\,,\quad P_+\left(f_{j,\frac{1}{2}}\, e^{-\frac{i\varphi}{2}}\right) = \text{const}\, f_{j,\,-\frac{1}{2}}\, e^{+\frac{i\varphi}{2}}$$

im Resultat die singuläre Lösung $f_{j,\,-\frac{1}{2}}$ auftritt, dagegen für ganze j, m nach (14)

$$P_- f_{j,0} = \text{const}\, f_{j,\,-1}\, e^{-i\,\varphi} = \text{const}\, f_{j,\,1}\, e^{-i\,\varphi} = \text{const}\, u_{j,\,1}^-(\vartheta,\varphi)\,.$$

Für halbzahlige j, m führt also in der Tat die Anwendung der Drehimpulsoperatoren aus unserem System (7), (10) von Eigenfunktionen heraus, was nach (17) zur Folge hat, dass die in der üblichen Weise aus den Integralen berechneten Drehimpulsmatrizen für $m = \frac{1}{2}$ nicht mehr diagonal in j sind, wie in § 1 angegeben wurde. Nach unserem Kriterium sind also diese halbzahligen Kugelfunktionen hier auszuschliessen.

b) *Die Wellengleichung des Spinelektrons.*

Wir beginnen hier mit derjenigen Form der Dirac'schen Gleichungen in Polarkoordinaten, die SCHRÖDINGER als Spezialfall seiner allgemeinen Theorie des Spinelektrons im Gravitationsfeld aufgestellt hat. Die Erläuterung des Zusammenhanges dieser Darstellung der Theorie mit der sonst üblichen soll dem folgenden § vorbehalten bleiben.

Wir schreiben die Schrödinger'schen Gleichungen in der Form[1])

$$\frac{1}{c}\frac{\partial\psi}{\partial t}-i\,\varphi_0\,\psi+\alpha_1\frac{1}{r}\frac{1}{\sqrt{\sin\vartheta}}\frac{\partial}{\partial\vartheta}(\sqrt{\sin\vartheta}\;\psi)+\alpha_2\frac{1}{r\sin\vartheta}\frac{\partial\psi}{\partial\varphi}$$
$$+\alpha_3\frac{1}{r}\frac{\partial(r\psi)}{\partial r}+i\frac{mc}{h}\beta\,\psi=0 \tag{20}$$

worin die Matrices α_k, β den bekannten Dirac'schen Vertauschungsrelationen genügen und φ_0 ein als zentralsymmetrisch angenommenes skalares Potentialfeld (multipliziert mit e/hc) bedeutet.

Man erhält die Drehimpulskomponenten nach der üblichen Methode, indem man die entsprechenden Ausdrücke (6) durch solche Terme ergänzt, dass sie mit dem Hamiltonoperator vertauschbar werden. Auf diese Weise ergibt sich

$$P_+=P_1+i\,P_2=e^{i\varphi}\left(\frac{\partial}{\partial\vartheta}+\frac{i\cos\vartheta}{\sin\vartheta}\frac{\partial}{\partial\varphi}+\frac{1}{2}\frac{s_3}{\sin\vartheta}\right) \tag{21a}$$

$$P_-=P_1-iP_2=e^{-i\varphi}\left(-\frac{\partial}{\partial\vartheta}+\frac{i\cos\vartheta}{\sin\vartheta}\frac{\partial}{\partial\varphi}+\frac{1}{2}\frac{s_3}{\sin\vartheta}\right) \tag{21b}$$

$$P_3=-i\frac{\partial}{\partial\varphi} \tag{21c}$$

mit der Abkürzung $s_3=-i\,\alpha_1\,\alpha_2$, (und zyklisch vertauscht). Abweichend von der sonstigen Form der Theorie erhält hier die Komponente P_3 keinen Zusatz, während die Matrix s_3 im Zusatzterm von P_1 und P_2 auftritt statt wie sonst in dem von P_3.

---

[1]) SCHRÖDINGER, P. A., Gl. (5, 12) und (8, 1) im Limes $R\to\infty$. Wir haben hier für die von SCHRÖDINGER mit $i\alpha_4\alpha_2$, $i\alpha_4\alpha_3$, $i\alpha_4\alpha_1$, $-\alpha_4$ bezeichneten Matrices die neue Bezeichnung α_1, α_2, α_3, β eingeführt. Dies rechtfertigt sich dadurch, dass auch für diese Matrices die Dirac'schen Vertauschungsrelationen folgen, wenn sie für die ursprünglichen $\alpha_1\ldots\alpha_4$ gelten. Ferner führt SCHRÖDINGER bisweilen die Abkürzung ein: $\omega=r\sqrt{\sin\vartheta}\;\psi$, was jedoch für das folgende nicht zweckmässig sein wird.

Ein weiterer mit dem gesamten Hamiltonoperator sowie mit den P_k vertauschbarer Operator ist definiert durch

$$K\,\psi = \beta\,\alpha_3\left(\frac{\alpha_1}{\sqrt{\sin\vartheta}}\,\frac{\partial}{\partial\,\vartheta}\,\sqrt{\sin\vartheta} + \frac{\alpha_2}{\sin\vartheta}\,\frac{\partial}{\partial\,\varphi}\right)\psi\,. \tag{22}$$

Das totale Quadrat der P_k lässt sich durch das Quadrat von K ausdrücken gemäss

$$P^2 \equiv P_1^2 + P_2^2 + P_3^2 = K^2 - \tfrac{1}{4}. \tag{23}$$

Sind daher $j\,(j+1)$ die Eigenwerte von P^2, so sind $k = \pm\,(j+\frac{1}{2})$ die Eigenwerte von K. Die mit einem Vorzeichen behaftete Quantenzahl k spielt bekanntlich bei der Feinstruktur des H-Atoms eine entscheidende Rolle.

Für die weitere Integration kann man zum Beispiel für die Matrices α_k, β den Ansatz machen

$$\alpha_k = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_k \\ \sigma_k & 0 \end{pmatrix}; \qquad \beta = \begin{pmatrix} \mathrm{I} & 0 \\ 0 & -\mathrm{I} \end{pmatrix} \tag{24}$$

mit

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

aus welchem übrigens folgt

$$s_k = \begin{pmatrix} \sigma_k & 0 \\ 0 & \sigma_k \end{pmatrix} \text{ mit } k = 1, 2, 3\,. \tag{24a}$$

Ferner ist ψ zu zerlegen in einen nur von ϑ, φ und einen nur von r abhängigen Faktor

$$\psi = \chi\,(r)\;u\,(\vartheta,\,\varphi) \tag{25}$$

worin

$$K\,u = k\,u \tag{26}$$

und mit

$$\frac{\partial}{\partial\,t} = -\,i\,\nu$$

$$-i\left(\frac{\nu}{c} + \varphi_0\right)\chi + \frac{1}{r}\,\alpha_3\,\beta\,k\,\chi + \alpha_3\,\frac{1}{r}\,\frac{\partial\,(r\,\chi)}{\partial\,r} + i\,\frac{m\,c}{h}\,\beta\,\chi = 0\,. \tag{27}$$

Für die beiden ersten Komponenten von $u\,(\vartheta,\,\varphi)$ ergibt sich aus (22)

$$k\,u = \frac{i\,\sigma_2}{\sqrt{\sin\vartheta}}\,\frac{\partial}{\partial\,\vartheta}\,(\sqrt{\sin\vartheta}\,u) - \frac{i\,\sigma_1}{\sin\vartheta}\,\frac{\partial\,u}{\partial\,\varphi} \tag{28}$$

und entsprechende Gleichungen für u_3, u_4 in denen k durch $-\,k$ ersetzt ist. Die Lösung dieser Gleichungen erhält man durch

Vorzeichenänderung einer der Komponenten des Paares, z. B. von u_2. Wir erhalten also schliesslich die Lösung

$$\psi_1 = F(r)\, u_1(\vartheta, \varphi); \quad \psi_2 = F(r)\, u_2(\vartheta, \varphi); \quad \psi_3 = i\, G(r)\, u_1(\vartheta, \varphi); \quad \psi_4 = -i\, G(r)\, u_2(\vartheta, \varphi). \tag{29}$$

Für F und G ergibt sich aus (27)

$$\left(\frac{v}{c} + \varphi_0\right) F + \frac{1}{r} k G - \frac{1}{r} \frac{d(rG)}{dr} - \frac{mc}{h} F = 0 \tag{30a}$$

$$\left(\frac{v}{c} + \varphi_0\right) G + \frac{1}{r} k F + \frac{1}{r} \frac{d(rF)}{dr} + \frac{mc}{h} G = 0. \tag{30b}$$

Die letzteren Gleichungen stimmen mit den in den Lehrbüchern hergeleiteten überein und werden hier nicht weiter behandelt.

Setzen wir nun analog zur skalaren Wellengleichung in (28), unter k und m nicht negative Zahlen verstehend,

$$u^+_{1;k,m} = f_{k,m}(\cos\vartheta)\, e^{im\varphi}; \quad u^+_{2;k,m} = g_{k,m}(\cos\vartheta)\, e^{im\varphi} \tag{31}$$

so folgt für f und g aus (28)

$$\frac{1}{\sqrt{\sin\vartheta}} \frac{d}{d\vartheta}(\sqrt{\sin\vartheta}\, g) + \frac{m}{\sin\vartheta} g - k f = 0 \tag{32a}$$

$$\frac{1}{\sqrt{\sin\vartheta}} \frac{d}{d\vartheta}(\sqrt{\sin\vartheta}\, f) - \frac{m}{\sin\vartheta} f + k g = 0.\text{[1]} \tag{32b}$$

Hieraus folgen sofort die weiteren Lösungen

$$u^-_{1;k,m} = g_{k,m}\, e^{-im\varphi}; \quad u^-_{2;k,m} = -f_{k,m}\, e^{-im\varphi} \tag{31}$$

$$f_{-k,m} = f_{k,m}; \quad g_{-k,m} = -g_{k,m}. \tag{33}$$

Die regulären Lösungen der Gleichungen (32) sind unter Verwendung früherer Ergebnisse WEYLS von SCHRÖDINGER[2]) angegeben worden. Bedeutet wieder

$$z = \cos\vartheta \tag{34}$$

so hat man anzusetzen

$$k - m - \tfrac{1}{2} \geq 0 \text{ und ganz, } k > 0 \tag{35}$$

$$f_{k,m}(z) = (1+z)^{-\frac{1}{2}(m+\frac{1}{2})} (1-z)^{-\frac{1}{2}(m-\frac{1}{2})} \left(\frac{d}{dz}\right)^{k-m-\frac{1}{2}} (1+z)^k (1-z)^{k-1} \tag{36a}$$

$$g_{k,m}(z) = (1+z)^{-\frac{1}{2}(m-\frac{1}{2})} (1-z)^{-\frac{1}{2}(m+\frac{1}{2})} \left(\frac{d}{dz}\right)^{k-m-\frac{1}{2}} (1+z)^{k-1} (1-z)^k \tag{36b}$$

---

[1]) Die Bezeichnungen bei SCHRÖDINGER sind etwas anders, indem wir für die von ihm mit (f, g) bezeichneten Grössen schreiben: $i\sqrt{\sin\vartheta}\, f$, $\sqrt{\sin\vartheta}\, g$.

[2]) P. A., § 7.

wobei wir wieder die Fälle k ganz, m halbganz und k halbganz, m ganz gesondert diskutieren wollen. Gemäss (33) genügt es, sich auf positive k zu beschränken (für $k = 0$ gibt es keine bei $z = +1$ und $z = -1$ regulären Lösungen).

Einer genaueren Diskussion bedürfen die Lösungen

$$u^{(-)}_{1;\,k,\,-m} = f_{k,\,-m}\, e^{-im\varphi}; \quad u^{(-)}_{2;\,k,\,-m} = g_{k,\,-m}\, e^{-im\varphi} \tag{31a—}$$

und

$$u^{+}_{1;\,k,\,-m} = g_{k,\,-m}\, e^{im\varphi}; \quad u^{+}_{2;\,k,\,-m} = -f_{k,\,-m}\, e^{im\varphi} \tag{31a+}$$

die aus (36) hervorgehen, wenn man formal m durch $-m$ ersetzt.

Wir zeigen zunächst, analog wie im § 1, dass der Fall k ganz, m halbganz dadurch besonders ausgezeichnet ist, dass

$$\left.\begin{matrix} f_{k,\,-m} \\ g_{k,\,-m} \end{matrix}\right\} = \text{const} \left\{\begin{matrix} g_{k,\,m} \\ -f_{k,\,m} \end{matrix}\right. \quad \text{für } k \text{ ganz, } m \text{ halbganz} \tag{37}$$

d. h. dass dort die regulären Lösungen (31) auch dadurch gewonnen werden können, dass in (31) und (36a, b) formal m durch $-m$ ersetzt wird. Zunächst kann man unter Einführung eines Kreises K_0 um den Nullpunkt als Integrationsweg in der komplexen t-Ebene statt (36) schreiben

$$f_{k,m}(z) = (1+z)^{-\frac{1}{2}(m+\frac{1}{2})}(1-z)^{-\frac{1}{2}(m-\frac{1}{2})}\frac{(k-m-\frac{1}{2})!}{2\pi i} \int_{K_0} \frac{dt}{t^{k-m+\frac{1}{2}}}(1+z+t)^k(1-z-t)^{k-1} \tag{38a}$$

$$g_{k,m}(z) = (1+z)^{-\frac{1}{2}(m-\frac{1}{2})}(1-z)^{-\frac{1}{2}(m+\frac{1}{2})}\frac{(k-m-\frac{1}{2})!}{2\pi i} \int_{K_0} \frac{dt\,(1+z+t)^{k-1}}{t^{k+m+\frac{1}{2}}}(1-z-t)^k. \tag{38b}$$

Für ganze $k \geq 1$ ist hierin die Grösse des Kreises K_0 gleichgültig, während andernfalls besonders darauf zu achten ist, dass die Verzweigungsstellen $t = -(1+z)$ und $t = 1-z$ ausserhalb des Kreises liegen:

$$|t| < |1+z| \text{ und } |t| < |1-z| \text{ auf } K_0 \text{ für } k,\ m-\tfrac{1}{2} \text{ nicht ganz}. \tag{39}$$

In den Ausdrücken für $f_{k,\,-m}$ und $g_{k,\,-m}$

$$f_{k,\,-m}(z) = (1+z)^{\frac{1}{2}(m-\frac{1}{2})}(1-z)^{\frac{1}{2}(m+\frac{1}{2})}\frac{(k+m-\frac{1}{2})!}{2\pi i} \int_{K_0} \frac{dt}{t^{k+m+\frac{1}{2}}}(1+z+t)^k\cdot(1-z-t)^{k-1} \tag{40a}$$

$$g_{k,-m}(z) = (1+z)^{\frac{1}{2}(m+\frac{1}{2})}(1-z)^{\frac{1}{2}(m-\frac{1}{2})}\frac{(k+m-\frac{1}{2})!}{2\pi i}$$

$$\int\limits_{K_0}\frac{dt}{t^{k+m+\frac{1}{2}}}(1+z+t)^{k-1}(1-z-t)^k \tag{40b}$$

machen wir nun die Substitution:

$$t \to -\frac{1-z^2}{t}$$

welche ergibt

$$f_{k,-m}(z) = (1+z)^{-\frac{1}{2}(m-\frac{1}{2})}(1-z)^{-\frac{1}{2}(m+\frac{1}{2})}e^{-\pi i(m-\frac{1}{2})}\frac{(k+m-\frac{1}{2})!}{2\pi i}$$

$$\int\limits_{K_1}\frac{dt\cdot(1+z+t)^{k-1}}{t^{k-m+\frac{1}{2}}}.(1-z-t)^k \tag{41a}$$

$$g_{k,-m}(z) = -(1+z)^{-\frac{1}{2}(m+\frac{1}{2})}(1-z)^{-\frac{1}{2}(m-\frac{1}{2})}e^{-\pi i(m-\frac{1}{2})}\frac{(k+m-\frac{1}{2})!}{2\pi i}$$

$$\int\limits_{K_1}\frac{dt\,(1+z+t)^{k}}{t^{k-m+\frac{1}{2}}}.(1-z-t)^{k-1} \tag{41b}$$

wobei nun

$$|t| > |1+z|;\ |t| > |1-z| \text{ auf } K_1 \tag{42}$$

Da aber für ganze k und ganze $m-\frac{1}{2}$ der Kreis K_1 sich auf den Kreis K_0 zusammenziehen lässt, ist für diesen besonderen Fall die Beziehung (37) bewiesen.

Anders im Falle k halbganz, m ganz. Hier sind die Lösungen (36a), (36b) nur für $m > 0$ an beiden Stellen $z = -1$ und $z = +1$ regulär, während die Lösungen (31a) für $-m \leqq 0$ singulär sind. Für $m = 0$ sind sie eben noch quadratisch integrierbar in z. Es ist aber bemerkenswert, dass wir für $m = 0$ aus (36) und (37) zwei verschiedene Lösungen erhalten. Erstens

$$u^{\mathrm{I}}_{1;k,0} = f_{k,0}, \quad u^{\mathrm{I}}_{2;k,0} = g_{k,0} \tag{43a}$$

zweitens

$$u^{\mathrm{II}}_{1;k,0} = g_{k,0}, \quad u_{2;k,0} = -f_{k,0}. \tag{43b}$$

Wir zeigen weiter, dass diese beiden Scharen von Lösungen für $k-k'$ ungerade nicht orthogonal aufeinander sind. Es gilt sogar allgemeiner mit $m \geqq 0$ ganz und k halbganz

$$\begin{aligned}\frac{1}{4\pi}\sum_{\varrho=1,2}\int u^{+\,*}_{\varrho;k,m}\,u^{+}_{\varrho;k',-m}\sin\vartheta\,d\vartheta\,d\varphi \\ = -\frac{1}{4\pi}\sum_{\varrho=1,2}\int u^{-\,*}_{\varrho;k,m}\,u^{-}_{\varrho;k',-m}\sin\vartheta\,d\vartheta\,d\varphi \\ = \tfrac{1}{2}\int\limits_{-1}^{+1}(f_{k;m}\,g_{k',-m}-g_{k,m}\,f_{k',-m})\,dz \neq 0 \text{ für } k-k' \text{ ungerade}\end{aligned} \tag{45}$$

ein Ergebnis, das zu § 1, Gl. (17) analog ist. Man kann übrigens aus (36) folgern, dass der Integrand von (45) gerade in z ist, wenn k halbganz und $k-k'$ ungerade ist, während für gerades $k-k'$ der Integrand ungerade in z ist, das Integral dann also verschwindet.

Zum Beweise von (45) folgern wir aus (32a, b)

$$(k-k')\,\tfrac{1}{2}\int\limits_{-1}^{+1}(f_{k,m}\,g_{k',-m}-g_{k,m}\,f_{k',-m})\,dz$$
$$=\tfrac{1}{2}\left|\,(1-z^2)^{\frac{1}{2}}\,(f_{k,m}\,f_{k',-m}+g_{k,m}\,g_{k',-m})\right|_{-1}^{+1}.$$

Gemäss (43), (44) ist die rechte Seite in der Tat an den beiden Grenzen endlich und die Beiträge der beiden Grenzen kompensieren sich nicht für ungerades $k-k'$, womit (45) bewiesen ist.

Die Anwendung der durch (21a, b) definierten Operatoren P_+ und P_- auf die Eigenfunktionen gibt ferner das zu den Relationen (18) des § 1 analoge Resultat

$$P_+\begin{cases}f_{k,m}\,e^{im\varphi}\\ g_{k,m}\,e^{im\varphi}\end{cases}=\text{const}\begin{cases}f_{k,m+1}\,e^{i(m+1)\varphi}\\ g_{k,m+1}\,e^{i(m+1)\varphi}\end{cases}\tag{46a}$$

$$P_-\begin{cases}f_{k,m}\,e^{im\varphi}\\ g_{k,m}\,e^{im\varphi}\end{cases}=\text{const}\begin{cases}f_{k,m-1}\,e^{i(m-1)\varphi}\\ g_{k,m-1}\,e^{i(m-1)\varphi}\end{cases}\tag{46b}$$

$$P_+\begin{cases}g_{k,m}\,e^{-im\varphi}\\ -f_{k,m}\,e^{-im\varphi}\end{cases}=\text{const}\begin{cases}g_{k,m-1}\,e^{-i(m-1)\varphi}\\ -f_{k,m-1}\,e^{-i(m-1)\varphi}\end{cases}\tag{46c}$$

$$P_-\begin{cases}g_{k,m}\,e^{-im\varphi}\\ -f_{k,m}\,e^{-im\varphi}\end{cases}=\text{const}\begin{cases}g_{k,m+1}\,e^{-i(m+1)\varphi}\\ -f_{k,m+1}\,e^{-i(m+1)\varphi}\end{cases}\tag{46d}$$

Hierin ist in (46a) und (46d) für den Randwert $m=k-\frac{1}{2}$ die rechte Seite identisch Null zu setzen.

Mit Rücksicht auf (21) und (24a) erhält man in der Tat aus (36a, b) zunächst

$$P_-\,(f_{k,m}\,e^{im\varphi})=e^{i(m-1)\varphi}\,(1-z^2)^{\frac{1}{2}}\left[\frac{df_{k,m}}{dz}-\frac{mz}{1-z^2}f_{k,m}+\tfrac{1}{2}\,\frac{1}{1-z^2}f_{k,m}\right]$$
$$=e^{i(m-1)\varphi}\,(1-z^2)^{\frac{1}{2}}\left[\frac{df_{k,m}}{dz}+\tfrac{1}{2}\,(m+\tfrac{1}{2})\,\frac{f_{k,m}}{1+z}-\tfrac{1}{2}\,(m-\tfrac{1}{2})\,\frac{f_{k,m}}{1-z}\right]$$
$$=e^{i(m-1)\varphi}\,(1+z)^{-\frac{1}{2}(m-\frac{1}{2})}\,(1+z)^{-\frac{1}{2}(m-{}^3/_2)}\,\frac{d}{dz}\,[f_{k,m}\cdot(1+z)^{\frac{1}{2}(m+\frac{1}{2})}$$
$$(1-z)^{\frac{1}{2}(m-\frac{1}{2})}]=e^{i(m-1)\varphi}\,f_{k,m-1}$$

und ebenso

$$P_-(g_{km}\, e^{im\varphi}) = e^{i(m-1)\varphi}\,(1-z^2)^{\frac{1}{2}}\left[\frac{d\,g_{k.m}}{dz} - \frac{m z}{1-z^2}\, g_{k,m} - \tfrac{1}{2}\,\frac{1}{1-z^2}\, g_{k,m}\right]$$

$$= e^{i(m-1)\varphi}\,(1-z^2)^{\frac{1}{2}}\left[\frac{d\,g_{k,m}}{dz} + \tfrac{1}{2}(m-\tfrac{1}{2})\,\frac{g_{k,m}}{1+z} - \tfrac{1}{2}(m+\tfrac{1}{2})\,\frac{g_{k,m}}{1-z}\right]$$

$$= e^{i(m-1)\varphi}\,(1+z)^{-\frac{1}{2}(m-{}^3\!/_2)}(1-z)^{-\frac{1}{2}(m-\frac{1}{2})}\,\frac{d}{dz}\left[g_{k,m}\cdot(1+z)^{\frac{1}{2}(m-\frac{1}{2})}\right.$$

$$\left.(1-z)^{\frac{1}{2}(m+\frac{1}{2})}\right] = e^{i(m-1)\varphi}\, g_{k,m-1}\,.$$

Ferner ergibt sich mittels der Integraldarstellung (38)

$$P_+(f_{k,m}\, e^{im\varphi}) = e^{i(m+1)\varphi}\,(1-z^2)^{\frac{1}{2}}\left[-\frac{d\,f_{k,m}}{dz} + \tfrac{1}{2}(m+\tfrac{1}{2})\,\frac{f_{k,m}}{1+z}\right.$$

$$\left. - \tfrac{1}{2}(m-\tfrac{1}{2})\,\frac{f_{k,m}}{1-z}\right]$$

$$= e^{i(m+1)\varphi}\,(1+z)^{-\frac{1}{2}(m+{}^3\!/_2)}\,(1-z)^{-\frac{1}{2}(m+\frac{1}{2})}\cdot\frac{(k-m-\frac{1}{2})!}{2\pi i}$$

$$\cdot\int_{K_0}\frac{dt}{t^{k-m+\frac{1}{2}}}\{-(1-z^2)\,k\,(1+z+t)^{k-1}\,(1-z-t)^{k-1}$$

$$+(1-z^2)\,(k-1)\,(1+z+t)^{k}\cdot(1-z-t)^{k-2}$$

$$+[(m+\tfrac{1}{2})\,(1-z)-(m-\tfrac{1}{2})\,(1+z)]\,(1+z+t)^{k}\,(1-z-t)^{k-1}\}.$$

Der Integrand lässt sich umformen zu

$$(k+m+\tfrac{1}{2})\, t^{-(k-m-\frac{1}{2})}\,(1+z+t)^k\,(1-z-t)^{k-1}$$

$$-\frac{d}{dt}\left[t^{-(k-m-\frac{1}{2})}\,(2z+t)\,(1+z+k)^k\cdot(1-z-t)^{k-1}\right].$$

Der zweite Term verschwindet bei Integration über den Kreis K_0 und es ergibt sich

$$P_+(f_{k,m}\, e^{im\varphi}) = (k+m+\tfrac{1}{2})\,(k-m-\tfrac{1}{2})\, f_{k,m+1}\, e^{i(m+1)\varphi}\,.$$

Ebenso erhält man

$$P_+(g_{k,m}\, e^{im\varphi})$$

$$= e^{i(m+1)\varphi}\,(1-z^2)^{\frac{1}{2}}\left[-\frac{d\,g_{k,m}}{dz} + \tfrac{1}{2}(m-\tfrac{1}{2})\,\frac{g_{k,m}}{1+z} - \tfrac{1}{2}(m+\tfrac{1}{2})\,\frac{g_{k,m}}{1-z}\right]$$

$$= e^{i(m+1)\varphi}\,(1+z)^{-\frac{1}{2}(m+\frac{1}{2})}\,(1-z)^{-\frac{1}{2}(m+{}^3\!/_2)}\,\frac{(k-m-\frac{1}{2})!}{2\pi i}\cdot\int\frac{dt}{t^{k-m+\frac{1}{2}}}\,\cdot$$

$$\cdot\{-(1-z^2)\,(k-1)\,(1+z+t)^{k-2}(1-z-t)^k+(1-z^2)\,k\,(1+z+t)^{k-1}(1-z-t)^{k-1}$$

$$+[(m-\tfrac{1}{2})\,(1-z)-(m+\tfrac{1}{2})\,(1+z)]\,(1+z+t)^{k-1}\,(1-z-t)^k\}.$$

Der Integrand lässt sich umformen zu

$$(k+m+\tfrac{1}{2})\, t^{-(k-m-\frac{1}{2})}(1+z+t)^{k-1}(1-z-t)^k$$
$$-\frac{d}{dt}\left[t^{-(k-m-\frac{1}{2})}(2z+t)(1+z+t)^{k-1}\cdot(1-z-t)^k\right]$$

und die Integration über den Kreis K_0 ergibt

$$P_+(g_{k,m}\, e^{im\varphi}) = (k+m+\tfrac{1}{2})(k-m-\tfrac{1}{2})\, g_{k,m+1}\, e^{i(m+1)\varphi}\,.$$

Die Durchrechnung von (46c) und (46d) verläuft analog.

Für die Anwendung unseres Kriteriums ist speziell wichtig, dass im Fall k halbganz, m ganz in den Relationen

$$P_-\begin{cases} f_{k,1}\, e^{i\varphi} \\ g_{k,1}\, e^{i\varphi}\end{cases} = \text{const}\begin{cases} f_{k,0} \\ g_{k,0}\end{cases}; \quad P_+\begin{cases} g_{k,1}\, e^{-i\varphi} \\ -f_{k,1}\, e^{-i\varphi}\end{cases} = \text{const}\begin{cases} g_{k,0} \\ -f_{k,0}\end{cases}$$

$$P_-\begin{cases} f_{k,0} \\ g_{k,0}\end{cases} = \text{const}\begin{cases} f_{k,-1}\, e^{-i\varphi} \\ g_{k,-1}\, e^{-i\varphi}\end{cases}; \quad P_+\begin{cases} g_{k,0} \\ -f_{k,0}\end{cases} = \text{const}\begin{cases} g_{k,-1}\, e^{i\varphi} \\ -f_{k,-1}\, e^{i\varphi}\end{cases}$$

singuläre Lösungen im Resultat auftreten. Daher verlangt unser Kriterium die *Ausschliessung des Falles k halbganz, m ganz.* In der Tat ergeben sich in diesem Fall stets Widersprüche für die in üblicher Weise aus den Integralen berechneten Drehimpulsmatrizen. Rechnet man einerseits die eine der beiden Lösungen $(f_{k,0}, g_{k,0})$ *oder* $(g_{k,0}, -f_{k,0})$ zum ursprünglichen System der Lösungen, so werden die berechneten Matrixelemente gemäss (45), (45a), (45) teilweise nicht diagonal in k, im Widerspruch zur Vertauschbarkeit der Operatoren P_+ und P_- mit dem durch (22) definierten Operator K. Würde man anderseits die (nicht regulären, aber noch quadratisch integrierbaren) Lösungen für $m = 0$ nicht zu den zugelassenen Eigenlösungen zählen[1]), so würden, da die gemäss (46) erzeugten Lösungen für $m = 0$ dann auf allen ursprünglich zugelassenen Lösungen orthogonal wären, aus den Matrixelementen von P_+ und P_- Stücke am Rande abgeschnitten, was die Gültigkeit der notwendigen Vertauschungsrelationen für diese Matrizen verhindern würde.

Dagegen führt im Fall k ganz ($\neq 0$), m halbganz als Folge von (37) die Anwendung der Operatoren P_+ und P_- auf das ursprüngliche Orthogonalsystem $u^+_{k,m}(\vartheta, \varphi)$, $u^-_{k,m}(\vartheta, \varphi)$, worin $\frac{1}{2} \leqq m \leqq k-\frac{1}{2}$, nicht aus diesem System heraus, wie unser Kriterium es verlangt, so dass also dieser Fall die physikalisch richtigen Eigenlösungen liefert.

---

[1]) Vgl. E. Schrödinger, P. A., Anm. bei der Korrektur am Schluss.

§ 3. Zusammenhang der Schrödinger'schen mit der gewöhnlichen Form der Dirac'schen Gleichungen. Verhalten der Lösungen bei endlichen Drehungen.

Es möge Ψ der gewöhnlichen Dirac'schen Gleichung

$$\frac{1}{c}\frac{\partial \Psi}{\partial t} - i\varphi_0 \Psi + \sum_{k=1}^{3} \alpha_k \frac{\partial \Psi}{\partial x_k} + i\frac{mc}{h}\beta\Psi = 0 \tag{47}$$

genügen, während ψ die Gleichung (20) in Polarkoordinaten

$$x_1 = r\sin\vartheta\cos\varphi, \quad x_2 = r\sin\vartheta\sin\varphi, \quad x_3 = r\cos\vartheta \tag{48}$$

erfüllt, die wir schreiben können

$$\frac{1}{c}\frac{\partial \psi}{\partial t} - i\varphi_0\psi + \alpha_1\frac{1}{r}\left(\frac{\partial\psi}{\partial\vartheta} + \tfrac{1}{2}\frac{\cos\vartheta}{\sin\vartheta}\psi\right) + \alpha_2\frac{1}{r\sin\vartheta}\frac{\partial\psi}{\partial\varphi}$$
$$+ \alpha_3\left(\frac{\partial\psi}{\partial r} + \frac{1}{r}\psi\right) + \frac{imc}{h}\beta\psi = 0. \tag{49}$$

Der Übergang von Ψ zu ψ wird nun durch die von ϑ, φ abhängige unitäre Matrix $R(\vartheta, \varphi)$ vermittelt, die sich aus den durch

$$s_1 = -i\alpha_2\alpha_3, \quad s_2 = -i\alpha_3\alpha_1, \quad s_3 = -i\alpha_1\alpha_2 \tag{50}$$

definierten Spinmatrizes und der Einheitsmatrix linear zusammensetzt gemäss der Formel[1])

$$R(\vartheta, \psi) = e^{is_2\frac{\vartheta}{2}} \cdot e^{is_3\frac{\varphi}{2}} = \cos\frac{\vartheta}{2}\cos\frac{\varphi}{2} I - i\sin\frac{\vartheta}{2}\sin\frac{\varphi}{2} s_1$$
$$+ i\sin\frac{\vartheta}{2}\cos\frac{\varphi}{2}\cdot s_2 + i\cos\frac{\vartheta}{2}\sin\frac{\varphi}{2}\cdot s_3. \tag{51}$$

Wie man sieht, ist R mit der Matrix β vertauschbar. Auf Grund der bekannten Vertauschungsrelationen für die s_k bestätigt man ferner leicht, dass man die zu R inverse Matrix durch Vertauschen von i mit $-i$ sowie der Reihenfolge der beiden Exponentialfaktoren erhält:

$$R^{-1}(\vartheta, \varphi) = e^{-is_3\frac{\varphi}{2}} \cdot e^{-is_2\frac{\vartheta}{2}} = \cos\frac{\vartheta}{2}\cos\frac{\varphi}{2} I + i\sin\frac{\vartheta}{2}\sin\frac{\varphi}{2}\cdot s_1$$
$$- i\sin\frac{\vartheta}{2}\cos\frac{\varphi}{2}\cdot s_2 - i\cos\frac{\vartheta}{2}\sin\frac{\varphi}{2} s_3. \tag{51a}$$

Man kann nun in der Tat zeigen, dass die Zuordnung

$$\psi = R\Psi \quad \text{oder} \quad \Psi = R^{-1}\psi \tag{52}$$

[1]) Die Kenntnis der Schreibweise für $R(\vartheta, \varphi)$ als Produkt zweier Exponentialfaktoren, die auch für den Beweis der folgenden Relationen (53), (55) zweckmässig ist, verdanke ich einer freundlichen Mitteilung von Herrn E. Schrödinger.

von der Gleichung (47) zur Gleichung (49) führt oder umgekehrt. Dies beruht auf den aus (51) folgenden Relationen[1])

$$R^{-1}\,\alpha_1\,R = \alpha_1 \cos\vartheta\cos\varphi + \alpha_2\cos\vartheta\sin\varphi - \alpha_3\sin\vartheta \qquad (53_1)$$

$$R^{-1}\,\alpha_2\,R = -\alpha_1\sin\varphi + \alpha_2\cos\varphi \qquad (53_2)$$

$$R^{-1}\,\alpha_3\,R = \alpha_1\sin\vartheta\cos\varphi + \alpha_2\sin\vartheta\sin\varphi + \alpha_3\cos\vartheta. \qquad (53_3)$$

Mittels der Relationen

$$\frac{\partial}{\partial x_1} = \cos\vartheta\cos\varphi\,\frac{1}{r}\,\frac{\partial}{\partial\vartheta} - \sin\varphi\left(\frac{1}{r\sin\vartheta}\,\frac{\partial}{\partial\varphi}\right) + \sin\vartheta\cos\varphi\,\frac{\partial}{\partial r}$$

$$\frac{\partial}{\partial x_2} = \cos\vartheta\sin\varphi\,\frac{1}{r}\,\frac{\partial}{\partial\vartheta} + \cos\varphi\left(\frac{1}{r\sin\vartheta}\,\frac{\partial}{\partial\varphi}\right) + \sin\vartheta\sin\varphi\,\frac{\partial}{\partial r}$$

$$\frac{\partial}{\partial x_3} = -\sin\vartheta\,\frac{1}{r}\,\frac{\partial}{\partial\vartheta} + \cos\vartheta\,\frac{\partial}{\partial r}$$

folgt aus (53) weiter

$$\sum_{k=1}^{3}\alpha_k\,\frac{\partial}{\partial x_k} = (R^{-1}\,\alpha_1\,R)\,\frac{1}{r}\,\frac{\partial}{\partial\vartheta} + (R^{-1}\alpha_2\,R)\,\frac{1}{r\sin\vartheta}\,\frac{\partial}{\partial\varphi} + R^{-1}\alpha_3\,R\,\frac{\partial}{\partial r}. \qquad (54)$$

Schliesslich findet man für die durch

$$R^{-1}\,\alpha_1\,\frac{\partial R}{\partial\vartheta} + \frac{1}{\sin\vartheta}\left(R^{-1}\,\alpha_2\,\frac{\partial R}{\partial\varphi}\right) = R^{-1} X R$$

definierte Matrix X das Ergebnis

$$X = \alpha_1\,\frac{\partial R}{\partial\vartheta}\,R^{-1} + \frac{1}{\sin\vartheta}\,\alpha_2\,\frac{\partial R}{\partial\varphi}\,R^{-1} = -\left(\frac{1}{2}\,\frac{\cos\vartheta}{\sin\vartheta}\,\alpha_1 + \alpha_3\right). \qquad (55)$$

---

[1]) Um diese Relationen sowie die folgenden (55) zu verifizieren, kann man auch die spezielle Darstellung (24) der Diracmatrices zugrunde legen, die nach (24a) für die s_k einfach

$$\begin{pmatrix}\sigma_k & 0\\ 0 & \sigma_k\end{pmatrix}$$

ergibt. Man erhält dann aus (51), (51a)

$$R = \begin{pmatrix}T, & 0\\ 0, & T\end{pmatrix}$$

mit der zweireihigen Matrix

$$T = \begin{pmatrix}\cos\frac{\vartheta}{2}\,e^{i\varphi/2}, & \sin\frac{\vartheta}{2}\,e^{-i\varphi/2}\\ -\sin\frac{\vartheta}{2}\,e^{i\varphi/2}, & \cos\frac{\vartheta}{2}\,e^{-i\varphi/2}\end{pmatrix};\quad T^{-1} = \begin{pmatrix}\cos\frac{\vartheta}{2}\,e^{-i\varphi/2}, & -\sin\frac{\vartheta}{2}\,e^{-i\varphi/2}\\ \sin\frac{\vartheta}{2}\,e^{i\varphi/2}, & \cos\frac{\vartheta}{2}\,e^{i\varphi/2}\end{pmatrix}$$

und die Relationen (53) reduzieren sich auf die einfacheren, in denen R durch T und die α_k durch die σ_k ersetzt sind.

Aus (54) und (55) gewinnt man endlich mittels der Substitution (52) aus den ursprünglichen Dirac'schen Gleichungen (47) ihre Schrödinger'sche Form (49).

Wie hier nicht näher ausgeführt werden soll, lassen sich auch die durch (21) definierten Drehimpulsoperatoren der Gleichungen (49) aus den gewöhnlichen Drehimpulsoperatoren

$$P_1^0 = \frac{1}{i}\left(x_2 \frac{\partial}{\partial x_3} - x_3 \frac{\partial}{\partial x_2}\right) + \tfrac{1}{2} s_1 \ldots \text{(und zyklisch vertauscht)} \tag{56}$$

der Gleichungen (47) durch Umrechnung mittels der R-Matrix gewinnen.

Wir können nun auch die im § 1 diskutierte Frage nach dem Verhalten der Lösungen von (49) bei endlichen Drehungen der Polarachsen beantworten, da sich diese Frage mittels der Matrix R auf das bekannte Verhalten der Lösungen von (47) zurückführen lässt. Betrachten wir also wieder eine durch 3 Parameter a charakterisierte endliche Drehung des Koordinatensystems, die neue Koordinaten x_k' bzw. Polarwinkel ϑ', φ' als Funktionen der alten Koordinaten x_k bzw. Winkel ϑ, φ und der a bestimmt. Für ein kugelsymmetrisches Potential $\varphi_0 = \varphi_0(r)$ erhält man beim gewöhnlichen System (47) der Dirac'schen Gleichungen aus einer beliebigen Lösung $\Psi(x)$ der Gleichungen in den x_k eine neue Lösung $X(x, a)$ derselben Gleichungen, indem man erstens bei ungeänderter Funktionsform von Ψ die x durch die x' ersetzt und diese durch die x und a ausdrückt und zweitens noch eine von den a abhängige S-Transformation mit *konstanten* Koeffizienten ausführt.

$$X(x, a) = S^0(a)\, \Psi(x'). \tag{57}$$

(Wir schreiben hier in üblicher Weise die Spinindizes nicht explicite an.) Die Matrix $S^0(a)$ ist aus der Theorie der Spinoren bekannt und braucht hier nicht näher angegeben zu werden.

Wir erhalten nun sogleich die entsprechende Relation

$$\chi(\vartheta, \varphi, a) = S(\vartheta, \varphi, a)\, \psi(\vartheta', \varphi'), \tag{58}$$

die einer beliebigen Lösung ψ von (49) eine neue Lösung χ von (49) zuordnet, durch den Zusammenhang (52)

$$\Psi(x') = R^{-1}(\vartheta', \varphi')\, \psi(\vartheta', \varphi'), \qquad \chi = R(\vartheta, \varphi)\, X$$

der für die Matrix $S(\vartheta, \varphi, a)$ ergibt

$$S(\vartheta, \varphi, a) = R(\vartheta, \varphi) \cdot S^0(a) \cdot R^{-1}(\vartheta', \varphi') \tag{59}$$

worin ϑ', φ' als Funktion von ϑ, φ und den a zu denken sind.