

# Vorlesungen über Quantenmechanik - Vorlesung 14

JOCHEN GEPPERT / DIDAKTIK DER PHYSIK

Wintersemester

ABSTRACT. Vorbereitend auf die SCHRÖDINGER-Gleichung werden in dieser Vorlesung die Darstellung von Funktionen in Kugelkoordinaten, die Kugelflächenfunktionen und ihre Differenzialgleichung behandelt. Als physikalischer Aspekt wird die Quantisierung des Drehimpulses diskutiert.

## 1. DARSTELLUNG VON FUNKTIONEN IN KUGELKOORDINATEN

### Maple-Datei zur Vorlesung:

- QMVor14Pr1.mws (Kugelkoordinaten und Kugelflächenfunktionen)

In einem kartesischen Koordinatensystem sind die drei Basisvektoren  $\mathbf{e}_x$ ,  $\mathbf{e}_y$ ,  $\mathbf{e}_z$  ortsunabhängig. Manchmal ist es jedoch sinnvoll, ein Koordinatensystem zu wählen, bei dem die Richtung der Basisvektoren ortsabhängig ist. Die gebräuchlichsten ortsabhängigen Koordinatensysteme sind Zylinderkoordinaten und Kugelkoordinaten<sup>1</sup>. Da wir die SCHRÖDINGER-Gleichung des H-Atoms später in Kugelkoordinaten lösen wollen, ist es an dieser Stelle sinnvoll, noch einmal die grundlegenden Definitionen und Formeln im Umgang mit Kugelkoordinaten zu betrachten. Anschließend werden wir die Möglichkeiten, die Maple zur Verfügung stellt, um Funktionen in Kugelkoordinaten darzustellen, studieren. Da die Kugelflächenfunktionen bei der Lösung der SCHRÖDINGER-Gleichung des Wasserstoffatoms eine wichtige Rolle spielen<sup>2</sup>, sollen auch sie in dieser Vorlesung eingehend untersucht werden. Zum Schluss werden wir dann noch auf die quantenmechanische Betrachtung des Drehimpulses und seine damit verbundene Quantisierung eingehen, die eng mit den Kugelflächenfunktionen zusammenhängt.

**1.1. Einführung.** Der Ortsvektor  $\mathbf{r}$  kann statt durch seine kartesischen Koordinaten  $x$ ,  $y$ ,  $z$  auch durch seinen Betrag  $r$ <sup>3</sup> und durch den **Polarwinkel**  $\theta$  und den **Azimutwinkel**  $\phi$  charakterisiert werden<sup>4</sup>. Der Polarwinkel ist der Winkel zwischen der  $z$ -Achse und dem Ortsvektor, der Azimutwinkel  $\phi$  ist der Winkel zwischen der  $x$ -Achse und der Projektion des Ortsvektors in die  $x$ - $y$ -Ebene. Die Umrechnungsbeziehungen zwischen kartesischen Koordinaten und Kugelkoordinaten können relativ leicht aus einer grafischen Darstellung der Kugelkoordinaten in einem kartesischen Koordinatensystem hergeleitet werden.

---

<sup>1</sup>Siehe Skript zur 1. Vorlesung: *Einführung in die Quantenphysik*.

<sup>2</sup>Wie etwa die LEGENDRE-Polynome bei der Lösung des harmonischen Oszillators.

<sup>3</sup>Der den Abstand von einem willkürlich - dann aber fest - gewählten Mittelpunkt einer Kugel angibt.

<sup>4</sup>Man benutzt auch  $\vartheta = \theta$  und  $\phi = \varphi$  als Polar- bzw. Azimutwinkel.

Betrachte dazu die folgende Abbildung<sup>5</sup>: (beachte  $\theta = \vartheta$  und  $\phi = \varphi$ )

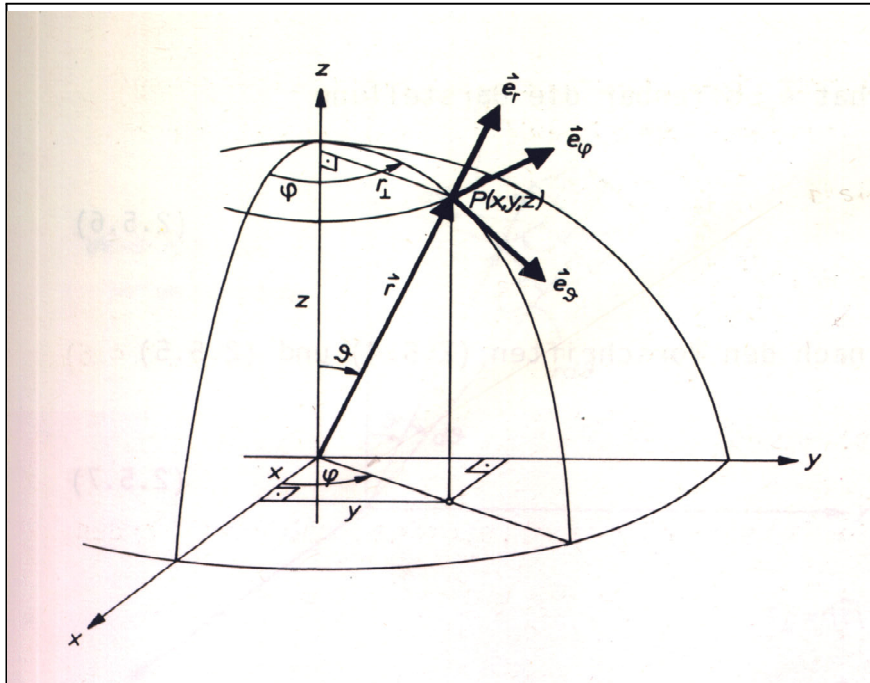


Figure 1: Zur Darstellung eines Vektors in Kugelkoordinaten

Aus der Abbildung liest man bei genauer Betrachtung den folgenden **Zusammenhang zwischen kartesischen und Kugelkoordinaten** sofort ab:

$$\begin{aligned} x &= r \cdot \sin \vartheta \cdot \cos \varphi \\ y &= r \cdot \sin \vartheta \cdot \sin \varphi \\ z &= r \cdot \cos \vartheta \end{aligned} \quad (1)$$

Aus diesen Beziehungen kann man dann leicht ableiten:

$$\begin{aligned} r &= \sqrt{x^2 + y^2 + z^2} \\ \tan \theta &= \frac{1}{z} \sqrt{x^2 + y^2} \\ \tan \phi &= \frac{y}{x} \end{aligned} \quad (2)$$

Als Basissystem am Ort  $\mathbf{r}$  wählt man die Einheitsvektoren (siehe Abbildung), die in die Richtung wachsender Werte von  $r$  bzw.  $\vartheta$  bzw.  $\varphi$  zeigen. Dabei werden die anderen Koordinaten konstant gehalten. Der Einheitsvektor in Richtung wachsender

<sup>5</sup>Entnommen aus Brandt / Dahmen: Mechanik, Springer 1996.

Werte von  $r$  ist:

$$\mathbf{e}_r = \frac{\mathbf{r}}{|\mathbf{r}|} = \begin{pmatrix} \sin \theta \cdot \cos \phi \\ \sin \theta \cdot \sin \phi \\ \cos \theta \end{pmatrix} \quad (3)$$

Für die beiden anderen Einheitsvektoren erhält man:

$$\begin{aligned} \mathbf{e}_\theta &= \frac{\frac{\partial \mathbf{e}_r}{\partial \theta}}{\left| \frac{\partial \mathbf{e}_r}{\partial \theta} \right|} = \begin{pmatrix} \cos \theta \cdot \cos \phi \\ \cos \theta \cdot \sin \phi \\ -\sin \theta \end{pmatrix} \\ \mathbf{e}_\phi &= \frac{\frac{\partial \mathbf{e}_r}{\partial \phi}}{\left| \frac{\partial \mathbf{e}_r}{\partial \phi} \right|} = \begin{pmatrix} -\sin \phi \\ \cos \phi \\ 0 \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (4)$$

**1.2. Darstellung mit Maple.** Natürlich kann man mit Maple nur dreidimensionale Plots erzeugen, deshalb kann man mit Maple nur Funktionen der Art:

$$r = r(\theta, \phi) \quad (5)$$

erzeugen. Maple zeichnet also an einer durch die beiden Winkel klassifizierten Gerade durch den Ursprung im Abstand  $r$  vom Ursprung einen Punkt ein. Es entsteht allerdings im Verständnis der Bilder, die Maple zeichnet ein Manko, denn Maple hat intern die Winkel  $\theta$  und  $\phi$  umgekehrt definiert, wie es in der Literatur üblich ist! Diesem Problem begegnet man am besten in der Weise, dass man in der Funktion, die man zeichnen lassen möchte, einfach die beiden Winkel tauscht. Beim Betrachten der entstandenen Figur kann man dann wieder in gewohnten Kugelkoordinaten denken! Man erhält Bilder wie z.B. das folgende:

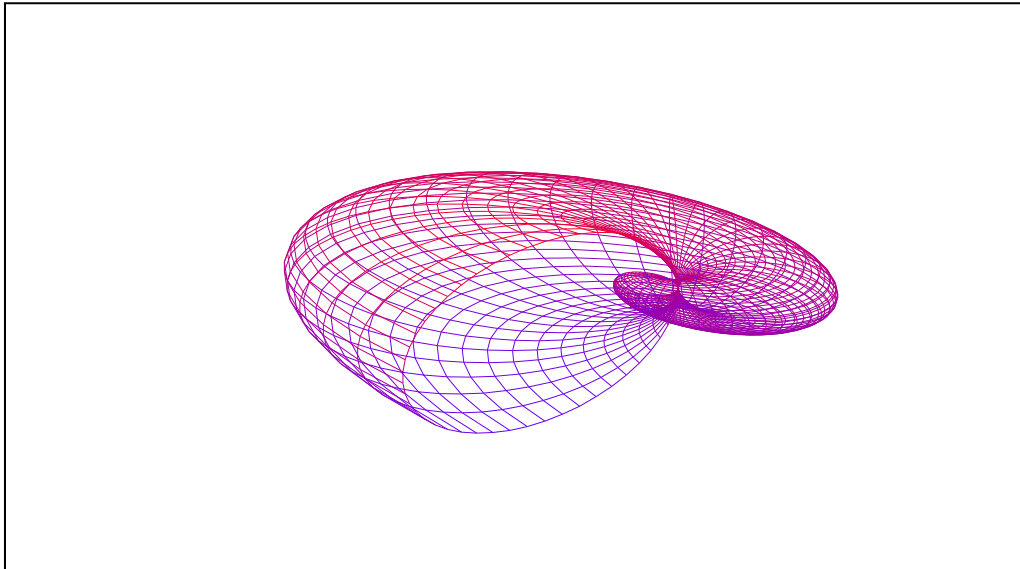


Figure 2: Beispiel für einen Maple-Plot.

Maple erlaubt die Erzeugung von Animationen in Kugelkoordinaten<sup>6</sup> und man kann mit Kugelkoordinaten einfach Kugeln zeichnen (wie ebenfalls im Programm zu sehen ist).

## 2. DIE KUGELFUNKTIONEN

**2.1. Der LAPLACE-Operator in Kugelkoordinaten.** Wir kennen diesen Operator bereits aus der SCHRÖDINGER-Gleichung als Operator in kartesischen Koordinaten:

$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \quad (6)$$

Natürlich ist auch eine Darstellung in Kugelkoordinaten möglich und sie kann über eine längere Rechnung, die nicht weiter schwierig ist<sup>7</sup> und die in jedem Buch zur Mechanik<sup>8</sup> zu finden ist, auch leicht gezeigt werden. Wir verzichten in dieser Vorlesung auf die Herleitung und betrachten sofort das Ergebnis:

$$\Delta = \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} (r \cdot) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \quad (7)$$

**2.2. Lösung der LAPLACE-Gleichung in Kugelkoordinaten.** Die Kugelfunktionen, die uns besonders interessieren, werden bei der Lösung dieser Gleichung in Kugelkoordinaten gefunden. Ausgangspunkt ihrer Bestimmung ist also die LAPLACE-Gleichung in Kugelkoordinaten:

$$\Delta \Phi(r, \theta, \phi) = 0 \quad (8)$$

$$\frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} (r \cdot \Phi(r, \theta, \phi)) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \Phi(r, \theta, \phi) \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \Phi(r, \theta, \phi) = 0 \quad (9)$$

Diese Gleichung lösen wir wieder durch einen Separationsansatz. Die ganze Rechnung ist im Programm QMVorl15Pr1.mws dargestellt und Maple führt die einzelnen Rechnungen durch. Aus diesem Grund können wir an dieser Stelle auch auf die einzelnen Rechnungen verzichten und stattdessen die Ergebnisse präsentieren.

Über den Separationsansatz<sup>9</sup>:

$$\Phi(r, \theta, \phi) = \frac{U(r)}{r} \cdot P(\cos \theta) \cdot Q(\phi) \quad (10)$$

erhält man drei gewöhnliche Differenzialgleichungen (die alle im Programm entwickelt werden):

$$\begin{aligned} Q''(\phi) + m^2 Q(\phi) &= 0 \quad (11) \\ 2 \cos \theta \cdot \frac{d}{d\theta} P(\cos \theta) - \sin^2 \theta \cdot \frac{d^2}{d\theta^2} P(\cos \theta) + \left( \frac{m^2}{\sin^2 \theta} - \lambda \right) P(\cos \theta) &= 0 \\ \frac{d^2}{dr^2} U(r) - \frac{\lambda}{r^2} U(r) &= 0 \end{aligned}$$

<sup>6</sup> Siehe für ein Beispiel die Animation im Programm.

<sup>7</sup> Sie erfordert nur Kenntnisse über Ableitungen - insbesondere über die totale Ableitung.

<sup>8</sup> So z.B. in Greiner, Mechnik, Verlag Harri Deutsch, 1989.

<sup>9</sup> Man kann zeigen, dass alle Lösungen der Laplacegleichung diese Struktur besitzen.

Zu beachten ist hierbei, dass in der zweiten Gleichung die inneren Ableitungen bereits ausgeführt wurden. Die erste der drei Gleichungen lässt sich dabei sofort und einfach lösen:

$$Q(\phi) \Rightarrow Q_m(\phi) = e^{im\phi} \quad (12)$$

Man muss nun beachten, dass der Raumpunkt  $(r, \theta, \phi)$  identisch ist mit dem Raumpunkt  $(r, \theta, \phi + 2\pi)$ . Deshalb muss für die Lösung  $Q_m(\phi)$  gelten:

$$Q_m(\phi) = Q_m(\phi + 2\pi) \Rightarrow e^{im\phi} = e^{im(\phi+2\pi)} = e^{im\phi} \cdot e^{im2\pi}$$

Es muss also gelten:

$$e^{im2\pi} = 1 \Rightarrow m = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots \quad (13)$$

wie man sich leicht klarmacht, wenn man die EULER-Identität:

$$e^{i\alpha} = \cos \alpha + i \sin \alpha$$

beachtet. Da wir in unserer Lösung auch negative  $m$  zulassen, brauchen wir den Summand  $e^{-im\theta}$  der natürlich auch eine Lösung der Gleichung wäre, nicht zu betrachten. Die Lösung der zweiten Gleichung ist langwieriger und soll an dieser Stelle nur rudimentär erklärt werden. Zuerst substituiert man:

$$x = \cos \theta \Rightarrow dx = -\sin \theta \cdot d\theta \Rightarrow \frac{d}{dx} = -\frac{1}{\sin \theta} \frac{d}{d\theta}$$

Mittels dieses Tricks wird die zweite Differenzialgleichung etwas übersichtlicher, denn man erhält:

$$\frac{d}{dx} \left( (1-x^2) \frac{dP}{dx} \right) + \left( \lambda - \frac{m^2}{1-x^2} \right) P(x) = 0 \quad (14)$$

Nun löst man diese Gleichung über einen sogenannten Potenzreihenansatz, d.h. man legt die Lösung als unendliche Reihe der Art:

$$P(x) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k x^k \quad (15)$$

fest. Diesen Ansatz setzt man ein und man erhält nach einer längeren Rechnung eine sogenannte Abbruchbedingung. Diese führt dazu, dass bei oberhalb eines Index  $k$  alle Koeffizienten  $a_k$  Null sind und somit die unendliche Reihe in Wirklichkeit endlich bleibt. Bei der Rechnung stösst man auf die Bedingungen:

$$\begin{aligned} \lambda &= l \cdot (l+1) \quad , \quad l = 0, 1, 2, 3, 4, \dots \\ m &= 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l \end{aligned} \quad (16)$$

da sonst die Abbruchbedingung nicht erfüllt werden kann.

Die Lösungen dieser zweiten Differenzialgleichung können aus der folgenden Formel heraus entwickelt werden und heissen **zugeordnete LEGENDRE-Polynome**:

$$P_l^m(x) = \frac{(-1)^m}{2^l \cdot l!} (1-x^2)^{\frac{m}{2}} \frac{d^{l+m}}{dx^{l+m}} (1-x^2)^l \quad (17)$$

Maple benutzt im Programm die gleiche Formel um die Polynome zu entwickeln, wobei man  $l$  wahlweise vorgeben kann. Betrachten wir die ersten Beispiele:

$$\begin{aligned} P_0^0 &= 1 \\ P_1^0 &= x \\ P_1^1 &= -\sqrt{1-x^2} \\ P_1^{-1} &= \frac{1}{2}\sqrt{1-x^2} \end{aligned}$$

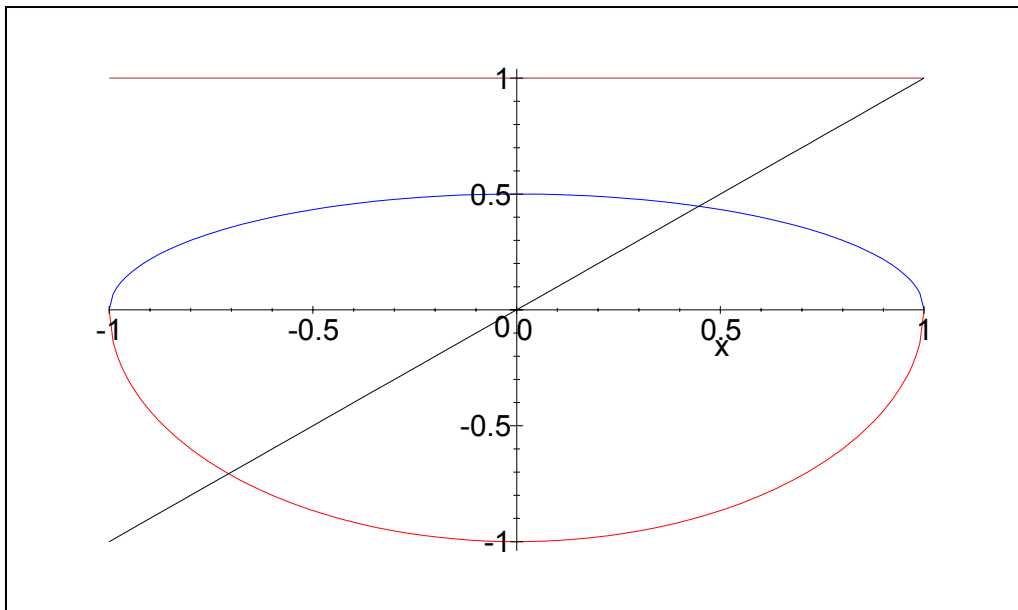


Figure 3: Die niedrigsten zugeordneten LEGENDRE-Polynome.

Man resubstituiert nun wieder  $x = \cos \theta$  und fasst dann das Produkt aus zugeordnetem LEGENDRE-Polynom und Lösung der ersten Gleichung zusammen (mit einem Vorfaktor, der Vereinbarung ist) zu den **Kugelfunktionen**:

$$\begin{aligned} Y_{lm}(\theta, \phi) &= \sqrt{\frac{(2l+1) \cdot (l-m)!}{4\pi \cdot (l+m)!}} P_l^m(\cos \theta) \cdot e^{im\phi} \\ l &= 0, 1, 2, 3, 4, \dots \\ m &= 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots \pm l \end{aligned} \quad (18)$$

Im Programm benutzt Maple diese Formel zur Entwicklung der Kugelfunktionen bei wahlweiser Vorgabe von  $l$ . Da wir ja in der Quantenphysik immer an Beträgen interessiert sind - und natürlich spielen die Kugelfunktionen dort eine Rolle - kann man dort im Programm auch solche Bilder von Maple zeichnen lassen. Man sollte die Bilder genau betrachten und auch drehen, um die Struktur der Bilder zu erfassen.

Dies wird noch bei der Behandlung des H-Atoms eine wichtige Rolle spielen. Im Programm kann ein frei gewähltes Beispiel auch in einer Animation als sich langsam drehendes Objekt betrachtet werden.

Betrachten wir an dieser Stelle ein Beispiel:

$$Y_{20}(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{5}{16\pi}} (3 \cos^2 \theta - 1) \quad (19)$$

und schauen wir uns das Betragsquadrat an:

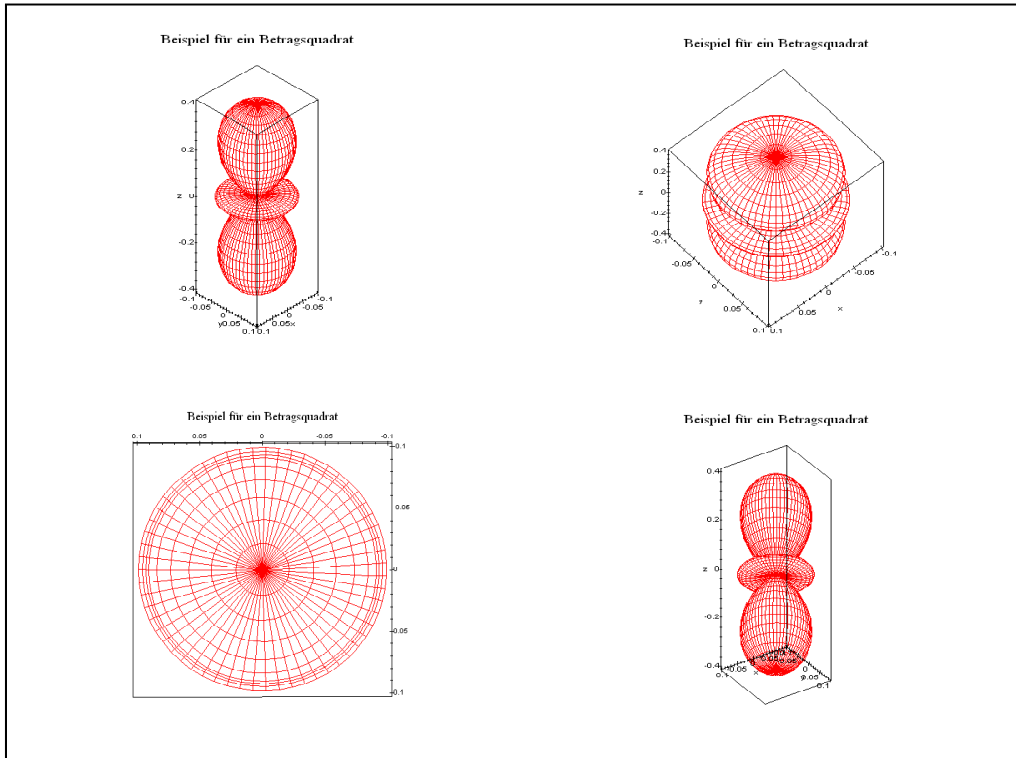


Figure 4:  $|Y_{20}(\theta, \phi)|^2$  in verschiedenen Ansichten

Es ist sinnvoll diese Figur im Programm zu drehen, um die Struktur richtig zu erfassen<sup>10</sup>! Im Programm wird diese Figur in der Weise erzeugt, dass wir die Funktion  $|Y_{2,0}(\theta, \phi)|^2$  ausdrucken lassen. In der Betrachtung des Bildes kann man dann wieder in den zu Beginn der Vorlesung eingeführten Kugelkoordinaten denken.

Die Lösung der dritten Teilgleichung:

$$\frac{d^2}{dr^2} U(r) - \frac{\lambda}{r^2} U(r) = 0, \quad \lambda = l(l+1) \quad (20)$$

<sup>10</sup>Sehenswert ist ebenfalls die Animation beliebig gewählter Betragsquadrate, die im Programm entwickelt wird!

ist für Maple ebenfalls kein Problem (siehe Programm), wir erhalten die allgemeine Lösung:

$$U(r) = C_1 r^{l+1} + C_2 \frac{1}{r^l} \quad (21)$$

Die **allgemeine Lösung der LAPLACE-Gleichung** erhält man dann durch Überlagerung aller Lösungen:

$$\begin{aligned} \Phi_{lm}(r, \theta, \phi) &= \frac{U_{lm}(r)}{r} Y_{lm}(\theta, \phi) \\ \Phi(r, \theta, \phi) &= \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l \left( a_{lm} r^l + \frac{b_{lm}}{r^{l+1}} \right) Y_{lm}(\theta, \phi) \end{aligned} \quad (22)$$

Wir benötigen diese allgemeine Lösung zwar nicht im weiteren Verlauf der Vorlesung, jedoch war die Herleitung (mit Maple!) auch nicht weiter von großer Mühe.

Eine Gleichung, die wir aber im folgenden benötigen, ist eine spezielle Gleichung, die die Kugelfunktionen erfüllen, es gilt nämlich:

$$\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} Y_{lm}(\theta, \phi) \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} Y_{lm}(\theta, \phi) = -l(l+1) Y_{lm}(\theta, \phi) \quad (23)$$

Mit Maple wird im Programm die Richtigkeit dieser Gleichung nachgewiesen. Mathematisch folgt diese Gleichung auch auf relativ einfache Weise, führt man nämlich die  $\phi$ -Ableitung aus, so erhält man wieder die zweite Gleichung aus (11) (nach Division durch  $e^{im\phi}$ ).



## 3. DIE DISKRETISIERUNG DES DREHIMPULSES

**3.1. Der Drehimpuls in der klassischen Mechanik.** Aus der Mechanik ist der **Drehimpuls eines Teilchens** mit der Masse  $m$  und der Geschwindigkeit  $\mathbf{v}$  relativ zu einem beliebigen Punkt<sup>11</sup> bekannt:

$$\mathbf{L} = \mathbf{r} \times m \cdot \mathbf{v} = \mathbf{r} \times \mathbf{p} \quad (24)$$

Betrachte dazu die folgende Abbildung:

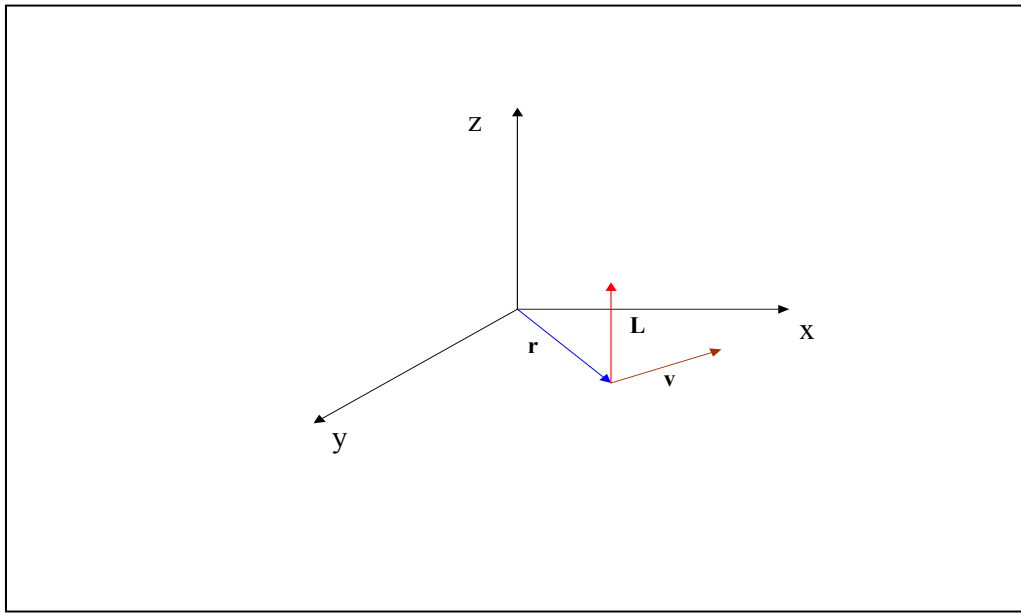


Figure 5: Zum Drehimpuls

Der Vektor  $\mathbf{L}$  ist also ein Vektor, der senkrecht auf der durch  $\mathbf{r}$  und  $\mathbf{p}$  aufgespannten Ebene steht. Die zeitliche Ableitung des Drehimpulses bezeichnet man als **Drehmoment**  $\mathbf{M}$ :

$$\frac{d}{dt}\mathbf{L} = \frac{d}{dt}\mathbf{r} \times \mathbf{p} = \mathbf{r}' \times m\mathbf{r}' + \mathbf{r} \times m\mathbf{r}'' = \mathbf{r} \times \mathbf{F} = \mathbf{M} \quad (25)$$

da  $\mathbf{r}' \times m\mathbf{r}' = 0$ . Diese Gleichung drückt den **Drehimpulssatz** aus:

*Die zeitliche Änderung des Drehimpulses entspricht dem Drehmoment.*

Ist das Drehmoment identisch gleich Null, so wird aus diesem Satz der Drehimpulserhaltungssatz:

$$\mathbf{M} = \mathbf{0} \iff \frac{d}{dt}\mathbf{L} = \mathbf{0} \implies \mathbf{L} = \mathbf{0} \quad (26)$$

Es gibt zwei Möglichkeiten für  $\mathbf{M} = \mathbf{0}$ :

1.  $\mathbf{F} = 0$  (trivialer Fall)
2.  $\mathbf{F} \uparrow \uparrow \mathbf{r}$  (Zentralfeld)

<sup>11</sup>Ursprung eines frei gewählten Koordinatensystems.

Beide Fälle werden in der Mechanik ausgiebig diskutiert und sollten bekannt sein. Insbesondere ist an den in der Mechanik angewendeten Formel keinerlei Diskretisierung zu erkennen, der Drehimpuls bzgl. eines Koordinatensystems kann jeden beliebigen Wert annehmen. Dies wird in der Quantenphysik nicht mehr so sein, wie wir uns nun verdeutlichen werden.

**3.2. Der Drehimpuls in der Quantenmechanik.** Wir betrachten nun noch einmal den klassischen Drehimpuls in seiner Komponentendarstellung:

$$\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p} = \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} p_x \\ p_y \\ p_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} yp_z - zp_y \\ zp_x - xp_z \\ xp_y - yp_x \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} L_x \\ L_y \\ L_z \end{pmatrix} \quad (28)$$

In der Quantenmechanik gilt nun als Übersetzungsschlüssel klassischer Beziehungen in quantenmechanische Ausdrücke das **Korrespondenzprinzip**<sup>12</sup>:

*Jeder physikalischen Messgröße (genannt "Observable")  $F$  (z.B. Ort, Impuls, Drehimpuls, Energie etc.) , die in der klassischen Mechanik durch  $F(\vec{r}, \vec{p})$  beschrieben wird, entspricht in der Quantenmechanik ein Operator  $\hat{F}$ , den man erhält, wenn man in  $F(\vec{r}, \vec{p})$   $\vec{r}$  und  $\vec{p}$  ersetzt durch*

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{r}} &= \begin{pmatrix} \hat{x} \\ \hat{y} \\ \hat{z} \end{pmatrix} = \mathbf{r} = \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} \\ \hat{\mathbf{p}} &= \begin{pmatrix} \hat{p}_x \\ \hat{p}_y \\ \hat{p}_z \end{pmatrix} = -i\hbar \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial x} \\ \frac{\partial}{\partial y} \\ \frac{\partial}{\partial z} \end{pmatrix} = -i\hbar \nabla \end{aligned} \quad (29)$$

**Bemerkung:**

Dieses Korrespondenzprinzip kann nicht logisch begründet werden, es hat axiomatischen Charakter. Der Sinn dieses Korrespondenzprinzips ergibt sich aus seinem Erfolg. Seine Anwendung führt in der Praxis zu Ergebnissen, die mit dem Experiment in frappierender Weise übereinstimmen, wie wir auch in der Behandlung des H-Atoms noch sehen werden.

Anzumerken bleibt noch, dass diese Ersetzungsregel nur für kartesische Koordinaten gilt. Nur Funktionen, die von den kartesischen Koordinaten für den Ort und den Impuls abhängen, können in dieser Weise in quantenmechanische Operatoren überführt werden.

Wenden wir dieses Korrespondenzprinzip nun auf den klassischen Drehimpuls an, so erhalten wir den **Drehimpulsoperator**:

$$\mathbf{L} = \begin{pmatrix} yp_z - zp_y \\ zp_x - xp_z \\ xp_y - yp_x \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} L_x \\ L_y \\ L_z \end{pmatrix} \Rightarrow \hat{\mathbf{L}} = \begin{pmatrix} \hat{L}_x \\ \hat{L}_y \\ \hat{L}_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} y \left( -i\hbar \frac{\partial}{\partial z} \right) - z \left( -i\hbar \frac{\partial}{\partial y} \right) \\ z \left( -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) - x \left( -i\hbar \frac{\partial}{\partial z} \right) \\ x \left( -i\hbar \frac{\partial}{\partial y} \right) - y \left( -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) \end{pmatrix} \quad (30)$$

Analog findet man auch den Operator:

$$|\mathbf{L}|^2 = L_x^2 + L_y^2 + L_z^2 \Rightarrow \hat{L}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2 \quad (31)$$

<sup>12</sup>Siehe auch Skript 3 zur *Quantenmechanik*.

Dieser Operator wie auch der Operator  $\hat{L}_z$  spielen bei der Behandlung des H-Atoms noch eine wichtige Rolle! Beide haben in Kugelkoordinaten eine Darstellung, die wir nicht herleiten wollen<sup>13</sup>, die aber im folgenden von Bedeutung sind:

$$\begin{aligned}\hat{L}^2 &= -\hbar^2 \left( \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right) \\ \hat{L}_z &= -i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi}\end{aligned}\quad (32)$$

Entscheidend ist nämlich, dass wir den Ausdruck für  $\hat{L}^2$  schon einmal gesehen haben, betrachte Gleichung (23):

$$\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} Y_{lm}(\theta, \phi) \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} Y_{lm}(\theta, \phi) = -l(l+1) Y_{lm}(\theta, \phi)$$

Multiplizieren wir sie mit  $-\hbar^2$ , so erhalten wir:

$$\hat{L}^2 Y_{lm}(\theta, \phi) = \hbar^2 \cdot l \cdot (l+1) \cdot Y_{lm}(\theta, \phi) \quad (33)$$

also eine Eigenwertgleichung für den Operator des Drehimpulsquadrats. Quantenmechanisch interpretiert bedeutet dies, wenn die Betragsquadrate der Kugelfunktionen die Wahrscheinlichkeitsdichte beschreiben, mit der ein Teilchen auf einer Geraden, beschrieben durch  $\theta$  und  $\phi$ , nachgewiesen werden kann, so besitzen diese Teilchen nur diskrete Werte für ihr Drehimpulsbetragsquadrat!

Betrachte dazu die folgende Darstellung der Geraden, die durch die beiden Winkel beschrieben wird:

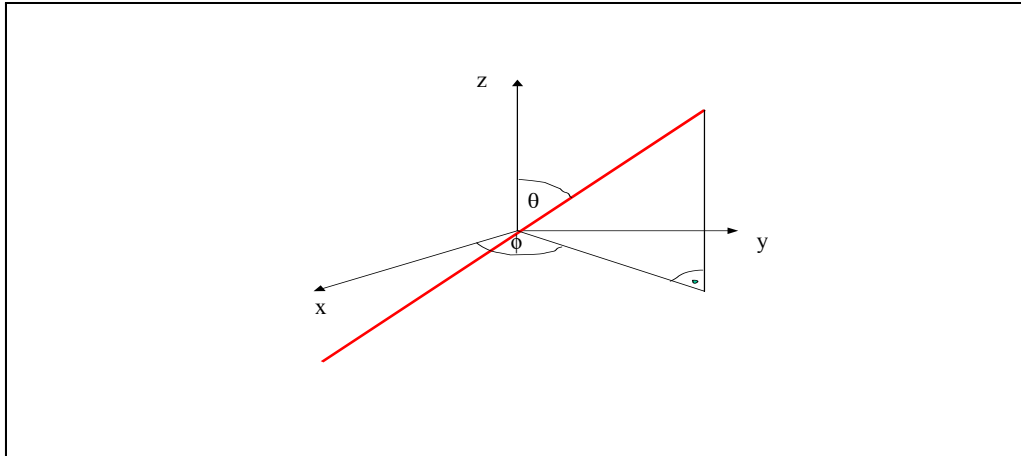


Figure 6: Zur Darstellung einer Geraden

<sup>13</sup>Die Berechnung ist nicht weiter schwierig, man findet sie z.B. in Fließbach: Quantenmechanik, B.I. Verlag 1991.

Eine ähnliche Eigenwertgleichung lässt sich auch für den Operator  $\hat{L}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi}$  finden, denn es gilt:

$$\hat{L}_z Y_{lm}(\theta, \phi) = m \cdot \hbar \cdot Y_{lm}(\theta, \phi) \quad (34)$$

Mit anderen Worten, das Teilchen, dass sich auf der Geraden befindet besitzt dann bzgl. des Mittelpunkts des Koordinatensystems (und der damit festgelegten z-Achse) nur diskrete Werte für die z-Komponente seines Drehimpulses bzgl. dieses Mittelpunkts.