

V.3.4 Ortsdarstellung des Bahndrehimpulses

Das Ergebnis (V.58) gilt natürlich auch im Fall des in Gl. (V.37) eingeführten Bahndrehimpulsoperators $\vec{\hat{L}} = \{\hat{L}_x, \hat{L}_y, \hat{L}_z\}$, wobei die Quantenzahl j traditionell eher mit ℓ bezeichnet wird. Für die letztere kann man zeigen, dass ℓ notwendig ganzzahlig sein muss:

$$\hat{\vec{L}}^2 |\ell, m\rangle = \ell(\ell+1)\hbar^2 |\ell, m\rangle \quad \text{mit } \ell \in \mathbb{N} \quad (\text{V.59a})$$

$$\hat{L}_z |\ell, m\rangle = m\hbar |\ell, m\rangle \quad \text{mit } m \in \{-\ell, -\ell+1, \dots, \ell-1, \ell\}. \quad (\text{V.59b})$$

ℓ wird *Bahndrehimpulsquantenzahl* genannt und m (manchmal m_ℓ , um Verwechslung mit der Masse zu vermeiden) *magnetische Quantenzahl*.

In diesem Abschnitt werden die Ortsdarstellungen der Bahndrehimpulsoperatoren \hat{L}_j angegeben und die zugehörigen Eigenfunktionen untersucht.

V.3.4 a Ortsdarstellung der Bahndrehimpulsoperatoren $\hat{L}_x, \hat{L}_y, \hat{L}_z$

In praktischen Anwendungen werden die mit dem Bahndrehimpuls assoziierten Quantenzahlen nützlich sein, um die Energie-Eigenzustände zu kennzeichnen, wenn der Hamilton-Operator \hat{H} des physikalischen Systems mit $\hat{\vec{L}}^2$ kommutiert, d.h. wenn das System Kugelsymmetrie hat. Dementsprechend ist es sinnvoll, mit Kugelkoordinaten (r, θ, φ) zu arbeiten. Dann lautet der Ortsvektor

$$\vec{r} = r \sin \theta \cos \varphi \vec{e}_x + r \sin \theta \sin \varphi \vec{e}_y + r \cos \theta \vec{e}_z = r \vec{e}_r, \quad (\text{V.60a})$$

woraus sich der Ausdruck des Gradienten wiederfinden lässt:

$$\vec{\nabla} = \vec{e}_r \frac{\partial}{\partial r} + \vec{e}_\theta \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} + \vec{e}_\varphi \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi}, \quad (\text{V.60b})$$

wobei die orthonormierten Basisvektoren $\{\vec{e}_r, \vec{e}_\theta, \vec{e}_\varphi\}$ durch

$$\begin{cases} \vec{e}_r = \sin \theta \cos \varphi \vec{e}_x + \sin \theta \sin \varphi \vec{e}_y + \cos \theta \vec{e}_z \\ \vec{e}_\theta = \cos \theta \cos \varphi \vec{e}_x + \cos \theta \sin \varphi \vec{e}_y - \sin \theta \vec{e}_z \\ \vec{e}_\varphi = -\sin \varphi \vec{e}_x + \cos \varphi \vec{e}_y \end{cases} \quad (\text{V.60c})$$

gegeben sind.

Ausgehend von \vec{r} und $\vec{\nabla}$ berechnet man die kartesischen Komponenten der Ortsdarstellung $\vec{r} \times (-i\hbar \vec{\nabla})$ des Bahndrehimpulsoperators:

$$\hat{L}_x \rightsquigarrow -i\hbar \left(-\sin \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} - \cos \varphi \cot \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \quad (\text{V.61a})$$

$$\hat{L}_y \rightsquigarrow -i\hbar \left(\cos \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} - \sin \varphi \cot \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \quad (\text{V.61b})$$

$$\hat{L}_z \rightsquigarrow -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi}. \quad (\text{V.61c})$$

Dabei kann man merken, dass diese Operatoren nicht mehr von der Radialvariablen r abhängen, sondern nur von den Winkeln θ und φ .

Mit den zwei Komponenten \hat{L}_x, \hat{L}_y berechnet man die Auf- und Absteigeoperatoren

$$\hat{L}_+ \equiv \hat{L}_x + i\hat{L}_y \rightsquigarrow \hbar e^{i\varphi} \left(\frac{\partial}{\partial \theta} + i \cot \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \quad (\text{V.62a})$$

$$\hat{L}_- \equiv \hat{L}_x - i\hat{L}_y \rightsquigarrow \hbar e^{-i\varphi} \left(-\frac{\partial}{\partial \theta} + i \cot \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right). \quad (\text{V.62b})$$

Schließlich folgt aus Gl. (V.54)

$$\hat{\vec{L}}^2 = \hat{L}_- \hat{L}_+ + \hat{L}_z^2 + \hbar \hat{L}_z.$$

Mithilfe dieser Formel und der Ausdrücke (V.61c), (V.62) findet man nach einiger Berechnung

$$\hat{L}^2 \rightsquigarrow -\hbar^2 \left[\frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \cot \theta \frac{\partial}{\partial \theta} + (1 + \cot^2 \theta) \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right].$$

Der Term auf der rechten Seite lässt sich noch in der äquivalenten Form

$$\hat{L}^2 \rightsquigarrow -\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right] \quad (\text{V.63})$$

umschreiben.

Andererseits führt der Ausdruck (V.60b) des Gradienten zum Laplace-Operator in Kugelkoordinaten

$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right]. \quad (\text{V.64})$$

Dabei ist der Term in den eckigen Klammern, d.h. die ganze Winkelabhängigkeit, genau der gleiche wie im Ausdruck (V.63) der Ortsdarstellung des quadrierten Bahndrehimpulsoperators. Daher wird der Winkelanteil des Laplace-Operators eine einfachere Form annehmen, wenn es auf eine Eigenfunktion von \hat{L}^2 wirkt.

V.3.4b Eigenfunktionen der Ortsdarstellungen von \hat{L}^2 und \hat{L}_z

Die gemeinsamen Eigenfunktionen der Operatoren \hat{L}_z und \hat{L}^2 — genauer, von deren Ortsdarstellungen (V.61c) und (V.63) — mit den jeweiligen Eigenwerten $m\hbar$ und $\ell(\ell+1)\hbar^2$ sind definitionsgemäß die *Kugelflächenfunktionen* $Y_{\ell,m}(\theta, \varphi)$: entsprechend den Beziehungen (V.59) gelten

$$-\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right] Y_{\ell,m}(\theta, \varphi) = \ell(\ell+1)\hbar^2 Y_{\ell,m}(\theta, \varphi) \quad (\text{V.65a})$$

$$-i\hbar \frac{\partial Y_{\ell,m}(\theta, \varphi)}{\partial \varphi} = m\hbar Y_{\ell,m}(\theta, \varphi). \quad (\text{V.65b})$$

Die letztere Gleichung kann sofort in der Form

$$\frac{\partial Y_{\ell,m}(\theta, \varphi)}{\partial \varphi} = im Y_{\ell,m}(\theta, \varphi) \quad (\text{V.66})$$

umgeschrieben werden. Daraus folgt $Y_{\ell,m}(\theta, \varphi) = e^{im\varphi} F_{\ell,m}(\theta)$, wobei die Funktion $F_{\ell,m}$ wiederum durch Gl. (V.65a) bestimmt ist.

Einige Eigenschaften der Kugelflächenfunktionen, einschließlich einer Tabelle der einfachsten, werden im Anhang B.2 dargelegt. Hiernach werden diese Eigenschaften im Rahmen des quantenmechanischen Problems formuliert.

Die $\{Y_{\ell,m}\}$ bilden eine orthonormierte Basis der quadratintegriblen Funktionen von θ und φ . Hier lässt sich dieses Ergebnis dadurch „erklären“, dass die entsprechenden Zustände $\{|\ell, m\rangle\}$ eine orthonormierte Basis des Hilbert-Raums sind.

Bei gegebener Bahndrehimpulsquantenzahl ℓ genügt der Eigenzustand mit maximaler magnetischer Quantenzahl $m = \ell$ der Bedingung $\hat{L}_+ |\ell, \ell\rangle = |\emptyset\rangle$, vgl. Gl. (V.57). Mit der Ortsdarstellung (V.62a) des Aufsteigeoperators lautet dies

$$\hat{L}_+ |\ell, \ell\rangle = |\emptyset\rangle \rightsquigarrow \hbar e^{i\varphi} \left(\frac{\partial}{\partial \theta} + i \cot \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) Y_{\ell,\ell}(\theta, \varphi) = 0.$$

Dabei kann man durch $\hbar e^{i\varphi}$ dividieren und die Ableitung nach φ mithilfe der Gl. (V.66) transformieren. Somit ergibt sich die gewöhnliche Differentialgleichung

$$\frac{\partial Y_{\ell,\ell}(\theta, \varphi)}{\partial \theta} - \ell \cot \theta Y_{\ell,\ell}(\theta, \varphi) = 0, \quad (\text{V.67})$$

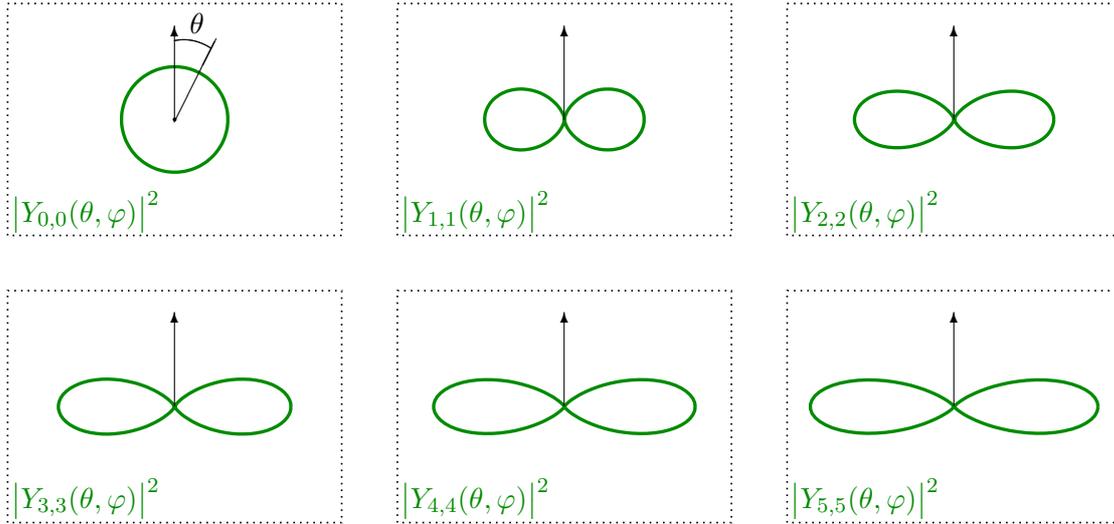


Abbildung V.1 – Darstellung von $|Y_{\ell,\ell}(\theta, \varphi)|^2$ in Abhängigkeit des von der Vertikalen gemessenen Polarwinkels θ für $\ell \in \{0, \dots, 5\}$. Alle sechs Plots sind auf derselben Skala.

deren Lösung $Y_{\ell,\ell}(\theta, \varphi) \propto (\sin \theta)^\ell$ ist. Genauer gilt

$$Y_{\ell,\ell}(\theta, \varphi) = C_{\ell,\ell} (\sin \theta)^\ell e^{i\ell\varphi}, \quad (\text{V.68})$$

weil die φ -Abhängigkeit durch Gl. (V.66) eindeutig ist, wobei $C_{\ell,\ell}$ eine Normierungskonstante ist.

Wenn $Y_{\ell,\ell}$ bekannt ist, lassen sich die Zustände mit kleinerer magnetischer Quantenzahl m über die Beziehung (V.56b) bestimmen, deren Ortsdarstellung genau der Gl. (B.4) entspricht:

$$\begin{aligned} Y_{\ell,m-1}(\theta, \varphi) &= \frac{e^{-i\varphi}}{\sqrt{\ell(\ell+1) - m(m-1)}} \left(-\frac{\partial}{\partial \theta} + i \cot \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) Y_{\ell,m}(\theta, \varphi) \\ &= \frac{-e^{-i\varphi}}{\sqrt{\ell(\ell+1) - m(m-1)}} \left[\frac{\partial Y_{\ell,m}(\theta, \varphi)}{\partial \theta} + m Y_{\ell,m}(\theta, \varphi) \cot \theta \right] \quad \text{für } m \in \{-\ell+1, \dots, \ell\}. \end{aligned}$$

Da die Abhängigkeit der Kugelflächenfunktion $Y_{\ell,m}(\theta, \varphi)$ von dem Azimutwinkel φ die Form eines einfachen Phasenfaktors $e^{im\varphi}$ annimmt, wird der Betrag $|Y_{\ell,m}(\theta, \varphi)|$ unabhängig von φ sein. In Abb. V.1 und V.2 wird das Betragsquadrat $|Y_{\ell,m}(\theta, \varphi)|^2$ für unterschiedliche Werte von ℓ und m gezeigt. Für eine Wellenfunktion der Form $\psi(\vec{r}) = R(r)Y_{\ell,m}(\theta, \varphi)$ — wie bei stationären Zuständen in Problemen mit Kugelsymmetrie, vgl. Kap. VI — bestimmt $|Y_{\ell,m}(\theta, \varphi)|^2$ nämlich die (Azimut-) Winkelabhängigkeit der Aufenthaltswahrscheinlichkeit $|\psi(\vec{r})|^2$.

In Abb. V.1 werden die Betragsquadrate der Kugelflächenfunktionen mit maximaler magnetischer Quantenzahl, $|Y_{\ell,\ell}(\theta, \varphi)|^2$, für Bahndrehimpulsquantenzahlen $\ell \in \{0, \dots, 5\}$ in Abhängigkeit von θ aufgetragen. Mit wachsender ℓ und daher m , d.h. klassisch mit zunehmender Drehimpuls um die z -Achse, streckt sich $|Y_{\ell,\ell}(\theta, \varphi)|^2$ immer weiter entlang der Richtung $\theta = \frac{\pi}{2}$, d.h. in der (x, y) -Ebene, wie in Anwesenheit einer „Zentrifugalkraft“ weg von der z -Achse. Dabei muss man aber vorsichtig beim Interpretieren sein: aufgetragen ist nicht irgendeiner Abstand von der z -Achse, sondern eine Wahrscheinlichkeitsdichte. Mit zunehmender ℓ wird der Wert $\theta = \frac{\pi}{2}$ immer wahrscheinlicher, und die Wahrscheinlichkeitsdichte konzentriert sich immer näher an diesem Wert — wie auch am Ausdruck (V.68) von $Y_{\ell,\ell}$ erkennbar ist.

Wiederum zeigt Abb. V.2 die Betragsquadrate $|Y_{3,m}(\theta, \varphi)|^2$ für $m \in \{0, \pm 1, \pm 2, \pm 3\}$. Als $|m|$ zunimmt, d.h. mit wachsender Drehimpulskomponente entlang der z -Achse, entfernt sich die Wahrscheinlichkeitsdichte vom Wert $\theta = 0$, um sich entlang der Richtung $\theta = \frac{\pi}{2}$ zu konzentrieren.

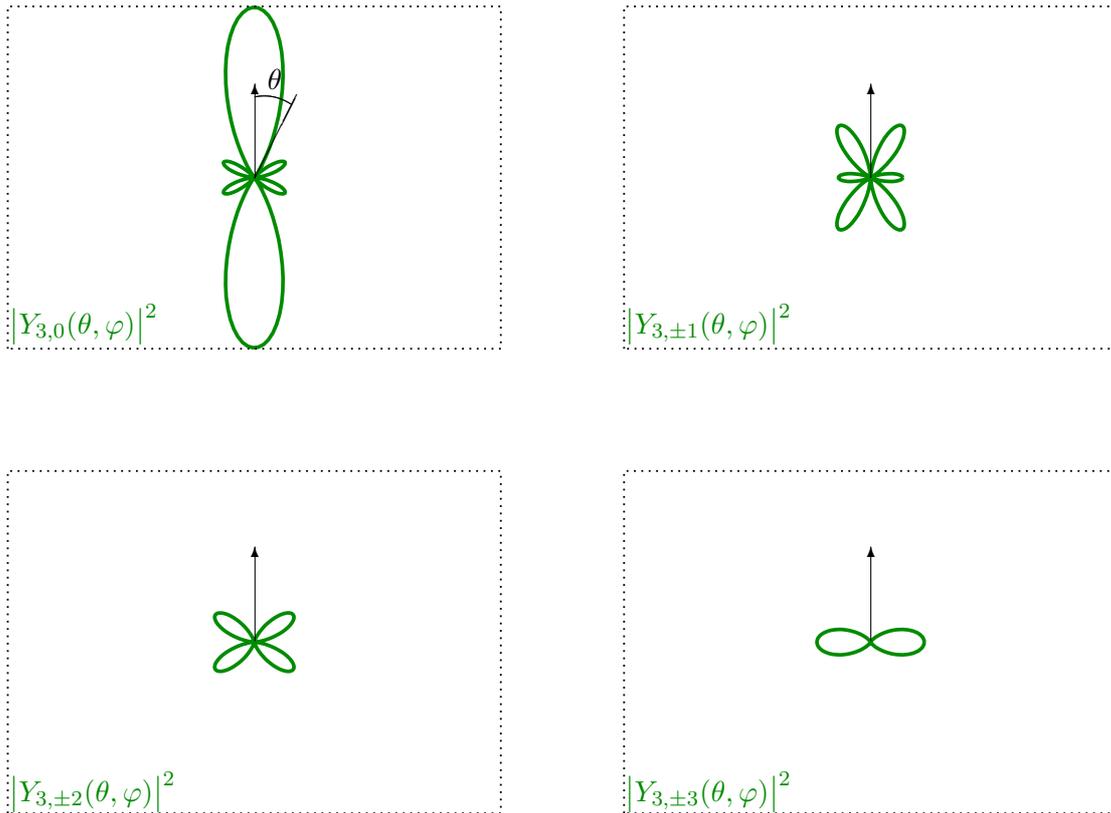


Abbildung V.2 – Darstellung von $|Y_{3,\pm m}(\theta, \varphi)|^2$ in Abhängigkeit des von der Vertikalen gemessenen Polarwinkels θ für $m \in \{0, \dots, 3\}$. Alle vier Plots sind auf derselben Skala, die unterschiedlich von jener der Abb. V.1 ist.

Bemerkung: Neben den Effekten, die schon in $|Y_{\ell,m}(\theta, \varphi)|^2$ auftreten, soll man noch berücksichtigen, dass Integrale über θ mit dem Integrationsmaß $\sin \theta \, d\theta$ durchzuführen sind, was zu einer zusätzlichen Verstärkung des Gewichts des Bereichs in der Nähe von $\theta = \frac{\pi}{2}$ führt.