

3.3 Mehrdimensionale Probleme

Nachdem im vorherigen Abschnitt eindimensionale Systeme behandelt wurden, sollen im folgenden 2 mehrdimensionale Systeme betrachtet werden. Dafür muss nur die dreidimensionale Schrödingergleichung

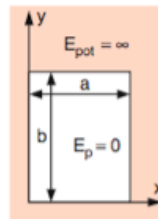
$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi(\vec{x}) + V(x)\psi(\vec{x}) = E\psi(\vec{x}) \quad \text{mit } \Delta\psi(\vec{x}) = \frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial z^2} \quad (56)$$

gelöst werden.

3.3.1 Der 2-dimensionale Potentialtopf

- Es sei das Potential

$$V(x, y) = \begin{cases} 0 & \text{für } \begin{cases} 0 \leq x \leq a \\ 0 \leq y \leq b \end{cases} \\ \infty & \text{sonst} \end{cases}$$



gegeben.

- Für die Lösungsfunktion $\psi(x, y)$ ist wegen der Linearität und Homogenität der Schrödingergleichung (56) ein Produktansatz

$$\psi(x, y) = f(x) \cdot g(y) \quad (57)$$

gerechtfertigt. Einsetzen in (56) ergibt (mit $\partial^2\psi/\partial z^2 \equiv 0$) unter Beachtung der Randbedingungen analog zum eindimensionalen Potentialtopf

$$f(x) = A \cdot \sin\left(\frac{n_x \pi \cdot x}{a}\right),$$

$$g(y) = B \cdot \sin\left(\frac{n_y \pi \cdot y}{b}\right)$$

mit n_x und $n_y \in \mathbb{N}$ sodass die gesuchte Funktion (57) zu

$$\psi(x, y) = C \cdot \sin\left(\frac{n_x \pi \cdot x}{a}\right) \cdot \sin\left(\frac{n_y \pi \cdot y}{b}\right) \quad \text{mit } C = A \cdot B \quad (58)$$

bestimmt ist. Durch die Normierungsbedingung (12)

$$\int_{x=0}^a \int_{y=0}^b |\psi(x, y)|^2 dx dy = 1$$

ergibt sich dabei die Konstante $C = 2/\sqrt{a \cdot b}$.

- Durch Einsetzen der Lösung der Wellengleichung (58) in Gleichung (56) erhält man die Energiewerte des Systems

$$E_{n_x n_y} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m} \left(\frac{n_x^2}{a^2} + \frac{n_y^2}{b^2} \right) = E_a n_x^2 + E_b n_y^2 \quad (59)$$

mit den Konstanten $E_a = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2}$ und $E_b = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mb^2}$ die von den Systemparametern abhängen. Die Energiewerte $E_{n_x n_y}$ hängen quadratisch von den Quantenzahlen n_x und $n_y \in \{1, 2, 3, \dots\}$ ab.

- Für einen bestimmten Energiewert $E_{n_x n_y}$ des Teilchens im Kastenpotential sind die Werte für die Quantenzahlen n_x und n_y nicht eindeutig bestimmt. So haben bei einem quadratischen Kastenpotential ($a = b$) nach (59) der Zustand $n_x = 7$ und $n_y = 1$ die Energie $E = 50 \cdot E_{a=b}$, genauso wie der Zustand $n_x \equiv n_y \equiv 5$. Dieser Umstand wird im Allgemeinen als **Entartung** bezeichnet: Wenn n verschiedene Konfigurationen des Systems zur selben Energie führt sagt man, die Energieeigenwerte des Systems sind n -fach *entartet*.

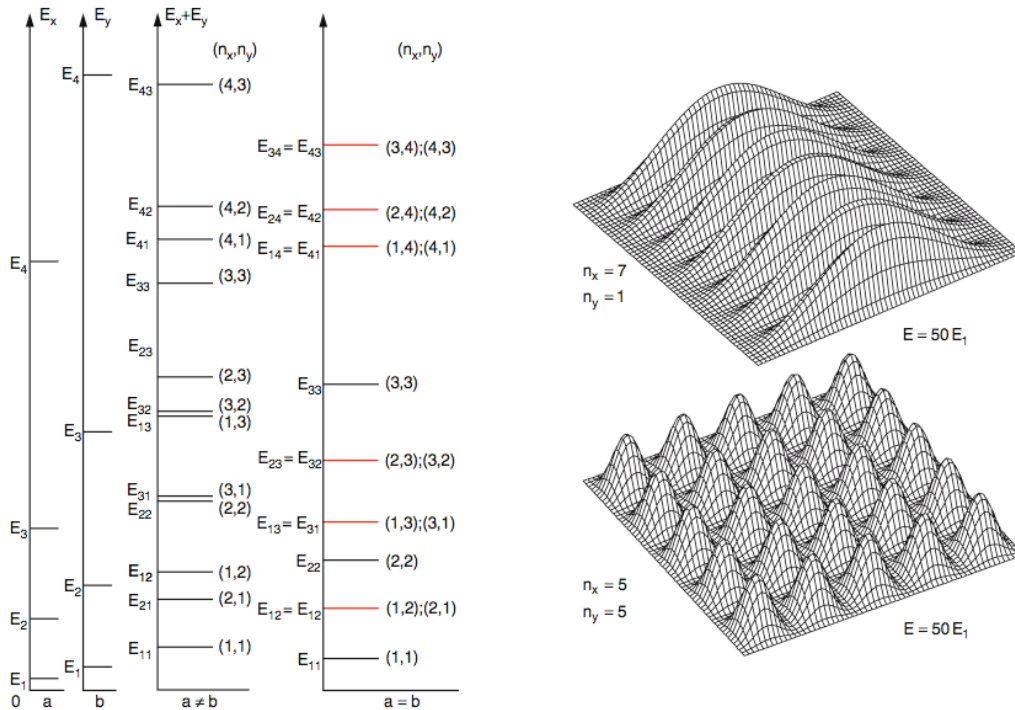


Abbildung 8: **links:** Energieschema für einen quadratischen ($a \neq b$) und einen rechteckigen ($a = b$), 2-dimensionalen Potentialkasten. Während im quadratischen Potentialkasten entartete Energieeigenwerte (rot) auftreten, kommen diese im rechteckigen Potentialtopf nicht vor. **rechts:** Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte $\rho(x, y) = |\psi(x, y)|^2$ für die oben erwähnten entarteten Zustände zur Energie $E = 50 \cdot E_{a=b}$ im quadratischen Potentialtopf.

3.3.2 Das Teilchen im kugelsymmetrischen Potentialtopf

- Gegeben sei ein kugelsymmetrisches Potential $V(r) = f(r)$, d.h. ein Potential was nur vom Abstand $r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$ abhängt. Daher macht es Sinn die zum System gehörende Schrödingergleichung in Kugelkoordinaten auszudrücken für die die Umrechnungsformeln

$$x = r \sin \vartheta \cos \varphi$$

$$y = r \sin \vartheta \sin \varphi$$

$$z = r \cos \vartheta$$

$$r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$$

$$\vartheta = \arccos \frac{z}{\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}}$$

$$\varphi = \arctan y/x$$

gelten.

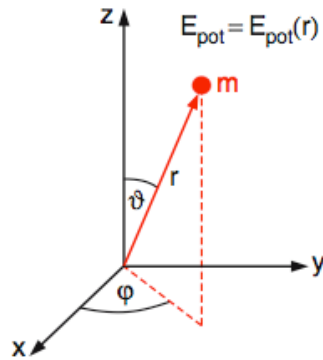


Abbildung 9: Ein quantenmechanisches Teilchen der Masse m in einem kugelsymmetrischen Potential $V(r) = E_{\text{pot}}(r)$

- Der Laplace Operator in Kugelkoordinaten lautet

$$\Delta = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left(\sin \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \quad (60)$$

wodurch sich die zum System gehörende Schrödingergleichung (2) direkt in Kugelkoordinaten

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left(\sin \vartheta \frac{\partial \psi}{\partial \vartheta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \varphi^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V(r)) \psi = 0 \quad (61)$$

angegeben werden kann.

- Wieder wird ein Produktansatz, diesmal jedoch in Kugelkoordinaten

$$\psi(r, \vartheta, \varphi) = R(r) \cdot \theta(\vartheta) \cdot \phi(\varphi) \quad (62)$$

zur Bestimmung der Wellenfunktion gewählt.

Einsetzen in die Schrödingergleichung (61) führt auf:

$$\frac{\sin^2 \vartheta}{R} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \frac{\sin \vartheta}{\theta} \frac{d}{d\vartheta} \left(\sin \vartheta \frac{d\theta}{d\vartheta} \right) + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V(r)) r^2 \sin^2 \vartheta = -\frac{1}{\phi} \frac{d^2 \phi}{d\varphi^2} \quad (63)$$

Diese partielle Differentialgleichung muss nun für die Funktionen $R(r)$, $\theta(\vartheta)$ und $\phi(\varphi)$ gelöst werden.

- Zunächst fällt auf, dass in Gleichung (63) nur die rechte Seite von φ abhängt. Der Theorie der partiellen Differentialgleichungen folgend müssen daher beide Seiten konstant ($= C_1$) sein, sodass wegen

$$\frac{d^2}{d\varphi^2} \phi(\varphi) = -C_1 \cdot \phi(\varphi) \quad (64)$$

für die Funktion $\phi(\varphi)$ der Ansatz

$$\phi(\varphi) = A \cdot e^{\pm \sqrt{C_1} \varphi} \quad (65)$$

gerechtfertigt ist. Die Bedingung, dass $\phi(\varphi)$ periodisch auf 2π sein soll (sodass zu jedem Wert φ exakt ein Wert $\phi(\varphi)$ existiert) muss als Einschränkung an (65) beachtet werden und führt für die Konstante C_1 auf

$$\sqrt{C_1} = m \quad \text{mit } m \in \{\dots, -2, -1, 0, +1, +2, \dots\} \quad (66)$$

Damit ergibt sich für die Funktion (65)

$$\phi_m(\varphi) = A \cdot e^{im\varphi} \quad \text{mit } A = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \quad (67)$$

wobei der Faktor A mit Hilfe der Normierungsbedingung (12) gefunden wurde. Die Zahl m wird später als magnetische Quantenzahl bezeichnet werden.

- Nun wird die linke Seite von (63) betrachtet die ja auch gleich der Konstanten $C_1 = m^2$ sein muss. Durch umsordieren nach Termen von r und ϑ (wobei die rechte Seite durch m^2 ersetzt wurde) erhält man

$$\frac{1}{R} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \frac{2\tilde{m}}{\hbar^2} r^2 (E - V(r)) = -\frac{1}{\theta \sin \vartheta} \frac{d}{d\vartheta} \left(\sin \vartheta \frac{d\theta}{d\vartheta} \right) + \frac{m^2}{\sin^2 \vartheta} \equiv C_2 \quad (68)$$

(hier ist die Masse des Teilchens als \tilde{m} bezeichnet um Verwechslungen mit der oben eingeführten magnetischen Quantenzahl m zu vermeiden) Da nun die linke Seite nur von r und die rechte Seite nur von ϑ abhängt müssen beide Seiten wieder konstant ($= C_2$) sein.

- Der Teil der Gleichung (68) für $\theta(\vartheta)$

$$\frac{1}{\theta \sin \vartheta} \frac{d}{d\vartheta} \left(\sin \vartheta \frac{d\theta}{d\vartheta} \right) + \frac{m^2}{\sin^2 \vartheta} = C_2 \quad (69)$$

führt durch die Substitution $\xi = \cos \vartheta$ auf die **Legendre Differentialgleichung** deren Lösung vom Wert $C_1 = m$ und einer weiteren natürlichen Zahl l abhängen, welche mit der Konstanten C_2 über $C_2 = l(l+1)$ zusammenhängt. So kann die Lösungsfunktion $\theta(\xi)$ als **assoziertes Legendrepolynom**

$$\theta_l^m(\xi) = P_l^m(\cos \vartheta) = \text{const} \cdot (1 - \xi^2)^{|m|/2} \frac{d^{|m|}}{d\xi^{|m|}} (P_l(\xi)) \quad (70)$$

angegeben werden. Die Funktion $P_l(\xi)$ ist dabei l -te Legendrepolynom

$$P_l(\xi) = \frac{1}{2^l l!} \frac{d^l}{d\xi^l} (\xi^2 - 1)^l \quad (71)$$

Die Konstante in (70) muss dabei mittels Normierungsbedingung (12) bestimmt werden.

- Da die Werte der Quantenzahl l und der Quantenzahl m über die Gleichung (70) miteinander verknüpft sind und $\theta(\vartheta)$ prinzipiell periodisch über π sein muss, können deren Werte nicht beliebig gewählt werden. Es zeigt sich, dass Werte für m und l der Bedingung

$$-l \leq m \leq +l \quad (72)$$

genügen müssen. Die Zahl l wird später als Drehimpulsquantenzahl bezeichnet werden.

- Die noch nicht bestimmte Radialfunktion $R(r)$ in (62) wird aus der linken Seite von (68) durch einsetzen von $C_2 = l \cdot (l + 1)$ über die Differentialgleichung

$$\frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \left[\frac{2\tilde{m}}{\hbar^2} r^2 (E - V(r)) - l \cdot (l + 1) \right] R(r) = 0 \quad (73)$$

gewonnen. Diese Differentialgleichung besitzt eine Lösung $R_l(r)$ die von der Quantenzahl l , vom tatsächlichen Verlauf des kugelsymmetrischen Potentials $V(r)$ und der Energie des Systems E abhängt. Bei der Behandlung des Wasserstoffatoms werden die möglichen Energien für ein Teilchen im kugelsymmetrische Potential näher behandelt.

- Somit sind die einzelnen Funktionen für den Produktansatz (62) bestimmt. Üblicherweise fasst man die winkelabhängigen Funktionen $\phi_m(\varphi)$ und $\theta_l^m(\vartheta)$ zusammen zur bekannten Kugelflächenfunktion

$$Y_l^m(\vartheta, \varphi) = P_l^m(\cos \vartheta) \cdot \phi_m(\varphi) \quad (74)$$

sodass die Lösung (62) des kugelsymmetrischen Potentialtopfes zu

$$\psi(r, \vartheta, \varphi) = A \cdot R_l(r) \cdot Y_l^m(\vartheta, \varphi) \quad (75)$$

angegeben werden. Dabei müssen die Parameter m und l den oben erwähnten Bedingungen genügen und der Faktor A über die Normierungsbedingung (12) bestimmt werden.

- Zu jeder vorgegebener Quantenzahl l (und damit zu jeder mit ihr assoziierten Energie) existieren nach (72) insgesamt $(2l + 1)$ verschiedene Kugelflächenfunktionen Y_l^m , d.h. der Zustand zur Quantenzahl l ist $(2l + 1)$ -fach entartet. Dies wird bei der Diskussion des Wasserstoffatoms nochmal näher erläutert werden.

l	m	Y_l^m
0	0	$\frac{1}{2\sqrt{\pi}}$
1	± 1	$\mp \frac{1}{2} \sqrt{\frac{3}{2\pi}} \sin \vartheta e^{\pm i\varphi}$
	0	$\frac{1}{2} \sqrt{\frac{3}{\pi}} \cos \vartheta$
2	± 2	$\frac{1}{4} \sqrt{\frac{15}{2\pi}} \sin^2 \vartheta e^{\pm 2i\varphi}$
	± 1	$\mp \frac{1}{2} \sqrt{\frac{15}{2\pi}} \cos \vartheta \sin \vartheta e^{\pm i\varphi}$
	0	$\frac{1}{4} \sqrt{\frac{5}{\pi}} (3 \cos^2 \vartheta - 1)$
3	± 3	$\mp \frac{1}{8} \sqrt{\frac{35}{\pi}} \sin^3 \vartheta e^{\pm 3i\varphi}$
	± 2	$\frac{1}{4} \sqrt{\frac{105}{2\pi}} \cos \vartheta \sin^2 \vartheta e^{\pm 2i\varphi}$
	± 1	$\mp \frac{1}{8} \sqrt{\frac{21}{\pi}} \sin \vartheta (5 \cos^2 \vartheta - 1) e^{\pm i\varphi}$
	0	$\frac{1}{4} \sqrt{\frac{7}{\pi}} (5 \cos^3 \vartheta - 3 \cos \vartheta)$

Abbildung 10: Die ersten Kugelflächenfunktionen $Y_l^m(\vartheta, \varphi)$ für verschiedene Wertepaare für m und l . Wie oben erwähnt kann m nur Werte aus dem Intervall $[-l, +l]$ annehmen.

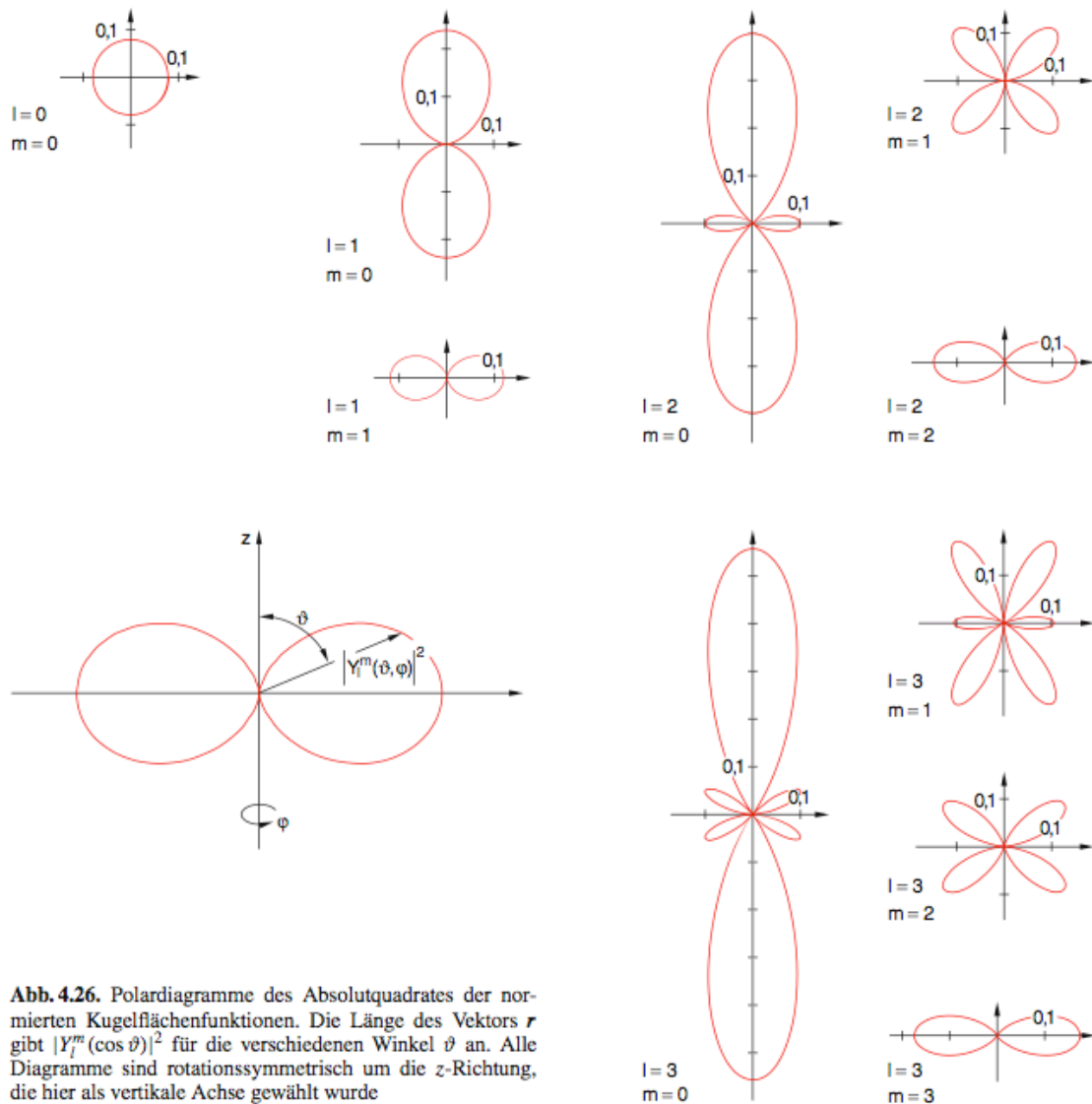


Abb. 4.26. Polardiagramme des Absolutquadrates der normierten Kugelflächenfunktionen. Die Länge des Vektors r gibt $|Y_l^m(\cos \vartheta)|^2$ für die verschiedenen Winkel ϑ an. Alle Diagramme sind rotationssymmetrisch um die z -Richtung, die hier als vertikale Achse gewählt wurde

3.4 Erwartungswerte und Operatoren

Bei der Untersuchung Quantenmechanischer Systeme ist man auf eine statistische Beschreibung der Eigenschaften des Systems angewiesen; sowohl für Ein- als auch Mehrteilchensysteme. Zunächst sollen die folgenden Formeln für statistische Standardgrößen behandelt werden.

- Die mittlere Geschwindigkeit \bar{v} eines quantenmechanischen Systems mit der Geschwindigkeitsverteilung $f(v)$ ist durch

$$\bar{v} = \int_{v=0}^{\infty} v \cdot f(v) dv \quad (76)$$

gegeben. Die funktion $f(v)$ gibt die Wahrscheinlichkeit dafür an ein Teilchen mit einer Geschwindigkeit im Geschwindigkeitsintervall $[v, v + dv]$ anzutreffen. Die Funktion $f(v)$ kann dabei aus der Wellenfunktion $\psi(x)$ mittels Fouriertransformation gefunden werden.

- Die mittlere quadratische Geschwindigkeit \bar{v}^2 ist dementsprechend durch

$$\bar{v}^2 = \langle v^2 \rangle = \int_{v=0}^{\infty} v^2 f(v) dv \quad (77)$$

definiert.

- Die Wahrscheinlichkeit ein Teilchen im Intervall $[x, x + dx]$ anzutreffen ist durch die Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte $\rho(x) = |\psi(x)|^2$ bestimmt. Der Mittelwert $\langle x \rangle$ für viele Messungen des Ortes x eines quantenmechanischen Systems mit der Wellenfunktion $\psi(x)$ ist gegeben durch:

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} x \cdot |\psi(x)|^2 dx \quad (78)$$

und wird als Erwartungswert für den Ort x eines Teilchens bezeichnet.

- An die Stelle einer exakten Ortsangabe in der klassischen Physik treten also Wahrscheinlichkeitsangaben durch Angabe eines Erwartungswertes. Dieser Erwartungswert besagt, dass bei einer Reihe von Messungen des Ortes x eines Teilchens, welches durch die stationäre Wellenfunktion $\psi(x)$ beschrieben wird, so wird man eine Verteilung der Messgröße x um den Mittelwert

$$\langle x \rangle = \int \psi^*(x) x \psi(x) dx \quad (79)$$

erhalten. Diese Verteilung entsteht nicht durch statistische Messfehler, sondern ist Ausdruck für die in der Quantenmechanik charakteristische Unschärfe $\Delta x \geq \hbar/\Delta p_x$.

- Der Erwartungswert für den Radiusvektor $\vec{r} = \vec{r}(x, y, z)$ ist analog gegeben durch

$$\langle r \rangle = \int \psi^*(\vec{r}) \vec{r} \psi(\vec{r}) d\tau = \int_x \int_y \int_z \psi^*(x, y, z) \vec{r}(x, y, z) \psi(x, y, z) dx dy dz \quad (80)$$

gegeben.

- Bewegt sich ein durch die Wellenfunktion $\psi(\vec{r})$ beschriebenes Elektron in einem elektrischen Potential $\phi(r)$, so ist seine mittlere potentielle Energie durch

$$\langle E_{pot} \rangle = -e \cdot \int \psi(\vec{r}) \phi(r) \psi(\vec{r}) d\tau \quad \text{mit dem Volumenelement } d\tau = dx \cdot dy \cdot dz. \quad (81)$$

gegeben.

- Generell gilt: der Erwartungswert für eine physikalische Messgröße eines durch die Wellenfunktion ψ beschriebenen Systems ist der Mittelwert dieser Größe. Dies wird im folgenden Abschnitt noch einmal näher diskutiert.

3.4.1 Eigenwerte und Eigenfunktionen von Operatoren

- Allgemein erhält man den Erwartungswert $\langle A \rangle$ einer physikalischen Messgröße (*Observablen*) A für ein quantenmechanisches System mit der dreidimensionalen Wellenfunktionen $\psi(x, y, z)$ durch Berechnung des Ausdrucks

$$\langle A \rangle = \int \psi^* \hat{A} \psi d\tau \quad (82)$$

wobei \hat{A} der zur physikalischen Größe A zugeordnete *Operator* heißt.

- Dies soll folgendes bedeuten: Sei A eine beobachtbare Messgrösse. Bei mehrfacher Messung von A zeigen die einzelnen Messwerte A_n Schwankungen $\Delta A_n = A_n - \langle A \rangle$ um den Mittelwert

$$\langle A \rangle = \frac{1}{n} \sum A_n \quad (83)$$

die von der Unschärfe ΔA im System herrühren und zu denen noch Schwankungen durch die Ungenauigkeit der Messapparatur hinzukommen können.

- Durch die Definition

$$\langle A \rangle = \int \psi^* \hat{A} \psi d\tau \quad (84)$$

ordnet man der Messgrösse A einen Operator \hat{A} zu. Dieser Operator \hat{A} bewirkt dabei eine bestimmte Operation an der Funktion ψ . So wäre der oben erwähnte Radiusvektor \vec{r} mit Hilfe des Radiusvektoroperators \hat{r} verknüpft, der lediglich für eine Multiplikation von $\psi(x, y, z)$ mit dem Vektor \vec{r} steht.

- Nun soll der sogenannte Impuls-Operator \hat{p} bestimmt werden, der den zu einer gegebenen Wellenfunktion $\psi(x, y, z)$ den Mittelwert des Impulses p liefern soll. Die stationäre Schrödingergleichung (2) kann als Energiesatz $E_{kin} + E_{pot} = E$ aufgefasst werden. Der Mittelwert der kinetischen Energie $E_{kin} = p^2/2m$ ergibt sich dann zu

$$\langle E_{kin} \rangle = -\frac{\hbar^2}{2m} \int \psi^* \Delta \psi d\tau \quad (85)$$

sodass der Operator der kinetischen Energie als

$$\hat{E}_{kin} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \quad (86)$$

angegeben werden kann. Der Operator für den Impuls \vec{p} ist somit

$$\hat{p} = -i\hbar \nabla \quad (87)$$

mit dem Nabla-Operator ∇ .

- Die Wellenfunktion ψ_A welche der Eigenwertsgleichung

$$\hat{A} \psi_A = A \psi_A \quad (88)$$

genügen heißt Eigenfunktion ψ_A zum Operator \hat{A} und Eigenwert A . Der Vergleich mit Gleichung (84) zeigt: Ist ein quantenmechanisches System im Eigenzustand ψ_A liefert die Messung der Grösse \hat{A} den Erwartungswert A .

Befindet sich ein quantenmechanisches System in einem Eigenzustand zur Observablen \hat{A} , so können die Messwerte A *scharf* gemessen werden. Dies äussert sich auch im Verschwinden der mittleren quadratischen Schwankung

$$\langle \Delta A^2 \rangle = \langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2 \quad (89)$$

- Mit Hilfe des sogenannten Kommutators für Operatoren \hat{A} und \hat{B}

$$[\hat{A}, \hat{B}] \psi = \hat{A} \hat{B} \psi - \hat{B} \hat{A} \psi \quad (90)$$

kann entschieden werden ob 2 Observablen \hat{A} und \hat{B} gleichzeitig scharf gemessen werden können. Wird der Ausdruck (90) gleich Null, so heißen die Operatoren \hat{A} und \hat{B} vertauschbar und besitzen gemeinsame Eigenzustände ψ .

Achtung: Da die Operatoren \hat{A} und \hat{B} Teil eines Hilbertraumes sind, gilt nicht zwangsläufig das Kommutativ-Gesetz, sodass (90) wirklich nur für ganz bestimmte Operatoren \hat{A} und \hat{B} verschwindet und somit nur bestimmte Messwerte gleichzeitig scharf messbar sind. Die Operatoren \hat{x} für Ort und \hat{p} für Impuls vertauschen zum Beispiel nicht, und sind daher nicht gleichzeitig scharf messbar (vgl. Heisenbergsche Unschärferelation).

- Die Energie eines stationären Zustands ergibt sich als Eigenwert des Energie- oder Hamilton-Operators der durch

$$\hat{H} = \hat{E}_{kin} + \hat{E}_{pot} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + E_{pot}(r) \quad (91)$$

gegeben ist. Mit seiner Hilfe kann die stationäre Schrödingergleichung (2) einfach als

$$\hat{H} \psi = E \psi \quad (92)$$

geschrieben werden und ist wieder als Eigenwertsgleichung aufzufassen. Ganz allgemein lässt sich jeder meßbaren physikalischen Größe A ein Operator \hat{A} zuordnen.

Physikalische Größe	Operator
Ortsvektor \mathbf{r}	\mathbf{r}
potentielle Energie	$\hat{E}_{pot} = V(\mathbf{r})$
kinetische Energie	$\frac{-\hbar^2}{2m} \Delta$
Gesamtenergie $E = E_{pot} + E_{kin}$	$\hat{H} = \hat{E}_{pot} - \frac{\hbar^2}{2m} \Delta$
Impuls \mathbf{p}	$\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar \nabla$
Drehimpuls \mathbf{L}	$\hat{\mathbf{L}} = -i\hbar (\mathbf{r} \times \nabla)$
z-Komponente des Drehimpulses	$\hat{L}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi}$

Abbildung 11: Operatoren zu verschiedenen Meßgrößen (im Ortsraum)

- Die Darstellungen des Ortsoperators \hat{r} als r und des Impulsoperators \hat{p} als $-i\hbar \nabla$ gelten nur, wenn die Wellenfunktionen Funktionen des Ortes sind. Viele physikalische Probleme (z. B. der Festkörperphysik) lassen sich jedoch einfacher behandeln, wenn man die Wellenfunktion $\psi(r)$ mittels Fouriertransformation vom Ortsraum in den Impulsraum $\phi(p)$ überführt. Der Ortsoperator \hat{r}_p in Impulsdarstellung lautet dann $\hat{r}_p = i\hbar \nabla_p$ und muss auf die Wellenfunktion $\phi(p)$ im Impulsraum angewendet werden. Der Impulsoperator \hat{p} lautet in der Impulsdarstellung einfach $\hat{p} = p$.

3.4.2 Der quantenmechanische Drehimpuls

- Analog zur klassischen Mechanik kann in der Quantenmechanik der Drehimpuls \vec{L} bezogen auf den Nullpunkt $\vec{r} = 0$ eines Teilchens mit Masse m und Geschwindigkeit \vec{v} definiert werden als

$$\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p} = m(\vec{r} \times \vec{v}) \quad (93)$$

Mit der Definition des Impulsoperators $\hat{p} = -i\hbar\nabla$ ergibt sich der Drehimpulsoperator zu

$$\hat{L} = -i\hbar(\vec{r} \times \nabla) \quad (94)$$

Die einzelnen Komponenten von \hat{L} in kartesischen und Kugelkoordinaten ergeben sich zu

$$\begin{aligned} \hat{L}_x &= -i\hbar \left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right) & \hat{L}_x &= i\hbar \left(\sin \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} + \cot \vartheta \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \\ \hat{L}_y &= -i\hbar \left(z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right) & \hat{L}_y &= i\hbar \left(-\cos \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} + \cot \vartheta \sin \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \\ \hat{L}_z &= -i\hbar \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) & \hat{L}_z &= -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi} \end{aligned}$$

- Damit ergibt sich für den Operator des Drehimpulsbetragsquadrats

$$\begin{aligned} \hat{L}^2 &= \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2 \\ &= -\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left(\sin \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right] \end{aligned} \quad (95)$$

Es kann gezeigt werden, dass die vorher erwähnten Kugelflächenfunktionen Y_l^m Eigenfunktionen zum Drehimpulsbetragsquadratsoperator \hat{L}^2 sind.

Durch Anwendung von \hat{L}^2 auf die Wellenfunktion $\psi(r, \vartheta, \varphi) = R(r) \cdot Y_l^m(\vartheta, \varphi)$ an, so folgt mit Gleichung (69) und $C_2 = l(l+1)$

$$\begin{aligned} \hat{L}^2 \psi &= \hat{L}^2 \cdot R(r) \cdot Y_l^m(\vartheta, \varphi) \\ &= R(r) \cdot \hat{L}^2 \cdot Y_l^m(\vartheta, \varphi) \\ &= R(r) \cdot l(l+1)\hbar^2 \cdot Y_l^m(\vartheta, \varphi) \\ &= l(l+1)\hbar^2 \psi \end{aligned} \quad (96)$$

Der Erwartungswert für das Quadrat des Drehimpulses L ist deshalb durch

$$\langle L^2 \rangle = \int \psi^* \hat{L}^2 \psi d\tau = l(l+1)\hbar^2 \quad (97)$$

gegeben. Die ganze Zahl $l \geq 0$ heißt daher *Drehimpulsquantenzahl*. Für den Betrag des Drehimpulses folgt damit

$$\langle |L| \rangle = \sqrt{l(l+1)} \cdot \hbar \quad (98)$$

- Analog dazu ergibt sich für die Eigenwerte der z-Komponente L_z des Drehimpulses mit der Rechnung

$$\begin{aligned} \hat{L}_z \psi &= -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi} (R(r) \cdot \theta(\vartheta) \cdot \phi(\varphi)) \\ &= -i\hbar R(r) \theta(\vartheta) \cdot \frac{\partial}{\partial \varphi} e^{im\varphi} \\ &= m \cdot \hbar \cdot \psi \quad \rightarrow \langle L_z \rangle = m \cdot \hbar \end{aligned} \quad (99)$$

mit der beim kugelsymmetrischen Potentialtopf eingeführten magnetischen Quantenzahl m . Wichtig ist, dass die Eigenwertgleichung nur für die z-Komponente des Drehimpulses gilt.

- Aus historischen Gründen bezeichnet man die Eigenfunktionen ψ mit der Drehimpulsquantenzahl $l = 0, 1, 2, \dots$ als s-,p-,d-Funktionen (Sie entsprechen den s-,p- und d-Orbitalen wie sie später beim Wasserstoffatom besprochen werden)
Die magnetische Quantenzahl m gibt dabei die Orientierung zur z-Achse an und kann wie oben erwähnt nur Werte zwischen $-l$ und $+l$ annehmen. D.h. zu jedem l existieren $(2l + 1)$ Funktionen, die alle Zustände gleicher Energie beschreiben.

l	m	Name	Entartungsgrad
0	0	s	1
1	-1, 0, +1	p	3
2	-2 bis +2	d	5
3	-3 bis +3	f	7
4	-4 bis +4	g	9
5	-5 bis +5	h	11

Abbildung 12: Funktionsnamen und Grad der Entartung für Zustände der Wellenfunktion ψ mit Drehimpulsquantenzahl l

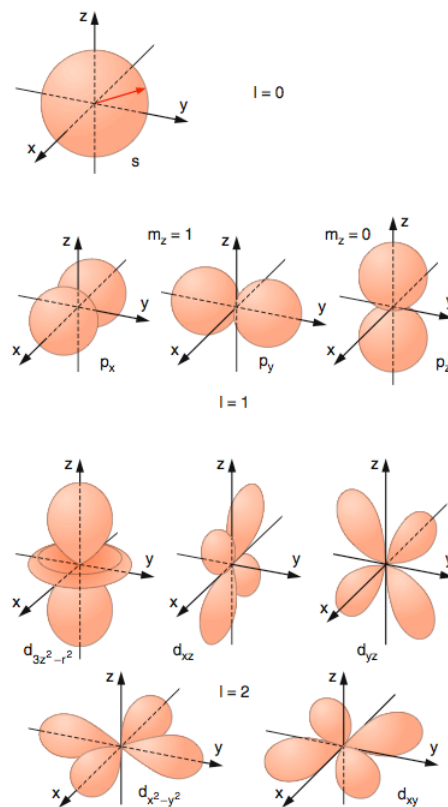


Abbildung 13: Quadrate der Eigenfunktionen $Y_l^m(\vartheta, \varphi)$ welche die Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte $\rho = |\psi|^2$ eines Teilchens im kugelsymmetrischen Potential $V(r)$ angeben.

- Während in der klassischen Mechanik der Drehimpuls eines Teilchens, das sich in einem kugelsymmetrischen Potential (Zentralkraftfeld) bewegt, nach Betrag *und* Richtung zeitlich konstant ist und daher alle drei Komponenten wohldefinierte Werte haben, sagt die quantenmechanische Beschreibung, dass zwar der Betrag des Drehimpulses $|L| = \sqrt{l(l+1)}\hbar$ zeitlich konstant ist, daß aber von seinen drei Komponenten nur eine einen

zeitlich konstanten Meßwert hat, während die beiden anderen Komponenten einzeln nicht gleichzeitig meßbar und daher nicht exakt bestimmbar sind.

Wählt man (wie üblich) die z-Achse als Quantisierungsachse, so gilt zusammenfassend:

$$\hat{L}^2 \psi = l(l+1)\hbar^2 \cdot \psi \quad \text{und} \quad \hat{L}_z \psi = m\hbar \cdot \psi \quad (100)$$

Da \hat{L}^2 und \hat{L}_z dieselben Eigenfunktionen haben (also ihr Kommutator verschwindet), lassen sie sich ihre Eigenwerte gleichzeitig scharf bestimmen.

\hat{L}_x und \hat{L}_y haben dagegen keine gemeinsamen Eigenfunktionen mit \hat{L}^2 und \hat{L}_z . Man kann nur ihre Quadratsumme

$$L_x^2 + L_y^2 = L^2 - L_z^2 = [l(l+1) - m^2] \hbar^2 \quad (101)$$

gleichzeitig mit L^2 und L_z^2 bestimmen. Im Vektormodell des Drehimpulses entspricht dies einem Vektor \vec{L} mit der Länge $\sqrt{l(l+1)}\hbar$, der um die z-Achse statistisch präzediert. Er hat dabei die zeitlich konstante Projektion $L_z = m \cdot \hbar$ auf die z-Richtung, aber keine definierte, d.h. zeitlich konstante Projektion L_x oder L_y .

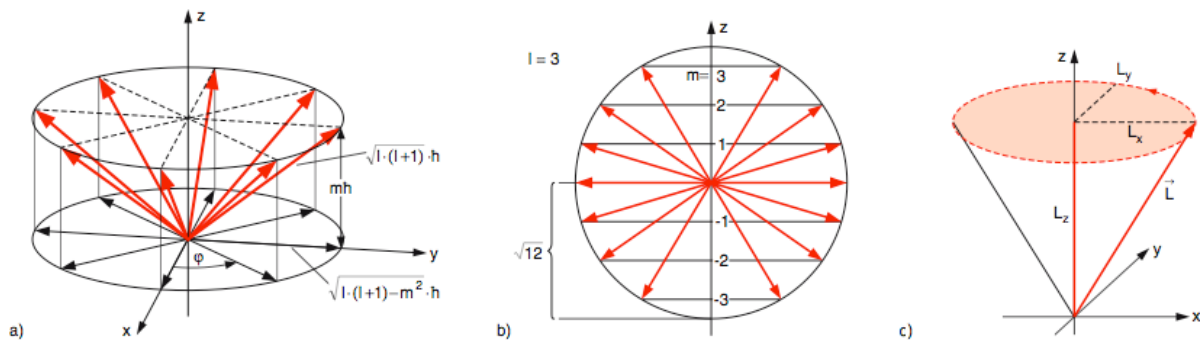


Abbildung 14: **Abb c)** Der Drehimpulsvektor \vec{L} hat eine wohldefinierte Länge $|\vec{L}|$ und eine Projektion L_z auf die z-Achse, aber keine definierte Raumrichtung L_x oder L_y . **Abb a)** Mögliche Richtungen eines Drehimpulses mit definierter Komponente $\langle L_z \rangle = m \cdot \hbar$ und definiertem Betrag $|\vec{L}| = \sqrt{l(l+1)}\hbar$. **Abb b)** Mögliche Eigenwerte $m\hbar$ für $l=3$.

Beispielaufgabe

In einem zweidimensionalen quadratischen Potentialtopf mit $a = 10 \text{ nm}$ und der Tiefe $E_{\text{pot}} = -1 \text{ eV}$ wird ein Elektron eingesperrt. Wieviele gebundene Energiezustände gibt es? (Hinweis: Man benutze die Formeln für einen unendlich hohen Potentialkasten zur Berechnung).

Lösung:

Die Energieniveaus im quadratischen Kastenpotential sind nach (4.45)

$$E(n_x, n_y) = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} (n_x^2 + n_y^2) \leq E_{\text{max}}$$

$$\Rightarrow R = 0,375.$$

Einsetzen der Zahlenwerte:

$$m = 9,1 \cdot 10^{-31} \text{ kg},$$

$$a = 10^{-8} \text{ m},$$

$$E_{\text{max}} = 1 \text{ eV} = 1,6 \cdot 10^{-19} \text{ J}$$

ergibt die Bedingung

$$(n_x^2 + n_y^2) \leq 2,66 \cdot 10^2$$

$$\Rightarrow n_x, n_y \leq 16.$$

Im Quadranten $n_x > 0, n_y > 0$ gibt es ungefähr $\pi/4 \cdot 2,66 \cdot 10^2 = 2,08 \cdot 10^2$ Zustände, die dieser Bedingung genügen. Davon sind einige energetisch entartet. Dies sind alle die, für die $n_x^2 + n_y^2$ den gleichen Wert hat, z. B. $n_x = n_y = 5$ und $n_x = 1, n_y = 7$ und $n_x = 7, n_y = 1$.