- Lösung der Schrödingergleichung durch Separation der Variablen mit Ansatz

$$\boxed{u(r, \vartheta, \varphi) = R(r)\, \Theta(\vartheta)\, \phi(\varphi)}$$

⇒ ist möglich für alle kugelsymmetrischen Potentiale $V(r)$

- multipliziere Schrödingergleichung mit $\left(-\frac{2m}{\hbar^2}\right)$ und $r^2 \sin^2\vartheta$, nutze Ansatz und dividiere durch $R \Theta \phi$:

$$\frac{1}{R} \sin^2\vartheta \frac{\partial}{\partial r}\left(r^2 \frac{\partial}{\partial r}\right) R \; + \qquad \text{R-abhängig}$$

$$\frac{1}{\Theta} \sin\vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta}\left(\sin\vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta}\right) \Theta \; + \qquad \Theta\text{-abhängig}$$

$$\frac{1}{\phi} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \phi \; + \qquad \phi\text{-abhängig}$$

$$r^2 \sin^2\vartheta \frac{2m}{\hbar^2}\left(\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r} + E\right) = 0 \qquad \text{konstant}$$

- löse azimutalen Teil mit Separationskonstante $-m_\ell^2$

$$\frac{1}{\phi} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \phi = -m_\ell^2$$

Bedeutung des φ-abhängigen Teils der Wellenfunktion? $\phi \phi^* = ?$

$$\Rightarrow \boxed{\phi = N e^{i m_\ell \varphi}}$$

mit Normierungskonstante N

- ϕ ist Eigenfunktion der z-Komponente des Drehimpulsoperators $\hat{l}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi}$

$$\boxed{\hat{l}_z \phi_{m_l} = \underbrace{\hbar m_l}_{} \phi_{m_l}}$$ mit $m_l = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots$

- z-Komponente des Drehimpuls
- Eigenwert des $\hat{l}_z$ Operators

- mit $\frac{1}{\phi} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \phi = -m_l^2$, separierte Schrödingergleichung erhält (Division durch $\sin^2 \vartheta$)

$$\overbrace{\frac{1}{R} \frac{\partial}{\partial r}\left(r^2 \frac{\partial}{\partial r}\right) R + r^2 \frac{2m}{\hbar^2}\left(\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r} + E\right)}^{\text{Radialkomponente von } u} =$$

$$\underbrace{-\frac{1}{\Theta} \frac{1}{\sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta}\left(\sin \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta}\right) \Theta + \frac{m_l^2}{\sin^2 \vartheta}}_{\text{Polarkomponente von } u}$$

- wähle Separationskonstante $l(l+1)$

- Differentialgleichung für die Radialkomponente von u

$$\boxed{\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r}\left(r^2 \frac{\partial}{\partial r}\right) R + \frac{2m}{\hbar^2}\left(\underbrace{\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}}_{} + E - \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2 m r^2}\right) R = 0}$$

einziger Teil der Wellenfunktion der explizit vom Potential abhängt.

- Differentialgleichung für Polarkomponente $\Theta(\vartheta)$ der Wellenfunktion u

$$(*) \quad \boxed{\sin\vartheta \frac{\partial}{\partial\vartheta}\left(\sin\vartheta \frac{\partial}{\partial\vartheta}\right)\Theta + \left(\sin^2\vartheta\, l(l+1) - m_l^2\right)\Theta = 0}$$

– Lösungen sind die zugeordneten Legendre Polynome $P_l^{m_l}$ mit Quantenzahlen l und m_l

$$\Theta = P_l^{m_l}(\cos\vartheta)$$

mit $P_l^{m_l} = \left(1-\cos^2\vartheta\right)^{|m_l|/2} \dfrac{d^{|m_l|}}{d\cos\vartheta^{|m_l|}} P_l(\cos\vartheta)$

und den Legendre - Polynomen (für $m_l = 0$)

$$P_l(\cos\vartheta) = \frac{1}{2^l\, l!} \frac{d^l}{d\cos\vartheta^l} \left(\cos^2\vartheta - 1\right)^l$$

⇒ Lösungsansatz: Substitution $\xi = \cos\vartheta$ in (*) und Potenzreihenansatz $\Theta(\xi) = P_l(\xi) = \sum_s a_s \xi^s$ liefert Rekursionsformel für a_s und bestimmt gleichzeitig Wert der Separationsvariable $\lambda = l(l+1)$.

⇒ siehe z.B. Künzig Kapitel 4
und 'Quantenmechanik auf dem Computer'

- Kugelflächenfunktionen als Lösung des winkelabhängigen Teils der Schrödingergleichung

$$Y_{l,m_l} = \Theta(\vartheta)\,\phi(\varphi)$$

$$= \underbrace{(-1)^{m_l}\left(\frac{2l+1}{4\pi}\,\frac{(l-|m_l|)!}{(l+|m_l|)!}\right)^{1/2}}_{\text{Normierungskonstante}} P_l^{m_l}(\cos\vartheta)\,e^{i m_l \varphi}$$

- Eigenfunktionen von $\hat{l}^2$

$$\boxed{\hat{l}^2\,Y_{l,m_l} = \hbar^2\,l(l+1)\,Y_{l,m_l}}$$

mit $l = 0, 1, 2, 3, \ldots, n-1$ Drehimpulsquantenzahl

– für Eigenfunktionen zu einer Quantenzahl l gilt

$$\langle \hat{l}^2 \rangle = \hbar^2 l(l+1)$$ und

$$\sqrt{\langle \hat{l}^2 \rangle} = \hbar\sqrt{l(l+1)}$$

Y_{l,m_l} ist gleichzeitige EF von $\hat{l}^2$ und $\hat{l}_z$.

- Eigenfunktionen von $\hat{l}_z$

$$\boxed{\hat{l}_z\,Y_{l,m_l} = \hbar\,m_l\,Y_{l,m_l}}$$

mit $m_l = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \ldots, \pm l$ magnetische Quantenzahl

- für Eigenfunktionen zu einer Quantenzahl m_ℓ gilt

$$\boxed{\langle \hat{\ell}_z \rangle = m_\ell \hbar}$$

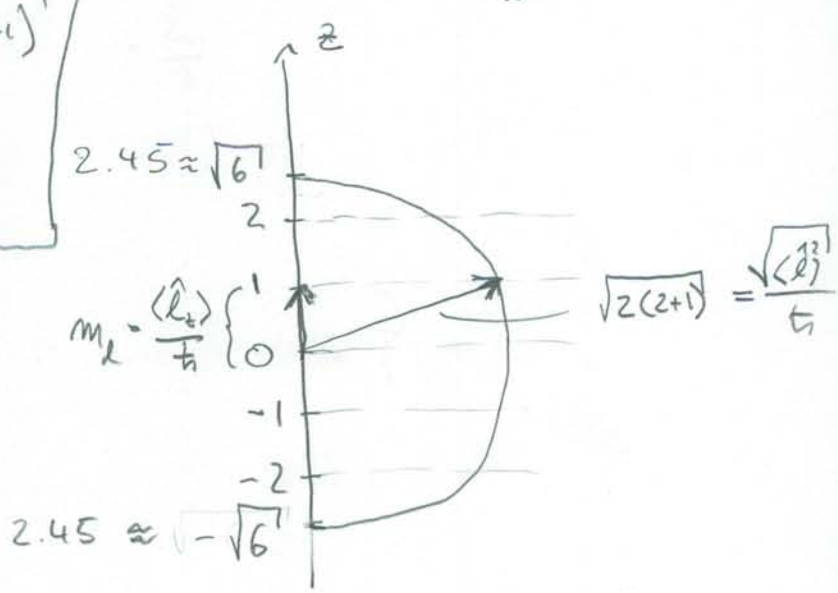
2) Für Teilchen in kugelsymmetrischen Potentialen gelten die oben beschriebenen Eigenschaften des quantenmechanischen Drehimpuls.

- **Richtungsquantisierung des Bahndrehimpuls**

- Lösung des Winkelteils der Schrödingergleichung legt Beziehung zwischen $\langle \hat{\ell}^2 \rangle$, $\langle \ell_z \rangle$, $\langle \ell_y \rangle$, und $\langle \ell_x \rangle$ fest.

$$\boxed{\begin{aligned} \sqrt{\langle \hat{\ell}^2 \rangle} &= \hbar \sqrt{\ell(\ell+1)} \\ \langle \ell_z \rangle &= \hbar\, m_\ell \end{aligned}}$$

Beispiel: $\ell = 2$
$m_\ell = 0, \pm 1, \pm 2$



⇒ Quantenmechanisch sind nur spezifische Ausrichtungen des Bahndrehimpuls relativ zu einer Quantisierungsachse erlaubt.
Siehe auch Zeeman-Effekt: Atom in externem Magnetfeld