Physikalische Blätter **41,Nr.8** S.283–285 (1985)

Bemerkungen zur Quantentheorie des Bahndrehimpulses

Cornelius C. Noack
Universität Bremen, Fachbereich 1 – Physik
Postfach 33 0440, D – 28334 Bremen

Fast alle Vorlesungen und Lehrbücher über Quantenmechanik geben unvollständige, wenn nicht geradezu falsche Antworten auf die Frage, warum der Bahndrehimpuls ganzzahlige Eigenwerte besitzt. Das ist umso erstaunlicher, als die richtige (und einfache) Antwort seit den Anfängen der Theorie bekannt ist. Der folgende Aufsatz beleuchtet diesen kuriosen Sachverhalt in physikalischer, didaktischer und historischer Hinsicht.

In einführenden Lehrbüchern und Vorlesungen über Quantentheorie nimmt die Diskussion des Drehimpulses gewöhnlich einen breiten Raum ein, nicht nur wegen seiner unmittelbaren Bedeutung für das Experiment, sondern vor allem auch, weil nach der Einführunmg der Grundgedanken und -begriffe der Theorie (meist anhand der Schrödingerschen Formulierung) die konkrete Anwendung des Formalismus sich hier besonders klar darstellen läßt. Man geht hierbei meist aus vom Bahndrehimpuls der klassischen Punktmechanik.

$$\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p} \quad ; \tag{1}$$

nach dem Übergang zur Schrödinger-Darstellung im Ortsraum durch die Ersetzung

$$\vec{p} \to -i\hbar\,\mathrm{grad} \tag{2}$$

stellt man fest, dass die drei Komponenten von $\vec{L}$ untereinander nicht vertauschen und schreibt sodann die zu lösenden Eigenwertgleichungen

$$\vec{L}^{\,2} Y_{\ell m} = \hbar\lambda\, Y_{\ell m} \tag{3a}$$

$$L_z Y_{\ell m} = \hbar m\, Y_{\ell m} \tag{3b}$$

an. Dem Vorgehen von Dirac [1] folgend, löst man diese nun aber meist nicht direkt als partielle Differentialgleichungen in Polarkoordinaten, sondern man stützt sich ganz auf die Vertauschungsrelationen [1]

$$[L_k, L_m] = i\,\varepsilon_{kmn} L_n \tag{4}$$

und erhält hieraus durch rein algebraische Manipulationen die bekannten Bedingungen für die Eigenwerte:

$$\lambda = \ell(\ell+1) \quad , \qquad \ell \geq 0 \quad \text{ganz- oder halb-zahlig,} \tag{5a}$$

$$-\ell \leq m \leq \ell \quad , \qquad \ell - m \qquad \text{ganzzahlig.} \tag{5b}$$

Der experimentelle Befund ist nun, dass für den *Bahn*-Drehimpuls ℓ immer ganzzahlig ist. Diese zusätzliche Bedingung kann jedenfalls nicht aus den Vertauschungsrelationen (4) hergeleitet werden, da es ja Drehimpulsoperatoren mit halbzahligen Eigenwerten durchaus gibt (Spin, Isospin). Man braucht also noch ein anderes Argument, um auch theoretisch halbzahlige Bahndrehimpulse auszuschließen. Hierzu greift man nun doch auf die Differentialgleichungsform der Eigenwertgleichungen (3) zurück, nämlich auf

$$L_z Y_{\ell m} = -i\frac{\partial}{\partial\phi} Y_{\ell m}(\theta,\phi) = m\, Y_{\ell m}(\theta,\phi)$$

[1] $\hbar$ wird von jetzt ab immer weggelassen.

und damit die Separationslösung

$$Y_{\ell m}(\theta,\phi) = e^{im\phi}\,\hat{Y}_{\lambda m}(\theta) \quad .$$

Es gilt also

$$Y_{\ell m}(\theta,\phi+2\pi) = e^{2\pi i m}\,Y_{\ell m}(\theta,\phi) \quad ,$$

da (θ,ϕ) und $(\theta,\phi+2\pi)$ aber den gleichen Raumpunkt darstellen, ist die Lösung nur für ganzzahlige m (und damit ℓ) eindeutig, für halbzahlige zweideutig. Wegen dieser Zweideutigkeiit sind die Lösungen mit halbzahligem ℓ und m auszuschließen; das ist die in der Literatur fast universell verbereitete und immer wieder angeführte [2] Begründung.

Nun ist schon frühzeitig darauf hingewiesen worden [3], dass es kein a priori gültges, in den Grundprinzipien der Quantenmeachnik verankertes Argument für die Eindeutigkeit von Wellenfunktionen gibt [2]. Seitdem sind in einer Fülle von zum Teil umfänglichen Arbeiten [5–8] die verschiedensten Argumente und Beweise für die Ganzzahligkeit der Bahndrehimpulseigenwerte angeführt worden, von denen die einen kaum stichhaltiger sind als das Eindeutigkeitsargument, die andern mathematisch wohl zu kompliziert, jedenfalls für ihre Verwendung etwa in einer einführenden Vorlesung.

Es ist nicht Ziel der vorliegenden Arbeit, die Glaubwürdigkeit der Theorie durch Anführen eines $(n+1)$ten „Beweises“ in einer Art von Induktionsschluss zu festigen; sie ist vielmehr deutlich pädagogischer Natur. Zum einen soll ein Beweis für die Ganzzahligkeit der Eigenwerte gegeben werden, der in seiner Einfachheit und Durchsichtigkeit wohl am ehesten für die erste Beschäftigung mit diesem Problem geeignet erscheint. Wer allerdings meint, mit diesem Beweis sei wohl die Frage nunmehr endgültig geklärt und bedürfe keiner weiteren Erörterung, dem sei mitgeteilt, dass Grundidee und physikalischer Inhalt der Argumentation bereits in der wohl ersten Äußerung zu diesem Thema zu finden [9] sind! Es ist ein weiterer Zweck der vorliegenden Arbeit, zu klären, warum diese Argumentation so in Vergessenheit geraten konnte. Die Konsequenzen aus dieser Überlegung sind – zum mindesten in pädagogischer Hinsicht – nicht trivial.

Der Beweis von Born und Jordan [9] ist ganz algebraisch und stützt sich auf zwei Bemerkungen, die wir zunächst voranschicken, um dann die Argumentation in einer etwas verallgemeinerten Form in moderner Notation durchzuführen [3].

Erstens: Der Bahndrehimpuls muss, wie oben schon bemerkt, irgendeine zusätzliche, spezielle Eigenschaft besitzen, die über die bloßen Vertauschungsrelationen (4) hinausgeht und deshalb nur von der speziellen Form (1) herrühren kann. Eine solche Eigenschaft ist die Beziehung

$$\vec{r}\cdot\vec{L} = 0 \tag{6a}$$

bzw.

$$\vec{p}\cdot\vec{L} = 0 \tag{6b}$$

Die Dipolauswahlregel $\Delta\ell \neq 0$ der Atomphysik ist, wie Born und Jordan [9] ausdrücklich bemerken, eine unmittelbare Folge von (6a). Die Beziehung (6b) andererseits braucht man, um die „Helizität“ eines Teilchens (definiert als Projektion des Drehimpulses auf die Impulsrichtung als Polarisation interpretieren zu können:

$$\lambda := \frac{\vec{J}\cdot\vec{p}}{|\vec{p}|} = \frac{(\vec{L}+\vec{S})\cdot\vec{p}}{|\vec{p}|} = \frac{\vec{S}\cdot\vec{p}}{|\vec{p}|} \quad .$$

Die beiden Beziehungen (6) erweisen also ihre direkte physikalische Bedeutung auch an anderer Stelle.

[2]Nur physikalisch messbare Größen, in der Quantenmechanik also Erwartungswerte von selbstadjungierten Operatoren, müssen eindeutig sein. Das bedeutet hier [4], dass in einem vorgegebenen System entweder *nur* ganzzahlige oder *nur* halbzahlige Drehimpulse vorkommen können.

[3]Eine andere Form des gleichen Beweises findet sich bei Green [10]. Dabei werden – nur um ihrer algebraischen Eigenschaften wegen – die Paulischen Spinmatrizen σ als Hilfsgrößen benutzt. Es erscheint zumindest in didaktischer Hinsicht nicht ganz glücklich, in einem Beweis für die Ganzzahligkeit der Drehimpulseigenwerte ausgerechnet die Größen zu benutzen, die für das Auftreten halbzahliger Eigenwerte charakteristisch sind.

Zweitens: Ein Beweis der Ganzzahligkeit ist geliefert, wenn es gelingt zuu zeigen, dass aus der Existenz einer Lösung von (3) zum Eigenwert ℓ die Existenz einer Lösung zum Eigenwert $(\ell-1)$ folgt, sofern nur $\ell > 0$. Denn daraus würde für jedes halbzahlige ℓ die Existenz einer Lösung zu $\ell = -\frac{1}{2}$ folgen, im Widerspruch zu $\ell \geq 0$ aus (5a).

Es sein nun $\vec{K}$ irgendein vorgegebener Vektoroperator, d.h.

$$[L_k, K_m] = i\,\varepsilon_{kmn} K_n \quad . \tag{7}$$

Der Einfachheit halber (die Einschränkung ist nicht wesentlich) nehmen wir außerdem an, dass die Komponenten von $\vec{K}$ untereinander vertauschbar sind. Wir definieren dann einen neuen Vektoroperator $\vec{A}^{(\ell)}$ durch

$$\vec{A}^{(\ell)} := i(\vec{K} \times \vec{L}) - \ell\vec{K} \quad ,$$

oder, in sphärischer Basis ausgeschrieben [4] und leicht umgeordnet,

$$A^{(\ell)}{}_+ := -K_0 L_+ + K_+(L_0 - \ell) \tag{8a}$$

$$A^{(\ell)}{}_0 := +K_- L_+ + K_0(L_0 - \ell) - \vec{K} \cdot \vec{L} \tag{8b}$$

$$A^{(\ell)}{}_- := +K_0 L_- - K_-(L_0 + \ell) \quad . \tag{8c}$$

Man findet

$$[A^{(\ell)}{}_+, A^{(\ell)}{}_-] = 2\vec{K}^{\,2} L_0 \tag{9}$$

sowie

$$[L_+, A^{(\ell)}{}_-] = 2A^{(\ell)}{}_0 \tag{10a}$$

$$[L_0, A^{(\ell)}{}_-] = -A^{(\ell)}{}_- \quad . \tag{10b}$$

Es sei nun $|\ell, m\rangle$ ein Eigenvektor zu $\vec{L}^{\,2}$ und L_0. Dann folgt aus (8a,8b)

$$A^{(\ell)}{}_+ \,|\ell, m{=}\ell\,\rangle = 0$$
$$A^{(\ell)}{}_0 \,|\ell, m{=}\ell\,\rangle = -\vec{K} \cdot \vec{L}\,|\ell, m{=}\ell\,\rangle \quad ;$$

aus (9) folgt

$$A^{(\ell)}{}_+ A^{(\ell)}{}_- \,|\ell, \ell\,\rangle = -\ell\,\vec{K}^{\,2}\,|\ell, \ell\,\rangle \quad ,$$

so dass also $A^{(\ell)}{}_- \,|\ell, \ell\,\rangle$ für $\ell > 0$ sicher nicht verschwindet, wenn $\vec{K}^{\,2}\,|\ell, \ell\,\rangle$ nicht verschwindet [dass $A^{(\ell)}{}_- |0, 0\,\rangle = 0$ ist, sieht man unmittelbar aus (8c)]. Aus (10a) und (10b) folgt nun

$$L_+, A^{(\ell)}{}_- \,|\ell, \ell\,\rangle = -2\vec{K} \cdot \vec{L}\,|\ell, \ell\,\rangle \tag{11a}$$

$$L_0, A^{(\ell)}{}_- \,|\ell, \ell\,\rangle = (\ell - 1) A^{(\ell)}{}_- \,|\ell, \ell\,\rangle \quad . \tag{11b}$$

(11a) und (11b) zeigen, dass $A^{(\ell)}{}_- \,|\ell, \ell\,\rangle$ ein neuer Drehimpulseigenvektor zum Eigenwert $(\ell - 1)$ ist *dann und nur dann*, wenn $\vec{K} \cdot \vec{L} = 0$ ist. Wir haben also den folgenden

Satz: Gibt es einen Vektoroperator $\vec{K}$ (mit vertauschenden Komponenten), der die Bedingung

$$\vec{\mathbf{K}}^{\,2}\,|\ell, \ell\,\rangle \neq \mathbf{0} \quad \textbf{für alle } \ell > 0 \tag{12}$$

erfüllt und für den überdies

$$\vec{\mathbf{K}} \cdot \vec{\mathbf{L}} = \mathbf{0} \tag{13}$$

gilt, so sind die Drehimpulseigenwerte ganzzahlig.

[4] Wir verwenden die Notation $V_\pm := (V_x \pm iV_y)$, $V_0 := V_z$ für alle vorkommenden Vektoroperatoren.

Es ist instruktiv zu sehen, wie hier die Bedingung (13) in ganz natürlicher Weise eingeht. Dass in dem uns interessierenden Fall (wir ersetzen jetzt $\vec{K}$ durch den Impuls $\vec{p}$) auch (12) erfüllt ist, ist klar: $\vec{p}^{\,2}$ hängt ja von den Winkelvariablen (θ, ϕ) gar nicht ab und ist, was die Drehimpulseigenfunktionen angeht, als multiplikative Konstante („c-Zahl") anzusehen.

Pauli hat diesen Beweis gekannt und anerkannt [11], aber trotzdem noch viele Jahre später das Bedürfnis für eine tiefergehende Analyse [5] empfunden, und spätere Autoren (soweit sie den Gedankengang von Born und Jordan überhaupt kannten) sind ihm darin gefolgt [5]. Wie kommt das? Das ist wohl in der Hauptsache historisch zu verstehen. Obwohl schon frühzeitig die volle Äquivalenz der wellenmechanischen und der matrixmechanischen Formulierung der Quantenmechanik erkannt worden war [12], hatte sich in kurzer Zeit die wellenmechanische Formulierung in allen praktischen Rechnungen doch als so überlegen erwiesen, dass die Matrixformulierung darüber mehr und mehr in den Hintergrund trat. Dadurch hat sich die Deutung der Schrödingegleichung als partielle Differentialgleichung so selbständig gemacht, dass manche Physiker auch heute noch die Ersetzungsvorschrift (2) als *das* Grundprinzip der Quantentheorie ansehen, obwohl sie ja nur eine (wenn auch oft sehr bequeme) von vielen möglichen Darstellungen der Quantentheorie ist. Diese Gewöhnung führte dazu, die übliche Differentialoperatorform in Polarkoordinaten des Drehimpulses als etwas Fundamentales anzusehen. Stellt man sich aber einmal gänzlich auf diesen Standpunkt, d.h. sieht man die Gleichungen (3) als partielle Differentialgleichungen mit wohldefinierten Differentialoperatoren $\vec{L}^{\,2}, L_z$ an und sucht nach quadratintegrablen Lösungen, so gibt es eben nicht nur die Kuglefunktionen mit ganzzahligem ℓ, sondern zu jedem nicht-negativen λ gibt es ganz legitime Lösungen [8].

Auf der anderen Seite haben wir gesehen, wie schon aus der Form (1) der Bahndrehimpulsoperatoren zusammen mit den Vertauschungsrelationen (4) und (7) [letzter für $\vec{K} = \vec{p}$] die Ganzzahligkeit der Eigenwerte folgt. (4) und (7) sind direkte Folge der Heisenberg-Vertauschungsrelationen

$$[x_m, p_n] = \delta_{mn}\, i\hbar \quad . \tag{14}$$

die Ersetzungsregel (2) soll ja aber gerade die Gültigkeit dieser Vertauschungsrelationen auch in der wellenmechanischen Formulierung sichern. Hier leigt also ein Widerspruch vor; diesen Widerspruch aufzudecken (und zu beseitigen) war das Ziel der Paulischen Arbeit [5].

Die Antwort ist die folgende: die Operatoren $\vec{r}, \vec{p}$ und damit auch die Drehimpulsoperatoren $\vec{L}$ sind ja, als Operatoren im Hilbertraum, unbeschränkt. Sie sind also nicht auf dem ganzen Hilbertraum definiert, auch die Vertauschungsrelationen (14) und damit (4) und (7) sind also nicht überall definiert. Es zeigt sich nun [5, 8], dass die „Kugelfunktionen" $Y_{\lambda m}$ mit unganzem Index zwar im Definitionsbereich der selbstadjungierten Erweiterung der Differentialoperatoren $\vec{L}^{\,2}, L_z$ liegen [und somit legitime Lösungen der Differentialgleichungen (3) sind], aber *nicht mehr im Definitionsbereich der Vertauschungsrelationen* (4). Das bedeutet, dass die unbedenkliche Ersetzung (2) in diesem Falle auf physikalisch unsinnige Resultate führt und *nicht* äquivalent ist mit den Heisenberg-Vertauschungsrelationen (14). In der Tat hat Kretzschmar [13] explizite gezeigt, wie die Ersetzungsregel (2) abzuändern ist, wenn man als Basis im Hilbertraum einen vollständigen Satz von (mehrdeutigen) Kugelfunktionen mit unganzem Index wählt. Das ist dann wieder genauso legitim wie die übliche Formulierung – insbesondere sind die Drehimpulseigenwerte ganzzahlig! – nur eben auf absurde Weise unbequem (siehe hierzu jedoch [14]).

Die ganze Betrachtung zeigt, das man zur Ausschließung der unganzen Bahndrehimpulse tatsächlich zu den üblichen Axiomen der Quantenmechanik noch eine Eischränkung der zulässigen Zustandsvektoren fordern muss: statt der üblichen Eindeutigkeit verlangt Pauli [5], das die mehrfache Anwendung der Drehimpulsoperatoren auf eine Lösung von (3) mit festem λ nicht aus dem Raum der Lösungen zu diesem λ herausführen soll. Pauli begründet diese Forderung unter anderem damit, dass

[5] In gruppentheoretisch orientierten Lehrbüchern [15] entledigt man sich des ganzen Problems häufig mit dem schlichten Hinweis auf die Tatsache, dass nur die zu ganzzahligen ℓ gehörigen irreduziblen Darstellungen der Lie-Algebra (4) auch eindeutige irreduzible Darstellungen der ganzen Dreh*gruppe* O_3^+ erzeugen, während die halbzahligen ℓ zu Darstellungen der universellen Überlagerungsgruppe SU_2 gehören. Allein das verschiebt das Problem natürlich nur auf die – äquivalente – Frage, welche Axiome der Quantenmechanik denn die Beschränkung auf *treue* (d.h. eindeutige) Darstellungen erfordern.

mit Hilfe der Drehimpulsoperatoren erzeugte endliche Drehungen andernfalls auch aus diesem Raum herausführen würden, was mit der physikalischen Interpretation der ganzen Theorie unvereinbar wäre.

Unser Kriterium, das in dem Gedankengang von Born und Jordan impliziert ist, lautet: Hilbertraum-Vektoren, die physikalischen Zuständen entsprechen, müssen im Definitionsbereich der Heisenberg-Vertauschungsrelationen liegen [6]. Diese Forderung scheint in Anbetracht der grundsätzlichen Bedeutung der Unschärferelation für die gesamte Quantentheorie fast selbstverständlich; dennoch hat sie, wie auch die Paulische Forderung, auch in den mehr formalen Expositionen der Theorie kaum Erwähnung gefunden [7]. Das liegt wohl daran, dass man kaum ein konkretes Beispiel kannte, in dem dieser Eischränkung praktische Bedeutung zukam. Aus dem gleichen Grunde übernimmt man meist unkritisch die Ersetzungsvorschrift (2), ohne sich über alle ihre Konsequenzen in Klaren zu sein.

Um Missverständnissen vorzubeugen, sollte betont werden, dass durch diese Sachlage keinerlei Zweifel an der Äquivalenz des Heisenberg- mit dem Schrödinger-Formalismus aufkommen können. Lediglich das Kriterium dafür, welche Zustandsvektoren als unphysikalisch auszuschließen sind, ist im einen Fall einfacher und physikalisch durchsichtiger formulierbar als im andern. Doch schon dieser Formulierungsunterschied sollte, wie unser Blick auf die Literatur zum Bahndrehimpuls überzeugend zeigt, Grund genug sein, dem Heisenberg-Formalismus mehr Raum in der Lehre zu geben, als dies gemeinhin der Fall ist.

*

Die vorliegende Arbeit ist schon vor vielen Jahren entstanden, aber zunächst unveröffentlicht geblieben, weil der Autor die schier endlose Literatur zu diesem Thema nicht weiter anreichern wollte. Da aber immer noch neue Lehrbücher mit immer den gleichen alten (und irreführenden) Argumenten erscheinen, kann die Verbreitung von Altbekanntem in pädagogischer Hinsicht vielleicht doch von Nutzen sein.

Literatur und Anmerkungen

[1] *P.A.M. Dirac*: The Principles of Quantum Mechanics. 1.Aufl. Oxford, 1930, §§ 30, 44 (deutsche Übers. Berlin 1930).

[2] unter der neueren Lehrbuchliteratur siehe zum Beispiel:
A. Messiah: Quantum Mechanics; Amsterdam 1975; *G. Baym*: Lectures on Quantum Mechanics, Reading 1981; *A.I. Rae*: Quantum Mechanics, London 1981; *J.L. Martin*: Basic Quantum Mechanics, Oxford 1981; *H. Haken* und *H.C. Wolf*: Atom- und Quantenphysik, Berlin/Heidelberg/New York 1980 (engl. Übers. New York 1984);
jüngste deutschsprachige Neuerscheinung: *R.J. Jelitto*: Theoretische Physik 4: Quantenmechanik I. Studientexte Physik, Wiesbaden 1984.

[3] *W. Pauli*: Handbuch der Physik Bd. XXIV/1. 2.Aufl., Berlin 1933, S. 126.

[4] siehe z.B. *D. Bohm*: Quantum Theory, New York 1951, S. 389.

[5] *W. Pauli*, Helv.Phys.Acta **12** (1939) 147.

[6] *H.A. Buchdahl*, Am.J.Phys. **30** (1962) 829.

[7] *J.M. Lèvy-Leblond*, Am.J.Phys. **35** (1967) 444.

[8] *C. van Winter*, Ann.Phys. (NY) **47** (1968) 232; sowie die dort zitierten Arbeiten.

[6] Dass dadurch gleich auch die *halbzahligen* Lösungen der Differentialgleichungen (3) eliminiert werden, liegt daran, dass die Bedingung $\vec{r} \cdot \vec{L} = 0$ in der Differentialoperatorform von $\vec{L}$ natürlich implizite enthalten ist.

[7] Soweit in der Lehrbuchliteratur andere korrekte Beweise der Ganzzahligkeit der Drehimpulseigenwerte zu finden sind [16], beruhen sie alle auf dieser Forderung, ohne dass sie jedoch irgendwo explizite formuliert wird.

[9] *M. Born* u. *P. Jordan*: Elementare Quantenmechanik, Berlin 1930, S. 32.

[10] *H.S. Green*, Matrix Mechanics, Groningen 1965 (deutsche Übers. „Heidelberger Taschenbuch“ Nr.13, Heidelberg 1966).

[11] *W. Pauli*, (loc. cit.), S. 183.

[12] siehe z.B. *J. von Neumann*: Mathematische Grundlagen der Quantenmechanik, Berlin 1932 (unveränd. Neudruck Berlin/Heidelberg/New York 1968).

[13] *M. Kretzschmar*, Z.f.Phys. **185** (1965) 73.

[14] *M. Kretzschmar*, Z.f.Phys. **185** (1965) 84 und 97.

[15] siehe z.B. *E.P. Wigner*: Group Theory and its Applications to the Quantum Mechanics of Atomic Spectra, New York 1959; die mathematischen Aspekte werden besonders ausführlich behandelt in *R. Jost*: Quantenmechanik I, Zürich 1969.

[16] *E. Fick*: Einführung in die Grundlagen der Quantentheorie, Frankfurt 1972; *M. Alonso*: Quantum Mechanics, Reading 1973; *S. Gasiorowicz*: Quantum Physics, New York 1974 (dt. Übers. München 1977); *A. Böhm*: Quantum Mechanics, New York/Heidelberg/Berlin 1979; *J.G. Taylor*: Quantum Mechanics – an Introduction, London 1970 (hier findet sich kurioserweise im *Text* das fragwürdige Eindeutigkeitsargument, in einem eigenen Anhang jedoch – gewissermaßen als Aufbesserung – ein korrekter Beweis!).