Klassische Größen und quantenmechanische Operatoren in allgemeinen Koordinaten

H. Näpfel, H. Ruder u. H. Volz

Institut für Theoretische Physik der Universität Erlangen-Nürnberg

(Z. Naturforsch. **23 a**, 199—203 [1968]; eingegangen am 30. Oktober 1967)

A method is given to find, in general coordinates, expressions for dynamical quantities connected with infinitesimal transformations. The classical and the corresponding quantum case are considered. A simple translation rule between the two cases is derived by comparison. The efficiency of the method is demonstrated in the example of angular momenta.

Bei der Behandlung klassischer wie quantenmechanischer Probleme hängt der Erfolg vielfach von der Einführung geeigneter Koordinaten ab. Es empfiehlt sich dabei zumeist, die Koordinaten so zu wählen, daß die charakteristischen physikalischen Eigenschaften, insbesondere also die Symmetrien des betreffenden Systems, in möglichst einfacher Weise zum Ausdruck kommen.

Die mathematische Behandlung beginnt mit der Aufstellung der Hamilton-Funktion bzw. des Hamilton-Operators. Die klassische Hamilton-Funktion läßt sich in den gewählten Koordinaten ohne grundsätzliche Schwierigkeiten gewinnen. Der wellenmechanische Hamilton-Operator ergibt sich hieraus mit Hilfe der Schrödingerschen Übersetzungsvorschrift [1].

Für die physikalische Deutung der einzelnen Bestandteile der Hamilton-Funktion (bzw. des Hamilton-Operators) ist es von Interesse, in den gewählten Koordinaten diejenigen Größen zu bestimmen, die mit infinitesimalen Transformationen in der Weise verknüpft sind, daß sich bei Invarianz der Hamilton-Funktion Erhaltungsgrößen ergeben. Es zeigt sich, daß die Kenntnis solcher Größen bzw. Operatoren auch die mathematische Lösung des Problems wesentlich erleichtert.

Ein einfaches Beispiel hierfür ist der Massenpunkt im kugelsymmetrischen Feld. Man führt zu seiner Beschreibung sphärische Polarkoordinaten ein, da in diesen die Invarianz gegen Raumdrehungen und die damit verbundene Erhaltung des Drehimpulses unmittelbar sichtbar werden.

Im folgenden wird ein Verfahren entwickelt, welches erlaubt, die zu einer bestimmten kontinuierlichen Transformationsgruppe gehörenden infinitesimalen Erzeugenden bzw. Operatoren in ganz allgemeiner Weise für beliebige Koordinaten zu ermitteln. Ein Vergleich zwischen den Ergebnissen der klassischen und der quantenmechanischen Überlegung führt zu einer einfachen Übersetzungsvorschrift zwischen entsprechenden Größen.

[1] E. Schrödinger, Ann. Phys. **79**, 361 [1926].

1. Infinitesimale Transformationen in der klassischen Mechanik

Das betrachtete System werde zunächst durch die allgemeinen Koordinaten p_i, q_i beschrieben. Wir können die ins Auge gefaßte infinitesimale Punkttransformation $q_i \to Q_i = q_i + \varepsilon f_i(q)$, $p_i \to P_i$ immer in die Form einer kanonischen Transformation kleiden, indem wir als Erzeugende den Ausdruck

$$S(\varepsilon) = \sum_k (P_k q_k + \varepsilon \cdot P_k f_k(q)) \tag{1}$$

benützen. Dabei ist ε ein infinitesimaler Parameter, q bzw. p stehen für die Gesamtheit der betreffenden Variablen. Über die Beziehungen

$$p_i = \partial S / \partial q_i \quad \text{und} \quad Q_i = \partial S / \partial P_i$$

gelangt man zu den infinitesimalen Änderungen der Impulse bzw. Koordinaten

$$\delta p_i = -\varepsilon \sum_k p_k \frac{\partial f_k(q)}{\partial q_i}, \qquad \delta q_i = \varepsilon \cdot f_i(q), \tag{2}$$

wobei bereits p_k für P_k geschrieben wurde. Falls die Hamilton-Funktion gegenüber dieser Transformation invariant ist, wird

$$F(p, q) = \sum_k p_k f_k(q) \tag{3}$$

eine Erhaltungsgröße des Systems.

Die hier skizzierten Zusammenhänge lassen sich in naheliegender Weise auf mehrparametrige Transformationsgruppen übertragen. Um hierbei nicht allzu abstrakt zu werden, betrachten wir im folgenden als konkretes und praktisch wichtigstes Beispiel die dreiparametrige Transformationsgruppe der Drehungen, deren infinitesimales Element durch den Drehvektor $\delta\boldsymbol{\Phi}$ dargestellt wird. Wir wollen dabei ausdrücklich betonen, daß die Achse der Drehung ganz beliebig in das System hineingelegt werden kann, und daß die virtuelle Drehung sich bei zusammengesetzten Gebilden sehr wohl nur auf Teile des Systems erstrecken kann.

Wenn wir auf der Drehachse den Ursprung eines beliebig orientierten kartesischen Achsenkreuzes (ξ, η, ζ) anbringen, so können wir den Drehvektor $\delta\boldsymbol{\Phi}$ in seine Komponenten $\delta\Phi_\xi$, $\delta\Phi_\eta$, $\delta\Phi_\zeta$ in bezug auf diese Achsen zerlegen. Im infinitesimalen Bereich läßt sich die durch $\delta\boldsymbol{\Phi}$ gegebene Drehung durch Hintereinanderschaltung der drei Drehungen $\delta\boldsymbol{\Phi}_\xi$, $\delta\boldsymbol{\Phi}_\eta$, $\delta\boldsymbol{\Phi}_\zeta$ in beliebiger Reihenfolge erzeugen. An die Stelle des Ausdruckes $S(\varepsilon)$ in Gl. (1) tritt nunmehr

$$\begin{aligned} S(\delta\boldsymbol{\Phi}) &= \sum_k \big(P_k\, q_k + \delta\Phi_\xi\, P_k\, f_{\xi k}(q) + \delta\Phi_\eta\, P_k\, f_{\eta k}(q) \\ &\qquad + \delta\Phi_\zeta\, P_k\, f_{\zeta k}(q)\big) \\ &= \sum_k P_k\, q_k + \delta\Phi_\xi\, F_\xi(P,q) + \delta\Phi_\eta\, F_\eta(P,q) \\ &\qquad + \delta\Phi_\zeta\, F_\zeta(P,q). \end{aligned} \tag{4}$$

Da die Transformation unabhängig von der gewählten Orientierung des Achsenkreuzes (ξ, η, ζ) ist, können wir die drei letzten Summanden zu einem Skalarprodukt $\delta\boldsymbol{\Phi}\cdot\boldsymbol{F}(P,q) = \delta\boldsymbol{\Phi}\cdot\boldsymbol{F}(p,q)$ zusammenfassen. Die vektorielle Größe $\boldsymbol{F}$ nennen wir Drehimpuls desjenigen Teiles des Systems, welcher der virtuellen Drehung unterworfen wird; die Größen F_ξ, F_η, F_ζ sind die Komponenten dieses Drehimpulsvektors bezüglich des gewählten Achsenkreuzes. Es liegt also durch die Wahl des Achsenkreuzes völlig in unserem Belieben, in welcher Komponentendarstellung wir $\boldsymbol{F}$ erhalten wollen.

Die Änderungen der Systemkoordinaten bei der betreffenden Drehung ergeben sich dann gemäß Gl. (2) zu

$$\delta q_k = \sum_{\lambda=\xi,\eta,\zeta} \delta\Phi_\lambda\, f_{\lambda k}(q). \tag{5}$$

Andererseits hängen die durch die Drehung $\delta\boldsymbol{\Phi}$ verursachten Koordinatenänderungen δq_k eindeutig und linear mit den Komponenten $\delta\Phi_\lambda$ des Drehvektors zusammen:

$$\delta q_k = \sum_{\lambda=\xi,\eta,\zeta} \delta\Phi_\lambda\, g_{\lambda k}(q). \tag{6}$$

Die Funktionen $g_{\lambda k}(q)$ kann man beispielsweise geometrisch bestimmen, indem man sich überlegt, wie sich bei einer infinitesimalen Drehung $\delta\boldsymbol{\Phi}_\lambda$ die betroffenen Koordinaten des Systems ändern.

Gleichsetzen von (5) und (6) liefert

$$\sum_{\lambda=\xi,\eta,\zeta} \big(f_{\lambda k}(q) - g_{\lambda k}(q)\big)\,\delta\Phi_\lambda = 0\,.$$

Da wir uns im vorliegenden Fall mit der dreiparametrigen Drehgruppe beschäftigen, sind die $\delta\Phi_\lambda$ unabhängig voneinander beliebig wählbar. Es folgt also

$$f_{\lambda k} = g_{\lambda k}(q), \qquad \lambda = \xi, \eta, \zeta, \qquad \text{alle } k.$$

Daraus erhalten wir mit (3) die Drehimpulskomponenten zu

$$F_\lambda = \sum_k g_{\lambda k}(q)\, p_k\,, \qquad \lambda = \xi, \eta, \zeta. \tag{7}$$

2. Infinitesimale Transformationen in der Wellenmechanik

In der Wellenmechanik wird ein mechanisches System durch eine Wellenfunktion beschrieben, die eine Funktion der gewählten Koordinaten ist. Wir stellen uns vor, daß wir die durch diese Koordinaten bzw. einen Teil von ihnen beschriebene Konfiguration wiederum einer Drehung unterwerfen, welche durch den Drehvektor $\delta\boldsymbol{\Phi}$ dargestellt wird. Für die dabei eintretende Änderung der Koordinaten gilt weiterhin Gl. (6). Bei den veränderten Koordinaten finden wir einen um

$$\delta\psi = \sum_k \frac{\partial\psi}{\partial q_k}\,\delta q_k \tag{8}$$

veränderten Funktionswert vor. Wir definieren nun einen zu $\delta\boldsymbol{\Phi}$ gehörenden Drehoperator $D(\delta\boldsymbol{\Phi})$ durch die Forderung, daß er die entsprechenden Teile des Funktionsbildes so verschiebt, daß sich gegenüber der ursprünglichen Funktion an jeder Stelle das obige $\delta\psi$ ergibt:

$$D(\delta\boldsymbol{\Phi})\,\psi(q) = \psi(q+\delta q) = \psi(q) + \delta\psi\,. \tag{9}$$

Da es sich um eine infinitesimale Drehung handelt, können wir mit derselben Begründung wie in der klassischen Mechanik schreiben

$$\begin{aligned} D(\delta\boldsymbol{\Phi}) &= 1 + \delta\Phi_\xi\,\Omega_\xi + \delta\Phi_\eta\,\Omega_\eta + \delta\Phi_\zeta\,\Omega_\zeta \\ &= 1 + \delta\,\boldsymbol{\Phi}\cdot\boldsymbol{\Omega}. \end{aligned} \tag{10}$$

Aus den drei vorhergehenden Beziehungen zusammen mit den in (6) gegebenen Ausdrücken für δq_k erhält man sofort

$$\Omega_\lambda = \sum_k g_{\lambda k}(q)\,\frac{\partial}{\partial q_k}\,, \qquad \lambda = \xi, \eta, \zeta. \tag{11}$$

Die vollkommene Analogie zwischen den Ausdrücken (7) und (11) ist offensichtlich: Wir erhalten die Ω_λ, indem wir in den Ausdrücken für die F_λ die Größen p_k durch die Operatoren $\partial/\partial q_k$ ersetzen, und zwar gilt diese Übersetzungsvorschrift für ganz beliebige Koordinaten q_k und Zerlegung auf ein beliebiges Achsenkreuz – wobei das letztere durchaus auch in irgendeiner Weise an das betrachtete System „gebunden" sein kann. Die Reihenfolge der Funktionen $g_{\lambda k}$ und der Operatoren $\partial/\partial q_k$ ergibt sich aus der Herleitung völlig eindeutig.

Es ist wohl bekannt, daß man von den Operatoren Ω_λ zu den eigentlichen Drehimpulsoperatoren L_λ gelangt, indem man ihnen noch einen Faktor $\hbar/i$ hinzufügt.

3. Operatoren höherer Ordnung

Die im vorigen Abschnitt dargelegte Analogie zwischen den klassischen und wellenmechanischen Ausdrücken gilt, wie aus der Herleitung hervorgeht, ganz allgemein für solche Ausdrücke, die in den Impulsen bzw. den Differentialoperatoren linear sind. Während jedoch auf der klassischen Seite keine weiteren Probleme auftreten, wenn es sich darum handelt, aus den F_λ beispielsweise quadratische Größen aufzubauen, treten auf der wellenmechanischen Seite neue Züge auf, da eine Funktion $g_{\lambda k}$ mit dem Differentialoperator $\partial/\partial q_k$ dann nicht vertauschbar ist, wenn $g_{\lambda k}$ die Koordinate q_k enthält. Quadratische Bildungen dieser Art kommen in den Vertauschungsrelationen zwischen den Komponenten L_λ sowie bei der Bildung von L^2 vor. Wir verweisen dazu auf die folgenden Beispiele.

4. Beispiele und Anwendungen

a) Als erstes Beispiel fragen wir nach dem Drehimpuls eines einzigen Massenpunktes, der durch sphärische Polarkoordinaten r, α, β beschrieben wird (Abb. 1). Das $\xi\eta\zeta$-System, auf dessen Achsen wir den Drehimpuls zerlegen, soll mit dem raumfesten XYZ-System zusammenfallen, in welchem r, α, β definiert sind.

Für die Koordinatenänderungen erhält man aus einfachen geometrischen Überlegungen

$$\begin{aligned}\delta r &= \sum_\lambda g_{\lambda r}\,\delta\Phi_\lambda = 0\,,\\ \delta\alpha &= \sum_\lambda g_{\lambda\alpha}\,\delta\Phi_\lambda = -\cot\beta\cos\alpha\,\delta\Phi_\xi\\ &\qquad -\cot\beta\sin\alpha\,\delta\Phi_\eta + \delta\Phi_\zeta\,,\\ \delta\beta &= \sum_\lambda g_{\lambda\beta}\,\delta\Phi_\lambda = -\sin\alpha\,\delta\Phi_\xi + \cos\alpha\,\delta\Phi_\eta\,.\end{aligned}$$

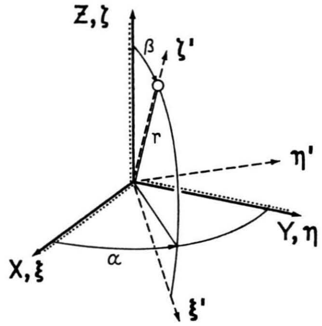

Abb. 1.

Die klassischen Drehimpulskomponenten lauten also gemäß (7)

$$\begin{aligned}F_\xi &\equiv F_X = -\sin\alpha\,p_\beta - \cot\beta\cos\alpha\,p_\alpha\,,\\ F_\eta &\equiv F_Y = \cos\alpha\,p_\beta - \cot\beta\sin\alpha\,p_\alpha\,,\\ F_\zeta &\equiv F_Z = p_\alpha\,,\end{aligned}$$

wobei p_α und p_β die zu α und β kanonisch konjugierten Impulse sind. Mit Hilfe der oben angegebenen Übersetzungsvorschrift $p_k \to \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial q_k}$ ergeben sich daraus die Drehimpulsoperatoren

$$\begin{aligned}L_\xi &\equiv L_X = \frac{\hbar}{i}\left(-\sin\alpha\frac{\partial}{\partial\beta} - \cot\beta\cos\alpha\frac{\partial}{\partial\alpha}\right),\\ L_\eta &\equiv L_Y = \frac{\hbar}{i}\left(\cos\alpha\frac{\partial}{\partial\beta} - \cot\beta\sin\alpha\frac{\partial}{\partial\alpha}\right),\\ L_\zeta &\equiv L_Z = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\alpha}\,.\end{aligned}$$

Die Vertauschungsrelationen haben die übliche Form $L_X L_Y - L_Y L_X = -\frac{\hbar}{i} L_Z$ und zyklisch. Ferner erhält man

$$L_\xi^2 + L_\eta^2 + L_\zeta^2 = -\hbar^2\left(\frac{\partial^2}{\partial\beta^2} + \cot\beta\frac{\partial}{\partial\beta} + \frac{1}{\sin^2\beta}\frac{\partial^2}{\partial\alpha^2}\right). \tag{12}$$

Der rechtsstehende Ausdruck ist der bekannte Operator L^2 des Drehimpulsquadrates. Er hängt jedoch, wie vorauszusehen war, mit der entsprechenden klassischen Größe

$$F^2 = F_\xi^2 + F_\eta^2 + F_\zeta^2 = p_\beta^2 + \frac{1}{\sin^2\beta}p_\alpha^2 \tag{13}$$

nicht mehr über die einfache Übersetzungsvorschrift zusammen.

b) In manchen Fällen wird durch die innere Konfiguration eines Systems die Einführung eines „systemgebundenen" Achsenkreuzes nahegelegt. Schon der einzelne Massenpunkt erlaubt einen ersten Schritt in dieser Richtung, indem wir z. B. ein Achsenkreuz $\xi'\eta'\zeta'$ wie in Abb. 1 einführen. Die ζ'-Achse zeigt dabei vom Ursprung zum Massenpunkt, die ξ'-Achse liegt in der durch die Z- und ζ'-Achse definierten Meridianebene. Für die infinitesimalen Koordinatenänderungen erhalten wir in diesem Fall

$$\delta r = 0, \quad \delta\alpha = -\frac{1}{\sin\beta}\,\delta\Phi_{\xi'}, \quad \delta\beta = \delta\Phi_{\eta'}. \tag{14}$$

Damit ergeben sich die Drehimpulsoperatoren

$$L_{\xi'} = -\frac{\hbar}{i}\,\frac{1}{\sin\beta}\,\frac{\partial}{\partial\alpha}, \quad L_{\eta'} = \frac{\hbar}{i}\,\frac{\partial}{\partial\beta}, \quad L_{\zeta'} = 0. \tag{15}$$

Schon die dritte Gleichung zeigt, daß die üblichen Vertauschungsrelationen für Drehimpulskomponenten nicht mehr gelten. Die Quadratsumme der Komponenten liefert in diesem Fall:

$$L_{\xi'}^2 + L_{\eta'}^2 + L_{\zeta'}^2 = -\hbar^2\left(\frac{\partial^2}{\partial\beta^2} + \frac{1}{\sin^2\beta}\,\frac{\partial^2}{\partial\alpha^2}\right). \tag{16}$$

Dieser Operator würde sich zwar mit der oben angegebenen Übersetzungsvorschrift aus dem klassischen Ausdruck (13) unmittelbar ergeben. Ein Vergleich mit (12) zeigt jedoch, daß ihm ein wesentlicher Bestandteil des „echten" Drehimpulsoperators, nämlich das Glied $-\hbar^2\cot\beta(\partial/\partial\beta)$, fehlt. Infolgedessen läßt sich dieser Operator bzw. das hier verwendete Koordinatensystem für die bekannte Lösungstheorie drehinvarianter Systeme nicht einsetzen.

Unser Beispiel zeigt also, daß sich ein mitgeführtes Bezugssystem nicht ohne weiteres für die Komponentendarstellung von Drehimpulsoperatoren eignet. Der nächste Punkt gibt jedoch einen speziellen für die Anwendung wichtigen Fall, wo sich ein systemgebundenes Koordinatensystem sinnvoll verwenden läßt.

c) In engem Anschluß an b) betrachten wir jetzt statt des einzelnen Massenpunktes ein ausgedehntes Gebilde, welches uns erlaubt, eine ξ''-Achse vermittels der inneren Struktur des Gebildes, also unabhängig von der raumfesten Z-Achse, einzuführen. Neben den schon vorhandenen Winkeln α, β tritt dann ein weiterer Winkel γ auf, der angibt, wie die nunmehr durch die Struktur des Körpers definierte ξ''-Achse gegenüber der in b) eingeführten ξ'-Achse (um die ζ'-Achse) verdreht ist. Die drei Winkel α, β, γ sind dann die üblichen Eulerschen Winkel, durch welche die Orientierung des systemgebundenen Achsenkreuzes gegenüber dem raumfesten XYZ-System bestimmt ist.

Die einzelnen Schritte zur Bestimmung der Komponenten des Drehimpulsoperators sind dieselben wie in den beiden vorangehenden Beispielen. Mit den Koordinatenänderungen bei infinitesimalen Drehungen um die ξ''-, η'- bzw. ζ'-Achse,

$$\begin{aligned}
\delta\alpha &= -\frac{\cos\gamma}{\sin\beta}\,\delta\Phi_{\xi''} + \frac{\sin\gamma}{\sin\beta}\,\delta\Phi_{\eta'}, \\
\delta\beta &= \sin\gamma\,\delta\Phi_{\xi''} + \cos\gamma\,\delta\Phi_{\eta'}, \\
\delta\gamma &= \cot\beta\cos\gamma\,\delta\Phi_{\xi''} - \cot\beta\sin\gamma\,\delta\Phi_{\eta'} + \delta\Phi_{\zeta'},
\end{aligned} \tag{17}$$

gelangen wir zu den entsprechenden Operatoren

$$\begin{aligned}
L_{\xi''} &= \frac{\hbar}{i}\left(\sin\gamma\,\frac{\partial}{\partial\beta} - \frac{\cos\gamma}{\sin\beta}\,\frac{\partial}{\partial\alpha} + \cot\beta\cos\gamma\,\frac{\partial}{\partial\gamma}\right), \\
L_{\eta'} &= \frac{\hbar}{i}\left(\cos\gamma\,\frac{\partial}{\partial\beta} + \frac{\sin\gamma}{\sin\beta}\,\frac{\partial}{\partial\alpha} - \cot\beta\sin\gamma\,\frac{\partial}{\partial\gamma}\right), \\
L_{\zeta'} &= \frac{\hbar}{i}\,\frac{\partial}{\partial\gamma}.
\end{aligned} \tag{18}$$

Diese Ausdrücke gehen, wie man sich auch geometrisch überlegen kann, durch die Substitutionen $\alpha \to \pi - \gamma$, $\beta \to \beta$, $\gamma \to \pi - \alpha$ und ein durchgehend anzubringendes zusätzliches Minuszeichen in die raumfesten Komponenten über. Dies beruht auf der durch die Eulerschen Winkel gegebenen symmetrischen Verknüpfung der beiden Koordinatensysteme.

Als Vertauschungsrelationen erhalten wir

$$L_{\xi''}\,L_{\eta'} - L_{\eta'}\,L_{\xi''} = \frac{\hbar}{i}\,L_{\zeta'} \text{ und zyklisch;} \tag{19}$$

sie unterscheiden sich von den üblichen Vertauschungsrelationen der auf raumfeste Achsen bezogenen Operatoren um ein Minuszeichen auf der rechten Seite [2]. Dieser Vorzeichenunterschied beruht nicht auf speziellen Eigenschaften der Eulerschen Winkel, sondern ist rein geometrisch-kinematischer Art. Er hat seine Korrespondenz im Verhalten der Poisson-Klammern der klassischen Drehimpulskomponenten.

Der Operator

$$L_{\xi''}^2 + L_{\eta'}^2 + L_{\zeta'}^2 = -\hbar^2\left[\frac{\partial^2}{\partial\beta^2} + \cot\beta\,\frac{\partial}{\partial\beta} + \frac{1}{\sin^2\beta}\left(\frac{\partial^2}{\partial\alpha^2} - 2\cos\beta\,\frac{\partial^2}{\partial\alpha\,\partial\gamma} + \frac{\partial^2}{\partial\gamma^2}\right)\right] \tag{20}$$

stimmt mit dem Operator $L^2 = L_X{}^2 + L_Y{}^2 + L_Z{}^2$ überein.

Die in (19) und (20) zusammengefaßten Eigenschaften machen es möglich, die auf das vorliegende mitbewegte Achsenkreuz bezogenen Drehimpulsoperatoren bei der Lösung wellenmechanischer Probleme einzusetzen. Ein bekanntes Beispiel hierfür

[2] O. KLEIN, Z. Phys. **58**, 730 [1929].

ist die wellenmechanische Theorie des Kreisels [3]. Die SCHRÖDINGERsche Übersetzungsvorschrift der klassischen Hamilton-Funktion liefert einen Hamilton-Operator, der sich bei näherer Untersuchung als der Ausdruck

$$H = \frac{1}{2\,\Theta_1} L_1{}^2 + \frac{1}{2\,\Theta_2} L_2{}^2 + \frac{1}{2\,\Theta_3} L_3{}^2$$

erweist. Darin sind Θ_1, Θ_2, Θ_3 die Hauptträgheitsmomente des Kreisels, L_1, L_2, L_3 die auf die entsprechenden Achsen bezogenen Drehimpulsoperatoren nach (18). Die physikalische Natur des Hamilton-Operators ist damit unmittelbar durchsichtig.

d) Mehrteilchensysteme, methodische Möglichkeiten. Die Aufstellung des Hamilton-Operators für ein Mehrteilchensystem kann grundsätzlich auf zwei Arten erfolgen: Man kann entweder die klassische, kartesisch dargestellte Hamilton-Funktion in oft sehr mühsamer Weise auf die neuen Koordinaten und die zugehörigen Impulse umrechnen und dann mit der SCHRÖDINGERschen Vorschrift zu dem entsprechenden Operator übergehen. Oder man kann den Operator in kartesischen Koordinaten aufstellen und diesen nunmehr, wiederum oft in äußerst mühsamer Arbeit, auf die neuen Variablen umrechnen – wobei meist die physikalische Einsicht in die Bedeutung der einzelnen Teile verloren geht. Unsere Überlegungen geben nun die Möglichkeit, die klassische Hamilton-Funktion in sehr viel direkterer Weise in den gewählten Koordinaten anzuschreiben. Man geht dazu so vor, daß man den kinetischen Energieanteil des Systems soweit wie möglich in translatorische und rotatorische Bestandteile aufspaltet – was je nach Wahl der Koordinaten in verschiedener Weise möglich sein wird. Die rotatorischen Bestandteile lassen sich dann durch entsprechende Teildrehimpulse darstellen, die sich nach unserem Verfahren in einfacher Weise sofort in kanonischer Darstellung ergeben. Es bleibt dann die – meist nicht allzu schwierige – Aufgabe, die gewonnene Hamilton-Funktion nach SCHRÖDINGER [1] in den entsprechenden Operator umzuwandeln, wobei auch die physikalische Bedeutung der einzelnen Anteile ständig sichtbar bleibt.

Anwendungsmöglichkeiten ergeben sich in der Atom-, Molekül- und Kernphysik. Auf diese soll in weiteren Untersuchungen eingegangen werden.

[3] C. VAN WINTER, Physica **20**, 274 [1954].