# Übungen zur Vorlesung Theoretische Chemie I
# WS 2018/19 – Übungsblatt 8

**Ausgabe: Freitag 7. Dezember, Besprechung: Freitag 14. Dezember**

1. Die Winkelbewegung eines Teilchens der Masse $M$ auf einem Kreisring mit Radius $r$ lässt sich durch die folgende Schrödingergleichung beschreiben:

$$-\frac{\hbar^2}{2I}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\varphi^2}\psi(\varphi) = E\psi(\varphi) \tag{1}$$

   wobei $I = Mr^2$ als Trägheitsmoment bezeichnet wird.

   a) Zeigen Sie, dass

$$\psi(\varphi) = c_+\psi_+(\varphi) + c_-\psi_-(\varphi) = c_+A_+\exp(+\mathrm{i}m_l\varphi) + c_-A_-\exp(-\mathrm{i}m_l\varphi)$$

   eine Lösung der Schrödingergleichung (1) ist. Welche Werte kann $m_l$ ohne die Annahme einer Randbedingung annehmen?

   b) Im Falle eines Teilchens auf einem Kreisring muss die Wellenfunktion $\psi(\varphi)$ die zyklische Randbedingung $\psi(\varphi) = \psi(\varphi + 2\pi)$ erfüllen. (Dies folgt direkt aus der Stetigkeitsbedingung. Warum?) Zeigen Sie, dass diese Randbedingung zu einer Quantisierung führt, d.h., dazu, dass $m_l$ nur die diskreten Werte $m_l = \pm l$ mit $l \in \mathbb{N}^0$ annehmen kann.

   c) Betrachten Sie nun die Wellenfunktionen $\psi_\pm(\varphi) = A_\pm\exp(\pm\mathrm{i}m_l\varphi)$ getrennt und normieren Sie diese, d.h., bestimmen Sie die Normierungskonstante $A_\pm$ so, dass,

$$\int_0^{2\pi}\psi_\pm^*(\varphi)\psi_\pm(\varphi)\mathrm{d}\varphi = 1$$

   (Rationalisieren Sie die Wahl der Integrationsgrenzen!)

   d) Zeigen Sie, dass die Wellenfunktionen $\psi_\pm(\varphi)$ Eigenfunktionen des Drehimpulsoperators $\hat{l}_z = -\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\varphi}$ sind. Wie lauten die entsprechenden Eigenwerte?

   e) Was ist die physikalische Bedeutung der Lösungen $\psi_\pm(\varphi) = A_\pm\exp(\pm\mathrm{i}m_l\varphi)$? Vergleichen Sie mit einem klassischen Teilchen, das im oder gegen den Uhrzeigersinn rotiert.

**Fortsetzung auf der nächsten Seite!**

2. In Polarkoordinaten lautet die Schrödingergleichung für ein Teilchen in einem zweidimensionalen kreisförmigen Potentialtopf mit Radius $a$ und unendlich hohen Wänden

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2}+\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}+\frac{1}{r^2}\frac{\partial^2}{\partial \phi^2}\right)\Psi(r,\phi)=E\Psi(r,\phi) \tag{2}$$

wobei die Wellenfunktion $\Psi(r,\phi)$ für alle Werte von $\phi$ die Randbedingung

$$\Psi(a,\phi)=0$$

erfüllen muss.

a) Schreiben Sie die Schrödingergleichung (2) mit Hilfe der $z$-Komponente $\hat{l}_z$ des Drehimpulsoperators um.

b) Geben Sie die Eigenfunktionen $\Phi_{m_l}(\phi)$ und Eigenwerte von $\hat{l}_z$ an.

c) Welche Gleichung ergibt sich für den Radialanteil $R_{m_l}(r)$, wenn man in die Schrödingergleichung (2) den Separationsansatz $\Psi_{m_l}(r,\phi)=R_{m_l}(r)\Phi_{m_l}(\phi)$ einsetzt? Wie sieht diese Gleichung im Fall $m_l=0$ aus?
(*Anleitung:* Wenden Sie den $\phi$-abhängigen Teil des Hamiltonoperators auf $\Phi_{m_l}(\phi)$ an, um anschließend $\Phi_{m_l}(\phi)$ „ausintegrieren“ zu können.)
Die Lösungen der Gleichung für den Radialanteil sind dann wie folgt durch die Besselfunktionen erster Art, $J_{m_l}$, gegeben, siehe Abbildung 1:

$$R_{m_l}(r)=J_{m_l}(kr) \qquad , \qquad k=\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

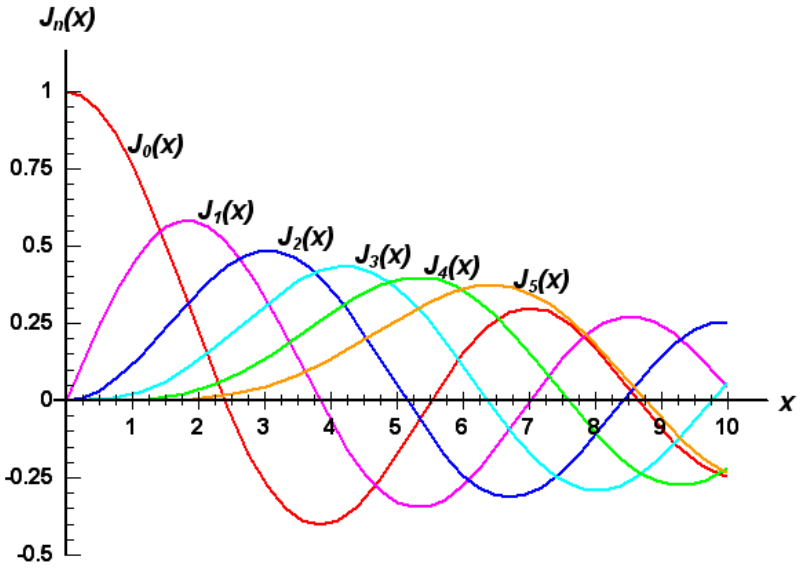


Abbildung 1: Die ersten sechs Besselfunktionen.