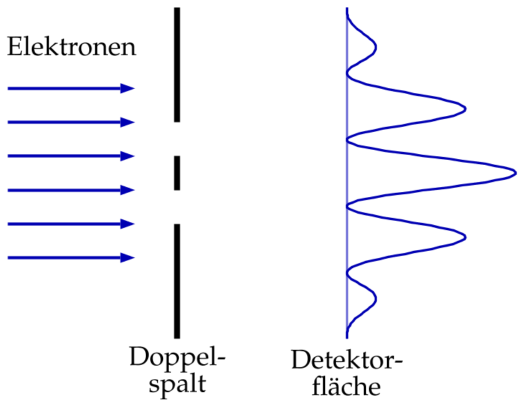
Übungen zur Vorlesung Theoretische Chemie I
WS 2018/19 – Übungsblatt 2

Ausgabe: Freitag 19. Oktober, Besprechung: Freitag 26. Oktober

1. Das Doppelspaltexperiment an einem Elektronenstrahl (siehe Abbildung) illustriert den Welle-Teilchen-Dualismus. Die Wellenfunktion des Elektrons lässt sich nach Durchlaufen des Doppelspalts als Überlagerung (Superposition) zweier Komponenten schreiben: $\Psi(x) = \psi_1(x) + \psi_2(x)$.



   a) Wie lautet die Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte $P(x) = |\Psi(x)|^2$ des Elektrons?

   b) Warum gilt $P(x) \neq |\psi_1(x)|^2 + |\psi_2(x)|^2$?

   c) Gegeben seien die Funktionen $f(x) = \mathrm{e}^{-x}$ und $g(x) = x^2\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}x}$, $x \in \mathbb{R}^+$. Visualisieren Sie $f(x)$, $g(x)$, $f(x) + g(x)$, $|f(x)|^2$, $|g(x)|^2$, $|f(x)|^2 + |g(x)|^2$, $|f(x) + g(x)|^2$.

2. Betrachten Sie die folgende Wahrscheinlichkeitsverteilung

$$P(x) = N \exp\left(-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}\right) \tag{1}$$

   Normieren Sie diese Wahrscheinlichkeitsverteilung, d.h., bestimmen Sie N, so dass gilt:

$$\int_{-\infty}^{\infty} P(x)\mathrm{d}x = 1 \tag{2}$$

   Erläutern Sie die anschauliche Bedeutung von Gleichung (2).

Fortsetzung auf der Rückseite!

3. Betrachten Sie die folgende Wahrscheinlichkeitsverteilung

$$P(x) = \frac{1}{\sqrt{8\pi\sigma^2}} \left(\exp\left(-\frac{x^2}{2\sigma^2}\right) + \exp\left(-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}\right) \right) \tag{3}$$

Bestimmen Sie den Erwartungswert $\langle x \rangle$ dieser Wahrscheinlichkeitsverteilung gemäß

$$\langle x \rangle = \int\limits_{-\infty}^{\infty} x P(x) \mathrm{d}x \tag{4}$$

Stellen Sie $P(x)$ für $\sigma = 0.5$ und $\mu = 4.0$ graphisch dar und erläutern Sie anhand ihrer Darstellung die anschauliche Bedeutung von $\langle x \rangle$.

Hilfreiche Formeln

$$\int\limits_{-\infty}^{\infty} \exp(-ax^2) \mathrm{d}x = \sqrt{\frac{\pi}{a}} \qquad , \qquad a \in \mathbb{R}^+$$

$$\int\limits_{-\infty}^{\infty} x \exp(-ax^2) \mathrm{d}x = 0 \qquad , \qquad a \in \mathbb{R}^+$$