Lösung des Übungsblattes 2 zur Vorlesung Theoretische Chemie I
WS 2018/19 – Übungsblatt 2

1. $\Psi(x) = \psi_1(x) + \psi_2(x)$

   a)

$$
\begin{aligned}
P(x) &= |\Psi(x)|^2 = \Psi^*(x) \cdot \Psi(x) \\
&= [\psi_1(x) + \psi_2(x)]^* [\psi_1(x) + \psi_2(x)] \\
&= [\psi_1^*(x) + \psi_2^*(x)] [\psi_1(x) + \psi_2(x)] \\
&= \psi_1^*(x)\psi_1(x) + \psi_1^*(x)\psi_2(x) + \psi_2^*(x)\psi_1(x) + \psi_2^*(x)\psi_2(x) \\
&= |\psi_1(x)|^2 + |\psi_2(x)|^2 + \psi_1^*(x)\psi_2(x) + \psi_2^*(x)\psi_1(x)
\end{aligned}
$$

   b) $P(x) \neq |\psi_1(x)|^2 + |\psi_2(x)|^2$ weil die Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte in Aufgabe 1.(a) vier Terme enthält. Die zuzätlichen Ausdrücke, die Interferenzeffekte berücksichtigen, werden auch in der Quantenmechanik berücksichtigt.

   c) $f(x) = \mathrm{e}^{-x}$ und $g(x) = x^2\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}x}$, $x \in \mathbb{R}^+$.

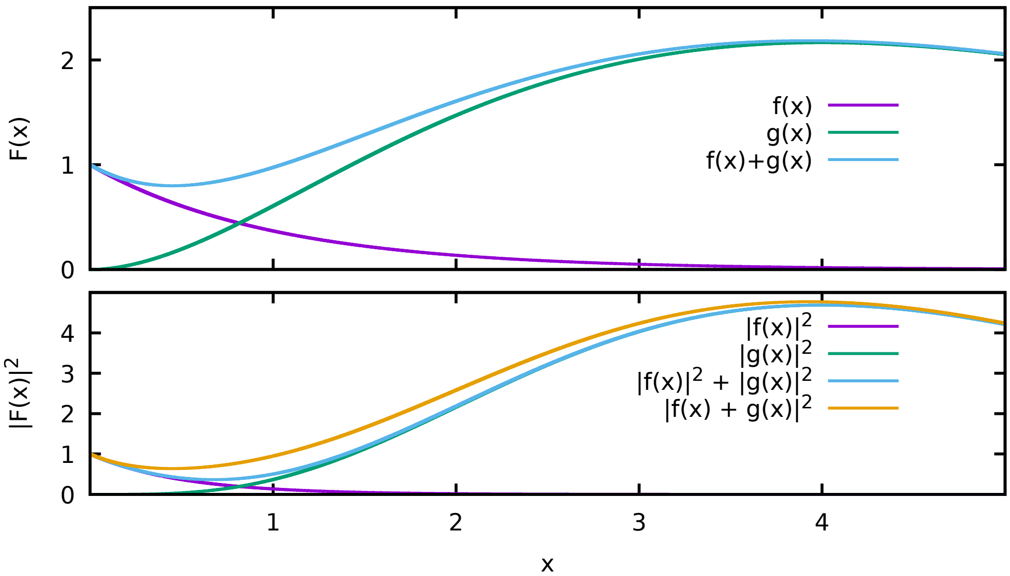
$$f(x) + g(x) = e^{-x} + x^2 e^{-\frac{1}{2}x}$$

$$|f(x)|^2 = (e^{-x})^2 = e^{-2x}$$

$$|g(x)|^2 = (x^2 e^{-\frac{1}{2}x})^2 = x^4 e^{-x}$$

$$|f(x)|^2 + |g(x)|^2 = e^{-2x} + x^4 e^{-x}$$

$$|f(x) + g(x)|^2 = (e^{-x} + x^2 e^{-\frac{1}{2}x})^2 = e^{-2x} + x^4 e^{-x} + 2x^2 e^{-\frac{3}{2}x}$$



2.

$$P(x) = Ne^{-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}} \tag{1}$$

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

$$N \int\limits_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}}\,\mathrm{d}x = 1 \tag{3}$$

Sei $x - \mu = v$. Dann $dx = dv$. Aus Gl.(3)

$$N \int\limits_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{v^2}{2\sigma^2}}\,\mathrm{d}v = 1$$

$$N \int\limits_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{1}{2\sigma^2}v^2}\,\mathrm{d}v = 1$$

$$N\sqrt{\frac{\pi}{\frac{1}{2\sigma^2}}} = 1$$

$$N\sigma\sqrt{2\pi} = 1$$

$$\therefore N = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}}$$

Gleichung (2) bedeutet, dass die Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion $P(x)$ normiert ist. Die Summe über alle Möglichkeiten in der gegebenen Wahrscheinlichkeitsdichte ist gleich 1.

3.

$$P(x) = \frac{1}{\sqrt{8\pi\sigma^2}}\left[e^{-\frac{x^2}{2\sigma^2}} + e^{-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}}\right] \tag{4}$$

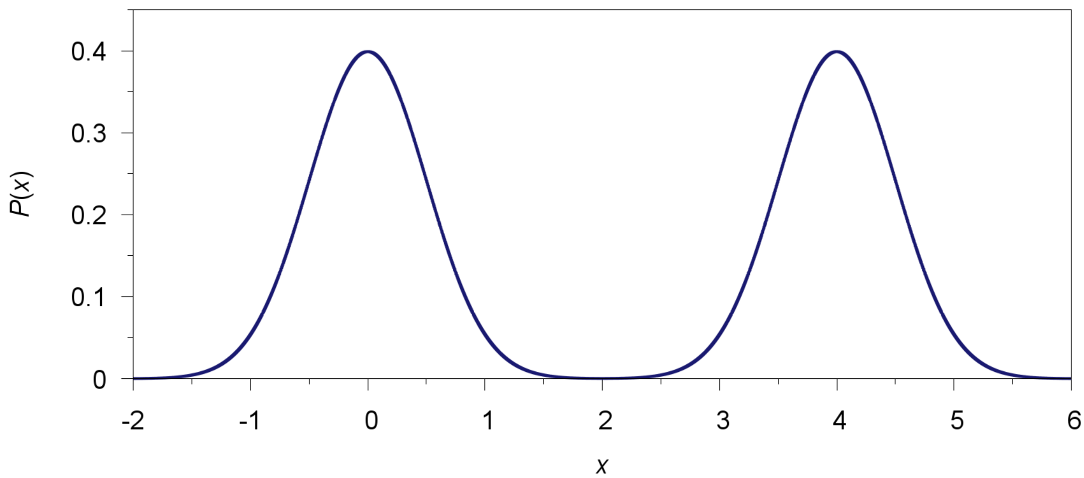
$$\begin{aligned}
\langle x\rangle &= \int\limits_{-\infty}^{\infty} xP(x)\,\mathrm{d}x \\
&= \frac{1}{\sqrt{8\pi\sigma^2}} \int\limits_{-\infty}^{\infty} x\left[e^{-\frac{x^2}{2\sigma^2}} + e^{-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}}\right]\mathrm{d}x \\
&= \frac{1}{\sqrt{8\pi\sigma^2}}\left[\int\limits_{-\infty}^{\infty} \underbrace{xe^{-\frac{x^2}{2\sigma^2}}\,\mathrm{d}x}_{=0} + \int\limits_{-\infty}^{\infty} xe^{-\frac{(x-\mu)}{2\sigma^2}}\,\mathrm{d}x\right] \\
&= \frac{1}{\sqrt{8\pi\sigma^2}} \int\limits_{-\infty}^{\infty} xe^{-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}}\,\mathrm{d}x
\end{aligned} \tag{5}$$

Sei $x - \mu = v$. Dann $\mathrm{d}x = \mathrm{d}v$ und $x = v + \mu$. Gl.(5) wird

$$\begin{aligned}
\langle x \rangle &= \frac{1}{\sqrt{8\pi\sigma^2}} \int\limits_{-\infty}^{\infty} (v+\mu)\, e^{-\frac{v^2}{2\sigma^2}}\, \mathrm{d}v \\
&= \frac{1}{\sqrt{8\pi\sigma^2}} \left[\int\limits_{-\infty}^{\infty} \underbrace{ve^{-\frac{v^2}{2\sigma^2}}\, \mathrm{d}v}_{=0} + \int\limits_{-\infty}^{\infty} \mu e^{-\frac{v^2}{2\sigma^2}}\, \mathrm{d}v \right] \\
&= \frac{\mu}{\sqrt{8\pi\sigma^2}} \int\limits_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{v^2}{2\sigma^2}}\, \mathrm{d}v \\
&= \frac{\mu}{\sqrt{8\pi\sigma^2}} \sqrt{\frac{\pi}{\frac{1}{2\sigma^2}}} \\
&= \frac{\mu}{2}
\end{aligned}$$

Für $\sigma = 0.5$ und $\mu = 4.0$,

$$\langle x \rangle = \frac{\mu}{2} = 2$$



$\langle x \rangle$ bedeutet hier, dass der Durchschnitt aller möglichen Ergebnisse der Messung in der Wahrscheinlichkeitsverteilung 2 ist, obwohl die wahrscheinlichtsten Werte $x = 0$ und $x = 4$ sind. Jedoch ist die Wahrscheinlichkeit von $x = 2$ nahe bis Null.