Übungen zur Quantenphysik

Serie 10: Partielle Integration und Normierung

1. *Training der partiellen Integration*

Musterbeispiel: Wir betrachten das folgende Integral:

$$\int_1^e x \ln x \, \mathrm{d}x = ?$$

Exemplarische Gedankenschritte bei der partiellen Integration:

i. Zunächst bemerken wir, dass es sich beim Integranden (= Funktion, über die integriert wird) um ein **Produkt zweier Funktionen** von x handelt, nämlich x und $\ln x$. Wäre der Integrand kein Produkt zweier Funktionen der Variable x, so bräuchten wir gar nicht erst über partielle Integration nachdenken.

ii. Es wäre schön, den $\ln x$ irgendwie loszuwerden, denn das Produkt mit diesem Logarithmus sieht echt ungewohnt zu integrieren aus.

iii. **Idee:** Wir erkennen x als Ableitung von $u(x) = \frac{x^2}{2}$. D.h., wir können diesen Teil der Gesamtfunktion partiell integrieren und müssen dafür beim Restterm die Funktion $v(x) = \ln x$ ableiten. Das stört uns aber überhaupt nicht, denn genau so werden wir $\ln x$ los, weil $[\ln x]' = \frac{1}{x}$.

Hier die konkrete Ausführung mit $u(x) = \frac{x^2}{2}$ und $v(x) = \ln x$:

$$\text{Allgemein:} \quad \int_a^b u'(x)v(x) = u(x)v(x)\Big|_a^b - \int_a^b u(x)v'(x)$$

$$\text{Im Beispiel:} \quad \int_1^e x \ln x \, \mathrm{d}x = \left(\frac{x^2}{2} \cdot \ln x\right)\Bigg|_1^e - \int_1^e \frac{x^2}{2} \cdot \frac{1}{x} \, \mathrm{d}x$$

$$= \frac{e^2}{2} \cdot 1 - \frac{1}{2} \cdot 0 - \int_1^e \frac{x}{2} \, \mathrm{d}x = \frac{e^2}{2} - \frac{x^2}{4}\Bigg|_1^e = \ldots = \frac{e^2+1}{4}$$

Berechne nun die folgenden Integrale mittels partieller Integration:

(a) $\displaystyle\int_1^e x^2 \ln x \, \mathrm{d}x$ (b) $\displaystyle\int_0^1 x^2 e^x \, \mathrm{d}x$ (c) $\displaystyle\int_0^{+\infty} x\, e^{-x} \, \mathrm{d}x$

(d) $\displaystyle\int_0^{+\infty} x\, e^{-\mu x} \, \mathrm{d}x$ (e) $\displaystyle\int_0^{+\infty} x^2\, e^{-\mu x} \, \mathrm{d}x$ (f) $\displaystyle\int_0^{\pi/2} \sin x \, \cos x \, \mathrm{d}x$

Zu (b): Man darf durchaus mehrmals nacheinander partiell integrieren...

Zu (c) bis (e): Für alle $n \in \mathbb{N}$ und $\mu > 0$ gilt: $\lim_{x\to\infty} \left(x^n\, e^{-\mu x}\right) = 0$.
Das exponentielle Abfallverhalten $e^{-\mu x}$ "siegt" über jede noch so hohe Potenz x^n ($n \in \mathbb{N}$).

Zu (c): Mögliche lineare Substitution: $y = -x$ mit $\mathrm{d}x = -\mathrm{d}y$.

Zu (d)+(e): Es soll $\mu > 0$ sein. Warum nicht mit der linearen Substitution $y = -\mu x$ arbeiten?!

Zu (f): Vermutlich kennst du andere Wege dieses Integral zu berechnen (z.B. den Sinus als Ableitung des Cosinus ansehen). Die Idee ist aber, dass du es hier explizit mit einer partiellen Integration versuchst – denn das ist besonders interessant.

Hinweis: Zur Überprüfung sind die richtigen Resultate am Ende der Serie angegeben.

2. *Plausibilisierungen rund um den Beweis der Normierungserhaltung*

   Aus dem Beweis der Normierungserhaltung (Griffiths, p. 34f) möchten wir in dieser Aufgabe zwei Schritte etwas besser verstehen.

   (a) Zu Beginn des Beweises wird die Ableitung nach der Zeit, die eigentlich vor dem Integralzeichen steht, einfach ins Integral hineingenommen:

   $$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(x,t)|^2 \,\mathrm{d}x = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial}{\partial t} |\Psi(x,t)|^2 \,\mathrm{d}x$$

   Wir wollen an einem willkürlichen Beispiel ($f(x,t) = A \cdot \frac{t^2}{x^2}$) nachvollziehen, dass eine derartige Vertauschung des örtlichen Integrals ($\int \ldots \mathrm{d}x$) und der zeitlichen Ableitung ($\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}$) in aller Regel problemlos funktioniert. Zeige dazu, dass die folgenden beiden Ausdrücke identisch sind, indem du sie in der vorgegebenen Reihenfolge integrierst und ableitest:

   $$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\int_{1}^{+\infty} A \cdot \frac{t^2}{x^2}\,\mathrm{d}x \qquad \text{und} \qquad \int_{1}^{+\infty} \frac{\partial}{\partial t}\left(A \cdot \frac{t^2}{x^2}\right)\mathrm{d}x$$

   (b) Im Beweis wird das Konjugiert-Komplexe der Schrödingergleichung verwendet (Übergang von (1.23) zu (1.24)). Offenbar werden dabei einfach alle i's mit einem Minuszeichen versehen und von der Wellenfunktion Ψ – der Funktionswert $\Psi(x,t)$ ist eine komplexe Zahl – wird stets das komplex Konjugierte Ψ^* notiert. Ist das so in Ordnung?

   Wir wollen uns die Richtigkeit dieses Vorgehens plausibel machen. Für drei komplexe Zahlen z_1, z_2 und z_3 gelte:

   $$z_1 = \mathrm{i}z_2 - \mathrm{i}z_3$$

   Zeige, dass dann auch gilt:

   $$z_1^* = -\mathrm{i}z_2^* + \mathrm{i}z_3^*$$

   Tipp: Notiere zuerst alle drei komplexen Zahlen in der Summenschreibweise $z = x + y\mathrm{i}$.

3. *Eine erste komplexwertige Wellenfunktion*

   Löse die **Aufgabe 1.5** auf Seite 35f im QM-Buch von Griffiths.

   Tipp 1: Das Integrieren sieht im ersten Moment kompliziert aus, wird aber mit $|\Psi|^2 = \Psi^*\Psi$ sofort einfacher, wie ich am Beispiel der Normierungsaufgabe (a) im Ansatz vorzeigen möchte:

   $$\int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(x,t)|^2 \,\mathrm{d}x \overset{\text{i.}}{=} \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(x,t)\ \Psi(x,t)\,\mathrm{d}x \overset{\text{ii.}}{=} \int_{-\infty}^{+\infty} A\,e^{-\lambda|x|}\,e^{\mathrm{i}\omega t} \cdot A\,e^{-\lambda|x|}\,e^{-\mathrm{i}\omega t}\,\mathrm{d}x$$

   $$\overset{\text{iii.}}{=} A^2 \cdot \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\lambda|x|-\lambda|x|} \cdot e^{\mathrm{i}\omega t - \mathrm{i}\omega t}\,\mathrm{d}x \overset{\text{iv.}}{=} A^2 \cdot \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-2\lambda|x|}\,\mathrm{d}x \overset{\text{v.}}{=} 2A^2 \cdot \int_{0}^{+\infty} e^{-2\lambda x}\,\mathrm{d}x = \text{etc.}$$

   i. $|\Psi|^2 = \Psi^*\Psi$, denn $\Psi(x,t)$ ist eine komplexe Zahl, und dafür gilt stets: $|z|^2 = z^*z$.
   ii. Aus $\Psi(x,t) = A\,e^{-\lambda|x|}e^{-\mathrm{i}\omega t}$ folgt: $\Psi^*(x,t) = A\,e^{-\lambda|x|}e^{\mathrm{i}\omega t}$.
   iii. Konstante Faktoren vor das Integral nehmen und Potenzen gleicher Basis zusammenfassen.
   iv. $e^0 = 1$.
   v. Achsensymmetrie ausnutzen (wegen dem Betrag $|x|$ ist $e^{-\lambda|x|}$ eine gerade Funktion).

   Tipp 2: $x, A^2\,e^{-2\lambda|x|}$ ist eine ungerade und $x^2A^2\,e^{-2\lambda|x|}$ wieder eine gerade Funktion. Nutze diese Symmetrieeigenschaften beim Integrieren rigoros aus!

   Tipp 3: Gedenke der partiellen Integrationen aus Aufgabe 1.

   Tipp 4: Schon für die vorhergehenden Teilaufgaben, aber insbesondere für die Aufgabe (c), lohnt sich eine Darstellung von $|\Psi(x,t)|^2$ in GeoGebra (mit Schieberegler für λ), sodass wir die Verteilung vor uns haben. Den Betrag einer Zahl kann man am besten mit dem Befehl `abs(...)` eingeben.

4. **Zusatzaufgabe:** *Eine rein reellwertige Wellenfunktion*

Vorbemerkung: Fakultativ! Diese Aufgabe ist nur für Leute, die nicht genug bekommen und gerne noch mehr rechnen möchten. Sie bringt potentiell tolle Erfolgserlebnisse mit sich, ist gemäß Griffiths aber eine *kein Stern*- also *Fastfood*-Aufgabe – ok, wenn man Hunger hat, aber nicht sehr nahrhaft (in Bezug auf den physikalischen Gehalt).

Löse die **Aufgabe 1.4** auf Seite 35 im QM-Buch von Griffiths. Hier ein paar Bemerkungen:

Zu (a): Da A, a und b reelle Parameter sein sollen, ist $\Psi(x,0)$ insgesamt reell und es folgt:

$$|\Psi(x,0)|^2 = \begin{cases} \frac{A^2x^2}{a^2} & \text{für } 0 \leq x \leq a \\ \frac{A^2(b-x)^2}{(b-a)^2} & \text{für } a \leq x \leq b \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$$

$\Psi(x,0)$ zu normieren ist bereits eine grössere Angelegenheit. Zwei Integrale über $|\Psi(x,0)|^2$ sind zu berechnen, eines von 0 bis a und eines von a bis b.

Führe diese Normierung zweimal durch, einmal "straight forward" (d.h. ohne lineare Substitution), einmal unter Verwendung der linearen Substitution $s = b - x$ im zweiten Integral. Natürlich geht's mit linearer Substitution viel leichter!

Tipp 1: Ziehe der Übersichtlichkeit halber möglichst viele multiplikative Konstanten vor das Integral (im einen Fall $\frac{A^2}{a^2}$, im anderen $\frac{A^2}{(b-a)^2}$).

Tipp 2: Bei der Berechnung ohne lineare Substitution ist vor allem die Addition der beiden Integrale algebraisch aufwändig. Verwende dabei, dass gilt:

$$b^3 - 3b^2a + 3ba^2 - a^3 = (b-a)^3$$

Hinweis: Wenn du alles korrekt ausführst, ergibt sich schließlich:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(x,0)|^2 \, \mathrm{d}x = \ldots = \frac{A^2 b}{3} \stackrel{!}{=} 1 \quad \Rightarrow \quad A = \sqrt{\frac{3}{b}}$$

Zu (b): Mit der in (a) gefundenen Normierungskonstante A lautet die Wellenfunktion und ihr Betragsquadrat zum Zeitpunkt $t = 0$ nun:

$$\Psi(x,0) = \begin{cases} \sqrt{\frac{3}{b}} \cdot \frac{x}{a} & \text{für } 0 \leq x \leq a \\ \sqrt{\frac{3}{b}} \cdot \frac{b-x}{b-a} & \text{für } a \leq x \leq b \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \qquad |\Psi(x,0)|^2 = \begin{cases} \frac{3x^2}{ba^2} & \text{für } 0 \leq x \leq a \\ \frac{3(b-x)^2}{b(b-a)^2} & \text{für } a \leq x \leq b \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$$

Betrachte sowohl $\Psi(x,0)$, als auch $|\Psi(x,0)|^2$ in GeoGebra. Definiere dazu zuerst zwei Schieberegler a und b, von denen anschließend $\Psi(x,0)$ abhängt, sodass sich die Funktionsgraphen hinterher dynamisch verändern lassen. Eine auf ein Intervall eingeschränkte Funktion gibt man mit dem Befehl `Funktion()` ein, z.B.:

Funktion $|\Psi(x,0)|^2$ über dem Intervall $[0,a]$: `Funktion(3x^2/(ba^2),0,a)`

Du wirst sehen: Der Funktionsgraph besteht aus zwei Parabeln zwischen den Stellen 0 und b mit Spitze auf der Höhe $3/b$ über der Stelle a.

Zu (e): Ein Reminder vorneweg:

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} x |\Psi(x,0)|^2 \, \mathrm{d}x$$

Wiederum gibt es ein Integral von 0 bis a und eines von a bis b zu berechnen. Verwende beim zweiten Integral unbedingt wieder die lineare Substitution $s = b - x$.

Das Resultat lautet: $\langle x \rangle = \frac{b+2a}{4}$ – garantiert ein freudiges Gefühl, wenn du das schaffst!

Resultate der Aufgabe 1 zur Kontrolle

(a) $\dfrac{2e^3+1}{9}$ (b) $e-2$ (c) 1 (d) $\dfrac{1}{\mu^2}$ (e) $\dfrac{2}{\mu^3}$ (f) $\dfrac{1}{2}$

Ein nützliches, weil danach oft auftretendes Resultat ist sicher dasjenige aus (c), dessen Berechnung ich hier kurz vorzeige. Dabei verwende ich die Substitution $y=-x$ mit $\mathrm{d}y=-\mathrm{d}x$ resp. $\mathrm{d}x=-\mathrm{d}y$:

$$\begin{aligned}\int_0^{+\infty} x\,e^{-x}\,\mathrm{d}x &= \int_0^{-\infty} -y\,e^y\,(-\mathrm{d}y) = \int_0^{-\infty} y\,e^y\,\mathrm{d}y \\ &= y\,e^y\Big|_0^{-\infty} - \int_0^{-\infty} e^y\,\mathrm{d}y = 0-0-e^y\Big|_0^{-\infty} = -(0-1) = 1\end{aligned}$$

Achtung! Bei der Substitution $y=-x$ wird die Integrationsgrenze $+\infty$ neu zu $-\infty$.