Übungen zur Quantenphysik

Serie 9: Lineare Substitution und Normalverteilung

1. *Lineare Substitution – ein paar Trainingsaufgaben*

   Ziel dieser Aufgabe ist, dass wir mit der **linearen Substitution** immer speditiver umgehen. Es handelt sich um eine relativ einfache, weil rezeptartig anwendbare Integrationstechnik – da lässt sich die Geläufigkeit gut trainieren.

   Zur Erinnerung: Ersetzen wir die Variable x durch eine neue, linear von x abhängende Variable

   $$s(x) = mx + q$$

   so wird aus der Funktion $f(x)$ neu die Funktion $f(s)$ und für das bestimmte Integral gilt:

   $$\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x = \frac{1}{m} \cdot \int_{s(a)}^{s(b)} f(s)\,\mathrm{d}s$$

   Beachte, dass dabei die Grenzen a und b in neue Werte $s(a)$ und $s(b)$ umzurechnen sind. Der Vorfaktor $\frac{1}{m}$ entspringt dem Umstand, dass $\frac{\mathrm{d}s}{\mathrm{d}x} = m$ und somit $\mathrm{d}x = \frac{\mathrm{d}s}{m}$.

   Berechne nun die folgenden Integrale mithilfe einer geeigneten linearen Substitution:

   (a) $\displaystyle\int_{-2}^{-1} 2(2x+4)^5\,\mathrm{d}x$ (b) $\displaystyle\int_{\frac{\pi}{9}}^{\frac{\pi}{6}} \sin(3\alpha)\,\mathrm{d}\alpha$

   (c) $\displaystyle\int_{\pi}^{2\pi} \cos\left(\frac{\vartheta}{2} - \frac{\pi}{3}\right)\,\mathrm{d}\vartheta$ (d) $\displaystyle\int_{4e}^{4e^3} \ln\frac{x}{4}\,\mathrm{d}x$

   (e) $\displaystyle\int_{4}^{12} \sqrt{2\lambda+1}\,\mathrm{d}\lambda$ (f) $\displaystyle\int_{0}^{\frac{3}{2}} \lambda\sqrt{2\lambda+1}\,\mathrm{d}\lambda$

   (g) $\displaystyle\int_{-1}^{0} (x-1)(x+1)^5\,\mathrm{d}x$ (h) $\displaystyle\int_{\frac{1}{2}}^{\frac{5}{4}} \frac{2x}{\sqrt{\frac{1}{3}\,x - \frac{1}{6}}}\,\mathrm{d}x$

   Verwende bei Aufgabe (d) die Integraltabelle auf Seite 9 im Integralskript (Abschnitt 2.5).

   Hier zur Schnellkontrolle die Lösungen:

   (a) $\frac{32}{3}$ (b) $\frac{1}{6}$ (c) $\sqrt{3}-1$ (d) $8e^3$

   (e) $\frac{98}{3}$ (f) $\frac{29}{15}$ (g) $-\frac{4}{21}$ (h) $\frac{9}{2}$

2. *Normalverteilung und Gauss'sche Glockenkurve – ein erstes Kennenlernen*

   Diese und die nächste Aufgabe dienen der Vorbereitung von Aufgabe 4, wo wir statistische Berechnungen rund um die sogenannte **Normalverteilung** anstellen werden. Sie ist gegeben durch:

   $$\varrho(x) = A \cdot e^{-\lambda(x-a)^2} \qquad \text{mit} \quad A, \lambda, a \in \mathbb{R} \quad \text{und} \quad A, \lambda > 0$$

   Zunächst wollen wir uns in **GeoGebra** ein Bild dieser Normalverteilung machen. Definiere im Programm drei Schieberegler für die Parameter von $\varrho(x)$:

   - A von 0 bis 10 mit Schrittweite 0.1
   - λ von 0 bis 5 mit Schrittweite 0.01
   - a von -10 bis 10 mit Schrittweite 0.1

   Gib die Funktion $\varrho(x)$ in Abhängigkeit dieser drei Schieberegler ein. Es ergibt sich die charakteristische **Gauss'sche Glockenkurve**[1], der Graph der Normalverteilung.

   Tipp: Die Exponentialfunktion e^x lässt sich besonders anschaulich mit dem Befehl $\exp(\mathrm{x})$ eingeben. Das ist nicht nur in GeoGebra so, sondern ebenso auf vielen Taschenrechnern oder in diversen Programmiersprachen.

   Schaue, wie sich diese Glockenkurve in Abhängigkeit der Schieberegler verändert und fasse in Worte, welchen Einfluss A, λ und a haben.

3. *Lineare Substitution bei Gauss-Integralen*

   In Aufgabe 4 wollen wir die Normalverteilung als Wahrscheinlichkeitsdichte auffassen und damit dann Statistik betreiben. D.h., wir werden es dort bei der Normierung, aber auch bei der Berechnung von $\langle x \rangle$ und $\langle x^2 \rangle$ mit Integralen über die Normalverteilung zu tun bekommen. Diese Rechnungen wollen wir hier vorbereiten.

   In Formelsammlungen finden wir die **Gauss'schen Integrale** oder einfach **Gauss-Integrale**:

   $$\text{I.} \quad \int_0^{+\infty} e^{-x^2/b^2}\,\mathrm{d}x = \sqrt{\pi} \cdot \frac{b}{2}$$

   $$\text{II.} \quad \int_0^{+\infty} x^{2n} e^{-x^2/b^2}\,\mathrm{d}x = \sqrt{\pi} \cdot \frac{(2n)!}{n!} \cdot \left(\frac{b}{2}\right)^{2n+1} \qquad \text{mit} \quad n \in \mathbb{N}_0$$

   $$\text{III.} \quad \int_0^{+\infty} x^{2n+1} e^{-x^2/b^2}\,\mathrm{d}x = \frac{n!}{2} \cdot b^{2n+2} \qquad \text{mit} \quad n \in \mathbb{N}_0$$

   Dass diese Integralformeln stimmen, werden wir selber nicht überprüfen (dafür fehlt uns nochmals weiterführende Mathematik). Wir "glauben" an dieser Stelle einfach, dass sie richtig sind und wenden sie vorbehaltlos an.

[1] Nach dem berühmten Mathematiker **Carl Friedrich Gauss** (1777 – 1855), der auch als "Erfinder" der Normalverteilung gilt.

(a) Zeige zunächst, dass I. nur ein Spezialfall von II. für $n = 0$ ist.
Dabei steht $n!$ für die Fakultät von n, also für $n! = 1 \cdot \ldots \cdot n$, wobei $0! := 1$ sein soll.

(b) Notiere unter Verwendung von II. und III. möglichst einfache Formeln für die Gauss-Integrale

$$\int_0^{+\infty} x\, e^{-x^2/b^2}\, \mathrm{d}x \qquad \text{und} \qquad \int_0^{+\infty} x^2\, e^{-x^2/b^2}\, \mathrm{d}x \quad .$$

(c) Nimm dein GeoGebra-File aus Aufgabe 2 hervor und setze darin $A = 1$ und $a = 0$. Damit entspricht der Graph von $\varrho(x) = A\, e^{-\lambda(x-a)^2}$ demjenigen der Funktion e^{-x^2/b^2}, wenn wir λ mit $\frac{1}{b^2}$ identifizieren.
Gib nun zudem die Funktionen

$$f(x) = x\varrho(x) = x\, e^{-\lambda x^2} \qquad \text{und} \qquad g(x) = x^2 \varrho(x) = x^2 e^{-\lambda x^2}$$

ein. Welche Symmetrieeigenschaften haben diese Funktionen f und g?

(d) Wir werden später nicht von 0 bis $+\infty$, sondern von $-\infty$ bis $+\infty$ zu integrieren haben. Benutze die eben entdeckten Symmetrieeigenschaften von e^{-x^2/b^2}, $x\, e^{-x^2/b^2}$ und $x^2 e^{-x^2/b^2}$, um mit I. und den Resultaten aus (b) möglichst einfache Formeln für

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-x^2/b^2}\, \mathrm{d}x \quad , \qquad \int_{-\infty}^{+\infty} x\, e^{-x^2/b^2}\, \mathrm{d}x \qquad \text{und} \qquad \int_{-\infty}^{+\infty} x^2\, e^{-x^2/b^2}\, \mathrm{d}x$$

anzugeben. Die Resultate finden sich zur Kontrolle am Ende dieser Übungsserie.

(e) Die unter (d) gefundenen Formeln können nun verwendet werden, um Integrale mit der Normalverteilung zu bestimmen. Ich zeige hier unseren einfachsten Fall vor:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \varrho(x)\, \mathrm{d}x = \int_{-\infty}^{+\infty} A\, e^{-\lambda(x-a)^2}\, \mathrm{d}x \overset{\text{i.}}{=} A \cdot \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-(x-a)^2/b^2}\, \mathrm{d}x$$
$$\overset{\text{ii.}}{=} A \cdot \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-s^2/b^2}\, \mathrm{d}s \overset{\text{iii.}}{=} \sqrt{\pi} \cdot Ab \overset{\text{iv.}}{=} \sqrt{\pi} \cdot \frac{A}{\sqrt{\lambda}} = A \cdot \sqrt{\frac{\pi}{\lambda}}$$

Dabei habe ich benutzt:

i. $\lambda = \frac{1}{b^2}$. Das ist eigentlich nur eine Umbenennung eines Parameters.
ii. Substitution: $s = x - a$ mit $\frac{\mathrm{d}s}{\mathrm{d}x} = 1$. Man beachte, dass sich die Integrationsgrenzen effektiv nicht verändern, weil $+\infty - a = +\infty$ und $-\infty - a = -\infty$.
iii. Wir benutzen genau das Resultat aus (d): $\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-s^2/b^2}\, \mathrm{d}s = \sqrt{\pi} \cdot b$.
iv. Aus $\lambda = \frac{1}{b^2}$ folgt umgekehrt: $b = \frac{1}{\sqrt{\lambda}}$. Dies setzen wir zurück ein.

Berechne in ähnlicher Weise die folgenden beiden Integrale:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} x\, \varrho(x)\, \mathrm{d}x = \int_{-\infty}^{+\infty} x \cdot A\, e^{-\lambda(x-a)^2} \mathrm{d}x$$
$$\int_{-\infty}^{+\infty} x^2\, \varrho(x)\, \mathrm{d}x = \int_{-\infty}^{+\infty} x^2 \cdot A\, e^{-\lambda(x-a)^2} \mathrm{d}x$$

Achtung! Die Sache ist etwas komplizierter als beim vorgezeigten Integral oben, denn die Vorfaktoren x resp. x^2 erzeugen aufgrund der Substitution $s = x - a$ mehrere Glieder, die in mehrere Integrale auseinandergenommen werden sollten.
Auch hier habe ich die beiden Resultate zur Kontrolle am Ende der Serie notiert.

4. *Die Normalverteilung als Wahrscheinlichkeitsdichte*

   (a) Löse nun die **Aufgabe 1.3 auf Seite 33 im QM-Buch von Griffiths**. Hinweise:

   - Die Funktion $\varrho(x)$ soll als örtliche Wahrscheinlichkeitsdichte verstanden werden. Deshalb wird unter (a) gefordert, dass das Integral von $-\infty$ bis $+\infty$ über die Wahrscheinlichkeitsdichte gleich 1 sein soll – irgendwo muss das durch $\varrho(x)$ beschriebene Objekt ja sein. Aus dieser Bedingung lässt sich ein Ausdruck für den Parameter A angeben, der von λ und a abhängen kann.
     Den "Amplituden"-Parameter A durch die Bedingung $\int_{-\infty}^{+\infty} \varrho(x)\,\mathrm{d}x = 1$ festzulegen, bezeichnen wir als **Normierung** der Wahrscheinlichkeitsdichte (später Normierung der **Wellenfunktion**).
   - Natürlich greifst du bei der Berechnung der Integrale auf die Gauss'schen Integrale aus Aufgabe 3.(e) zurück.
   - Überlege dir vor der Berechnung von $\langle x \rangle$, wo du diesen örtlichen Mittelwert erwartest. Das müsste dann eigentlich auch das Resultat der Rechnung sein.
   - Wiederum als Überlegung vor der Rechnung: Wovon wird die Standardabweichung σ abhängen, und wovon nicht?
   - Die Aufgabe (c) haben wir mit Aufgabe 2 natürlich bereits erledigt.

   (b) Notiere die Wahrscheinlichkeitsdichte $\varrho(x)$ nochmals neu, wobei die Parameter A und λ nicht mehr vorkommen sollen. Baue stattdessen deine Resultate aus Aufgabe (a) in die Wahrscheinlichkeitsdichte ein.

   (c) Erstelle ein neues GeoGebra-File mit Schiebereglern für $-5 \leq a \leq 5$ und $0 \leq \sigma < 5$. Benutze deinen Ausdruck aus (b), um $\varrho(x)$ in Abhängigkeit von a und σ einzugeben.

   (d) Verwende die Funktion `Integral(<Funktion>, <Startwert>, <Endwert>)`, um das Integral über $\varrho(x)$ von -1000 ($\approx -\infty$) bis 1000 ($\approx +\infty$) zu berechnen.
   Nun kannst du überprüfen, dass die Fläche unter dem Graphen von $\varrho(x)$ immer gleich 1 bleibt, egal wie du die beiden Parameter a und σ veränderst.

   (e) Lasse dir ebenso die folgenden Integrale berechnen:

$$\int_{a-\sigma}^{a+\sigma} \varrho(x)\,\mathrm{d}x \qquad \int_{a-2\sigma}^{a+2\sigma} \varrho(x)\,\mathrm{d}x \qquad \int_{a-3\sigma}^{a+3\sigma} \varrho(x)\,\mathrm{d}x$$

   Wie verändern sich die Werte dieser Integrale bei Veränderung von a und σ?

Resultate 3.(d):

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-x^2/b^2}\,\mathrm{d}x = \sqrt{\pi}\cdot b \qquad \text{Achsensymmetrie!}$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} x\,e^{-x^2/b^2}\,\mathrm{d}x = 0 \qquad \text{Punktsymmetrie!}$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} x^2\,e^{-x^2/b^2}\,\mathrm{d}x = \sqrt{\pi}\cdot\frac{b^3}{2} \qquad \text{Achsensymmetrie!}$$

Resultate 3.(e):

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \varrho(x)\,\mathrm{d}x = \int_{-\infty}^{+\infty} A\,e^{-\lambda(x-a)^2}\,\mathrm{d}x = \ldots = A\cdot\sqrt{\frac{\pi}{\lambda}}$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} x\,\varrho(x)\,\mathrm{d}x = \int_{-\infty}^{+\infty} x\cdot A\,e^{-\lambda(x-a)^2}\,\mathrm{d}x = \ldots = Aa\cdot\sqrt{\frac{\pi}{\lambda}}$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} x^2\,\varrho(x)\,\mathrm{d}x = \int_{-\infty}^{+\infty} x^2\cdot A\,e^{-\lambda(x-a)^2}\,\mathrm{d}x = \ldots = A\left(\frac{1}{2\lambda}+a^2\right)\cdot\sqrt{\frac{\pi}{\lambda}}$$