
Seminar zur Vorlesung Quantenmechanik
Übungsblatt 2
Mathematische Grundlagen II

Wintersemester 15/16

1 Differential- und Integralrechnung

Die Differentiation und Integration von Funktionen sind wichtige Werkzeuge der Quantenmechanik. Wichtige Rechenregeln für die Differentiation sind unter anderem:

$$\text{Produktregel:} \quad (u \cdot v)' = u'v + uv' \quad (1)$$

$$\text{Quotientenregel:} \quad \left(\frac{u}{v}\right)' = \frac{u'v - uv'}{v^2} \quad (2)$$

$$\text{Kettenregel:} \quad \frac{d}{dx} f(g(x)) = \frac{d}{du} f(u) \frac{d}{dx} g(x) \quad \text{mit } u = g(x) \quad (3)$$

Die Integration verlangt häufig komplexere Ansätze, wie:

a) Integration durch Substitution

Ist der Integrand eine zusammengesetzte bzw. verkettete Funktion

$$\int h(f(x)) \, dx$$

so kann folgender Satz verwendet werden, um einen Integrand mit bekannter Stammfunktion zu erhalten:

Führt man in ein unbestimmtes Integral der Form $\int h(f(x)) \, dx$ die neue Variable $u = f(x)$ ein, so gilt unter der Voraussetzung, dass zu $u = f(x)$ eine eindeutige Umkehrfunktion $x = f^{-1}(u) = g(u)$ gehört,

$$\int h(f(x)) \, dx = \int h(u)g'(u) \, du \quad (4)$$

Bei einem bestimmten Integral muss man darauf achten, dass man bei der Transformation der Variablen auch die Grenzen entsprechend transformiert ($a' = f(a), b' = f(b)$).

$$\int_a^b h(f(x)) \, dx = \int_{f(a)}^{f(b)} h(u)g'(u) \, du \quad (5)$$

Zum Beispiel sei die Funktion $\cos(2x)$ gegeben. Wir setzen $u = 2x$. Formal nicht ganz sauber, aber einfach zu merken ist, dass wir u nach x ableiten, das Ergebnis nach dx umstellen ($du/dx = 2 \Leftrightarrow dx = 1/2 \, du$) und dx substituieren. Somit ergibt sich:

$$\int \cos(2x) \, dx = \int \cos(u) \frac{1}{2} \, du = \frac{1}{2} \sin(u) = \frac{1}{2} \sin(2x)$$

b) Partielle Integration

Ausgehend von der Produktregel in Gl. (1) kann die partielle Integration hergeleitet werden. Integriert man beide Seiten von Gl. (1), erhält man

$$uv = \int u'v \, dx + \int uv' \, dx$$

Stellt man diese Gleichung um, erhält man die Gleichung für die partielle Integration ohne Grenzen

$$\int uv' \, dx = uv - \int u'v \, dx \quad (6)$$

und mit Grenzen

$$\int_a^b uv' \, dx = [uv]_a^b - \int_a^b u'v \, dx \quad (7)$$

Betrachten wir beispielsweise das Integral $\int x \cdot \cos x \, dx$. Wir definieren $u = x$ und $v' = \cos x$, somit ist $v = \sin x$ und $u' = 1$.

$$\int x \cdot \cos x \, dx = x \cdot \sin x - \int 1 \cdot \sin x \, dx = x \cdot \sin x - (-\cos x) = x \cdot \sin x + \cos x$$

- a) Differenzieren Sie die angegebenen Funktionen nach den in den Klammern stehenden Ausdrücken. Verwenden Sie hierzu je nach Bedarf die Produkt-, Quotienten- und Kettenregel.

$$(i) \, f(x) = x^4 e^{-x} \quad \left(\frac{d^2}{dx^2} \right)$$

$$(ii) \, f(x) = \frac{\ln x}{\sqrt{x}} \quad \left(\frac{d^2}{dx^2} \right)$$

$$(iii) \, f(x) = \sqrt{1 + \cos^3 x} \quad \left(\frac{d}{dx} \right)$$

$$(iv) \, f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{x^n}{n!} \quad \left(\frac{d^2}{dx^2} \right)$$

- b) Bilden Sie $\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial^2}{\partial x^2}, \frac{\partial^2}{\partial y^2}$ und $\frac{\partial^2}{\partial x \partial y}$ von (i) sowie den Gradienten ∇ von (ii).

$$(i) \, f(x, y) = -x^2 \cdot \cos y + e^{2xy}$$

$$(ii) \, f(x, y, z) = x^3 y^2 z + 3xz - xyz^2$$

- c) Lösen Sie folgende Integrale mithilfe der Substitutionsregel:

$$(i) \, \int \sqrt[3]{3x+1} \, dx$$

$$(ii) \, \int \frac{1}{(\sqrt{x}+1)\sqrt{x}} \, dx \quad \text{Tipp: } t = \sqrt{x} + 1$$

$$(iii) \, \int \cos(4x+5) \, dx$$

- d) Lösen Sie folgende Integrale durch partielle Integration:

$$(i) \, \int x \cdot e^x \, dx$$

$$(ii) \, \int \ln(x) \, dx \quad \text{Tipp: } \ln(x) = 1 \cdot \ln(x)$$

$$(iii) \, \int \cos x \cdot \sin x \, dx$$

2 Statistik

Betrachten wir ein Experiment (z.B. Werfen eines Würfels), welches n mögliche Ergebnisse hat und unendlich oft wiederholt wird, so ergibt sich die Gesamtzahl der Durchführungen N aus:

$$N = \sum_{j=0}^n N(j). \quad (8)$$

Dabei gibt $N(j)$ an, wie oft das Ergebnis j eingetreten ist (absolute Häufigkeit). Die Wahrscheinlichkeit (relativ Häufigkeit) dieses Ergebnisses erhält man nach:

$$P(j) = \frac{N(j)}{N} \quad (9)$$

Wichtig dabei ist die Normalisierungsbedingung, welche besagt, dass die Durchführung des Experiments immer zu einem Ergebnis führt:

$$\sum_{j=0}^n P(j) = 1 \quad (10)$$

Das Ergebnis, welches am häufigsten eingetreten ist, nennt man Modalwert. Der Medianwert teilt die Ergebnisse in zwei gleich große Mengen, wobei die Elemente der einen Menge kleiner und die der anderen größer als der Medianwert sind.

Meist interessiert man sich aber vor allem für den (arithmetischen) Mittelwert der Ergebnisse $\langle x \rangle$, der in der Quantenmechanik in der Regel als Erwartungswert bezeichnet wird.

$$\langle x \rangle = \sum_{j=0}^n x_j P(j) \quad (11)$$

Interessant ist außerdem, wie weit die Verteilung von ihrem Mittelwert abweicht. Aus diesem Grund wird Δx_j definiert:

$$\Delta x_j = x_j - \langle x \rangle \quad (12)$$

Das arithmetische Mittel über alle $\langle \Delta x_j \rangle$ ist 0. Um dennoch ein Maß für die "Breite" der Verteilung zu haben, wird die Varianz σ^2 oder die Standardabweichung σ berechnet:

$$\sigma = \sqrt{\langle (\Delta x_j)^2 \rangle} \quad (13)$$

Um Varianz bzw. Standardabweichung zu bestimmen, kann folgender Satz verwendet werden:

$$\begin{aligned} \sigma^2 = \langle (\Delta x_j)^2 \rangle &= \sum_{j=0}^n (\Delta x_j)^2 P(j) = \sum_{j=0}^n (x_j - \langle x \rangle)^2 P(j) \\ &= \sum_{j=0}^n \left(x_j^2 - 2x_j \langle x \rangle + \langle x \rangle^2 \right) P(j) \\ &= \sum_{j=0}^n x_j^2 P(j) - 2 \langle x \rangle \sum_{j=0}^n x_j P(j) + \langle x \rangle^2 \sum_{j=0}^n P(j) \\ &= \langle x^2 \rangle - 2 \langle x \rangle \langle x \rangle + \langle x \rangle^2 \\ &= \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2 \end{aligned}$$

Die Standardabweichung ist somit definiert durch:

$$\sigma = \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2} \quad (14)$$

Die bisherigen Betrachtungen, in denen wir von diskreten Verteilungen ausgegangen sind, sollen nun auch auf kontinuierliche übertragen werden. Dazu wird die Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion $\rho(x)$ definiert, welche die Wahrscheinlichkeit angibt, dass ein Ergebnis in einem infinitesimal kleinen Intervall liegt. Die Wahrscheinlichkeit für ein endliches Intervall $[a;b]$ erhält man durch Integration der Dichtefunktion über dieses Intervall:

$$P_{ab} = \int_a^b \rho(x) dx \quad (15)$$

Auch die anderen statistischen Größen ergeben sich für die kontinuierlichen Verteilungen in Analogie zu denen der diskreten.

$$1 = \int_{-\infty}^{+\infty} \rho(x) dx \quad (16)$$

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} x \cdot \rho(x) dx \quad (17)$$

$$\langle f(x) \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} f(x) \cdot \rho(x) dx \quad (18)$$

$$\sigma^2 \equiv \langle (\Delta x)^2 \rangle = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2 \quad (19)$$

Die am meisten verwendete Fehlerverteilung, die Gauß-Verteilung, soll hergeleitet werden. Sie hat die Form:

$$\rho(x) dx = A e^{-B(x-C)^2} dx \quad -\infty < x < \infty \quad (20)$$

Bestimmen Sie (a1) A , (a2) $\langle x \rangle$, (b1) $\langle x^2 \rangle$ und (b2) σ^2 . Schreiben Sie am Ende die Gauß-Funktion mit den ermittelten Parametern (A , B , C) auf.

Tipps:

- a) (a1) Die Konstante A ist in diesem Fall die Normierungskonstante. Verwenden Sie Gl. (16) und substituieren Sie $z = (x - C)$. Wie ändern sich die Integrationsgrenzen bei der Substitution? Verwenden Sie weiterhin das Integral

$$\int_0^{\infty} e^{-\gamma z^2} dz = \sqrt{\frac{\pi}{4\gamma}}$$

und die Information, dass die Funktion $e^{-\gamma z^2}$ eine gerade Funktion $f(z) = f(-z)$, d.h. symmetrisch zur y-Achse, ist.

(a2) Verwenden Sie Gl. (17) und die gleiche Substitution, wie in (a1). Zerlegen Sie in zwei Integrale. Für weitere Vereinfachungen benötigen Sie die Gleichung

$$\int_{-\infty}^{+\infty} z e^{-\gamma z^2} dz = 0 \quad (21)$$

sowie die Ergebnisse aus (a1).

Die Funktion $z e^{-\gamma z^2}$ ist ungerade, d.h. punktsymmetrisch zum Koordinatenursprung. Begründen Sie, dass daraus sofort das Integral aus Gleichung (21) folgt.

- b) (b1) Verwenden Sie ebenfalls Gl. (17), aber für x^2 , und wiederum die gleiche Substitution, wie in (a1). Wenden Sie dann die binomische Formel an und zerlegen Sie in drei Integrale. Zwei der Integrale kennen Sie schon, das dritte berechnen Sie mittels:

$$\int_0^{\infty} z^2 e^{-\gamma z^2} dz = \frac{1}{4\gamma} \sqrt{\frac{\pi}{\gamma}}$$

unter Nutzung der Information, dass $z^2 \cdot e^{-\gamma z^2}$ ebenfalls eine gerade Funktion ist.

(b2) Verwenden Sie Gl. (19), um mithilfe der Ergebnisse aus (a2) und (b1) σ zu berechnen. Danach können die gesuchten Parameter A , B und C in Abhängigkeit der statistischen Größen $\mu = \langle x \rangle$ und σ angegeben sowie in die Gauß-Funktion einsetzen.

- c) (i) Skizzieren Sie in ein Koordinatensystem Gauß-Verteilungen mit folgenden Parametern:
 1.) $\mu = 0, \sigma = 1$ 2.) $\mu = 2, \sigma = 1$ 3.) $\mu = 0, \sigma = 2$
- (ii) Beweisen Sie (für eine diskrete Verteilung), dass $\langle \Delta x_j \rangle = 0$ ist. Nutzen Sie die Gleichungen (10), (11) und (12).