Julius-Maximilians-
UNIVERSITÄT
WÜRZBURG

Fakultät für Physik und Astronomie
Prof. Dr. Thorsten Ohl
Raimond Abt, Adam Büchner,
Robert Franken, David Rodriguez Fernandez

5. Übung zur Quantenmechanik
23. Mai 2019

Gaußsche Integrale und Wellenfunktionen

5.1 Gaußsche Integrale

1. Verifizieren Sie mit den Standard-Trick „quadrieren und Polarkoordinaten einführen“ die Gaußsche Integralformel
$$\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x\, \mathrm{e}^{-x^2} = \sqrt{\pi}\,. \tag{1}$$

2. Transformieren Sie (1), um
$$I(0,a,b) = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x\, \mathrm{e}^{-\frac{(x-b)^2}{2a^2}} \tag{2}$$
zu berechnen.

3. Transformieren Sie (2) weiter, um die Formel
$$I(k,a,b) = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x\, \mathrm{e}^{-\frac{(x-b)^2}{2a^2}+\mathrm{i}kx} = \sqrt{2\pi}a\mathrm{e}^{-\frac{a^2k^2}{2}+\mathrm{i}bk} \tag{3}$$
für die Fouriertransformation einer Gaußfunktion nachzuweisen.

4. Verallgemeinern Sie die eindimensionale Formel (3) auf den dreidimensionalen Anschauungsraum
$$I(\vec{k},A,\vec{b}) = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}^3x\, \mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\sum_{i,j=1}^{3}(x_i-b_i)A_{ij}(x_j-b_j)+\mathrm{i}\sum_{i=1}^{3}k_ix_i} \tag{4}$$
mit der reell symmetrischen quadratischen Form $A_{ij} = A_{ji}$. *Hinweis: betrachten Sie zuerst den Fall, daß A diagonal mit positiven Diagonalelementen ist*
$$A_{ij} = a_i^2\delta_{ij} \tag{5}$$
und verallgemeinern Sie anschließend. Welche Bedingungen müssen Sie an A stellen?

5.2 Erzeugende Funktion

Benutzen Sie die Formel (3), um Integrale der Form

$$J_n(a,b) = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x\, x^n \mathrm{e}^{-\frac{(x-b)^2}{2a^2}} \tag{6}$$

zu berechnen.

1. Drücken Sie $J_n(a,b)$ durch

$$\left.\frac{\partial^n I}{\partial k^n}(k,a,b)\right|_{k=0} \tag{7}$$

   aus.

2. Berechnen Sie $J_n(a,b)$ für $n = 0, 1, 2, 3, 4$.

3. Definieren Sie den Mittelwert

$$\langle f(x)\rangle = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x\, f(x) \mathrm{e}^{-\frac{(x-b)^2}{2a^2}}}{\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x\, \mathrm{e}^{-\frac{(x-b)^2}{2a^2}}} \tag{8}$$

   und berechnen Sie

$$\langle x\rangle \ , \tag{9}$$

   sowie

$$\langle (x - \langle x\rangle)^2\rangle \ . \tag{10}$$

4. Wie können Sie mit dieser Methode Integrale der Form

$$K_{n_1,n_2,n_3}(a,b) = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}^3x\, x_1^{n_1} x_2^{n_2} x_3^{n_3}\, \mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\sum_{i,j=1}^{3}(x_i-b_i)A_{ij}(x_j-b_j)} \tag{11}$$

   berechnen?

5. Berechnen Sie

$$\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}^3x\, \vec{x}\, \mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\sum_{i,j=1}^{3}(x_i-b_i)A_{ij}(x_j-b_j)} \tag{12}$$

   und

$$\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}^3x\, x_i x_j\, \mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\sum_{i,j=1}^{3}(x_i-b_i)A_{ij}(x_j-b_j)} \ , \tag{13}$$

   sowie

$$\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}^3x\, \vec{x}^2\, \mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\sum_{i,j=1}^{3}(x_i-b_i)A_{ij}(x_j-b_j)} \ . \tag{14}$$

5.3 Wellenfunktionen

Betrachten Sie das Gaußsche Wellenpaket $\left|A, \vec{b}\right\rangle$ mit Wellenfunktion

$$\psi_{A,\vec{b}} = \langle \vec{x} | A, \vec{b} \rangle = N \mathrm{e}^{-\frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^{3} (x_i - b_i) A_{ij} (x_j - b_j)} \tag{15}$$

wobei $A_{ij} = A_{ji}$ reell symmetrisch.

1. Bestimmen Sie die Normierungskonstante N aus

$$\langle A, \vec{b} | A, \vec{b} \rangle = 1 \tag{16}$$

   mit der Zerlegung der Einheit

$$\mathbf{1} = \int \mathrm{d}^3x \; |\vec{x}\rangle \langle \vec{x}| \; . \tag{17}$$

2. Berechnen Sie die Erwartungswerte

$$E_{A,\vec{b}}(X_i) = \langle A, \vec{b} | X_i | A, \vec{b} \rangle \tag{18a}$$

$$E_{A,\vec{b}}\left((X_i - E_{A,\vec{b}}(X_i))^2 \right) = \langle A, \vec{b} | X_i^2 | A, \vec{b} \rangle - \langle A, \vec{b} | X_i | A, \vec{b} \rangle^2 \tag{18b}$$

3. Betrachten Sie auch den Impulsoperator[1]

$$(P_i \psi)(\vec{x}) = \frac{\hbar}{\mathrm{i}} \frac{\partial \psi}{\partial x_i}(\vec{x}) \tag{19}$$

   und berechnen Sie die Erwartungswerte

$$E_{A,\vec{b}}(P_i) = \langle A, \vec{b} | P_i | A, \vec{b} \rangle \tag{20a}$$

$$E_{A,\vec{b}}\left((P_i - E_{A,\vec{b}}(P_i))^2 \right) = \langle A, \vec{b} | P_i^2 | A, \vec{b} \rangle - \langle A, \vec{b} | P_i | A, \vec{b} \rangle^2 \; . \tag{20b}$$

4. Entsprechen die Ergebnisse Ihren intuitiven Erwartungen?

[1] Der Impulsoperator wird am Ende der Vorlesung vom 27. Mai eingeführt werden. Bis dahin können sie (19) als Definition benutzen.