Die Normierung einer Wellenfunktion

Martin Ueding

16. Januar 2010

Aus einer schon vereinfachten Schrödingergleichung in einem eindimensionalen Raum ohne Zeitabhängigkeit haben wir im Physikkurs eine Wellenfunktion für das Elektron in einem Potentialtopf abgeleitet. Dabei hat sich als Wellenfunktion $\psi(x)$ folgendes ergeben:

$$\psi(x) = \hat{\psi} \cdot \sin\left(\frac{n\pi}{a} x\right)$$

n ist der Anregungszustand und muss eine natürliche Zahl (1, 2, 3, ...) sein. a ist die Breite des Potentialtopfes, und x die Position im Raum, an der der Wert der Wellenfunktion abgefragt werden soll. x sollte sinnvollerweise im Intervall [0;a] liegen.

Der Faktor $\hat{\psi}$ ist jedoch noch unbekannt und soll hier bestimmt werden. Da die Wahrscheinlichkeit, dass Teilchen irgendwo zwischen 0 und a im Potentialtopf anzutreffen, 1 sein muss, kann man auch sagen, dass die Fläche unterhalb der quadrierten Wellenfunktion 1 ergeben muss. Die Wahrscheinlichkeit bekommt man durch $\psi^2(x)$, somit muss man das Integral von 0 bis a von der quadrierten Wellenfunktion auf 1 normieren.

$$\int_0^a \hat{\psi}^2 \cdot \sin^2\left(\frac{n\pi}{a} x\right) dx = 1$$

Als ersten Schritt kann der konstante Faktor $\hat{\psi}^2$ vor das Integral gezogen[1] werden.

[1]Regel: $\int_a^b d \cdot z(x) dx = d \int_a^b z(x) dx$

$$\hat{\psi}^2 \int_0^a \sin^2\left(\frac{n\pi}{a}x\right)dx = 1$$

Damit im nächsten Schritt die Produktregel der Integration angewandt werden kann, wird der quadrierte Sinus in zwei Faktoren getrennt.

$$\hat{\psi}^2 \int_0^a \underbrace{\sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right)}_{u(x)} \cdot \underbrace{\sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right)}_{v'(x)} dx = 1$$

Jetzt kann die Produktregel der Integration[2] angewandt werden, die beiden Teilfunktionen sind oben markiert. Unten sind entsprechend die Ableitungen und Aufleitungen markiert.

$$\hat{\psi}^2 \int_0^a \underbrace{\sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right)}_{u(x)} \cdot \underbrace{\sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right)}_{v'(x)} dx = \hat{\psi}^2 \cdot \left[\underbrace{\sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right)}_{u(x)} \cdot \underbrace{(-)cos\left(\frac{n\pi}{a}x\right) \cdot \frac{a}{n\pi}}_{v(x)}\right]_0^a - \hat{\psi}^2 \cdot \int_0^a \underbrace{cos\left(\frac{n\pi}{a}x\right) \cdot \frac{n\pi}{a}}_{u'(x)} \cdot \underbrace{(-)cos\left(\frac{n\pi}{a}x\right) \cdot \frac{a}{n\pi}}_{v(x)} dx$$

Der Hauptsatz[3] wird in der eckigen Klammer durchgeführt.

$$\hat{\psi}^2 \int_0^a \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) \cdot \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) dx = \hat{\psi}^2 \cdot \left(\underbrace{\sin\left(\frac{n\pi}{a}a\right) \cdot (-)cos\left(\frac{n\pi}{a}a\right) \cdot \frac{a}{n\pi}}_{z(a)} - \underbrace{\sin\left(\frac{n\pi}{a}0\right) \cdot (-)cos\left(\frac{n\pi}{a}0\right) \cdot \frac{a}{n\pi}}_{z(0)}\right) - \hat{\psi}^2 \cdot \int_0^a cos\left(\frac{n\pi}{a}x\right) \cdot \frac{n\pi}{a} \cdot (-)cos\left(\frac{n\pi}{a}x\right) \cdot \frac{a}{n\pi} dx$$

Der Sinus auf der linken Seite wird wieder als Quadrat geschrieben. In der großen, runden Klammer in der Mitte wird nach Möglichkeit gekürzt, im letzen Summanden wird der Cosinus ebenfalls als Quadrat geschrieben.

[2]Regel: $\int_a^b u(x) \cdot v'(x)dx = u(x) \cdot v(x)\Big|_a^b - \int_a^b u'(x) \cdot v(x)dx$

[3]Regel: $z(x)\big|_a^b = z(b) - z(a)$

$$\hat{\psi}^2 \int_0^a \sin^2\left(\frac{n\pi}{a}x\right)dx = \hat{\psi}^2 \cdot \left(\sin(n\pi)\cdot(-)cos(n\pi)\cdot\frac{a}{n\pi} - \sin(0)\cdot(-)cos(0)\cdot\frac{a}{n\pi}\right) - \hat{\psi}^2 \int_0^a -cos^2\left(\frac{n\pi}{a}x\right)dx$$

Die Relation $\sin^2(x) + cos^2(x) = 1$ wird jetzt benutzt, um den Cosinus im letzten Summanden in einen Sinus umzuwandeln. Außerdem wird das Minus zwischen den beiden Cosinusfaktoren vor das Integral gezogen. In der großen, runden Klammer fällt der zweite Summand weg, da dieser auf Grund von $\sin(0) = 0$ immer gleich Null ist[4].

$$\hat{\psi}^2 \int_0^a \sin^2\left(\frac{n\pi}{a}x\right)dx = \hat{\psi}^2 \cdot \left(\sin(n\pi)\cdot(-)cos(n\pi)\cdot\frac{a}{n\pi}\right) + \hat{\psi}^2 \int_0^a 1 - \sin^2\left(\frac{n\pi}{a}x\right)dx$$

Das letzte Integral wird getrennt[5].

$$\hat{\psi}^2 \int_0^a \sin^2\left(\frac{n\pi}{a}x\right)dx = \hat{\psi}^2 \cdot \left(\sin(n\pi)\cdot(-)cos(n\pi)\cdot\frac{a}{n\pi}\right) + \hat{\psi}^2 \int_0^a 1dx - \hat{\psi}^2 \int_0^a \sin^2\left(\frac{n\pi}{a}x\right)dx$$

Die Integrale werden auf die linke Seite gebracht.

$$\hat{\psi}^2 \int_0^a \sin^2\left(\frac{n\pi}{a}x\right)dx - \hat{\psi}^2 \int_0^a 1dx + \hat{\psi}^2 \int_0^a \sin^2\left(\frac{n\pi}{a}x\right)\cdot\frac{a}{n\pi}dx = \hat{\psi}^2 \cdot \left(\sin(n\pi)\cdot(-)cos(n\pi)\right)$$

Auf der linken Seite wird $\hat{\psi}^2$ ausgeklammert. Auf der anderen Seite wird die Eigenschaft $n \subset N$ benutzt. So kann der Sinus $\sin(n\pi)$ nur den Wert 0 annehmen, da er bei den Winkeln 0, π, 2π, etc. immer 0 ist. Im Gradmaß sind die entsprechenden Winkel 0, 180 und 360 Grad. Dadurch wird die gesamte rechte Seite Null.

$$\hat{\psi}^2 \cdot \left(\int_0^a \sin^2\left(\frac{n\pi}{a}x\right)dx - \int_0^a 1dx + \int_0^a \sin^2\left(\frac{n\pi}{a}x\right)dx\right) = 0$$

[4] Regel: $a \cdot 0 = 0$

[5] Regel: $\int_a^b z(x) + w(x)dx = \int_a^b z(x)dx + \int_a^b w(x)dx$

Jetzt können die beiden $\int \sin^2()dx$ zusammengefasst werden. Das $\int_0^a 1dx$ wird integriert.

$$\hat{\psi}^2 \cdot \left(2\int_0^a \sin^2\left(\frac{n\pi}{a}x\right)dx - x\Big|_0^a\right) = 0$$

Für das $x|_0^a$ wird der Hauptsatz angewandt. Das resultierende $a - 0$ wird zu a vereinfacht.

$$\hat{\psi}^2 \cdot \left(2\int_0^a \sin^2\left(\frac{n\pi}{a}x\right)dx - a\right) = 0$$

Der Faktor $\hat{\psi}^2$ wird wieder ausmultipliziert.

$$2\hat{\psi}^2\int_0^a \sin^2\left(\frac{n\pi}{a}x\right)dx - \hat{\psi}^2 a = 0$$

Beide Seiten der Gleichung werden durch 2 geteilt.

$$\hat{\psi}^2\int_0^a \sin^2\left(\frac{n\pi}{a}x\right)dx - \hat{\psi}^2\frac{a}{2} = 0$$

Der Faktor $\hat{\psi}^2$ wird wieder in das Integral gezogen, um die Anfangsgleichung wieder her zu stellen. Der Summand $\hat{\psi}^2\frac{a}{2}$ wird auf die andere Seite gebracht.

$$\int_0^a \hat{\psi}^2 \cdot \sin^2\left(\frac{n\pi}{a}x\right)dx = \hat{\psi}^2\frac{a}{2}$$

Die Anfangsgleichung sagt, dass dieses spezielle Integral auf der linken Seite gleich 1 ist. Somit muss auch die rechte Seite gleich 1 sein.

$$1 = \hat{\psi}^2 \cdot \frac{a}{2}$$

Jetzt durch den Bruch teilen und die Seiten aus kosmetischen Gründen tauschen:

$$\hat{\psi}^2 = \frac{2}{a}$$

Jetzt kann noch die Wurzel gezogen werden.

$$\hat{\psi} = \pm\sqrt{\frac{2}{a}}$$

$\hat{\psi}$ ist somit $\pm\sqrt{\frac{2}{a}}$.

Die komplette Wellenfunktion sieht dann so aus:

$$\psi(x) = \pm\sqrt{\frac{2}{a}} \cdot \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right)$$

Die Wahrscheinlichkeit, dass sich das Elektron an der Stelle x aufhält, ist durch die quadrierte Wellenfunktion $\psi^2(x)$ gegeben:

$$\psi^2(x) = \frac{2}{a} \cdot \sin^2\left(\frac{n\pi}{a}x\right)$$