ΕΡΓΑΛΕΙΟΘΗΚΗ ΤΟΥ ΧΗΜΙΚΟΥ 15 Ολοκλήρωση κατά παράγοντες

Πολλά ολοκληρώματα στην κβαντική μηχανική έχουν τη μορφή $\int f(x)h(x)\mathrm{d}x$ όπου $f(x)$ και $h(x)$ δύο διαφορετικές συναρτήσεις. Τέτοια ολοκληρώματα μπορούν συχνά να υπολογιστούν αν θεωρήσουμε την $h(x)$ ως την παράγωγο μιας άλλης συνάρτησης, της $g(x)$, οπότε $h(x) = \mathrm{d}g(x)/\mathrm{d}x$. Παραδείγματος χάριν, αν $h(x) = x$, τότε $g(x) = \frac{1}{2}x^2$. Το ολοκλήρωμα βρίσκεται τότε με **ολοκλήρωση κατά παράγοντες**:

$$\int f\frac{\mathrm{d}g}{\mathrm{d}x}\mathrm{d}x = fg - \int g\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}x}\mathrm{d}x$$

Η διαδικασία επιτυγχάνει μόνο αν το ολοκλήρωμα που προκύπτει στα δεξιά υπολογίζεται πιο εύκολα από εκείνο στα αριστερά. Η διαδικασία συνοψίζεται συνήθως μέσω της σχέσης

$$\int f\mathrm{d}g = fg - \int g\mathrm{d}f$$

Σύντομη εφαρμογή 15.1: Ολοκλήρωση κατά παράγοντες

Ολοκληρώματα του xe^{-ax} και τα ανάλογά τους εμφανίζονται συχνά στη μελέτη της ατομικής δομής και των φασμάτων. Η ολοκλήρωση μπορεί να γίνει κατά παράγοντες, όπως στο ακόλουθο ολοκλήρωμα. Σε αυτή την περίπτωση, $f(x) = x$, οπότε $\mathrm{d}f(x)/\mathrm{d}x = 1$ και $\mathrm{d}g(x)/\mathrm{d}x = \mathrm{e}^{-ax}$, έτσι $g(x) = -(1/a)\mathrm{e}^{-ax}$. Τότε

$$\begin{aligned}\int \overbrace{x}^{f}\,\overbrace{\mathrm{e}^{-ax}}^{\mathrm{d}g/\mathrm{d}x}\,\mathrm{d}x &= \overbrace{x}^{f}\,\overbrace{\frac{-\mathrm{e}^{-ax}}{a}}^{g} - \int \overbrace{\frac{-\mathrm{e}^{-ax}}{a}}^{g}\,\overbrace{1}^{\mathrm{d}f/\mathrm{d}x}\,\mathrm{d}x\\ &= -\frac{x\mathrm{e}^{-ax}}{a} + \frac{1}{a}\int \mathrm{e}^{-ax}\,\mathrm{d}x\\ &= -\frac{x\mathrm{e}^{-ax}}{a} - \frac{\mathrm{e}^{-ax}}{a^2} + \text{σταθερά}\end{aligned}$$

Αν το ολοκλήρωμα είναι ορισμένο, τότε θέτουμε τα όρια στο τελευταίο από τα παραπάνω βήματα και γράφουμε

$$\begin{aligned}\int_0^\infty \overbrace{x}^{f}\,\overbrace{\mathrm{e}^{-ax}}^{\mathrm{d}g/\mathrm{d}x}\,\mathrm{d}x &= \overbrace{x}^{f}\,\overbrace{\frac{-\mathrm{e}^{-ax}}{a}}^{g}\Big|_0^\infty - \int_0^\infty \overbrace{\frac{-\mathrm{e}^{-ax}}{a}}^{g}\,\overbrace{1}^{\mathrm{d}f/\mathrm{d}x}\,\mathrm{d}x\\ &= -\frac{x\mathrm{e}^{-ax}}{a}\Big|_0^\infty + \frac{1}{a}\int_0^\infty \mathrm{e}^{-ax}\,\mathrm{d}x = 0 - \frac{\mathrm{e}^{-ax}}{a^2}\Big|_0^\infty = \frac{1}{a^2}\end{aligned}$$