Skript zur 2. Vorlesung "Quantenmechanik", Freitag den 15. April, 2011.

2 Mathematik: Fourier Analyse und Delta Funktion

Fourier Analyse ist ein wichtiges mathematisches Hilfsmittel bei der Analyse von Wellen und, daher, auch in der Quantenmechanik. In dieser Vorlesung wird die Fourier Analyse und ihre Beziehung zur Dirac Delta Funktion besprochen.

2.1 Dirac Delta-Funktion

1. Die Dirac Delta Funktion $\delta(x)$ ist eine reelle Funktion $\delta(x)$ mit den Eigenschaften

   - $\delta(x) = \delta(-x)$,
   - $\delta(x) = 0$ für $x \neq 0$,
   - $\int dx \delta(x) = 1$.

2. Aus diesen Eigenschaften folgen die weitere Eigenschaften:

   - $\int_a^b dx\, F(x)\delta(x) = F(0)$

     für eine beliebige, stetige Funktion $F(x)$, wenn $a < 0$ und $b > 0$. Wenn nicht $a < 0 < b$, dann $\int_a^b dx\, F(x)\delta(x) = 0$.

   - $\int_a^b dx\, F(x)\delta(x - x') = \begin{cases} F(x') & \text{wenn } a < x' < b, \\ & \text{sonst.} \end{cases}$

   - $\int_a^b dx\, F(x)\delta(cx - cx') = \begin{cases} \frac{F(x')}{|c|} & \text{wenn } a < x' < b, \\ 0 & \text{sonst.} \end{cases}$

     Beweis: Wenn $c > 0$:

$$
\begin{aligned}
\int_a^b dx\, F(x)\delta(cx - cx') &= \frac{1}{c}\int_{ac}^{bc} dy\, F\left(\frac{y}{c}\right)\delta(y - cx') \\
&= \frac{1}{c}F\left(\frac{x'c}{c}\right) \qquad (\text{wenn } a < x' < b) \\
&= \frac{1}{c}F(x') \qquad (\text{wenn } a < x' < b)
\end{aligned}
$$

Wenn $c < 0$:

$$\begin{aligned}
\int_a^b dx\, F(x)\delta(cx - cx') &= -\frac{1}{c}\int_{-ac}^{-bc} dy\, F\left(-\frac{y}{c}\right)\delta(-y - cx') \\
&= -\frac{1}{c}\int_{-ac}^{-bc} dy\, F\left(\frac{-y}{c}\right)\delta(y + cx') \quad \text{(weil } \delta \text{ symmetrisch)} \\
&= -\frac{1}{c}F\left(-\frac{-x'c}{c}\right) \quad \text{(wenn } a < x' < b) \\
&= -\frac{1}{c}F(x') \quad \text{(wenn } a < x' < b)
\end{aligned}$$

- Es folgt direkt aus den vorherigen Eigenschaften, dass

$$\int_a^b dx\, F(x)\delta\left(g(x)\right) = \sum_{n:\ x_n \text{ Nullstelle von } g(x)} \frac{1}{|g'(x_n)|}F(x'_n).$$

Die oben genannten Eigenschaften beziehen sich alle auf Integrale. Es ist sehr wichtig, zu bedenken, dass die δ-Funktion nur eine Bedeutung in einem Integral hat. In der Mathematik werden solche Objekte "Distributionen" genannt. Mathematiker sprechen deshalb auch von de "Delta Distribution", nicht von der "Delta Funktion". Die meisten Physiker machen diesen Unterschied nicht, und betrachten, auf jeden Fall rein symbolisch, die Dirac Delta Funktion als eine normale Funktion. So werden die vier oben genannten Eigenschaften als Eigenschaften einer Funktion geschrieben:

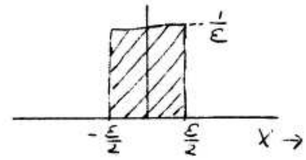
$$\begin{aligned}
F(x)\delta(x) &= F(0)\delta(x) \\
F(x)\delta(x - x') &= F(x')\delta(x - x') \\
F(x)\delta(cx - cx') &= \frac{1}{|c|}F(x')\delta(x - x') \\
F(x)\delta\left(g(x)\right) &= \sum_n \frac{1}{|g'(x'_n)|}F(x'_n)\delta(x - x'_n)
\end{aligned}$$

(In der letzten Gleichung findet die Summe über die Nullstellen der Funktion $g(x)$ statt.) Man sollte aber immer bedenken, dass diese und ähnliche Gleichungen nur in einem Integral eine Bedeutung haben!

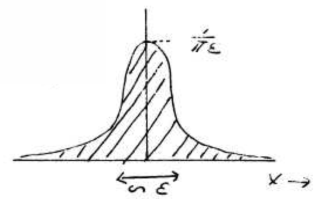
3. Eine Darstellung der δ-Funktion ist eine reguläre Funktion $\delta_\epsilon(x)$, für die der Limes $\epsilon \to 0$ die Eigenschaften der δ-Funktion hat.

   Beispiele:

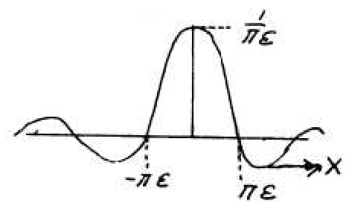
- $\delta_\epsilon(x) = \begin{cases} \frac{1}{\epsilon} & \text{für } |x| < \frac{\epsilon}{2} \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$



- $\delta_\epsilon(x) = \frac{1}{\pi}\frac{\epsilon}{x^2+\epsilon^2} = \frac{1}{\pi}\text{Im}\left(\frac{1}{x-i\epsilon^2}\right) = -\frac{1}{\pi}\text{Im}\left(\frac{1}{x+i\epsilon}\right)$



- $\delta_\epsilon(x) = \frac{1}{\pi x}\sin\frac{x}{\epsilon}$



Aus der letzten Darstellung der δ-Funktion folgt eine wichtige Gleichung:

$$\begin{aligned} \delta(x) &= \lim_{\epsilon\downarrow 0}\frac{1}{\pi}\frac{\sin\frac{x}{\epsilon}}{x} \\ &= \lim_{L\to\infty}\frac{1}{\pi}\frac{\sin(xL)}{x} \\ &= \lim_{L\to\infty}\frac{1}{2\pi}\int_{-L}^{L} dk\,\cos kx \\ &= \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} dk\,\cos kx = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} dk\, e^{ikx} \end{aligned}$$

Dies ist die Fourier-Darstellung der δ-Funktion.

4. Wir werden häufig eine δ-Funktion in 3 Dimensionen benützen,

$$\delta(x,y,z) = \delta(x)\delta(y)\delta(z).$$

Man schreibt $\delta(\mathbf{r}) = \delta(x, y, z)$. Die Fourier-Darstellung von $\delta(\mathbf{r})$ ist:

$$\delta(\mathbf{r}) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\mathbf{k}\, e^{i\mathbf{kr}}.$$

2.2 Fourier Theorie

Eine Funktion $F(x)$ mit der Eigenschaft

$$\int_{\infty}^{\infty} dx\, |F(x)|^2 < \infty$$

wird quadratintegrabel genannt. Die Fourier Theorie beschäftigt sich mit solchen quadratintegrablen Funktionen.

1. Sei $F(x)$ eine quadratintegrable Funktion, dann

   $$F(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dk\, G(k) e^{ikx}, \quad \text{wobei} \quad G(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dx\, F(x) e^{-ikx}.$$

   Hier heißt $G(k)$ "Fourier-transformierte Funktion".

   Beweis durch die Fourier-Darstellung der Delta Funktion:

   $$\begin{aligned} F(x) &= \int_{-\infty}^{\infty} dx'\, F(x') \delta(x' - x) \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dx'\, F(x') \int_{-\infty}^{\infty} dk\, e^{ik(x-x')} \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dk\, G(k) e^{ikx}. \end{aligned}$$

2. Wichtiger Satz aus der Fourier-Theorie (Parseval): Sei $F(x)$ eine quadratintegrable Funktion und $G(k)$ die Fourier-transformierte, dann gilt

   $$\int_{-\infty}^{\infty} dx\, |F(x)|^2 = \int_{-\infty}^{\infty} dk\, |G(k)|^2$$

   Beweis: Die Fourier-tranformierte der komplex-konjugierte Funktion $F^*(x)$ ist

   $$F^*(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dk\, G^*(k) e^{-ikx}.$$

Dann findet man, dass

$$\begin{aligned}\int_{-\infty}^{\infty} dx\, F^*(x)F(x) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-\infty}^{\infty} dk G^*(k)e^{-ikx}F(x) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} dk\, G^*(k)\int_{-\infty}^{\infty} dx\, F(x)e^{-ikx} \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dk\, G^*(k)G(k).\end{aligned}$$

Eine Generalisierung des Parsevalschen Theorems beschäftigt sich mit zwei quadratintegrablen Funktionen $F_1(x)$ und $F_2(x)$. In diesem Fall gilt

$$\int dx F_1^*(x)F_2(x) = \int dk G_1^*(k)G_2(k),$$

wobei $G_j(k)$ die Fourier-Transformierte von $F_j(x)$ ist,

$$G_j(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int dx F_j(x)e^{-ikx}, \quad j = 1, 2.$$

Beweis: Versuchen Sie es selbst!

3. Für quadratintegrable Funktionen $F(\mathbf{r}) = F(x, y, z)$ in drei Dimensionen gilt ähnlich, dass

$$F(\mathbf{r}) = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}}\int d\mathbf{k}\, G(\mathbf{k})e^{i\mathbf{kr}}, \qquad G(\mathbf{k}) = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}}\int d\mathbf{r}\, F(\mathbf{r})e^{-i\mathbf{kr}}.$$

4. Wenn Verwechslung ausgeschlossen ist, schreiben wir häufig $F(k)$ oder $F(\mathbf{k})$ für die Fourier-Transformierte einer Funktion $F(x)$ bzw. $F(\mathbf{r})$.

5. Ein wichtiges Beispiel einer Fourier Transformation ist die Fourier-transfomierte der Gauß-Funktion

$$F(x) = \frac{1}{(\pi d^2)^{\frac{1}{4}}}e^{-\frac{x^2}{2d^2}}.$$

Mit dem Gausschen Integral

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx\, \exp\left(-ax^2 \pm ibx\right) = \sqrt{\frac{\pi}{a}}e^{-\frac{b^2}{4a}}$$

mit $a > 0$ findet man dann, dass

$$G(k) = \left(\frac{d^2}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{1}{2}d^2k^2}.$$

Durch Berechnung lässt sich nun schnell überprüfen, dass

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \; |F(x)|^2 = \int_{-\infty}^{\infty} dk \, |G(k)|^2 = 1.$$

Eine wichtige Beobachtung ist, dass für kleine d $F(x)$ eine hohe Spitze bei $x = 0$ hat. Die Fourier-Transformierte $G(k)$ hat dann ein breites Maximum bei $k = 0$. Für große d gilt genau das Umgekehrte.