A.5 Die Delta-Distribution

Oft werden wir Räume mit kontinuierlichen Koordinaten wie z.B. x benötigen. Dazu werden wir den sehr effizienten Formalismus von *Dirac* benutzen und brauchen Distributionen, insbesondere die δ-Distribution. Wir werden den Formalismus möglichst einfach halten und Konvergenzfragen nur kurz diskutieren. Eine strengere mathematische Behandlung findet man in Lehrbüchern zur Theorie von Distributionen.

Motivation

Ein Beispiel für das Auftreten der δ-Distribution ergibt sich beim elastischen Stoß zweier Kugeln derselben Masse. Die erste Kugel mit Impuls p_0 stoße gegen eine ruhende zweite Kugel. Nach Abschluss des Stoßes ruht die erste Kugel und die zweite Kugel hat den Impuls p_0. Der Stoß benötigt eine endliche Zeitspanne Δt. Währenddessen tritt eine Kraft $F(t) = \frac{dp}{dt}$ auf. Das Integral unter der Kurve $F(t)$ ist der gesamte Impulsübertrag

$$\Delta p = \int F(t)\,\mathrm{d}t = p_0 \;.$$

Es ist unabhängig von der Stoßzeit. Der zeitliche Verlauf der Kraft $F(t)$ wird daher immer schärfer, je kürzer die Stoßzeit Δt ist.

Kann man auch den Grenzfall $\Delta t \to 0$ beschreiben ? In diesem Grenzfall ist der Impulsübertrag instantan. Die Kraft $F(t)$ hat dann die Form einer Nadel: sie ist immer Null, außer zu einem Zeit*punkt* t_0. Trotzdem muss das

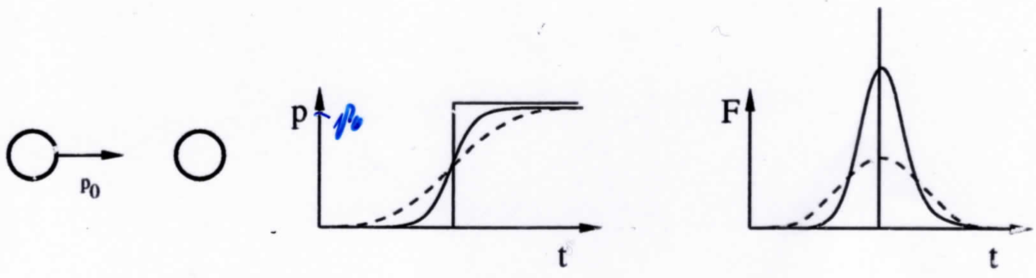


Abbildung A.2: Elastischer Stoß zweier Kugeln mit unterschiedlichen Stoßzeiten.

Integral $\int\, F(t)\,\mathrm{d}t = p_0$ immer noch endlich sein. Diese Eigenschaften können nicht von einer *Funktion* mit Werten $F(t)$ erfüllt werden. Stattdessen benötigen wir Distributionen.

$f \mapsto \mathbb{R}$

Distributionen

Distributionen sind *Funktionale*, d.h. Funktionen von Funktionen. Sie sind auf **Testfunktionen** f aus einem Testfunktionenraum T mit geeigneten Eigenschaften definiert. Insbesondere müssen die Testfunktionen genügend oft stetig differenzierbar sein. Sie dürfen auch nicht zu stark divergieren.

Für die Definition der δ-Distribution genügen Testfunktionen f, die

1) stetig sind, nicht zu stark divergieren, und
2) im Unendlichen genügend stark abfallen, so dass alle auftretenden Integrale konvergieren. Insbesondere soll gelten

$$\lim_{x\to\pm\infty} f(x) \;=\; 0\;.$$

Distributionen bilden Testfunktionen auf die reellen Zahlen ab:

$$\begin{aligned} \hat{\varphi}: T &\mapsto \mathbb{R} \\ f &\mapsto \hat{\varphi}(f) \end{aligned}$$

Diese Abbildung soll *linear* und *stetig* sein.

Oft kann man eine Distribution $\hat{\varphi}(f)$ als ein Integral schreiben:

$$(\varphi, f) \;\equiv\; \hat{\varphi}(f) \;=\; \int_{-\infty}^{\infty} \varphi^*(x)\, f(x)\,\mathrm{d}x \qquad \text{(A.74)}$$

mit einer *Funktion* φ, die man dem Funktional $\hat{\varphi}$ zuordnen kann. Umgekehrt definieren alle Funktionen φ auf diese Weise eine Distribution $\hat{\varphi}$.

A.5.1 δ-Distribution

Die Delta-Distribution $\hat{\delta}$ ist *definiert* über

$$\boxed{\hat{\delta}(f) \;:=\; f(0)\,.} \tag{A.75}$$

Sie bildet jede Funktion f auf den Wert der Funktion beim Argument Null ab.

Üblicherweise schreibt man diese Beziehung symbolisch in der gleichen Form wie Gl. (A.74):

$$\boxed{\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x)\, f(x)\, \mathrm{d}x \;:=\; f(0)\;.} \tag{A.76}$$

Diese Schreibweise ist für Rechnungen bequem. Es gibt allerdings keine normale *Funktion* mit Werten $\delta(x)$, die diese Beziehung erfüllt ! Für eine solche Funktion müsste (wie bei der Kraft $F(t)$ im obigen Beispiel) gelten

$$\delta(x) \;\stackrel{?}{=}\; \begin{cases} 0, & x \neq 0 \\ \infty, & x = 0 \end{cases} \quad ,$$

aber so, dass Gl. (A.76) erfüllt wäre.

Stattdessen kann man $\hat{\delta}$ aber als *Limes* von Integralen wie Gl. (A.74) darstellen:

$$\boxed{\hat{\delta}(f) \;=\; \lim_{\alpha\to 0} \int_{-\infty}^{\infty} \delta_\alpha(x)\, f(x)\, \mathrm{d}x \;=\; f(0)} \tag{A.77}$$

mit Hilfe einer *Schar* von normalen Funktionen δ_α, die von einem Parameter α abhängen, und die sich bei $\alpha \to 0$ immer weiter auf Null konzentrieren müssen.

Achtung: Integral und Grenzwert vertauschen hier nicht, denn dann erhielten wir Gl. (A.76) mit einer normalen Funktion δ.

Konkret müssen die Funktionen δ_α die folgenden Bedingungen erfüllen:

1) Normierung: $\int_{-\infty}^{\infty} \delta_\alpha(x)\, \mathrm{d}x = 1$ für alle α

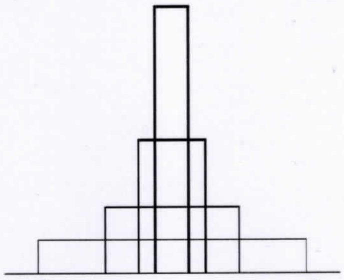
2) Konzentration der gesamten Norm auf ein infinitesimales Intervall um Null:

$$\lim_{\alpha\to 0} \int_{|x|\leq A} \delta_\alpha(x)\, \mathrm{d}x = 1$$

für alle $A > 0$.

Ein *Beispiel* für eine solche Funktionenschar sind die folgenden Rechtecke:

$$\delta_\alpha(x) \;:=\; \begin{cases} 0, & |x| > \frac{\alpha}{2} \\ \frac{1}{\alpha}, & |x| < \frac{\alpha}{2} \end{cases} \quad ,$$



Sie erfüllen offensichtlich die Bedingungen 1) und 2). $-\frac{\alpha}{2}$ $+\frac{\alpha}{2}$
Das Integral mit einer Testfunktion f ist

$$(\delta_\alpha, f) \equiv \int_{-\infty}^{\infty} \delta_\alpha(x)\, f(x)\, \mathrm{d}x \;=\; \frac{1}{\alpha} \int_{-\alpha/2}^{\alpha/2} f(x)\, \mathrm{d}x$$

$$\overset{\text{Mittelwertsatz}}{=} \;\frac{1}{\alpha}\, \alpha\, f(\tilde{x}) \;=\; f(\tilde{x}), \;\text{ mit }\; \tilde{x} \in \left[-\frac{\alpha}{2}, \frac{\alpha}{2}\right] .$$

Für den Limes $\lim_{\alpha\to 0}$ folgt also wie gewünscht

$$\lim_{\alpha\to 0}\; (\delta_\alpha, f) \;=\; f(0) \;. \;= \hat{\delta}(f)$$

Man beachte: die Anwendung der Delta-Distribution auf eine Testfunktion ist mit Hilfe einer Funktionenschar und des Limes $\lim_{\alpha\to 0}$ über ein Integral definiert. Die Schreibweise Gl. (A.76) ist als Kurzschreibweise für einen solchen Prozess zu interpretieren: Mit diesem Hintergrundwissen kann man in der Praxis Gl. (A.76) direkt anwenden.

Obwohl es keine *Funktion* δ gibt, spricht man üblicherweise von der Diracschen „Delta-Funktion $\delta(x)$". *Dieser Ausdruck macht nur Sinn, wenn er letztlich unter einem Integral steht !*

Weitere Beispiele für geeignete Funktionenfolgen:

1) $\dfrac{1}{\sqrt{2\pi\alpha}}\, \mathrm{e}^{-\frac{x^2}{2\alpha}}$

2) $\dfrac{1}{\pi}\, \dfrac{\alpha}{x^2+\alpha^2}$

3) $\dfrac{\sin(x/\alpha)}{\pi x} \;=\; \dfrac{1}{2\pi} \displaystyle\int_{-1/\alpha}^{1/\alpha} \mathrm{e}^{\mathrm{i}xt}\, \mathrm{d}t$

Die Kurzform der letzten Beziehung ist

$$\boxed{\delta(x) \;=\; \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{e}^{\mathrm{i}xt}\, \mathrm{d}t \;.} \qquad \text{(A.78)}$$

23.3.2023

A.5.2 Differentiation von Distributionen

Es ist nützlich, auch der Ableitung einer Distribution eine Bedeutung zu geben. Wir benötigen dann Testfunktionen, die zumindest einmal stetig differenzierbar sind. Sie müssen weiterhin im Unendlichen auf Null abfallen: $f(\pm\infty) = 0$.

Wir definieren die Ableitung einer Distribution $\hat{\varphi}$ über die Ableitung der zugehörigen Funktionen φ_α mit Hilfe einer partiellen Integration:

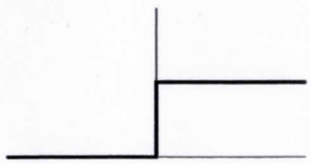
$$
\begin{aligned}
\hat{\varphi}'(f) &:= \lim_{\alpha\to 0} \int_{-\infty}^{\infty} \varphi_\alpha'(x)\, f(x)\, \mathrm{d}x \\
&= \lim_{\alpha\to 0} \left(\underbrace{\varphi_\alpha(x) f(x)\big|_{-\infty}^{\infty}}_{=0} - \int_{-\infty}^{\infty} \varphi_\alpha(x)\, f'(x)\, \mathrm{d}x \right) \\
&= -\,\hat{\varphi}(f')
\end{aligned}
$$

Die Ableitung überträgt sich also auf die Testfunktion. Für die δ-Distribution erhält man

$$\hat{\delta}'(f) \;=\; -\hat{\delta}(f') \;=\; -f'(0) \;.$$

Beispiel: *Heavisidesche Stufenfunktion*

$$\theta(x) \;:=\; \begin{cases} 1, & x > 0 \\ 0 & x \leq 0 \end{cases} \quad , \qquad \text{(A.79)}$$



Wenn man die Ableitung der zugehörigen Distribution auf eine Testfunktion f anwendet, findet man

$$
\begin{aligned}
\hat{\theta}'(f) &= -\,\hat{\theta}(f') \\
&= -\int_{-\infty}^{\infty} \theta(x)\, f'(x)\, \mathrm{d}x \;=\; -\int_{0}^{\infty} f'(x)\, \mathrm{d}x \;=\; -\; f(x)\big|_0^{\infty} \\
&= f(0) \;.
\end{aligned}
$$

Dies ist aber gerade die Definition der Delta-Distribution. Die Ableitung der Stufenfunktion ergibt also die Delta-Distribution.

$$\boxed{\hat{\theta}' \;=\; \hat{\delta}\,.} \qquad \text{(A.80)}$$

Damit bekommen wir die Antwort zum Grenzfall des einleitend betrachteten elastischen Stoßes: Im Grenzfall $\Delta t \to 0$ wird der Impuls des zweiten Teilchens zur θ-Funktion und die Kraft zur Delta-Distribution:

$$\begin{aligned}
\text{Impuls}\;\; p(t) &= p_0\,\theta(t) \\
\text{Kraft}\;\; F(t) &= p'(t) = p_0\,\delta(t)\ .
\end{aligned}$$

A.5.3 Delta-Distribution mit transformiertem Argument

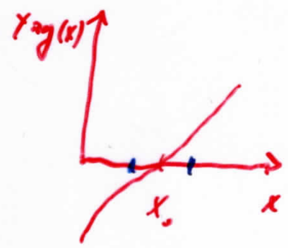
Zunächst berechnen wir die Wirkung von $\delta(x-x_0)$ durch Anwenden auf eine Testfunktion und Substitution $y = x - x_0$:

$$\begin{aligned}
\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x-x_0)\, f(x)\, \mathrm{d}x \equiv \;& \lim_{\alpha\to 0} \int_{-\infty}^{\infty} \delta_\alpha(x-x_0)\, f(x)\, \mathrm{d}x \\
=\;& \lim_{\alpha\to 0} \int_{-\infty}^{\infty} \delta_\alpha(y)\, f(y+x_0)\, \mathrm{d}y \\
=\;& f(x_0)\ .
\end{aligned}$$

Allgemein gilt für eine Funktion $g(x)$ mit aussschließlich *ein*fachen Nullstellen x_i:

$$\boxed{\delta\left(g(x)\right) \;=\; \sum_i \frac{\delta(x-x_i)}{|g'(x_i)|}} \tag{A.79}$$

Wir zeigen dies zunächst für den Fall, dass $g(x)$ streng monoton ist, also $g'(x) \neq 0$, und eine Nullstelle $g(x_0) = 0$ hat. Weil $g'(x) \neq 0$, gibt es zu $y = g(x)$ eine Umkehrfunktion, mit $x = g^{-1}(y)$.



Wir können dann das Integral über eine Testfunktion berechnen:

$$\begin{aligned}
\int_{-\infty}^{\infty} \delta(g(x))\, f(x)\, \mathrm{d}x =\;& \int_{-\infty}^{\infty} \delta(y))\, f\,\underbrace{\left(g^{-1}(y)\right)}_{x}\, \frac{\mathrm{d}y}{|g'\,\underbrace{\left(g^{-1}(y)\right)}_{x}|} \\
=\;& \left.\frac{f\,\overbrace{\left(g^{-1}(y)\right)}^{x}}{|g'\,\underbrace{\left(g^{-1}(y)\right)}_{x}|}\right|_{y=0} \\
=\;& \frac{f(x_0)}{|g'(x_0)|} \;=\; \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\delta(x-x_0)}{|g'(x_0)|}\, f(x)\, \mathrm{d}x\ .
\end{aligned}$$

Hierbei haben wir substituiert:

$$y = g(x) \quad \Rightarrow \quad g'(x) = \frac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}x} \quad \Rightarrow \quad \mathrm{d}x = \frac{\mathrm{d}y}{g'(x)} \quad = \quad \frac{\mathrm{d}y}{g'(g^{-1}(y))} \quad .$$

Die Betragszeichen im Nenner treten auf, weil sich bei $g' < 0$ die Integrationsgrenzen vertauschen. Die Nullstelle $y = 0$ schließlich bedeutet $0 = y = g(x) \quad \Rightarrow \quad x = x_0$.

Wenn die Funktion g *mehrere* einfache Nullstellen hat, tragen nur die Umgebungen der Nullstellen zum Integral bei. Zu jeder einfachen Nullstelle gibt es eine genügend kleine Umgebung, so dass dort die Funktion streng monoton ist und obige Überlegung angewandt werden kann. Das Endergebnis ergibt sich als Summe über alle Nullstellen.

Eine weitere wichtige Beziehung ist

$$\boxed{g(x)\,\delta(x-y) \quad = \quad g(y)\,\delta(x-y)\,,} \tag{A.81}$$

insbesondere

$$\boxed{x\,\delta(x-y) \quad = \quad y\,\delta(x-y)\,.}$$

Dies folgt (für geeignete Funktionen f und g) aus

$$\int dx\, \underbrace{\overset{\text{Testfkt.}}{f(x)}\, g(x)}_{\overset{!}{\in}\, T}\!\!\!\!\!\!\overbrace{\;\delta(x-y)}^{\text{Distribution}} \quad = \quad f(y)\,g(y) \quad = \quad \int dx\, f(x)\,g(y)\,\delta(x-y)\,.$$

N.B. Bei mehrfachen Nullstellen der Funktion g(x) ist delta(g(x)) nicht definiert !

A.6 Der Ortsraum

Wir behandeln nun Funktionen $f(x)$, wobei x eine Position im Raum ist. Zunächst betrachten wir diskrete Positionen x_i und anschließend kontinuierliche x.

A.6.1 Funktionen als Vektoren

Funktionen $f(x)$ kann man als *Vektoren* auffassen:

Endlich viele Stützstellen

Das einfachste Beispiel ist eine Funktion mit endlich vielen Stützstellen x_i, $i = 1, ..., n$. Die Funkion ist durch die n *Werte* $f(x_i)$ bestimmt.

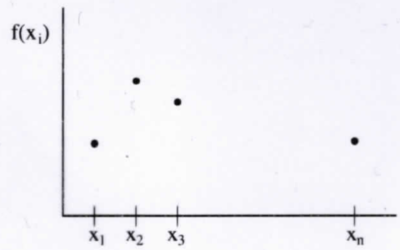


Abbildung A.3: *Funktion mit endlich vielen Stützstellen.*

Diese *Werte* kann man *als Koordinaten eines Vektors* interpretieren: $f(x_i)$ sind die Koeffizienten von "Basisvektoren", die wir $\vec{x}_i$ nennen, und die ganze *Funktion* ist dann ein *Vektor* in $\mathbb{R}^n$.

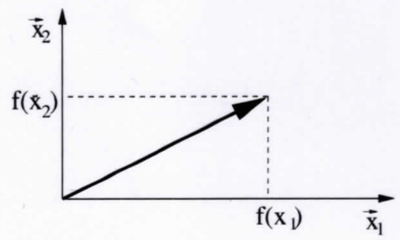


Abbildung A.4: *Funktion mit zwei Stützstellen, interpretiert als Vektor.*

Abstraktere Schreibweise mit Bra und Ket:

$$\underbrace{|f\rangle}_{\text{Vektor}} = \sum_i \underbrace{|x_i\rangle}_{\text{Basisvektor}} \underbrace{f(x_i)}_{\text{Koeffizienten}} = \sum_i |x_i\rangle \underbrace{\langle x_i|f\rangle}_{f(x_i)} \tag{A.82}$$

$|x_i\rangle$ ist ein Basisvektor, äquivalent zu einer Funktion mit Wert 1 bei x_i, Null sonst. Seine Darstellung im $\mathbb{R}^n$ ist der Basisvektor x_i (mit Pfeil). ~~dem Wert 1 bei x_i, und Null sonst~~.

Bedeutung des Ket-Vektors I x_i > : Zustand, bei dem das Teilchen sich am Punkt x_i befindet.

Die Basisvektoren könnte man auch anders nennen. Für die Verallgemeinerung auf kontinuierliche Orte ist aber $|x_i\rangle$ am günstigsten.

Die Abbildung $\langle x_i|$ bedeutet: Man nehme den Funktionswert an der Stelle x_i :

$$\boxed{\langle x_i|f\rangle = f(x_i)} \tag{A.83}$$

Der endlich dimensionale Vektorraum ist derselbe wie in den vorigen Kapiteln. Nur die Interpretation der Koeffizienten hat sich geändert. Daher gelten weiterhin:

Orthonormalität der Basisvektoren: $\langle x_i|x_j\rangle = \delta_{ij}$.
Vollständigkeit: $\sum_i |x_i\rangle\langle x_i| = \hat{\mathbb{1}}$.

Abzählbar unendlich viele Stützstellen

Dieser Fall unterscheidet sich in der Diracschen Formulierung nicht wesentlich von der Situation mit endlich vielen Stützstellen.Die Koeffizienten müssen nun geeignete Normierungsbedingungen erfüllen, damit die zu berechnenden Ausdrücke wohl-definiert sind. In der Diracschen Formulierung kann man dabei, wie wir noch sehen werden, auch mit nichtnormierbaren Vektoren arbeiten, die z.B. ebenen Wellen entsprechen.

Funktion $f(x)$ eines kontinuierlichen Arguments

Zu einem kontinuierlichen Argument x kommt man, indem man die Stützstellen x_i immer dichter werden lässt. Dann geht die Summe über die Stützstellen in ein Integral über

$$\sum_i (\Delta x) \quad \mapsto \quad \int \mathrm{d}x \ ,$$

wobei Δx die (hier als konstant angenommene) Intervall-Länge zwischen den Stützpunkten ist. Diese Intervall-Länge benötigen wir im rein diskreten Fall nicht.

Die Integrationsgrenzen sind in der Regel $-\infty$ und ∞. Gelegentlich ist es auch sinnvoll, ein nur endlich langes Intervall im Ort zu betrachten. Das kann man aber auch erreichen, indem man $f(x)$ außerhalb des Intervalls auf Null setzt.

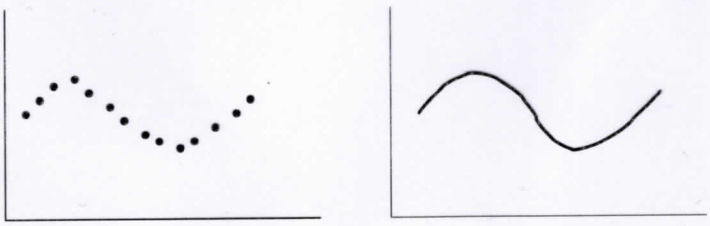


Abbildung A.5: *Eine Funktion mit vielen dichten Stützstellen geht im Grenzfall in eine Funktion eines kontinuierlichen Argumentes über.*

A.6.2 Kontinuierlicher Ortsraum

Wenn wir x als eine Koordinate im Raum auffassen, gelangen wir zum kontinuierlichen Ortsraum. Wir betrachten im Folgenden der Einfachheit halber zunächst nur 1 räumliche Dimension. Die Behandlung ist nicht rigoros; wir werden z.B. auf Fragen wie Randbedingungen, Definitionsbereiche und Konvergenz nur zum Teil eingehen. Aus der Basisdarstellung Gl. (A.82) eines beliebigen Vektors $|\psi\rangle$ wird die

ORTSRAUMDARSTELLUNG: WELLENFUNKTION

$$\underbrace{|\psi\rangle}_{\text{Vektor}} = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x\, |x\rangle \underbrace{\langle x|\psi\rangle}_{\psi(x)} . \tag{A.84}$$

Die Werte $\psi(x)$ bilden die *Koeffizienten* oder *Darstellung* des abstrakten Vektors $|\psi\rangle$ im Ortsraum. Die Funktion $\psi(x)$ nennt man in der Quantenmechanik die *"Wellenfunktion"*. wenn I psi > der qm Zustand ist.

Es gibt jetzt kontinuierlich viele Basisvektoren $|x\rangle$. Wie wir gleich sehen werden, sind sie aber nicht mehr normierbar! Die mathematische Standard-Beschreibung von Operatoren in kontinuierlichen Räumen vermeidet solche nicht-normierbaren Vektoren. Sie geht auf von Neumann zurück und benutzt Stieltjes-Integrale mit geeigneten Integrations-Maßen. Wir werden diesen Zugang in Kapitel A.10 kurz kennenlernen.

In der Praxis viel bequemer und deswegen sehr gebräuchlich ist es, Dirac folgend *den bisherigen Formalismus beizubehalten* und Distributionen zu benutzen, insbesondere die Diracsche Delta-Distribution. Wir werden diesen Zugang benutzen.

Das Erscheinen der Deltafunktion sieht man z.B. am Spezialfall $|\psi\rangle = |y\rangle$. Aus Gl. (A.84) wird

$$|y\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}\,x\; |x\rangle\; \langle x|y\rangle .$$

Dies kann nur gelten, wenn die Orthonormalitätsrelation zwischen den Basisvektoren $|x\rangle$ und $|y\rangle$ jetzt nicht mehr $\langle \cancel{x}_i|\cancel{x}_j\rangle = \delta_{ij}$ lautet, sondern

$$\boxed{\langle\, x\,|\,y\,\rangle \;=\; \delta(x-y)} . \tag{A.85}$$

(s.u.) Dann ist tatsächlich $\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}\,x\, |x\rangle\, \langle x|y\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x\, |x\rangle\, \delta(x-y) = |y\rangle$.

$\langle\, x\,|\,y\,\rangle \;=\; \delta(x-y)$ ist auch die Darstellung des Vektors $|y\rangle$ im Ortsraum. Die Vollständigkeitsrelation wird jetzt zu

$$\boxed{\hat{1\!\!1} \;=\; \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x\, |x\rangle\langle x|} , \tag{A.86}$$

Zur Rechnung unter Gleichung (A.85): Um mit der Delta-Distribution rechnen zu können, braucht man zunächst eigentlich Testfunktionen f(x). Man erhält sie durch Multiplikation der Gleichung von links mit einem Testvektor < f I.
Man bekommt dann auf der rechten Seite < f I y >. Da dies für jeden Testvektor <fI gilt, gilt die Rechnung auch für die Ket-Vektoren, so wie sie im Text stehen.
Schlussfolgerung: Man kann auch Ket-Vektoren Ix> behandeln wie Testfunktionen (und analog auch Bra-Vektoren <xI), so wie das in der Rechnung schon gemacht wird.

$$\text{denn} \quad |y\rangle \stackrel{?}{=} \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x\, |x\rangle\langle x|}_{=\hat{1}\,?} \, |y\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x\, |x\rangle\, \delta(x-y) = |y\rangle\,.$$

Das Auftreten des Integrals statt der Summe, sowie der Delta-Funktion statt des Kronecker-Deltas, sind in diesen Beziehungen die einzigen Änderungen gegenüber den diskreten Vektorräumen.

Verallgemeinerung auf drei räumliche Dimensionen.

Diese Verallgemeinerung erhält man einfach über den Produktraum. Die Basisvektoren sind dann $|x_1, x_2, x_3\rangle = |x_1\rangle \otimes |x_2\rangle \otimes |x_3\rangle$, was man auch $= |x_1\rangle|x_2\rangle|x_3\rangle$ als $|\vec{x}\rangle$ schreibt. Aus dem Integral $\int \mathrm{d}x$ wird $\int \mathrm{d}\vec{x} = \int \mathrm{d}x_1\, \mathrm{d}x_2\, \mathrm{d}x_3$ und die Orthonormalitätsrelation lautet nun

$$\begin{aligned}\langle \vec{x}\,|\,\vec{y}\rangle &= \delta^{(3)}(\vec{x}-\vec{y}) \equiv \delta(\vec{x}-\vec{y}) \\ &:= \delta(x_1-y_1)\ \delta(x_2-y_2)\ \delta(x_3-y_3)\,.\end{aligned} \tag{A.87}$$

Im Folgenden beschreiben wir der Einfachheit halber wieder den eindimensionalen Fall $\int \mathrm{d}x$.

A.6.3 Zur Spektraldarstellung

Eigenwerte λ und Eigenvektoren $|a_\lambda\rangle$ eines Operators $\hat{A}$ sind weiterhin über die Gleichung

$$\hat{A}\,|a_\lambda\rangle = \lambda\,|a_\lambda\rangle$$

definiert. Ein hermitescher Operator *kann* dabei im allgemeinen sowohl kontinuierliche als auch diskrete Eigenwerte λ besitzen !

Beispiel: Die Eigenwerte des Hamiltonoperators $\hat{H}$ eines Systems sind die möglichen Werte der Energie dieses Systems. Bei einem Wassserstoffatom zum Beispiel gibt es sowohl diskrete Werte der Energie, für die gebundenen Zustände des Elektrons, als auch die kontinuierlichen Werte der Energie jenseits der Ionisationsschwelle.

Auch mit kontinuierlichen Eigenwerten kann man eine Spektraldarstellung schreiben. Sie hat im Diracschen Formalismus oft die einfache Form

$$\hat{A} = \int \mathrm{d}\lambda\, \lambda\, |a_\lambda\rangle\langle a_\lambda| + \sum_i \lambda_i\, |a_i\rangle\langle a_i|\,, \tag{A.88}$$

mit kontinuierlichen Eigenwerten λ und diskreten Eigenwerten λ_i. Mehr zur Spektraldarstellung folgt im Zusammenhang mit dem von Neumannschen Formalismus in Kap. A.10.

A.6.4 Der Ortsoperator

Der Ortsoperator $\hat{Q} \equiv \hat{X}$ ist in der Quantenmechanik besonders wichtig. Wir betrachten der Einfachheit halber zunächst nur einen 1-dim. Ortsraum mit Koordinate x. Der Operator $\hat{Q}$ ist über die Eigenwertgleichung

$$\boxed{\hat{Q}\, f(x) \;:=\; x\, f(x)} \tag{A.89}$$

definiert. Diese Gleichung ist etwas missverständlich. Es ist *nicht* gemeint, den Operator $\hat{Q}$ auf die *Zahl* $f(x)$ anzuwenden, was keinen Sinn machen würde. Stattdessen ist Gl. (A.89) zu lesen als

$$\left(\hat{Q}\, f\right)(x) \;=\; x\, f(x)\ . \tag{A.90}$$

Somit wird der Operator $\hat{Q}$ auf die Funktion f angewandt. Das Ergebnis ist wieder eine Funktion. An der Stelle x soll die neue Funktion den Zahlenwert $x\, f(x)$ haben. In Bra- und Ket-Schreibweise wird daraus

$$\langle x|\hat{Q}|f\rangle \;=\; x\,\langle x|f\rangle \;\equiv\; \langle x|x|f\rangle \quad = x\,\langle x|f\rangle = x\, f(x) \tag{A.91}$$

Hier ist x eine Zahl (räumliche Koordinate), die in das Matrixelement hineingezogen werden konnte. Dagegen ist das x in $\langle x|$ ein *Name*, der geeignet gewählt wurde, so dass er gleich die Koordinate spezifiziert. Die Gleichung Gl. (A.91) soll für *jedes* f gelten. Sie gilt daher auch als Operator-Gleichung

$$\boxed{\langle x|\,\hat{Q} \;=\; \langle x|\, x} \tag{A.92}$$

und beschreibt die Wirkung von $\hat{Q}$ bei Anwendung nach links.

Das Matrixelement von $\hat{Q}$ zwischen zwei beliebigen Basisvektoren $|x\rangle$ und $|y\rangle$ ist dann

$$\langle x|\,\hat{Q}\,|y\rangle \;=\; x\,\langle x|y\rangle \;=\; x\,\delta(x-y) \;=\; y\,\delta(x-y) \;=\; y\,\langle x|y\rangle\ . \tag{A.93}$$

Daraus können wir die Wirkung von $\hat{Q}$ nach rechts ablesen:

$$\boxed{\hat{Q}\,|y\rangle \;=\; y\,|y\rangle}\ . \tag{A.94}$$

Der Ortsoperator ist *hermitesch*:

$$\boxed{\hat{Q} = \hat{Q}^\dagger} \quad . \tag{A.95}$$

Wir zeigen dies durch Berechnen der Matrixelemente zwischen beliebigen Basisvektoren:

$$\langle x|\hat{Q}^\dagger|y\rangle \;\equiv\; \langle y|\hat{Q}|x\rangle^* \;=\; x\,\delta(x-y) \;=\; \langle x|\hat{Q}|y\rangle \;.$$

Der Ortsoperator ist auch *selbstadjungiert*.

Aus Gl. (A.94) sehen wir, dass der Ortsoperator $\hat{Q}$ die Eigenvektoren $|x\rangle$ mit zugehörigen Eigenwerten x besitzt. Die *Eigenfunktionen* des Ortsoperators im Ortsraum bekommt man durch die Darstellung dieser Eigenvektoren im Ortsraum: $\hat{=} \langle e_i|f\rangle$

$$\langle y|x\rangle \;=\; \delta(x-y)\;.$$

Dies sind also keine normalen Funktionen, sondern Distributionen. !

Die *Spektraldarstellung* des Ortsoperators lautet

$$\boxed{\hat{Q} \;=\; \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x \;\; x \;\; |x\rangle\langle x|} \quad . \tag{A.96}$$

25.3.2021

In dieser *Operator*-Form kann man den Ortsoperator immer verwenden, auch wenn er in einem Ausdruck auftritt, in dem $|x\rangle$ ansonsten nicht explizit vorkommt, weil eine andere Basis als die Ortsraumbasis verwendet wird.

Beispiel: Wir wenden wir die Spektraldarstellung auf einen Vektor $|f\rangle$ an und berechnen das Ergebnis an der Stelle x:

$$\langle x|\hat{Q}|f\rangle \;=\; \langle x|\overbrace{\int \mathrm{d}y\; y \;\; |y\rangle}^{\hat{Q}}\underbrace{\langle y|\;|f\rangle}_{f(y)} \;=\; \int \mathrm{d}y\; y\; \delta(x-y)\;\; f(y) \;=\; x\; f(x)$$

Wir finden wieder die definierende Gleichung $\hat{Q}\,f(x) = x\,f(x)$.

Mit Hilfe der Spektraldarstellung kann man den *Erwartungswert des Ortsoperators* in einem Zustand $|\psi\rangle$ umformen:

$$\langle\psi|\;\hat{Q}\;|\psi\rangle \;=\; \langle\psi|\int_{-\infty}^{\infty} dx\; x|x\rangle\langle x|\;|\psi\rangle \;=\; \int_{-\infty}^{\infty} dx\; x\;\langle\psi||x\rangle\;\langle x|\;|\psi\rangle\;,$$

und mit $\langle\psi|x\rangle = \psi^*(x)$ und $\langle x|\psi\rangle = \psi(x)$:

$$\langle\psi|\ \hat{Q}\ |\psi\rangle \;=\; \int_{-\infty}^{\infty} dx\ x\ |\psi(x)|^2 \tag{A.97}$$

Dies ist die Darstellung des Erwartungswertes des Ortsoperators im Ortsraum, d.h. über die Wellenfunktion $\psi(x) = \langle x|\psi\rangle$. Sie enthält die sogenannte *"Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte"* $|\psi(x)|^2$.

Mehrere räumliche Richtungen

Die verschiedenen räumlichen Richtungen bleiben völlig unabhängig. **Zu jeder Richtung** $\alpha = x, y, z$ **gibt es einen Ortsoperator** $\hat{Q}_\alpha$**,** der nur auf die Basisvektoren $|x_\alpha\rangle$ wirkt:

$$\hat{Q}_\alpha\,|x_\alpha\rangle \;=\; x_\alpha\,|x_\alpha\rangle\,. \tag{A.98}$$

Die Ortsoperatoren zu den verschiedenen Richtungen kann man zu einem Vektor zusammenfassen, $\hat{\vec{Q}} \equiv \hat{\vec{Q}} = \left(\hat{Q}_x, \hat{Q}_y, \hat{Q}_Z\right)$, der im Produktraum $|\vec{x}\rangle$ wirkt:

$$\hat{\vec{Q}}\,|\vec{x}\rangle \;=\; \vec{x}\,|\vec{x}\rangle\,. \tag{A.99}$$

$\hat{Q}_3\,|x_1\rangle|x_2\rangle|x_3\rangle$
$= |x_1\rangle|x_2\rangle\,\hat{Q}_3\,|x_3\rangle$
$= x_3\ |x_1\rangle|x_2\rangle|x_3\rangle$

Ortsoperator im diskreten Raum

Im Falle von diskreten Orten x_i definiert man den Ortsoperator völlig analog zu Gl. (A.89):

$$\hat{Q}\,f(x_i) \;:=\; x_i\,f(x_i)\,, \tag{A.100}$$

woraus wie zuvor

$$\hat{Q} = \hat{Q}^\dagger\ ,\quad \hat{Q}\,|x_i\rangle \;=\; x_i\,|x_i\rangle\ ,\quad \langle x_i|\,\hat{Q} \;=\; \langle x_i|\,x_i\,, \tag{A.101}$$

und die diskrete Spektraldarstellung

$$\hat{Q} \;=\; \sum_i x_i\,|x_i\rangle\langle x_i| \tag{A.102}$$

folgen.

A.6.5 Spektralsatz, Erwartungswerte

Auch für kontinuierliche Eigenwerte gibt es einen Spektralsatz. Wenn ein Operator $\hat{A}$ die Spektraldarstellung Gl. (A.88)

$$\hat{A} \;=\; \int \mathrm{d}\lambda \;\lambda\; |a_\lambda\rangle\langle a_\lambda| \;+\; \sum_i \;\lambda_i\; |a_i\rangle\langle a_i|$$

hat, dann gilt für Funktionen dieses Operators

$$f(\hat{A}) \;=\; \int \mathrm{d}\lambda \; f(\lambda) \; |a_\lambda\rangle\langle a_\lambda| \;+\; \sum_i \; f(\lambda_i) \; |a_i\rangle\langle a_i| \;. \qquad \text{(A.103)}$$

Insbesondere gilt für den *Ortsoperator*

$$\boxed{f(\hat{Q}) \;=\; \int_{-\infty}^{\infty} dx \;\; f(x)\, |x\rangle\langle x| \;.} \qquad \text{(A.104)}$$

~~Für den Erwartungswert des Ortsoperators in einem Zustand $|\psi\rangle$~~

Mit Hilfe des Spektralsatzes können *Erwartungswerte* besonders leicht berechnet werden, z.B. der Erwartungswert einer Funktion des Ortsoperators $\hat{Q}$ im reinen Zustand $|\psi\rangle$:

$$\langle\psi|\; f(\hat{O})\; |\psi\rangle \;\;=\;\; \langle\psi| \int_{-\infty}^{\infty} dx\; f(x)|x\rangle\langle x|\; |\psi\rangle \;,$$

Q

und daher, mit $\langle\psi|x\rangle = \psi*(x)$ und $\langle x|\psi\rangle = \psi(x)$:

$$\boxed{\langle\psi| \;\; f(\hat{Q}) \;\; |\psi\rangle \;\;=\;\; \int_{-\infty}^{\infty} dx \;\; f(x) \;\; |\psi(x)|^2} \qquad \text{(A.105)}$$

Dies ist die Darstellung des Erwartungswertes einer Funktion des Ortsoperators über die Wellenfunktion $\psi(x)$.

N.B.: Anhang A.10 zu Hilberträumen

A.7 Der Impulsraum

Der Ortsraum ist nicht die einzige Möglichkeit, Funktionen darzustellen. Durch eine *Basistransformation* gelangt man vom Ortsraum zum Impulsraum. Im Impulsraum hat der zum physikalischen Impuls eines Teilchens korrespondierende *Impulsoperator* eine besonders einfache Darstellung.

Die zugehörige Basistransformation ist die **Fouriertransformation.** Je nach Art des Ortsraums (diskret/kontinuierlich, und begrenzt/unendlich) benötigt man unterschiedliche Varianten der Fouriertransformation. Wir betrachten der Einfachheit halber zunächst immer den eindimensionalen Fall und transformieren zum *"Wellenzahlraum"*. Der Impulsraum ergibt sich dann durch zusätzliche Faktoren $\hbar$.

A.7.1 Diskrete Fouriertransformation (Fourierreihen)

Wir betrachten eine Funktion, die auf N Punkten definiert ist

$$f(x_j)\,, \quad x_j \;=\; a\cdot j, \quad j \;=\; 0,\ldots N-1\,.$$

Für die physikalische Anwendung haben wir hier einen Abstand a der

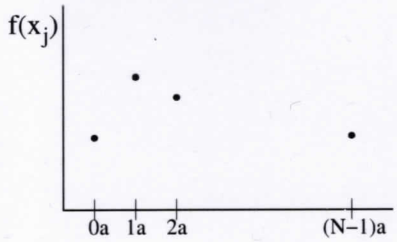


Abbildung A.6: *Funktion mit endlich vielen Stützstellen.*

Punkte eingeführt. Man *kann* sich die Funktion periodisch fortgesetzt denken; dies ist aber nicht nötig. Die Funktion ist durch N Werte bestimmt. Die zugehörige Basis im schon bekannten diskreten Ortsraum ist die

$$\text{Ortsraumbasis:} \quad |x_j\rangle\,,$$

wobei $\langle x_j|$ auf den Wert bei x_j projiziert:

$$\langle x_j|f\rangle \;=\; f(x_j)\,.$$

!

Eine weitere Basis ist die

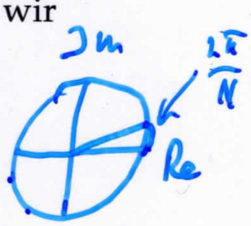
Diskrete Fourierbasis

$$|k_n\rangle\ , \quad n = 0, \dots, N-1 \qquad \text{(orthonormal: } \langle k_n|k_m\rangle = \delta_{nm}\text{)},$$

$$\langle x_j|k_n\rangle \ := \ \frac{1}{\sqrt{N}}\, e^{i\,k_n\,x_j} \quad \text{mit der } \textit{Wellenzahl } k_n \ = \ n\,\frac{2\pi}{Na}\,. \tag{A.106}$$

Die Basisvektoren $|k_n\rangle$ sind hier durch ihre Koeffizienten $\langle x_j|k_n\rangle$ in der Ortsraumbasis definiert.

Wir zeigen, dass diese Vektoren zueinander orthonormal sind, indem wir $\hat{1\!\!1} = \sum_j |x_j\rangle\langle x_j|$ einschieben :



$$\begin{aligned}
\langle k_n|k_m\rangle &= \sum_{j=0}^{N-1} \langle k_n|x_j\rangle\langle x_j|k_m\rangle \ = \ \sum_{j=0}^{N-1} \frac{1}{N}\, e^{-i\,k_n\,x_j}\, e^{i\,k_m\,x_j} \\
&= \sum_{j=0}^{N-1} \frac{1}{N}\, e^{-i\,a\,j\,\frac{2\pi}{Na}\,(n-m)} \ = \ \delta_{nm}
\end{aligned}$$

Zuletzt haben wir die Beziehung

$$\boxed{\frac{1}{N}\sum_{j=0}^{N-1} e^{i\,n\,\frac{2\pi}{N}\,j} \ = \ \delta_{n,0} \qquad (0 \le n \le N-1)} \tag{A.107}$$

benutzt, welche man beweist, indem man die linke Seite als geometrische Reihe interpretiert. Die Vektoren $|k_n\rangle$ bilden somit eine orthonormale Basis. Sie enthält N Elemente und ist deswegen vollständig. Daher gilt auch die Vollständigkeitsrelation

$$\sum_n |k_n\rangle\langle k_n| \ = \ \hat{1\!\!1}\,. \tag{A.108}$$

Diese Beziehungen reichen schon aus, um sowohl die Fouriertransformation einer Funktion $f(x_i)$ als auch die Rücktransformation in der Form einer Basistransformation zwischen dem Ortsraum und dem Wellenzahlraum durchzuführen (!), nämlich jeweils durch Einschieben des Einheitsoperators:

DISKRETE FOURIERTRANSFORMATION

$$\tilde{f}(k_n) \equiv \langle k_n|f\rangle = \sum_{j=0}^{N-1} \langle k_n|x_j\rangle \underbrace{\langle x_j|f\rangle}_{f(x_j)} = \sum_{j=0}^{N-1} \frac{1}{\sqrt{N}}\, e^{-i k_n x_j}\, f(x_j)$$

$$f(x_j) \equiv \langle x_j|f\rangle = \sum_{n=0}^{N-1} \langle x_j|k_n\rangle \underbrace{\langle k_n|f\rangle}_{\tilde{f}(k_n)} = \sum_{n=0}^{N-1} \frac{1}{\sqrt{N}}\, e^{+i k_n x_j}\, \tilde{f}(k_n) \qquad \text{(A.109)}$$

Man verifiziert leicht, dass die Umkehrtransformation tatsächlich zurückführt: dabei geht nur die Orthonormalität der N Basisvektoren $|k_n\rangle$ ein.

Anmerkungen: Bei der Diracschen Notation $\langle x_j|f\rangle$ und $\langle k_n|f\rangle$ benötigt man kein zusätzliches Symbol $\tilde{f}$ mit einer Tilde, um die Funktionswerte einer Fouriertransformierten von denen der ursprünglichen Funktion zu unterscheiden: es ist immer dieselbe Funktion $|f\rangle$, deren Koeffizienten in unterschiedlichen Basen angegeben werden !

Von der Darstellung eines Vektors im *Wellenzahlraum* spricht man bei Verwendung der Basisvektoren $|k_n\rangle$, d.h. der Darstellung mittels $\langle k_n|f\rangle$.

Die Fourierkoeffizienten beschreiben auch ebene Wellen: Die Funktion $|f\rangle = |k_m\rangle$ hat im Wellenzahlraum die Koeffizienten $\tilde{f}(k_n) = \delta_{nm}$. Es trägt also nur die Wellenzahl k_m (mit festem m) bei. Dann sind die Funktionswerte im Ortsraum $f(x_j) = e^{ik_m x_j}/\sqrt{N}$ diejenigen einer ebenen Welle.

Die rücktransformierte Funktion f mit Werten $f(x_j)$ ist automatisch periodisch mit Periode Na, enthält aber außerhalb von $j = 0, \ldots, N-1$ keine neue Information. Entsprechendes gilt für die Fouriertransformierte mit Werten $\tilde{f}(k_n)$, wenn n außerhalb von $n = 0, \ldots, N-1$ liegt.

Man kann die Wellenzahl k_n alternativ auch mit einem verschobenen Bereich gleicher Länge definieren, z.B. mit $n = 1, \ldots, N$, oder auch $n = -\frac{N}{2}, \ldots, \frac{N}{2} - 1$ bei gerader Zahl N. (Die letzte Variante ist ungünstig, weil man zwischen geradem und ungeradem N unterscheiden muss). Dadurch wird im Endeffekt nur die Fouriertransformierte mit einem der Verschiebung entsprechenden Phasenfaktor multipliziert, ohne weitere Auswirkungen. Entsprechend kann man auch den Definitionsbereich im Ortsraum anders benennen, z.B. mit $j = 1, \ldots, N$.

Impulsraum

Wir können über die Beziehung $p = \hbar k = h/\lambda$ die diskrete Fouriertransformation auch mit „Impulsen" $p_n \equiv \hbar k_n$ schreiben. Der Name rührt daher, dass p (nicht nur bei Photonen) direkt mit dem mechanischen Impuls von quantenmechanischen Teilchen zusammenhängt. Im *diskreten* Wellenzahlraum definiert man üblicherweise, dass die Vektoren mit Namen $|p_n\rangle$ und $|k_n\rangle$ dasselbe sein sollen:

$$|p_n\rangle \;:=\; |k_n\rangle\,, \quad p_n \equiv \hbar\, k_n \;=\; \hbar\, n\,\frac{2\pi}{Na}, \qquad n = 0, \ldots, N-1. \tag{A.110}$$

Die Orthonormalitätsbeziehung und die Vollständigkeitsrelation haben daher bei diskreten Impulsen dieselbe Form wie mit Wellenzahlen:

$$\boxed{\langle p_n | p_m \rangle \;=\; \delta_{nm} \quad , \qquad \sum_n |p_n\rangle\langle p_n| \;=\; \hat{\mathbb{1}}\,.} \tag{A.111}$$

Die Fouriertransformationen Gl. (A.109) schreibt man dann mit $\frac{p_n}{\hbar}$ statt k_n.

Drei Dimensionen

In drei Dimensionen transformiert man jede der drei kartesischen Richtungen unabhängig. Die räumlichen Koordinaten werden zu $\vec{x} = (x, y, z) = (i{\cdot}a,\ j{\cdot}a,\ l{\cdot}a)$ und die Wellenzahlen zu $\vec{k} = (k_x, k_y, k_z) = (n_x \frac{2\pi}{Na}, n_y \frac{2\pi}{Na}, n_z \frac{2\pi}{Na})$ mit drei unabhängigen Komponenten. Aus der Summe $\sum_{i=0}^{N-1}$ über alle Punkte des Ortsraums wird eine Dreifachsumme $\sum_{i,j,l=0}^{N-1}$. Entsprechend auch im Wellenzahlraum. Die Fouriertransformation erfolgt unabhängig in jeder der drei Richtungen, kompakt geschrieben also mit dem Fourierfaktor

$$\frac{1}{\sqrt{N}^3}\, \mathrm{e}^{\pm \mathrm{i}\, \vec{k}\, \vec{x}} .$$

A.7.2 Kontinuierliche Fouriertransformation

Wir betrachten Funktionen des kontinuierlichen Ortsraumes $x \in (-\infty, \infty)$ mit Basisvektoren $|x\rangle$. Das Integral $\int_{-\infty}^{\infty} |f(x)|^2 \mathrm{d}x$ soll existieren. Deswegen muss $f(\pm\infty) = 0$ gelten.

Der Wellenzahlraum ist dann ebenfalls kontinuierlich. Seine Basisvektoren sind wieder über die Koeffizienten in der Ortsraumbasis definiert:

KONTINUIERLICHE FOURIERBASIS
$|k\rangle\,, \quad k \in (-\infty, \infty)\,, \qquad \langle x|k\rangle \; := \; \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\, \mathrm{e}^{\mathrm{i}\, k\, x}$

Wenn man den Ort als Vielfaches einer physikalischen Längeneinheit ausdrückt, dann muss man die Wellenzahl mit dem Inversen dieser Einheit schreiben. In den Produkten kx fällt die Einheit heraus.

Wir zeigen wieder, dass diese Basisvektoren orthonormal sind, durch Einschieben des Einheitsoperators $\hat{\mathbb{1}} = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x\, |x\rangle\langle x|$:

$$\langle k|k'\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x\, \langle k|x\rangle\, \langle x|k'\rangle \; = \; \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x\, \frac{1}{2\pi} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\,(k'-k)\,x} \; = \; \delta(k-k')$$

Zuletzt haben wir die Darstellung Gl. (A.78) der Delta-Distribution benutzt. Die Basisvektoren im Wellenzahlraum sind vollständig, daher kann man den Einheitsoperator darstellen:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}k\, |k\rangle\langle k| \; = \; \hat{\mathbb{1}}\,. \tag{A.112}$$

Die kontinuierliche Fouriertransform und ihre Umkehrung sind dann Basistransformationen:

KONTINUIERLICHE FOURIERTRANSFORMATION

$$\tilde{f}(k) \equiv \langle k|f\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x\, \langle k|x\rangle \underbrace{\langle x|f\rangle}_{f(x)} = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x\, \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\, \mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx}\, f(x)$$

$$f(x) \equiv \langle x|f\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}k\, \langle x|k\rangle \underbrace{\langle k|f\rangle}_{\tilde{f}(k)} = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}k\, \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\, \mathrm{e}^{+\mathrm{i}kx}\, \tilde{f}(k) \quad \text{(A.113)}$$

Anmerkungen: Im Diracschen Formalismus sind die Fourierkoeffizienten für die Transformation und ihre Umkehrung, $\langle k|x\rangle$ und $\langle x|k\rangle$, zueinander komplex konjugiert. Die Gesamtnormierung von $\frac{1}{2\pi}$ muss daher auf *gleiche* Faktoren $\frac{1}{\sqrt{2\pi}}$ aufgeteilt werden.

Bei zunächst nicht-konvergenten Integralen kann man die Fouriertransformation, analog zur Definition der Delta-Distribution, über den Limes eines sogenannten *Konvergenz erzeugenden Faktors* definieren :

$$\tilde{f}(x) = \lim_{\epsilon\to 0^+} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x\; \mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx}\, f(x)\, \mathrm{e}^{-\epsilon x^2} \quad \text{(A.114)}$$

Analog für die Rücktransformation.

Norm-Erhaltung

Weil die Fouriertransformation eine Basistransformation ist, bleibt die Norm einer Funktion erhalten: !

$$\langle f|f\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x\, \langle f|x\rangle\, \langle x|f\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x\, |f(x)|^2 \quad \text{(A.115)}$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}k\, \langle f|k\rangle\, \langle k|f\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}k\, |\tilde{f}(k)|^2 \,. \quad \text{(A.116)}$$

Transformation einer Konstanten: Dirac-Distribution

Wir können die Delta-Distribution über ein Fourier-Integral darstellen:

$$\delta(x-y) \;=\; \langle x|y\rangle \;=\; \int_{-\infty}^{\infty} dk\; \langle x|k\rangle\langle k|y\rangle \;=\; \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} dk\; e^{\mathrm{i}\,k\,(x-y)}\,.$$

!

Daraus folgt sofort:

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} dk\; e^{\mathrm{i}\,k\,x}\; 1 \;=\; \sqrt{2\pi}\;\delta(x)\,. \tag{A.117}$$

Distribution!
Mit Testfunktion zu integrieren

(sowie die analoge Beziehung mit vertauschten Rollen von x und k). Also: *die Fouriertransformierte der Eins ist* $\sqrt{2\pi}\;\delta$!

Drei Dimensionen

In drei Dimensionen transformiert man wieder jede Richtung getrennt, also

$$\tilde{f}(\vec{k}) \;=\; \frac{1}{\sqrt{2\pi}^{3}}\int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-\infty}^{\infty} dy \int_{-\infty}^{\infty} dz\; e^{-\mathrm{i}\vec{k}\vec{x}}\; f(\vec{x})$$

und entsprechend für die Umkehrtransformation.

A.7.3 Faltungssatz und Ableitungen

In der Praxis tritt oft das sogenannte *Faltungsprodukt* zweier Funktionen f und g auf:

$$h(x) \;\equiv\; (f*g)\,(x) \;:=\; \int_{-\infty}^{\infty} dx'\; f(x-x')\; g(x')\,. \tag{A.118}$$

Dieses Integral kann man mit Hilfe der Fouriertransformation ausrechnen:

FALTUNGSSATZ

$$\tilde{h}(k) \;=\; \sqrt{2\pi}\;\tilde{f}(k)\;\tilde{g}(k) \tag{A.119}$$

!

↳ Anwendungen !
(FFT : N log N)

29.3.2021

In Worten: *Die Fouriertransformierte der Faltung ist das Produkt der Fouriertransformierten.* (Beweis in den Übungen).

Der Satz gilt genauso mit vertauschten Rollen von k und x !:

!

$$\tilde{h}(k) := (\tilde{f} * \tilde{g})(k) \quad \Rightarrow \quad h(x) = \sqrt{2\pi} f(x) g(x) \, .$$

Die Ableitung einer Funktion korrespondiert im Fourier-transformierten Raum mit einem einfachen Produkt von Funktion und Argument !:

ABLEITUNG UND FOURIERTRANSFORMATION

$$\mathrm{i}\,\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}k}\,\tilde{f}(k) \;=\; \widetilde{(x\,f)}(k) \tag{A.120}$$

$$-\mathrm{i}\,\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\,f(x) \;=\; \widetilde{\left(k\,\tilde{f}\right)}(x) \tag{A.121}$$

(Beweis in den Übungen). Die Tilde steht hier für die Fouriertransformation bzw. die Umkehrtransformation. Man kann daher eine Ableitung durch Transformation, Multiplikation mit k, und Rücktransformation berechnen !

A.7.4 Der Impulsraum

Statt der Wellenzahl k kann man den Impuls $p = \hbar k$ benutzen. Der Impulsraum wird von den Basiszuständen $|p\rangle$ aufgespannt. Im kontinuierlichen Raum muss man dabei eine Wahl für die Normierung treffen. Es ist üblich, die Impulsraumzustände $|p\rangle$ analog zu $\langle k|k'\rangle = \delta(k-k')$ zu normieren:

$$\langle p|p'\rangle \;=\; \delta(p-p') \, . \tag{A.122}$$

Es gilt aber andererseits $\delta(p-p') = \delta(\hbar k - \hbar k') = \frac{1}{\hbar}\delta(k-k') = \frac{1}{\hbar}\langle k|k'\rangle$. Aus Gl. (A.122) folgt daher die Normierung

$\delta(ax) = \frac{1}{|a|}\,\delta(x)$

$$\boxed{|p\rangle := \frac{1}{\sqrt{\hbar}}\,|k\rangle\,. \qquad \text{(A.123)}}$$

Mit dieser Normierung, die sich vom diskreten Fall Gl. (A.7.1) unterscheidet, hat die Vollständigkeitsrelation ihre übliche Form:

$$\boxed{\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}p\; |p\rangle\langle p| \;=\; \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}(\hbar k)\,\frac{1}{\hbar}\,|k\rangle\langle k| \;=\; \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}k\; |k\rangle\langle k| \;=\; \hat{1\!\!1}\,. \qquad \text{(A.124)}}$$

Anmerkung: Man muss bei der Notation von Fouriertransformierten achtgeben, wenn man $\tilde{f}(p)$ und $\tilde{f}(k)$ schreibt, statt die Bra- und Ket-Notation zu benutzen: Diese beiden Ausdrücke unterscheiden sich um den Faktor $\sqrt{\hbar}$.

$$\tilde{f}(p) \;:=\; \langle p|f\rangle \;=\; \frac{1}{\sqrt{\hbar}}\,\langle k|f\rangle \;=:\; \frac{1}{\sqrt{\hbar}}\,\tilde{f}(k)\,. \qquad \text{(A.125)}$$

In drei Dimensionen wird die Beziehung zwischen $|p\rangle$ und $|k\rangle$ zu

$$|\vec{p}\rangle \;=\; \frac{1}{\sqrt{\hbar}^{3}}\,|\vec{k}\rangle\,.$$

Auch die übliche Notation mit Bra und Ket lädt zu Missverständnissen ein, weil nur noch der *Name* $|k\rangle$ oder $|p\rangle$ impliziert, welche Normierung gemeint ist. Im Zweifelsfall sind Kommentare nötig !

Die Darstellung einer Funktion im Impulsraum lautet

$$\underbrace{|f\rangle}_{\text{Vektor}} \;=\; \int \mathrm{d}p\;|p\rangle\,\underbrace{\langle p|f\rangle}_{\tilde{f}(p)}\,. \qquad \text{(A.126)}$$

A.7.5 Der Impulsoperator

Der Impulsoperator ist im Impulsraum völlig analog definiert wie der Ortsoperator im Ortsraum. Wir betrachten zunächst wieder der Einfachheit halber nur 1 Dimension. Der Impulsoperator hat bei einem kontinuierlichen Impulsraum die Spektraldarstellung

IMPULSOPERATOR IN 1 DIMENSION

$$\hat{P} \;=\; \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}p \quad p \quad |p\rangle\langle p| \;. \tag{A.127}$$

Er ist im Impulsraum diagonal, mit den Eigenwerten p. Im diskreten Raum wird das Integral durch die entsprechende Summe ersetzt. Wie wir noch sehen werden, ist der Impulsoperator derjenige Operator, der der Messung des Impulses eines Teilchens entspricht.

Da die Eigenwerte reell sind, ist der Impulsoperator *hermitesch*: $\hat{P}^\dagger = \hat{P}$, und wegen übereinstimmender Definitionsbereiche auch *selbstadjungiert*.

Die Eigenwertgleichung des Impulsoperators ist analog zu $\hat{Q}\,|x\rangle = x\,|x\rangle$:

$$\hat{P}\,|p\rangle \;=\; p\,|p\rangle \qquad \Leftrightarrow \qquad \hat{P}\;\tilde{f}(p) \;=\; p\;\tilde{f}(p)\;. \tag{A.128}$$

Die zweite Beziehung folgt aus $\hat{P}\tilde{f}(p) \;:=\; \langle p|\hat{P}|f\rangle \;=\; p\;\langle p|f\rangle \;\equiv\; p\;\;\tilde{f}(p)$. Insbesondere ist

analog zu (A.89):
Q f(x) = x f(x)

$$\langle p'|\hat{P}|p\rangle \;=\; p\,\langle p'|p\rangle \;=\; p\,\delta(p-p')\;.$$

Die Eigenfunktionen $|p\rangle$ können wir auch im Ortsraum ausdrücken. Diese Funktionen sind die Fourierkoeffizienten (ebenen Wellen):

p/hquer = k

$$\langle x|p\rangle \;=\; \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\,\mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}xp}\;. \tag{A.129}$$

Distribution !

Man beachte die Faktoren $\hbar$. Bei kontinuierlichem Raum sind die Eigenfunktionen allerdings nicht normierbar, da sie im Unendlichen nicht auf Null abfallen. (Ebensowenig sind die Eigenfunktionen $\langle y|x\rangle = \delta(x-y)$ des Ortsoperators normierbar.)

Distribution

Wirkung des Impulsoperators im Ortsraum

Wir betrachten nun die Darstellung eines Vektors $|\psi\rangle$ im Ortsraum, d.h. eine Wellenfunktion $\psi(x)$. Wir lassen $\hat{P}$ auf den Vektor $|\psi\rangle$ wirken und drücken das Ergebnis wieder im Ortsraum aus: $\langle x|\hat{P}|\psi\rangle$.
Analog zu $\langle x|\hat{Q}|f\rangle \equiv \hat{Q}\, f(x)$ schreibt man das Ergebnis auch als $\hat{P}\,\psi(x)$:

$$\text{"}\hat{P}\,\psi(x)\text{"} \;:=\; \left(\hat{P}\,\psi\right)(x) \;\equiv\; \langle x|\hat{P}|\psi\rangle\,. \tag{A.130}$$

Wir berechnen also, „wie der Impulsoperator auf $\psi(x)$ wirkt". Das Ergebnis erhalten wir mit Hilfe von Gl. (A.121), oder in der folgenden Rechnung direkt durch Einfügen des Einheitsoperators $\hat{1\!\!1} = \int\limits_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}p\; |p\rangle\langle p|$:

$$\begin{aligned}
\langle x|\hat{P}|\psi\rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}p\; \langle x|\underbrace{\hat{P}|p\rangle}_{p\,|p\rangle}\langle p|\psi\rangle \;=\; \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}p\; p\;\langle x|p\rangle\langle p|\psi\rangle \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}p\; \left(p\,\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\,\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}px}\right)\,\langle p|\psi\rangle \;=\; \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}p\; \left(\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\,\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\,\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}px}\right)\,\langle p|\psi\rangle \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}p\; \left(\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\,\langle x|p\rangle\right)\,\langle p|\psi\rangle \;=\; \frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\,\underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}p\;\langle x|p\rangle\,\langle p|\psi\rangle}_{\psi(x)} \;=\; \frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\,\psi(x)
\end{aligned}$$

In der 2. Zeile haben wir $p\,\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}px} = \frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}px}$ ausgenutzt.

WIRKUNG DES IMPULSOPERATORS IM ORTSRAUM IN 1 DIMENSION

$$\hat{P}\,\psi(x) \;=\; \frac{\hbar}{\mathrm{i}}\,\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\,\psi(x) \tag{A.131}$$

Im Ortsraum bewirkt der Impulsoperator also eine Ableitung ! !
Diese Beziehung kann man benutzen, um den Impulsoperator formal auch mit Ortsraumvektoren zu schreiben:

$$\hat{P} \;=\; \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x' \;|x'\rangle\; \frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x'}\;\langle x'|\,. \tag{A.132}$$

(werden wir nicht weiter verwenden)

Die Ableitung soll dabei nach rechts wirken. Beweis: Anwenden dieser Gleichung auf einen Vektor $|\psi\rangle$ und Auswerten an der Stelle x ergibt wieder Gl. (A.131).

Im dreidimensionalen Orts- und Impulsraum gibt es die drei unabhängigen Ortsoperatoren $\hat{Q}_\alpha$ (mit $\alpha = 1, 2, 3$ für die drei kartesischen Raumrichtungen), und entsprechend drei unabhängige Impulsoperatoren $\hat{P}_\alpha$. Als Vektoren geschrieben: $\hat{\vec{Q}} = \left(\hat{Q}_x, \hat{Q}_y, \hat{Q}_Z\right)$ und $\hat{\vec{P}} = \left(\hat{P}_x, \hat{P}_y, \hat{P}_Z\right)$, mit

$$\hat{Q}_\alpha \;\psi(\vec{x}) \;=\; x_\alpha \;\psi(\vec{x}) \qquad \text{oder} \; \hat{\vec{Q}}\,\psi(\vec{x}) \;=\; \vec{x}\,\psi(\vec{x})\,, \tag{A.133a}$$

$$\hat{P}_\alpha \;\psi(\vec{x}) \;=\; \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x_\alpha}\;\psi(\vec{x}) \qquad \text{oder} \; \hat{\vec{P}}\,\psi(\vec{x}) \;=\; \frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}\,\psi(\vec{x}) \tag{A.133b}$$

Spektralsatz, Erwartungswerte

Aus dem Spektralsatz Gl. (A.103) folgt für den Impulsoperator

$$f(\hat{P}) \;=\; \int_{-\infty}^{\infty} dp\;\; f(p)\;|p\rangle\langle p|\,. \tag{A.134}$$

und die Berechnung von Erwartungswerten vereinfacht sich damit im Impulsraum, analog zu Gl. (A.105) beim Ortsoperator

$$\langle\psi|\;\tilde{f}(\hat{P})\;|\psi\rangle \;=\; \int_{-\infty}^{\infty} dp\;\;\tilde{f}(p)\;\;|\tilde{\psi}(p)|^2\,. \tag{A.135}$$

Im Ortsraum folgt mit derselben Herleitung wie bei Gl. (A.131):

$$\hat{P}^n\,\psi(x) \;=\; \left(\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right)^n\;\psi(x)\,, \tag{A.136}$$

was man auch mit $\left(\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x'}\right)^n$ in Gl. (A.132) schreiben kann. Diese Beziehung lässt sich dann auch auf Funktionen $f(\hat{P})$ erweitern, wenn diese Funktionen in Potenzreihen entwickelbar sind

$$f(\hat{P}) \;=\; \int\limits_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}x'\;|x'\rangle\;f\left(\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x'}\right)\;\langle x'|\,. \tag{A.137}$$

Mit diesen Bezeihungen kann man Erwartungswerte im Ortsraum berechnen, z.B.

$$\langle\psi|\;\hat{P}\;|\psi\rangle \;=\; \int\limits_{-\infty}^{\infty}dx\;\underbrace{\langle\psi|x\rangle}_{\psi^*(x)}\;\langle x|\;\hat{P}\;|\psi\rangle \;=\; \frac{\hbar}{\mathrm{i}}\int\limits_{-\infty}^{\infty}dx\;\psi^*(x)\;\psi'(x) \tag{A.138}$$

und

$$\langle\psi|\;\hat{P}^2\;|\psi\rangle \;=\; \int\limits_{-\infty}^{\infty}dx\;\langle\psi|x\rangle\;\langle x|\;\hat{P}^2\;|\psi\rangle \;=\; -\hbar^2\int\limits_{-\infty}^{\infty}dx\;\psi^*(x)\;\psi''(x)\;. \tag{A.139}$$

Bedingung

Den letzten Ausdruck kann man auch anders schreiben, über eine partielle Integration und Ausnutzen von $\psi(\pm\infty) = 0.$, oder indem man $\hat{P}^2 = \hat{P}\hat{P}$ nach links und nach rechts wirken lässt:

$$\langle\psi|\;\hat{P}^2\;|\psi\rangle \;=\; \int\limits_{-\infty}^{\infty}dx\;\langle\psi|\hat{P}|x\rangle\;\langle x|\hat{P}|\psi\rangle \;=\; \hbar^2\int\limits_{-\infty}^{\infty}dx\;|\psi'(x)|^2\;. \tag{A.140}$$

Diskreter Impulsraum

Im Falle eines diskreten Impulsraums (diskreter Wellenzahlraum) definiert man den Impulsoperator völlig analog zu Gl. (A.127):

$$\hat{P} \;=\; \sum_n p_n \,|p_n\rangle\langle p_n|\;, \tag{A.141}$$

woraus ebenfalls analog wie zuvor

$$\hat{P} \;=\; \hat{P}^\dagger, \qquad \hat{P}\,|p_m\rangle \;=\; p_m\,|p_m\rangle, \qquad \langle p_m|\,\hat{P} \;=\; \langle p_m|\,p_m\;, \tag{A.142}$$

und

$$\hat{P}\,\tilde{f}(p_n) \;\equiv\; \langle p_n|\,\hat{P}\,|f\rangle \;=\; p_n\,\tilde{f}(p_n) \tag{A.143}$$

folgen.

Wenn der Ortsraum kontinuierlich ist (s. Kap. A.7.6), dann bleibt auch Gl. (A.131) gültig, mit analoger Herleitung, d.h. der Impulsoperator wirkt dann im Ortsraum weiterhin als Ableitungsoperator.

17.4.2023

A.7.6 Gemischt diskret/kontinuierliche Fouriertransformation

Die Fouriertransformation kann man auch für den Fall konstruieren, dass der Ortsraum kontinuierlich, aber von endlicher Länge ist. Dann ist der Impulsraum diskret und unendlich. Entsprechendes gilt für vertauschte Rollen von Ort und Impuls. Beide Fälle tauchen in der Festkörpertheorie auf. Es ergeben sich die **Fourierreihen**. Man kann sie, statt mit Sinus und Cosinus, kompakter mit komplexem Fourierkoeffizienten schreiben, und besonders einfach in der Diracschen Notation.

Kontinuierlicher Ortsraum endlicher Länge

Die Funktion f mit Werten $f(x)$ sei auf dem kontinuierlichen Intervall $[0, L)$ definiert. Das Integral $\int_0^L |f(x)|^2 \mathrm{d}x$ soll existieren. Formal müssen wir uns $f(x)$ hier auf die ganze reelle Achse periodisch fortgesetzt denken. Die Funktion $f(x)$ darf nur eine endliche Anzahl von Extrema und Sprungstellen haben (Dirichlet-Kriterium).

In diesem Fall ist der *Wellenzahlraum diskret, hat aber unendlich viele Elemente.* Die Fourierbasis besteht aus den Vektoren $|k_n\rangle$, $n \in \mathcal{Z}$ und

$$\langle x|k_n\rangle = \frac{1}{\sqrt{L}}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\,k_n\,x} \quad \text{mit der Wellenzahl } k_n = n\,\frac{2\pi}{L} \tag{A.144a}$$

$$\hat{1\!\!1} = \sum_{n=-\infty}^{\infty} |k_n\rangle\langle k_n| \tag{A.144b}$$

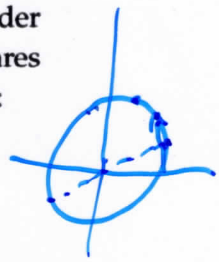
$$\hat{1\!\!1} = \int_0^L |y\rangle\langle y|\; \mathrm{d}y \tag{A.144c}$$

Die Fouriertransformation und ihre Umkehrung erhält man dann als

$$\begin{aligned}\tilde{f}(k_n) \;&\equiv\; \langle k_n|f\rangle \;=\; \int_0^L \langle k_n|y\rangle\langle y|f\rangle\;\mathrm{d}y\\ &=\; \int_0^L \frac{1}{\sqrt{L}}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\,k_n\,y}\; f(y)\,\mathrm{d}y\,,\end{aligned} \tag{A.145a}$$

$$\begin{aligned}f(x) \;&\equiv\; \langle x|f\rangle \;=\; \sum_{m=-\infty}^{\infty} \langle x|k_m\rangle\langle k_m|f\rangle\\ &=\; \sum_{m=-\infty}^{\infty} \frac{1}{\sqrt{L}}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\,k_m\,x}\;\tilde{f}(k_m)\,.\end{aligned} \tag{A.145b}$$

Wir verifizieren, dass diese Gleichungen tatsächlich Umkehrungen voneinander sind. Einsetzen der zweiten Transformation in die erste ergibt ein sofort lösbares Integral über y, bei dem man die Fälle $n = m$ und $n \neq m$ unterscheiden muss:



$$\begin{aligned}\tilde{f}(k_n) &= \int_0^L \mathrm{d}y\;\frac{1}{L}\sum_m \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\,\frac{2\pi}{L}\,(n-m)\,y}\;\tilde{f}(k_m)\\ &= \frac{1}{L}\sum_m \left(\delta_{n,m}\cdot L \;+\; \delta_{n\neq m}\cdot 0\right)\tilde{f}(k_m)\\ &= \tilde{f}(k_n)\end{aligned}$$

Wählt man speziell einen Basisvektor $|f\rangle = |k_i\rangle$, so folgt mit der gleichen Rechnung, dass wie gewohnt gilt

$$\langle k_n|k_i\rangle \;=\; \delta_{ni}\;. \tag{A.146}$$

Der umgekehrte Fall ist komplizierter. Wir setzen Gl. (A.145a) in Gl. (A.145b) ein und benötigen dann die *Poissonsche Summenformel* für eine Funktion $g(\tau)$:

$$\sum_{m=-\infty}^{\infty} g(2\pi m) \;=\; \frac{1}{2\pi} \sum_{m=-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} g(\tau)\, \mathrm{e}^{-\mathrm{i}m\tau}\, \mathrm{d}\tau \,, \tag{A.147}$$

und zwar hier mit $g(2\pi\, m) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\,2\pi\, m\, \frac{x-y}{L}}$:

$$\begin{aligned}
f(x) \;&=\; \frac{1}{L} \sum_{m=-\infty}^{\infty} \int_0^L \mathrm{e}^{\mathrm{i}\, m(x-y)\, \frac{2\pi}{L}}\, f(y)\, \mathrm{d}y \\
&\overset{\text{Poisson}}{=}\; \frac{1}{2\pi L} \sum_{m=-\infty}^{\infty} \int_0^L \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}\tau\, \mathrm{e}^{-\mathrm{i}m\tau}\, \mathrm{e}^{\mathrm{i}\tau \frac{x-y}{L}}}_{=\,2\pi\,\delta(m-\frac{x-y}{L})}\, f(y)\, \mathrm{d}y \\
&=\; \sum_{m=-\infty}^{\infty} \int_0^L \mathrm{d}y\, f(y)\, \delta(y-(x+mL))\,.
\end{aligned}$$

Wegen des Integrationsbereichs $(0, L)$ ist dies die periodische Fortsetzung der Funktion $f(x)$ aus dem Intervall $(0, L)$ auf die ganze reelle Achse. Wenn man nur $x \in [0, L)$ betrachtet, erhält man tatsächlich wieder $f(x)$.

Aus der Poissonformel folgt genauso, dass

$$\langle x|y\rangle = \sum_m \delta(y-(x+mL)) \;. \tag{A.148}$$

„Dirac-Kamm"!

Im Intervall $x, y \in [0, L)$ wird dies zur vertrauten Beziehung $\langle x|y\rangle = \delta(x-y)$.

Diskreter Ortsraum unendlicher Länge

Dieser Fall ist analog zum vorherigen, mit vertauschten Rollen von x und k. Die Funktion f sei jetzt auf diskreten Stützpunkten $x_j = j\,a$ definiert, mit $j \in \mathcal{Z}$, dem Gitterabstand a, und Ortsraum-Basisvektoren $|x_j\rangle$. Dann ist der Wellenzahlraum kontinuierlich, aber periodisch, mit Periode $2\pi/a$.

$$|k\rangle, \qquad k \in [0, \frac{2\pi}{a}) \tag{A.149a}$$

$$\langle x_j|k\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi/a}}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\,k\,x_j} \tag{A.149b}$$

$$\hat{1} = \int_0^{2\pi/a} |k\rangle\langle k|\;\mathrm{d}k \quad ! \tag{A.149c}$$

$$\hat{1} = \sum_{j=-\infty}^{\infty} |x_j\rangle\langle x_j| \quad ! \tag{A.149d}$$

Die Fouriertransformation und ihre Umkehrung lauten jetzt

$$\boxed{\begin{aligned}
\tilde{f}(k) \;&\equiv\; \langle k|f\rangle \;=\; \sum_{m=-\infty}^{\infty} \langle k|x_m\rangle\langle x_m|f\rangle \\
&=\; \sum_{m=-\infty}^{\infty} \frac{1}{\sqrt{2\pi/a}}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\,k\,x_m}\, f(x_m)\,, && \text{(A.150a)} \\
f(x_m) \;&\equiv\; \langle x_m|f\rangle \;=\; \int_0^{2\pi/a} \langle x_m|k\rangle\langle k|f\rangle\;\mathrm{d}k \\
&=\; \int_0^{2\pi/a} \frac{1}{\sqrt{2\pi/a}}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\,k\,x_m}\,\tilde{f}(k)\,\mathrm{d}k\,. && \text{(A.150b)}
\end{aligned}}$$

Beweis wie zuvor. Jetzt gilt $\langle x_i|x_j\rangle = \delta_{ij}$ und $\langle k|k'\rangle = \sum_j \delta(k' - (k + j\frac{2\pi}{a}))$, bzw. $\langle k|k'\rangle = \delta(k' - k)$ im Definitionsbereich von k und k'.

1.4.2021