Kai Hebeler, Jan Hoppe, Lars Zurek
Achim Schwenk
Institut für Kernphysik

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

Theoretische Physik II: Quantenmechanik

Wintersemester 2021/22

Übungsblatt 1

18. Oktober 2021

1 Diskrete Fourierentwicklung

Wir betrachten die 2π-periodische Funktion $f(x+2\pi) = f(x)$. Sie kann als trigonometrische Reihe bzw. als Reihe von Sinus- und Kosinus-Funktionen geschrieben werden:

$$f(x) = \frac{a_0}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} \left(a_n \cos(nx) + b_n \sin(nx)\right) \tag{1}$$

$$= \sum_{n=-\infty}^{\infty} c_n e^{inx} \quad \text{mit} \quad c_0 = \frac{a_0}{2}\,, \quad c_{\pm n} = \frac{1}{2}\left(a_n \mp i b_n\right), \quad n > 0\,. \tag{2}$$

Die Fourier-Reihe konvergiert sofern die Dirichletschen Bedingungen erfüllt sind.[1] Mit Hilfe der Orthogonalitätsrelationen,

$$\int_{-\pi}^{\pi} dx \sin(mx)\sin(nx) = \begin{cases} \pi\delta_{nm} & m \neq 0 \\ 0 & m = 0 \end{cases} \tag{3}$$

$$\int_{-\pi}^{\pi} dx \cos(mx)\cos(nx) = \begin{cases} \pi\delta_{nm} & m \neq 0 \\ 2\pi & m = n = 0 \\ 0 & m = 0, n \neq 0 \end{cases} \tag{4}$$

$$\int_{-\pi}^{\pi} dx \sin(mx)\cos(nx) = 0 \quad \forall m, n\,, \tag{5}$$

können die Entwicklungskoeffizienten a_n, b_n und c_n eindeutig bestimmt werden,

$$a_n = \frac{1}{\pi}\int_{-\pi}^{\pi} dx \cos(nx) f(x)\,, \quad b_n = \frac{1}{\pi}\int_{-\pi}^{\pi} dx \sin(nx) f(x)\,, \quad c_n = \frac{1}{2\pi}\int_{-\pi}^{\pi} dx e^{-inx} f(x)\,. \tag{6}$$

Daraus folgt direkt: Ist $f(x)$ eine gerade (ungerade) Funktion, so gilt $b_n = 0\,(a_n = 0)\,, \forall n$. Ist $f(x)$ eine rein reelle Funktion, so gilt $c_{-n} = c_n^*$.

[1] 1. Das Periodenintervall kann in endliche viele Teilintervalle zerlegt werden, in denen $f(x)$ stetig und monoton ist. 2. Bei vorhandenen Unstetigkeitsstellen exisitiert sowohl der links- als auch rechtsseitige Grenzwert. Die Fourier-Reihe nimmt an diesen Stellen den arithmetischen Mittelwert der beiden Grenzwerte an.

2 Beispiele

Auf diese Weise kann die Fourier-Reihe z.B. einer Rechteckfunktion,

$$y(x) = \begin{cases} +1 & 0 \leq x \leq \pi \\ -1 & \pi < x < 2\pi \end{cases} \tag{7}$$

zu

$$y(x) = \frac{4}{\pi} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{\sin[(2k-1)x]}{2k-1} \tag{8}$$

bestimmt werden. In Abb. 1 wurden bis zu vier Terme der unendlichen Reihe aus $y(x)$ berücksichtigt.

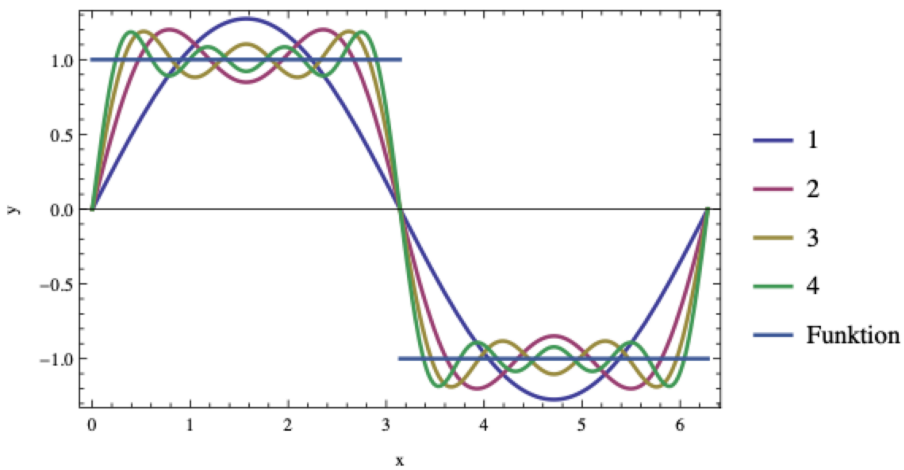

Abbildung 1: Fourier-Reihe einer Rechteckfunktion in verschiedenen Ordnungen.

Man sieht, dass die Ursprungsfunktion durch Hinzunahme von höheren Termen der Reihe beliebig gut approximiert werden kann.
Als weiteres Beispiel betrachten wir die Sägezahnwelle im Intervall $x = [0, 2\pi]$:

$$y(x) = \begin{cases} x & 0 \leq x < \pi \\ x - 2\pi & \pi \leq x < 2\pi \end{cases} \tag{9}$$

Eine einfache Rechnung liefert folgende Werte für die Entwicklungskoeffizienten:

$$a_n = 0 \tag{10}$$

$$b_n = (-1)^{n+1} \frac{2}{n} \tag{11}$$

und somit

$$y(x) = 2 \left(\sin(x) - \frac{\sin(2x)}{2} + \frac{\sin(3x)}{3} \mp \cdots \right). \tag{12}$$

3 Allgemeine Transformation

Wir betrachten nun eine L-periodische Funktion $f(x+L) = f(x)$, die absolut integrabel ist, d.h., $\int_{-L/2}^{L/2} |f(x)| dx < \infty$. Nicht-periodische Funktionen behandeln wir dann durch den Grenzwert $L \to \infty$.

Mit Hilfe der Variablendefinition $y = \frac{2\pi}{L}x$ bzw. $\tilde{y} = \frac{2\pi}{L}\tilde{x}$ erhalten wir zunächst eine 2π-periodische Funktion, dessen Fourier-Reihe bereits diskutiert wurde,

$$g(y) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \left[\frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} d\tilde{y} e^{-in\tilde{y}} g(\tilde{y}) \right] e^{iny} \,. \tag{13}$$

Resubstituieren liefert

$$f(x) = \frac{1}{2\pi} \frac{2\pi}{L} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \left[\int_{-L/2}^{L/2} d\tilde{x} e^{-in2\pi\tilde{x}/L} f(\tilde{x}) \right] e^{in2\pi x/L} \,. \tag{14}$$

Im Limes $L \to \infty$ geht die diskrete Summe in ein kontinuierliches Integral über, $\frac{2\pi}{L} \sum_{-\infty}^{\infty} \Delta n \to \int_{-\infty}^{\infty} dk$,

$$f(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk \left[\int_{-\infty}^{\infty} d\tilde{x} e^{-ik\tilde{x}} f(\tilde{x}) \right] e^{ikx} = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk \tilde{f}(k) e^{ikx} \,, \tag{15}$$

mit der Fouriertransformierten,

$$\tilde{f}(k) = \int_{-\infty}^{\infty} dx f(x) e^{-ikx} \,. \tag{16}$$

Nota bene: Der Faktor $(2\pi)^{-1}$ kann auch symmetrisch verteilt werden, $\frac{dk}{\sqrt{2\pi}}$ und $\frac{dx}{\sqrt{2\pi}}$.

4 Eigenschaften

1. Linearität: $\widetilde{c_1 f + c_2 g} = c_1 \tilde{f} + c_2 \tilde{g}$
2. Verschiebung: $\tilde{f}(ax+b) = \frac{\exp[ikb/a]}{|a|} \tilde{f}\left(\frac{k}{a}\right)$
3. $f(x)$ reell $\Rightarrow \tilde{f}(k)^* = \tilde{f}(-k)$
4. $f(x)$ (un-)gerade $\Rightarrow \tilde{f}$ (un-)gerade
5. Faltung $(f * g)(x) = \int_{-\infty}^{\infty} dy f(x-y) g(y) = \int_{-\infty}^{\infty} dy f(y) g(x-y)$, dann gilt $\widetilde{(f * g)} = \tilde{f}\tilde{g}$
6. Ableitung: $\tilde{f'} = ik\tilde{f}$
7. Parseval Gleichung: $\int_{-\infty}^{\infty} dx |f(x)|^2 = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk |\tilde{f}(k)|^2$

5 Weitere Beispiele

$f(x)$	$\tilde{f}(k)$
$\delta(x)$	1
1	$2\pi\delta(k)$
$\exp(-a\|x\|)$	$\frac{2a}{k^2+a^2}$
$\frac{1}{x^2+a^2}$	$\frac{\pi}{a} \exp(-a\|k\|)$
$\exp\left(\frac{-ax^2}{2}\right)$	$\sqrt{\frac{2\pi}{a}} \exp\left(-\frac{k^2}{2a}\right)$
$\begin{cases} 1 & \|x\| \leq a \\ 0 & \|x\| > a \end{cases}$	$2\,\frac{\sin(ak)}{k}$

Aufgabe P1: Fourier-Transformation

1. Lesen Sie dieses Skript und machen Sie sich mit der Fourier-Transformation vertraut und verifizieren Sie die Relationen (10) und (11).

   Verstehen Sie die Transformation als Entwicklung in eine Orthonormalbasis,

   $$A_0(x) = \frac{1}{\sqrt{2}}\,,\ A_n(x) = \cos(nx)\,,\ B_n(x) = \sin(nx) \text{ für } x \in [-\pi, \pi] \text{ und } n \in \mathbb{N}$$

   mit dem Skalarprodukt $\langle f, g\rangle = \frac{1}{\pi}\int_{-\pi}^{\pi} f(x)g(x)dx$.

LÖSUNG: Zur Berechnung der Fourier-Transformation der Sägezahnwelle betrachten wir diese als periodische Funktion und berechnen

$$a_n = \frac{1}{\pi}\left[\int_0^{2\pi} dx\cos(nx)x - 2\pi\int_\pi^{2\pi} dx\cos(nx)\right] = 0 \tag{17}$$

$$b_n = \frac{1}{\pi}\left[\int_0^{2\pi} dx\sin(nx)x - 2\pi\int_\pi^{2\pi} dx\sin(nx)\right] = (-1)^{n+1}\frac{2}{n}\,. \tag{18}$$

Bezüglich der Interpretation der Fourier-Transformation als Entwicklung in eine Orthonormalbasis kann durch einfache Umformungen gezeigt werden:

$$\frac{a_0}{2} = \langle f, A_0\rangle A_0(x) \tag{19}$$

$$a_n = \langle A_n, f\rangle \tag{20}$$

$$b_n = \langle B_n, f\rangle\,, \tag{21}$$

sodass sich

$$f(x) = \langle f, A_0\rangle A_0(x) + \sum_{n=1}^{\infty}\left(\langle A_n, f\rangle A_n(x) + \langle B_n, f\rangle B_n(x)\right) \tag{22}$$

ergibt, d.h. eine Entwicklung in orthogonale Basisvektoren A_n und B_n.

---

2. Berechnen Sie die Fourier-Transformierte eines Gaußschen Wellenpakets ($a > 0$),

   $$\Psi(x) = N\exp\left[-ax^2 + bx + c\right]\,, \tag{23}$$

   und diskutieren Sie qualitativ den Einfluss von $a > 0$ auf die Breite von $\Psi(x)$ bzw. $\tilde{\Psi}(k)$ im Fall $b = c = 0$.

LÖSUNG: Es gilt

$$\begin{aligned}
\tilde{\psi}(k) &= \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x\ \psi(x)\exp(-ikx) && (24)\\
&= N\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x\ \exp\left(-a\left(x^2+\frac{ik-b}{a}x\right)+c\right) && (25)\\
&= N\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x\ \exp\left(-a\left(x+\frac{ik-b}{2a}\right)^2+a\left(\frac{ik-b}{2a}\right)^2+c\right) && (26)\\
&= N\exp\left(\frac{(ik-b)^2}{4a}+c\right)\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}\tilde{x}\ \exp\left(-a\tilde{x}^2\right) && (27)\\
&= N\exp\left(\frac{(ik-b)^2}{4a}+c\right)\sqrt{\frac{\pi}{a}}\,, && (28)
\end{aligned}$$

wobei wir $\tilde{x} = x + \frac{ik-b}{2a}$ definiert haben.

3. Verifizieren Sie die in Abschnitt 5 gegebenen Beispiele von Fouriertransformationen.

LÖSUNG:

$$\begin{aligned}
\tilde{f}_1(k) &= \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x\ \delta(x)\exp(-ikx) = \exp(-ik0) = 1 && (29)\\
\tilde{f}_2(k) &= \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x\exp(-ikx) = 2\pi\delta(k) && (30)\\
\tilde{f}_3(k) &= \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x\exp(-a|x|)\exp(-ikx) && (31)\\
&= \int_{-\infty}^{0} \mathrm{d}x\exp(ax)\exp(-ikx) + \int_{0}^{\infty} \mathrm{d}x\exp(-ax)\exp(-ikx) && (32)\\
&= \int_{0}^{\infty} \mathrm{d}x\exp(-ax)(\exp(-ikx)+\exp(ikx)) = \frac{2a}{k^2+a^2} && (33)
\end{aligned}$$

Für $\tilde{f}_4$ betrachte zunächst $k > 0$:

$$\begin{aligned}
\tilde{f}_4(k) &= \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x\frac{1}{x^2+a^2}\exp(-ikx) = \oint_C dz\frac{\exp(ikz)}{z^2+a^2} && (34)\\
&= 2\pi i\frac{\exp(-ak)}{2ai} = \frac{\pi}{a}\exp(-ak) && (35)
\end{aligned}$$

Es wurde ausgenutzt, dass das Integral über den oberen Halbkreis verschwindet. Falls $k < 0$ wähle Contour in unterer komplexen Ebene und rechne analog. Alternativ können wir für diese Aufgabe auch die Lösung von f_3 nutzen und invertieren.

$$\begin{aligned}
\tilde{f}_5(k) &= \text{siehe P2} && (36)\\
\tilde{f}_6(k) &= \int_{-a}^{a} \mathrm{d}x\exp(-ikx) = -\left.\frac{i\exp(ikx)}{k}\right|_{-a}^{a} = \frac{2\sin(ak)}{k} && (37)
\end{aligned}$$