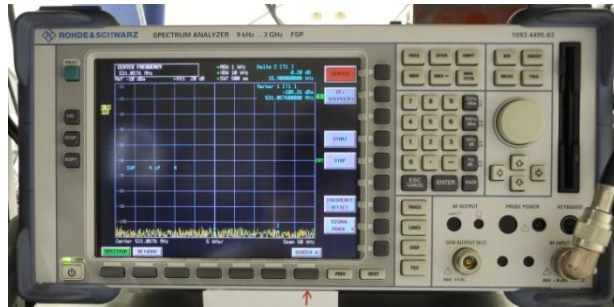
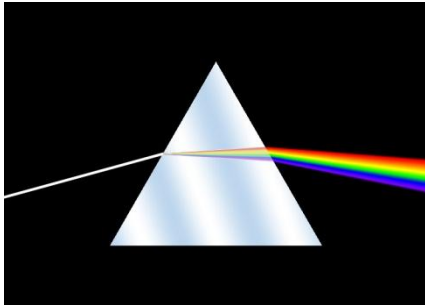


Einschub: Fourier-Transformation

Periodische Vorgänge in Natur und Technik (Erdrotation, Herzschlag, Schall, Licht, Schwingkreis...) motivieren die Zerlegung eines Vorgangs in die beteiligten Frequenzen. Beim Licht geschieht dies mit Prismen oder Gittern, bei einem elektronischen Signal kann man das Spektrum z.B. mit einem variablen Bandpassfilter ausmessen. Eine mathematische Methode, eine Funktion nach Frequenzen zu zerlegen, ist die Fourier-Transformation. Das gängige numerische Verfahren hierfür ist die FFT (fast Fourier transform).



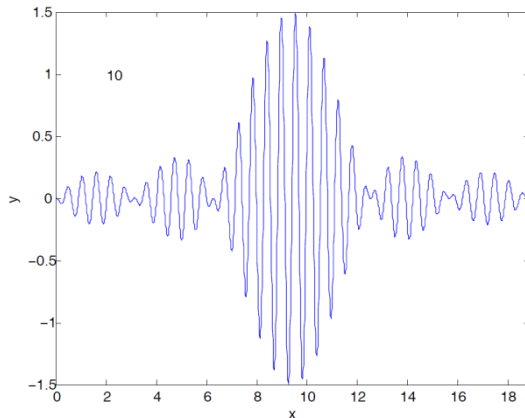
Spektrumanalysator



Jean Baptiste Fourier (1768 - 1830)

⁴There is a theorem stating when you have only a partial knowledge of the solution to a differential equation and do not know what to do next, make a Fourier transformation. This theorem is one reason why impedance is such a useful quantity.

A. Chao, Physics of Collective Beam Instabilities in High Energy Accelerators (Wiley 1993)



Funktionen lassen sich als Summen von unendlich langen sin/cos-Wellenzügen verschiedener Frequenz darstellen. Dies gilt auch für nichtperiodische Funktionen. Die Addition von zwei sin-Funktionen mit leicht verschiedener Frequenz ergibt ein Schwebungsmuster. Mit der Addition weiterer Wellenzügen (10 im Beispiel links) mit benachbarten Frequenzen entsteht ein "Wellenpaket".

Betrachte eine in x periodische Funktion, die sich z.B. mit der Periode von 2π wiederholt

$$f(x) = f(x + 2\pi) = f(x + 2\pi \cdot n)$$

Eine solche Funktion kann (abgesehen von pathologischen Fällen) durch eine unendliche Reihe dargestellt werden, deren Summanden cos- und sin-Funktionen mit $n = 1, 2, 3 \dots$ enthalten:

$$f(x) = \frac{1}{2} a_0 + \sum_{n=1}^{\infty} a_n \cdot \cos(n \cdot x) + \sum_{n=1}^{\infty} b_n \cdot \sin(n \cdot x) \quad \text{Fourier-Reihe}$$

$$a_n = \frac{1}{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} f(x) \cdot \cos(n \cdot x) \cdot dx \quad \text{Fourier-Koeffizienten für gerade Funktionen} \quad f(x) = f(-x)$$

$$b_n = \frac{1}{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} f(x) \cdot \sin(n \cdot x) \cdot dx \quad \text{Fourier-Koeffizienten für ungerade Funktionen} \quad f(x) = -f(-x)$$

Warum? Voraussetzungen:

Integral über eine Periode: $\int_{-\pi+c}^{\pi+c} \cos x \cdot dx = 0$ und $\int_{-\pi+c}^{\pi+c} \sin x \cdot dx = 0$ für jedes c ist anschaulich klar (und leicht zu beweisen)

Skalarprodukte:

$$\int_{-\pi}^{\pi} \cos(mx) \cdot \cos(nx) \cdot dx = \frac{1}{2} \int_{-\pi}^{\pi} \cos(mx - nx) \cdot dx + \frac{1}{2} \int_{-\pi}^{\pi} \cos(mx + nx) \cdot dx = \begin{cases} 0 & (m \neq n) \\ \pi & (m = n) \end{cases}$$

Ebenso:

$$\int_{-\pi}^{\pi} \sin(mx) \cdot \sin(nx) \cdot dx = \begin{cases} 0 & (m \neq n) \\ \pi & (m = n) \end{cases}$$

$$= \frac{1}{2} \int_{-\pi}^{\pi} 1 \cdot x \cdot dx = \frac{x}{2} \Big|_{-\pi}^{\pi} + 0 = \pi \quad (m = n)$$

$$\int_{-\pi}^{\pi} \cos(mx) \cdot \sin(nx) \cdot dx = 0$$

Sinus- und Kosinus-Funktionen bilden ein **orthonormales System** ähnlich wie Einheitsvektoren im kartesischen Raum

Auf die Fouriekoeffizienten angewandt, z.B.:

$$\begin{aligned}
 a_5 &= \frac{1}{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} f(x) \cdot \cos(5 \cdot x) \cdot dx = \frac{1}{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} [\dots a_4 \cdot \cos(4 \cdot x) + a_5 \cdot \cos(5 \cdot x) + a_6 \cdot \cos(6 \cdot x) \dots] \cdot \cos(5 \cdot x) \cdot dx \\
 &= \frac{1}{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} [\dots a_4 \cdot \cos(4 \cdot x) \cdot \cos(5 \cdot x) + a_5 \cdot \cos(5 \cdot x) \cdot \cos(5 \cdot x) + a_6 \cdot \cos(6 \cdot x) \cdot \cos(5 \cdot x) \dots] \cdot dx \\
 &= \dots 0 + a_5 \frac{\pi}{\pi} + 0 + \dots = a_5
 \end{aligned}$$

Durch das Integral wird die Funktion $f(x)$ auf eine Basisfunktion "projiziert". Wie ist es aber mit dem 1. Term?

$$a_0 = \frac{1}{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} f(x) \cdot \cos(0 \cdot x) \cdot dx = \frac{1}{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \left[\frac{a_0}{2} \cdot \cos(0 \cdot x) + \dots \right] \cdot \cos(0 \cdot x) \cdot dx = \frac{1}{\pi} \frac{a_0}{2} x \Big|_{-\pi}^{\pi} = a_0$$

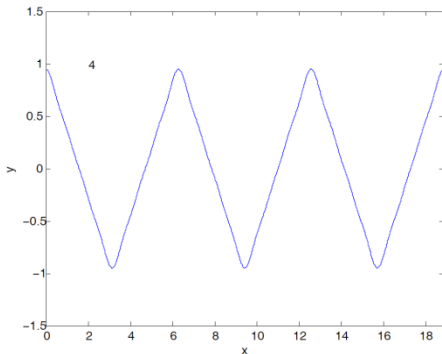
Fourier-Analyse: Zerlegung einer Funktion in ihre spektralen Anteile

Fourier-Synthese: Darstellung einer Funktion als Summe ihrer spektralen Anteile

Beispiele (jeweils 4 Terme addiert):

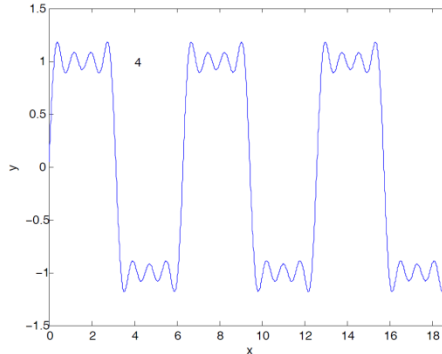
Dreieck

$$f(x) = \cos(x) + \frac{1}{3^2} \cos(3x) + \frac{1}{5^2} \cos(5x) \dots$$



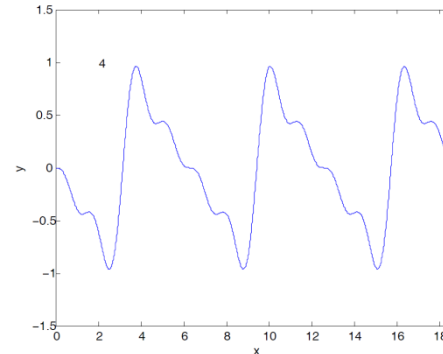
Rechteck

$$f(x) = \sin(x) + \frac{1}{3} \sin(3x) + \frac{1}{5} \sin(5x) \dots$$



Sägezahn

$$f(x) = \sin(x) + \frac{1}{2} \sin(2x) + \frac{1}{3} \sin(3x) \dots$$



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

$$f(x) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} c_n \cdot \exp(i \cdot n \cdot x)$$

$$a_n = \frac{1}{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} f(x) \cdot \cos(n \cdot x) \cdot dx$$

$$c_n = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} f(x) \cdot \exp(-i \cdot n \cdot x) \cdot dx$$

$$b_n = \frac{1}{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} f(x) \cdot \sin(n \cdot x) \cdot dx$$

Die komplexe Darstellung ist kompakter, wobei f(x) komplex oder reell sein kann (im letzteren Fall gelten Einschränkungen für die Koeffizienten)

Auch nichtperiodische Funktionen können in ihre Frequenzbestandteile mit Wellenzahl k zerlegt werden, deren Amplituden nun nicht mehr diskrete Koeffizienten, sondern eine Funktion - die Fourier-Transformierte - bilden.

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{f}(k) \cdot \exp(i \cdot k \cdot x) \cdot dk$$

$$\tilde{f}(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} f(x) \cdot \exp(-i \cdot k \cdot x) \cdot dx$$

Die Fourier-Integrale, die eine Funktion vom x- in den k-Raum und umgekehrt transformieren, sind einander sehr ähnlich (in manchen Büchern haben sie allerdings verschiedene Vorfaktoren, deren Produkt stets 1/2π ist). Die Funktionen von x und k bilden Fourier-Paare.

Wichtige Fourier-Transformationspaare sind:

δ-Funktion ↔ flache Verteilung

Gauß-Funktion ↔ Gauß-Funktion*

Rechteck-Funktion** ↔ sinc-Funktion sin(x)/x

unendlicher Kamm*** von δ-Funktionen ↔ unendlicher Kamm von δ-Funktionen

endlicher Kamm von δ-Funktionen ↔ unendlicher Kamm von Linien endlicher Breite

endlicher Kamm von Linien endlicher Breite** ↔ endlicher Kamm von Linien endlicher Breite

$$f(x) \propto e^{-\frac{1}{2\sigma_x^2} x^2} \quad \tilde{f}(k) \propto e^{-\frac{1}{2\sigma_k^2} k^2} \quad \sigma_x \cdot \sigma_k = 1$$

* Je schmaler die Gaußfunktion ist, desto breiter ist ihre Fourier-Transformierte

** Diese Beispiele entsprechen einem Spalt bzw. einem Gitter, an denen Licht gebeugt wird.

Das Beugungsmuster im Fernfeld entspricht der Fourier-Transformierten des beugenden Objekts.

*** "Kamm" soll hier eine Abfolge äquidistanter Linien bezeichnen

2.6 Erwartungswerte und Operatoren

Wellenfunktion

... ist eine komplexe Funktion.

... kann man als unendlich-dimensionalen Vektor auffassen

$$\psi(x) = \begin{pmatrix} \vdots \\ \psi_i \\ \vdots \end{pmatrix}$$

Menge aller Funktionen bildet einen Vektorraum, den **Hilbert-Raum** (quadratintegrale komplexe Funktionen, Existenz eines Skalarprodukt, ...)



David Hilbert
(1862 - 1943)

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi|^2 dx = \int_{-\infty}^{\infty} (\dots \psi_i^* \dots) \cdot \begin{pmatrix} \vdots \\ \psi_i \\ \vdots \end{pmatrix} dx = 1$$

$$\psi = \text{Re}\psi + i \cdot \text{Im}\psi; \quad i = \sqrt{-1}$$

$$\psi^* = \text{Re}\psi - i \cdot \text{Im}\psi; \quad \psi^* \cdot \psi = (\text{Re}\psi)^2 + (\text{Im}\psi)^2 = |\psi|^2$$

Erwartungswert

ist der Wert, den eine Zufallsvariable v bei gegebener Verteilung $f(v)$ im statistischen Mittel annimmt, z.B. könnte v die Geschwindigkeit von Teilchen in einem Gas sein:

Ebenso für den Ort x eines Teilchens:

$$\langle v \rangle = \int_{v=0}^{\infty} v \cdot f(v) \cdot dv$$

$$\langle x \rangle = \int_{x=-\infty}^{\infty} x \cdot f(x) \cdot dx = \int_{x=-\infty}^{\infty} x \cdot |\psi(x)|^2 \cdot dx = \int_{x=-\infty}^{\infty} \psi^*(x) \cdot x \cdot \psi(x) \cdot dx$$

Allgemein: $\langle A \rangle = \int_{x=-\infty}^{\infty} \psi^* \cdot \hat{A} \cdot \psi \cdot dx$ mit dem Operator \hat{A}

Wenn $\hat{A}\psi = A \cdot \psi$ dann ist A ein Eigenwert und ψ eine Eigenfunktion zum Operator \hat{A}

dann $\langle A \rangle = \int_{x=-\infty}^{\infty} \psi^* \cdot \hat{A} \cdot \psi \cdot dx = A \int_{x=-\infty}^{\infty} \psi^* \cdot \psi \cdot dx = A$

Einer Messgröße ("Observable") wird ein Operator zugeordnet, d.h. eine Rechenvorschrift, die auf Ψ angewandt wird (und nicht immer so einfach ist wie die Multiplikation mit x).

Wenn der Erwartungswert des Operators gleich dem Eigenwert ist, dann ist die mittlere quadratische Schwankung der Größe (bis auf Messfehler) gleich null - was aber i.d.R. nicht der Fall ist.

Ortsoperator - Vergleich mit der linearen Algebra

Wenn $\hat{M} \cdot \vec{v} = \lambda \cdot \vec{v}$

dann ist der Skalar λ ein Eigenwert und v ein Eigenvektor der Matrix M . Den Ortsoperator kann man sich als Matrix vorstellen, die Wellenfunktion als unendlichen Vektor.

Grob vereinfacht: angenommen, nur vier Orte x_i sind möglich und die Wellenfunktion sei null außer für x_3

Eigenwertgleichung:
$$\begin{pmatrix} x_1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & x_2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & x_3 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & x_4 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ x_3 \\ 0 \end{pmatrix} = x_3 \cdot \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

Erwartungswert:
$$\langle x \rangle = (0 \ 0 \ 1 \ 0) \cdot \begin{pmatrix} x_1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & x_2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & x_3 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & x_4 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} = x_3$$

Die Information über den Zustand eines Objekts steckt in seiner Wellenfunktion. Operatoren dienen dazu, bestimmte Größen aus der Wellenfunktion "herauszuholen" - im obigen Fall den Ort, der auf x_3 begrenzt war.

Wenn der Ort "unscharf" ist, kann die Eigenwertgleichung nicht oder nur näherungsweise erfüllt werden, d.h. es gibt keine eindeutige Position des Objekts, wohl aber einen Erwartungswert.

Impulsoperator

für ein Teilchen mit wohldefiniertem Impuls (aber beliebig großer Ortsunschärfe)

$$\psi(x,t) = C_0 \cdot e^{i(k \cdot x - \omega t)} = C_0 \cdot e^{\frac{i}{\hbar}(p_x \cdot x - E \cdot t)}$$

$$-i \cdot \hbar \cdot \frac{\partial}{\partial x} \psi(x,t) = p_x \cdot \psi(x,t) \quad \text{und analog für } p_y \text{ und } p_z$$

Impulsoperator

$$\hat{p} = -i \cdot \hbar \cdot \vec{\nabla}$$

$$\vec{\nabla} \equiv \begin{pmatrix} \partial / \partial x \\ \partial / \partial y \\ \partial / \partial z \end{pmatrix}$$

Analog dazu:

$$i \cdot \hbar \cdot \frac{\partial}{\partial t} \psi(x,t) = E \cdot \psi(x,t)$$

Energieoperator

$$\hat{E} = i \cdot \hbar \cdot \frac{\partial}{\partial t}$$

Experiment zur Wellennatur von Elektronen

Elektronen werden in einem evakuierten Glaskolben mit einer Spannung von 7 kV beschleunigt und treffen auf eine Schicht von polykristallinem Graphit auf einem Kupferträger. Ein Teil der Wand des Glaskolbens ist beschichtet und leuchtet, wenn Elektronen auftreffen.

Beobachtet wird ein ringförmiges Muster, das nur als Beugung der Elektronen an der Graphitschicht interpretiert werden kann - analog zur Beugung von Laserlicht an regellos verteilten Teilchen (Experiment mit HeNe-Laser und Lycopodiumpulver).

(Durch Ablenkung mit einem Magneten wird verifiziert, dass es sich um geladene Teilchen handelt, die auf der Kolbenwand auftreffen)

