3 Fouriertransformation auf $\mathcal{S}$

Motivation:
Die Schrödingergleichung ohne Potential lautet

$$\mathrm{i}\frac{\partial}{\partial t}\psi(t,x) = -\frac{1}{2}\Delta_x\psi(t,x)$$

wobei $\psi\colon \mathbb{R}_t \times \mathbb{R}^d_x \to \mathbb{C}$ die sogenannte Wellenfunktion und $\Delta_x = \sum_{j=1}^d \frac{\partial^2}{\partial x_j^2} = \nabla_x^2$ der Laplaceoperator ist.

Aufgrund der Linearität der Gleichung kann sind wir bei der Wärmeleitungsgleichung Linearkombinationen von Lösungen wieder Lösungen. Wieder kann man durch Ternnung der Variable oder durch bloßes Hinschauen die ebenen Wellen als Lösungen erkennen:

$$\phi_k(t,x) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{k^2}{2}t}$$

löst die Schrödingergleichung und zumindest formal ist auch

$$\psi(t,x) = \int\limits_{\mathbb{R}^d} \mathrm{d}k\,\widehat{\psi}(k)\phi_k(t,x) = \int\limits_{\mathbb{R}^d} \mathrm{d}k\,\widehat{\psi}(k)\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{k^2}{2}t}$$

eine Lösung der Schrödingergleichung. Es ist

$$\psi(0,x) = \int\limits_{\mathbb{R}^d} \mathrm{d}k\,\widehat{\psi}(k)\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}\,.$$

Es stellen sich die gleichen Fragen wie bei der formalen Fourierreihe. Welche Anfangsdaten kann man in dieser Form schreiben und in welchen Sinne löst die so gewonnene Funktion tatsächlich die Schrödingergleichung?

3.1 Definition (Fouriertransformation)**:**
Sei $f \in L^1(\mathbb{R}^d)$, dann heißt die Funktion

$$\widehat{f}(k) = (\mathcal{F}f)(k) = \frac{1}{(2\pi)^{d/2}}\int\limits_{\mathbb{R}^d} \mathrm{d}x\, f(x)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx}$$

die *Fouriertransformierte von f* und

$$\check{f}(k) = (\mathcal{F}^{-1}f)(k) = \frac{1}{(2\pi)^{d/2}}\int\limits_{\mathbb{R}^d} \mathrm{d}x\, f(x)\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}$$

die *Fourierrücktransformierte.*

3.2 Lemma (Integrale mit Parameter)**:**
Sei $\Gamma \subset \mathbb{R}$ *ein offenes Intervall und* $f\colon \mathbb{R}^d \times \Gamma \to \mathbb{C}$ *so, dass* $f(x,\gamma) \in L^1(\mathbb{R}^d_x)$ *für jedes feste* $\gamma \in \Gamma$*. Setze* $I(\gamma) = \int_{\mathbb{R}^d} f(x,\gamma)\,\mathrm{d}x$.

(i) Falls die Abbildung $\gamma \mapsto f(x,\gamma)$ *für fast alle* $x \in \mathbb{R}^d$ *stetig ist und es eine Funktion* $g \in L^1(\mathbb{R}^d)$ *gibt mit* $\sup_{\gamma\in\Gamma} |f(x,\gamma)| \le g(x)$ *für fast alle* $x \in \mathbb{R}^d$*, dann ist auch* $I(\gamma)$ *stetig.*

(ii) Falls die Abbildung $\gamma \mapsto f(x,\gamma)$ *für alle* $x \in \mathbb{R}^d$ *stetig differenzierbar ist und es eine Funktion* $g \in L^1(\mathbb{R}^d)$ *gibt mit* $\sup_{\gamma\in\Gamma} |\partial_\gamma f(x,\gamma)| \le g(x)$ *für fast alle* $x \in \mathbb{R}^d$*, dann ist auch* $I(\gamma)$ *stetig differenzierbar und es gilt*

$$\frac{\mathrm{d}I}{\mathrm{d}\gamma}(\gamma) = \frac{d}{\mathrm{d}\gamma}\int\limits_{\mathbb{R}^d} f(x,\gamma)\,\mathrm{d}x = \int\limits_{\mathbb{R}^d} \frac{\partial}{\partial\gamma} f(x,\gamma)\,\mathrm{d}x\,.$$

3.3 Satz (Lemma von Riemann-Lebesgue)**:**
Sei $f \in L^1(\mathbb{R}^d)$*, dann ist* $\widehat{f} \in C_\infty(\mathbb{R}^d)$ *und* $\check{f} \in C_\infty(\mathbb{R}^d)$*.*

Hier ist $C_\infty(\mathbb{R}^d) = \big\{ f \in C(\mathbb{R}^d) \mid \lim_{n\to\infty} f(x_n) = 0$ *falls* $\lim_{n\to\infty} |x_n| = \infty \big\}$

Beweis: $\widehat{f} \in C(\mathbb{R}^d)$ folgt sofort aus Lemma 3.2. Den Abfall bei ∞ beweisen wir später. □

Wir untersuchen die Fouriertransformation zunächst auf möglichst schönen Funktionen. Da wir nun über ein unbeschränktes Gebiet integrieren, verlangen wir von "schönen Funktionen" nicht nur Glattheit sondern auch schnellen Abfall.

3.4 Definition:
Ein *Multiindex* $\alpha \in \mathbb{N}_0^d$ ist ein d-tupel $\alpha = (\alpha_1, \dots, \alpha_d)$ mit $\alpha_j \in \mathbb{N}_0$, und $|\alpha| = \sum_{j=1}^d \alpha_j$.

Für $x \in \mathbb{R}^d$ bezeichne

$$x^\alpha = x_1^{\alpha_1} x_2^{\alpha_2} \dots x_d^{\alpha_d} \text{ und } \partial_x^\alpha = \frac{\partial^{|\alpha|}}{\partial x_1^{\alpha_1} \dots x_d^{\alpha_d}}\,.$$

3.5 Definition:
Der $\mathbb{C}$-Vektorraum der *Schwartzschen Funktionen* $\mathcal{S}(\mathbb{R}^d) \subset C^\infty(\mathbb{R}^d)$ ist die Menge derjenigen $f \in C^\infty(\mathbb{R}^d)$, mit

$$\|f\|_{\alpha,\beta} = \sup_{x\in\mathbb{R}^d} |x^\alpha \partial_x^\beta f(x)| < \infty$$

für alle α, $\beta \in \mathbb{N}_0^d$.

Bemerkung: Die Funktionen in $\mathcal{S}$ fallen also schneller als jedes inverse Polynom ab und gleiches gilt für all ihre partiellen Ableitungen. Für $f \in \mathcal{S}$ ist $x^\alpha \partial^\beta f \in \mathcal{S}$ für alle $\alpha, \beta \in \mathbb{N}_0^d$ und $\mathcal{S}(\mathbb{R}^d) \subset L^1(\mathbb{R}^d)$.

Wir definieren auf $\mathcal{S}$ die folgende Metrik:

$$d_{\mathcal{S}}(f,g) := \sum_{n=0}^{\infty} 2^{-n} \sup_{|\alpha|+|\beta|=n} \left(\frac{\|f-g\|_{\alpha,\beta}}{1+\|f-g\|_{\alpha,\beta}} \right) .$$

3.6 Satz:
$d_{\mathcal{S}}\colon \mathcal{S} \times \mathcal{S} \to \mathbb{R}_0^+$ *ist eine Metrik auf* $\mathcal{S}$ *und der metrische Raum* $(\mathcal{S}, d_{\mathcal{S}})$ *ist vollständig.*

Beweis: Positivität, $d_{\mathcal{S}}(f,g) \geq 0$, und Symmetrie $d_{\mathcal{S}}(f,g) = d_{\mathcal{S}}(g,f)$ sind offensichtlich. Definitheit ebenfalls, denn $d_{\mathcal{S}}(f,g) = 0$ impliziert $\|f-g\|_{0,0} = \|f-g\|_\infty = 0$, also $f = g$.

Die Dreiecksungleichung $d_{\mathcal{S}}(f,g) \leq d_{\mathcal{S}}(f,h) + d_{\mathcal{S}}(h,g)$ gilt, da $\|\cdot\|_{\alpha,\beta}$ jeweils die Dreiecksgleichung erfüllt und $h(x) = \frac{x}{1+x}$ für $x > 0$ monoton wachsend ist und $h(x+y) \leq h(x) + h(y)$ erfüllt.

Zur Vollständigkeit: Sei (f_m) eine Cauchyfolge in $\mathcal{S}$ bezüglich $d_{\mathcal{S}}$. Dann ist (f_m) auch Cauchyfolge bezüglich aller $\|\cdot\|_{\alpha,\beta}$. Also konvergiert $x^\alpha \partial_x^\beta f_m(x) \to g_{\alpha,\beta}(x) \in C_b(\mathbb{R}^d)$ gleichmäßig, da $C_b(\mathbb{R}^d)$ vollständig ist bezüglich der $\|\cdot\|_\infty$-Norm.

Es bleibt zu zeigen, dass $g := g_{0,0} \in C^\infty(\mathbb{R}^d)$ ist und dass $x^\alpha \partial_x^\beta g = g_{\alpha,\beta}$. Denn dann ist $g \in \mathcal{S}$ und $d_{\mathcal{S}}(f_m, g) \overset{m\to\infty}{\to} 0$.

Sei nun der Einfachheit halber $(f_m) \subset \mathcal{S}(\mathbb{R})$. Wir zeigen $g \in C^1(\mathbb{R})$ und $\partial_x g = g_{0,1}$. Höhere Ableitungen und höhere Dimensionen gehen analog.

Da $f_m \in \mathcal{S}$, gilt

$$f_m(x) = f_m(0) + \int_0^x \mathrm{d}y\, f_m'(y) . \qquad (*)$$

Nun gilt $f_m \to g$ und $f_m' \to g_{0,1}$ gleichmäßig und deshalb ergibt der Limes $m \to \infty$ in $(*)$

$$g(x) = g(0) + \int_0^x \mathrm{d}y\, g_{0,1}(y) .$$

Damit ist $g \in C^1(\mathbb{R})$ und $g' = g_{0,1}$ $\square$

Bemerkung: Räume mit einer auf diese Weise aus einer abzählberen Familie von Halbnormen konstruierten Metrik nennt man *Fréchet-Räume*.

3.7 Lemma:
$\mathcal{F}$ und $\mathcal{F}^{-1}$ sind stetige lineare Abbildungen von $\mathcal{S}(\mathbb{R}^d)$ nach $\mathcal{S}(\mathbb{R}^d)$ und für beliebige $\alpha, \beta \in \mathbb{N}_0^d$ gilt

$$\Big((\mathrm{i}k)^\alpha \, \partial_k^\beta \, \mathcal{F} f\Big)(k) = (\mathcal{F} \, \partial_x^\alpha \, (-\mathrm{i}x)^\beta \, f)(k)$$

also insbesondere, dass

$$\widehat{xf}(k) = \mathrm{i}\nabla_k \widehat{f}(k) \text{ und } \widehat{\nabla_x f}(k) = \mathrm{i}k\widehat{f}(k)$$

Beweis: Wir betrachten $\mathcal{F}$, $\mathcal{F}^{-1}$ geht analog. Die Linearität von $\mathcal{F}$ ist klar.

Für $f \in \mathcal{S}$ gilt

$$\begin{aligned}
((\mathrm{i}k)^\alpha \partial_k^\beta \mathcal{F} f)(k) &= \frac{1}{(2\pi)^{d/2}} \int_{\mathbb{R}^d} \mathrm{d}x \, (\mathrm{i}k)^\alpha \partial_k^\beta \mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx} f(x) \\
&= \frac{1}{(2\pi)^{d/2}} \int_{\mathbb{R}^d} \mathrm{d}x \, (\mathrm{i}k)^\alpha (-\mathrm{i}x)^\beta \mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx} f(x) \\
&= \frac{1}{(2\pi)^{d/2}} \int_{\mathbb{R}^d} \mathrm{d}x \, (-1)^{|\alpha|} (-\mathrm{i}x)^\beta (\partial_x^\alpha \mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx}) f(x) \\
&\overset{|\alpha|\text{-fache part. Int.}}{=} \frac{1}{(2\pi)^{d/2}} \int_{\mathbb{R}^d} \mathrm{d}x \, \mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx} \partial_x^\alpha (-\mathrm{i}x)^\beta f(x) \\
&= (\mathcal{F} \partial_x^\alpha (-\mathrm{i}x)^\beta f)(k) \,.
\end{aligned}$$

Damit gilt insbesondere

$$\|\mathcal{F} f\|_{\alpha,\beta} = \sup_{k \in \mathbb{R}^d} |(k^\alpha \partial_k^\beta \mathcal{F} f)(k)| \leq \frac{1}{(2\pi)^{d/2}} \int \mathrm{d}x \, |\partial_x^\alpha x^\beta f(x)| < \infty$$

also $\widehat{f} \in \mathcal{S}$. Es bleibt die Stetigkeit zu zeigen. Da auf metrischen Räumen Folgenstetigkeit die Stetigkeit einer Abbildung impliziert, genügt es, die Folgenstetigkeit von $\mathcal{F} \colon \mathcal{S} \to \mathcal{S}$ nachzuweisen.

Dazu wähle $n \in \mathbb{N}$ so groß, dass $\int_{\mathbb{R}^d} \frac{1}{(1+|x|^2)^n} < \infty$ ist. Dann gilt

$$\begin{aligned}
\|\widehat{f}\|_{\alpha,\beta} &\leq \frac{1}{(2\pi)^{d/2}} \int \mathrm{d}x \, |\partial_x^\alpha x^\beta f(x)| \frac{(1+x^2)^n}{(1+x^2)^n} \\
&\leq \frac{1}{(2\pi)^{d/2}} \sup_x \big((1+x^2)^n |\partial_x^\alpha x^\beta f(x)|\big) \underbrace{\int \mathrm{d}x \, \frac{1}{(1+x^2)^n}}_{=c<\infty} \\
&\leq \frac{c}{(2\pi)^{d/2}} \sum_{(\tilde{\alpha},\tilde{\beta})\in I} \|f\|_{\tilde{\alpha},\tilde{\beta}} \, ,
\end{aligned}$$

wobei $I \subset \mathbb{N}_0^d \times \mathbb{N}_0^d$ eine endliche Menge ist. Sei $f_m \to f$ in $\mathcal{S}$, also $d_{\mathcal{S}}(f_m, f) \to 0$. Dann gilt $\|f_m - f\|_{\alpha,\beta} \to 0$ für alle $\alpha, \beta \in \mathbb{N}_0^d$ und mit der gerade gezeigten Ungleichung auch $\|\widehat{f}_m - \widehat{f}\|_{\alpha,\beta} \to 0$ für alle $\alpha, \beta \in \mathbb{N}_0^d$, also $d_{\mathcal{S}}(\widehat{f}_m, \widehat{f}) \to 0$.

$\square$

3.8 Satz:
$\mathcal{F}\colon \mathcal{S} \to \mathcal{S}$ ist eine stetige Bijektion und die stetige Inverse ist durch $\mathcal{F}^{-1}$ gegeben.

Beweis: Wir zeigen, dass $\mathcal{F}^{-1}\mathcal{F}f = f$ für $f \in \mathcal{S}$ gilt. Der Beweis für $\mathcal{F}\mathcal{F}^{-1}f = f$ geht analog.

Da $\mathcal{F}\colon \mathcal{S} \to \mathcal{S}$, $\mathcal{F}^{-1}\colon \mathcal{S} \to \mathcal{S}$ stetig sind, reicht es $\mathcal{F}^{-1}\mathcal{F} = \mathrm{id}_{\mathcal{S}}$ auf einer dichten Teilmenge zu zeigen.
Bemerkung: Seien $f, g\colon M \to N$ stetige Abbildungen zwischen metrischen Räumen. Sei $D \subset M$ dicht. Falls $f(x) = g(x)$ für $x \in D$ dann folgt schon $f(x) = g(x)$ für $x \in M$, denn sei $x \in M$ und $(x_n) \subset D$ mit $x_n \to x$, dann ist $f(x) = f(\lim_{n\to\infty} x_n) = \lim_{n\to\infty} f(x_n) = \lim_{n\to\infty} g(x_n) = g(\lim_{n\to\infty} x_n) = g(x)$.

3.9 Lemma:
Die glatten Funktionen mit kompaktem Träger, bezeichnet mit $C_0^\infty(\mathbb{R}^d)$ liegen dicht in $\mathcal{S}(\mathbb{R}^d)$.

Beweis: Für $x \in \mathbb{R}^d$ sei

$$G(x) = \begin{cases} \mathrm{e}^{-\frac{1}{1-x^2}+1} & \text{falls } |x| < 1 \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$$

Man überzeuge sich, dass $G \in \mathrm{C}_0^\infty(\mathbb{R}^d)$. Sei nun $G_m(x) = G(\frac{x}{m})$ dann ist $G_m f \in C_0^\infty$ für $f \in \mathcal{S}$ und man rechnet direkt nach, dass für alle $\alpha, \beta \in \mathbb{N}_0^d$ gilt $\lim_{m\to\infty} \|G_m f - f\|_{\alpha,\beta} = 0$. Damit gilt $d_{\mathcal{S}}(G_m f, f) \to 0$. □

Also reicht es aus, $\mathcal{F}^{-1}\mathcal{F}f = f$ für alle $f \in C_0^\infty$ zu zeigen. Sei also $f \in C_0^\infty$ gegeben, dann gibt es ein $l > 0$ so dass $\mathrm{supp} f \subset W_l := [-l, l]^d$ und wir können f auch als glatte $2l$-periodische Funktion auffassen. Gemäß Kapitel 1 konvergiert die Fourierreihe von f auf W_l gleichmäßig:

$$f(x) = \sum_{n\in\mathbb{Z}^d} c_n \,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\frac{\pi n\cdot x}{l}}\,, \qquad c_n = \frac{1}{(2l)^d} \int\limits_{[-l,l]^d} \mathrm{d}x\, f(x)\, \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{n\pi x}{l}}\,,$$

Substituieren wir $k = n\pi/l$ ergibt sich alternativ

$$f(x) = \sum_{k\in\frac{\pi}{l}\mathbb{Z}^d} \mathrm{e}^{\mathrm{i}kx} f_k$$

mit

$$f_k = \frac{1}{(2l)^d} \int\limits_{[-l,l]^d} \mathrm{d}x\, f(x)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx} = \frac{1}{(2l)^d} \int\limits_{\mathbb{R}^d} \mathrm{d}x\, f(x)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx} = \frac{(2\pi)^{\frac{d}{2}}}{(2l)^d} (\mathcal{F}f)(k)$$

Es gilt also

$$f(x) = \sum_{k\in\frac{\pi}{l}\mathbb{Z}^d} \frac{(\mathcal{F}f)(k)\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}}{(2\pi)^{d/2}} \left(\frac{\pi}{l}\right)^d .$$

Da $\mathbb{R}^d$ die disjunkte Vereinigung von an den Punkten $k \in \frac{\pi}{l}\mathbb{Z}^d$ zentrierten Würfeln der Seitenlänge π/l ist, ist die rechte Seite nichts anderes als eine Riemann-Summe für das Integral über die Funktion $(\mathcal{F}f)(k)\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}k\cdot x}/(2\pi)^{d/2}$. Da gemäß Lemma 3.7 $(\mathcal{F}f)(k) \in \mathcal{S}$ gilt, konvergieren die Riemann-Summen für $l \to \infty$ gegen das Integral, also

$$\begin{aligned} f(x) &= \lim_{l\to\infty} \sum_{k\in\frac{\pi}{l}\mathbb{Z}^d} \frac{(\mathcal{F}f)(k)\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}k\cdot x}}{(2\pi)^{d/2}} \left(\frac{\pi}{l}\right)^d \\ &= \frac{1}{(2\pi)^{d/2}} \int\limits_{\mathbb{R}^d} \mathrm{d}k\, (\mathcal{F}f)(k)\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}k\cdot x} = (\mathcal{F}^{-1}\mathcal{F}f))(x)\,. \end{aligned}$$

□

3.10 Satz:
Für $f, g \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^d)$ gilt

$$\int\limits_{\mathbb{R}^d} \mathrm{d}x\, \widehat{f}(x) g(x) = \int\limits_{\mathbb{R}^d} \mathrm{d}x\, f(x) \widehat{g}(x) \tag{$*$}$$

und insbesondere

$$\|f\|^2_{L^2(\mathbb{R}^d)} = \int\limits_{\mathbb{R}^d} \mathrm{d}x\, |f(x)|^2 = \int\limits_{\mathbb{R}^d} \mathrm{d}k\, |\widehat{f}(k)|^2 = \|\widehat{f}\|^2_{L^2(\mathbb{R}^d)}\,. \tag{$**$}$$

Beweis:

$$\begin{aligned}
\int\limits_{\mathbb{R}^d} \mathrm{d}x\, \widehat{f}(x) g(x) &= \frac{1}{(2\pi)^{\frac{d}{2}}} \int\limits_{\mathbb{R}^d} \mathrm{d}x \int\limits_{\mathbb{R}^d} \mathrm{d}k\, \mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx} f(k) g(x) \\
&= \int\limits_{\mathbb{R}^d} \mathrm{d}k\, \underbrace{\left(\frac{1}{(2\pi)^{\frac{d}{2}}} \int\limits_{\mathbb{R}^d} \mathrm{d}x\, \mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx} g(x) \right)}_{=\widehat{g}(k)} f(k) \\
&= \int\limits_{\mathbb{R}^d} \mathrm{d}k\, \widehat{g}(k) f(k)\,.
\end{aligned}$$

Für die zweite Gleichung stellen wir zunächst fest, dass

$$\begin{aligned}
(\overline{\mathcal{F}f})(k) &= \frac{1}{(2\pi)^{\frac{d}{2}}} \int\limits_{\mathbb{R}^d} \mathrm{d}x\, \overline{\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx} f(x)} \\
&= \frac{1}{(2\pi)^{\frac{d}{2}}} \int\limits_{\mathbb{R}^d} \mathrm{d}x\, \mathrm{e}^{\mathrm{i}kx} \overline{f(x)} = (\mathcal{F}^{-1}\overline{f})(k)
\end{aligned}$$

Setzt man $g(x) = (\mathcal{F}^{-1}\overline{f})(x) = (\overline{\mathcal{F}f})(x)$ in $(*)$, erhält man $(**)$. $\square$

3.11 Beispiel:
Sei

$$f(x) = \mathrm{e}^{-x^2/(2\sigma^2)}$$

mit $\sigma > 0$. Es gilt offensichtlich $f \in \mathcal{S}(\mathbb{R})$ und man findet

$$\begin{aligned}
\widehat{f}(k) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{\mathbb{R}} \mathrm{d}x \; \mathrm{e}^{-x^2/(2\sigma^2)} \; \mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx} \overset{(a)}{=} \frac{\sigma}{\sqrt{\pi}} \int_{\mathbb{R}} \mathrm{d}y \; \mathrm{e}^{-y^2 - \mathrm{i}yk\sqrt{2}\sigma} \\
&\overset{(b)}{=} \frac{\mathrm{e}^{-k^2\sigma^2/2}\,\sigma}{\sqrt{\pi}} \int_{\mathbb{R}} \mathrm{d}y \; \mathrm{e}^{-(y+\mathrm{i}k\sigma/\sqrt{2})^2} \\
&\overset{(c)}{=} \frac{\mathrm{e}^{-k^2\sigma^2/2}\,\sigma}{\sqrt{\pi}} \underbrace{\int_{\mathbb{R}} \mathrm{d}z \; \mathrm{e}^{-z^2}}_{=\sqrt{\pi}} = \sigma\, \mathrm{e}^{-k^2\sigma^2/2} \,. \qquad (6)
\end{aligned}$$

Für (a) haben wir $y^2 = x^2/(2\sigma^2)$ substituiert, für (b) den Exponenten im Integranden quadratisch ergänzt und in (c) wieder $z = y + \mathrm{i}k\sigma/\sqrt{2}$ substituiert, allerdings ohne den Integrationsweg anzupassen, da e^{-z^2} eine holomorphe Funktion ist. Wir werden das genaue Argument gleich noch geben.

An diesem Beispiel sieht man schon eine wichtige Eigenschaft der Fouriertransformation, die wir später noch allgemeiner verstehen wollen. Die "Breite" der Funktion f (genauer die Varianz der Verteilung $|f(x)|^2$) ist σ^2 und die von $\widehat{f}$ gleich $1/\sigma^2$. Je schmäler die Funktion f, desto breiter die Funktion $\widehat{f}$.

Einschub zu Gaußschen Integralen. Wir wollen nun noch den letzten Schritt in der Rechnung (6) begründen und betrachten dazu das allgemeine Gaussche Integral der Form

$$\int_{\mathbb{R}} \mathrm{e}^{-(\alpha x+\beta)^2} \,\mathrm{d}x$$

für $\alpha, \beta \in \mathbb{C}$ mit $\mathrm{Re}(\alpha^2) > 0$. Im Detail lautet der letzte Schritt in (6) dann

$$\lim_{R\to\infty} \int_{-R}^{R} \mathrm{d}x\, \mathrm{e}^{-(\alpha x+\beta)^2} = \lim_{R\to\infty} \frac{1}{\alpha} \int_{-\alpha R+\beta}^{\alpha R+\beta} \mathrm{d}z\, \mathrm{e}^{-z^2} \overset{(*)}{=} \lim_{R\to\infty} \frac{1}{\alpha} \int_{-R}^{R} \mathrm{d}z\, \mathrm{e}^{-z^2} = \frac{\sqrt{\pi}}{\alpha} \,,$$

wobei nur die Änderung des Integrationsweges in $(*)$ noch zu rechtfertigen ist. Das wollen wir kurz skizzieren. Offensichtlich ist e^{-z^2} eine auf ganz $\mathbb{C}$ holomorphe Funktion. Sei $\gamma := \mathrm{Re}\,\alpha \neq \alpha$, dann ist

$$\int_{-\gamma R}^{\gamma R} \mathrm{d}z\, \mathrm{e}^{-z^2} + \int_{\gamma R}^{\alpha R+\beta} \mathrm{d}z\, \mathrm{e}^{-z^2} + \int_{\alpha R+\beta}^{-\alpha R+\beta} \mathrm{d}z\, \mathrm{e}^{-z^2} + \int_{-\alpha R+\beta}^{-\gamma R} \mathrm{d}z\, \mathrm{e}^{-z^2} = 0 \,,$$

da es sich um ein geschlossenes Wegintegral handelt. Dabei nehmen wir jeweils die Geradenstücke welche die Endpunkte verbinden als Integrationswege. (Man zeichne sich das auf!). O.B.d.A. nehmen wir an, dass β reell ist, da wir uns die endliche Verschiebung des "unendlich langen" Integrationsweg immer in reeller Richtung vorstellen können. (Bild!)

Wir zeigen, dass

$$\lim_{R\to\infty} \int\limits_{\gamma R}^{\alpha R+\beta} \mathrm{d}z\, \mathrm{e}^{-z^2} = \lim_{R\to\infty} \int\limits_{-\gamma R}^{-\alpha R+\beta} \mathrm{d}z\, \mathrm{e}^{-z^2} = 0\,,$$

was

$$\int\limits_{\alpha R+\beta}^{-\alpha R+\beta} \mathrm{d}z\, \mathrm{e}^{-z^2} = \int\limits_{-\gamma R}^{\gamma R} \mathrm{d}z\, \mathrm{e}^{-z^2}$$

und somit $(*)$ impliziert Mit $z = x + \mathrm{i}y$ und $\delta = \tan\arg\alpha$ findet man

$$\begin{aligned}
\left| \int\limits_{\gamma R}^{\alpha R+\beta} \mathrm{d}z\, \mathrm{e}^{-z^2} \right| &\leq \int\limits_{\gamma R}^{\alpha R+\beta} \mathrm{d}z\, \left|\mathrm{e}^{-z^2}\right| = \int\limits_{\gamma R}^{\alpha R+\beta} \mathrm{d}z\, \mathrm{e}^{-x^2}\mathrm{e}^{y^2} \\
&= \mathrm{e}^{-\gamma^2 R^2} \int\limits_{0}^{\delta\gamma R+\beta} \mathrm{d}y\, \mathrm{e}^{y^2} \leq \mathrm{e}^{-\gamma^2 R^2} \int\limits_{0}^{\delta\gamma R+\beta} \mathrm{d}y\, \frac{2y}{\delta\gamma R+\beta}\mathrm{e}^{y^2} \\
&= \frac{\mathrm{e}^{-\gamma^2 R^2}}{\delta\gamma R+\beta} \left(\mathrm{e}^{\delta^2\gamma^2R^2+2\delta\gamma R\beta+\beta^2} - 1\right) \overset{R\to\infty}{\to} 0\,,
\end{aligned}$$

da $\delta^2 < 1$ aus $\mathrm{Re}(\alpha^2) > 0$ folgt. Wir sehen hier, dass für $\mathrm{Re}(\alpha^2) = 0$ und $\beta = 0$ der letzte Ausdruck immer noch verschwindet, also in diesem Fall als uneigentliches Integral

$$\lim_{R\to\infty} \int\limits_{-R}^{R} \mathrm{d}x\, \mathrm{e}^{-(\alpha x)^2} = \frac{\sqrt{\pi}}{\alpha}\,, \tag{7}$$

gilt.

Um später verweisen zu können, fassen wir noch einmal zusammen. Für $\alpha, \beta \in \mathbb{C}$ mit $\mathrm{Re}(\alpha^2) > 0$ gilt

$$\int\limits_{\mathbb{R}} \mathrm{d}x\, \mathrm{e}^{-(\alpha x+\beta)^2} = \frac{\sqrt{\pi}}{\alpha}\,. \tag{8}$$

Für $a \in \mathbb{C}$ mit $\mathrm{Re}(a > 0)$ folgt mit der Rechnung (6), dass

$$f(x) = \mathrm{e}^{-ax^2/2} \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^d) \quad \Rightarrow \quad \widehat{f}(k) = \frac{1}{a^{d/2}}\mathrm{e}^{-k^2/(2a)} \,. \tag{9}$$

Zurück zur Schrödingergleichung: Falls $\psi(t = 0) = \psi_0 \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^d)$, dann gilt, dass

$$\psi(t, x) = (\mathcal{F}^{-1}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{k^2}{2}t}\mathcal{F}\psi_0)(x) \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^d)$$

tatsächlich eine Lösung der freien Schrödingergleichung ist, da mit $\hat{\psi}(k) \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^d)$ auch

$$\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{k^2}{2}t}\hat{\psi}(k) \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^d)$$

und

$$\frac{\partial}{\partial t}\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}k^2 t}{2}}\hat{\psi}(k) = -\mathrm{i}\frac{k^2}{2}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{k^2}{2}t}\hat{\psi}(k) \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^d)$$

Zusammengefasst, für $\psi_0 \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^d)$, löst

$$\psi(t, x) = (\mathcal{F}^{-1}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{k^2}{2}t}\mathcal{F}\psi_0)(x) \in C^\infty(\mathbb{R}_t \times \mathbb{R}^d_x)$$

die Schrödingergleichung $\mathrm{i}\partial_t\psi(t, x) = -\frac{1}{2}\Delta_x\psi(t, x)$

$$\begin{aligned} \mathrm{i}\partial_t\psi(t, x) &= \mathrm{i}(-\frac{\mathrm{i}}{2})(\mathcal{F}^{-1}k^2\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{k^2}{2}t}\mathcal{F}\psi_0)(x) \\ -\frac{1}{2}\Delta_x\psi(t, x) &= \frac{1}{2}(\mathcal{F}^{-1}k^2\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{k^2}{2}t}\mathcal{F}\psi_0)(x) \end{aligned}$$

Also ist $\psi(t, x)$ eine klassische Lösung der Schrödingergleichung.

Es gilt noch mehr: Wir können $\psi(t, x)$ als $\mathcal{S}$-wertige Funktion

$$\psi\colon \mathbb{R}_t \to \mathcal{S}(\mathbb{R}^d)$$

und die Schrödingergleichung als gewöhnliche Differentialgleichung für $\psi(t) \in \mathcal{S}$ auffassen:

$$\mathrm{i}\frac{d}{dt}\psi(t) = -\frac{1}{2}\Delta\psi(t)$$

wobei $-\frac{1}{2}\Delta\colon \mathcal{S} \to \mathcal{S},\ f(x) \mapsto -\frac{1}{2}\Delta_x f(x)$.

3.12 Satz:
Sei $\psi_0 \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^d)$. Die eindeutige globale Lösung $\psi(t,x)$ der freien Schrödingergleichung erfüllt $\psi \in C^\infty(\mathbb{R}_t, \mathcal{S}(\mathbb{R}^d))$ und löst $\mathrm{i}\frac{d}{dt}\psi(t) = -\frac{1}{2}\Delta\psi(t)$ als Gleichung in $\mathcal{S}$ und ist für $t \neq 0$ durch

$$\psi(t,x) = \frac{1}{(2\pi\mathrm{i}t)^{\frac{d}{2}}} \int\limits_{\mathbb{R}^d} \mathrm{d}y \, \mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}|x-y|^2}{2t}} \psi_0(y) \tag{$*$}$$

gegeben. Es ist $\int_{\mathbb{R}^d} \mathrm{d}x \, |\psi(t,x)|^2 = \int_{\mathbb{R}^d} \mathrm{d}x \, |\psi(0,x)|^2$.

Beweis: $(\mathcal{F}^{-1}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{k^2}{2}t}\mathcal{F}\psi_0)(x)$ ist die eindeutige Lösung der Schrödingergleichung mit $\psi(0,x) = \psi_0(x)$, da $\mathrm{e}^{-\frac{k^2}{2}t}\widehat{\psi_0(k)}$ offensichtlich die eindeutige Lösung der gewöhnlichen Differentialgleichung $\mathrm{i}\partial_t\widehat{\psi}(t,k) = k^2\widehat{\psi}(t,k)$ ist.

$\mathcal{F}, \mathcal{F}^{-1}$ und Multiplikationen mit einer Funktion $f(k)$ mit $|f(k)| = 1$ sind Isometrien bezüglich $\|\cdot\|_{L^2}$.

Um nun zu zeigen, dass $(\mathcal{F}^{-1}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{k^2}{2}t}\mathcal{F}\psi_0)(x) \in C^\infty(\mathbb{R}_t, \mathcal{S}(\mathbb{R}^d))$ gilt, genügt es aufgrund der Stetigkeit zu zeigen, dass

$$\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{k^2}{2}t}\widehat{\psi_0} \in C^\infty(\mathbb{R}_t, \mathcal{S}(\mathbb{R}^d))$$

Zur Stetigkeit findet man für $\|\cdot\|_{0,0}$

$$\begin{aligned}
\lim_{t\to t_0} \left\| (\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{k^2}{2}t} - \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{k^2}{2}t_0})\psi_0(k) \right\|_{0,0} &= \lim_{t\to t_0} \sup_{k\in\mathbb{R}^d} |(\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{k^2}{2}t} - \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{k^2}{2}t_0})\psi_0(k)| \\
&\leq \lim_{t\to t_0} \sup_{k\in\mathbb{R}^d} |t-t_0||\frac{k^2}{2}\psi_0(k)| = 0
\end{aligned}$$

und betrachte die übrigen $\|\cdot\|_{\alpha,\beta}$ analog.

Um die Formel $(*)$ zu beweisen, rechnet man einfach nach, dass sie die Schrödingergleichung erfüllt. Eine formale Herleitung ist:

$$\begin{aligned}
(\mathcal{F}^{-1}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{k^2}{2}t}\mathcal{F}\psi_0)(x) &= \frac{1}{(2\pi)^d}\int\limits_{\mathbb{R}^d} \mathrm{e}^{\mathrm{i}ks}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{k^2}{2}t}\left(\int\limits_{\mathbb{R}^d} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}ky}\psi_0(y)\,\mathrm{d}y\right)\mathrm{d}k \\
&= \frac{1}{(2\pi)^d}\int \psi_0(y)\left(\int \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{k^2}{2}t}\mathrm{e}^{\mathrm{i}k(x-y)}\,\mathrm{d}k\right)\mathrm{d}y \\
&= \frac{1}{(2\pi)^d}\int \psi_0(y)\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}(x-y)^2}{2t}} \underbrace{\int \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{t}{2}(k-\frac{x-y}{t})^2}\,\mathrm{d}k}_{\text{Gauß-Integral: }=((2\pi)(\frac{1}{\mathrm{i}t}))^{\frac{d}{2}}} \mathrm{d}y \\
&= \frac{1}{(2\pi\mathrm{i}t)^{\frac{d}{2}}}\int \mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}(x-y)^2}{2t}}\psi_0(y)\,\mathrm{d}y
\end{aligned}$$

□

Bemerkung: Man sieht an (∗) sofort, dass die Lösung der freien Schrödingergleichung für hinreichend große Zeiten „zerfließen". Denn gemäß

$$\sup_{x\in\mathbb{R}^d}|\psi(t,x)| \leq \frac{1}{(2\pi t)^{\frac{d}{2}}}\underbrace{\int|\psi_0(y)|\,\mathrm{d}y}_{=\|\psi_0\|_{L^2}}$$

nimmt das Maximum von $|\psi(t,x)|$ wie $t^{-\frac{d}{2}}$ ab.

3.13 Definition:
Sei $C^\infty_{\text{pol}}(\mathbb{R}^d)$ der Raum der glatten polynomial beschränkten Funktionen, das heißt $g \in C^\infty_{\text{pol}}$ falls $g \in C^\infty(\mathbb{R}^d)$ und es für alle $\alpha \in \mathbb{N}_0^d$ ein $n(\alpha) \in \mathbb{N}$ und $C_\alpha < \infty$ gibt, so dass

$$|\partial^\alpha g(x)| \leq C_\alpha\langle x\rangle^{n(\alpha)} := C_\alpha(1+x^2)^{\frac{n(\alpha)}{2}}$$

3.14 Lemma:
Sei $f \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^d)$ und $g \in C^\infty_{pol}(\mathbb{R}^d)$. Dann ist $gf \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^d)$ und die Abbildung $M_g\colon \mathcal{S} \to \mathcal{S}, f \mapsto gf$ ist stetig.

3.15 Definition:
Sei $g \in C^\infty_{\text{pol}}(\mathbb{R}^d)$. Dann ist $g(-\mathrm{i}\nabla)\colon \mathcal{S} \to \mathcal{S}$ die durch

$$(g(-\mathrm{i}\nabla)f)(x) = (\mathcal{F}^{-1}g(k)\mathcal{F}f)(x)$$

definierte stetige lineare Abbildung. Man nennt $g(-\mathrm{i}\nabla)$ einen Pseudodifferentialoperator.

Bemerkung: Es gilt $g(k) = k^\alpha \Rightarrow g(-\mathrm{i}\nabla) = (-\mathrm{i})^{|\alpha|}\partial_x^\alpha$. Für Polynome sind die zugehörigen Pseudodifferentialoperatoren also wieder gewöhnliche Differentialoperatoren.
Bemerkung: Wenn $|g(k)| = 1$, dann gilt für alle $f \in \mathcal{S}$

$$\|g(-\mathrm{i}\nabla)f\|_{L^2} = \left\|\mathcal{F}^{-1}g(k)\mathcal{F}f\right\|_{L^2} = \|f\|_{L^2}$$

3.16 Beispiel (Translation)**:**
Für $a \in \mathbb{R}^d$ sei $T_a(k) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}ak}$. dann gilt für $\psi \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^d)$

$$T_a(-\mathrm{i}\nabla)\psi)(x) = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{d}{2}}} \int \mathrm{e}^{-\mathrm{i}ka}\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}\widehat{\psi}(k)\,\mathrm{d}k$$

Man kann also den Operator der Funktionen um einen konstanten Vektor a verschiebt als Pseudodifferentaloperator schreiben.

3.17 Beispiel (freier Propagator)**:**
Sei $P_f(t,k) = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{k^2}{2}t}$, dann heißt

$$P_f(t, -\mathrm{i}\nabla) = \mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{2}\Delta t}$$

der freie Propagator, da wir gezeigt haben, dass $\psi(t,x) = (P_f(t,-\mathrm{i}\nabla)\psi_0)(x)$ die freie Schrödingergleichung löst.

Man beachte die Gruppeneigenschaften von $P_f(t,-\mathrm{i}\nabla)$. Es gilt

$$P_f(t_2,-\mathrm{i}\nabla)P_f(t_1,-\mathrm{i}\nabla) = P_f(t_1+t_2,-\mathrm{i}\nabla)$$

für alle $t_1, t_2 \in \mathbb{R}$, da

$$\mathrm{e}^{\mathrm{i}\frac{k^2}{2}t_2}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\frac{k^2}{2}t_1} = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\frac{k^2}{2}(t_1+t_2)}$$

3.18 Beispiel (Wärmeleitungsgleichung)**:**
Wir können nun direkt auch die Lösung der Wärmeleitungsgleichung

$$\frac{\partial}{\partial t}f(t,x) = \frac{1}{2}\Delta_x f(t,x)$$

für $f(\cdot,x) \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^d)$ hinschreiben.

Fouriertransformation liefert

$$\partial_t\widehat{f}(t,k) = -\frac{k^2}{2}\widehat{f}(t,k),$$

das heißt
$$\widehat{f}(t,k) = \mathrm{e}^{-\frac{k^2}{2}t}\widehat{f}(0,k).$$

Sei also $W(t,k) = \mathrm{e}^{-\frac{k^2}{2}t}$, dann löst

$$f(t,x) = \mathrm{e}^{\S\frac{\Delta}{2}t}f(0,x) = W(t,-\mathrm{i}\nabla)f(0,x)$$

die Wärmeleitungsgleichung für $t \geq 0$.

Der Wärmeleitungspropagator glättet Funktionen, da die hohen Frequenzen im Fourierraum dämpft (abschneidet). Der Schrödingerpropagator tut das nicht!

3.19 Definition:
Seien $f,g \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^d)$, dann heißt

$$(f \star g)(x) = \int\limits_{\mathbb{R}^d} f(x-y)g(y)\,\mathrm{d}y$$

die Faltung von f und g.

3.20 Satz:
Für $f,g,h \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^d)$ gilt

(i) $f \star g = g \star f$ *und* $f \star (g \star h) = (f \star g) \star h$

(ii) Die Abbildung $g \mapsto f \star g$ von $\mathcal{S}$ nach $\mathcal{S}$ ist stetig.

(iii) Es gilt
$$\widehat{f \star g} = (2\pi)^{\frac{d}{2}}\widehat{f}\widehat{g}$$
und entsprechend $\widehat{fg} = (2\pi)^{-\frac{d}{2}}\widehat{f} \star \widehat{g}$. Insbesondere ist für $f,g \in \mathcal{S}$
$$g(-\mathrm{i}\nabla)f = \mathcal{F}^{-1}(g\widehat{f}) = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{d}{2}}}\,\check{g} \star f\,.$$

Beweis: (i) $(f \star g)(x) = \int f(x-y)g(y)\,\mathrm{d}y = \int f(z)g(x-z)\,\mathrm{d}z = (g \star f)(x)$

(iii)

$$\begin{aligned}
(\widehat{f*g})(k) &= \frac{1}{(2\pi)^{d/2}} \int\limits_{\mathbb{R}^d} \mathrm{d}x\, \mathrm{e}^{-\mathrm{i}k\cdot x} \int\limits_{\mathbb{R}^d} \mathrm{d}y\, f(x-y)\, g(y) \\
&\overset{\text{(a)}}{=} \frac{1}{(2\pi)^{d/2}} \int\limits_{\mathbb{R}^d} \mathrm{d}y \int\limits_{\mathbb{R}^d} \mathrm{d}x\, \mathrm{e}^{-\mathrm{i}k\cdot x}\, f(x-y)\, g(y) \\
&\overset{\text{(b)}}{=} \frac{1}{(2\pi)^{d/2}} \int\limits_{\mathbb{R}^d} \mathrm{d}y \int\limits_{\mathbb{R}^d} \mathrm{d}z\, \mathrm{e}^{-\mathrm{i}k\cdot(y+z)}\, f(z)\, g(y) \\
&= (2\pi)^{d/2}\, \hat{f}(k)\, \hat{g}(k)\,.
\end{aligned}$$

In (a) haben wir Fubini verwendet (Man mache sich nochmal klar, wie das Argument genau geht!) und in (b) $x = z + y$ substituiert. Die zweite Aussage in (iii) bekommt man, indem man zunächst die zur ersten analoge Aussage für $\mathcal{F}^{-1}$ zeigt, nämlich dass $\mathcal{F}^{-1} f * g = (2\pi)^{d/2}\, \check{f}\check{g}$ gilt (folgt genau wie oben!), in diese dann $\hat{f}$ und $\hat{g}$ für f und g einsetzt und schließlich $\mathcal{F}$ anwendet.

(ii) Mit (iii) gilt $f*g = (2\pi)^{d/2}\, \mathcal{F}^{-1} \widehat{f}\, \mathcal{F}\, g$, die Faltung mit f entspricht also der Hintereinanderausführung von Fouriertransformation, Multiplikation mit $\hat{f}$ und Rücktransformation, also der Komposition stetiger Abbildungen, welche dann auch stetig ist. Damit gilt auch (ii).

$\square$

3.21 Beispiel:
Für $W(t, -\mathrm{i}\nabla) f(x) = (\mathcal{F}^{-1}\, \mathrm{e}^{-\frac{k^2}{2}t}\, \mathcal{F} f)(x)$ liefert Satz 3.20, dass

$$W(t, -\mathrm{i}\nabla) f(x) = (K_h(t) \star f)(x)$$

wobei $K_h(t)$ der Wärmeleitungskern („heat kernel") heißt und durch

$$K_{\mathrm{h}}(t,x) = \frac{1}{(2\pi)^{d/2}} \left(\mathcal{F}^{-1}\ \mathrm{e}^{-\frac{1}{2}k^2 t} \right)(x) = \frac{1}{(2\pi t)^{d/2}} \mathrm{e}^{-\frac{x^2}{2t}}$$

gegeben ist.