

0.1 15a

In zweiter Quantisierung hat der Hamilton-Operator \hat{H} folgende Gestalt:

$$\hat{H} = \sum_{i,j,\sigma,\sigma'} \hat{c}_{i,\sigma}^\dagger \langle \varphi_i, \sigma | h_0 | \varphi_j, \sigma' \rangle \hat{c}_{j,\sigma'} \quad (1)$$

Die $|\varphi_i, \sigma\rangle$ sind Eigenzustände von h_0 und daher gilt:

$$\langle \varphi_i, \sigma | h_0 | \varphi_j, \sigma' \rangle = \epsilon_i \delta_{ij} \delta_{\sigma\sigma'} \quad (2)$$

Damit bekommt der Hamiltonoperator in zweiter Quantisierung die folgende Form:

$$\hat{H} = \sum_{i,\sigma} \epsilon_i \underbrace{\hat{c}_{i,\sigma}^\dagger \hat{c}_{i,\sigma}}_{\hat{n}_{i,\sigma}} \quad (3)$$

0.2 15b

$$\hat{P} = \sum_{\sigma,\sigma'} \int d^3 r' \int d^3 r \hat{\psi}_{\sigma'}^\dagger(\vec{r}') \langle \vec{r}', \sigma' | \hat{p} | \vec{r}, \sigma \rangle \hat{\psi}_\sigma(\vec{r}) \quad (4)$$

Man benötigt also das Matrixelement des Impuls-Operators \hat{p} (in erster Quantisierung):

$$\langle \vec{r}', \sigma' | \hat{p} | \vec{r}, \sigma \rangle = \langle \vec{r}' | \hat{p} | \vec{r} \rangle \delta_{\sigma\sigma'} \quad (5)$$

Um das Matrixelement $\langle \vec{r}' | \hat{p} | \vec{r} \rangle$ zu berechnen, fügt man zweimal eine vollständige Eigenbasis ($\mathbb{1} = \int d^3 p |\vec{p}\rangle \langle \vec{p}|$) des Impulsoperators \hat{p} ein und benützt die Tatsache, dass der Operator \hat{p} in dieser Basis diagonal ist, d.h.: $\langle \vec{p}' | \hat{p} | \vec{p} \rangle = \vec{p} \delta^{(3)}(\vec{p} - \vec{p}')$. Ferner kennt man die Projektionen von Orts- auf Impulseigenzustände, was nichts anderes als eine ebene Welle ist:

$$\begin{aligned} \langle \vec{r}' | \vec{p} \rangle &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}} e^{\frac{i}{\hbar} \vec{p} \vec{r}'} \\ \langle \vec{p} | \vec{r} \rangle &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}} e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{p} \vec{r}} \end{aligned} \quad (6)$$

Damit erhält man nun für das Matrixelement $\langle \vec{r}' | \hat{p} | \vec{r} \rangle$:

$$\begin{aligned} \langle \vec{r}' | \hat{p} | \vec{r} \rangle &= \int d^3 p' \int d^3 p \langle \vec{r}' | \vec{p}' \rangle \langle \vec{p}' | \hat{p} | \vec{p} \rangle \langle \vec{p} | \vec{r} \rangle = \\ &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int d^3 p' \int d^3 p e^{\frac{i}{\hbar} \vec{p}' \vec{r}'} e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{p} \vec{r}} \vec{p} \delta^{(3)}(\vec{p} - \vec{p}') = \\ &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int d^3 p \vec{p} e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{p}(\vec{r} - \vec{r}')} = \\ &= i\hbar \nabla_{\vec{r}} \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int d^3 p e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{p}(\vec{r} - \vec{r}')} = \\ &= i\hbar \nabla_{\vec{r}} \delta^{(3)}(\vec{r} - \vec{r}') \end{aligned} \quad (7)$$

(Beachte, dass die Ableitung auf die δ -Funktion wirkt!). Setzt man diesen Ausdruck nun in Formel 5 bzw. 4 ein, so erhält man:

$$\begin{aligned}\hat{P} &= \sum_{\sigma} \int d^3r \int d^3r' \hat{\psi}_{\sigma}^{\dagger}(\vec{r}') i\hbar \left(\nabla_{\vec{r}} \delta^{(3)}(\vec{r} - \vec{r}') \right) \hat{\psi}_{\sigma}(\vec{r}) = \\ &= -i\hbar \sum_{\sigma} \int d^3r \hat{\psi}_{\sigma}^{\dagger}(\vec{r}) \nabla \hat{\psi}_{\sigma}(\vec{r})\end{aligned}\quad (8)$$

Bei der letzten Umformung wurde hier die partielle Integration verwendet. Die Rechnung für den Orts-Operator ist völlig analog.

0.3 15c

Ein allgemeiner Zwei-Teilchen-Operator \hat{O} in zweiter Quantisierung hat bei Verwendung einer beliebigen Basis $|\varphi_i\rangle$ des Ein-Teilchen-Hilbertraums $\mathcal{H}^{(1)}$ hat folgende Gestalt:

$$\hat{O} = \sum_{i_1, \dots, i_4} \hat{c}_{i_1}^{\dagger} \hat{c}_{i_2}^{\dagger} \langle \varphi_{i_1} | \otimes \langle \varphi_{i_2} | \hat{o} | \varphi_{i_3} \rangle \otimes | \varphi_{i_4} \rangle \hat{c}_{i_3} \hat{c}_{i_4} \quad (9)$$

Hierbei ist \hat{o} der entsprechende Zwei-Teilchen-Operator in erster Quantisierung. In Ortsdarstellung lautet die Darstellung des Coulomb-Operators dementsprechend:

$$\begin{aligned}\hat{V}_C &= \frac{1}{2} \sum_{\sigma_1, \dots, \sigma_4} \int d^3r_1 \dots \int d^3r_4 \hat{\psi}_{\sigma_1}^{\dagger}(\vec{r}_1) \hat{\psi}_{\sigma_2}^{\dagger}(\vec{r}_2) \times \\ &\quad \times \left\langle \vec{r}_1, \sigma_1 \left| \otimes \left\langle \vec{r}_2, \sigma_2 \left| \frac{e^2}{|\hat{r}^{(1)} - \hat{r}^{(2)}|} \right| \vec{r}_3, \sigma_3 \right\rangle \otimes \left| \vec{r}_4, \sigma_4 \right\rangle \right\rangle \times \\ &\quad \times \hat{\psi}_{\sigma_3}(\vec{r}_3) \hat{\psi}_{\sigma_4}(\vec{r}_4)\end{aligned}\quad (10)$$

Das entsprechende Matrixelement lautet:

$$\begin{aligned}\left\langle \vec{r}_1, \sigma_1 \left| \otimes \left\langle \vec{r}_2, \sigma_2 \left| \frac{e^2}{|\hat{r}^{(1)} - \hat{r}^{(2)}|} \right| \vec{r}_3, \sigma_3 \right\rangle \otimes \left| \vec{r}_4, \sigma_4 \right\rangle \right\rangle = \\ = \frac{e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} \delta_{\sigma_1 \sigma_4} \delta_{\sigma_2 \sigma_3} \delta^{(3)}(\vec{r}_1 - \vec{r}_4) \delta^{(3)}(\vec{r}_2 - \vec{r}_3)\end{aligned}\quad (11)$$

(Anmerkung zur Notation: $\hat{r}^{(1)}$ ist der Orts-Operator, der im Hilbertraum (1) des "ersten" Teilchens wirkt. Eigentlich müsste man ihn als $\hat{r}^{(1)} \otimes \mathbb{1}^{(2)}$, wobei $\mathbb{1}^{(2)}$ der Einheitsoperator im Hilbertraum (2) des "zweiten" Teilchens ist. $\hat{r}^{(1)}$ wirkt auf die Zustände $|\vec{r}_4, \sigma_4\rangle$ bzw. $\langle \vec{r}_1, \sigma_1|$, d.h. die in dieser Notation sind die äußeren Zustände aus dem Hilbertraum (1) während die inneren aus dem Hilbertraum (2) sind.)

Setzt man das Matrixelement 11 nun in 10 ein, so erhält man für den Coulomb-Operator in zweiter Quantisierung in Ortsdarstellung:

$$\hat{V}_C = \frac{1}{2} \sum_{\sigma_1, \sigma_2} \int d^3 r_1 \int d^3 r_2 \hat{\psi}_{\sigma_1}^\dagger(\vec{r}_1) \hat{\psi}_{\sigma_2}^\dagger(\vec{r}_2) \frac{e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} \hat{\psi}_{\sigma_2}(\vec{r}_2) \hat{\psi}_{\sigma_1}(\vec{r}_1) \quad (12)$$

Um den Coulomb-Operator nun in Impulsdarstellung zu berechnen geht man von Gleichung 10 aus und ersetzt die Ortsvariablen \vec{r}_i durch die Impulsvariablen \vec{p}_i :

$$\begin{aligned} \hat{V}_C &= \frac{1}{2} \sum_{\sigma_1, \dots, \sigma_4} \int d^3 p_1 \dots \int d^3 p_4 \hat{\psi}_{\sigma_1}^\dagger(\vec{p}_1) \hat{\psi}_{\sigma_2}^\dagger(\vec{p}_2) \times \\ &\quad \times \left\langle \vec{p}_1, \sigma_1 \left| \otimes \left\langle \vec{p}_2, \sigma_2 \left| \frac{e^2}{|\hat{r}^{(1)} - \hat{r}^{(2)}|} \right| \vec{p}_3, \sigma_3 \right\rangle \otimes \left| \vec{p}_4, \sigma_4 \right\rangle \right\rangle \times \\ &\quad \times \hat{\psi}_{\sigma_3}(\vec{p}_3) \hat{\psi}_{\sigma_4}(\vec{p}_4) \end{aligned} \quad (13)$$

Demzufolge ist statt dem Matrixelement in Gleichung 11 das entsprechende Matrixelement für die Impulseigenzustände zu berechnen:

$$\begin{aligned} &\left\langle \vec{p}_1, \sigma_1 \left| \otimes \left\langle \vec{p}_2, \sigma_2 \left| \frac{e^2}{|\hat{r}^{(1)} - \hat{r}^{(2)}|} \right| \vec{p}_3, \sigma_3 \right\rangle \otimes \left| \vec{p}_4, \sigma_4 \right\rangle \right\rangle = \\ &= \delta_{\sigma_1 \sigma_4} \delta_{\sigma_2 \sigma_3} \left\langle \vec{p}_1 \left| \otimes \left\langle \vec{p}_2 \left| \frac{e^2}{|\hat{r}^{(1)} - \hat{r}^{(2)}|} \right| \vec{p}_3 \right\rangle \otimes \left| \vec{p}_4 \right\rangle \right\rangle = \\ &= \delta_{\sigma_1 \sigma_4} \delta_{\sigma_2 \sigma_3} \int d^3 r_1 \dots \int d^3 r_4 \left\langle \vec{p}_1 \left| \vec{r}_1 \right\rangle \times \right. \\ &\quad \times \left\langle \vec{r}_1 \left| \otimes \left\langle \vec{p}_2 \left| \vec{r}_2 \right\rangle \left\langle \vec{r}_2 \left| \frac{e^2}{|\hat{r}^{(1)} - \hat{r}^{(2)}|} \right| \vec{r}_3 \right\rangle \left\langle \vec{r}_3 \left| \vec{p}_3 \right\rangle \otimes \left| \vec{r}_4 \right\rangle \left\langle \vec{r}_4 \left| \vec{p}_4 \right\rangle \right. \end{aligned} \quad (14)$$

Hier wurde im letzten Schritt viermal die vollständige Ortsbasis $\mathbb{1} = \int d^3 r |\vec{r}\rangle \langle \vec{r}|$ eingeführt. Nun verwendet man die Tatsache, dass die Projektionen von Orts- auf Impulseigenzustände Exponentialfunktionen sind (Formel 6) und setzt für das Matrixelement des Coulomb-Operators mit den Ortseigenzuständen den Ausdruck aus Formel 11 ein. Danach führt man mit Hilfe der darin enthaltenen δ -Funktionen die $d^3 r_3$ - und die $d^3 r_4$ -Integration durch. Als Ergebnis erhält man:

$$\begin{aligned} &\left\langle \vec{p}_1, \sigma_1 \left| \otimes \left\langle \vec{p}_2, \sigma_2 \left| \frac{e^2}{|\hat{r}^{(1)} - \hat{r}^{(2)}|} \right| \vec{p}_3, \sigma_3 \right\rangle \otimes \left| \vec{p}_4, \sigma_4 \right\rangle \right\rangle = \\ &= \delta_{\sigma_1 \sigma_4} \delta_{\sigma_2 \sigma_3} \frac{1}{(2\pi\hbar)^6} \int d^3 r_1 \int d^3 r_2 e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{r}_1 (\vec{p}_1 - \vec{p}_4)} e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{r}_2 (\vec{p}_2 - \vec{p}_3)} \frac{e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} \end{aligned} \quad (15)$$

Im nächsten Schritte führt man die Variablensubstitution $\vec{r}_2 = \vec{r}_1 + \vec{r}$ durch:

$$\begin{aligned}
& \left\langle \vec{p}_1, \sigma_1 \left| \otimes \left\langle \vec{p}_2, \sigma_2 \left| \frac{e^2}{|\hat{r}^{(1)} - \hat{r}^{(2)}|} \right| \vec{p}_3, \sigma_3 \right\rangle \otimes \left| \vec{p}_4, \sigma_4 \right\rangle = \right. \\
& = \delta_{\sigma_1 \sigma_4} \delta_{\sigma_2 \sigma_3} \frac{1}{(2\pi\hbar)^6} \underbrace{\int d^3 r_1 e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{r}_1 (\vec{p}_1 + \vec{p}_2 - \vec{p}_3 - \vec{p}_4)}}_{(2\pi\hbar)^3 \delta^{(3)}(\vec{p}_1 + \vec{p}_2 - \vec{p}_3 - \vec{p}_4)} \int d^3 r e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{r} (\vec{p}_2 - \vec{p}_3)} \frac{e^2}{|\vec{r}|} = \quad (16) \\
& = \delta_{\sigma_1 \sigma_4} \delta_{\sigma_2 \sigma_3} \delta^{(3)}(\vec{p}_1 + \vec{p}_2 - \vec{p}_3 - \vec{p}_4) \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int d^3 r e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{r} (\vec{p}_2 - \vec{p}_3)} \frac{e^2}{|\vec{r}|}
\end{aligned}$$

Diesen Ausdruck setzt man nun in Formel 13 ein und führt mit Hilfe der entsprechenden δ -Funktionen die σ_3 - und die σ_4 -Summation sowie die $d^3 p_4$ -Integration durch. Der Coulomb-Operator in zweiter Quantisierung nimmt danach folgende Gestalt an:

$$\begin{aligned}
\hat{V}_C &= \frac{1}{2} \sum_{\sigma_1, \sigma_2} \int d^3 p_1 \dots d^3 p_3 \hat{\psi}_{\sigma_1}^\dagger(\vec{p}_1) \hat{\psi}_{\sigma_2}^\dagger(\vec{p}_2) \hat{\psi}_{\sigma_2}(\vec{p}_3) \hat{\psi}_{\sigma_1}(\vec{p}_1 + \vec{p}_2 - \vec{p}_3) \times \\
& \quad \times \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int d^3 r e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{r} (\vec{p}_2 - \vec{p}_3)} \frac{e^2}{|\vec{r}|} \quad (17)
\end{aligned}$$

Nun führt man die Variablensubstitution $\vec{p}_3 = \vec{p}_2 + \vec{q}$ durch (die Variable \vec{q} ist dann genau der Impulsübertrag zwischen den beiden Teilchen durch die Coulombwechselwirkung):

$$\begin{aligned}
\hat{V}_C &= \frac{1}{2} \sum_{\sigma_1, \sigma_2} \int d^3 p_1 \int d^3 p_2 \int d^3 q \hat{\psi}_{\sigma_1}^\dagger(\vec{p}_1) \hat{\psi}_{\sigma_2}^\dagger(\vec{p}_2) \hat{\psi}_{\sigma_2}(\vec{p}_2 + \vec{q}) \hat{\psi}_{\sigma_1}(\vec{p}_1 - \vec{q}) \times \\
& \quad \times \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int d^3 r e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{r} \vec{q}} \frac{e^2}{|\vec{r}|} \quad (18)
\end{aligned}$$

Es verbleibt die Berechnung des Integrals

$$\frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int d^3 r e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{r} \vec{q}} \frac{e^2}{|\vec{r}|} \quad (19)$$

Da dieses Integral nicht konvergiert fügt man im Integranden den Term $1 = \lim_{\lambda \rightarrow 0^+} e^{-\lambda |\vec{r}|}$ ein. Danach zieht man den $\lim_{\lambda \rightarrow 0^+}$ vor das Integral $d^3 r$ (was eigentlich nicht erlaubt ist, da der Konvergenzsatz von Lebesgue nicht anwendbar ist, und erst recht nicht der Konvergenzsatz von Beppo-Levi). Das $d^3 r$ -Integral ist somit aufgrund des dämpfenden Faktors $e^{-\lambda |\vec{r}|}$ konvergent:

$$\lim_{\lambda \rightarrow 0^+} \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int d^3 r e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{r} \vec{q}} e^{-\lambda |\vec{r}|} \frac{e^2}{|\vec{r}|} \quad (20)$$

Um dieses Integral zu berechnen führt man Kugelkoordinaten ein. Dabei wählt man das \vec{r} -Koordinatensystem so, dass \vec{q} in diesem Koordinatensystem in z -Richtung zeigt. Damit wird $\vec{r} \vec{q} = |\vec{r}| |\vec{q}| \cos(\theta) = r q \cos(\theta)$ (mit $|\vec{r}| = r$ und

$|\vec{q}| = q$). Der Integrand hängt dann nicht von φ ab, und die $d\varphi$ -Integration ergibt einfach einen Faktor 2π :

$$\begin{aligned} \lim_{\lambda \rightarrow 0^+} \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int d^3r e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{r}\vec{q}} e^{-\lambda|\vec{r}|} \frac{e^2}{|\vec{r}|} &= \lim_{\lambda \rightarrow 0^+} \frac{2\pi}{(2\pi\hbar)^3} \int_0^\infty dr r^2 e^{-\lambda r} \frac{e^2}{r} \times \\ &\times \int_0^\pi d\theta \sin(\theta) e^{-\frac{i}{\hbar}qr \cos(\theta)} \end{aligned} \quad (21)$$

Die Substitution $\cos(\theta) = u$ führt mit $\sin(\theta)d\theta = -du$ und den neuen Grenzen $0 \rightarrow 1$ und $\pi \rightarrow -1$ auf (Umtausch der Integrationsgrenzen hebt das $-$ vor dem du auf):

$$\begin{aligned} &\lim_{\lambda \rightarrow 0^+} \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int d^3r e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{r}\vec{q}} e^{-\lambda|\vec{r}|} \frac{e^2}{|\vec{r}|} = \\ &= \lim_{\lambda \rightarrow 0^+} \frac{2\pi}{(2\pi\hbar)^3} \int_0^\infty dr r^2 e^{-\lambda r} \frac{e^2}{r} \int_{-1}^{+1} du e^{-\frac{i}{\hbar}qr u} = \\ &= \lim_{\lambda \rightarrow 0^+} \frac{2\pi\hbar}{(2\pi\hbar)^3} \int_0^\infty dr r^2 e^{-\lambda r} \frac{e^2}{r} \frac{1}{qr} \underbrace{\frac{1}{i}(e^{\frac{i}{\hbar}pr} - e^{-\frac{i}{\hbar}qr})}_{2 \sin(\frac{qr}{\hbar})} = \\ &= \lim_{\lambda \rightarrow 0^+} \frac{2}{(2\pi\hbar)^2} \frac{e^2}{q} \underbrace{\int_0^\infty dr e^{-\lambda r} \sin\left(\frac{qr}{\hbar}\right)}_{\frac{q}{\hbar} \frac{1}{\lambda^2 + \frac{q^2}{\hbar^2}}} = \\ &= \frac{2\hbar}{(2\pi\hbar)^2} \frac{e^2}{q^2} = \frac{1}{2\pi^2\hbar} \frac{e^2}{q^2} \end{aligned} \quad (22)$$

Einsetzen dieses Ausdrucks in Gleichung 18 für den Coulomb-Operator liefert:

$$\hat{V}_C = \frac{e^2}{4\pi^2\hbar} \sum_{\sigma_1, \sigma_2} \int d^3p_1 \int d^3p_2 \int d^3q \hat{\psi}_{\sigma_1}^\dagger(\vec{p}_1) \hat{\psi}_{\sigma_2}^\dagger(\vec{p}_2) \frac{1}{q^2} \hat{\psi}_{\sigma_2}(\vec{p}_2 + \vec{q}) \hat{\psi}_{\sigma_1}(\vec{p}_1 - \vec{q}) \quad (23)$$

Bemerkung zu Beispiel 15c: Aufgrund der eigentlich nicht erlaubten Vertauschung des $\lim_{\lambda \rightarrow 0^+}$ im Integral 19 bzw. 20 ist die Berechnung dieses Integrals in der obigen Ableitung etwas fragwürdig. Es gibt jedoch eine Möglichkeit das Integral 19 ohne Einführung des Konvergenzfaktors $e^{-\lambda r}$ zu berechnen. Die Grundidee ist, die Funktion $1/r$ nicht als Funktion sondern als Distribution, d.h. als lineare Abbildung aus einem geeignet gewählten Funktionenraum in den Skalkörper aufzufassen. In Bezug auf Fouriertransformationen ist der geeignete Funktionenraum der Schwartz-Raum $\mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$:

$$\mathcal{S}(\mathbb{R}^n) = \left\{ \varphi(\vec{r}) \in C^\infty(\mathbb{R}^n) \left| \lim_{|\vec{r}| \rightarrow +\infty} x_1^{m_1} \dots x_n^{m_n} \varphi(\vec{r}) = 0, \forall (m_1, \dots, m_n) \in \mathbb{N}^n \right. \right\}, \quad (24)$$

wobei $\vec{r} = (x_1, \dots, x_n)^T \in \mathbb{R}^n$ ist. $\mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$ ist also der Raum aller auf \mathbb{R}^n unendlich oft differenzierbaren Funktionen, die um Unendlichen schneller als jedes Polynom, d.h. als jede Potenz von x_i , abfallen. (Ein Beispiel für eine Funktion $\varphi(\vec{r}) \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$ ist $e^{-(x_1^2 + \dots + x_n^2)}$.)

Die Fourier-Transformation stellt nun eine bijektive Abbildung von $\mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$ in sich selbst dar, d.h.:

$$\begin{aligned} \mathcal{F} : \mathcal{S}(\mathbb{R}^n) &\longrightarrow \mathcal{S}(\mathbb{R}^n) \\ \varphi(\vec{r}) &\longrightarrow \mathcal{F}[\varphi(\vec{r})](\vec{q}) = \frac{1}{(2\pi)^n} \int d^n x e^{-i\vec{r}\vec{q}} \varphi(\vec{r}) \end{aligned} \quad (25)$$

Des weiteren ist \mathcal{S} ein linearer Vektorraum über \mathbb{C} und besitzt als solcher den zugehörigen Dualraum \mathcal{S}' , d.h. den Raum aller linearen Abbildungen von \mathcal{S} in den Skalkörper \mathbb{C} . Für $f \in \mathcal{S}'$ gilt also $(\varphi, f) \in \mathbb{C}, \forall \varphi \in \mathcal{S}$. Man nennt f eine **temperierte Distribution**.

Eine Distribution f wird nun *regulär* genannt, wenn es eine lokal integrierbare Funktion $f(\vec{r})$ gibt für die gilt: $(\varphi, f) = \int d^n x \varphi(\vec{r}) f(\vec{r}), \forall \varphi \in \mathcal{S}$, d.h. die Funktion $f(\vec{r})$ "erzeugt" die Distribution (\cdot, f) .

Man kann nun für temperierte Distributionen ebenfalls die Fouriertransformation auf folgende Weise definieren:

$$(\varphi, \mathcal{F}[f]) := (\mathcal{F}[\varphi], f), \quad (26)$$

man geht also ähnlich vor wie bei der Definition der Ableitung für Distributionen und lässt die entsprechende Operation einfach auf die Testfunktion wirken.

Nun können wir unser Problem behandeln: $f(\vec{r}) = \frac{1}{|\vec{r}|} = \frac{1}{r}$ ist im Sinne des oben gesagten eine temperierte Distribution. Ihre Fouriertransformation ist gemäß Gleichng 26 definiert als:

$$\left(\varphi(\vec{q}), \mathcal{F}\left[\frac{1}{|\vec{r}|}\right](\vec{q}) \right) := \left(\mathcal{F}[\varphi(\vec{q})](\vec{r}), \frac{1}{|\vec{r}|} \right) = \int d^3 r \underbrace{\left(\frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3 q e^{-i\vec{r}\vec{q}} \varphi(\vec{q}) \right)}_{\mathcal{F}[\varphi(\vec{q})](\vec{r})} \frac{1}{|\vec{r}|} \quad (27)$$

Die Frage ist nun ob die Fourier-Transformierte der Distribution $\frac{1}{r}$ eine *reguläre* Distribution ist, d.h. ob es also eine lokal integrierbare Funktion $g(\vec{q})$ für die gilt:

$$\begin{aligned}
& \left(\varphi(\vec{q}), \mathcal{F} \left[\frac{1}{|\vec{r}|} \right] (\vec{q}) \right) := \left(\mathcal{F}[\varphi(\vec{q})](\vec{r}), \frac{1}{|\vec{r}|} \right) = \\
& = \int d^3 r \underbrace{\left(\frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3 q e^{-i\vec{r}\vec{q}} \varphi(\vec{q}) \right)}_{\mathcal{F}[\varphi(\vec{q})](\vec{r})} \frac{1}{|\vec{r}|} \stackrel{?}{=} \\
& \stackrel{?}{=} \int d^3 q \varphi(\vec{q}) g(\vec{q}), \forall \varphi(\vec{q}) \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^3)
\end{aligned} \tag{28}$$

Um $g(\vec{q})$ zu bestimmen machen wir einige Umformungen an den Integralen, die die Fouriertransformierte von $\frac{1}{r}$ definieren:

$$\int d^3 r \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3 q e^{-i\vec{r}\vec{q}} \varphi(\vec{q}) \frac{1}{|\vec{r}|} \tag{29}$$

Wir gehen bei der Berechnung dieser Integrale nun auf Kugelkoordinaten über (sowohl bezüglich \vec{r} als auch bezüglich \vec{q}). Die Integrale über den Winkelanteil verlaufen über kompakte Teilmengen von \mathbb{R} , daher kann man alle Winkelintegrationen beliebig untereinander und mit der dr - bzw. der dq -Integration vertauschen. Wichtig ist nur, dass man die dr - **nicht** mit der dq -Integration vertauschen darf. Man erhält dann für obiges Integral 29:

$$\begin{aligned}
\int d^3 r \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3 q e^{-i\vec{r}\vec{q}} \varphi(\vec{q}) \frac{1}{|\vec{r}|} &= \frac{1}{(2\pi)^3} \int_0^\infty dr r^2 \int_0^\infty dq q^2 \int_{[4\pi]} d\Omega_{\vec{q}} \varphi(\vec{q}) \times \\
&\times \int_0^{2\pi} d\phi_{\vec{r}} \int_0^\pi d\theta_{\vec{r}} \sin(\theta_{\vec{r}}) e^{-i\vec{q}\vec{r}} \frac{1}{r}
\end{aligned} \tag{30}$$

Zur Berechnung der $\phi_{\vec{r}}$ - bzw. der $\theta_{\vec{r}}$ -Integration geht man nun genauso wie für Integral 20 vor, d.h. man nimmt an dass $\vec{r}\vec{q} = r q \cos(\theta_{\vec{r}})$ ist. Damit erhält man:

$$\int_0^{2\pi} d\phi_{\vec{r}} \int_0^\pi d\theta_{\vec{r}} \sin(\theta_{\vec{r}}) e^{-i\vec{q}\vec{r}} = (2\pi) \frac{1}{iqr} \left(e^{iqr} - e^{-iqr} \right) \tag{31}$$

Man erkennt nun, dass dieser Ausdruck nicht mehr von den Winkelvariablen $\Omega_{\vec{q}}$ bezüglich des Vektors \vec{q} abhängt. Daher kann man nun folgende Funktion $\tilde{\varphi}(q)$ definieren:

$$\tilde{\varphi}(q) = \int_{[4\pi]} d\Omega_{\vec{q}} \varphi(\vec{q}) \tag{32}$$

Es ist leicht zu sehen, dass $\tilde{\varphi}(q) \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^1)$ ist (oder genauer in $\mathcal{S}(\mathbb{R}^+)$). Mit dieser Definition und dem Ergebniss 31 lässt sich Integral 30 folgendermaßen schreiben:

$$\begin{aligned}
& \int d^3 r \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3 q e^{-i\vec{r}\vec{q}} \varphi(\vec{q}) \frac{1}{|\vec{r}|} = \\
& = \frac{1}{(2\pi)^2} \int_0^\infty dr r^2 \int_0^\infty dq q^2 \tilde{\varphi}(q) \frac{1}{iqr} \left(e^{iqr} - e^{-iqr} \right) \frac{1}{r} = \quad (33) \\
& = \frac{1}{(2\pi)^2} \int_0^\infty dr \int_0^\infty dq q \tilde{\varphi}(q) \frac{1}{i} \left(e^{iqr} - e^{-iqr} \right)
\end{aligned}$$

Nun betrachte ich das Integral

$$\int_0^\infty dr \int_0^\infty dq q \tilde{\varphi}(q) \frac{1}{i} e^{iqr}. \quad (34)$$

(Der Term mit e^{-iqr} ergibt genau dasselbe, da sowohl im Exponenten als auch vor diesem Term ein zusätzliches Vorzeichen auftreten. Daher muss man nur den Ausdruck 34 berechnen und ihn dann mal 2 nehmen.)

$$\begin{aligned}
\int_0^\infty dr \int_0^\infty dq q \tilde{\varphi}(q) \frac{1}{i} e^{iqr} &= \int_0^\infty dr \left(-\frac{d}{dr} \right) \underbrace{\left(\int_0^\infty dq \tilde{\varphi}(q) \frac{1}{i} e^{iqr} \right)}_{\mathcal{F}[\tilde{\varphi}(q)](r)} = \\
&= -\mathcal{F}[\tilde{\varphi}(q)](r = \infty) + \mathcal{F}[\tilde{\varphi}(q)](r = 0)
\end{aligned} \quad (35)$$

Nun ist aber die Fouriertransformierte der $\mathcal{S}(\mathbb{R}^1)$ -Funktion $\tilde{\varphi}$ wieder eine $\mathcal{S}(\mathbb{R}^1)$ -Funktion, da die Fouriertransformation ja \mathcal{S} auf sich selbst abbildet. Daher fällt die Fouriertransformierte von $\tilde{\varphi}$ für $r \rightarrow \infty$ schneller als jede Potenz von r , und insbesondere ist $\mathcal{F}[\tilde{\varphi}(q)](r = \infty) = 0$. Damit erhält man:

$$\int_0^\infty dr \int_0^\infty dq q \tilde{\varphi}(q) \frac{1}{i} e^{iqr} = \mathcal{F}[\tilde{\varphi}(q)](r = 0) = \int_0^\infty dq \tilde{\varphi}(q) \quad (36)$$

Dies setzt man nun in 33 ein und benutzt 32 so erhält man (unter Berücksichtigung des Faktors 2, der vom Term mit e^{-iqr} kommt):

$$\int d^3 r \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3 q e^{-i\vec{r}\vec{q}} \varphi(\vec{q}) \frac{1}{|\vec{r}|} = \frac{1}{2\pi^2} \int_0^\infty dq \int d\Omega_{\vec{q}} \varphi(\vec{q}) = \int d^3 q \varphi(\vec{q}) g(\vec{q}) \quad (37)$$

Um nun $g(\vec{q})$ zu identifizieren muss man das Integral in Kugelkoordinaten wieder in ein $d^3 q$ -Integral umschreiben. Zu diesem Zweck muss man den Faktor q^2 ergänzen und dann natürlich auch wieder durch ihn dividieren. Damit ergibt sich:

$$\int d^3 q \varphi(\vec{q}) \frac{1}{2\pi^2} \frac{1}{q^2} = \int d^3 q \varphi(\vec{q}) g(\vec{q}) \quad (38)$$

Man erkennt also, dass die Fouriertransformierte von $\frac{1}{r}$ eine reguläre Distribution ist, die durch die lokal integrierbare Funktion $\frac{1}{2\pi^2} \frac{1}{q^2}$ erzeugt wird.