2.5 Hermitesche Differenzialoperatoren [Arfken 10.2]

Wie beim Übergang vom Kapitel 1.8 zum 1.9, lohnt es sich auch bei Differenzialoperatoren, komplexe Funktionenräume zu betrachten.

Sei, wie auf Seite 50, $\mathcal{L} f(x) = \frac{d}{dx}\left[p(x)\frac{df}{dx}\right] + q(x) f(x)$.

Ein hermitesches Skalarprodukt wird eingeführt (vgl. Seite 51):

$$\langle g|f\rangle := \int_a^b dx\, w(x)\, g^*(x) f(x) \quad ; \quad w(x) > 0 \quad \text{außer einzelner Punkte}.$$

$$\langle g|\mathcal{L}f\rangle := \int_a^b dx\, w(x)\, g^*(x) \frac{1}{w(x)} \mathcal{L}f(x) = \int_a^b dx\, g^*(x)\, \mathcal{L}f(x) .$$

Ein Operator sei hermitesch wenn $\langle g|\mathcal{L}f\rangle \overset{!}{=} \langle \mathcal{L}g|f\rangle = \langle f|\mathcal{L}g\rangle^*$ (vgl. Seite 35).
Dies führt zu nichttrivialen Randbedingungen (vgl. Seite 52):

$$\begin{aligned}
\langle g|\mathcal{L}f\rangle &= \int_a^b dx \left\{ g^*(x) \frac{d}{dx}\left[p(x)\frac{df}{dx}\right] + g^*(x) q(x) f(x) \right\} \\
&= \left[g^*(x) p(x) \frac{df(x)}{dx} \right]_a^b + \int_a^b dx \left\{ -\frac{dg^*(x)}{dx} p(x) \frac{df(x)}{dx} + g^*(x) q(x) f(x) \right\} \\
&= \left[g^* p \frac{df}{dx} - f p \frac{dg^*}{dx} \right]_a^b + \int_a^b dx \left\{ f \frac{d}{dx}\left[p \frac{dg^*}{dx} \right] + f q g^* \right\} .
\end{aligned}$$

$$\langle f|\mathcal{L}g\rangle^* = \int_a^b dx \left\{ f \frac{d}{dx}\left[p^* \frac{dg^*}{dx} \right] + f q^* g^* \right\} .$$

D.h. ein selbstadjungierter Differenzialoperator $\mathcal{L} = \frac{d}{dx}\left[p(x)\frac{d}{dx}\right] + q(x)$, $p, q \in \mathbb{R}$, ist hermitesch, wenn eine Klasse $\mathcal{K}$ von Funktionen betrachtet wird, in der $\left[g^* p \frac{df}{dx} - f p \frac{dg^*}{dx} \right]_a^b = 0 \quad \forall\ f, g \in \mathcal{K}$. (Beispiele: Seite 52.)

Bemerkung: Im Gegensatz zu Seite 50 kann auch ein Diff. operator erster Ordnung hermitesch sein:

$$\begin{aligned}
\langle g|\mathcal{L}f\rangle = \int_a^b dx\, g^* \left(p_1 \frac{df}{dx} + p_2 f \right) &= \left[g^* p_1 f \right]_a^b + \int_a^b dx \left(-f \frac{d}{dx}(g^* p_1) + f p_2 g^* \right) \\
&= \left[g^* p_1 f \right]_a^b + \int_a^b dx\, f \left\{ -p_1 \frac{dg^*}{dx} + (-p_1' + p_2) g^* \right\}
\end{aligned}$$

$$\langle f|\mathcal{L}g\rangle^* = \int_a^b dx\, f \left(p_1^* \frac{dg^*}{dx} + p_2^* g^* \right)$$

$$\Rightarrow \begin{cases} p_1^* = -p_1 \\ p_2^* = -p_1' + p_2 \end{cases}$$

Lösungen existieren, z.B. $p_1(x) = -i\hbar$!

Hermitesch konjugierte Differenzialoperatoren

Ein zu $\mathcal{L}$ „adjungierter" bzw. hermitesch konjugierter Differenzialoperator sei definiert durch seine „Matrixelemente" als

$$\langle g | \mathcal{L}^+ f \rangle := \langle \mathcal{L} g | f \rangle = \langle f | \mathcal{L} g \rangle^* .$$

im anderen Sinne als im Kap. 2.4 – schlechte Bezeichnungen!

Ein hermitescher Differenzialoperator ist dann auch „selbst-adjungiert", $\mathcal{L}^+ = \mathcal{L}$.

Es folgt:

* Sei $\mathcal{A}$ ein beliebiger linearer Differenzialoperator. Wenn er als $\mathcal{A} = \frac{1}{2}(\mathcal{A} + \mathcal{A}^+) - \frac{i}{2}(i\mathcal{A} - i\mathcal{A}^+)$ ausgedrückt wird, sind $\mathcal{A} + \mathcal{A}^+$ sowie $i\mathcal{A} - i\mathcal{A}^+$ hermitesch.

(Denn: $\langle g | (\mathcal{A} + \mathcal{A}^+) f \rangle = \langle g | \mathcal{A} f \rangle + \langle \mathcal{A} g | f \rangle$ und

$$\begin{aligned} \langle (\mathcal{A} + \mathcal{A}^+) g | f \rangle &= \langle f | (\mathcal{A} + \mathcal{A}^+) g \rangle^* \\ &= \{ \langle f | \mathcal{A} g \rangle + \langle \mathcal{A} f | g \rangle \}^* \\ &= \langle \mathcal{A} g | f \rangle + \langle g | \mathcal{A} f \rangle . \end{aligned}$$

Ähnlich bei $i(\mathcal{A} - \mathcal{A}^+)$.)

* Es gilt $(\mathcal{A}\mathcal{B})^+ = \mathcal{B}^+ \mathcal{A}^+$.

(Denn: $$\begin{aligned} \langle g | (\mathcal{A}\mathcal{B})^+ f \rangle &= \langle \mathcal{A}\mathcal{B} g | f \rangle = \langle \mathcal{A}(\mathcal{B} g) | f \rangle \\ &= \langle \mathcal{B} g | \mathcal{A}^+ f \rangle = \langle g | \mathcal{B}^+ (\mathcal{A}^+ f) \rangle \end{aligned}$$)

* Es gilt $(\mathcal{A}^+)^+ = \mathcal{A}$.

(Denn: $$\begin{aligned} \langle g | (\mathcal{A}^+)^+ | f \rangle &= \langle \mathcal{A}^+ g | f \rangle = \langle f | \mathcal{A}^+ g \rangle^* \\ &= \langle \mathcal{A} f | g \rangle^* = \langle g | \mathcal{A} f \rangle . \end{aligned}$$)

* Wenn $\mathcal{A}$ und $\mathcal{B}$ hermitesche Operatoren sind, dann ist $\mathcal{C} := i(\mathcal{A}\mathcal{B} - \mathcal{B}\mathcal{A})$ unbedingt hermitesch.

(Denn: $$\begin{aligned} \langle i(\mathcal{A}\mathcal{B} - \mathcal{B}\mathcal{A}) g | f \rangle &= -i \langle (\mathcal{A}\mathcal{B} - \mathcal{B}\mathcal{A}) g | f \rangle \\ &= -i \langle (\mathcal{A}^+\mathcal{B}^+ - \mathcal{B}^+\mathcal{A}^+) g | f \rangle = -i \langle [(\mathcal{B}\mathcal{A})^+ - (\mathcal{A}\mathcal{B})^+] g | f \rangle \\ &= -i \langle g | (\mathcal{B}\mathcal{A} - \mathcal{A}\mathcal{B}) f \rangle = \langle g | i(\mathcal{A}\mathcal{B} - \mathcal{B}\mathcal{A}) f \rangle . \end{aligned}$$)

ein paar Schritte fehlen – wie bei $(\mathcal{A}^+)^+ = \mathcal{A}$

Bemerkung: In der Praxis bedeutet die Definition

$$\langle g | \mathcal{L}^+ f \rangle = \langle f | \mathcal{L} g \rangle^*$$

dass $$\int_a^b dx\, g^*(x)\, \mathcal{L}^+ f(x) = \int_a^b dx\, f(x)\, \mathcal{L}^* g^*(x) ,$$

d.h. $\mathcal{L}^+ =$ „$\mathcal{L}^*$ zusammen mit $\left(\frac{d}{dx}\right)^n \to \left(-\frac{d}{dx}\right)^n$".

aus partiellen Integrationen

Eigenwerte hermitescher Differenzialoperatoren

Eigenwerte seien definiert wie auf Seite 51:

$$\mathcal{L}u(x) + \lambda w(x) u(x) = 0 \quad , \quad u(x) \neq 0 \; ; \quad w(x) > 0 \, .$$

Behauptung: Die Eigenwerte sind unbedingt reell.

Beweis:

$$\mathcal{L}u + \lambda w u = 0 \quad \longleftarrow \text{multipliziere durch } u^*$$

$$\mathcal{L}^* u^* + \lambda^* w u^* = 0 \quad \longleftarrow \text{multipliziere durch } u$$

Subtrahiere und integriere

$$\Rightarrow \int_a^b dx \left(u^* \mathcal{L} u - u \mathcal{L}^* u^* + \lambda u^* w u - \lambda^* u w u^* \right) = 0$$

$$\Leftrightarrow \langle u | \mathcal{L} u \rangle - \underbrace{\langle u | \mathcal{L} u \rangle^*}_{\langle \mathcal{L} u | u \rangle \underset{\mathcal{L} = \mathcal{L}^+}{=} \langle u | \mathcal{L} u \rangle} + (\lambda - \lambda^*) \langle u | u \rangle = 0$$

$$\Rightarrow (\lambda - \lambda^*) \underbrace{\int_a^b dx \, w(x) \, |u(x)|^2}_{> 0} = 0 \quad \Rightarrow \quad \lambda = \lambda^* \quad \square \, .$$

Eigenfunktionen hermitescher Differenzialoperatoren

Behauptung: Eigenfunktionen zu unterschiedlichen Eigenwerten sind unbedingt orthogonal zueinander.

Beweis:

$$\mathcal{L}u + \lambda w u = 0 \quad \longleftarrow \text{multipliziere durch } v^*$$

$$\mathcal{L}^* v^* + \mu^* w v^* = 0 \quad \longleftarrow \text{multipliziere durch } u$$

Subtrahiere und integriere

$$\Rightarrow \int_a^b dx \left(v^* \mathcal{L} u - u \mathcal{L}^* v^* + \lambda v^* w u - \mu^* u w v^* \right) = 0$$

$$\Leftrightarrow \langle v | \mathcal{L} u \rangle - \underbrace{\langle u | \mathcal{L} v \rangle^*}_{\langle \mathcal{L} v | u \rangle \underset{\mathcal{L} = \mathcal{L}^+}{=} \langle v | \mathcal{L} u \rangle} + (\lambda - \mu^*) \langle v | u \rangle = 0$$

$$\Rightarrow \underbrace{(\lambda - \mu^*)}_{= \lambda - \mu \neq 0} \langle v | u \rangle = 0 \quad \Rightarrow \quad \langle v | u \rangle = 0 \quad \square \, .$$

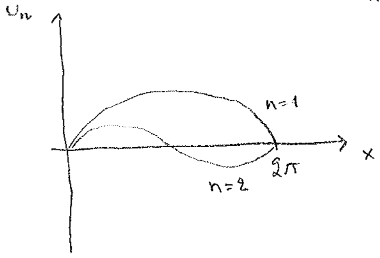
Bemerkungen:

(i) Wenn es mehrere linear unabhängige Eigenfunktionen zum selben Eigenwert gibt, ist es nicht automatisch garantiert, dass diese orthogonal zueinander sind. Sie können aber als orthogonal gewählt werden; mehr dazu im Kapitel 2.6.

(ii) Es besteht wieder die Frage der Vollständigkeit, d.h. ob Eigenfunktionen eines hermiteschen Differenzialoperators als Basis dienen können. Auch diese Sache wird im Kapitel 2.6 diskutiert.

Beispiel

Wie auf Seite 52: $\mathcal{L} := \frac{d^2}{dx^2}$, $a := 0$, $b := 2\pi$, $w := 1$.



* Dirichlet-Randbedingungen $\quad u(0) = u(2\pi) = 0$

$$\Rightarrow \quad u_n(x) = B_n \sin\left(\frac{nx}{2}\right), \quad n \in \mathbb{Z}.$$

Nur $n \in \mathbb{Z}^+ = \{1, 2, 3, \dots\}$ sind nichttrivial und linear unabhängig.

Orthogonalität: $\displaystyle\int_0^{2\pi} dx \; \sin\left(\frac{nx}{2}\right) \sin\left(\frac{mx}{2}\right)$

$$= \int_0^{2\pi} dx \; \frac{1}{(2i)^2} \left(e^{\frac{inx}{2}} - e^{-\frac{inx}{2}}\right)\left(e^{\frac{imx}{2}} - e^{-\frac{imx}{2}}\right)$$

$$= -\frac{1}{4} \int_0^{2\pi} dx \left(e^{\frac{i(n+m)x}{2}} - e^{\frac{i(m-n)x}{2}} - e^{\frac{i(n-m)x}{2}} + e^{-\frac{i(n+m)x}{2}} \right)$$

$$\overset{n \neq m}{=} -\frac{1}{4} \left[\frac{2e^{\frac{i(n+m)x}{2}}}{i(n+m)} - \frac{2e^{\frac{i(m-n)x}{2}}}{i(m-n)} - \frac{2e^{\frac{i(n-m)x}{2}}}{i(n-m)} - \frac{2e^{-\frac{i(n+m)x}{2}}}{i(n+m)} \right]_0^{2\pi}$$

$$= -\frac{1}{2i} \left[\frac{(-1)^{n+m} - 1}{n+m} - \frac{(-1)^{m-n} - 1}{m-n} - \frac{(-1)^{n-m} - 1}{n-m} - \frac{(-1)^{n+m} - 1}{n+m} \right]$$

$$= 0 \; !$$

Oder: $\cos(a+b) = \cos a \cos b - \sin a \sin b$;

$\cos(a-b) = \cos a \cos b + \sin a \sin b$;

$\Rightarrow \sin a \sin b = \frac{1}{2}\left[\cos(a-b) - \cos(a+b)\right]$.

Normierung: $\displaystyle\int_0^{2\pi} dx \; \sin^2\left(\frac{nx}{2}\right)$

$$= \frac{1}{2} \int_0^{2\pi} dx \left(1 - \cos(nx)\right)$$

$$= \frac{1}{2} \left[x - \frac{1}{n} \sin(nx) \right]_0^{2\pi} = \pi.$$

——— o ——— o ———