

Mathematische Grundlagen der Quantenmechanik

Vorlesung im Sommersemester 2007

ANDREAS RUFFING

*Zentrum Mathematik
Technische Universität München
Boltzmannstraße 3
D-85747 Garching, Germany*

*e-mail: ruffing@ma.tum.de
<http://www-m6.ma.tum.de/~ruffing/>*

Inhaltsverzeichnis

1.	Die Schrödinger-Gleichung als Eigenwertproblem	1
2.	Einige Begriffe aus der Funktionalanalysis	5
3.	Quadratische Potentiale und Leiteroperatoren	12
4.	Hermite-Funktionen und Fourier-Transformation	21
5.	Selbstadjungierte und Adjungierte Operatoren	29
6.	Die Hilbertraum-Struktur der Quantenmechanik	37
7.	Orthogonale Polynome und Faltungsstrukturen	44
8.	Die Methode des Separationsansatzes	52
9.	Selbstadjungiertheit bei tridiagonalen Operatoren	57
10.	Einige gewöhnliche Differentialgleichungen	65
11.	Kompakte Symmetrische Operatoren (Einführung)	76

1. Die Schrödinger-Gleichung als Eigenwertproblem

Partielle Differentialgleichungen spielen in allen Zweigen der Physik eine große Rolle. Diese Tatsache macht auch vor dem Übergang zwischen Mechanik und Quantenmechanik nicht halt. Führen wir uns die Situation vor Augen:

- **Mechanik**

Die Bewegungsgleichungen werden in der Theoretischen Mechanik in Verbindung zu den Euler-Lagrange-Gleichungen gesetzt, die ihrerseits eng an die Konzepte der Variationsrechnung gekoppelt sind. Seit der Zeit von Leonhard Euler, dem Begründer der Variationsrechnung, hat dieser Zweig der Mathematik eine stürmische Entwicklung erlebt. Für einen Einblick in die sogenannten direkten Methoden der Variationsrechnung zu erhalten, siehe z.B. das Buch von Bernard Dacorogna, "Direct Methods in the Calculus of Variations", [Da]. Auch in der aktuellen Forschung sind viele Fragen der Variationsrechnung noch offen und gestalten sich als relativ hartnäckige Probleme.

In der Physik steht die Variationsrechnung selber eher im Hintergrund und man interessiert sich in erster Linie für die Lösung der Euler-Lagrange-Gleichungen: Hierzu ist in der Theoretischen Mechanik der Grundstock gelegt worden.

- **Quantenmechanik**

Auch hier spielen partielle Differentialgleichungen eine große Rolle, wie z. B.

- Schrödinger-Gleichung (nichtrelativistische Gleichung, ohne Spin)
- Pauli-Gleichung (nichtrelativistische Gleichung, mit Spin)
- Klein-Gordon-Gleichung (relativistische Gleichung, ohne Spin)
- Dirac-Gleichung (relativistische Gleichung, mit Spin)

Jedoch kommt vom mathematischen Standpunkt aus noch eine völlig neue Komponente hinzu:

Die diskrete Struktur verschiedener Größen in der Quantenwelt erfordert, Aspekte der Funktionalanalysis zum Studium der entsprechenden partiellen Differentialgleichungen hinzuzunehmen. Grob gesagt geht es darum, die Quantisierung von physikalischen Größen im Kontext einer Eigenwerttheorie zu verstehen, ähnlich zur Situation in der Linearen Algebra.

Ausgangspunkt für viele mathematische Fragestellungen der Quantenmechanik ist die **Schrödinger-Gleichung**. Sie ist eine partielle Differentialgleichung, die in der folgenden Form geschrieben werden kann:

$$\left(-\frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{\partial^2}{\partial y^2} - \frac{\partial^2}{\partial z^2} + V(x, y, z)\right) \psi(x, y, z, t) = i \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, y, z, t), \quad (1)$$

wobei die Funktion $V : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}$ die Information über die entsprechende physikalische Situation beinhaltet (wir nehmen zunächst Zeitunabhängigkeit von V an).

Im folgenden verstehen wir unter der Menge $C^2(\mathbb{R}^n)$, $n \in \mathbb{N}$, diejenigen **komplexwertigen Funktionen**, die auf ganz \mathbb{R}^n definiert sind und die in jeder ihrer Variablen zweimal differenziert werden können (nicht notwendigerweise stetig differenzierbar).

Definition 1.1

Es sei $\psi : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{C}$ zweimal partiell differenzierbar in seinen drei Variablen. Es sei fernerhin $V : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}$ eine stückweise stetige Funktion. $P(\mathbb{R}^3)$ bezeichne den Raum der stückweise stetigen \mathbb{C} -wertigen Funktionen. Die lineare Abbildung $H : C^2(\mathbb{R}^3) \rightarrow P(\mathbb{R}^3)$, gegeben durch

$$(H\psi)(x, y, z) := \left(-\frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{\partial^2}{\partial y^2} - \frac{\partial^2}{\partial z^2} + V(x, y, z)\right)\psi(x, y, z) \quad (2)$$

heißt **Hamilton-Operator** in $C^2(\mathbb{R}^3)$.

Lemma 1.2 Separation der Zeitvariablen

Es sei $\psi \in C^2(\mathbb{R}^3)$. Die Funktion $\varphi \in C^2(\mathbb{R}^4)$, gegeben durch

$$(x, y, z, t) \mapsto \varphi(x, y, z, t) := \psi(x, y, z)e^{-iEt} \quad (3)$$

mit einer Zahl $E \in \mathbb{R}$ ist genau dann Lösung der Schrödinger-Gleichung (1), sofern

$$(H\psi)(x, y, z) = E \psi(x, y, z) \quad (4)$$

für alle Punkte $(x, y, z) \in \mathbb{R}^3$.

Gleichung (4) wird auch **Stationäre Schrödinger-Gleichung** genannt. Die Funktion V in (1), (2) wird als **Potential** bezeichnet.

Beweis

Der Beweis kann durch direkte Rechnung sofort nachvollzogen werden: Setzt man die Funktion φ in die Schrödinger-Gleichung (1) ein, so erhält man mit der Funktion $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C}$, gegeben durch

$$t \mapsto f(t) := e^{-iEt} \quad (5)$$

folgende Kette von Äquivalenzen:

$$\left(-\frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{\partial^2}{\partial y^2} - \frac{\partial^2}{\partial z^2} + V(x, y, z)\right) \psi(x, y, z, t) = i \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, y, z, t) \quad \Leftrightarrow \quad (6)$$

$$fH\psi = i\psi \frac{d}{dt} f \quad \Leftrightarrow \quad fH\psi = Ef\psi \quad \Leftrightarrow \quad H\psi = E\psi \quad (7)$$

Entscheidend ist dabei gewesen, dass die Funktion f als Exponentialfunktion keine Nullstellen besitzt und daher durch sie dividiert werden kann.

Dieses Lemma über die Variablenseparation zeigt, dass Lösungen der Schrödinger-Gleichung (1) durch das Auflösen von Gleichungen (4) gegeben werden, die von ihrer Gestalt her wie Eigenwertprobleme in der Linearen Algebra aussehen, konkret mit folgender Bedeutung:

Lineare Abbildung H **”Eigenvektor”** ψ **”Eigenwert”** E

Wir werden dieser Analogie im folgenden nachgehen, und in der Tat ist das Studium von Eigenwertproblemen des Typs (4) der Schlüssel zur stationären Schrödinger-Gleichung.

Um mit der stationären Schrödinger-Gleichung vertraut zu werden, betrachten wir im folgenden den eindimensionalen Spezialfall, an dem sich sehr viel strukturelles Vorgehen erlernen lässt:

Eindimensionale Stationäre Schrödinger-Gleichung in $C^2(\mathbb{R})$

$$\left(-\frac{d^2}{dx^2}\psi\right)(x) + V(x)\psi(x) = E\psi(x) \quad (8)$$

Hierbei ist entsprechend dem dreidimensionalen Fall $V : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ als stückweise stetige Funktion vorausgesetzt, E eine reelle Zahl und die Abbildung

$$H := -\frac{d^2}{dx^2} + V(x) \quad (9)$$

wird durch punktweise Anwendung auf die Funktion $\psi \in C^2(\mathbb{R})$ gegeben.

Beispiel 1.3

Das Potential V werde gegeben durch $V(x) = x^2$ und die stationäre Schrödinger-Gleichung in $C^2(\mathbb{R})$ wird zu

$$-\psi''(x) + x^2\psi(x) = E\psi(x) \quad (10)$$

Wir machen für ψ einen Potenzreihenansatz

$$\psi : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R} \quad x \mapsto \psi(x) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n x^n \quad (11)$$

mit reellwertigen Koeffizienten c_n . Als Ergebnis erhalten wir, dass zu jedem reellen E eine solche Potenzreihenlösung vom Typ (11) existiert.

Diese Überlegungen zeigen insgesamt, dass wir für eine realistische physikalische Beschreibung noch mehr Forderungen an die Funktionen ψ stellen müssen, denn

- In der Physik hat E die Bedeutung einer Energie.
- Für das x^2 -Potential ist bekannt, dass es nur diskrete E -Werte erlaubt.
- Die Funktion $\psi\bar{\psi}$ hat die Bedeutung einer Wahrscheinlichkeitsdichte.

Man wird diesen drei Forderungen dadurch gerecht, dass man die Eigenschaften der Funktion ψ und damit die Randbedingungen an die stationäre Schrödinger-Gleichung wie folgt abändert:

Eindimensionale Stationäre Schrödinger-Gleichung (SG) in $C^2(\mathbb{R}) \cap L^2(\mathbb{R})$

$$\left(-\frac{d^2}{dx^2}\psi\right)(x) + V(x)\psi(x) = E\psi(x) \quad (12)$$

Hierbei bedeutet $L^2(\mathbb{R})$ die Menge der messbaren Funktionen, die entlang der reellen Achse quadratintegrierbar im Sinne des Lebesgue-Integrals sind:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi(x)\overline{\psi(x)}dx < \infty \quad (13)$$

Die Lösung von Problemen des Typs (12) ist Gegenstand der Quantenmechanik. Um systematisch an diese Probleme herangehen zu können, bedarf es einiger mathematischer Werkzeuge, die in den folgenden Kapiteln zur Verfügung gestellt werden sollen.

Im zweiten Kapitel wird auf die Verallgemeinerung der Eigenwertsituation beim Übergang von symmetrischen linearen Abbildungen im Endlichdimensionalen auf symmetrische lineare Abbildungen in \mathbb{C} -Hilberträumen kurz eingegangen.

Unser Interesse richtet sich auf die Frage, inwiefern die drei Begriffe

- Eigenwerte
- Orthogonalität von Eigenfunktionen
- Symmetrie einer linearen Abbildung

im Fall allgemeiner Hilberträume noch in Verbindung zueinander stehen. Im weiteren Verlauf der Vorlesung werden wir diese Frage durch das Konzept der selbstadjungierten Operatoren beantworten, die für das Studium der Schrödinger-Gleichung unerlässlich sind.

2. Einige Begriffe aus der Funktionalanalysis

Der Raum $L^2(\mathbb{R})$ ist ein typisches Beispiel für einen **Hilbertraum** über \mathbb{C} . Wir wiederholen die Definition für einen \mathbb{C} -Hilbertraum:

Definition 2.1

Es sei E ein \mathbb{C} -Vektorraum mit Skalarprodukt $(*, *) : E \times E \rightarrow \mathbb{C}$, d.h. einer Abbildung, welche für alle $u, v, w \in E$ und alle $\alpha \in \mathbb{C}$ die folgenden Eigenschaften erfüllt:

1. $(u + v, w) = (u, w) + (v, w)$
2. $(\alpha u, v) = \alpha(u, v)$
3. $(u, v) = \overline{(v, u)}$
4. $(u, u) \geq 0$
5. $(u, u) = 0 \Leftrightarrow u = 0$

E heisst **\mathbb{C} -Hilbertraum**, sofern E mit der Norm $\| * \| := \sqrt{(*, *)}$ vollständig, d.h. ein Banachraum ist. Wir nennen zwei Vektoren $u, v \in E$ **orthogonal**, sofern $(u, v) = 0$.

Aus der Linearen Algebra ist bekannt, dass symmetrische lineare Abbildungen eine Entwicklung nach Eigenvektoren gestatten. Wir zitieren hierzu das entsprechende Resultat - zuvor jedoch noch einmal die Definition für eine symmetrische lineare Abbildung $A : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$.

Definition 2.2

Es sei $(*, *)$ ein Skalarprodukt in \mathbb{R}^n . Eine lineare Abbildung $A : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ heisst symmetrisch, sofern

$$\forall u, v \in \mathbb{R}^n : \quad (Au, v) = (u, Av) \quad (14)$$

Theorem 2.3 Spektralsatz symmetrischer linearer Abbildungen

Es sei $A : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ eine symmetrische lineare Abbildung. Dann existieren zu den Eigenwerten von A insgesamt n paarweise orthonormale Eigenvektoren u_1, \dots, u_n und zu jedem Vektor $x \in \mathbb{R}^n$ existiert eine eindeutige Entwicklung nach den Eigenvektoren u_1, \dots, u_n :

$$x = \sum_{j=1}^n c_j u_j \quad (15)$$

mit reellwertigen Koeffizienten c_j . Insbesondere kann man die Wirkung von A auf jeden Vektor $x \in \mathbb{R}^n$ darstellen durch

$$Ax = \sum_{j=1}^n \lambda_j c_j u_j \quad (16)$$

wobei die allesamt reellen Eigenwerte λ_j von A mehrmals gleich sein können.

Es stellt sich die Frage, unter welchen Bedingungen es in allgemeinen Hilberträumen noch ähnliche Spektrale Darstellungssätze gibt. Der Vorzug solcher Sätze liegt auf der Hand: Die *analytischen* Eigenschaften der betrachteten Abbildungen lassen sich durch Angabe einer ihrer *algebraischen* Eigenschaften - nämlich ihrer Eigenwerte - vollkommen charakterisieren.

Beim Studium der Schrödinger-Gleichung wäre es von großem Vorteil, Sätze solcher Art zur Verfügung zu haben. Es zeigt sich aber, dass die Situation im Unendlichdimensionalen sehr viel komplizierter ist. Sind im endlichdimensionalen Fall bei symmetrischen linearen Abbildungen die drei Begriffe

- Eigenwerte
- Symmetrie der Abbildung
- Orthogonalität der Eigenvektoren

eng miteinander verbunden, so fehlt zunächst ein entsprechendes allgemeines Analogon für symmetrische lineare Operatoren in Hilberträumen.

Um die Frage zu beantworten, wieviel Analogie wir vom endlichdimensionalen Fall zum unendlichdimensionalen Fall hinübertragen können, stellen wir in diesem Kapitel die Definitionen für Eigenwerte und Symmetrie im Falle allgemeiner linearer Hilbertraum-Operatoren auf. Neu hinzutreten wird der Begriff der Stetigkeit einer linearen Abbildung in einem Hilbertraum.

Um dieses Konzept vorzubereiten, geben wir die folgende Definition:

Definition 2.4

Es sei E ein Hilbertraum und U Untervektorraum von E . Eine lineare Abbildung $A : U \rightarrow E$ heißt **linearer Operator** auf E . Ist $U = E$, so heißt A Hilbertraum-Endomorphismus. Entsprechend nennen wir A **symmetrisch** auf U , sofern

$$\forall u, v \in U : \quad (Au, v) = (u, Av) \tag{17}$$

Falls $U = E$, so nennen wir A symmetrisch.

Für einen symmetrischen linearen Operator geben wir das folgende Beispiel:

Beispiel 2.5

Es sei $E = L^2([0, 1])$ und $U := \{f \in E \mid f(0) = f(1) = 0, |f'(0)f'(1)| < \infty\} \cap C^2([0, 1])$. Die Abbildung $A : U \rightarrow E$ werde gegeben durch

$$(Au)(x) := -iu'(x) \quad \forall x \in [0, 1] \tag{18}$$

Dann gilt

$$(Au, v) = \int_0^1 -iu'(x)\overline{v(x)}dx = - \int_0^1 u(x)(-i)\frac{d}{dx}\overline{v(x)}dx - iu(x)\overline{v(x)}\Big|_0^1 \quad (19)$$

Da die Werte der Funktionen u, v an den Intervallgrenzen 0 und 1 verschwinden, ist dies äquivalent zu

$$(Au, v) = - \int_0^1 u(x)(-i)\frac{d}{dx}\overline{v(x)}dx = \int_0^1 u(x) i \overline{\left(\frac{d}{dx}v\right)(x)}dx = \quad (20)$$

$$= \int_0^1 u(x) \overline{(-iv'(x))} dx = (u, Av) \quad (21)$$

und wir sehen, dass A symmetrisch auf U ist.

Definition 2.6

Es sei E ein \mathbb{C} -Hilbertraum und U Untervektorraum von E . Die Abbildung $A : U \rightarrow E$ sei ein linearer Operator auf U .

1. Ein Vektor $v \in E \setminus \{0\}$ heisst **Eigenvektor** von A , sofern es eine Zahl $\lambda \in \mathbb{C}$ gibt, so dass

$$Av = \lambda v \quad (22)$$

Die Zahl λ heisst **Eigenwert** von A .

2. Der lineare Operator A heisst **stetig** oder **beschränkt** auf U , sofern es eine positive Zahl γ gibt, so dass

$$\forall u \in U : \quad \|Au\| \leq \gamma\|u\| \quad (23)$$

wobei $\|*\|$ vom in E gegebenen Skalarprodukt induziert wird:

$$\|*\| := \sqrt{(*, *)} \quad (24)$$

Falls $U = E$, so nennen wir A stetig bzw. beschränkt.

Im Endlichdimensionalen, also wenn z. B. $E = \mathbb{R}^n, n \in \mathbb{N}$, ist jede symmetrische lineare Abbildung A von selbst stetig. Beachtlicherweise gilt diese Eigenschaft auch in allgemeinen Hilberträumen. Der entsprechende Satz ist tiefgehend:

Theorem 2.7 Satz von Hellinger-Toeplitz

Es sei E ein \mathbb{C} -Hilbertraum und $A : E \rightarrow E$ ein symmetrischer Hilbertraum-Endomorphismus, also

$$\forall u, v \in E : \quad (Au, v) = (u, Av) \quad (25)$$

Dann ist A ein stetiger linearer Operator.

Der Beweis dieses Satzes ist mit den uns zur Verfügung stehenden Mitteln langwierig und wir verweisen dazu auf die einschlägige funktionalanalytische Literatur.

Im Endlichdimensionalen sind die Eigenvektoren symmetrischer linearer Operatoren zu verschiedenen Eigenwerten paarweise orthogonal. Das gleiche gilt auch für symmetrische lineare Operatoren eines Hilbertraums, sofern sie mindestens zwei verschiedene Eigenwerte besitzen:

Lemma 2.8

Es sei A ein symmetrischer \mathbb{C} -Hilbertraum-Endomorphismus, $A : E \rightarrow E$. Falls A Eigenwerte besitzt, so sind diese reell. Falls A mindestens zwei verschiedene Eigenwerte besitzt, so sind die zugehörigen Eigenvektoren paarweise orthogonal.

Beweis

Es seien u, v Eigenvektoren von A zu den Eigenwerten λ bzw. μ :

$$Au = \lambda u \quad Av = \mu v \quad (26)$$

Dann gilt einerseits

$$(Au, v) = (\lambda u, v) = \lambda(u, v) \quad (27)$$

und andererseits

$$(Au, v) = (u, Av) = (u, \mu v) = \bar{\mu}(u, v) \quad (28)$$

Falls $u = v$ und $\lambda = \mu$, so folgt hieraus $\lambda = \bar{\lambda}$, weshalb λ reelle Zahl ist. Falls $u \neq v$ und $\lambda \neq \mu$, so wissen wir nach dem soeben Bewiesenen bereits, dass λ und μ rein reelle Zahlen sind. Daher gilt insbesondere $\bar{\mu} = \mu$, und Gleichung (28) schreibt sich als

$$(Au, v) = (u, Av) = (u, \mu v) = \mu(u, v) \quad (29)$$

Vergleich von (27) mit (29) ergibt nun, dass wegen $\lambda \neq \mu$ der Ausdruck (u, v) nur die Null sein kann, was zu zeigen war.

Obwohl es viele formale Analogien zwischen der Theorie endlichdimensionaler symmetrischer linearer Abbildungen $A : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ und der Theorie symmetrischer Operatoren gibt, so kann man im allgemeinen kein Verfahren zur Berechnung von Eigenwerten symmetrischer Operatoren angeben. Mehr noch, es kann noch nicht einmal generell etwas zur Existenz von Eigenwerten zu einem beliebigen symmetrischen Operator in einem Hilbertraum E ausgesagt werden. Durch die zusätzliche Eigenschaft der **Kompaktheit eines Operators** eröffnen sich wiederum Möglichkeiten, die Existenz von Eigenwerten eines symmetrischen Operators zu garantieren. Wir kommen auf diese Eigenschaften im spektraltheoretischen Teil dieser Vorlesung zu sprechen.

Da der Begriff des Eigenwerts sehr zentral in der Theorie der linearen Hilbertraum-Operatoren und ihrer Anwendung in der Quantenmechanik ist, geben wir eigens die folgende

Definition 2.9

Es sei E ein Hilbertraum und U Untervektorraum von E . Wir nennen die Menge aller Eigenwerte eines linearen Operators $A : U \rightarrow E$ das **Punktspektrum** des Operators A . Man bezeichnet das Punktspektrum des Operators A auch mit $\sigma_p(A)$. Wir nennen eine Teilmenge $M \subseteq \sigma_p(A)$ **diskret**, sofern M nichtleer und abzählbar ist.

Beachte!

Das Punktspektrum eines linearen \mathbb{C} -Hilbertraum-Operators $A : U \rightarrow E$ kann durchaus die leere Menge sein.

Beispiel 2.10

Wir betrachten die eindimensionale stationäre Schrödinger-Gleichung für ein freies Teilchen. Dazu gehen wir in den Hilbertraum $E := L^2(\mathbb{R})$ und betrachten den Unterraum $U := \{f \in E \cap C^2(\mathbb{R}) \mid f'' \in E\}$ sowie den linearen Operator A , der gegeben wird durch

$$A : U \rightarrow E, \quad \psi \mapsto A\psi$$

$$\forall x \in \mathbb{R} : \quad (A\psi)(x) := \left(-\frac{d^2}{dx^2}\psi\right)(x) \quad (30)$$

Die eindimensionale stationäre Schrödinger-Gleichung für ein freies Teilchen schreibt sich damit als Eigenwertproblem:

$$A\psi = \lambda\psi \quad (31)$$

Dies ist nichts anderes als die Differentialgleichung

$$-\psi''(x) = \lambda\psi(x) \quad x \in \mathbb{R} \quad (32)$$

die z. B. für nichtnegatives λ sofort gelöst werden kann: Real- bzw. Imaginärteil von ψ sind stets von der allgemeinen Bauart

$$\varphi(x) = \alpha \cos(\sqrt{\lambda}x) + \beta \sin(\sqrt{\lambda}x) \quad x \in \mathbb{R} \quad (33)$$

mit reellen Zahlen α, β . Wir erkennen jedoch sofort, dass Funktionen des Typs φ entlang der reellen Achse nicht quadratintegrierbar im Sinne des Lebesgue-Integrals sein können. Daraus folgt insgesamt $\sigma_p(A) \cap \mathbb{R}^+ = \{\}$.

Dieses Ergebnis mutet merkwürdig an, denn man würde für das freie Teilchen sicherlich positive Energiewerte erwarten. Der Grund liegt darin, dass der Begriff des

Eigenwerts allein für ein physikalisch sinnvolles Studium der Schrödinger-Gleichung nicht ausreicht. Das was fehlt, ist, den Begriff des Spektrums einer linearen Abbildung im Hilbertraum so einzuführen, dass man damit einerseits sinnvoll Physik treiben kann und dass andererseits der Begriff Spektrum im endlichdimensionalen Fall sich wieder mit dem Spektralbegriff der Linearen Algebra deckt. Dies soll im weiteren Verlauf der Vorlesung besprochen werden.

Im nächsten Beispiel gibt es im Bereich der positiven Zahlen Werte, die zum Punktspektrum des entsprechenden Operators gehören: Die Menge dieser Zahlen ist sogar diskret.

Beispiel 2.11

Wir betrachten den Hilbertraum $E := L^2([0, 1])$ und den Unterraum

$$U := \{f = \bar{f} \in E \cap C^2([0, 1]) \mid f(0) = f'(1) + f(1) = 0, f'' \in E\} \quad (34)$$

Weiterhin definieren wir den linearen Operator $A : U \rightarrow E$ durch

$$(Ay)(x) := \left(-\frac{d^2}{dx^2}y\right)(x) \quad \forall x \in [0, 1] \quad (35)$$

Wir wollen die Eigenwertgleichung

$$(Ay)(x) = \lambda y(x) \quad x \in \mathbb{R} \quad (36)$$

für positive Werte von λ lösen:

Die allgemeine reellwertige Lösung der Differentialgleichung

$$y''(x) + \lambda y(x) = 0 \quad x \in [0, 1] \quad \lambda > 0 \quad (37)$$

lautet

$$y(x) = \alpha \cos \sqrt{\lambda}x + \beta \sin \sqrt{\lambda}x \quad (38)$$

mit reellen Konstanten α, β . Wir arbeiten jetzt die Randbedingungen ein,

$$y(0) = 0 \quad y'(1) + y(1) = 0 \quad (39)$$

und erhalten damit schrittweise durch Einsetzen:

$$y(0) = 0 \quad \Rightarrow \quad \alpha = 0 \quad \Rightarrow \quad y(x) = \beta \sin \sqrt{\lambda}x \quad (40)$$

$$y'(1) + y(1) = 0 \quad \Rightarrow \quad \beta \sqrt{\lambda} \cos \sqrt{\lambda} + \beta \sin \sqrt{\lambda} = 0 \quad (41)$$

Wir möchten eine Lösung $y(x)$ haben, die verschieden von 0 ist und stellen zusätzlich die Forderung einer Normierung auf die Zahl 1:

$$\int_0^1 y(x)\overline{y(x)} dx = \int_0^1 y(x)^2 dx = 1 \quad (42)$$

Daher können wir $\beta \neq 0$ wählen. Division von Gleichung (41) durch β liefert die Beziehung

$$\tan \sqrt{\lambda} = -\sqrt{\lambda} \quad (43)$$

Diese Gleichung ist natürlich nicht für alle $\lambda > 0$ erfüllbar, sondern, wie man z.B. aus dem Graphen der Tangensfunktion erkennt, gibt es genau eine monoton wachsende Folge $(\lambda_n)_{n \in \mathbb{N}}$ positiver Zahlen, zu denen jeweils Funktionen y_n existieren, die die Gleichungen

$$y_n''(x) + \lambda_n y_n(x) = 0 \quad y_n(0) = 0 \quad y_n'(1) + y_n(1) = 0 \quad (44)$$

erfüllen. Konkret sehen diese Funktionen wie folgt aus:

$$y_n(x) = \beta_n \sin \sqrt{\lambda_n} x \quad n \in \mathbb{N} \quad x \in \mathbb{R} \quad (45)$$

Es verbleibt die Aufgabe, den Wert der Konstanten β_n so zu bestimmen, dass

$$\int_0^1 y_n(x)^2 dx = 1 \quad (46)$$

Ausgeschrieben bedeutet die letzte Gleichung

$$\beta_n^2 \int_0^1 (\sin \sqrt{\lambda_n} x)^2 dx = 1, \quad (47)$$

was äquivalent ist zu

$$\frac{\beta_n^2}{2} \int_0^1 (1 - \cos 2\sqrt{\lambda_n} x) dx = 1 \quad (48)$$

Dies liefert für das Quadrat der Konstanten β_n :

$$\beta_n^2 = \frac{4\sqrt{\lambda_n}}{2\sqrt{\lambda_n} - \sin 2\sqrt{\lambda_n}} \quad (49)$$

Die gesuchten Funktionen y_n , $n \in \mathbb{N}$, lauten daher - falls β_n als positiv angenommen wird:

$$y_n(x) = \sqrt{\frac{4\sqrt{\lambda_n}}{2\sqrt{\lambda_n} - \sin 2\sqrt{\lambda_n}}} \sin \sqrt{\lambda_n} x \quad (50)$$

Mit diesem Kapitel haben wir verschiedene Grundbegriffe aus der Funktionalanalysis eingeführt, die uns im folgenden öfter begegnen werden. Im folgenden Kapitel wenden wir uns gleich der eindimensionalen Schrödinger-Gleichung für das quadratische Potential $V(x) = x^2$ des harmonischen Oszillators zu und geben eine algebraische Methode an, wie man Eigenwerte und Eigenvektoren des zugehörigen Hamilton-Operators berechnen kann. Wir werden explizit zeigen, dass diese Eigenvektoren paarweise orthogonal sind.

3. Quadratische Potentiale und Leiteroperatoren

In diesem Abschnitt betrachten wir die eindimensionale Schrödinger-Gleichung mit harmonischem Potential $V(x) = x^2$. Gesucht sind Zahlen $\lambda \in \mathbb{R}$, so dass die entsprechenden Lösungen ψ der nachfolgenden Gleichung

$$-\psi''(x) + x^2\psi(x) = \lambda\psi(x) \quad x \in \mathbb{R} \quad (51)$$

in $C^2(\mathbb{R}) \cap L^2(\mathbb{R})$ liegen.

Da man vorneherein an Lösungen in $C^2(\mathbb{R}) \cap L^2(\mathbb{R})$ interessiert ist, kann man einen Separationsansatz der Gestalt

$$x \mapsto \psi(x) = f(x)e^{-\alpha x^2} \quad \alpha > 0 \quad x \in \mathbb{R} \quad (52)$$

versuchen, wobei die Funktion $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ und die Zahl α zu bestimmen sind. Dies führt uns zu

Lemma 3.1

Es sei $f \in C^2(\mathbb{R})$ reellwertig und $\alpha > 0$, $\lambda \in \mathbb{R}$. Die Funktion $\psi : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ mit

$$x \mapsto \psi(x) = f(x)e^{-\alpha x^2} \quad \alpha > 0 \quad x \in \mathbb{R} \quad (53)$$

ist genau dann Lösung der Schrödinger-Gleichung

$$-\psi''(x) + x^2\psi(x) = \lambda\psi(x) \quad x \in \mathbb{R} \quad (54)$$

in $C^2(\mathbb{R})$, sofern f die nachstehende Differentialgleichung erfüllt:

$$-f''(x) + 4\alpha x f'(x) + (2\alpha + (1 - 4\alpha^2)x^2) f(x) = \lambda f(x) \quad x \in \mathbb{R} \quad (55)$$

Der Beweis geht durch Einsetzen von (53) in (54) und elementare Rechnung.

Aus der Differentialgleichung (55) kann man bereits folgendes ablesen:

Lemma 3.2

Es sei $g : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$, $x \mapsto g(x) = e^{-\frac{1}{2}x^2}$ und $u : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$, $x \mapsto u(x) := xg(x)$. Dann gilt für alle $x \in \mathbb{R}$

$$-g''(x) + x^2 g(x) = g(x) \quad -u''(x) + x^2 u(x) = 3u(x) \quad (56)$$

Offensichtlich gilt $g, u \in C^2(\mathbb{R}) \cap L^2(\mathbb{R})$. Dies motiviert die folgende

Definition 3.3

Es sei g wie in Lemma 3.2. Wir definieren

$$U := \{f \in C^2(\mathbb{R}) \cap L^2(\mathbb{R}) \mid x \mapsto f(x) = g(x) \sum_{j=0}^n c_j x^j \quad c_j \in \mathbb{R}, n \in \mathbb{N}_0\} \quad (57)$$

Für ein $f \in U$ seien weiterhin die linearen Abbildungen $D : U \rightarrow U$ und $X : U \rightarrow U$ gegeben durch

$$(Df)(x) := f'(x) \quad (Xf)(x) := xf(x) \quad x \in \mathbb{R} \quad (58)$$

Es seien $F : U \rightarrow U$ und $G : U \rightarrow U$ lineare Operatoren. Für $\alpha, \beta \in \mathbb{R}$ definieren wir $\alpha F + \beta G$ und FG (und entsprechend induktiv die Potenzen F^n, G^n , $n \in \mathbb{N}_0$) durch die Vereinbarungen

$$((\alpha F + \beta G)u)(x) := \alpha(Fu)(x) + \beta(Gu)(x) \quad \forall u \in U \quad \forall x \in \mathbb{R} \quad (59)$$

$$((FG)u)(x) := (F(Gu))(x) \quad \forall u \in U \quad \forall x \in \mathbb{R} \quad (60)$$

Man überzeugt sich relativ leicht, dass der Bildbereich von D und X tatsächlich selber wieder Teilmenge von U ist:

$$DU \subseteq U \quad XU \subseteq U \quad (61)$$

Theorem 3.4

Die linearen Operatoren $A : U \rightarrow U$ und $S : U \rightarrow U$ seien gegeben durch

$$A := D + X \quad S := -D + X \quad (62)$$

Weiterhin bezeichne I die identische Abbildung auf U . Dann gelten die nachstehenden Relationen:

$$DX - XD = I \quad AS - SA = 2I \quad -D^2 + X^2 = SA + I \quad (63)$$

Dem Beweis des Theorems liegt im wesentlichen die Produktregel der Differentiation zugrunde, im Detail:

$$\begin{aligned} \forall x \in \mathbb{R} : \quad (DXu)(x) - (XD u)(x) &= \\ u(x) + x(Du)(x) - X(Du)(x) &= u(x) + X(Du)(x) - X(Du)(x) = u(x) \end{aligned} \quad (64)$$

$$\begin{aligned} AS - SA &= (D + X)(-D + X) - (-D + X)(D + X) = \\ -D^2 - (-D^2) + X^2 - X^2 + 2DX - 2XD &= 2I \end{aligned} \quad (65)$$

$$SA + I = (-D + X)(D + X) + I = -D^2 + X^2 - DX + XD + I \quad (66)$$

Die so eingeführten Operatoren A und S helfen uns jetzt auf relativ einfache Weise, die Schrödinger-Gleichung mit harmonischem Potential in der Menge $C^2(\mathbb{R}) \cap L^2(\mathbb{R})$ zu lösen.

Theorem 3.5

Es sei $g : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$, $x \mapsto g(x) := e^{-\frac{1}{2}x^2}$ und die Folge $(\varphi_n)_{n \in \mathbb{N}_0}$ der Funktionen $\varphi_n : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ werde gegeben durch die Vorschrift

$$\varphi_n := (-D + X)^n g \quad n \in \mathbb{N}_0 \quad (67)$$

Die in $C^2(\mathbb{R}) \cap L^2(\mathbb{R})$ liegenden reellwertigen Funktionen φ_n sind Eigenvektoren des Operators $H := -D^2 + X^2$. Sie erfüllen die Schrödinger-Gleichung

$$-\varphi_n''(x) + x^2 \varphi_n(x) = (2n + 1) \varphi_n(x) \quad n \in \mathbb{N}_0, \quad x \in \mathbb{R} \quad (68)$$

mit dem quadratischen Potential $V(x) = x^2$ und genügen der Rekursionsrelation

$$\varphi_{n+1}(x) - 2x\varphi_n(x) + 2n\varphi_{n-1}(x) = 0 \quad n \in \mathbb{N}_0, \quad x \in \mathbb{R} \quad (69)$$

mit Anfangsbedingungen

$$\varphi_0(x) = e^{-\frac{1}{2}x^2} \quad \varphi_1(x) = 2x e^{-\frac{1}{2}x^2} \quad x \in \mathbb{R} \quad (70)$$

Beweis

Offensichtlich ist nach Lemma 3.2 die Zahl $\lambda_0 = 1$ Eigenwert von $H = -D^2 + X^2$, d.h. $\sigma_p(H) \neq \{ \}$.

Nach Konstruktion sind die Funktionen $\varphi_n, n \in \mathbb{N}_0$ allesamt in $U \subseteq C^2(\mathbb{R}) \cap L^2(\mathbb{R})$. Es sei jetzt $\varphi \in U$ Eigenvektor von H in U zum Eigenwert λ . Dann gilt

$$H\varphi = \lambda\varphi \quad \Leftrightarrow \quad (SA + I)\varphi = \lambda\varphi \quad (71)$$

Die Zahl $\mu = 0$ ist Eigenwert von SA zum Eigenvektor $g \in U$, also $\sigma_p(SA) \neq \{ \}$. Es sei jetzt $\mu \in \sigma_p(SA)$ mit Eigenvektor $\psi \in U$. Dann gilt

$$SA\psi = \mu\psi \quad \Rightarrow \quad SSA\psi = \mu S\psi \quad \Leftrightarrow \quad (72)$$

$$S(AS - 2I)\psi = \mu S\psi \quad \Leftrightarrow \quad SA(S\psi) = (\mu + 2)S\psi \quad (73)$$

Da der Operator $H = SA + I$ die gleichen Eigenvektoren wie SA hat und überdies den Eigenwert $\lambda_0 = 1$ besitzt, folgt mit (73), dass alle Zahlen $\lambda_n = (2n + 1), n \in \mathbb{N}$ ebenfalls Eigenwerte von H sind. Mit Induktion zeigt man, dass sie zu den Eigenvektoren $S^n g = (-D + X)^n g, n \in \mathbb{N}_0$ gehören (führe die Schritte von (72)(73) beliebig oft aus). Nach Konstruktion sind alle Funktionen $S^n g$ wieder in U , so dass wir, wie im Theorem 3.5 behauptet, bereits eine ganze Folge von Eigenwerten und Eigenvektoren der Schrödinger-Gleichung mit harmonischem Potential bestimmt haben.

Um die im Theorem 3.5 aufgestellten Rekursionsrelationen zu beweisen, gehen wir mit Induktion vor: Der Fall $n = 0$ ist offensichtlich richtig, $Sg = (-D + X)g = 2Xg$. Es gibt also ein $n \in \mathbb{N}_0$, so dass die Rekursionsrelationen

$$\varphi_{n+1} - 2X\varphi_n + 2n\varphi_{n-1} = 0 \quad (74)$$

erfüllt sind. Dann folgt

$$S\varphi_{n+1} - 2SX\varphi_n + 2nS\varphi_{n-1} = 0 \Leftrightarrow \varphi_{n+2} - 2(-D + X)X\varphi_n + 2n\varphi_n = 0 \Leftrightarrow \quad (75)$$

$$\varphi_{n+2} + (2DX - 2X^2)\varphi_n + 2n\varphi_n = 0 \Leftrightarrow \varphi_{n+2} + (2(I + XD) - 2X^2)\varphi_n + 2n\varphi_n = 0 \Leftrightarrow \quad (76)$$

$$\varphi_{n+2} - 2X(-D + X)\varphi_n + (2n + 1)\varphi_n = 0 \Leftrightarrow \varphi_{n+2} - 2X\varphi_{n+1} + (2n + 1)\varphi_n = 0 \quad (77)$$

Dies erbringt den Induktionsschritt und wir haben die Rekursionsaussage aus Theorem 3.5 bewiesen. Die Tatsache, dass die Funktionen $\varphi_n, n \in \mathbb{N}_0$ reell sind, ist nach Konstruktion $\varphi_n := (-D + X)^n g$ klar. Dies komplettiert insgesamt den Beweis von Theorem 3.5.

Definition 3.6

Die in (67) eingeführten Funktionen $\varphi_n := (-D + X)^n g, n \in \mathbb{N}_0$ heißen **Hermite-Funktionen**. Die Funktionen $H_n : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}, n \in \mathbb{N}_0$, gegeben durch

$$x \mapsto H_n(x) := \frac{\varphi_n(x)}{g(x)} \quad x \in \mathbb{R} \quad (78)$$

heissen **Hermite-Polynome**.

Die Hermite-Polynome erfüllen die gleiche Rekursionsrelation wie die Hermite-Funktionen:

$$H_{n+1}(x) - 2xH_n(x) + 2nH_{n-1}(x) = 0 \quad n \in \mathbb{N}_0 \quad x \in \mathbb{R} \quad (79)$$

jedoch mit Anfangsbedingungen

$$H_0(x) = 1 \quad H_1(x) = 2x \quad x \in \mathbb{R} \quad (80)$$

Beachte, dass die Anfangsbedingungen (80) zusammen mit (79) in der Tat garantieren, dass es sich bei den H_n um Polynome vom Grad n in x handelt.

Lemma 3.7

Die Operatoren $S = -D + X$ und $A = D + X$ bilden die Hermite-Funktionen auf ihre oberen bzw. ihre unteren Nachbarn wie folgt ab:

$$S\varphi_n = \varphi_{n+1} \quad A\varphi_n = 2n\varphi_{n-1} \quad n \in \mathbb{N}_0 \quad (81)$$

Beweis

Die Beziehung $S\varphi_n = \varphi_{n+1}$ folgt sofort aus der Definition $\varphi_n = S^n g$. Die Beziehung $A\varphi_n = n\varphi_{n-1}$, $n \in \mathbb{N}_0$ erkennt man wie folgt (der Fall $n = 0$ ist klar):

$$\begin{aligned} n \in \mathbb{N} \quad \Rightarrow \quad A\varphi_n &= AS^n g = (D + X)(-D + X)S^{n-1} g = & (82) \\ (2I + SA)S^{n-1} g &= 2S^{n-1} g + (2n - 2)S^{n-1} g = 2nS^{n-1} g = 2n\varphi_{n-1} & (83) \end{aligned}$$

Definition 3.8

Aufgrund ihrer Abbildungseigenschaften (81) nennen wir die Operatoren S und A **Leiteroperatoren**.

Bemerkung 3.9

Geläufig ist auch für S der Begriff **Aufsteigeoperator** sowie für A der Begriff **Absteigeoperator**. Auch die Begriffe **Erzeugungsoperator** und **Vernichtungsoperator** werden verwendet.

Die Hermite-Polynome als Beispiel für sogenannte **Orthogonale Polynome** zählen zu den wichtigsten Funktionensystemen der Mathematik überhaupt. In der Theoretischen Physik kommt ihnen die Vorzugsrolle zu, die wir gerade beleuchtet haben: Die Hermite-Funktionen liefern Eigenvektoren des Hamilton-Operators mit harmonischem Potential $V(x) = x^2$. Aufgrund der Bedeutung, die diese Funktionen haben, werden wir deshalb im folgenden einige ihrer Eigenschaften eigens besprechen.

Lemma 3.10

Die in (78) eingeführten Hermite-Polynome H_n erfüllen die Identität

$$H_n(x) = (-1)^n e^{x^2} \left(\frac{d}{dx}\right)^n e^{-x^2} \quad x \in \mathbb{R} \quad n \in \mathbb{N}_0 \quad (84)$$

und genügen den Differentialgleichungen

$$H_n''(x) - 2xH_n'(x) + 2nH_n(x) = 0 \quad x \in \mathbb{R} \quad n \in \mathbb{N}_0 \quad (85)$$

Beweis

Betrachte die Funktionen $f_n : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$, die gegeben werden durch

$$f_n(x) := (-1)^n \left(\frac{d}{dx}\right)^n e^{-x^2} \quad x \in \mathbb{R} \quad n \in \mathbb{N}_0 \quad (86)$$

Offensichtlich gilt

$$f_1(x) - 2xf_0(x) = 0 \quad x \in \mathbb{R} \quad (87)$$

und wir behaupten

$$f_{n+1}(x) - 2xf_n(x) + 2nf_{n-1}(x) = 0 \quad x \in \mathbb{R} \quad n \in \mathbb{N}_0 \quad (88)$$

Die letzte Gleichung ist bereits richtig für $n = 0$. Wir differenzieren (88) und erhalten mit Hilfe von (86):

$$(-1)f_{n+2}(x) - 2f_n(x) - 2xf'_n(x) + (-1)2nf_n(x) = 0 \quad x \in \mathbb{R} \quad n \in \mathbb{N}_0 \quad \Leftrightarrow \quad (89)$$

$$f_{n+2}(x) + 2f_n(x) + (-1)2xf_{n+1}(x) + 2nf_n(x) = 0 \quad x \in \mathbb{R} \quad n \in \mathbb{N}_0 \quad \Leftrightarrow \quad (90)$$

$$f_{n+2}(x) - 2xf_{n+1}(x) + (2n+2)f_n(x) = 0 \quad x \in \mathbb{R} \quad n \in \mathbb{N}_0, \quad (91)$$

was den Induktionsschritt erbringt. Folglich ist (88) korrekt. Aufgrund der Anfangsbedingungen $f_0(x) = H_0(x)e^{-x^2}$ und $f_1(x) = H_1(x)e^{-x^2}$ gilt damit einerseits wegen der Rekursionsvorschrift (88) die Beziehung:

$$f_n(x) = H_n(x)e^{-x^2} \quad (92)$$

und andererseits aufgrund der Definition (86):

$$f_n(x) := (-1)^n \left(\frac{d}{dx}\right)^n e^{-x^2} \quad x \in \mathbb{R} \quad n \in \mathbb{N}_0 \quad (93)$$

Die Kombination von (92) und (93) liefert - wie behauptet - die Gleichung

$$H_n(x) = (-1)^n e^{x^2} \left(\frac{d}{dx}\right)^n e^{-x^2} \quad x \in \mathbb{R} \quad n \in \mathbb{N}_0 \quad (94)$$

Differentiation von (94) liefert nun

$$H'_n(x) = 2xH_n(x) - H_{n+1}(x) \quad x \in \mathbb{R} \quad n \in \mathbb{N}_0 \quad (95)$$

und dies ist - wegen der Rekursionsgleichung (79) - gleichbedeutend mit

$$H'_n(x) = 2nH_{n-1}(x) \quad x \in \mathbb{R} \quad n \in \mathbb{N}_0 \quad (96)$$

Erneute Differentiation erbringt für $x \in \mathbb{R}$, $n \in \mathbb{N}_0$:

$$H''_n(x) = 2n \cdot 2(n-1)H_{n-2} \quad (97)$$

und damit

$$H''_n(x) - 2xH'_n(x) = 2n \cdot 2(n-1)H_{n-2}(x) - 2x \cdot 2nH_{n-1}(x) = -2nH_n(x), \quad (98)$$

wobei wir im letzten Schritt wiederum von der Rekursionsbeziehung (79) Gebrauch gemacht haben. Schreiben wir (98) um, so erhalten wir - wie behauptet - die Differentialgleichung

$$H''_n(x) - 2xH'_n(x) + 2nH_n(x) = 0 \quad (99)$$

Bemerkung 3.11

Gleichung (99) heisst auch **Hermite-Differentialgleichung**.

Lemma 3.12

Der Operator $H = -D^2 + X^2$ ist symmetrisch auf seinem Definitionsbereich $U = \{f \in C^2(\mathbb{R}) \cap L^2(\mathbb{R}) \mid x \mapsto f(x) = g(x) \sum_{j=0}^n c_j x^j \quad c_j \in \mathbb{R}, n \in \mathbb{N}_0\}$.

Beweis

Wir zeigen zunächst, dass für alle Funktionen $\varphi, \psi \in U$ und alle reellen Zahlen $\alpha \in \mathbb{R} \setminus \{0\}$ die folgenden Beziehungen gelten:

$$((\alpha D + X)\varphi, \psi) = (\varphi, (-\alpha D + X)\psi) \quad (100)$$

Wir berechnen zunächst für positives y das Integral

$$\int_{-y}^y (\alpha\varphi'(x) + x\varphi(x))\psi(x)dx = \int_{-y}^y \alpha\varphi'(x)\psi(x)dx + \int_{-y}^y x\varphi(x)\psi(x)dx \quad (101)$$

$$= \alpha\varphi(x)\psi(x)|_{-y}^y - \int_{-y}^y \alpha\varphi(x)\psi'(x)dx + \int_{-y}^y x\varphi(x)\psi(x)dx \quad (102)$$

Beachte, dass die Funktionen φ, ψ nach der Definition von U rein reellwertig sind und daher das Konjugationssymbol entfallen kann. Da alle Funktionen aus U , also insbesondere auch die gewählten φ, ψ Produkte aus einem Polynom und der Gaußschen Glockenfunktion $g(x) = e^{-\frac{1}{2}x^2}$ sind, zudem ausgestattet mit der zusätzlichen Eigenschaft

$$\lim_{|x| \rightarrow \infty} \varphi(x) = \lim_{|x| \rightarrow \infty} \psi(x) = 0, \quad (103)$$

kann man den Grenzübergang $y \rightarrow +\infty$ in (101)(102) ausführen und erhält

$$\int_{-\infty}^{\infty} (\alpha\varphi'(x) + x\varphi(x))\psi(x)dx = - \int_{-\infty}^{\infty} \alpha\varphi(x)\psi'(x)dx + \int_{-\infty}^{\infty} x\varphi(x)\psi(x)dx \quad (104)$$

Dies ist gleichbedeutend mit der Behauptung (100). Insbesondere erhalten wir mit Hilfe von (100) für beliebige Funktionen $\varphi, \psi \in U$ (beachte wiederum deren Reellwertigkeit, d.h. die Konjugation bei den Skalarprodukten entfällt):

$$((-D + X)(D + X)\varphi, \psi) = ((D + X)\varphi, (D + X)\psi) = (\varphi, (-D + X)(D + X)\psi) \quad (105)$$

woraus sich die Symmetrie des Operators $H = -D^2 + X^2 = I + (-D + X)(D + X)$ ergibt. Insbesondere erhalten wir für die Hermite-Funktionen die Aussage

$$\forall m, n \in \mathbb{N}_0 : ((-D + X)(D + X)\varphi_m, \varphi_n) = (\varphi_m, (-D + X)(D + X)\varphi_n), \quad (106)$$

was wegen Theorem 3.5, Gleichung (68), äquivalent ist zu

$$\forall m, n \in \mathbb{N}_0 : (2m\varphi_m, \varphi_n) = (\varphi_m, 2n\varphi_n) \quad (107)$$

Dies bedeutet aber, dass die Hermite-Funktionen paarweise orthogonal sind. Die Orthogonalität der Hermite-Funktionen werden wir im folgenden Theorem 3.13 zudem auf direktem Wege beweisen.

Theorem 3.13

Die Hermite-Funktionen sind paarweise orthogonal,

$$m \neq n \quad \Rightarrow \quad \int_{-\infty}^{\infty} \varphi_m(x) \varphi_n(x) dx = 0 \quad m, n \in \mathbb{N}_0 \quad (108)$$

Beweis

Wir betrachten für voneinander verschiedene $m, n \in \mathbb{N}_0$ die beiden Hermite-Differentialgleichungen (vgl. (99)):

$$H_m''(x) - 2xH_m'(x) + 2mH_m(x) = 0 \quad x \in \mathbb{R} \quad (109)$$

$$H_n''(x) - 2xH_n'(x) + 2nH_n(x) = 0 \quad x \in \mathbb{R} \quad (110)$$

Multiplizieren wir Gleichung (109) mit $H_n(x)$, Gleichung (110) mit $H_m(x)$ und subtrahieren wir beide voneinander, so erhalten wir

$$\begin{aligned} H_m(x)H_n''(x) - H_n(x)H_m''(x) - 2x(H_m(x)H_n'(x) - H_n(x)H_m'(x)) = \\ (2m - 2n)H_m(x)H_n(x) \quad x \in \mathbb{R} \end{aligned} \quad (111)$$

Dies ist gleichbedeutend zu

$$\begin{aligned} (H_mH_n' - H_nH_m')'(x) - 2x(H_m(x)H_n'(x) - H_n(x)H_m'(x)) = \\ (2m - 2n)H_m(x)H_n(x) \quad x \in \mathbb{R} \end{aligned} \quad (112)$$

Die letzte Gleichung kann man auch mit Hilfe der Funktion e^{-x^2} wie folgt schreiben:

$$\frac{d}{dx}(e^{-x^2} (H_m(x)H_n'(x) - H_n(x)H_m'(x))) = (2m - 2n) e^{-x^2} H_m(x)H_n(x) \quad (113)$$

Wir integrieren für positives y diese Gleichung und erhalten

$$\begin{aligned} \int_{-y}^y \frac{d}{dx}(e^{-x^2} (H_m(x)H_n'(x) - H_n(x)H_m'(x))) dx = \\ (2m - 2n) \int_{-y}^y e^{-x^2} H_m(x)H_n(x) dx \end{aligned} \quad (114)$$

Dies liefert

$$(e^{-x^2} (H_m(x)H_n'(x) - H_n(x)H_m'(x)))|_{-y}^y = (2m - 2n) \int_{-y}^y e^{-x^2} H_m(x)H_n(x) dx \quad (115)$$

Aufgrund der Tatsache, dass die Funktionen H_m, H_m', H_n, H_n' Polynome in x sind, kann man den Grenzübergang $y \rightarrow +\infty$ auf die linke Seite von (115) anwenden und erhält damit für die rechte Seite:

$$(2m - 2n) \lim_{y \rightarrow \infty} \int_{-y}^y e^{-x^2} H_m(x)H_n(x) dx = 0 \quad (116)$$

Wegen $m \neq n$ folgt daraus

$$\int_{-\infty}^{\infty} H_m(x)H_n(x)e^{-x^2} dx = 0 \quad (117)$$

Aufgrund der Definitionen (67)(69)(70) und (78) folgt damit die Behauptung von Theorem 3.13:

$$m \neq n \quad \Rightarrow \quad \int_{-\infty}^{\infty} \varphi_m(x) \varphi_n(x) dx = 0 \quad m, n \in \mathbb{N}_0 \quad (118)$$

Bemerkung 3.14 Erzeugende Funktion

Man kann wesentliche Informationen über die Hermite-Polynome bzw. die Hermite-Funktionen auch noch anders gewinnen. Dazu betrachten wir für einen festen Wert von $x \in \mathbb{R}$ die Funktion $F : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$, $y \mapsto F(y) := e^{2xy-y^2}$. Mit Hilfe von Standardargumenten aus der Analysis folgt sofort, dass man die Funktion F auch in der folgenden Form schreiben kann: $F(y) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{A_n}{n!} y^n$ mit reellwertigen Koeffizienten A_n . Verändert man jetzt den Wert von x , so verändern sich in dieser Potenzreihendarstellung für F auch die Koeffizienten A_n und werden selber zu reellwertigen, sogar stetig differenzierbaren Funktionen $A_n : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$, $x \mapsto A_n(x)$, d.h. es gibt insgesamt für die Funktion $G : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$, $(x, y) \mapsto G(x, y) := e^{2xy-y^2}$ eine eindeutige Entwicklung der Bauart

$$G(x, y) = e^{2xy-y^2} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{A_n(x)}{n!} y^n \quad (119)$$

mit stetig differenzierbaren Funktionen $A_n : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$, $x \mapsto A_n(x)$. Partielles Differenzieren erbringt zunächst, dass die Funktion G und ihre Reihenentwicklung in ganz \mathbb{R}^2 die folgenden Differentialgleichungen erfüllen:

$$\left(\frac{\partial G}{\partial x}\right)(x, y) = 2y G(x, y) \quad \left(\frac{\partial G}{\partial y}\right)(x, y) = 2(x - y) G(x, y) \quad (120)$$

Durch Koeffizientenvergleich folgen aus diesen beiden Differentialgleichungen die Beziehungen

$$A'_n(x) = 2nA_{n-1}(x) \quad A_{n+1}(x) = 2xA_n(x) - A'_n(x) \quad x \in \mathbb{R} \quad n \in \mathbb{N}_0$$

D.h. die Funktionen A_n sind bis auf die Wahl der Anfangsbedingungen gerade die Hermite-Polynome, siehe (95)(96). Das bedeutet, dass in der Funktion G und ihrer Darstellung der Form $G(x, y) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{A_n(x)}{n!} y^n$ bereits die gesamte Information über die Hermite-Polynome codiert ist, man nennt sie auch die **Erzeugende Funktion** für die Hermite-Polynome.

Bemerkung 3.15 Fourier-Invarianz

Die Hermite-Funktionen φ_n aus (67)(69)(70) sind "Eigenvektoren" der Fourier-Abbildung. Wir werden darauf im folgenden Kapitel noch detailliert eingehen.

Mit diesem Kapitel haben wir die Existenz von Lösungen in $L^2(\mathbb{R}) \cap C^2(\mathbb{R})$ zur Schrödinger-Gleichung mit quadratischem Potential gezeigt. Im nächsten Kapitel wird wesentlich die Frage der Eindeutigkeit von Lösungen in $L^2(\mathbb{R}) \cap C^2(\mathbb{R})$ zur Schrödinger-Gleichung mit quadratischem Potential im Mittelpunkt stehen.

4. Hermite-Funktionen und Fourier-Transformation

Wir wenden uns jetzt der Frage zu, inwiefern die Hermite-Funktionen φ_n , $n \in \mathbb{N}_0$ aus dem letzten Kapitel die einzigen Funktionen sind, die als Lösungen der Schrödinger-Gleichung

$$-\psi''(x) + x^2\psi(x) = E\psi(x) \quad (121)$$

in $L^2(\mathbb{R})$ in Frage kommen. Eine entscheidende Rolle bei der Beantwortung dieser Frage kommt dabei der Fourier-Transformation als \mathbb{C} -linearer Abbildung zu, weshalb wir eingangs noch einmal kurz auf sie eingehen:

Lemma 4.1 Inversionsformel der Fourier-Transformation

Es sei $F(\mathbb{R}, \mathbb{C})$ der \mathbb{C} -Vektorraum der komplexwertigen Funktionen $u : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C}$ und die Fourier-Transformation T werde gegeben durch

$$T : L^1(\mathbb{R}) \rightarrow F(\mathbb{R}, \mathbb{C}) \quad u \mapsto Tu \quad (122)$$

mit

$$\forall y \in \mathbb{R} : (Tu)(y) := \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ixy} u(x) dx \quad y \in \mathbb{R} \quad (123)$$

Falls

$$u \in M := \{\varphi \in L^1(\mathbb{R}) \mid T\varphi \in L^1(\mathbb{R})\}, \quad (124)$$

so gilt die **Inversionsformel**

$$\forall x \in \mathbb{R} : u(-x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} (Tu)(y) e^{-ixy} dy \quad (125)$$

d.h.

$$u \in M \quad \Rightarrow \quad T^2 u = 2\pi P u \quad (126)$$

wobei allgemein auf dem Raum $L^p(\mathbb{R})$, $p \in \mathbb{N}$ die **Paritätsabbildung** $P : L^p(\mathbb{R}) \rightarrow L^p(\mathbb{R})$ gegeben wird durch

$$\forall x \in \mathbb{R} : (Pu)(x) := u(-x) \quad (127)$$

Die Inversionsformel der Fourier-Transformation ist ein wichtiges und oft zitiertes Hilfsmittel der Fourier-Analyse, siehe z.B. [TvWi]. Wir verzichten hier auf die Herleitung der Inversionsformel und halten lediglich als Konsequenz von Lemma 4.1 fest, dass die Fourier-Transformation auf M **injektiv** ist, d.h.

$$\forall u \in M \setminus \{0\} : Tu \neq 0 \quad \Leftrightarrow \quad \{\varphi \in M \mid T\varphi = 0\} = \{0\} \quad (128)$$

Damit kommen wir zu folgendem entscheidenden Theorem:

Theorem 4.2

Es sei $f \in L^2(\mathbb{R})$ orthogonal zu allen Hermite-Funktionen φ_n , $n \in \mathbb{N}_0$, d.h.

$$\forall n \in \mathbb{N}_0 : (\varphi_n, f) = 0 \quad (129)$$

Dann ist mit $g := \varphi_0$ das Produkt fg in $L^1(\mathbb{R})$ und es gilt $Tfg = T(fg) = 0$ sowie insbesondere $f = 0$.

Beweis

Nach Voraussetzung gilt

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x)\varphi_n(x)dx = 0 \quad (130)$$

Es sei jetzt $Q : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ ein Polynom vom Grade k mit komplexen Koeffizienten. Für die Hermite-Polynome gilt $\text{Grad}(H_n) = n$ mit $n \in \mathbb{N}_0$ und daher kann jedes Polynom vom Grad k nach den ersten $k + 1$ Hermite-Polynomen entwickelt werden,

$$Q(x) = \sum_{j=0}^k \alpha_j H_j(x) \quad \alpha_j \in \mathbb{C} \quad (131)$$

Aufgrund der Beziehung

$$\forall n \in \mathbb{N}_0 : \int_{-\infty}^{\infty} f(x)\varphi_n(x)dx = \int_{-\infty}^{\infty} f(x)H_n(x)g(x)dx = 0 \quad (132)$$

folgt wegen (131) und (132) für jedes beliebige Polynom Q vom Grade k :

$$\int_{-\infty}^{\infty} Q(x)f(x)g(x)dx = 0 \quad (133)$$

Insbesondere folgt damit für die Funktionen

$$P_n : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{C} \quad (x, y) \mapsto P_n(x, y) := \sum_{j=0}^n \frac{(-ixy)^j}{j!} \quad (134)$$

die Beziehung

$$\int_{-\infty}^{\infty} P_n(x, y)f(x)g(x)dx = 0 \quad y \in \mathbb{R} \quad (135)$$

Wählen wir $y \in \mathbb{R}$ fest, so gilt für alle $x \in \mathbb{R}$ die folgende Abschätzung:

$$|f(x)g(x)P_n(x, y)| \leq \sum_{j=0}^n |f(x)g(x)| \frac{|xy|^j}{j!} \leq |f(x)g(x)|e^{|xy|} \quad (136)$$

Daraus folgt wegen $g(x) = e^{-\frac{1}{2}x^2}$ sofort die Abschätzung

$$|f(x)g(x)P_n(x, y)| \leq |f(x)\sqrt{g(x)}| e^{-\frac{1}{4}x^2+|xy|} \leq C_y |f(x)\sqrt{g(x)}| \quad (137)$$

mit einer von der Wahl von y gesteuerten Konstanten C_y . Wegen $f, \sqrt{g} \in L^2(\mathbb{R})$ gilt die Cauchy-Schwarz-Ungleichung

$$\left(\int_{-\infty}^{\infty} |f(x)\sqrt{g(x)}|dx\right)^2 \leq \left(\int_{-\infty}^{\infty} |f(x)|^2 dx\right)\left(\int_{-\infty}^{\infty} (\sqrt{g(x)})^2 dx\right) < \infty \quad (138)$$

und dies impliziert $\int_{-\infty}^{\infty} |f(x)\sqrt{g(x)}|dx < \infty$, so dass

$$h : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}, \quad x \mapsto h(x) := |f(x)\sqrt{g(x)}| \quad (139)$$

im Raum $L^1(\mathbb{R})$ liegt. Fassen wir die Abschätzung (137) zusammen, so gilt bei festem $y \in \mathbb{R}$ für alle $x \in \mathbb{R}$:

$$|f(x)g(x)P_n(x, y)| \leq C_y h(x) \quad (140)$$

Die Funktionenfolge $(u_n)_{n \in \mathbb{N}}$, gegeben durch

$$u_n : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}, \quad x \mapsto f_n(x) := f(x)g(x)P_n(x, y) \quad (141)$$

konvergiert überall in \mathbb{R} punktweise wegen

$$\forall x \in \mathbb{R} : \quad \lim_{n \rightarrow \infty} P_n(x, y) = e^{-ixy} \quad (142)$$

und somit insbesondere μ -fast überall punktweise in \mathbb{R} . Vgl. zur jetzt folgenden Argumentation auch z.B. [Bro3], Definition 4.4, Seite 56. Weiterhin sind alle Funktionen f_n wegen (137)(138) in $L^1(\mathbb{R})$ und insbesondere gibt es eine Majorante $h^{maj} := C_y h$ in $L^1(\mathbb{R})$ (h wie in (139) definiert), so dass

$$\forall n \in \mathbb{N} : \quad |u_n| \leq h^{maj} \quad (143)$$

Damit sind die Voraussetzungen des Satzes von Lebesgue zur majorisierten Konvergenz erfüllt, vgl. z. B. [Bro3], Satz 4.17, Seite 65. Das bedeutet, dass die Funktionen $u_n \in L^1(\mathbb{R})$ gegen ein Element $u \in L^1(\mathbb{R})$ im Sinne der L^1 -Norm konvergieren:

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \int_{-\infty}^{\infty} |u_n(x) - u(x)|dx = 0 \quad (144)$$

Dies erbringt schließlich

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \int_{-\infty}^{\infty} u_n(x)dx = \int_{-\infty}^{\infty} \lim_{n \rightarrow \infty} u_n(x)dx = \int_{-\infty}^{\infty} u(x)dx \quad (145)$$

Aufgrund (135) gilt

$$\forall n \in \mathbb{N} : \quad \int_{-\infty}^{\infty} u_n(x)dx = 0 \quad (146)$$

Mit (142) folgt einerseits

$$\int_{-\infty}^{\infty} u(x)dx = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ixy} f(x)g(x)dx \quad (147)$$

und wegen (145) und (146) andererseits

$$\int_{-\infty}^{\infty} u(x) dx = 0, \quad (148)$$

also insgesamt

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-ixy} f(x)g(x) dx = 0 \quad (149)$$

Dies ist gleichbedeutend zu der Aussage

$$Tfg = T(fg) = 0 \quad (150)$$

Die Funktionen f und g sind beide in $L^2(\mathbb{R})$, d.h. es gilt insbesondere, in Analogie zu (138)

$$\left(\int_{-\infty}^{\infty} |f(x)g(x)| dx\right)^2 \leq \left(\int_{-\infty}^{\infty} |f(x)|^2 dx\right) \left(\int_{-\infty}^{\infty} |g(x)|^2 dx\right) < \infty, \quad (151)$$

woraus zunächst $fg \in L^1(\mathbb{R})$ folgt und wegen $Tfg = 0$ auch $fg \in M$, wobei M wie in (124) definiert ist. Wegen $Tfg = 0$ und der Injektivitätsaussage zur Fourier-Transformation auf M , vgl. Lemma 4.1, folgt damit

$$\forall x \in \mathbb{R} : \quad f(x)g(x) = 0, \quad (152)$$

was bedeutet, dass $f = 0$. Dies war zu zeigen.

Wir zitieren im folgenden ein nützliches Resultat aus der Funktionalanalysis und lenken zu seinem Beweis die Aufmerksamkeit des Lesers auf die entsprechende Standardliteratur, vgl. etwa [He], [DV].

Lemma 4.3

Es sei E ein \mathbb{C} -Hilbertraum und $(u_n)_{n \in \mathbb{N}_0}$ eine Folge von paarweise orthogonalen Vektoren in E :

$$\forall m, n \in \mathbb{N}_0, \quad m \neq n : \quad (u_m, u_n) = 0 \quad (u_m, u_m)(u_n, u_n) > 0 \quad (153)$$

Fernerhin sei $(v_n)_{n \in \mathbb{N}_0}$ die Folge der zugehörigen normierten Vektoren

$$\forall n \in \mathbb{N}_0 : \quad v_n := \frac{u_n}{\sqrt{(u_n, u_n)}} \quad (154)$$

und der Teilraum F von E sowie sein **Orthogonalraum** F^* seien gegeben durch

$$F := \left\{ \psi \in E \mid \psi = \sum_{n=0}^{\infty} c_n v_n, \quad c_n \in \mathbb{C}, \quad \sum_{n=0}^{\infty} |c_n|^2 < \infty \right\} \quad (155)$$

$$F^* := \left\{ \psi \in E \mid \forall \varphi \in F : (\psi, \varphi) = 0 \right\} \quad (156)$$

Dann gelten folgende Aussagen:

1. F ist mit dem von E induzierten Skalarprodukt selbst ein \mathbb{C} -Hilbertraum.
2. Zu jedem Vektor x in E gibt es genau einen Vektor $y \in F$ und genau einen Vektor $z \in F^*$, so dass

$$x = y + z \quad (157)$$

Im folgenden Existenz- und Eindeutigkeitsatz halten wir fest, dass die Hermite-Funktionen die einzigen nichtverschwindenden Funktionen in $L^2(\mathbb{R})$ sind, die die stationäre Lösung der Schrödinger-Gleichung mit quadratischem Potential gestatten.

Theorem 4.4 Existenz- und Eindeutigkeitsatz

Die einzigen Werte für E , zu denen für die Schrödinger-Gleichung

$$-\psi''(x) + x^2\psi(x) = E\psi(x) \quad (158)$$

mit quadratischem Potential ($V(x) = x^2$) Lösungen in $L^2(\mathbb{R}) \cap C^2(\mathbb{R}) \setminus \{0\}$ existieren, werden gegeben durch die Folge $(E_n)_{n \in \mathbb{N}_0}$ der Zahlen

$$E_n := 2n + 1 \quad n \in \mathbb{N}_0 \quad (159)$$

Die zu den E_n gehörenden Lösungen ψ_n der Schrödinger-Gleichung

$$-\psi_n''(x) + x^2\psi_n(x) = E_n\psi_n(x) \quad (160)$$

werden - bis auf einen komplexen Vorfaktor - durch die Hermite-Funktionen gegeben, d.h. $\psi_n = \varphi_n$, $n \in \mathbb{N}_0$.

Beweis

Die Funktionen $\psi_n : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$, $n \in \mathbb{N}_0$ seien durch die Normierung der Hermite-Funktionen φ_n , $n \in \mathbb{N}_0$ gegeben:

$$\psi_n := \frac{\varphi_n}{\sqrt{(\varphi_n, \varphi_n)}} \quad n \in \mathbb{N}_0 \quad (161)$$

Es sei

$$F := \left\{ \sum_{n=0}^{\infty} c_n \psi_n \mid c_n \in \mathbb{C}, \sum_{n=0}^{\infty} |c_n|^2 < \infty \right\} \quad (162)$$

Wir nehmen an, es gebe eine weitere Funktion $\psi \in L^2(\mathbb{R}) \cap C^2(\mathbb{R})$, die die Schrödinger-Gleichung (159) löst und für die gilt

$$\{\psi\} \cap \{\psi_0, \psi_1, \psi_2, \dots\} = \{ \} \quad (163)$$

Dann existiert nach Lemma 4.3 eine eindeutige Zerlegung

$$\psi = \varphi + f \quad \varphi \in F \quad f \in F^* \quad (164)$$

Wegen

$$\forall u \in F : \quad (f, u) = 0 \quad (165)$$

gilt damit $f = 0$ nach Theorem 4.2, was

$$\psi = \varphi \in F \quad (166)$$

bedeutet, d. h. es gibt eindeutig bestimmte Koeffizienten $c_n \in \mathbb{C}$, so dass

$$\psi = \sum_{n=0}^{\infty} c_n \psi_n \in F \quad (167)$$

Als **notwendige** Bedingung an die Funktion ψ , die Schrödinger-Gleichung

$$-\psi''(x) + x^2\psi(x) = E\psi(x) \quad (168)$$

zu einer Zahl $E \in \mathbb{C}$ zu lösen, erhält man durch Koeffizientenvergleich und unter Beachtung der Gleichungen

$$-\psi_n''(x) + x^2\psi_n(x) = (2n+1)\psi_n(x) \quad x \in \mathbb{R} \quad n \in \mathbb{N}_0 \quad (169)$$

für die Funktion ψ aus (167) die Forderung

$$\forall n \in \mathbb{N}_0 : \quad (2n+1)c_n = Ec_n \quad (170)$$

(170) ist jedoch nur im Falle $\psi = 0$ lösbar, was schließlich bedeutet, dass es außer den Hermite-Funktionen keine weiteren Funktionen $\psi \in L^2(\mathbb{R}) \cap C^2(\mathbb{R}) \setminus \{0\}$ geben kann, die die Schrödinger-Gleichung

$$-\psi''(x) + x^2\psi(x) = E\psi(x) \quad (171)$$

erfüllen. Damit ist die Behauptung des Existenz- und Eindeutigkeitsatzes bewiesen.

Lemma 4.5

Die Fourier-Abbildung T wirkt auf den Hermite-Funktionen als Streckung, d.h. die Hermite-Funktionen bleiben bis auf einen komplexen Vorfaktor invariant unter der Fourier-Transformation.

Beweis

Es sei im folgenden $u \in U$ (U definiert wie in (57)) und es sei $v := Tu \in F(\mathbb{R}, \mathbb{C})$. Wir betrachten zunächst das Integral

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-ixy}xu(x)dx,$$

welches geschrieben werden kann als

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-ixy} x u(x) dx = \int_{-\infty}^{\infty} i \frac{\partial}{\partial y} e^{-ixy} u(x) dx = i v'(y) \quad (172)$$

Beachte, dass Differentiation und Integralbildung aufgrund $u \in U$ vertauscht werden dürfen. Weiterhin betrachten wir das Integral

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-ixy} u'(x) dx$$

und erhalten durch partielle Integration

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-ixy} u'(x) dx = e^{-ixy} u(x) \Big|_{-\infty}^{\infty} - \int_{-\infty}^{\infty} (-iy) e^{-ixy} u(x) dx \quad (173)$$

also

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-ixy} u'(x) dx = iy \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ixy} u(x) dx \quad (174)$$

Für alle reellen Zahlen α gilt demnach folgende Beziehung

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-ixy} \left(\alpha x + \frac{d}{dx} \right) u(x) dx = i \left(\alpha \frac{d}{dy} + y \right) v(y) \quad (175)$$

Da die Funktionen φ_n , $n \in \mathbb{N}_0$ allesamt nicht nur in $L^2(\mathbb{R})$ sondern auch in $L^1(\mathbb{R})$ liegen und T als Abbildung von $L^1(\mathbb{R})$ nach $F(\mathbb{R}, \mathbb{C})$ fungiert, ist für jedes einzelne φ_n seine Fourier-Transformierte $\psi_n := T\varphi_n$ wohldefiniert. Unter Zuhilfenahme des Operators A aus dem letzten Kapitel erhalten wir jetzt einerseits

$$\forall n \in \mathbb{N}_0 : \quad TA\varphi_n = 2nT\varphi_{n-1} = 2n\psi_{n-1} \quad (176)$$

und andererseits

$$\forall n \in \mathbb{N}_0 : \quad TA\varphi_n = i \left(\frac{d}{dy} + y \right) \psi_n \quad (177)$$

wegen $A = D + X$ und (175) (setze $\alpha := 1$). Vergleich von (176) mit (177) liefert

$$\forall n \in \mathbb{N}_0 : \quad i \left(\frac{d}{dy} + y \right) \psi_n = 2n\psi_{n-1} \quad (178)$$

Und unter Zuhilfenahme des Operators S aus dem letzten Kapitel erhalten wir jetzt einerseits

$$\forall n \in \mathbb{N}_0 : \quad TS\varphi_n = T\varphi_{n+1} \quad (179)$$

und andererseits

$$\forall n \in \mathbb{N}_0 : \quad TS\varphi_n = -i \left(-\frac{d}{dy} + y \right) \psi_n \quad (180)$$

wegen $S = -D + X$ und (175) (setze $\alpha := -1$). Vergleich von (179) mit (180) liefert

$$\forall n \in \mathbb{N}_0 : \quad -i \left(-\frac{d}{dy} + y \right) \psi_n = \psi_{n+1} \quad (181)$$

Kombination von (178) und (181) liefert

$$\left(-\frac{d}{dy} + y\right)\left(\frac{d}{dy} + y\right)\psi_n = 2n\psi_n \quad (182)$$

Gleichung (182) ist äquivalent zu

$$-\psi_n''(y) + y^2\psi_n(y) = (2n+1)\psi_n(y) \quad n \in \mathbb{N}_0 \quad (183)$$

Aufgrund der Beziehungen (178)(181) folgt, dass die Funktionen ψ_n allesamt in $L^2(\mathbb{R})$ sind (Argumentation analog zum letzten Kapitel): Man wähle z. B. $n = 0$ und erhält bis auf einen Vorfaktor als Lösung von (178) die Funktion $\psi_0(y) = e^{-\frac{1}{2}y^2}$. Beachte aber, dass im Gegensatz zum dritten Kapitel jetzt die imaginäre Einheit i in den Formeln (178)(181) mit auftritt. Mit dem Existenz- und Eindeutigkeitsresultat aus Theorem 4.4, kombiniert mit Gleichung (183), folgt jetzt, dass die Funktionen ψ_n - bis auf einen Vorfaktor - nur die Hermite-Funktionen sein können, was unseren Beweis beendet. Wir haben sogar noch mehr gezeigt: Als Konsequenz des Auftretens von i in (178) und (181) folgt sogar

$$\forall n \in \mathbb{N}_0 : \quad \psi_n = T\varphi_n = \rho i^n \varphi_n \quad (184)$$

mit einer positiven reellen Zahl ρ . Aus der Normierung der Funktion φ_0 etwa kann ρ zu $\rho = \sqrt{2\pi}$ ermittelt werden.

Korollar 4.6

1. Als Konsequenz von Theorem 4.2 und Theorem 4.3 ist die nachstehende Menge V dicht in $L^2(\mathbb{R})$:

$$V := \left\{ \sum_{j=0}^n c_j \varphi_j \mid c_j \in \mathbb{C}, \quad n \in \mathbb{N}_0 \right\} \quad (185)$$

2. Die Menge V ist jedoch kein \mathbb{C} -Hilbertraum, da sie z. B. die Folge $(v_n)_{n \in \mathbb{N}}$ enthält, die gegeben wird durch

$$v_n := \sum_{j=0}^n \frac{1}{j!} \frac{\varphi_j}{\sqrt{(\varphi_j, \varphi_j)}} \quad (186)$$

Diese Folge ist Cauchy-Folge, besitzt aber nach Konstruktion von V keinen Grenzwert in V . Wohl aber ist nach Lemma 4.3 der Raum

$$E := \left\{ \sum_{j=0}^{\infty} c_j \frac{\varphi_j}{\sqrt{(\varphi_j, \varphi_j)}} \mid c_j \in \mathbb{C}, \quad \sum_{j=0}^{\infty} |c_j|^2 < \infty \right\} \quad (187)$$

ein \mathbb{C} -Hilbertraum.

3. Als Konsequenz von Lemma 4.3 kann jede Funktion $\psi \in L^2(\mathbb{R})$ durch die Hermite-Funktionen dargestellt werden:

$$\psi = \sum_{n=0}^{\infty} c_n \varphi_n \quad (188)$$

mit eindeutig bestimmten Koeffizienten c_n , $n \in \mathbb{N}_0$. Entwicklung (188) ist im Sinne der Normkonvergenz in $L^2(\mathbb{R})$ zu verstehen.

5. Selbstadjungierte und Adjungierte Operatoren

In der Quantenmechanik begegnen wir oft Relationen vom Typ

$$AB - BA = \alpha I \quad (189)$$

wobei $A : U \rightarrow U$, $B : U \rightarrow U$ lineare Operatoren auf einem normierten \mathbb{C} -Vektorraum U sind, I die identische Abbildung auf U . Typische Beispiele hierfür waren die Operatoren D , X in (58) und $A := D + X$, $S := -D + X$ in (62) mit den Vertauschungsrelationen

$$DX - XD = I \quad AS - SA = 2I \quad (190)$$

auf dem in (57) eingeführten Vektorraum U , der mit dem Skalarprodukt von $L^2(\mathbb{R})$ ausgestattet ist. Eine erste Aussage über Stetigkeit symmetrischer linearer Operatoren hat uns der Satz von Hellinger-Toeplitz geliefert (Theorem 2.7). Wir zeigen im folgenden, dass eine Relation (189) mit $\alpha \neq 0$ für zwei Abbildungen $A, B : E \rightarrow E$ eines normierten Raums E in sich nur erfüllt werden kann, wenn mindestens eine der beiden Abbildungen unstetig ist.

Konsequenz des nachstehenden Theorems 5.2 wird also sein, dass die wichtigsten quantenmechanischen Operatoren **unstetig** sind. Dies zieht einige neue Situationen nach sich, die wir im folgenden untersuchen werden.

Definition 5.1

Es sei E ein normierter Vektorraum über einem Körper \mathbb{K} . Falls für eine Abbildung $A : E \rightarrow E$ eine Zahl $\gamma > 0$ existiert, so dass $\forall u \in E : \|Au\| \leq \gamma \|u\|$, so nennen wir den Ausdruck

$$\|A\| := \sup_{x \in E \setminus \{0\}} \frac{\|Ax\|}{\|x\|}$$

Norm des Operators A . Insbesondere heißen wir wiederum wie in Definition 2.6 den Operator A **stetig** und **beschränkt**, sofern $\forall u \in E : \|Au\| \leq \gamma \|u\|$, gilt. Die Nacheinanderausführung zweier stetiger Operatoren A, B ist wiederum stetig, und es gilt per Vereinbarung

$$\forall x \in E : (AB)x := A(Bx) \quad (191)$$

Beachte, dass die Existenz einer Zahl $\gamma > 0$ mit Eigenschaft $\forall u \in E : \|Au\| \leq \gamma \|u\|$ die Existenz des Ausdrucks $\|A\|$ nach sich zieht. Beachte fernerhin, dass für zwei stetige Operatoren $A : E \rightarrow E$, $B : E \rightarrow E$ die nachstehende Beziehung gilt:

$$\|AB\| \leq \|A\| \|B\| \quad (192)$$

Theorem 5.2 Satz von Wintner

Es seien $A : E \rightarrow E$, $B : E \rightarrow E$ beschränkte Abbildungen eines normierten Raums E über einem Körper \mathbb{K} . Dann kann eine Beziehung vom Typ

$$\forall x \in E : \quad ABx - BAx = \alpha x \quad (193)$$

mit einer reellen Zahl α nur gelten, sofern $\alpha = 0$.

Beweis (nach Wieland)

Aus der Beziehung $AB - BA = \alpha I$ (I bezeichne Identität auf E) mit beschränkten Abbildungen $A : E \rightarrow E$, $B : E \rightarrow E$ folgt

$$A^2B - BA^2 = A(AB - BA) + (AB - BA)A = 2\alpha A \quad (194)$$

$$A^3B - BA^3 = A(A^2B - BA^2) + (AB - BA)A^2 = 3\alpha A^2 \quad (195)$$

und entsprechend mit Induktion

$$\forall n \in \mathbb{N} : \quad A^n B - BA^n = n\alpha A^{n-1} \quad (196)$$

Hieraus folgt

$$\begin{aligned} n |\alpha| \|A^{n-1}\| &= \|A^{n-1}AB - BAA^{n-1}\| \\ &\leq \|A^{n-1}AB\| + \|BAA^{n-1}\| \leq 2 \|A\| \|B\| \|A^{n-1}\| \end{aligned} \quad (197)$$

Falls es ein $m \in \mathbb{N}$ gibt, so dass $A^m = 0$ und $A^{m-1} \neq 0$, so erhalten wir $m\alpha A^{m-1} = A^m B - BA^m = 0$, woraus $\alpha = 0$ folgt.

Falls $\forall n \in \mathbb{N} : A^n \neq 0$, so folgt $n|\alpha| \leq 2 \|A\| \|B\|$ für alle $n \in \mathbb{N}$, was aber nur geht, falls $\alpha = 0$. Dies liefert insgesamt den Beweis für Theorem 5.2.

Konsequenz

Wir müssen den Begriff der Symmetrie einer linearen Abbildung verfeinern, wenn wir die für die Quantenmechanik relevanten linearen Operatoren in $L^2(\mathbb{R})$ näher kennenlernen wollen. Insbesondere wird dies von großer Wichtigkeit, wenn wir das gesamte Punktspektrum $\sigma_p(A)$ eines Hilbertraum-Operators A untersuchen oder sogar bestimmen möchten.

Bemerkung 5.3

Der Begriff der “Unstetigkeit” eines linearen Operators $A : U \rightarrow E$, der auf einem Teilraum U des Hilbertraums E erklärt ist, kann nach Definition 5.1 folgendermaßen interpretiert werden: Es existiert eine Folge von normierten Vektoren $(e_n)_{n \in \mathbb{N}_0}$, so dass die Folge $(\alpha_n)_{n \in \mathbb{N}_0}$, gegeben durch $\alpha_n := \|Ae_n\|$ unbeschränkt ist.

Betrachten wir z. B. den Operator $H : U \rightarrow L^2(\mathbb{R})$, $H := -D^2 + X^2$, siehe (63), wobei der Teilraum U von $L^2(\mathbb{R})$ wie in (57) gegeben wird. Als Folge $(e_n)_{n \in \mathbb{N}_0}$ wählen wir die normierten Hermite-Funktionen. Es gilt dann $\alpha_n := \|He_n\| = (2n+1)$, wobei $n \in \mathbb{N}_0$. Klarerweise ist die Folge $(\alpha_n)_{n \in \mathbb{N}_0}$ nicht beschränkt, weshalb H kein stetiger Operator auf U sein kann.

Um systematisch mit der Unstetigkeit der quantenmechanischen Operatoren umzugehen, geben wir die folgende wichtige

Definition 5.4

Es sei E ein \mathbb{C} -Hilbertraum und $U \subseteq E$ ein dichter Teilraum in E . Weiterhin sei $A : D(A) = U \rightarrow E$ ein linearer Operator auf U . Wir nennen U seinen **Definitionsbereich** und bezeichnen ihn auch mit $D(A)$. Wir heissen die Abbildung

$$A^* : D(A^*) \rightarrow E \quad (198)$$

Adjungierte zu A , wobei der Untervektorraum $D(A^*)$ von E wie folgt definiert ist

$$y \in D(A^*) \iff \exists z \in E \quad \forall x \in D(A) : (Ax, y) = (x, z) \quad (199)$$

Die Wirkung von A^* auf $y \in D(A^*)$ wird vereinbart durch

$$A^*y := z \quad (200)$$

Wir nennen die Adjungierte A^* **adjungierten Operator** zu A , sofern $D(A^*)$ dicht in E ist.

Beispiel 5.5

Gegeben sei der endliche komplexe Spann U aller normierten Hermite-Funktionen, die wiederum mit $e_j, j \in \mathbb{N}_0$ bezeichnet werden:

$$U := \left\{ \sum_{j=0}^n c_j e_j \mid c_j \in \mathbb{C}, \quad n \in \mathbb{N}_0 \right\} \quad (201)$$

U ist Teilraum des Hilbertraums $E := \left\{ \sum_{n=0}^{\infty} c_n e_n \mid c_n \in \mathbb{C}, \quad \sum_{n=0}^{\infty} |c_n|^2 < \infty \right\}$. Wir definieren den linearen Operator $L : D(L) = U \rightarrow E$, gegeben durch

$$u = \sum_{j=0}^n c_j e_j \mapsto Lu := \sum_{j=0}^n \frac{1}{j!} c_j e_j \quad c_j \in \mathbb{C}, \quad n \in \mathbb{N}_0 \quad (202)$$

Es sei jetzt $y \in E$ und wir stellen die Frage, ob es ein $z \in E$ gibt, so dass

$$\forall x \in D(L) : (Lx, y) = (x, z) \quad (203)$$

Offensichtlich gilt

$$(Lx, y) = \left(L \sum_{j=0}^n c_j e_j, \sum_{m=0}^{\infty} \gamma_m e_m \right) = \sum_{j=0}^n \sum_{m=0}^{\infty} \frac{1}{j!} c_j \gamma_m \delta_{mj} \quad (204)$$

Wir setzen

$$z := \sum_{m=0}^{\infty} \frac{1}{m!} \gamma_m e_m \quad (205)$$

und erhalten

$$(x, z) = \left(\sum_{j=0}^n c_j e_j, \sum_{m=0}^{\infty} \frac{1}{m!} \gamma_m e_m \right) = \sum_{j=0}^n \sum_{m=0}^{\infty} c_j \frac{1}{m!} \gamma_m \delta_{mj} \quad (206)$$

Verrechnen der Kronecker- δ -Symbole in (204)(206) liefert, dass die Ausdrücke in (204) und (206) gleich sind, konkret gilt

$$(Lx, y) = (x, z) = \sum_{j=0}^n c_j \gamma_j \frac{1}{j!} \quad (207)$$

Somit existiert sogar zu jedem $y \in E$ ein z der Bauart (205), mit dem (207) gilt. D.h. die Adjungierte L^* ist auf ganz E definiert, somit dicht in E definiert. L^* ist der adjungierte Operator zu L . Für jedes $y = \sum_{m=0}^{\infty} \gamma_m e_m$ gilt

$$L^*y = z \quad \Leftrightarrow \quad L^* \sum_{m=0}^{\infty} \gamma_m e_m = z = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{1}{m!} \gamma_m e_m \quad (208)$$

und insbesondere

$$\forall m \in \mathbb{N}_0 : \quad L^*e_m = \frac{1}{m!} e_m \quad (209)$$

Wir schieben das folgende Lemma ein, um die Wirkung der Leiteroperatoren A und S aus dem dritten Kapitel auf die normierten Hermite-Funktionen zu studieren.

Lemma 5.6

Für die Wirkung der Leiteroperatoren $A, S : U \rightarrow U$, siehe (62), mit $A = D + X$ und $S = -D + X$, auf die normierten Hermite-Funktionen $e_n, n \in \mathbb{N}_0$ gilt:

$$\forall n \in \mathbb{N}_0 : \quad Ae_n = \sqrt{2n} e_{n-1} \quad Se_n = \sqrt{2n+2} e_{n+1} \quad (210)$$

Beweis

Wir wissen bereits, dass die folgenden Beziehungen gelten

$$\forall m, n \in \mathbb{N}_0 : \quad A\varphi_n = 2n\varphi_{n-1} \quad S\varphi_n = \varphi_{n+1} \quad (211)$$

$$\forall m, n \in \mathbb{N}_0 : \quad (A\varphi_n, \varphi_m) = (\varphi_n, S\varphi_m) \quad (212)$$

Kombiniert man (211) und (212), so liefert dies

$$\forall m, n \in \mathbb{N}_0 : \quad (2n\varphi_{n-1}, \varphi_m) = (\varphi_n, \varphi_{m+1}) \quad (213)$$

Falls $n = m + 1$, so schreibt sich die letzte Gleichung als

$$\forall m \in \mathbb{N}_0 : \quad 2(m+1)(\varphi_m, \varphi_m) = (\varphi_{m+1}, \varphi_{m+1}) \quad (214)$$

Somit erhalten wir - unter Verwendung der Norm $\|\varphi_m\| := \sqrt{(\varphi_m, \varphi_m)}$ für alle $m \in \mathbb{N}_0$ - die Beziehung

$$\forall m \in \mathbb{N}_0 : \quad \|\varphi_{m+1}\| = \sqrt{2m+2} \|\varphi_m\| \quad (215)$$

Hieraus folgt

$$\forall m \in \mathbb{N}_0 : \quad \frac{S\varphi_m}{\|\varphi_m\|} = \frac{\varphi_{m+1}}{\|\varphi_m\|} = \sqrt{2m+2} \frac{\varphi_{m+1}}{\|\varphi_{m+1}\|} \quad (216)$$

Dies ist gleichbedeutend mit

$$\forall m \in \mathbb{N}_0 : \quad Se_m = \sqrt{2m+2} e_{m+1} \quad (217)$$

Und analog geht auch der Beweis für die Beziehung

$$\forall m \in \mathbb{N}_0 : \quad Ae_m = \sqrt{2m} e_{m-1} \quad (218)$$

Damit haben wir genügend Werkzeuge zusammengelegt, um zu einem der wichtigsten Begriffe in der Eigenwerttheorie für Schrödinger-Gleichungen zu gelangen - der **Selbstadjungiertheit**.

Definition 5.7 Selbstadjungierter Operator

Es sei L ein linearer Operator eines \mathbb{C} -Hilbertraums E

$$L : D(L) \subseteq E \rightarrow E, \quad (219)$$

wobei L auf einem Teilraum $D(L) \subseteq E$ definiert sein soll, der dicht in E liegt. Es sei weiterhin L^* die Adjungierte von L . Der Operator L heisst **selbstadjungiert**, sofern die beiden folgenden Bedingungen erfüllt sind:

1. $D(L) = D(L^*)$,
2. $\forall x \in D(L) : \quad Lx = L^*x$

Beispiel 5.8

Wir betrachten jetzt den Operator $H : D(H) \rightarrow E = L^2(\mathbb{R})$, der gegeben wird durch

$$D(H) := \left\{ \varphi = \sum_{n=0}^{\infty} c_n e_n \in E \mid \sum_{n=0}^{\infty} |c_n|^2 4n^2 < \infty \right\} \quad (220)$$

$$\varphi \in D(H) \mapsto H \sum_{n=0}^{\infty} c_n e_n := \sum_{n=0}^{\infty} 2n c_n e_n \quad (221)$$

Es seien jetzt $x = \sum_{n=0}^{\infty} c_n e_n \in D(H)$ und $y = \sum_{m=0}^{\infty} \gamma_m e_m \in E$. Dann gilt

$$(Hx, y) = \left(\sum_{n=0}^{\infty} c_n 2n e_n, \sum_{m=0}^{\infty} \gamma_m e_m \right) \quad (222)$$

Dieser Ausdruck ist gleich

$$\sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} c_n \gamma_m 2n \delta_{mn} \quad (223)$$

und existiert nach der Cauchy-Schwarz-Ungleichung, da die Normen für Hx und y nach Voraussetzung endlich sind. Die Frage stellt sich jetzt, wann für das gegebene y ein $z \in E$ existiert, so dass für alle $x \in D(H)$ das folgende gilt:

$$(Hx, y) = (x, z) \quad (224)$$

Wir behaupten, dass mit $z := \sum_{m=0}^{\infty} \gamma_m 2m e_m$ diese Beziehung erfüllt werden kann, sofern

$$(z, z) = \sum_{m=0}^{\infty} |\gamma_m|^2 4m^2 < \infty \quad (225)$$

In der Tat gilt

$$(x, z) = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} c_n \gamma_m 2m \delta_{mn} \quad (226)$$

und dies ist gleich dem Ausdruck in (223), wie man durch Auswerten der Kronecker- δ -Symbole sieht. y ist genau dann in $D(H^*)$, sofern es also ein $z \in E$ von der Bauart $z := \sum_{m=0}^{\infty} \gamma_m 2m e_m$ gibt, so dass

$$H^* y = z \quad (227)$$

Konkret gilt

$$H^* y = H^* \sum_{m=0}^{\infty} \gamma_m e_m = z = \sum_{m=0}^{\infty} \gamma_m 2m e_m = H \sum_{m=0}^{\infty} \gamma_m e_m \quad (228)$$

D. h. aber

$$y \in D(H^*) \Rightarrow y \in D(H) \quad (229)$$

Wir zeigen jetzt auch die Umkehrung: Wir beginnen damit, dass H symmetrisch auf $D(H)$ ist, d. h. es gilt

$$\forall x, y \in D(H) : (Hx, y) = (x, Hy) \Leftrightarrow \quad (230)$$

$$\left(\sum_{n=0}^{\infty} c_n 2n e_n, \sum_{m=0}^{\infty} \gamma_m e_m \right) = \left(\sum_{n=0}^{\infty} c_n e_n, \sum_{m=0}^{\infty} 2m \gamma_m e_m \right) \quad (231)$$

Wähle jetzt $y = \sum_{m=0}^{\infty} \gamma_m e_m$ fest und setze $z := Hy$, dann schreibt sich die letzte Gleichung als

$$\exists z \in E \quad \forall x \in D(H) : (Hx, y) = (x, z) \quad (232)$$

d. h. aber $y \in D(H^*)$ und wir haben gezeigt:

$$y \in D(H) \Rightarrow y \in D(H^*) \quad (233)$$

Somit gilt insgesamt $D(H) = D(H^*)$, d.h. H ist ein selbstadjungierter Operator.

Als direkte Konsequenz aus Definition 5.7 ergibt sich jetzt, dass wir das Lemma 2.8, das die Eigenwertsituation für symmetrische - und damit nach dem Satz von Hellinger-Toeplitz, Theorem 2.7 - für beschränkte \mathbb{C} -Hilbertraum-Endomorphismen beschreibt, sofort auf die selbstadjungierten Operatoren übertragen können:

Theorem 5.9

Es sei E ein \mathbb{C} -Hilbertraum und $L : D(L) \subseteq E \rightarrow E$ sei ein selbstadjungierter Operator. Falls L Eigenwerte besitzt, so sind diese reell. Falls L mindestens zwei verschiedene Eigenwerte besitzt, so sind die zugehörigen Eigenvektoren paarweise orthogonal.

Beweis

Es seien u, v Eigenvektoren von L zu den Eigenwerten λ bzw. μ :

$$Lu = \lambda u \quad Lv = \mu v \quad (234)$$

Dann gilt einerseits

$$(Lu, v) = (\lambda u, v) = \lambda(u, v) \quad (235)$$

und andererseits wegen $u, v \in D(L) = D(L^*)$ und wegen $\forall x \in D(L) : Lx = L^*x$:

$$(Lu, v) = (u, L^*v) = (u, Lv) = (u, \mu v) = \bar{\mu}(u, v) \quad (236)$$

Falls $u = v$ und $\lambda = \mu$, so folgt hieraus $\lambda = \bar{\lambda}$, weshalb λ reelle Zahl ist. Falls $u \neq v$ und $\lambda \neq \mu$, so wissen wir nach dem soeben Bewiesenen bereits, dass λ und μ rein reelle Zahlen sind. Daher gilt insbesondere $\bar{\mu} = \mu$, und Gleichung (236) schreibt sich als

$$(Lu, v) = (u, L^*v) = (u, Lv) = (u, \mu v) = \mu(u, v) \quad (237)$$

Vergleich von (236) mit (237) ergibt nun, dass wegen $\lambda \neq \mu$ der Ausdruck (u, v) nur die Null sein kann, was zu zeigen war.

Bemerkung 5.10

Insbesondere folgt damit, dass alle Eigenvektoren des Operators H aus (220)(221) paarweise orthogonal sind: Wie wir schon wissen, sind dies gerade die Hermite-Funktionen. Weiterhin hat H nur rein reelle Eigenwerte. Auch dies deckt sich mit unseren Beobachtungen aus dem dritten bzw. dem vierten Kapitel.

Wir halten fest: Insgesamt tritt an die Stelle des symmetrischen Operators im Falle beschränkter Operatoren das Konzept des selbstadjungierten Operators im Falle unbeschränkter Operatoren. Wir werden im folgenden Kapitel auf die Spektralmethoden für selbstadjungierte Operatoren noch näher eingehen. Aufgrund der Unbeschränktheit der wichtigsten Operatoren in der Quantenmechanik müssen wir uns mit dem Konzept der Selbstadjungiertheit noch tiefer vertraut machen.

Große Vorsicht

ist beim Umgang mit selbstadjungierten Operatoren geboten! Insbesondere muss bei der Einführung eines selbstadjungierten Operators sehr genau auf die Definitionsbereiche eines Operators L bzw. seiner Adjungierten L^* geachtet werden. Einfache Argumente, wie Symmetrierelationen auf einer Orthonormalbasis reichen im allgemeinen weder, um die eventuelle Existenz von Eigenwerten zu L zu beweisen, noch um Symmetrieeigenschaften für L bzw. L^* zu gewährleisten!

Wir wollen kurz illustrieren, zu welchen merkwürdigen Situation es bei Operatoren kommen kann, die zwar symmetrisch hinsichtlich einer Basis sind, deren Adjungierte aber weder symmetrisch noch selbstadjungiert sein muss.

Illustration 5.11

Es seien $e_n, n \in \mathbb{N}_0$ wiederum die Hermite-Funktionen, U wie in (57) und $E := L^2(\mathbb{R})$. Der lineare Operator L werde festgelegt durch

$$L : D(L) = U \rightarrow U$$

$$\forall n \in \mathbb{N}_0 : e_n \mapsto Le_n := n \exp(n!)e_{n-1} + \frac{1}{n^2 + 1}e_n + (n+1) \exp((n+1)!)e_{n+1} \quad (238)$$

Dann gilt offensichtlich

$$\forall m, n \in \mathbb{N}_0 : (Le_m, e_n) = (e_m, Le_n) \quad (239)$$

und L ist symmetrisch auf $D(L)$. Beachte jedoch, dass $\sigma_p(L) = \{ \}$ gilt! D. h. L hat keine Eigenwerte. Für den adjungierten Operator gilt

$$\forall n \in \mathbb{N}_0 : L^*e_n = Le_n \quad (240)$$

und sogar

$$\forall m, n \in \mathbb{N}_0 : (L^*e_m, e_n) = (e_m, L^*e_n) \quad (241)$$

Man kann jedoch zeigen, dass trotz all dieser Beobachtungen $\sigma_p(L^*) = \mathbb{C}$ und dass auch nicht mehr alle Eigenvektoren von L^* paarweise orthogonal sind. Damit ist L^* kein selbstadjungierter Operator aber auch kein symmetrischer Operator auf seinem Definitionsbereich $D(L^*)$. Beachte, dass dies kein Widerspruch zur formalen Symmetrierelation (241) auf der Basis $\{e_n \mid n \in \mathbb{N}_0\}$ ist. Aus einer formalen Symmetrierelation (241) kann also im allgemeinen weder auf Selbstadjungiertheit noch auf Symmetrie des betrachteten Operators geschlossen werden.

Nachdem wir den außerordentlich wichtigen Begriff des selbstadjungierten Operators eingeführt haben, werden wir uns im folgenden der Struktur des Hilbertraums selbst zuwenden, in dem die Operatoren der Quantenmechanik wirken.

6. Die Hilbertraum-Struktur der Quantenmechanik

Wir beginnen mit einem weiteren Beispiel zur Adjungiertenbildung, das für uns im folgenden sehr nützlich sein wird.

Beispiel 6.1

Wir definieren die folgende Teilmenge von $L^2(\mathbb{R})$, wobei die $e_n, n \in \mathbb{N}_0$ wiederum die normierten Hermite-Funktionen bedeuten:

$$\Omega := \left\{ \psi = \sum_{n=0}^{\infty} c_n e_n \mid \sum_{n=0}^{\infty} |c_n|^2 n < \infty \right\} \quad (242)$$

Weiterhin definieren wir den Operator a durch

$$a : D(a) := \Omega \rightarrow L^2(\mathbb{R}) \quad (243)$$

$$a\psi = a \sum_{n=0}^{\infty} c_n e_n := \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_{n=0}^{\infty} c_n A e_n = \sum_{n=0}^{\infty} c_n \sqrt{n} e_{n-1} \quad (244)$$

Dann gilt insbesondere

$$\forall m, n \in \mathbb{N}_0 : (a e_m, e_n) = (e_m, a^* e_n) \quad (245)$$

und wir erhalten hieraus für die Wirkung von a^* auf die normierten Hermite-Funktionen

$$a^* e_n = \sqrt{n+1} e_{n+1} = \frac{1}{\sqrt{2}} S e_n \quad (246)$$

Wir wollen als erstes zeigen, dass

$$y \in D(a) \Rightarrow y \in D(a^*) \quad (247)$$

Es sei $y = \sum_{m=0}^{\infty} \gamma_m e_m \in D(a)$. Offensichtlich gilt für alle $\psi \in D(a) = \Omega$:

$$a^* \psi = a^* \sum_{n=0}^{\infty} c_n e_n = \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_{n=0}^{\infty} c_n \sqrt{n+1} e_{n+1} \quad (248)$$

Man kann sich leicht davon überzeugen, dass $a^* \psi = a^* \sum_{n=0}^{\infty} c_n e_n$ wieder in $L^2(\mathbb{R})$ liegt, denn es gilt

$$\sum_{n=0}^{\infty} |c_n|^2 (n+1) = \sum_{n=0}^{\infty} n |c_n|^2 + \sum_{n=0}^{\infty} |c_n|^2 \quad (249)$$

Der erste Summand auf der rechten Seite existiert, da ψ nach Voraussetzung in Ω ist. Der zweite Summand auf der rechten Seite existiert, da ψ auch in $L^2(\mathbb{R})$ ist. D.h. wir haben $y \in D(a) \Rightarrow y \in D(a^*)$ gezeigt.

Wir zeigen im folgenden, dass in diesem Beispiel in der Tat $D(a) = D(a^*)$ gilt. Sicherlich gilt nach unseren obigen Ausführungen $D(a^*) \neq \{ \}$, denn die normierten

Hermite-Funktionen liegen ja bereits in $D(a^*)$. Es sei also $y = \sum_{n=0}^{\infty} \gamma_n e_n \in D(a^*)$. Dann existiert ein $z \in E = L^2(\mathbb{R})$, so dass

$$\forall x \in D(a) : \quad (ax, y) = (x, z) \quad (250)$$

Wählen wir jetzt $x = \sum_{n=0}^{\infty} c_n e_n$ beliebig, aber fest, so erbringt die letzte Gleichung

$$\left(a \sum_{n=0}^{\infty} c_n e_n, \sum_{m=0}^{\infty} \gamma_m e_m \right) = \left(\sum_{n=0}^{\infty} c_n e_n, z \right) \quad (251)$$

Wir zeigen, dass diese Beziehung durch

$$z := \sum_{m=0}^{\infty} \gamma_m S e_m \quad (252)$$

erfüllt werden kann, wobei als Forderung $z \in \Omega$ gelten muss. Setzt man z aus (252) in (251) ein, so erhält man

$$\left(a \sum_{n=0}^{\infty} c_n e_n, \sum_{m=0}^{\infty} \gamma_m e_m \right) = \left(\sum_{n=0}^{\infty} c_n e_n, \sum_{m=0}^{\infty} \gamma_m S e_m \right) \quad (253)$$

Dies kann geschrieben werden als

$$\left(\sum_{n=0}^{\infty} c_n \sqrt{n} e_{n-1}, \sum_{m=0}^{\infty} \gamma_m e_m \right) = \left(\sum_{n=0}^{\infty} c_n e_n, \sum_{m=0}^{\infty} \gamma_m \sqrt{m+1} e_{m+1} \right) \quad (254)$$

Führt man die beiden Skalarprodukte aus, so bedeutet dies

$$\sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} c_n \sqrt{n} \gamma_m \delta_{n-1,m} = \sum_{m=0}^{\infty} \sum_{n=0}^{\infty} c_n \sqrt{m+1} \gamma_m \delta_{n,m+1} \quad (255)$$

Verrechnen der Kronecker- δ -Symbole macht (255) zu

$$\sum_{n=0}^{\infty} c_n \sqrt{n} \gamma_{n-1} = \sum_{n=0}^{\infty} c_n \sqrt{n} \gamma_{n-1} \quad (256)$$

was offensichtlich eine richtige Aussage ist. Fassen wir diese Rechnungen zusammen, so erkennen wir:

$y = \sum_{m=0}^{\infty} \gamma_m e_m$ ist genau dann in $D(a^*)$, sofern der Ausdruck $z = \sum_{m=0}^{\infty} \gamma_m S e_m$ in $L^2(\mathbb{R})$ ist. In diesem Fall gilt

$$a^* y = a^* \sum_{m=0}^{\infty} \gamma_m e_m = z = \sum_{m=0}^{\infty} \gamma_m \sqrt{m+1} e_{m+1} \quad (257)$$

$z \in L^2(\mathbb{R})$ bedeutet hierbei, dass $\sum_{m=0}^{\infty} |\gamma_m|^2 (m+1) < \infty$. Dies ist wegen $y = \sum_{m=0}^{\infty} \gamma_m e_m \in L^2(\mathbb{R})$ äquivalent zu der Forderung

$$\sum_{m=0}^{\infty} |\gamma_m|^2 m < \infty \quad (258)$$

Wir stellen abschließend die Frage, ob für dieses $y = \sum_{m=0}^{\infty} \gamma_m e_m$ auch der Ausdruck ay erklärt ist und in $L^2(\mathbb{R})$ liegt. Offensichtlich liegt y wegen (258) in $\Omega \subseteq L^2(\mathbb{R})$ und damit in $D(a) = \Omega \subseteq L^2(\mathbb{R})$. D. h. wir haben insgesamt gezeigt, dass

$$y \in D(a^*) \Rightarrow y \in D(a) \quad (259)$$

Mit der in (247) fortfolgend bis (249) bewiesenen Umkehrrichtung zu (259) gilt schließlich

$$D(a) = D(a^*) = \Omega, \quad (260)$$

was wir behauptet hatten.

Offensichtlich sind die Operatoren a und a^* - bis auf Normierung - eng mit den Operatoren A und S aus dem dritten Kapitel verwandt. Konkret gilt für die Wirkung auf die normierten Hermite-Funktionen

$$\forall n \in \mathbb{N}_0 : \quad Ae_n = \sqrt{2} ae_n = \sqrt{2n} e_{n-1} \quad (261)$$

$$\forall n \in \mathbb{N}_0 : \quad Se_n = \sqrt{2} a^* e_n = \sqrt{2n+2} e_{n+1} \quad (262)$$

Der wichtigste Unterschied ist aber derjenige der Definitionsbereiche: Der Definitionsbereich für A bzw. für S war lediglich der endliche komplexe Spann aller Hermite-Funktionen, während der Definitionsbereich für a und a^* weit größer ist, siehe (242) und (260).

Wir fassen abschließend die Relationen zwischen den Operatoren a, a^* und den normierten Hermite-Funktionen noch einmal zusammen:

$$\forall n \in \mathbb{N}_0 : \quad ae_n = \sqrt{n} e_{n-1} \quad a^* e_n = \sqrt{n+1} e_{n+1} \quad (263)$$

$$\forall n \in \mathbb{N}_0 : \quad (aa^* - a^*a)e_n = e_n \quad (264)$$

und entsprechend gilt auf der Menge

$$\Delta := \{\psi \in L^2(\mathbb{R}) \mid a\psi \in D(a^*), \quad a^*\psi \in D(a)\} \quad (265)$$

die **Oszillator-Vertauschungsrelation**

$$aa^* - a^*a = 1 \quad (266)$$

im Sinne von $\forall \psi \in \Delta : aa^*\psi - a^*a\psi = \psi$.

Im Falle endlichdimensionaler symmetrischer quadratischer Matrizen ist bekannt, dass zwei Matrizen $A, B \in \mathbb{R}^{n \times n}$ mit jeweils paarweise verschiedenen Eigenwerten genau dann die Beziehung

$$AB - BA = 0 \quad (267)$$

erfüllen, wenn sie auch gemeinsame Eigenvektoren haben. Wir geben im folgenden ein ähnliches Resultat in $L^2(\mathbb{R})$.

Definition 6.2

Es sei $A : D(A) \subseteq L^2(\mathbb{R}) \rightarrow L^2(\mathbb{R})$ linearer Operator auf seinem Definitionsbereich $D(A)$. Wir bezeichnen mit

$$K(A) := \{T : D(A) \subseteq L^2(\mathbb{R}) \rightarrow L^2(\mathbb{R}) \mid T = A - \lambda I, \lambda \in \sigma_p(A)\}$$

$$K(A) := \{ \} \Leftrightarrow \sigma_p(A) = \{ \}$$

$$\text{Eig}(A) := \{v \in D(A) \mid \exists T \in K(A) : Tv = 0\}$$

Lemma 6.3

Es seien A, B lineare Operatoren auf ihren Definitionsbereichen in $L^2(\mathbb{R})$ mit

$$\forall \psi \in C := \{v \in L^2(\mathbb{R}) \mid Av \in D(B), Bv \in D(A)\} : (AB - BA)\psi = 0 \quad (268)$$

Falls $K(A), K(B) \neq \{ \}$ und $\text{Eig}(A) \subseteq C$ sowie $\text{Eig}(B) \subseteq C$ und alle Elemente T aus $K(A), K(B)$ einen eindimensionalen Kern $N(T)$ besitzen, so gilt $\text{Eig}(A) = \text{Eig}(B)$. Hierbei verstehen wir unter dem Kern eines linearen Operators $T : D(T) \subseteq L^2(\mathbb{R}) \rightarrow L^2(\mathbb{R})$ den \mathbb{C} -Vektorraum $N(T) := \{u \in L^2(\mathbb{R}) \mid Tu = 0\}$.

Beweis

Wir nehmen an, es sei $v \in \text{Eig}(A)$. d. h. es gebe ein $\lambda \in \mathbb{C}$, so dass

$$Av = \lambda v \quad (269)$$

Dann gilt wegen $v \in C$ auch

$$BAv = \lambda Bv \Leftrightarrow ABv = \lambda Bv \quad (270)$$

Die Tatsache, dass die Elemente von $K(A)$ alle eindimensionalen Kern haben sollen, bedeutet jetzt folgendes: Mit der ursprünglichen Gleichung $Av = \lambda v$ folgt aus der Gleichung

$$(A - \lambda I)Bv = 0 \quad (271)$$

die Existenz einer Zahl $\mu \in \mathbb{C}$, so dass

$$Bv = \mu v \quad (272)$$

Dies bedeutet aber gerade, dass v auch Eigenvektor von B ist. Der gleiche Beweis kann geführt werden, wenn man anstelle von B mit dem Operator A beginnt. D.h. unter den getroffenen Voraussetzungen gilt

$$\text{Eig}(A) = \text{Eig}(B),$$

was zu zeigen war.

Beispiel 6.4

Wir betrachten die Operatoren $H_1 := a^*a$ und $H_2 := aa^*$, wobei a und a^* wie zu Beginn dieses Kapitels definiert sein sollen. Im Detail soll gelten

$$D(H_1) := \{\psi \in D(a) \mid a\psi \in D(a) = D(a^*)\} \quad (273)$$

und $D(H_2)$ analog. Nach unseren bisherigen Ausführungen wissen wir, dass $\sigma_p(H_1) = \mathbb{N}_0$ und $\sigma_p(H_2) = \mathbb{N}$. Dementsprechend ist

$$K(H_1) = \{T_n = H_1 - nI \mid n \in \mathbb{N}_0\} \quad (274)$$

und $K(H_2)$ analog. Entsprechend wird auch die Menge C wie in Lemma 6.3 konstruiert. Nach dem Existenz- und Eindeigkeitssatz, Theorem 4.4, folgt, dass die Elemente von K_1 und K_2 eindimensionalen Kern haben. Damit sind die Voraussetzung von Lemma 6.3 erfüllt und es gilt

$$\text{Eig}(H_1) = \text{Eig}(H_2),$$

und in der Tat, die Hermite-Funktionen sind die gemeinsamen - und einzigen - Eigenvektoren von H_1 und H_2 . Beachte jedoch, dass das Punktspektrum von H_1 größer als das von H_2 ist!

Wir zitieren im folgenden ohne Beweis drei wichtige Sätze aus der Funktionalanalysis, siehe z. B. [He], die für das Verständnis des abstrakten Hilbertraums wichtig sind.

Theorem 6.5 Isomorphiesatz separabler Hilberträume

Es sei E ein unendlichdimensionaler \mathbb{C} -Hilbertraum mit Skalarprodukt $(*, *)_E$. Falls es eine höchstens abzählbare Menge gibt, die dicht in E liegt, so existiert eine bijektive lineare Abbildung $J : E \rightarrow l^2$, so dass

$$\forall u, v \in E : (u, v) = \langle Ju | Jv \rangle \quad (275)$$

wobei $\langle * | * \rangle$ das Standardskalarprodukt in l^2 bedeutet.

Bemerkung

Wir nennen einen unendlichdimensionalen \mathbb{C} -Hilbertraum **separabel**, falls eine höchstens abzählbare Menge existiert, die dicht in ihm liegt. Das Theorem besagt, dass jeder separable unendlichdimensionale \mathbb{C} -Hilbertraum normisomorph zu l^2 ist.

Dieses Theorem bedeutet für die Quantenmechanik letztlich, dass das Studium der Schrödinger-Gleichung sowohl in $L^2(\mathbb{R})$ durchgeführt werden kann, das ist die sogenannte **Schrödinger-Wellenmechanik**, als auch in l^2 , das ist die sogenannte **Heisenberg-Matrizenmechanik**.

Wir betrachten zur Illustration

$$E := \left\{ \sum_{n=0}^{\infty} c_n e_n \mid \sum_{n=0}^{\infty} |c_n|^2 < \infty, c_n \in \mathbb{C} \right\}, \quad (276)$$

wobei die $e_n, n \in \mathbb{N}_0$ die normierten Hermite-Funktionen bedeuten. E ist ein unendlichdimensionaler separabler \mathbb{C} -Hilbertraum und es existiert nach Theorem 6.5 eine bijektive lineare Abbildung $J : E \rightarrow l^2$, so dass

$$\forall m, n \in \mathbb{N}_0 : (e_n, e_m) = \langle J e_n \mid J e_m \rangle \quad (277)$$

Beachten wir, dass bereits die Menge aller endlicher Linearkombinationen aus E nach Theorem 4.2 dicht in $L^2(\mathbb{R})$ liegt, so verdeutlicht dieses Beispiel den engen Zusammenhang zwischen $L^2(\mathbb{R})$ und l^2 . Man führe sich hierbei noch einmal vor Augen, dass alle Funktionen $\psi \in L^2(\mathbb{R})$, die bereits auf allen endlichen Linearkombinationen der e_n orthogonal sind, gleich 0 sein müssen.

Definition 6.6

Eine **Linearform** auf einem \mathbb{C} -Hilbertraum E ist eine \mathbb{C} -lineare Abbildung $f : E \rightarrow \mathbb{C}$. Wir nennen f stetig und beschränkt, sofern $\sup_{x \in E \setminus \{0\}} \frac{|f(x)|}{\|x\|} < \infty$.

Der folgende Satz zeigt einen tiefen Zusammenhang zwischen Skalarprodukt und Linearformen in einem Hilbertraum auf und ist die mathematische Grundlage für die **Dirac-Bra-Ket-Notation**.

Theorem 6.7 Darstellungssatz von Fréchet-Riesz

Es sei E ein \mathbb{C} -Hilbertraum mit Skalarprodukt $(*, *)_E$. Dann wird für jedes feste Element z von E durch $f(x) := (x, z)_E$ für alle $x \in E$ eine stetige Linearform auf E definiert. Umgekehrt gibt es zu jeder stetigen Linearform f auf E genau einen Vektor $z \in E$, so dass $f(x) = (x, z)_E$ für alle $x \in E$ gilt.

Wir nennen den \mathbb{C} -Vektorraum E' der stetigen Linearformen auf E den **Dualraum** oder das **Dual** zu E . Es seien $f, g \in E'$. Dann existieren eindeutige Elemente $z_f, z_g \in E$, die f, g durch die Vorschriften $f(x) := (x, z_f)_E$, $g(x) := (x, z_g)_E$ erzeugen. Durch $(f, g)_{E'} := (z_f, z_g)_E$ können wir auf E' ein Skalarprodukt definieren und erhalten die nachstehende beachtliche Aussage:

Theorem 6.8 Dualitätssatz

Jeder \mathbb{C} -Hilbertraum E ist normisomorph zu seinem Dual E' . D. h. E' ist wiederum ein \mathbb{C} -Hilbertraum.

Betrachten wir jetzt noch einmal die Situation der abgeschlossenen komplexen Spanns E aller normierten Hermite-Funktionen, definiert wie in (276). Es ist also gleich, ob man die Elemente von E der Bauart $\psi = \sum_{n=0}^{\infty} c_n e_n$ studiert oder die zugehörigen Linearformen $f = \sum_{n=0}^{\infty} c_n (e_n, *)$.

Dies gibt die Möglichkeit in die Hand, das Skalarprodukt auf einem Hilbertraum auch noch völlig anders zu verstehen: Es ist nicht nur eine Paarung zweier Elemente aus E , sondern auch die Wirkung einer Linearform f :

$$(x, y)_E = f_x(y) \quad (278)$$

Betrachten wir z.B. den Raum l^2 , so bedeutet dies: Die

bilineare Paarung $\langle x|y\rangle$

zweier Elemente $x, y \in l^2$ kann auch interpretiert werden als

Wirkung einer Linearform $\langle x|*$ auf den Vektor y

Der Tatsache, dass auch hier wiederum Element und Linearform zwei Seiten ein und derselben Medaille sind, trägt man im Hilbertraum l^2 auch dadurch Rechnung, dass man verschiedene Schreibweisen wählt. Man bezeichnet die Elemente aus l^2 von jetzt an mit $|y\rangle$ und die Element seines Dualraums mit $\langle x|$. Die Wirkung der Linearform $\langle x|$ auf das Element $|y\rangle$ des Hilbertraums l^2 ist gerade nach Fréchet-Riesz das Skalarprodukt von $|x\rangle$ mit $|y\rangle$.

Die so gewählte Notation heisst auch

Dirac-Bra-Ket-Notation “Bra” $\langle u|$ “Ket” $|v\rangle$

Wir führen diese Notationen im darstellungstheoretischen Teil der Vorlesung noch intensiver ein.

Mit diesen Ausführungen verlassen wir die eindimensionale Schrödinger-Theorie und arbeiten jetzt an den mathematischen Grundlagen der dreidimensionalen Theorie. Wie bereits im eindimensionalen Fall, wird hierbei speziellen Funktionen und zu einander paarweise orthogonalen Polynomen eine besondere Rolle zukommen. Diese Sorte spezieller Funktionen soll im nächsten Kapitel vorrangig behandelt werden.

7. Orthogonale Polynome und Faltungsstrukturen

Orthogonale Funktionensysteme spielen in der dreidimensionalen Schrödinger-Theorie eine besondere Rolle, wobei insbesondere den orthogonalen Polynomen eine Schlüsselstellung zukommt. Um dies zu illustrieren, betrachten wir die Schrödinger-Gleichung für den dreidimensionalen harmonischen Oszillator: Gesucht sind reelle Zahlen $E \in \mathbb{R}$ - eben die Energien - und zugehörige Funktionen $\psi \in C^2(\mathbb{R}^3) \cap L^2(\mathbb{R}^3)$, so dass die nachstehende Gleichung gilt

$$\left(-\frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{\partial^2}{\partial y^2} - \frac{\partial^2}{\partial z^2} + x^2 + y^2 + z^2\right) \psi(x, y, z) = E\psi(x, y, z) \quad (279)$$

für alle $(x, y, z) \in \mathbb{R}^3$. Mit den Abkürzungen

$$H(x) := -\frac{\partial^2}{\partial x^2} + x^2 \quad H(y) := -\frac{\partial^2}{\partial y^2} + y^2 \quad H(z) := -\frac{\partial^2}{\partial z^2} + z^2 \quad (280)$$

schreibt sich dies als

$$(H(x) + H(y) + H(z)) \psi(x, y, z) = E \psi(x, y, z) \quad (281)$$

Verwenden wir wiederum die (normierten) Hermite-Funktionen $e_n, n \in \mathbb{N}_0$ wie in den vergangenen Kapiteln, so erkennen wir, dass z. B. die Funktion $f : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}$ mit $f(x, y, z) := e_0(x)e_0(y)e_0(z)$ eine Lösung der Gleichung (279) zur Zahl $E = 3$ liefert:

$$\begin{aligned} (H(x) + H(y) + H(z))f(x, y, z) &= \\ (H(x)e_0)(x)e_0(y)e_0(z) + e_0(x)(H(y)e_0)(y)e_0(z) + e_0(x)e_0(y)(H(z)e_0)(z) &= \\ e_0(x)e_0(y)e_0(z) + e_0(x)e_0(y)e_0(z) + e_0(x)e_0(y)e_0(z) &= 3f(x, y, z) \end{aligned} \quad (282)$$

Diese Beobachtung lässt sich verallgemeinern und wir erhalten, indem wir die soeben durchgeführte Rechnung analog übertragen, das folgende Resultat:

Lemma 7.1

Es seien $i, j, k \in \mathbb{N}_0$ und die Funktionen $\psi_{ijk} : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}$ seien gegeben durch $(x, y, z) \mapsto \psi_{ijk}(x, y, z) := e_i(x)e_j(y)e_k(z)$, wobei die $e_n, n \in \mathbb{N}_0$ die normierten Hermite-Funktionen bedeuten. Dann gilt

$$\begin{aligned} \left(-\frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{\partial^2}{\partial y^2} - \frac{\partial^2}{\partial z^2} + x^2 + y^2 + z^2\right) \psi_{ijk}(x, y, z) &= \\ (2i + 2j + 2k + 3) \psi_{ijk}(x, y, z) \end{aligned} \quad (283)$$

Wir gelangen damit zu der folgenden

Beobachtung 7.2

Zu vorgegebenen Zahlen $E \in \mathbb{R}$ kann es durchaus mehrere Lösungen der Gleichung (279) in $C^2(\mathbb{R}^3) \cap L^2(\mathbb{R}^3)$ geben, wie man sofort an den folgenden Beispielen erkennt:

$$E = 5 \quad \Rightarrow \quad \psi_{100}, \psi_{010}, \psi_{001} \quad \text{sind Lösungen von (279)}$$

$$E = 7 \quad \Rightarrow \quad \psi_{200}, \psi_{020}, \psi_{002}, \psi_{110}, \psi_{101}, \psi_{011} \quad \text{sind Lösungen von (279)}$$

Man sagt auch, es kommt zu einer Degeneration der Eigenwerte. Verantwortlich dafür ist letztlich der symmetrische Aufbau der Differentialgleichung (279) hinsichtlich der drei Variablen (x, y, z) . Diese Erscheinungsform von Symmetrien wird uns im Laufe der Vorlesung noch öfter begegnen.

Die Hermite-Polynome bzw. Hermite-Funktionen sind ein wichtiges Beispiel für **Orthogonale Funktionensysteme**. Wir werden im folgenden noch zwei weitere orthogonale Funktionensysteme kennenlernen, die Laguerre- und die Legendre-Funktionen. Kurz zusammengefasst hier ihre Anwendungsfelder in der Quantenmechanik:

- Hermite-Funktionen Harmonische Oszillatoren
- Laguerre-Funktionen Wasserstoff-Atom
- Legendre-Funktionen Drehimpulse und Spin

Definition 7.3

Die **Hermite-Differentialgleichung** wird gegeben durch

$$H''(x) - 2xH'(x) + 2n H(x) = 0 \quad n \in \mathbb{N}_0 \quad x \in \mathbb{R} \quad (284)$$

Die **Laguerre-Differentialgleichung** wird gegeben durch

$$xL''(x) + (1-x)L'(x) + n L(x) = 0 \quad n \in \mathbb{N}_0 \quad x \in \mathbb{R} \quad (285)$$

Die **Legendre-Differentialgleichung** wird gegeben durch

$$(1-x^2)P''(x) - 2xP'(x) + n(n+1)P(x) = 0 \quad n \in \mathbb{N}_0 \quad x \in \mathbb{R} \quad (286)$$

Lemma 7.4

Zu festem Wert $n \in \mathbb{N}_0$ existieren bis auf einen konstanten Vorfaktor genau drei Polynome H, L, P vom Grade n mit reellwertigen Koeffizienten, die die drei Gleichungen (284)(285)(286) erfüllen.

Beweis

Wir betrachten z. B. die Laguerre-Differentialgleichung. Das Beweisschema bei den beiden anderen ist das gleiche. Wir zeigen zunächst zu einem fest vorgegebenen $\lambda \in \mathbb{R}$, dass die Differentialgleichung

$$xy''(x) + (1-x)y'(x) + \lambda y(x) = 0 \quad x \in \mathbb{R} \quad (287)$$

eine Potenzreihenlösung $y(x) = \sum_{j=0}^{\infty} c_j x^j$ besitzt. Einsetzen dieses Ansatzes in (287) erbringt als Koeffizientenvergleich

$$\forall j \in \mathbb{N}_0 : \quad (j+1)^2 c_{j+1} = (j-\lambda)c_j \quad (288)$$

Mit Standardargumenten aus der Analysis kann man hieraus folgern, dass es zu vorgegebenem λ bis auf einen konstanten Vorfaktor auch nur die eine, durch (288) festgelegte Potenzreihenlösung gibt. Falls jetzt $\lambda = n \in \mathbb{N}_0$, so folgt aus (288), dass die bis auf Vorfaktor eindeutige Potenzreihenlösung ein Polynom vom Grade λ ist (für $j = \lambda$ wird $c_{j+1} = 0$ und damit auch $0 = c_{j+2} = c_{j+3} = \dots$). Die so gefundene, bis auf einen Vorfaktor eindeutige Lösung ist genau die polynomiale Lösung L vom Grade n , wie im Lemma behauptet. Durch die Wahl von c_0 kann stets erreicht werden, dass es sich bei L um ein Polynom vom Grade n mit reellen Koeffizienten handelt. Dies war zu zeigen.

Theorem 7.5

Es seien H_n, L_n, P_n die nach der Aussage von Lemma 7.4 konstruierten Lösungen der Hermite-, Laguerre- bzw. Legendre-Differentialgleichung mit fester Zahl $n \in \mathbb{N}_0$. Die Funktionen H_n, L_n, P_n werden bis auf einen konstanten Vorfaktor gegeben durch

$$H_n(x) = \sum_{0 \leq 2k \leq n} (-1)^k \frac{n!}{k!(n-2k)!} (2x)^{n-2k} \quad (289)$$

$$L_n(x) = \sum_{k=0}^n \frac{n!}{k!(n-k)!} \frac{(-x)^k}{k!} \quad (290)$$

$$P_n(x) = \frac{1}{2^n n!} \sum_{0 \leq 2k \leq n} (-1)^k \frac{n!}{k!(n-k)!} \frac{(2n-2k)!}{(n-2k)!} x^{n-2k} \quad (291)$$

und erfüllen die nachstehenden Rekursionsvorschriften (n generell in \mathbb{N}_0):

$$H_{n+1}(x) - 2xH_n(x) + 2nH_{n-1}(x) = 0 \quad H_0(x) = 1, \quad H_1(x) = 2x \quad (292)$$

$$L_{n+1}(x) - (2n+1-x)L_n(x) + n^2 L_{n-1}(x) = 0 \quad L_0(x) = 1, \quad L_1(x) = 1-x \quad (293)$$

$$P_{n+1}(x) - \frac{2n+1}{n+1} x P_n(x) + \frac{n}{n+1} P_{n-1}(x) = 0 \quad P_0(x) = 1, \quad P_1(x) = x \quad (294)$$

Beweis

Die Formeln (289)(290)(291) erhält man durch Auswerten der Rekursionsgleichungen für die Entwicklungskoeffizienten, wie im Beweis zu Lemma 7.4 dargelegt.

Die Rekursionsgleichungen (292)(293)(294) sind letzten Endes eine Konsequenz der Additionstheoreme zwischen den Binomialkoeffizienten der Bauart $\frac{n!}{k!(n-k)!}$, wobei $n \in \mathbb{N}_0$ und $k \leq n$. Sie können durch direktes Nachrechnen an den Formeln (289)(290)(291) verifiziert werden. Man berechnet etwa H_{n+1} und H_{n-1} mit Hilfe von (289) und vergleicht die Binomialkoeffizienten miteinander: Man sieht, dass die beiden Polynome $H_{n+1}(x)$ und $H_{n-1}(x)$ geeignet so linear kombiniert werden können, dass das Ergebnis ein Vielfaches von $xH_n(x)$ ist. Die Argumentation bei den anderen beiden Polynomsorten geht analog.

Definition 7.6

Die gemäß (292) (293) (294) eindeutig festgelegten Lösungen $H_n, L_n, P_n, n \in \mathbb{N}_0$ der Hermite-, Laguerre- bzw. Legendre-Differentialgleichung heißen entsprechend **Hermite-Polynome** H_n , **Laguerre-Polynome** L_n , **Legendre-Polynome** P_n .

Das in Theorem 7.5 gegebene Resultat ist bereits beachtlich, doch können wir sogar noch mehr herleiten, nämlich **Orthogonalitätsrelationen** für die Polynome vom Typ $H_n, L_n, P_n, n \in \mathbb{N}_0$.

Theorem 7.7

Es seien $(H_m)_{m \in \mathbb{N}_0}, (L_m)_{m \in \mathbb{N}_0}, (P_m)_{m \in \mathbb{N}_0}$ die Folgen der polynomialen Lösungen H_n, L_n, P_n der Differentialgleichungen (284)(285)(286) zu jeweils vorgegebenem festen Wert n . Dann gelten die folgenden Orthogonalitätsrelationen

$$m, n \in \mathbb{N}_0, \quad m \neq n \Rightarrow \int_{-\infty}^{\infty} H_m(x)H_n(x)e^{-x^2} dx = 0 \quad (295)$$

$$m, n \in \mathbb{N}_0, \quad m \neq n \Rightarrow \int_0^{\infty} L_m(x)L_n(x)e^{-x} dx = 0 \quad (296)$$

$$m, n \in \mathbb{N}_0, \quad m \neq n \Rightarrow \int_{-1}^1 P_m(x)P_n(x) dx = 0 \quad (297)$$

Beweis

Die Orthogonalitätseigenschaft der Hermite-Polynome haben wir bereits behandelt, so dass wir gleich zu den Laguerre-Polynomen kommen.

Wir beginnen zunächst mit den Laguerre-Differentialgleichungen für zwei verschiedenen Werte $m, n \in \mathbb{N}_0$, also

$$xL_m''(x) + (1-x)L_m'(x) + m L_m(x) = 0 \quad (298)$$

$$xL_n''(x) + (1-x)L_n'(x) + n L_n(x) = 0 \quad (299)$$

Wir multiplizieren beide Gleichungen mit $L_n(x)$ bzw. $L_m(x)$ und subtrahieren sie voneinander. Das erbringt

$$x(L_n(x)L_m''(x) - L_m(x)L_n''(x)) + (1-x)(L_n(x)L_m'(x) - L_m(x)L_n'(x)) = (n-m)L_m(x)L_n(x) \quad (300)$$

Dies kann auch geschrieben werden als

$$(xe^{-x}(L_nL_m' - L_mL_n'))'(x) = (n-m)e^{-x}L_m(x)L_n(x) \quad (301)$$

Man bestätigt, dass (301) tatsächlich gleichbedeutend zu (300) ist, da die Exponentialfunktion hierbei gekürzt werden kann (wird niemals 0). Wir führen jetzt das Integral von 0 bis ∞ an (301) aus. In diesem Fall gilt

$$(n-m) \int_0^\infty e^{-x}L_m(x)L_n(x)dx = xe^{-x}(L_n(x)L_m'(x) - L_m(x)L_n'(x))|_0^\infty = 0 \quad (302)$$

Hierbei war wichtig, zu beachten, dass die Funktionen $L_m, m \in \mathbb{N}_0$ Polynome sind, und es somit aufgrund des Faktors e^{-x} keine Probleme beim Grenzübergang der oberen Integralgrenze nach ∞ gibt.

Somit gilt für $m \neq n$ die im Theorem aufgestellte Orthogonalitätsaussage für die Funktionen $L_m, m \in \mathbb{N}_0$.

Das Beweisverfahren für die Orthogonalität der Funktionen $P_m, m \in \mathbb{N}_0$ ist ähnlich. Man startet für $m, n \in \mathbb{N}_0$ mit den beiden Gleichungen

$$(1-x^2)P_m''(x) - 2xP_m'(x) + m(m+1)P_m(x) = 0 \quad (303)$$

$$(1-x^2)P_n''(x) - 2xP_n'(x) + n(n+1)P_n(x) = 0 \quad (304)$$

Führt man analoge Schritte wie im Falle der Funktionen $L_m, m \in \mathbb{N}_0$ durch, so erhält man schließlich die Beziehung

$$((1-x^2)(P_nP_m' - P_mP_n'))'(x) = (n(n+1) - m(m+1))P_m(x)P_n(x) \quad (305)$$

Integration und Auswertung an den Grenzen erbringt

$$0 = (1-x^2)(P_n(x)P_m'(x) - P_m(x)P_n'(x))|_{-1}^1 = (n(n+1) - m(m+1)) \int_{-1}^1 P_m(x)P_n(x)dx \quad (306)$$

Dies liefert für $m \neq n$ die behauptete Orthogonalitätsrelation für die Funktionen $P_m, m \in \mathbb{N}_0$.

Ein ähnliches Vorgehen hatten wir im Falle der Hermite-Polynome bereits am Ende des vierten Kapitels in Theorem 3.13 vorgestellt.

Damit ist der Beweis für Theorem 7.7 erbracht.

Lemma 7.8

Es gilt für alle $n \in \mathbb{N}_0$:

$$0 < \mu_n := \int_{-\infty}^{\infty} H_n(x)H_n(x)e^{-x^2} dx < \infty \quad (307)$$

$$0 < \lambda_n := \int_0^{\infty} L_n(x)L_n(x)e^{-x} dx < \infty \quad (308)$$

$$0 < \nu_n := \int_{-1}^1 P_n(x)P_n(x)dx < \infty \quad (309)$$

Beweis

Wir zeigen zunächst die Endlichkeit aller Zahlen $\mu_n, \lambda_n, \nu_n, n \in \mathbb{N}_0$. Die Endlichkeit der Zahlen $\nu_n, n \in \mathbb{N}_0$ folgt sofort aus der Tatsache, dass die Funktionen $P_n P_n$ stetige Funktionen auf dem kompakten Träger $[-1, 1]$ sind und somit ihr Maximum annehmen, welches als Abschätzung für die Integrale (309) genommen werden kann.

Wir zeigen die Endlichkeit der Zahlen $\mu_n, n \in \mathbb{N}_0$, indem wir zuerst die sogenannten **Momente** $\gamma_n, n \in \mathbb{N}_0$ der Funktion e^{-x^2} ausrechnen:

$$\gamma_n := \int_{-\infty}^{\infty} x^n e^{-x^2} dx \quad n \in \mathbb{N}_0 \quad (310)$$

Mit Hilfe partieller Integration erkennen wir für alle $n \in \mathbb{N}_0$:

$$\gamma_n = \int_{-\infty}^{\infty} x^n e^{-x^2} dx = - \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{n+1} x^{n+1} (-2x) e^{-x^2} dx \quad (311)$$

Dies ist aber gleichbedeutend mit $\gamma_n = \frac{2}{n+1} \gamma_{n+2}$ für alle $n \in \mathbb{N}_0$. Da $\gamma_0 = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} dx$ existiert und $\gamma_1 = \int_{-\infty}^{\infty} x e^{-x^2} dx = 0$, sind somit alle Zahlen $\gamma_n, n \in \mathbb{N}_0$ endlich. Da die Funktionen $H_n H_n$ Polynome vom Grade $2n$ sind, sind sie Linearkombinationen der ersten $2n+1$ Funktionen $x^j, j = 0, \dots, 2n$. Aus der Existenz der Zahlen $\gamma_n, n \in \mathbb{N}_0$ folgt somit auch die Existenz und somit die Endlichkeit der Zahlen $\mu_n, n \in \mathbb{N}_0$. Der entsprechende Beweis für die Zahlen $\lambda_n, n \in \mathbb{N}_0$ geht analog.

Die Tatsache, dass keine der Zahlen μ_n, λ_n, ν_n gleich 0 sein kann, folgt aus der Skalarprodukteigenschaft der Integrale in (307) (308) (309) und aus ihren stets von der Nullfunktion verschiedenen Integranden.

Bemerkung 7.9

Das den Laguerre-Polynomen zugeordnete Skalarprodukt vom Aussehen $(f, g) = \int_0^{\infty} e^{-t} f(t) \overline{g(t)} dt$ ist formal mit der Laplace-Transformation verwandt, der wir uns für den Rest dieses Kapitels noch zuwenden wollen. Ihrerseits steht die Laplace-Transformation in engem Bezug zu Konvolutionsstrukturen, d.h. Faltungen, und weist gewisse Ähnlichkeiten zur Fourier-Transformation (vergleiche viertes Kapitel) auf.

Definition 7.10

Es sei $x : \mathbb{R}_0^+ \rightarrow \mathbb{R}$. Es sei weiterhin

$$\Omega := \{s \in \mathbb{C} \mid |\int_0^\infty e^{-st}x(t)dt| < \infty\} \quad (312)$$

Die Funktion $y : \Omega \rightarrow \mathbb{C}, z \mapsto y(z) := \int_0^\infty e^{-zt}x(t)dt$ heisst **Laplace-Transformierte** von x . Wir schreiben auch $y = Lx$.

Bemerkung 7.11

Um zu sagen, dass eine Funktion $f(s)$ Laplace-Transformierte einer Funktion $g(x)$ ist, d.h.

$$f(s) = \int_0^\infty e^{-st}g(t)dt, \quad (313)$$

schreibt man auch abkürzend

$$g(t) \circ - \bullet f(s)$$

Um einige Beispiele für Laplace-Transformierte zu geben, hier eine kleine Liste:

$$\sin(t) \circ - \bullet \frac{1}{1+s^2}$$

$$t^n \circ - \bullet \frac{n!}{s^{n+1}}$$

$$t^n e^{\lambda t} \circ - \bullet \frac{n!}{(s-\lambda)^{n+1}}$$

Wir wenden uns jetzt dem Begriff der **Faltung** zu.

Definition 7.12

Es seien $f, g : \mathbb{R}_0^+ \rightarrow \mathbb{R}$. Wir definieren die **Faltung** $f * g$ von f mit g durch

$$f * g : \mathbb{R}_0^+ \rightarrow \mathbb{R}, t \mapsto (f * g)(t) := \int_0^t f(x)g(t-x)dx \quad (314)$$

Es gibt einen interessanten Zusammenhang zwischen Faltung und den Laplace-Transformierten. Um ihn zu formulieren, benötigen wir die Definition der exponentiell beschränkten Funktion.

Definition 7.13

Es sei $f : \mathbb{R}_0^+ \rightarrow \mathbb{R}$ und es gelte

1. $\forall b \in \mathbb{R}^+ : \int_0^b |f(t)|^2 dt < \infty$
2. $\exists \alpha, M, \gamma \geq 0 : |e^{-\gamma t} f(t)| \leq M$ für alle $t \geq \alpha \geq 0$.

Dann heisst f exponentiell beschränkt.

Hiermit gelangen wir zur Aussage des Faltungssatzes:

Theorem 7.14 Faltungssatz

Es seien $f : \mathbb{R}_0^+ \rightarrow \mathbb{R}$ und $g : \mathbb{R}_0^+ \rightarrow \mathbb{R}$ exponentiell beschränkt. Weiterhin sei mindestens eine dieser Funktionen stückweise stetig. Unter diesen Voraussetzungen gilt

$$L(f * g) = Lf Lg, \tag{315}$$

wobei das Produkt auf der rechten Seite punktweise zu verstehen ist.

Zum Beweis dieses Theorems verweisen wir z.B. auf [MW], Kapitel über Laplace-Transformation.

Beispiel 7.15

Wir illustrieren kurz die Wirkungsweise des Faltungssatzes an den beiden Funktionen $f : \mathbb{R}_0^+ \rightarrow \mathbb{R}, t \mapsto f(t) := 1$ und $g : \mathbb{R}_0^+ \rightarrow \mathbb{R}, t \mapsto g(t) := t^n$ mit einer festen Zahl $n \in \mathbb{N}_0$.

Für f und g werden die Laplace-Transformierten gegeben durch

$$(Lf)(s) := \int_0^\infty e^{-st} dt \tag{316}$$

$$(Lg)(s) := \int_0^\infty t^n e^{-st} dt \tag{317}$$

Hieraus erkennt man sofort $(Lf)(s) = \frac{1}{s}$ und nach mehrmaliger partieller Integration $(Lg)(s) = \frac{n!}{s^{n+1}}$.

Das punktweise Produkt liefert damit

$$(Lf)(s)(Lg)(s) = \frac{n!}{s^{n+2}} \tag{318}$$

Die bisherigen Schritte sind in Einklang mit der kleinen Tabelle in Bemerkung 7.11.

Berechnen wir jetzt umgekehrt die Faltung der beiden Funktionen f, g , so erhalten wir

$$(f * g)(s) = \int_0^t f(x)g(t-x)dx = \int_0^t (t-x)^n dx = \frac{1}{n+1} t^{n+1} \tag{319}$$

Entsprechend finden wir - wie bei der Funktion t^n

$$L(f * g)(s) = \int_0^\infty e^{-st} \frac{1}{n+1} t^{n+1} dt \tag{320}$$

und dies ist gleich

$$L(f * g)(s) = \frac{(n+1)!}{s^{n+2}(n+1)} = \frac{n!}{s^{n+2}} \tag{321}$$

Dies stimmt gerade mit (318) überein.

8. Die Methode des Separationsansatzes

Separationsansätze sind eine sehr geschätzte Methode, um wichtige Probleme der Mathematischen Physik und der Theorie partieller Differentialgleichungen in den Griff zu bekommen. Diese Methoden sind nicht nur auf die Quantenmechanik beschränkt, wo sie natürlicherweise eine große Rolle spielen, sondern haben allgemein mit Symmetrien von Differentialoperatoren zu tun. Ein erstes Beispiel für Separationsansätze haben wir bereits durch die Zeitabsplattung bei der Schrödinger-Gleichung in Lemma 1.2 kennengelernt.

Den Separationsansätzen liegen zum Teil tiefgehende Verbindungen zwischen Analysis und linearer Algebra zugrunde, die hierzu verwendete Theorie ist entsprechend ausgedehnt. Wir wollen stellvertretend für das interessante Phänomen der Variablenseparation zwei Anwendungsbeispiele herausgreifen, wobei das erste Beispiel aus dem Bereich der Mathematischen Modellierung stammt - das zweite Beispiel wird das Wasserstoff-Atom in der Quantenmechanik sein. In beiden Fällen kommt den zugrundeliegenden Eigenwertproblemen eine charakteristische Bedeutung zu.

Beispiel 8.1 Modellierung eines homogenen vibrierenden Strahls

Gegeben sei die partielle Differentialgleichung

$$u_{tt} + r^2 u_{xxxx} = 0 \quad 0 < x < l \quad t > 0 \quad (322)$$

mit den Anfangsbedingungen

$$u(0, t) = u_x(0, t) = 0 \quad u(l, t) = u_{xx}(l, t) = 0 \quad t \geq 0 \quad (323)$$

Hierbei bedeuten z. B. u_{xxxx} die vierte partielle Ableitung der Funktion u nach dem Ort, u_t die erste Ableitung der Funktion u nach der Zeit. $r \neq 0$ ist eine reelle Konstante, $f : (0, l) \rightarrow \mathbb{R}$ eine stetige Funktion, l ist eine positive Konstante. Wir sprechen bei den Gleichungen (432) (323) im folgenden von den **Modellgleichungen**. Gesucht sind Lösungen $u : [0, l] \times \mathbb{R}_0^+ \rightarrow \mathbb{R}$.

Lemma 8.2 Separationsansatz für die Modellgleichungen

Die Modellgleichungen (432) (323) werden durch den Ansatz

$$u(x, t) = X(x) T(t) \quad (324)$$

auf die gewöhnliche Differentialgleichung

$$T''(t) + a^2 \lambda T(t) = 0 \quad t \geq 0, \quad \lambda \in \mathbb{R} \quad (325)$$

und das Randwertproblem

$$X_{xxxx}(x) - \lambda X(x) = 0 \quad X(0) = X'(0) = 0 \quad X(l) = X_{xx}(l) = 0 \quad (326)$$

reduziert.

Beweis

Einsetzen des Ansatzes

$$u(x, t) = X(x)T(t) \quad (327)$$

in die partielle Differentialgleichung (322) liefert die Gleichung

$$X(x)T_{tt}(t) + a^2 X_{xxxx}(x)T(t) = 0 \quad (328)$$

Für $X(x) \neq 0$ und $T(t) \neq 0$ erbringt dies

$$\frac{X_{xxxx}(x)}{X(x)} = -\frac{T_{tt}(t)}{a^2 T(t)} \quad (329)$$

Vereinbaren wir die Funktionen

$$f : (0, l) \rightarrow \mathbb{R}, \quad x \mapsto f(x) := \frac{X_{xxxx}(x)}{X(x)} \quad (330)$$

$$g : \mathbb{R}^+ \rightarrow \mathbb{R}, \quad t \mapsto g(t) := -\frac{T_{tt}(t)}{a^2 T(t)} \quad (331)$$

so erhalten wir

$$\forall x \in (0, l), \quad \forall t > 0 : \quad f(x) = g(t) \quad (332)$$

und damit

$$\left(\frac{d}{dx}f\right)(x) = \left(\frac{d}{dt}g\right)(t) = 0, \quad (333)$$

d.h.

$$\forall x \in (0, l), \quad \forall t > 0 : \quad f(x) = g(t) = \lambda \quad (334)$$

Die Gleichungen $\forall x \in (0, l) : f(x) = \lambda$ und $\forall t > 0 : g(t) = \lambda$ können demnach geschrieben werden als

$$X_{xxxx}(x) = \lambda X(x) \quad T_{tt}(t) + \lambda a^2 T(t) = 0 \quad (335)$$

Die Randbedingungen in Lemma 8.2 folgen entsprechend.

Theorem 8.3

Alle Funktionen $(u_n)_{n \in \mathbb{N}}$ des Typs

$$u_n(x, t) = X_n(x)T_n(t) \quad n \in \mathbb{N} \quad (336)$$

sind Lösungen der Modellgleichungen, wobei

$$X_n(x) = \cosh \mu_n x - \cos \mu_n x - \frac{\cosh \mu_n l - \cos \mu_n l}{\sinh \mu_n l - \sin \mu_n l} (\sinh \mu_n x - \sin \mu_n x) \quad (337)$$

$$T_n(t) = \alpha_n \cos(r\mu_n^2 t) + \beta_n \sin(r\mu_n^2 t) \quad (338)$$

mit $\alpha_n, \beta_n \in \mathbb{R}$. $\mu_n, n \in \mathbb{N}$ sind die positiven Lösungen der Gleichung

$$\tan \mu_n l = \tanh \mu_n l. \quad (339)$$

Beweis

Wir zeigen zunächst, dass die Zahlen λ nur positiv sein können, wenn wir eine nichttriviale Lösung der Modellgleichungen haben wollen.

Aus der Gleichung

$$X_{xxxx} = \lambda X \quad (340)$$

folgt nach Multiplikation mit X und zweimaliger partieller Integration

$$\int_0^\lambda |X_{xx}(x)|^2 dx = \lambda \int_0^l |X(x)|^2 dx \quad (341)$$

Hieraus folgt, dass nichttriviale Lösungen X nur $\lambda > 0$ gestatten. Wir setzen jetzt

$$\lambda = \mu^4, \quad \mu > 0 \quad (342)$$

Als allgemeiner Ansatz für $X(x)$ dient mit $a, b, c, d \in \mathbb{R}$:

$$X(x) = a \cosh(\mu x) + b \sinh(\mu x) + c \cos(\mu x) + d \sin(\mu x) \quad (343)$$

Wir schließen

$$X(0) = X'(0) = 0 \quad \Rightarrow \quad c = -a, \quad d = -b \quad (344)$$

und danach

$$X(l) = X''(l) = 0 \quad \Rightarrow \quad \tan(\mu l) = \tanh(\mu l) \quad (345)$$

Graphisch z. B. erkennt man schon relativ einfach, dass es nur eine Folge von Lösungen $(\mu_n)_{n \in \mathbb{N}}$ geben kann, aber eben nicht kontinuierlich viele Lösungen μ . Damit werden die Zahlen λ_n festgelegt durch

$$\lambda_n = \mu_n^4 \quad n \in \mathbb{N} \quad (346)$$

Der zeitabhängige Teil $T_n(t)$ folgt jetzt mit Hilfe der Lösung der Gleichung (325), indem man die Zahlen $\lambda_n, n \in \mathbb{N}$ entsprechend einsetzt.

Bemerkung 8.4

Die Modellierung des homogenen vibrierenden Strahls zeigt, dass der Einbau von Randbedingungen zu einer diskreten Eigenwertstruktur in den Gleichungen

$$X_{xxxx} = \lambda X \quad T_{tt} = -\lambda a^2 T \quad (347)$$

führt. Gleichzeitig haben wir auch sehr deutlich vor Augen, wie der Separationsansatz wirkt: Es ist zu erkennen, dass die ursprüngliche partielle Differentialgleichung in zwei Teile verschiedener Variablen zerfällt, die einander gleich sein müssen. Das geht nur, wenn beide konstant sind. Wir erkennen hieran eine der wichtigsten Strategien bei Separationsansätzen: Man möchte eine partielle Differentialgleichung durch gewöhnliche Differentialgleichungen ersetzen, die leichter handzuhaben sind.

Es sei noch einmal betont, dass die Randbedingungen eine der wichtigsten Ursachen diskreter Eigenwertstrukturen bei partiellen Differentialoperatoren sind. Bezogen auf die Quantenmechanik bedeutet das, dass ihr Wahrscheinlichkeitscharakter, modelliert durch die Verwendung von L^2 -Räumen, eine der Erklärungen für die Diskretisierung d.h. die “Quantisierung” der involvierten physikalischen Größen liefert. Damit wenden wir uns wieder einem rein quantenmechanischen Beispiel zu, dem Wasserstoff-Atom, an dem wir jetzt die Methode des Separationsansatzes studieren wollen.

Definition 8.5

Es sei $V : \mathbb{R} \setminus \{0\} \rightarrow \mathbb{R}$. Der Hamiltonoperator des Potentials V in Kugelkoordinaten (r, ϑ, φ) ist der Differentialoperator

$$H := -\frac{\partial^2}{\partial r^2} - \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{Q(\vartheta, \varphi)}{r^2} + V(r) \quad (348)$$

mit Definitionsbereich

$$D(H) = C^2(\mathbb{R} \setminus \{0\} \times [0, \pi) \times [0, 2\pi)) \quad (349)$$

und Winkeloperator

$$Q(\vartheta, \varphi) = -\left(\frac{1}{\sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \sin \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} + \frac{1}{\sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}\right) \quad (350)$$

Lemma 8.6

Es sei $v : \mathbb{R} \setminus \{0\} \rightarrow \mathbb{R}$, $S : [0, \pi) \times [0, 2\pi) \rightarrow \mathbb{R}$, so dass $\varphi \in D(H)$ mit

$$\varphi(r, \vartheta, \varphi) := v(r)S(\vartheta, \varphi) \quad (351)$$

Ein hinreichendes Kriterium an die Existenz einer Zahl $\lambda \in \mathbb{R}$ mit

$$Hv(r)S(\vartheta, \varphi) = \lambda v(r)S(\vartheta, \varphi) \quad (352)$$

liegt vor, falls es eine Zahl $\mu \in \mathbb{R}$ gibt, so dass

$$Q(\vartheta, \varphi)S = \mu S \quad (353)$$

Beweis

Dies ist eine direkte Konsequenz der Definition 8.5 des Hamiltonoperators und des Separationsansatzes (351).

Es stellt sich die Frage, welche Funktionen $S(\vartheta, \varphi)$ eine Gleichung des Typs (353) erfüllen können. Kandidaten hierzu sind die Kugelflächenfunktionen. Wir skizzieren ohne Beweis kurz eine Eigenschaft von ihnen in folgendem

Lemma 8.7

Die Funktionen

$$S_{lm} : [0, \pi) \times [0, 2\pi) \rightarrow \mathbb{R}, \quad (354)$$

gegeben durch

$$S_{lm}(\vartheta, \varphi) := P_l^m(\cos \vartheta) e^{im\varphi} \quad (355)$$

wobei $l \in \mathbb{N}_0, m = -l, -l+1, \dots, 0, \dots, l, l+1$ und

$$P_l^m(x) := \frac{(-1)^m}{2^l l!} (1-x^2)^{\frac{m}{2}} \frac{d^{l+m}}{dx^{l+m}} (x^2-1)^l \quad x \in [-1, 1], \quad (356)$$

erfüllen die Gleichung

$$Q(\vartheta, \varphi) S_{lm}(\vartheta, \varphi) = l(l+1) S_{lm}(\vartheta, \varphi) \quad (357)$$

Für ein $v \in C^2(\mathbb{R}^+)$ wird die Gleichung

$$Hv(r) S_{lm}(\vartheta, \varphi) = \lambda v(r) S_{lm}(\vartheta, \varphi) \quad (358)$$

immer erfüllt, falls die Funktion $u \in C^2(\mathbb{R}^+)$, gegeben durch

$$u(r) := rv(r) \quad (359)$$

der nachstehenden Gleichung genügt:

$$-u''(r) + \frac{l(l+1)}{r^2} u(r) + V(r)u(r) = \lambda u(r) \quad (360)$$

Theorem 8.8 Existenz von Wasserstoff-Energieeigenwerten

Es seien $u, v \in C^2(\mathbb{R}^+)$ zwei Funktionen, die die Beziehung

$$u(r) = v(r)r^{l+1}e^{-\gamma r} \quad (361)$$

erfüllen, wobei u der nachstehenden Gleichung genügt ($q \in \mathbb{R} \setminus \{0\}$):

$$u''(r) - \frac{l(l+1)}{r^2} u(r) + \frac{q}{r} u(r) + \lambda u(r) = 0 \quad (362)$$

Mit den Vereinbarungen $\lambda = -\gamma^2 \in \mathbb{R}$ und $x = 2\gamma r$ gilt die Gleichung

$$rv''(r) + (2l+2-2\gamma r)v'(r) + (q-2\gamma(l+1))v(r) = 0 \Leftrightarrow \quad (363)$$

$$xv''(x) + (2l+2-x)v'(x) + \left(\frac{q}{2\gamma} - l - 1\right)v(x) = 0 \quad (364)$$

$v : \mathbb{R}^+ \rightarrow \mathbb{R}$ ist ein Polynom genau dann, wenn

$$\frac{q}{2\gamma} - l - 1 \in \mathbb{N}_0 \Leftrightarrow \exists n \in \mathbb{N}_0 : \lambda = \frac{-q^2}{4(n+l+1)^2} \quad (365)$$

9. Selbstadjungiertheit bei tridiagonalen Operatoren

In der folgenden Definition fassen wir eine Situation zusammen, die uns in der Quantenmechanik des öfteren begegnet.

Definition 9.1

Es sei E ein \mathbb{C} -Hilbertraum und $(e_n)_{n \in \mathbb{N}_0}$ eine Folge paarweise orthonormaler Vektoren in E . S sei der endliche Spann aller Elemente dieser Folge und der lineare Operator $A : D(A) \subseteq E \rightarrow E$ mit der Eigenschaft $S \subseteq D(A) \subseteq E$ werde gegeben durch die Dreiterm-Beziehung

$$Ae_k = \alpha_k e_{k-1} + \beta_k e_k + \gamma_k e_{k+1} \quad \alpha_k, \beta_k, \gamma_k \in \mathbb{C} \quad (366)$$

wobei $k \in \mathbb{N}_0, \alpha_0 = 0$. Dann heisst A **tridiagonaler Operator** auf $D(A)$. Die Doppelfolge $(m_{ij})_{i,j \in \mathbb{N}_0}$, gegeben durch

$$m_{ij} := (e_i, Ae_j) \quad i, j \in \mathbb{N}_0 \quad (367)$$

heisst **tridiagonale Matrixdarstellung** des Operators A bezüglich der Orthogonalfolge $(e_n)_{n \in \mathbb{N}_0}$.

Von besonderem Interesse für die Quantenmechanik sind die symmetrischen und selbstadjungierten Operatoren, da die ihnen zugrundeliegenden Spektralsätze die komplette quantenmechanische Information über das zu betrachtende System mathematisch modellieren. Ausserdem sind diese Begriffe zentral beim Studium von approximationstheoretischen Methoden zur Lösung der Schrödinger-Gleichung, wie es in vielen realistischen Szenarien der Fall ist.

Nachdem wir im zweiten bzw. fünften Kapitel dieser Vorlesung den Begriff des symmetrischen bzw. selbstadjungierten Operators eingeführt haben, wollen wir in diesem Kapitel vor allem Kriterien für Selbstadjungiertheit im Falle von tridiagonalen Operatoren kennenlernen. Um diese Aussagen systematisch zu erarbeiten, beginnen wir zunächst mit der Charakterisierung der Selbstadjungiertheit eines Operators A durch die Reellität des Ausdrucks (Ax, x) , wobei x alle Elemente des Definitionsbereichs von A durchläuft. Dies ist Gegenstand von

Theorem 9.2

Es sei $A : D(A) \subseteq E \rightarrow E$ ein linearer Operator auf seinem Definitionsbereich in einem \mathbb{C} -Hilbertraum E . A ist selbstadjungiert genau dann, wenn für alle $x \in D(A)$ die Beziehung $(Ax, x) = (x, Ax) = (x, A^*x) \in \mathbb{R}$ gilt.

Beweis

Es sei A selbstadjungierter Operator. Dann gilt für alle $x, y \in D(A) = D(A^*)$:

$$(Ax, y) = (x, A^*y) = (x, Ay) \quad (368)$$

Insbesondere erhalten wir hieraus

$$(Ax, x) = (x, A^*x) = (x, Ax) = \overline{(Ax, x)} \quad (369)$$

was die Reellität des Ausdrucks (Ax, x) zeigt.

Es sei jetzt umgekehrt für jedes $x \in D(A)$ der Ausdruck (Ax, x) reell. D.h.

$$(Ax, x) = (x, A^*x) = (x, Ax) \quad (370)$$

Wir erhalten dann folgende Implikationen:

$$x \in D(A) \Rightarrow (Ax, x) = (x, Ax) \Rightarrow (x, A^*x) = (A^*x, x) \Rightarrow x \in D(A^*),$$

d.h. $D(A) \subseteq D(A^*)$. Wir wollen jetzt umgekehrt unter der Voraussetzung $\forall x \in D(A) : (Ax, x) \in \mathbb{R}$ auch zeigen, dass $D(A^*) \subseteq D(A)$. Wir nehmen zunächst an, es gebe ein $u \in D(A^*)$, so dass

$$(A^*u, u) \neq (u, A^*u)$$

Dann erhalten wir den Widerspruch

$$\exists u \in D(A^*) : (A^*u, u) \neq (u, A^*u) \Leftrightarrow (u, Au) \neq (Au, u)$$

Hieraus folgt nämlich einerseits $u \in D(A)$, aber andererseits wissen wir auch, dass

$$\forall x \in D(A) : (x, Ax) = (Ax, x)$$

d.h. es muss insgesamt gelten

$$\forall x \in D(A^*) : (A^*x, x) = (x, A^*x)$$

Dies ist gleichbedeutend zu

$$\forall x \in D(A^*) : (A^*x, x) = (x, A^*x) \Leftrightarrow (Ax, x) = (x, Ax)$$

d. h. es gilt mit $x \in D(A^*)$ schließlich auch $x \in D(A)$, daher $D(A^*) \subseteq D(A)$ und somit insgesamt $D(A) = D(A^*)$.

Es ist jetzt zu zeigen, dass für alle $x, y \in D(A)$ folgendes gilt:

$$(Ax, y) = (x, A^*y) = (x, Ay) \quad (371)$$

Unter der Voraussetzung der Reellität von (Az, z) für alle $z \in D(A)$ gelten für alle $x, y \in D(A)$ die Beziehungen

$$(A(x+y), x+y) = (x+y, A(x+y)) \quad (A(x+iy), x+iy) = (x+iy, A(x+iy)) \quad (372)$$

Berechnen wir die Skalarprodukte und verwenden die Beziehungen $(Ax, x) = (x, Ax)$ und $(Ay, y) = (y, Ay)$, so gewinnen wir

$$(Ay, x) + (Ax, y) = (y, Ax) + (x, Ay) \quad (Ay, x) - (Ax, y) = (y, Ax) - (x, Ay) \quad (373)$$

Subtrahieren wir diese Beziehungen voneinander, so erhalten wir für alle $x, y \in D(A)$ das Ergebnis

$$(Ax, y) = (x, A^*y) = (x, Ay), \quad (374)$$

d.h. A ist ein selbstadjungierter Operator.

Obwohl dieses Kriterium auf den ersten Blick sehr handlich aussieht, so ist doch die Selbstadjungiertheit im Detail in vielen Fällen nicht einfach zu verifizieren. Bei den tridiagonalen Operatoren jedoch gibt es explizite Kriterien zur Selbstadjungiertheit, die an den Elementen des zugeordneten tridiagonalen Matrixschemas abgelesen werden können. Diese Kriterien herzuleiten, wird eines der Ziele dieses Kapitels sein. Das soeben bewiesene Theorem 9.2 wird hierbei sehr hilfreich sein.

Wir fahren fort mit einem Begriff, der wesentlich schwächer als der der Symmetrie oder sogar der der Selbstadjungiertheit eines linearen Operators ist.

Definition 9.3

Es sei $A : D(A) \subseteq E \rightarrow E$ mit $S \subseteq D(A)$ tridiagonaler linearer Operator auf seinem Definitionsbereich. A heißt **formal symmetrisch**, sofern

$$\forall m, n \in \mathbb{N}_0 : (Ae_m, e_n) = (e_m, Ae_n) \quad (375)$$

Es gilt das folgende

Lemma 9.4

Es sei $A : D(A) \subseteq E \rightarrow E$ tridiagonaler linearer Operator mit $S \subseteq D(A)$. Falls A symmetrisch ist, so ist A formal symmetrisch, jedoch gilt die Umkehrung dieser Aussage im allgemeinen nicht. Ist A tridiagonaler formal symmetrischer linearer Operator mit $S \subseteq D(A)$, so gilt für die Indices in der Darstellung (366) die Beziehung $\gamma_k = \overline{\alpha_{k+1}}$, $k \in \mathbb{N}_0$, d. h. insgesamt

$$Ae_k = \alpha_k e_{k-1} + \beta_k e_k + \overline{\alpha_{k+1}} e_{k+1} \quad k \in \mathbb{N}_0 \quad (376)$$

Der Beweis des Lemmas ist relativ einfach und kann weggelassen werden, für das Gegenbeispiel siehe im fünften Kapitel die Illustration 5.11 dieser Vorlesung.

Wir benutzen das Ergebnis von Lemma 9.4, um mit dem folgenden Theorem ein wichtiges Normierungsverfahren für orthogonale Polynome herzuleiten.

Theorem 9.5

Es seien $(a_n)_{n \in \mathbb{N}_0}, (c_n)_{n \in \mathbb{N}_0}$ Folgen positiver reeller Zahlen, $(b_n)_{n \in \mathbb{N}_0}$ eine Folge reeller Zahlen, d.h. es gelte insbesondere $\frac{c_{n+1}}{a_n} > 0$ für alle $n \in \mathbb{N}_0$. Weiterhin seien die Funktionen $p_n : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ gegeben durch die rekursive Vorschrift

$$xp_n(x) = a_n p_{n+1}(x) + b_n p_n(x) + c_n p_{n-1}(x) \quad x \in \mathbb{R} \quad (377)$$

mit Anfangsbedingungen $p_0(x) = 1, p_{-1}(x) := 0$. Es sei $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}^+$ eine positive Funktion mit den Eigenschaften

$$\int_{-\infty}^{\infty} x^n f(x) dx < \infty \quad \int_{-\infty}^{\infty} p_m(x) p_n(x) f(x) dx = 0 \quad (378)$$

für alle paarweise verschiedenen $m, n \in \mathbb{N}_0$. Mit den rekursiv definierten Zahlen

$$\nu_{n+1} = \sqrt{\frac{c_{n+1}}{a_n}} \nu_n \quad n \in \mathbb{N}_0 \quad \nu_0 \in \mathbb{R}^+ \quad (379)$$

erfüllen die Polynome $P_n : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$, gegeben durch

$$P_n(x) := \frac{p_n(x)}{\nu_n} \quad n \in \mathbb{N}_0 \quad x \in \mathbb{R} \quad (380)$$

die Normierungsbeziehung

$$\int_{-\infty}^{\infty} P_n(x) P_m(x) f(x) dx = \frac{1}{\nu_0} \int_{-\infty}^{\infty} p_0(x) p_0(x) dx \quad (381)$$

Beweis

Für die im Theorem definierten Polynome P_n folgt aus der Rekursionsgleichung für p_n folgende Beziehung

$$x\nu_n P_n(x) = a_n \nu_{n+1} P_{n+1}(x) + \nu_n b_n P_n(x) + \nu_{n-1} c_n P_{n-1}(x), \quad (382)$$

die gleichbedeutend ist zu

$$xP_n(x) = \frac{a_n \nu_{n+1}}{\nu_n} P_{n+1}(x) + \nu_n P_n(x) + \frac{\nu_{n-1} c_n}{\nu_n} P_{n-1}(x) \quad (383)$$

Vereinbaren wir auf dem komplexen endlichen Spann P aller Polynome $P_n, n \in \mathbb{N}_0$ die Multiplikationsabbildung X durch

$$(Xp)(x) := xp(x) \quad p \in P, \quad x \in \mathbb{R}, \quad (384)$$

statten wir fernerhin P mit Hilfe von

$$(u, v)_P := \int_{-\infty}^{\infty} u(x) \overline{v(x)} f(x) dx \quad u, v \in P \quad (385)$$

durch ein Skalarprodukt aus, so erhalten wir insbesondere

$$(XP_m, P_n)_P = (P_m, XP_n)_P \quad (386)$$

X kann daher als formal symmetrischer linearer Operator auf $D(X) \subseteq E$ aufgefasst werden, wobei $E = \overline{S}$ der Abschluss des komplexen Spans S aller Vektoren $e_n, n \in \mathbb{N}_0$ ist, die aus der Normierung der orthogonalen Polynome $p_n, n \in \mathbb{N}_0$ hervorgehen. Insbesondere gilt $S \subseteq D(X) \subseteq E$. Damit können wir auf X die Situation von Lemma 9.4 anwenden und erhalten

$$\alpha_{n+1} = \overline{\alpha_{n+1}} = \frac{a_n \nu_{n+1}}{\nu_n} \quad \alpha_n = \frac{\nu_{n-1} c_n}{\nu_n} \quad (387)$$

wobei $n \in \mathbb{N}_0$. Vergleich dieser Ausdrücke liefert somit die Beziehung

$$\frac{\nu_{n+1} a_n}{\nu_n} = \frac{\nu_n c_{n+1}}{\nu_{n+1}} \quad (388)$$

oder gleichbedeutend zu

$$\nu_{n+1} = \nu_n \sqrt{\frac{c_{n+1}}{a_n}} \quad n \in \mathbb{N}_0 \quad (389)$$

Dies war gerade die Behauptung.

Theorem 9.6 Carleman-Kriterien der Selbstadjungiertheit

Es sei $A : D(A) \subseteq E \rightarrow E$ formal symmetrischer tridiagonaler Operator mit $S \subseteq D(A)$. Die Wirkung des Operators auf die Elemente der Orthogonalbasis $(e_k)_{k \in \mathbb{N}_0}$ werde gegeben durch

$$Ae_k = b_{k-1}e_{k-1} + a_k e_k + b_k e_{k+1} \quad k \in \mathbb{N}_0 \quad (390)$$

mit $a_k \in \mathbb{R}, k \in \mathbb{N}_0$ und $b_k > 0, k \in \mathbb{N}_0$ und $b_{-1} := 0$. Weiterhin seien die Polynome $P_k : \mathbb{C} \rightarrow \mathbb{C}, k \in \mathbb{N}_0$ rekursiv gegeben durch die Beziehung

$$zP_k(z) = b_k P_{k+1}(z) + a_k P_k(z) + b_{k-1} P_{k-1}(z) \quad k \in \mathbb{N}_0 \quad (391)$$

mit Anfangsbedingungen $P_{-1}(z) := 0, z \in \mathbb{C}$ und $P_0(z) = 1, z \in \mathbb{C}$. Dann gelten folgende Kriterien:

1. Divergiert die Reihe $\sum_{k=0}^{\infty} |P_k(\alpha)|^2$ für alle nichtreellen $\alpha \in \mathbb{C}$, so ist der Operator A^* selbstadjungiert.
2. Konvergiert die Reihe $\sum_{k=0}^{\infty} |P_k(\alpha)|^2$ für ein nichtreelles $\alpha \in \mathbb{C}$, so ist A nicht selbstadjungiert.
3. Divergiert die Zahlenfolge

$$s_j := \sum_{n=1}^j \frac{1}{b_n} \quad (392)$$

für $j \rightarrow \infty$, so ist A^* ein selbstadjungierter Operator.

Beweis

Wir zeigen zunächst den zweiten Teil, nämlich dass für nichtreelles $\alpha \in \mathbb{C}$ aus der Konvergenz der Reihe

$$\sum_{k=0}^{\infty} |P_k(\alpha)|^2 \quad (393)$$

folgt, dass der Operator A nicht selbstadjungiert ist. Aus der Konvergenz dieser Reihe im Falle $\alpha = i$ folgt zunächst, dass ein Element

$$x = \sum_{k=0}^{\infty} P_k(i)e_k \quad (394)$$

existiert, für das gilt:

$$(x, x) < \infty \quad (x, e_k) = P_k(i) \quad (395)$$

Aus der Wirkung von A auf die Basisvektoren e_k ,

$$Ae_k = b_{k-1}e_{k-1} + a_k e_k + b_k e_{k+1} \quad (396)$$

folgt somit

$$(Ae_k, x) = b_{k-1}(e_{k-1}, x) + a_k(e_k, x) + b_k(e_{k+1}, x) \quad (397)$$

Mit Hilfe der zweiten Beziehung in (395) erbringt dies

$$(Ae_k, x) = b_{k-1}\overline{P_{k-1}(i)} + a_k\overline{P_k(i)} + b_k\overline{P_{k+1}(i)} \quad (398)$$

was wegen der Gleichung (391) äquivalent ist zu

$$(Ae_k, x) = -i\overline{P_k(i)} \quad (399)$$

Wegen $(e_k, x) = \overline{P_k(i)}$ liefert dies

$$(Ae_k, x) = (e_k, ix) \quad (400)$$

Somit gilt für jedes Element y des endlichen komplexen Spanns der Elemente e_n , dass

$$(Ay, x) = (y, ix) \Leftrightarrow (y, A^*x + ix) = 0 \quad (401)$$

woraus folgt:

$$A^*x = ix \quad (402)$$

Dies bedeutet aber, dass A nicht selbstadjungiert sein kann. Dieser Beweis lässt sich für jedes nichtreelle $\alpha \in \mathbb{C}$ genauso hinschreiben. Wir haben damit gezeigt, dass die Reihe (393), falls sie für ein nichtreelles $\alpha \in \mathbb{C}$ konvergiert, nach sich zieht, dass A nicht selbstadjungiert ist. Damit ist Teil 3 des Theorems bewiesen.

Um den ersten Teil des Theorems zu verifizieren, zeigen wir als nächstes, dass die Konvergenz der Reihe $\sum_{k=0}^{\infty} |P_k(i)|^2$ nicht verträglich ist mit der Erfüllung der Gleichung $A^*x = ix$ für ein $x \in D(A^*)$, $x \neq 0$.

Wir nehmen an, es gelte $A^*x = ix$ für ein $x \neq 0 \in D(A^*)$. Nach Voraussetzung ist z. B. der k -te Einheitsvektor e_k in $D(A)$. Es gilt also

$$(Ae_k, x) = (e_k, A^*x) = (e_k, ix) = -ix_k \quad (403)$$

wobei x_k dem k -ten Entwicklungskoeffizienten in $x = \sum_{j=0}^{\infty} x_j e_j$ entspricht. Somit gilt auch

$$(x, Ae_k) = ix_k \quad (404)$$

Schreiben wir die Wirkung von A auf e_k aus, so erbringt dies

$$(x, b_{k-1}e_{k-1} + a_k e_k + b_k e_{k+1}) = ix_k \quad (405)$$

Berechnung des Skalarprodukts auf der linken Seite liefert damit

$$b_{k-1}x_{k-1} + a_k x_k + b_k x_{k+1} = ix_k \quad (406)$$

Aus dieser Gleichung folgt mit Hilfe von (391) die Identität

$$x_k = P_k(i)x_0 \quad (407)$$

mit $x_0 \neq 0$. Wegen $(x, x) = \sum_{k=0}^{\infty} |x_k|^2 < \infty$ folgt damit auch

$$(x, x) = |x_0|^2 \sum_{k=0}^{\infty} |P_k(i)|^2 < \infty \quad (408)$$

D.h. die Existenz eines Elementes $x \in D(A^*)$ mit $A^*x = ix$ und die Konvergenz der Reihe $\sum_{k=0}^{\infty} |P_k(i)|^2$ können nicht gleichzeitig realisiert werden.

Wir haben damit folgendes gezeigt

$$\exists x \in D(A^*) : A^*x = ix \Rightarrow \sum_{k=0}^{\infty} |P_k(i)|^2 < \infty$$

Dies ist gleichbedeutend zu

$$\sum_{k=0}^{\infty} |P_k(i)|^2 = \infty \Rightarrow \forall x \in D(A^*) : (A^*x, x) \neq i$$

Genauso wie für i hätten wir wiederum den Beweis für jedes nichtreelle $\alpha \in \mathbb{C}$ führen können, so dass für dieses α das folgende gilt:

$$\sum_{k=0}^{\infty} |P_k(\alpha)|^2 = \infty \Rightarrow \forall x \in D(A^*) : (A^*x, x) \neq \alpha$$

Hieraus folgt die nachstehende Kette von Implikationen:

$$\forall \alpha \in \mathbb{C} \setminus \mathbb{R} : \sum_{k=0}^{\infty} |P_k(\alpha)|^2 = \infty \Rightarrow$$

$$\forall x \in D(A^*) : \{(A^*x, x)\} \cap \mathbb{C} \setminus \mathbb{R} = \{ \} \Leftrightarrow \forall x \in D(A^*) : (A^*x, x) \in \mathbb{R}$$

Nach Theorem 9.2 bedeutet dies aber schließlich die Implikation

$$\forall \alpha \in \mathbb{C} \setminus \mathbb{R} : \sum_{k=0}^{\infty} |P_k(\alpha)|^2 = \infty \Rightarrow A^* \text{ selbstadjungiert}$$

Dies war zu zeigen. Damit ist Teil 1 des Theorems bewiesen.

Wir zeigen jetzt den dritten Teil des Theorems.

Aus der Beziehung (391) erhalten wir für jedes nichtreelle $\alpha \in \mathbb{C}$ den Ausdruck

$$b_k \frac{P_{k+1}(\alpha)\overline{P_k(\alpha)} - \overline{P_{k+1}(\alpha)}P_k(\alpha)}{\alpha - \bar{\alpha}} = |P_k(\alpha)|^2 + b_{k-1} \frac{P_k(\alpha)\overline{P_{k-1}(\alpha)} - \overline{P_k(\alpha)}P_{k-1}(\alpha)}{\alpha - \bar{\alpha}} \quad (409)$$

Summation über k von $k = 0$ bis $k = n$ liefert jetzt

$$\sum_{k=0}^{n-1} |P_k(\alpha)|^2 = b_{n-1} \frac{P_n(\alpha)\overline{P_{n-1}(\alpha)} - \overline{P_n(\alpha)}P_{n-1}(\alpha)}{\alpha - \bar{\alpha}} \quad (410)$$

Wegen $P_0(\alpha) = 1$, können wir die letzte Gleichung wie folgt abschätzen

$$1 \leq b_{n-1} \frac{P_n(\alpha)\overline{P_{n-1}(\alpha)} - \overline{P_n(\alpha)}P_{n-1}(\alpha)}{\alpha - \bar{\alpha}} \quad (411)$$

Auswertung des Ausdrucks auf der rechten Seite erbringt

$$1 \leq b_{n-1} \frac{J(\overline{P_n(\alpha)}P_{n-1}(\alpha))}{\alpha - \bar{\alpha}} \quad (412)$$

Hierbei bedeute J die Imaginärteilbildung.

Die vorhergehende Beziehung können wir wiederum abschätzen durch

$$\frac{\alpha - \bar{\alpha}}{b_{n-1}} \leq |\overline{P_n(\alpha)}| |P_{n-1}(\alpha)| \quad (413)$$

Eine letzte Abschätzung liefert

$$\frac{\alpha - \bar{\alpha}}{2b_{n-1}} \leq |P_n(\alpha)|^2 + |P_{n-1}(\alpha)|^2 \quad (414)$$

Summieren wir auf beiden Seiten der Ungleichung über n , so erkennen wir folgendes:

Divergiert die Zahlenfolge $\sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{b_n}$, so divergiert auch für jedes nichtreelle $\alpha \in \mathbb{C}$ die Zahlenfolge

$$\sum_{n=0}^{\infty} |P_n(\alpha)|^2 \quad (415)$$

Nach dem ersten Teil des Theorems folgt damit aber die Selbstadjungiertheit von A^* , so dass wir insgesamt folgendes gezeigt haben:

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{b_n} = \infty \quad \Rightarrow \quad A^* \text{ selbstadjungiert}$$

Dies erbringt den Beweis für den dritten Teil des Theorems.

10. Einige gewöhnliche Differentialgleichungen

Im letzten Kapitel haben wir den Begriff der Selbstadjungiertheit bei tridiagonalen Operatoren kennengelernt. In der Tat können solchen Operatoren in vielen Fällen als Darstellungen bestimmter partieller Differentialgleichungen betrachtet werden, z. B. als Darstellungen der stationären Schrödinger-Gleichung mit einem bestimmten Potential.

Dieses Kapitel soll lediglich der Wiederholung verschiedener Darstellungen von Lösungen zu gewöhnlichen Differentialgleichungen maximal zweiter Ordnung dienen und verfolgt somit die Vertiefung einer allgemeinen Methode, die für die Analysis historisch eine große Bedeutung hat. Auch im Rahmen der Sturm-Liouville-Theorie für supersymmetrische Schrödinger-Operatoren spielen ähnliche Lösungsdarstellungen eine Rolle, so dass ein intensives Studium dieser Strukturen auch für die Quantenmechanik selbst von besonderer Wichtigkeit ist.

Lemma 10.1

Es seien f, g stetige Funktionen auf einem Intervall $[a, b] \subseteq \mathbb{R}$. Weiterhin sei $\alpha \in (a, b)$. Die Differentialgleichung

$$y'(x) + f(x)y(x) = g(x) \quad x \in (a, b) \quad (416)$$

wird durch die folgende Funktion $y : (a, b) \rightarrow \mathbb{R}$, $x \mapsto y(x)$ gelöst:

$$y(x) := e^{-F(x)} \int_{\alpha}^x g(t)e^{F(t)} dt, \quad (417)$$

Hierbei wird die Funktion $F : (a, b) \rightarrow \mathbb{R}$, $x \mapsto F(x)$ gegeben durch

$$F(x) := \int_{\alpha}^x f(t) dt \quad (418)$$

Lemma 10.2

Gegeben sei die Differentialgleichung

$$y''(x) + p(x)y'(x) + q(x)y(x) = 0 \quad x \in (a, b) \subseteq \mathbb{R} \quad (419)$$

mit stetigen Funktionen $p, q : (a, b) \rightarrow \mathbb{R}$. Es sei die zweimal differenzierbare Funktion $u : (a, b) \rightarrow \mathbb{R}$ bereits eine Lösung der Differentialgleichung (419) und u habe keine Nullstellen. Die Funktion $v : (a, b) \rightarrow \mathbb{R}$, gegeben durch

$$v(x) := u(x) \int_{\alpha}^x \frac{e^{-P(t)}}{u^2(t)} dt \quad \alpha \in (a, b) \quad (420)$$

liefert dann eine zweite nichtverschwindende, von u linear unabhängige Lösung der Gleichung (419), wobei

$$P(x) := \int_{\alpha}^x p(t) dt \quad \alpha \in (a, b) \quad (421)$$

Beweis

Der Beweis von Lemma 10.1 geschieht durch direktes Nachrechnen. Wir führen im Fall von Lemma 10.2 die einzelnen Schritte jetzt explizit vor:

Wir definieren die Funktion

$$F : (a, b) \rightarrow \mathbb{R}, \quad x \mapsto F(x) := \int_{\alpha}^x \frac{e^{-P(t)}}{u^2(t)} dt \quad (422)$$

für einen festen Wert $\alpha \in (a, b)$, wobei die Funktion P wie in der Aufgabenstellung gegeben wird durch

$$P : (a, b) \rightarrow \mathbb{R}, \quad x \mapsto P(x) := \int_{\alpha}^x p(t) dt \quad (423)$$

Demnach gilt $v(x) = u(x)F(x)$ und wir erhalten

$$v'(x) = u'(x)F(x) + \frac{e^{-P(x)}}{u(x)} \quad (424)$$

Beachte hierbei, dass u nullstellenfreie Funktion ist. Hieraus folgt

$$v''(x) = u''(x)F(x) + u'(x) \frac{e^{-P(x)}}{u^2(x)} + \frac{-p(x)e^{-P(x)}u(x) - e^{-P(x)}u'(x)}{u^2(x)} \quad (425)$$

und somit

$$v''(x) = u''(x)F(x) - \frac{p(x)e^{-P(x)}}{u(x)} \quad (426)$$

Dies liefert

$$v''(x) + p(x)v'(x) = (u''(x) + p(x)u'(x))F(x) \quad (427)$$

und daher

$$v''(x) + p(x)v'(x) + q(x)v(x) = (u''(x) + p(x)u'(x))F(x) + q(x)u(x)F(x) = \quad (428)$$

$$(u''(x) + p(x)u'(x) + q(x)u(x))F(x) = 0 \quad (429)$$

also auch

$$v''(x) + p(x)v'(x) + q(x)v(x) = 0, \quad (430)$$

d.h. die Funktion v liefert eine zweite Lösung der Differentialgleichung (419).

Falls es eine Zahl $\lambda \in \mathbb{R}$ gibt, so dass $v = \lambda u$, so gilt wegen der Nullstellenfreiheit von u auch

$$\lambda = \frac{v(x)}{u(x)} \Rightarrow 0 = \frac{d}{dx} \left(\frac{v(x)}{u(x)} \right) = \frac{d}{dx} \left(\frac{u(x)F(x)}{u(x)} \right) = F'(x) = \frac{e^{-P(x)}}{u^2(x)} \quad (431)$$

Dies ist ein Widerspruch, denn es würde dann $e^{-P(x)} = 0$ für alle $x \in (a, b)$ folgen.

Lemma 10.3

Gegeben sei die Differentialgleichung

$$y''(x) + p(x)y'(x) + q(x)y(x) = f(x) \quad x \in (a, b) \subseteq \mathbb{R} \quad (432)$$

mit stetigen Funktionen $p, q, f : (a, b) \rightarrow \mathbb{R}$. Es seien $u, v : (a, b) \rightarrow \mathbb{R}$ zwei Lösungen der Gleichung (432) im Fall $f = 0$. Falls die Funktion

$$w : (a, b) \rightarrow \mathbb{R}, \quad x \mapsto w(x) := u(x)v'(x) - u'(x)v(x) \quad (433)$$

nullstellenfrei in (a, b) ist, so ist für ein beliebiges stetiges $g : (a, b) \rightarrow \mathbb{R}$ die Funktion $y : (a, b) \rightarrow \mathbb{R}$, gegeben durch

$$y(x) := -u(x) \int_{\alpha}^x \frac{v(t)g(t)}{w(t)} dt + v(x) \int_{\alpha}^x \frac{u(t)g(t)}{w(t)} dt \quad (434)$$

eine Lösung der Gleichung

$$y''(x) + p(x)y'(x) + q(x)y(x) = g(x) \quad x \in (a, b) \subseteq \mathbb{R} \quad (435)$$

Beweis

Nach den Voraussetzung der Aufgabenstellung setzen wir

$$y(x) := -u(x)V(x) + v(x)U(x) \quad (436)$$

mit

$$U(x) := \int_{\alpha}^x \frac{u(t)g(t)}{w(t)} dt \quad V(x) := \int_{\alpha}^x \frac{v(t)g(t)}{w(t)} dt \quad (437)$$

Damit erreichen wir

$$y'(x) = -u'(x)V(x) - u(x)\frac{v(x)g(x)}{w(x)} + v'(x)U(x) + v(x)\frac{u(x)g(x)}{w(x)} \Leftrightarrow \quad (438)$$

$$y'(x) = -u'(x)V(x) + v'(x)U(x) \quad (439)$$

$$y''(x) = -u''(x)V(x) - u'(x)\frac{v(x)g(x)}{w(x)} + v''(x)U(x) + v'(x)\frac{u(x)g(x)}{w(x)} \quad (440)$$

wobei wir

$$w(x) = u(x)v'(x) - u'(x)v(x) \quad (441)$$

benutzt haben. Damit bekommen wir

$$y''(x) = -u''(x)V(x) + \frac{g(x)}{w(x)}w(x) + v''(x)U(x) \Leftrightarrow \quad (442)$$

$$y''(x) = -u''(x)V(x) + g(x) + v''(x)U(x), \quad (443)$$

und somit

$$y''(x) + py'(x) = -(u''(x) + p(x)u'(x))V(x) + g(x) + (v''(x) + p(x)v'(x))U(x) \quad (444)$$

Addieren wir hierzu

$$q(x)y(x) = -q(x)u(x)V(x) + q(x)v(x)U(x), \quad (445)$$

so erhalten wir insgesamt wegen

$$u''(x) + p(x)u'(x) + q(x)u(x) = v''(x) + p(x)v'(x) + q(x)v(x) = 0 \quad (446)$$

die Differentialgleichung

$$y''(x) + p(x)y'(x) + q(x)y(x) = g(x), \quad (447)$$

d.h. der in der Aufgabenstellung gegebene Ansatz

$$y(x) := -u(x) \int_{\alpha}^x \frac{v(t) g(t)}{w(t)} dt + v(x) \int_{\alpha}^x \frac{u(t) g(t)}{w(t)} dt \quad (448)$$

erbringt tatsächlich eine Lösung der Gleichung

$$y''(x) + p(x)y'(x) + q(x)y(x) = g(x) \quad x \in (a, b) \subseteq \mathbb{R} \quad (449)$$

Beispiel 10.4

Gegeben sei als Anwendungsbeispiel für Lemma 10.2 die homogene Differentialgleichung

$$y''(x) - \frac{2x}{1-x^2} y'(x) + \frac{2}{1-x^2} y(x) = 0 \quad x \in (0, 1) \quad (450)$$

Eine erste Lösung der Differentialgleichung

$$y''(x) - \frac{2x}{1-x^2} y'(x) + \frac{2}{1-x^2} y(x) = 0 \quad x \in (0, 1) \quad (451)$$

kann sofort gesichtet werden: $y(x) = x$ liefert $y''(x) = 0$ und damit ist klar, dass $y(x) = x$ eine Lösung von (450) ist. Im Sinne des in Lemma 10.2 vorgestellten allgemeinen Verfahrens erhalten wir für die Funktion P :

$$P(x) = \int_{\alpha}^x p(t) dt = \int_{\beta}^x \frac{-2t}{1-t^2} dt, \quad (452)$$

wobei $\alpha \in (0, 1)$. Das jetzt zu berechnende Integral

$$F(x) := \int_{\alpha}^x \frac{e^{-P(t)}}{u^2(t)} dt, \quad (453)$$

wird zu

$$F(x) = \int_{\alpha}^x \frac{e^{-\ln(1-t^2)+\ln(1-\alpha^2)}}{t^2} dt \quad (454)$$

Dies kann man schreiben als

$$F(x) = (1-\alpha^2) \int_{\alpha}^x \frac{dt}{t^2(1-t^2)} = (1-\alpha^2) \int_{\alpha}^x \left(\frac{1}{t^2} + \frac{1}{1-t^2} \right) dt \quad (455)$$

Auswerten des Integrals führt zu

$$F(x) = (1 - \alpha^2) \left(-\frac{1}{t} + \frac{1}{2} \ln \frac{1+t}{1-t}\right) \Big|_{\alpha}^x \quad (456)$$

Dies kann zunächst geschrieben werden als

$$F(x) = (1 - \alpha^2) \left(\frac{1}{2} \ln \frac{1+x}{1-x} - \frac{1}{x}\right) + c, \quad (457)$$

wobei die Konstante c gegeben wird durch

$$c := -(1 - \alpha^2) \left(\frac{1}{2} \ln \frac{1+\alpha}{1-\alpha} - \frac{1}{\alpha}\right) \quad (458)$$

Nach dem Konstruktionsprinzip für eine zweite nichtverschwindende Lösung erhalten wir jetzt eine solche Lösung durch

$$v(x) := u(x) F(x) = (1 - \alpha^2) \left(\frac{1}{2} x \ln \frac{1+x}{1-x} - 1\right) + cx \quad (459)$$

und die allgemeine Lösung der homogenen Differentialgleichung (432) ($f = 0$) durch

$$y(x) = c_1 u(x) + c_2 v(x) \quad c_1, c_2 \in \mathbb{R} \quad (460)$$

Einsetzen von $u(x) = x$ und des Ausdrucks (459) für $v(x)$ in (460) erbringt damit, dass die allgemeine Lösung y für (450) geschrieben werden kann als

$$y(x) = \alpha_1 x + \alpha_2 \left(\frac{1}{2} x \ln \frac{1+x}{1-x} - 1\right) \quad \alpha_1, \alpha_2 \in \mathbb{R} \quad (461)$$

Beispiel 10.5

Wir betrachten auf dem Intervall $(\frac{1}{2}, \frac{3}{2})$ die Differentialgleichung

$$y''(x) + \frac{1}{x} y'(x) - \frac{4}{x^2} y(x) = 0 \quad (462)$$

Eine Lösung der Differentialgleichung wird offensichtlich gegeben durch $u : (\frac{1}{2}, \frac{3}{2}) \rightarrow \mathbb{R}, x \mapsto u(x) := x^2$. Wir erhalten damit nach der Wahl $\alpha := 1$ die Funktion P durch

$$P(x) := \int_1^x \frac{1}{t} dt, \quad (463)$$

und somit erhalten wir für die Funktion F :

$$F(x) = \int_1^x \frac{e^{-\ln t}}{t^4} dt \quad (464)$$

Dies liefert eine von u linear unabhängige Lösung $w : (\frac{1}{2}, \frac{3}{2}) \rightarrow \mathbb{R}, x \mapsto w(x) := \frac{1}{x^2}$.

Im folgenden Teil dieses Kapitels beschäftigen wir uns vornehmlich mit Auflösungsverfahren nichtlinearer gewöhnlicher Differentialgleichungen.

Theorem 10.6 Bernoulli-Gleichung

Es seien $p, q : J = (a, b) \rightarrow \mathbb{R}$ mit $a < b$ stetige Funktionen und es sei $\lambda \in \mathbb{R} \setminus \{0, 1\}$. Gegeben sei die nichtlineare Bernoullische Differentialgleichung

$$y'(x) = p(x)y(x) + q(x)(y(x))^\lambda \quad x \in J \quad (465)$$

Es seien $F : J \rightarrow \mathbb{R}$ und $u : J \rightarrow \mathbb{R}$ für $x \in J$ gegeben durch

$$F(x) := \int_\alpha^x (\lambda - 1) p(t) dt \quad u(x) := e^{-F(x)} \int_\alpha^x (1 - \lambda) q(t) e^{F(t)} dt \quad (466)$$

zu einem fest vorgegebenen $\alpha \in J$. Falls u eine positive Funktion auf J ist, d.h. falls

$$\forall x \in J : \quad u(x) > 0, \quad (467)$$

dann ist die Funktion

$$y : J \rightarrow \mathbb{R} \quad x \mapsto y(x) := (u(x))^{\frac{1}{1-\lambda}} \quad (468)$$

eine Lösung der Bernoullischen Differentialgleichung (465).

Beweis

Falls eine positive Lösung $y : J \rightarrow \mathbb{R}$ existiert, für die die Bernoulli-Gleichung

$$y'(x) = p(x)y(x) + q(x)(y(x))^\lambda \quad x \in J \quad (469)$$

gilt, so können wir die Gleichung mit $(y(x))^{-\lambda}$ multiplizieren und erhalten

$$y'(x)(y(x))^{-\lambda} = p(x)y(x)^{1-\lambda} + q(x) \quad x \in J \quad (470)$$

Vereinbaren wir die Funktion $u : J \rightarrow \mathbb{R}$ durch

$$u(x) := (y(x))^{1-\lambda}, \quad (471)$$

so ist die letzte Gleichung äquivalent zu

$$\frac{1}{1-\lambda} u'(x) = p(x)u(x) + q(x) \quad x \in J \quad \Leftrightarrow \quad (472)$$

$$u'(x) + (\lambda - 1)p(x)u(x) = (1 - \lambda)q(x) \quad x \in J \quad (473)$$

Es sei jetzt $u : J \rightarrow \mathbb{R}$ eine Lösung der Gleichung (473), wie sie mit dem in Lemma 10.1 angegebenen Standardverfahren konstruiert werden kann. Falls $u(x) > 0$ auf J gilt, so ist die Funktion

$$y : J \rightarrow \mathbb{R}, \quad x \mapsto y(x) := (u(x))^{\frac{1}{1-\lambda}} \quad (474)$$

immer eine positive Funktion, die die Gleichung (469) erfüllt.

Definition 10.7

Eine Funktion $f : U \subseteq \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$ heisst homogen vom Grade $n \in \mathbb{N}_0$, sofern

1. $\forall t \in \mathbb{R} \setminus \{0\} : (x, y) \in U \Rightarrow (tx, ty) \in U$
2. $\forall t \in \mathbb{R} \setminus \{0\}, \forall (x, y) \in U : f(tx, ty) = t^n f(x, y)$

Beispiel 10.8

1. Es sei $f : U = \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$ gegeben durch $f(x, y) := x^3 - xy^2$. Dann ist f eine homogene Funktion vom Grade 3.
2. Es sei $U := \mathbb{R}^2 \setminus (\{(0, s) \mid s \in \mathbb{R}\} \cup \{(s, 0) \mid s \in \mathbb{R}\})$. Die Funktion $f : U \rightarrow \mathbb{R}$, gegeben durch $f(x, y) = \frac{y}{x} - \frac{x}{y}$ ist homogen vom Grade 0.

Definition 10.9

Es sei $f : U \subseteq \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$ homogen vom Grade 0. Dann heisst die Differentialgleichung $y'(x) = f(x, y(x))$ Differentialgleichung vom homogenen Typ.

Theorem 10.10 Differentialgleichung vom homogenen Typ

Es sei $f : U \subseteq \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$ homogen vom Grade 0 und es gelte $U \cap \{(0, s) \mid s \in \mathbb{R}\} = \{ \}$. Weiterhin sei $\{(1, s) \mid s \in \mathbb{R}\} \cap U \neq \{ \}$ und es sei $J \subseteq \mathbb{R}$ eine Menge, für die gelte

$$J \subseteq \{x \in \mathbb{R} \mid \exists y \in \mathbb{R} : (x, y) \in U\} \quad (475)$$

Falls eine differenzierbare Funktion $u : J \rightarrow \mathbb{R}$, existiert, die die Differentialgleichung

$$\forall x \in J : u'(x) = \frac{1}{x} (f(1, u(x)) - u(x)) \quad (476)$$

erfüllt, dann ist die Funktion

$$y : J \rightarrow \mathbb{R}, \quad x \mapsto y(x) := xu(x) \quad (477)$$

eine Lösung der homogenen Gleichung

$$\forall x \in J : y'(x) = f(x, y(x)) \quad (478)$$

Beweis

Wir nehmen an, es gebe ein $J \subseteq \{x \in \mathbb{R} \mid \exists y \in \mathbb{R} : (x, y) \in U\}$ und eine differenzierbare Funktion $u : J \rightarrow \mathbb{R}$ mit der Eigenschaft

$$\forall x \in J : u'(x) = \frac{1}{x} (f(1, u(x)) - u(x)) \quad (479)$$

Dann folgt

$$\forall x \in J : xu'(x) = f(1, u(x)) - u(x) \quad (480)$$

Wegen der Homogenität von f vom Grade 0 ist dies äquivalent zu

$$\forall x \in J : xu'(x) = f(x, xu(x)) - u(x), \quad (481)$$

und dies ist gleichbedeutend mit

$$\forall x \in J : (xu)'(x) = f(x, xu(x)) \quad (482)$$

Definiert man jetzt die Funktion $y : J \rightarrow \mathbb{R}$ durch

$$x \mapsto y(x) := xu(x), \quad (483)$$

so schreibt sich die letzte Beziehung als

$$\forall x \in J : y'(x) = f(x, y(x)) \quad (484)$$

d.h. y erfüllt auf J unter den genannten Bedingungen die Differentialgleichung vom homogenen Typ.

Beispiel 10.11

Es sei die folgende Differentialgleichung gegeben

$$y'(x) = f(x, y(x)) = \frac{2\sqrt{xy(x)} - y(x)}{x} \quad (485)$$

Wählt man $U := \{(x, y) \in \mathbb{R}^2 \mid xy > 0\}$, so erkennt man, dass $f : U \rightarrow \mathbb{R}$ homogen vom Grade 0 ist. Wenden wir den Inhalt von Theorem 10.10 an, so bietet es sich an, die Differentialgleichung

$$u'(x) = \frac{1}{x} (f(1, u(x)) - u(x)) = \frac{1}{x} (2\sqrt{u(x)} - 2u(x)) \quad (486)$$

zu betrachten. Vereinbart man $u : J = \mathbb{R}^+ \rightarrow \mathbb{R}$ durch

$$u(x) := \left(1 + \frac{c}{x}\right)^2 \quad c > 0, \quad (487)$$

so erkennt man, dass diese Funktion die Differentialgleichung (486) erfüllt. Vereinbart man jetzt die Funktion

$$y : J = \mathbb{R}^+ \rightarrow \mathbb{R}, \quad x \mapsto y(x) := xu(x) = x \left(1 + \frac{c}{x}\right)^2 \quad (488)$$

so rechnet man relativ leicht nach, dass damit die Funktion y der ursprünglichen Differentialgleichung genügt:

$$y'(x) = f(x, y(x)) = \frac{2\sqrt{xy(x)} - y(x)}{x} \quad (489)$$

Wir zitieren im folgenden zwei Lemmata, die beide aus der mehrdimensionalen Analysis folgen. Das erste Lemma ist eine Konsequenz der Kettenregel, das zweite Lemma eine Konsequenz des Satzes von Schwarz über die Vertauschung partieller Ableitungen.

Lemma 10.12

Es sei f stetig differenzierbare Funktion $f : R := [a, b] \times [c, d] \rightarrow \mathbb{R}$ mit $a, b, c, d \in \mathbb{R}, a < b, c < d$. Für ein festes $\alpha \in \mathbb{R}$ sei

$$\Omega(\alpha) := \{(x, y) \in R \mid f(x, y) = \alpha\} \tag{490}$$

$$D(\alpha) := \{x \in \mathbb{R} \mid \exists y \in \mathbb{R} : (x, y) \in \Omega(\alpha)\} \tag{491}$$

Falls auf einem Intervall $J := (s, t) \subseteq D(\alpha)$ eine stetig differenzierbare Funktion $y : J \rightarrow \mathbb{R}$ existiert, so dass

$$\forall x \in U : f(x, y(x)) = \alpha, \tag{492}$$

so erfüllt f die Differentialgleichung

$$y'(x) \left(\frac{\partial f}{\partial y} \right)(x, y(x)) + \left(\frac{\partial f}{\partial x} \right)(x, y(x)) = 0 \tag{493}$$

Lemma 10.13

Es sei die Differentialgleichung

$$y'(x)Q(x, y(x)) + P(x, y(x)) = 0 \tag{494}$$

gegeben, wobei $P, Q : R \rightarrow \mathbb{R}$ stetig differenzierbare Funktionen sind. Eine notwendige Bedingung an die Existenz einer stetig differenzierbaren Funktion $f : R \rightarrow \mathbb{R}$ mit

$$\frac{\partial f}{\partial x} = P \quad \frac{\partial f}{\partial y} = Q \tag{495}$$

in R ist die Gradientenfeldgleichung

$$\frac{\partial P}{\partial y} = \frac{\partial Q}{\partial x} \tag{496}$$

im Rechteck R .

Die Kombination beider Lemmata führt zu einem sehr mächtigen Werkzeug, um mit einem bestimmten Typ nichtlinearer gewöhnlicher Differentialgleichungen umzugehen. Wir veranschaulichen dies in folgendem

Beispiel 10.14

Es sei die Differentialgleichung

$$(4y(x) - x)y'(x) = \frac{3}{2}x^2 + y(x) \quad (497)$$

gegeben. In der Notation des Lemmas 10.13 bedeutet dies

$$P(x, y) = 3x^2 + 2y \quad Q(x, y) = 2(x - 4y) \quad (498)$$

Offensichtlich erfüllen diese Funktionen auch die notwendige Bedingung

$$\frac{\partial P}{\partial y} = \frac{\partial Q}{\partial x} \quad (499)$$

zur Existenz einer stetig differenzierbaren Funktion f mit

$$\frac{\partial f}{\partial x} = P \quad \frac{\partial f}{\partial y} = Q \quad (500)$$

in einem geeignet gewählten Rechteck $R \subseteq \mathbb{R}^2$. Wir erhalten jetzt folgendes:

$$\frac{\partial f}{\partial x} = P \quad \Rightarrow \quad f(x, y) = x^3 + 2xy + g(y) \quad (501)$$

mit einer zunächst unbekanntem Funktion g

$$\frac{\partial f}{\partial y} = Q \quad \Rightarrow \quad 2x + g'(y) = 2(x - 4y) \quad \Rightarrow \quad g'(y) = -8y \quad (502)$$

Dies legt die Funktion f bis auf eine additive Konstante fest:

$$f(x, y) = x^3 + 2xy - 4y^2 + c \quad (503)$$

Aus der Beziehung

$$f(x, y) = x^3 + 2xy - 4y^2 + c = \alpha \in \mathbb{R} \quad (504)$$

folgt jetzt durch Differentiation nach x die Beziehung

$$2x^2 + 2xy'(x) + 2y(x) - 8y(x)y'(x) = 0 \quad (505)$$

was unsere ursprüngliche Differentialgleichung (497) ist. Die Gleichung (504) liefert bei festem $\alpha \in \mathbb{R}$ zu dieser Differentialgleichung eine implizite Lösung, sofern diese Gleichung zum vorgegebenen Wert von α in der Form $y = y(x)$ aufgelöst werden kann.

Definition 10.15 Euler-Multiplikator

Es sei $R \subseteq \mathbb{R}^2$ ein Rechteck und $P, Q : R \rightarrow \mathbb{R}$ stetig differenzierbare Funktionen, die nicht notwendigerweise die Beziehung

$$\frac{\partial P}{\partial y} = \frac{\partial Q}{\partial x} \quad (506)$$

in R erfüllen. Eine stetig differenzierbare Funktion $M : R \rightarrow \mathbb{R}$ mit der Eigenschaft

$$\frac{\partial(MP)}{\partial y} = \frac{\partial(MQ)}{\partial x} \quad (507)$$

heißt **Euler-Multiplikator**.

Falls die Differentialgleichung (499) also bei vorgegebenen P, Q nicht in ganz R erfüllt ist, so kann man versuchen, einen Euler-Multiplikator M anhand von (507) zu konstruieren, so dass sich wiederum die Situation der Lemmata 10.12 und 10.13 anwenden lässt.

Beispiel 10.16

Es sei $R : [1, 2] \times [1, 2]$ und die zu betrachtende Differentialgleichung

$$y'(x) Q(x, y(x)) + P(x, y(x)) = 0 \quad (508)$$

soll auf R untersucht werden. Hierbei seien

$$Q(x, y) = 2y^3x^4 + x^2y^2 \quad P(x, y) = 3y^4x^3 + y^3x \quad (509)$$

Die Differentialgleichung (499) ist auf R nicht erfüllt. Betrachten wir jedoch die Funktion

$$M : R \rightarrow \mathbb{R}, \quad (x, y) \mapsto M(x, y) := \frac{1}{xy^2}, \quad (510)$$

so gilt die Differentialgleichung (507) und dies liefert die neue Differentialgleichung

$$y'(x)(2y(x)x^3 + x) + (3y^2(x)x^2 + y(x)) = 0, \quad (511)$$

die auf die implizite Lösungsgestalt

$$y^2(x)x^3 + y(x)x = c \quad (512)$$

mit einer reellen Konstante c führt. In Abhängigkeit der gewählten Konstante c sind die jetzt möglichen Lösungen $y(x)$ durch Auflösung der Gleichung (512) zu untersuchen.

11. Einführung zu Kompakten Symmetrischen Operatoren

Wir haben zu Beginn im zweiten Kapitel, Theorem 2.3, den Spektralsatz für symmetrische lineare Abbildungen in endlichdimensionalen reellen Vektorräumen erwähnt und es als eine der Zielsetzungen ausgegeben, diesen Satz unter bestimmten Bedingungen in die Theorie unendlichdimensionaler Hilberträume hineinzutragen. Wir skizzieren im folgenden die Situation bei kompakten symmetrischen Operatoren, wo wir sehr viel Gemeinsamkeiten mit dem endlichdimensionalen Fall erkennen werden.

Entscheidend hierfür ist zunächst der Begriff des kompakten Operators, den wir an folgender Überlegung motivieren wollen.

Es sei $(x_n)_{n \in \mathbb{N}}$ irgendeine beschränkte Folge im \mathbb{C} -Hilbertraum l^2 mit Standard-Orthonormalbasis $(e_j)_{j \in \mathbb{N}}$. Somit kann jedes Element x_n der Folge in der folgenden Form geschrieben werden:

$$x_n = \sum_{j=1}^{\infty} x_j^n e_j \quad x_j^n \in \mathbb{C}, \quad n \in \mathbb{N} \quad (513)$$

Die Abbildung $K : D(K) \subseteq l^2 \rightarrow l^2$ sei so konstruiert, dass $(x_n)_{n \in \mathbb{N}} \subseteq D(K)$ und es gelte

$$Kx_n := \frac{1}{n!} x_n^n e_n \quad (514)$$

In diesem Fall haben wir also die Situation, dass wir aus dem Abbild $(Kx_n)_{n \in \mathbb{N}}$ der beschränkten Folge $(x_n)_{n \in \mathbb{N}}$ in jedem Fall eine konvergente Teilfolge auswählen können.

Diese Situation erinnert an das Kriterium für Folgenkompaktheit und gibt Anlaß zu folgender, allgemein gefasster

Definition 11.1

Eine lineare Abbildung K eines normierten Raumes E in einen normierten Raum F heisst **kompakt**, wenn das Bild $(Kx_n)_{n \in \mathbb{N}}$ jeder beschränkten Folge $(x_n)_{n \in \mathbb{N}}$ eine konvergente Teilfolge enthält.

Wir wollen zielstrebig zu einem Resultat gelangen, das uns ein hinreichendes Kriterium dafür in die Hand gibt, wann ein in l^2 agierender Operator kompakt ist. Dies ist von großer Bedeutung, etwa für Tridiagonaloperatoren, wie sie in der Quantenmechanik ständig auftreten. Es wird uns ein spektraltheoretisches Werkzeug zu ihrer Behandlung liefern.

Als erstes vergewissern wir uns der Tatsache, dass jeder kompakte Operator sogar stetig ist:

Lemma 11.2

Es sei K ein kompakter Operator des normierten Raumes E in den normierten Raum F . Dann ist K stetig, d. h. es existiert insbesondere der Ausdruck

$$\|K\| := \sup_{x \in E \setminus \{0\}} \frac{\|Kx\|}{\|x\|}$$

Beweis

Wir nehmen an, dass K unstetig, d.h. unbeschränkt ist. Dann existiert eine Folge $(x_n)_{n \in \mathbb{N}}$ mit $x_n \in E$, sowie $\|x_n\| = 1$ und $\|Kx_n\| \geq n$ ab einem gewissen Index $N \in \mathbb{N}$. Offensichtlich ist die Folge beschränkt, und daher gilt insbesondere für jede Teilfolge $(x_{n_j}) \subseteq (x_n)$, dass

$$\|Kx_{n_j}\| \geq n_j \tag{515}$$

ab einem gewissen Index $N_j \in \mathbb{N}$. Dies bedeutet aber, dass keine der aus den Elementen Kx_{n_j} gebildeten Folgen konvergieren können. Dies ist jedoch ein Widerspruch zu der geforderten Eigenschaft der Kompaktheit von K . Somit ist K in der Tat stetig.

Um das erwähnte hinreichende Kriterium für die Kompaktheit von Operatoren in l^2 herzuleiten, benötigen wir zudem das folgende Lemma, das eine Aussage darüber macht, wann ein kompakter Operator als Grenzelement einer Folge kompakter Abbildungen aufgefasst werden kann:

Lemma 11.3

Konvergiert die Folge der kompakten Abbildungen K_n eines normierten Raumes E in einen Banachraum F gleichmäßig gegen K , so ist K ein kompakter Operator.

Beweis

Wir folgen dem in "Funktionalanalysis" von Harro Heuser, [He], Kapitel 5, dargelegten Beweis. Es sei $(x_i)_{i \in \mathbb{N}}$ eine beschränkte Folge in E , d.h. es gebe eine positive Zahl γ , so dass

$$\forall i \in \mathbb{N} : \quad \|x_i\| \leq \gamma \tag{516}$$

Dann existiert eine Teilfolge $(x_{1i})_{i \in \mathbb{N}} \subseteq (x_i)_{i \in \mathbb{N}}$, so dass die Folge, welche aus den Elementen $K_1 x_{1i}$ gebildet wird, für $i \rightarrow \infty$ konvergiert.

Dementsprechend können wir auch eine Teilfolge $(x_{i2})_{i \in \mathbb{N}} \subseteq (x_{1i})_{i \in \mathbb{N}}$ konstruieren, so dass $K_2 x_{i2}$ konvergiert etc.

Dieses Verfahren wenden wir iterativ an und erkennen, dass die Folge $(y_i)_{i \in \mathbb{N}}$ der Diagonalglieder, gegeben durch

$$y_i := x_{ii} \quad i \in \mathbb{N} \tag{517}$$

ab einem gewissen Index eine Teilfolge jeder der Folgen $(x_{k1}), (x_{k2}), \dots$ ist. Somit konvergiert die Folge $(K_n y_i)_{i \in \mathbb{N}}$ für jeden Operator K_n . Es werde jetzt ein $\epsilon > 0$

beliebig gewählt und ein $n_0 \in \mathbb{N}_0$ vorgegeben, so dass

$$\|K_{n_0} - K\| < \epsilon \quad (518)$$

Beachte hierbei, dass die Operatoren K_n allesamt stetig sind und die geforderte Voraussetzung der gleichmäßige Konvergenz der Operatoren K_n gegen K bedeutet, dass die Operatoren $K_n - K$ stetig sind, daher eine Norm $\|K_n - K\|$ besitzen, und dass diese Norm für $n \rightarrow \infty$ gegen 0 geht.

Fixieren wir jetzt $i_0 \in \mathbb{N}$ so, dass für $i, k \geq i_0$ stets

$$\|K_{n_0}y_i - K_{n_0}y_k\| \leq \epsilon \quad (519)$$

so erhalten wir insgesamt:

$$\begin{aligned} \|Ky_i - Ky_k\| &\leq \|Ky_i - K_{n_0}y_i\| + \|K_{n_0}y_i - K_{n_0}y_k\| + \|K_{n_0}y_k - Ky_k\| < \\ &\epsilon\|y_i\| + \epsilon + \epsilon\|y_k\| \leq (2\gamma + 1)\epsilon \end{aligned} \quad (520)$$

Dies bedeutet aber, dass die Folge $(Ky_k)_{k \in \mathbb{N}}$ eine Cauchyfolge im Banachraum F ist und somit gegen ein Grenzelement in F konvergiert. D.h. diese Folge ist insbesondere eine konvergente Teilfolge von $(Kx_i)_{i \in \mathbb{N}}$. Da $(x_i)_{i \in \mathbb{N}}$ eine beliebige beschränkte Folge war, bedeutet dies aber gerade die Kompaktheit von K .

Dies erbringt uns jetzt ein hinreichendes Kriterium für die Kompaktheit von Operatoren in l^2 :

Lemma 11.4

Es sei $(\alpha_{ik})_{i,k \in \mathbb{N}}$ eine unendliche Matrix mit

$$\sum_{i=1}^{\infty} \sum_{k=1}^{\infty} |\alpha_{ik}|^2 < \infty \quad (521)$$

Fernerhin sei $x = (\xi_1, \xi_2, \dots)$ ein beliebiges Element in l^2 . Die Abbildung $K : l^2 \rightarrow l^2$ sei gegeben durch

$$Kx := K(\xi_1, \xi_2, \dots) := \left(\sum_{k=1}^{\infty} \alpha_{1k} \xi_k, \dots, \sum_{k=1}^{\infty} \alpha_{nk} \xi_k, \dots \right) \quad (522)$$

Dann ist K ein kompakter Operator auf l^2 .

Beweis

Wir folgen auch hier wiederum der Darstellung in [He]. Zunächst folgt aus der Cauchy-Schwarz-Ungleichung, dass für jedes $x = (\xi_1, \xi_2, \dots)$ in l^2 die Reihen $\sum_{k=1}^{\infty} \alpha_{ik} \xi_k$ konvergieren, und dass fernerhin

$$\sum_{i=1}^{\infty} \left| \sum_{k=1}^{\infty} \alpha_{ik} \xi_k \right|^2 \leq \sum_{i=1}^{\infty} \sum_{k=1}^{\infty} |\alpha_{ik}|^2 \sum_{k=1}^{\infty} |\xi_k|^2 \quad (523)$$

Damit ist klar, dass K in der Tat l^2 nach l^2 abbildet. Die Linearität der Abbildung K ist nach ihrer Definition klar. Ihre Stetigkeit und damit Beschränktheit erkennt man wie folgt:

$$\|Kx\| \leq \sqrt{\sum_{i,k \in \mathbb{N}} |\alpha_{ik}|^2} \|x\| \quad (524)$$

für beliebiges $x \in l^2$. Definieren wir die Operatoren

$$K_n : l^2 \rightarrow l^2, \quad x = (\xi_1, \xi_2, \dots) \mapsto K_n x := \left(\sum_{k=1}^{\infty} \alpha_{1k} \xi_k, \dots, \sum_{k=1}^{\infty} \alpha_{nk} \xi_k, 0, 0, \dots \right), \quad (525)$$

so gilt

$$\|Kx - K_n x\| \leq \sqrt{\sum_{i=n+1}^{\infty} \sum_{k=1}^{\infty} |\alpha_{ik}|^2} \|x\| \quad (526)$$

für alle $x \in l^2$ und daher

$$\|K - K_n\| \leq \sqrt{\sum_{i=n+1}^{\infty} \sum_{k=1}^{\infty} |\alpha_{ik}|^2} \quad (527)$$

Für $n \rightarrow \infty$ geht die rechte Seite dieser letzten Beziehung gegen 0, und daher konvergieren die K_n gleichmäßig gegen K . Nach Lemma 11.3 ist aber damit K ein kompakter Operator in l^2 .

Wir geben schließlich den Entwicklungssatz für kompakte symmetrische Operatoren in einem komplexen Hilbertraum.

Theorem 11.5

Genau dann gilt für einen linearen Operator A eines \mathbb{C} -Hilbertraums E die Darstellung

$$Ax = \sum_{n=1}^{\infty} \mu_n(x, u_n) u_n \quad (528)$$

für jedes beliebige $x \in E$ und mit einer endlichen oder gegen 0 strebenden festen Folge reeller Zahlen $(\mu_n)_{n \in \mathbb{N}}$ sowie einer festen Folge orthonormaler Vektoren $(u_n)_{n \in \mathbb{N}}$, sofern A symmetrisch und kompakt ist.

Beweis

Wir zeigen im folgenden lediglich, dass $\|A\|$ gleich dem Betrag des größten Eigenwerts von A ist und verweisen den interessierten Leser auf die vollständige Beweisführung von Theorem 11.5 in [He], Kapitel 5.

Für den symmetrischen Operator A gilt zunächst

$$\sup_{\|x\|=1} |(Ax, x)| = \|A\|$$

Dieses Fakt erkennt man wie folgt: Bezeichnen wir zunächst

$$\nu(A) := \sup_{\|x\|=1} |(Ax, x)|,$$

so erkennen wir trivialerweise $\nu(A) \leq \|A\|$. Wir wollen jetzt zeigen, dass auch $\nu(A) \geq \|A\|$ gilt. Für eine beliebige Zahl $\lambda > 0$ erhalten wir

$$\begin{aligned} & 4 \|Ax\|^2 = \\ & (A(\lambda x + \frac{1}{\lambda}Ax), \lambda x + \frac{1}{\lambda}Ax) - (A(\lambda x - \frac{1}{\lambda}Ax), \lambda x - \frac{1}{\lambda}Ax) \\ & \leq \nu(A) (\|\lambda x + \frac{1}{\lambda}Ax\|^2 + \|\lambda x - \frac{1}{\lambda}Ax\|^2) \\ & = 2\nu(A)(\lambda^2\|x\|^2 + \frac{1}{\lambda^2}\|Ax\|^2) \end{aligned} \quad (529)$$

wobei wir in der letzten Beziehung den Parallelogrammsatz

$$\|x + y\|^2 + \|x - y\|^2 = \|x\|^2 + \|y\|^2 \quad (530)$$

für beliebige Vektoren x, y des zugrundegelegten Hilbertraums benutzt haben.

Setzen wir jetzt

$$\lambda^2 = \frac{\|Ax\|}{\|x\|} \quad (531)$$

so erhalten wir die gesuchte Abschätzung $\|Ax\| \leq \nu(A)\|x\|$. Letzteres gilt insbesondere auch im Fall $x = 0$. Insgesamt haben wir damit $\|A\| = \nu(A)$ gezeigt. Infolgedessen existiert eine Folge $(x_n)_{n \in \mathbb{N}}$ und eine Zahl $\mu \in \mathbb{R}$ mit $\mu = \|A\| > 0$, so dass

$$\|x_n\| = 1 \quad (Ax_n, x_n) \rightarrow \mu \quad (532)$$

für $n \rightarrow \infty$. Aus der Ungleichung

$$\begin{aligned} 0 \leq \|Ax_n - \mu x_n\|^2 &= \|Ax_n\|^2 - 2\mu (Ax_n, x_n) + \mu^2 \|x_n\|^2 \leq \\ & \|A\|^2 - 2\mu (Ax_n, x_n) + \|A\|^2 \end{aligned} \quad (533)$$

folgt insbesondere

$$Ax_n - \mu x_n \rightarrow 0 \quad (534)$$

Aufgrund der Kompaktheit von A besitzt die Folge $(Ax_n)_{n \in \mathbb{N}}$ eine konvergente Teilfolge (Ax_{n_k}) und somit folgt aus der letzten Gleichung, dass x_{n_k} gegen ein normiertes Element $u \in E$ strebt. Weiterhin gilt

$$Au - \mu u = 0 \quad (535)$$

d.h. u ist wegen $|\mu| = \|A\|$ Eigenvektor von A zum Eigenwert $\|A\|$ bzw. $-\|A\|$. Damit gilt aber

$$|(Au, u)| = \sup_{\|x\|=1} |(Ax, x)|$$

Auf der anderen Seite ist jeder Vektor u , der der letzten Gleichung genügt, ein Eigenvektor von A zu den Eigenwerten $\|A\|$ bzw. $-\|A\|$. Dies kann verdeutlicht werden, in dem die Folgeelemente x_n alle zu u gewählt werden.