4. Orthogonale Funktionensysteme

Wir haben bereits eine Reihe von orthogonalen Funktionensystemen als Beispiele von Orthogonalsystemen in Hilberträumen kennengelernt (Legendrefunktionen, Hermitefunktionen, Laguerrefunktionen). Wir wollen diese Funktionensysteme im Folgenden als Lösungen von Differentialgleichungen diskutieren, die in der Quantenmechanik auftauchen, typischerweise nach Anwendung eines Separationsansatzes auf partiellen Differentialgleichungen. Zur Einordnung dieser und vieler anderer wichtiger gewöhnlicher Differentialgleichungen der Physik führen wir zunächst die Sturm-Liouville-Gleichungen ein. Weil der Sturm-Liouville-Operator hermitesch ist, sind die Lösungen der Sturm-Liouville-Gleichung Orthogonalsysteme reeller Funktionen. Damit erschließt sich ein wichtiger Zusammenhang zwischen der Theorie der linearen Operatoren auf Hilberträumen und den linealen Differentialgleichungen der Quantenmechanik.

4.1 Sturm-Liouville-Gleichungen

Die Sturm-Liouville-Gleichungen haben die allgemeine Form

$$p(x)\frac{d^2y}{dx^2} + r(x)\frac{dy}{dx} + q(x)y + \lambda\rho(x)y = 0 \text{ mit } r(x) = \frac{dp(x)}{dx}\,, \tag{4.1}$$

wobei p, q und r reelle Funktionen von x sind. (Für den Term $\lambda\rho(x)y$ findet man auch die Vorzeichenkonvention $-\lambda\rho(x)y$). Wir wollen uns jetzt vergewissern, dass die Lösungen der Sturm-Liouville-Gleichungen mit geeigneten Randbedingungnen Eigenfunktionen eines hermiteschen Operators sind. Gl. (4.1) kann als

$$\mathcal{L}(y) = \lambda\rho(x)y \qquad \text{mit } \mathcal{L} \equiv -\left[p(x)\frac{d^2}{dx^2} + r(x)\frac{d}{dx} + q(x)\right] \tag{4.2}$$

geschrieben werden. Unter Verwendung von $r(x) = p'(x)$ lässt sich Gl. (4.2) umschreiben als

$$(py')' + qy + \lambda\rho y = 0 \tag{4.3}$$

wobei $'$ die Ableitung nach x bedeutet. Damit können wir

$$\mathcal{L}y = -(py')' - qy = \lambda\rho y \tag{4.4}$$

schreiben und erhalten den Sturm-Liouville-Operator in der Form

$$\mathcal{L} \equiv -\left[\frac{d}{dx}\left(p(x)\frac{d}{dx}\right) + q(x)\right] \tag{4.5}$$

Hermitezität des Sturm-Liouville-Operators

Jetzt zeigen wir, dass der lineare Operator $\mathcal{L}$ selbstadjungiert ist. Der adjungierte Operator $\mathcal{L}^\dagger$ zu $\mathcal{L}$ ist hier definiert als

$$\int_a^b dx\, f^*(x)\big[\mathcal{L}g(x)\big] = \int_a^b dx\,\big[\mathcal{L}^\dagger f(x)\big]^* g(x) + \text{ Randterme} \tag{4.6}$$

Der adjungierte Operator kann also durch partielle Integration gefunden werden. Falls $\mathcal{L}^\dagger = \mathcal{L}$, wird $\mathcal{L}$ selbstadjungiert genannt. Wenn zusätzlich von den Funktionen, auf die der Operator wirkt, oder vom Operator selbst, Randbedingungen erfüllt werden, sodass die Randterme in Gl. (4.6) verschwinden, dann ist der Operator hermitesch im Intervall $a \leqslant x \leqslant b$. In diesem Fall gilt

$$\int_a^b dx\, f^*(x)\big[\mathcal{L}g(x)\big] = \int_a^b dx\,\big[\mathcal{L}f(x)\big]^* g(x) \tag{4.7}$$

Falls der Sturm-Liouville-Operator die Randbedingungen

$$\big[y_i^* p y_j'\big]_{x=a} = \big[y_i^* p y_j'\big]_{x=b} \quad \forall\, i,j \tag{4.8}$$

bzw.

$$\big[y_i^* p y_j'\big]_{x=a}^{x=b} = 0 \tag{4.9}$$

erfüllt, dann ist $\mathcal{L}$ im Intervall $[a,b]$ hermitesch. Es gibt viele Möglichkeiten, wie die Funktionen y_i und ihre Ableitungen y_i' diese Randbedingungen erfüllen können, sodass die Klasse der Probleme, die zu hermiteschen Sturm-Liouville-Operatoren führen, sehr groß ist. Wir zeigen nun die Hermitezität von $\mathcal{L}$ unter diesen Voraussetzungen, indem wir die Gleichung $\mathcal{L}y = -(py')' - qy$ in die Definitionsgleichung des hermiteschen Operators (4.7) einsetzen; für die linke Seite finden wir:

$$-\int_a^b dx\left[y_i^*(py_j')' + y_i^* q y_j\right]dx = \underbrace{-\int_a^b dx\, y_i^*(py_j')'}_{(1)} - \int_a^b dx\, y_i^* q y_j\, dx$$

Wir integrieren den ersten Term zweimal partiell:

$$(1) = \underbrace{\left[y_i^* p y_j'\right]_a^b}_{=0 \text{ (Randbed.)}} + \int_a^b dx\,(y_i^*)' p y_j' = \underbrace{\left[(y_i^*)' p y_j\right]_a^b}_{=0 \text{ (Randbed.)}} - \int_a^b dx\,\left((y_i^*)' p\right)' y_j$$

und damit

$$-\int_a^b dx\,\left[y_i^*(p y_j')' + y_i^* q y_j\right] = -\int_a^b dx\,\left[y_j\left(p (y_i^*)'\right)' + y_j q y_i^*\right]$$

d.h. der Sturm-Liouville-Operator ist in dem Intervall $a \leqslant x \leqslant b$ hermitesch.

Transformation von Differentialgleichungen auf Sturm-Liouville-Form

Jede Differentialgleichung zweiter Ordnung der Form

$$p(x)y'' + r(x)y' + q(x)y + \lambda\rho(x)y = 0 \tag{4.10}$$

kann auf Sturm-Liouville-Form gebracht werden, indem man mit einem geeigneten integrierenden Faktor multipliziert; dieser ist

$$F(x) = \exp\left\{\int^x du \frac{r(u) - p'(u)}{p(u)}\right\} \tag{4.11}$$

Damit erhält Gl. (4.10) die Sturm-Liouville-Form

$$\left[F(x)p(x)y'\right]' + F(x))q(x)y + \lambda F(x)\rho(x)y = 0 \tag{4.12}$$

mit einer anderen nichtnegativen Gewichtsfunktion $F(x)\rho(x)$ als zuvor. In Tab. 4.1 sind die Koeffizienten p, q, λ und ρ zur Sturm-Liouville-Gleichung

$$-(py')' - qy = \lambda\rho y \tag{4.13}$$

für eine Reihe wichtiger Differentialgleichungen der Physik angegeben.

Beispiel:
Die Laguerre-Differentialgleichung

$$xy'' + (1-x)y' + ny = 0 \tag{4.14}$$

ist in Sturm-Liouville-Form zu bringen.
Mit der Identifikation $p(x) = x$, $r(x) = 1 - x$, $p'(x) = 1$ finden wir für den integrierenden Faktor (Gl. (4.11)):

$$F(x) = \exp\left\{\int^x du\,\frac{1-u-1}{u}\right\} = \exp\left\{-\int^x du\right\} = e^{-x}$$

Gleichung	Funktionen	$p(x)$	$q(x)$	λ	$\rho(x)$
Laguerre	$L_n(x)$	xe^{-x}	0	r	e^{-x}
Assoziierte Laguerre	$L_n^m(x)$	$x^{m+1}e^{-x}$	0	r	$x^m e^{-x}$
Legendre	$P_n(x)$	$1-x^2$	0	$l(l+1)$	1
Assoziierte Legendre	$P_n^m(x)$	$1-x^2$	$-\frac{m^2}{1-x^2}$	$l(l+1)$	1
Tschebyscheff	$T_n(x)$	$\sqrt{1-x^2}$	0	r^2	$\frac{1}{\sqrt{1-x^2}}$
Hermite	$H_n(x)$	e^{-x^2}	0	$2r$	e^{-x^2}
Einfach harmonische		1	0	ω^2	1

Tabelle 4.1: Sturm-Liouville-Form für wichtige gewöhnliche Differentialgleichungen der Physik.

Einsetzen in Gl. (4.12) ergibt

$$\Rightarrow \left[e^{-x}xy'\right]' + ne^{-x}y = 0$$

Damit lesen wir für die Koeffizienten der Sturm-Liouvillegleichung der Form (4.13) ab: $p(x) = xe^{-x}$, $q(x) = 0$, $\lambda = n$, $\rho(x) = e^{-x}$, wie in Tabelle 4.1 angegeben.

Lösung der Laguerre-Gleichung

Die Laguerre-Differentialgleichung ist gegeben durch

$$xy''(x) + (1-x)y'(x) + ny(x) = 0\,, \qquad n \in \mathbb{N}_0\,, \quad x \in \mathbb{R} \tag{4.15}$$

Lemma 4.1. Zu festem Wert $n \in \mathbb{N}_0$ existiert ein bis auf einen konstanten Vorfaktor eindeutiges Polynom y vom Grade n mit reellwertigen Koeffizienten, das diese Gleichung erfüllt.

Beweis:
Wir zeigen zunächst für fest vorgegebenes $\lambda \in \mathbb{R}$, dass die Differentialgleichung

$$xy''(x) + (1-x)y'(x) + \lambda y(x) = 0 \tag{4.16}$$

eine Potenzreihenlösung

$$y(x) = \sum_{j=0}^{\infty} c_j x^j \tag{4.17}$$

besitzt. Es gilt:

$$y'(x) = \sum_{j=1}^{\infty} j c_j x^{j-1} = \sum_{j=0}^{\infty} (j+1) c_{j+1} x^j$$

$$y''(x) = \sum_{j=2}^{\infty} j(j-1) c_j x^{j-2} = \sum_{j=1}^{\infty} j(j+1) c_{j+1} x^{j-1}$$

Einsetzen in Gl. (4.16) und Koeffizientenvergleich ergibt:

$$\sum_{j=1}^{\infty} j(j+1) c_{j+1} x^j + \underbrace{(1-x) \sum_{j=0}^{\infty} (j+1) c_{j+1} x^j}_{\sum_{j=0}^{\infty}(j+1)c_{j+1}x^j - \sum_{j=0}^{\infty} j c_j x^j} + \lambda \sum_{j=0}^{\infty} c_j x^j = 0$$

$$\Rightarrow \sum_{j=0}^{\infty} \left[j(j+1) c_{j+1} + (j+1) c_{j+1} - j c_j + \lambda c_j \right] x^j = 0$$

$$\Rightarrow (j+1)^2 c_{j+1} = (j-\lambda) c_j \quad \forall\, j \in \mathbb{N}_0 \tag{4.18}$$

Für festes λ hat diese Lösung nur eine bis auf einen konstanten Vorfaktor eindeutige Lösung, die durch Gl. (4.18) festgelegt ist. Falls jetzt $\lambda = n \in \mathbb{N}_0$, dann folgt aus Gl. (4.18), dass die bis auf einen Vorfaktor eindeutige Potenzreihenlösung ein Polynom vom Grade λ ist (denn für $j = \lambda$ wird $c_{j+1} = 0$ und damit auch $0 = c_{j+2} = c_{j+3} = \dots$). Die so gefundene Lösung ist genau die polynomiale Lösung y vom Grade n, wie im Lemma behauptet. Durch die Wahl von c_0 kann stets erreicht werden, dass es sich bei y um ein Polynom vom Grade n mit reellen Koeffizienten handelt.

Aus der Rekursionsformel ergeben sich dann die Laguerre-Polynome zu

$$y_n(x) = L_n(x) = (-1)^n \left(x^n - \frac{n^2}{1!} x^{n-1} + \frac{n^2(n-1)^2}{2!} x^{n-2} \mp \dots + (-1)^n n! \right)$$
$$= \sum_{k=0}^{n} \frac{n!}{(n-k)!} \frac{(-x)^k}{k!} \tag{4.19}$$

Die ersten sechs sind in Abb. 4.1 dargestellt.
Es gilt die Orthogonalitätsrelation

$$\int_0^{\infty} dx\, L_m(x) L_n(x) e^{-x} = 0 \qquad \forall\, m, n \in \mathbb{N}_0, m \neq n \tag{4.20}$$

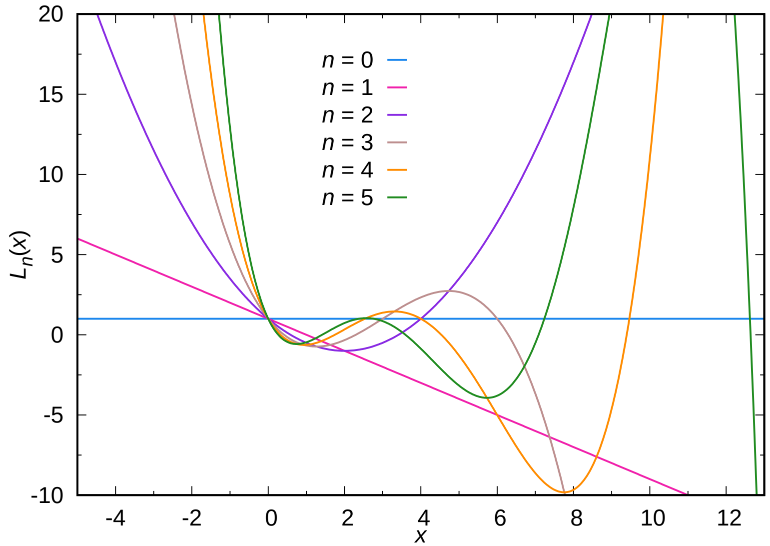

Abbildung 4.1: Die ersten sechs Laguerre-Polynome.

d.h. im Skalarprodukt der Laguerrepolynome wird die Gewichtsfunktion $w(x) = \rho(x) = e^{-x}$ verwendet:

$$\langle L_m | L_n \rangle_w = \int_0^{\infty} dx\, e^{-x} L_m(x) L_n(x) \tag{4.21}$$

Beweis:
Wir beginnen mit den Laguerre-Gleichungen für zwei verschiedene Werte $m, n \in \mathbb{N}_0$, d.h.

$$x L_m''(x) + (1-x) L_m'(x) + m L_m(x) = 0$$
$$x L_n''(x) + (1-x) L_n'(x) + n L_n(x) = 0$$

Wir multiplizieren die Gleichungen mit $L_n(x)$ bzw. $L_m(x)$ und ziehen sie voneinander ab:

$$x \left[L_n(x) L_m''(x) - L_m(x) L_n''(x) \right]$$
$$+ (1-x) \left[L_n(x) L_m'(x) - L_m(x) L_n'(x) \right] = (n-m) L_m(x) L_n(x)$$
$$\Leftrightarrow \left[x e^{-x} \left(L_n(x) L_m'(x) - L_m(x) L_n'(x) \right) \right]' = (n-m) e^{-x} L_m(x) L_n(x)$$

Nun integrieren wir die letzte Gleichung von 0 bis ∞; da $L_m(x)$ $m \in \mathbb{N}_0$ Polynome sind, gibt es wegen der Exponentialfunktion kein Problem an der oberen Grenze:

$$(n-m)\int_0^\infty dx\, e^{-x} L_m(x) L_n(x) = \left[x e^{-x}\left(L_n(x)L'_m(x) - L_m(x)L'_n(x)\right)\right]_0^\infty = 0$$

Für $n \neq m$ gilt also die behauptete Orthogonalitätsrelation.

Anstelle der expliziten Darstellung der Laguerrepolynome (4.19) erweist sich oft die sogenannte **Rodriguesformel** als nützlich, insbesondere wenn über die Polynome integriert werden muss. Die allgemeine Form der Rodriguesformel für polynomiale Lösungen der Sturm-Liouville-Gleichung (4.13) lautet

$$P_n(x) = \frac{1}{a_n w(x)} \frac{d^n}{dx^n}\left(w(x)\left[p(x)\right]^n\right) \tag{4.22}$$

mit dem Normierungsfaktor a_n und dem Gewicht $w(x) = \rho(x)$. Im Fall der Laguerrepolynome erhalten wir die Rodriguesformel

$$L_n(x) = \frac{1}{n!} e^x \frac{d^n\left(x^n e^{-x}\right)}{dx^n} \tag{4.23}$$

Die **erzeugende Funktion** $A(z)$ einer Folge von Entwicklungskoeffizienten $\{c_n\}_{n\in\mathbb{N}_0}$ ist definiert als

$$A(z) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n z^n \tag{4.24}$$

Erzeugende sind oft nützlich, wenn es keine explizite Form für die Folgenglieder gibt; sie helfen manchmal, Rekursionsformeln zu finden oder die Asymptotik der Folge zu untersuchen. Die erzeugende Funktion der Laguerrepolynome lautet

$$\frac{\exp\left\{-\frac{xz}{1-z}\right\}}{1-z} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{L_n(x) z^n}{n!} \tag{4.25}$$

Assoziierte Laguerre-Polynome

Die assoziierten Laguerre-Polynome $L_n^m(x)$ ergeben sich als Lösung der Differentialgleichung

$$xy'' + (m+1-x)y' + nx = 0 \tag{4.26}$$

in herkömmlicher Form bzw.

$$\left[x^{m+1} e^{-x} y'\right]' + n x^m e^{-x} y = 0 \tag{4.27}$$

in Sturm-Liouville-Form. Diese Gleichung tritt bei der Bestimmung des Radialanteils eines Teilchen in einem Zentralpotential, als z.B. beim Wasserstoffatom auf. $L_n^m(x)$ ist ein Polynom n-ten Grades mit der expliziten Darstellung

$$L_n^m(x) = n! \sum_{k=0}^{n} (-1)^k \binom{n+m}{n-k} \frac{x^k}{k!}, \qquad n \in \mathbb{N}_0;\ m > -1 \tag{4.28}$$

mit $L_n^0(x) = L_n(x)$. Die ersten drei assoziierten Laguerrepolynome sind

$$L_0^m(x) = 1\,;\ L_1^m(x) = m+1-x\,;\ L_2^m(x) = (1+m)(2+m) - 2(2+m)x + x^2$$

Für Orthogonalität und Normierung gilt

$$\int_0^\infty dx\, x^m e^{-x} L_n^m(x) L_l^m(x) = n!\Gamma(n+m+1)\delta_{nl} \tag{4.29}$$

mit der Gammafunktion

$$\Gamma(p) := \int_0^\infty dx\, x^{p-1} e^{-x}, \qquad \mathrm{Re}\, p > 0 \tag{4.30}$$

Es gilt die Rekursionsformel

$$\Gamma(p+1) = p\Gamma(p) \tag{4.31}$$

Für natürliche Zahlen gilt $\Gamma(n+1) = n!$. Damit ist die Normierung der Laguerrepolynome

$$\int_0^\infty dx\, e^{-x} L_n(x) L_l(x) = (n!)^2 \delta_{nl} \tag{4.32}$$

Die Formel von Rodrigues ist

$$L_n^m(x) = x^{-m} e^x \frac{d^n}{dx^n}\left(e^{-x} x^{n+m}\right) \tag{4.33}$$

Außerdem ergibt die m-te Ableitung der Laguerregleichung die assoziierte Lagurerregleichung, und die assoziierten Laguerrepolynome $L_n^m(x)$ sind durch

$$L_n^m(x) = (-1)^m \frac{d^m}{dx^m} L_{n+m}(x) \tag{4.34}$$

mit den Laguerrepolynomen verknüpft.
Beweis von Orthonormalität und Normierung:
Für den selbstadjungierten Differentialoperator $\mathcal{L}y(x) = \left(x^{m+1}e^{-x}y'(x)\right)'$ gilt

$$\int_0^\infty dx\, L_n^m(x)\left[x^{m+1}e^{-x}\frac{d}{dx}L_l^m(x)\right]' - \int_0^\infty dx\,\left[x^{m+1}e^{-x}\frac{d}{dx}L_n^m(x)\right]' L_l^m(x) = 0$$

da die Randterme verschwinden (wegen des Faktors x^{m+1}, $m > -1$ bei $x = 0$ und wegen des Faktors e^{-x} im Unendlichen. Ausnutzen der assoziierten Laguerreschen Differentialgleichung (4.27) liefert

$$(n - l)\int_0^\infty dx\, x^m e^{-x} L_n^m(x) L_l^m(x) = 0$$

woraus die Orthogonalität

$$\int_0^\infty dx\, x^m e^{-x} L_n^m(x) L_l^m(x) = 0 \qquad \forall\, n \neq l \tag{4.35}$$

folgt. Zur Berechnung des Normierungsintegrals benutzt man für ein $L_n^m(x)$ die Formel von Rodrigues und wälzt die Ableitungen mittels partieller Integration auf das andere $L_n^m(x)$ über; die Randterme verschwinden dabei:

$$\begin{aligned}\int_0^\infty dx\, x^m e^{-x}\left[L_n^m(x)\right]^2 &= \int_0^\infty dx\, L_n^m(x)\frac{d^n}{dx^n}\left(e^{-x}x^{n+m}\right)\\ &= (-1)^n\int_0^\infty dx\, e^{-x}x^{n+m}\frac{d^n}{dx^n}L_n^m(x)\end{aligned}$$

Aus der expliziten Darstellung (4.28) folgt (man muss wegen der n Ableitungen nur den Summanden mit $k = n$ berücksichtigen)

$$\frac{d^n}{dx^n}L_n^m(x) = (-1)^n n!$$

und somit mit der Definition (4.30) der Gammafunktion

$$\int_0^\infty dx\, x^m e^{-x}\left[L_n^m(x)\right]^2 = n!\,\Gamma(n + m + 1)\,. \tag{4.36}$$

Legendre-Polynome

Bei der Lösung der Laplace- oder Schwingungsgleichung in Kugelkoordinate r, ϑ., φ geben die Legendrepolynome $P_l(\cos\vartheta)$ den Winkelanteil in Kugelkoordinaten einer φ-unabhängigen Partikulärlösung [1] an.
$P_l(\cos\vartheta)$ ist die bei $x = \pm 1$ beschränkte Lösung der Differentialgleichung

$$(1 - x^2)y''(x) - 2xy'(x) + l(l+1)y(x) = 0 \qquad -1 \leqslant x \leqslant 1 \tag{4.37}$$

oder in Sturm-Liouvilleform

$$\left[(1 - x^2)y'(x)\right]' + l(l+1)y(x) = 0 \qquad -1 \leqslant x \leqslant 1 \tag{4.38}$$

mit der Normierung $P_l(1) = 1$, $l \in \mathbb{N}_0$.
Eine von $P_l(x)$ linear unabhängige Lösung ist die sogenannte Legendresche Funktion 2. Art $Q_l(x)$

$$Q_l(x) = \frac{1}{2}P_l(x)\ln\frac{1+x}{1-x} + \text{ Polynom } (l-1)\text{-ten Grades} \tag{4.39}$$

Die explizite Darstellung der Legendrepolynome ist

$$P_l(x) = \frac{1}{2^l}\sum_{k=0}^{k_{\max}}(-1)^k\frac{(2l-2k)!}{(l-2k)!(l-k)!k!}x^{l-2k}\,, \quad l \in \mathbb{N}_0\,,\ -1 \leqslant x \leqslant 1$$
$$\text{wobei } k_{\max} = \begin{cases}\frac{l}{2} & \text{für } l \text{ gerade}\\ \frac{l-1}{2} & \text{für } l \text{ ungerade}\end{cases} \tag{4.40}$$

Man findet dies durch Einsetzen des Potenzreihenansatzes

$$y(x) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k x^k$$

in die Differentialgleichung (4.37), wie wir das bereits für die Laguerregleichung getan haben. Das führt auf die Rekursionsformel

$$a_{k+2} = -\frac{(l-k)(l+k+1)}{(k+2)(k+1)}a_k\,, \qquad k \in \mathbb{N}_0\,. \tag{4.41}$$

Die Legendrepolynome sind orthogonal und folgendermaßen normiert:

$$\int_{-1}^{1} dx\, P_n(x)P_l(x) = \delta_{nl}\frac{2}{2l+1}\,, \qquad P_l(1) = 1 \tag{4.42}$$

[1] Jede Funktion $y(x)$, die die homogene lineare Differentialgleichung $\sum_{i=0}^n f_i(x)y^{(i)}(x) = 0$ erfüllt, ist eine Partikulärlösung der homogenen Differentialgleichung. Wenn y_1 und y_2 jeweils Partikulärlösungen einer homogene linearen Differentialgleichung sind, dann ist auch die Linearkombination $c_1y_1 + c_2y_2$ eine Lösung dieser homogenen Differentialgleichung.

Sie bilden in $[-1,1]$ ein vollständiges Orthogonalsystem. Die Rodriguesformel lautet

$$P_l(x) = \frac{(-1)^l}{2^l l!} \frac{d^l}{dx^l} \left[(1-x^2)^l\right] \tag{4.43}$$

Die erzeugende Funktion ist

$$\frac{1}{\sqrt{1-2xz+z^2}} = \sum_{l=0}^{\infty} P_l(x) z^l \quad \text{falls } |z^2 - 2xz| < 1 \tag{4.44}$$

Es gelten die Rekursionsformeln (die erste folgt sofort aus der expliziten Darstellung)

$$P_l(x) = (-1)^l P_l(-x) \tag{4.45}$$

$$(l+1)P_{l+1}(x) = (2l+1)xP_l(x) - lP_{l-1}(x) \tag{4.46}$$

$$(1-x^2)P_l'(x) = (l+1)\big[xP_l(x) - P_{l+1}(x)\big] = l\big[P_{l-1}(x) - xP_l(x)\big] \tag{4.47}$$

In Abb. 4.2 sind die ersten sechs Legendrepolynome gezeigt.

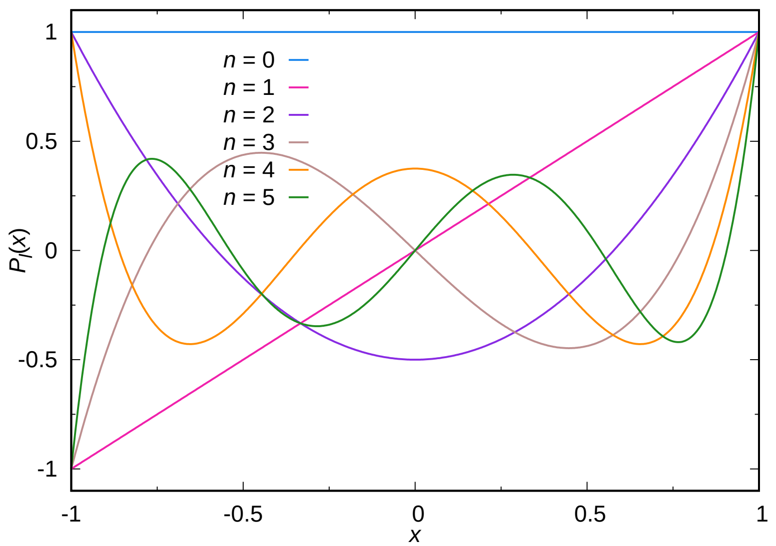

Abbildung 4.2: Die ersten sechs Legendre-Polynome.

Beweise:
a) Der Beweis der Orthogonalität nutzt wieder die Hermitezität des Sturm-Liouville-Operators der Legendre-Differentialgleichung; für diesen Operator $\mathcal{L} = \big[(1-x^2)y'(x)\big]'$ gilt

$$\begin{aligned} 0 &= \int_{-1}^{1} dx\, P_n(x)\big[(1-x^2)P_l'(x)\big]' - \int_{-1}^{1} dx\, \big[(1-x^2)P_n'(x)\big]' P_l(x) \\ &= \big[n(n+1) - l(l+1)\big] \int_{-1}^{1} dx\, P_n(x)P_l(x) \end{aligned}$$

unter Verwendung der Differentialgleichung (4.38). Also gilt

$$\int_{-1}^{1} dx\, P_n(x)P_l(x) = 0 \qquad \forall\, n \neq l \tag{4.48}$$

b) Zur Berechnung des Normierungsintegrals verwenden wir wieder die Formel von Rodrigues und wälzen die Ableitungen mittels partieller Integration über. Durch Faktoren $(1-x^2)$ verschwinden die Randterme:

$$\begin{aligned} \int_{-1}^{1} dx\, \big[P_l(x)\big]^2 &= \frac{1}{2^{2l}(l!)^2} \underbrace{\int_{-1}^{1} dx\, \frac{d^l}{dx^l}\big[(1-x^2)^l\big] \frac{d^l}{dx^l}\big[(1-x^2)^l\big]}_{= (-1)\int_{-1}^{1} dx\, \frac{d^{l-1}}{dx^{l-1}}\left[(1-x^2)^l\right] \frac{d^{l+1}}{dx^{l+1}}\left[(1-x^2)^l\right] = \ldots} \\ &= \frac{(-1)^l}{2^{2l}(l!)^2} \int_{-1}^{1} dx\, (1-x^2)^l \frac{d^{2l}}{dx^{2l}} (1-x^2)^l \end{aligned}$$

Bei dieser $2l$-ten Ableitung müssen wir nur die höchste Potenz des Polynoms betrachten:

$$\frac{d^{2l}}{dx^{2l}}(1-x^2)^l = (-1)^l \frac{d^{2l}}{dx^{2l}} x^{2l} = (-1)^l (2l)!$$

und damit

$$\begin{aligned} \int_{-1}^{1} dx\, \big[P_l(x)\big]^2 &= \frac{(2l)!}{2^{2l}(l!)^2} \int_{-1}^{1} dx\, (1-x^2)^l \qquad x = \cos(\varphi),\ dx = -\sin\varphi\, d\varphi \\ &= \frac{(2l)!}{2^{2l}(l!)^2} \int_0^{\pi} d\varphi\, (\sin\varphi)^{2l+1} \\ &= \frac{(2l)!}{2^{2l}(l!)^2} 2 \frac{2l \cdot (2l-2) \cdots 4 \cdot 2}{(2l+1)\cdot(2l-1)\cdots 5 \cdot 3} = \frac{2}{2l+1} \end{aligned}$$

Da man die Legendrepolynome bereits über $P_l(1) = 1$ festgelegt hat, lassen sie sich nicht mehr auf 1 normieren.

c) Beweis der Rodriguesformel:
Für die Funktion $f : [-1,1] \mapsto \mathbb{R}$, $f(x) = (x^2-1)^l = (-1)^l(1-x^2)^l$, $l \in \mathbb{N}_0$ gilt

$$f'(x) = 2lx(x^2-1)^{l-1} = \frac{2lx}{x^2-1}f(x)\,,$$

bzw.

$$(x^2-1)f'(x) - 2lxf(x) = 0\,.$$

Allgemeiner zeigt man durch Induktion, dass für die $(k+1)$-te Ableitung $(k = 0, 1, \ldots, 2l-1)$ gilt:

$$(x^2-1)f^{(k+1)}(x) + 2x(k-l)f^{(k)}(x) + k(k-1-2l)f^{(k-1)}(x) = 0\,.$$

Speziell folgt für $k = l+1$

$$(x^2-1)f^{(l+2)}(x) + 2xf^{(l+1)}(x) - l(l+1)f^{(l)}(x) = 0\,.$$

Also erfüllt $f^{(l)}(x)$ die Legendre-Differentialgleichung (4.37). Da $f^{(l)}(x)$ ein Polynom l-ten Grades ist, muss gelten:

$$f^{(l)}(x) = c_l P_l(x)\,.$$

Zur Bestimmung des Proportionalitätsfaktors c_l verwenden wir die Stelle $x = 1$. Aus

$$f^{(l)}(x) = \frac{d^l}{dx^l}(x^2-1)^l = \frac{d^l}{dx^l}\big[(x-1)^l(x+1)^l\big]$$

folgt, da alle anderen Terme bei $x = 1$ verschwinden:

$$f^{(l)}(1) = (x+1)^l \frac{d^l}{dx^l}(x-1)^l\bigg|_{x=1} = l!2^l\,.$$

Da $P_l(1) = 1$ ist, folgt $c_l = l!2^l$ und damit

$$P_l(x) = \frac{(-1)^l}{2^l l!}\frac{d^l}{dx^l}\big[(1-x^2)^l\big]$$

Assoziierte Legendrefunktionen 1. Art

Löst man die Laplace- oder Schwingungsgleichung in Kugelkoordinaten r, ϑ, φ so gibt $P_l^m(\cos\vartheta)e^{im\varphi}$ den Winkelanteil einer Partikulärlösung an. Die assoziierte (zugeordnete) Legendrefunktion 1. Art $P_l^m(x)$ ist die bei $x = \pm 1$ beschränkte Lösung der Differentialgleichung

$$(1-x^2)y''(x) - 2xy'(x) + \left[l(l+1) - \frac{m^2}{1-x^2}\right]y(x) = 0 \qquad -1 \leqslant x \leqslant 1 \tag{4.49}$$

oder in Sturm-Liouvilleform

$$\big[(1-x^2)y'(x)\big]' + \left[l(l+1) - \frac{m^2}{1-x^2}\right]y(x) = 0 \qquad -1 \leqslant x \leqslant 1\,. \tag{4.50}$$

Eine von $P_l^m(x)$ linear unabhängige Lösung ist die assoziierte Legendrefunktion 2. Art $Q_l^m(x)$; sie ist bei $x = \pm 1$ singulär.
Die assoziierten Legendrefunktionen 1. Art haben die explizite Darstellung

$$P_l^m(x) = (1-x^2)^{\frac{m}{2}}\frac{d^m}{dx^m}P_l(x)\,, \qquad l \in \mathbb{N}_0\,, m = 0, 1, \ldots, l \tag{4.51}$$

wobei

$$P_l^0(x) = P_l(x) \tag{4.52}$$

bzw. wenn man die Formel von Rodrigues (4.43) für $P_l(x)$ einsetzt:

$$P_l^m(x) = \frac{1}{2^l l!}(1-x^2)^{\frac{m}{2}}\frac{d^{m+l}}{dx^{m+l}}(x^2-1)^l\,, \qquad l \in \mathbb{N}_0\,, m = -l, -l+1, \ldots, l-1, l \tag{4.53}$$

Durch diese Beziehung lässt sich $P_l^m(x)$ auch für negative m-Werte definieren, wobei gilt:

$$P_l^{-m}(x) = (-1)^m\frac{(l-m)!}{(l+m)!}P_l^m(x) \qquad m = 0, 1, \ldots, l \tag{4.54}$$

Orthogonalität und Normierung:

$$\int_{-1}^{1} dx\, P_l^m(x)P_{l'}^m(x) = \delta_{ll'}\frac{2}{2l+1}\frac{(l+m)!}{(l-m)!} \tag{4.55}$$

$$\int_{-1}^{1} \frac{dx}{1-x^2}\, P_l^m(x)P_l^{m'}(x) = 0 \qquad \text{für } m \neq m' \tag{4.56}$$

Rekursionsformeln, Beziehungen:

$$P_l^m(-x) = (-1)^{l+m}P_l^m(x) \tag{4.57}$$

$$(l-m+1)P_{l+1}^m(x) - (2l+1)xP_l^m(x) + (l+m)P_{l-1}^m(x) = 0 \tag{4.58}$$

$$\begin{aligned}(1-x^2)\frac{d}{dx}P_l^m(x) &= (l+1)xP_l^m(x) - (l-m+1)P_{l+1}^m(x)\\ &= (l+m)P_{l-1}^m(x) - lxP_l^m(x)\end{aligned} \tag{4.59}$$

$$xP_l^m(x) - (l-m+1)\sqrt{1-x^2}P_l^{m-1}(x) - P_{l-1}^m(x) = 0 \tag{4.60}$$

$$P_{l+1}^x - xP_l^m(x) - (l+m)\sqrt{1-x^2}P_l^{m-1}(x) = 0 \tag{4.61}$$

Die erste Beziehung folgt aus der expliziten Darstellung; die Rekursionsformeln folgen aus denen für $P_l(x)$ durch m-malige Differentiation.

Im folgenden beweisen wir die explizite Darstellung. Dazu notieren wir den allgemeinen (also nicht nur für die assoziierten Legendrefunktionen 1. Art) geltenden Satz:

Satz 4.1. Ist $y_l(x)$ eine Lösung der Legendreschen Differentialgleichung

$$(1-x^2)y_l''(x) - 2xy_l'(x) + l(l+1)y_l(x) = 0 \qquad -1 \leqslant x \leqslant 1 \tag{4.62}$$

so ist

$$y_l^m(x) := (1-x^2)^{\frac{m}{2}} \frac{d^m}{dx^m} y_l(x) \qquad m \in \mathbb{N}_0 \tag{4.63}$$

eine Lösung der Differentialgleichung für die assoziierten Legendrefunktionen

$$(1-x^2)y_l''(x) - 2xy_l'(x) + \left[l(l+1) - \frac{m^2}{1-x^2}\right]y(x) = 0 \qquad -1 \leqslant x \leqslant 1 \tag{4.64}$$

Beweis:
Differenziert man die Gleichung (4.62) m mal, dann folgt durch Induktion:

$$(1-x^2)y_l^{(m+2)}(x) - 2(m+1)xy_l^{(m+1)}(x) + \left[l(l+1) - m(m+1)\right]y_l^{(m)}(x) = 0 \tag{4.65}$$

Macht man andererseits für eine Lösung y der Differentialgleichung (4.64) für die assoziierten Legendrefunktionen den Ansatz

$$y(x) = (1-x^2)^{\frac{m}{2}} \tilde{y}(x) \tag{4.66}$$

so folgt für $\tilde{y}$ die Differentialgleichung

$$(1-x^2)\tilde{y}''(x) - 2(m+1)x\tilde{y}'(x) + \left[l(l+1) - m(m+1)\right]\tilde{y}(x) = 0 \tag{4.67}$$

$\tilde{y}$ erfüllt also die m mal differenzierte Legendresche Differentialgleichung. Gehen wir daher von den beiden linear unabhängigen Lösungen der Legendreschen Differentialgleichung $P_l(x)$, $Q_l(x)$, $l \in \mathbb{N}_0$ aus, so ergeben sich daraus die beiden linear unabhängigen zugeordneten Legendre-Funktionen

$$\begin{aligned} P_l^m(x) &= (1-x^2)^{\frac{m}{2}} \frac{d^m}{dx^m} P_l(x) \qquad m = 0, 1, \ldots, l \\ Q_l^m(x) &= (1-x^2)^{\frac{m}{2}} \frac{d^m}{dx^m} Q_l(x) \qquad m = 0, 1, \ldots, l \end{aligned} \tag{4.68}$$

Beweis von Orthonormalität und Normierung:
Wie bei den Legendrepolynomen folgt

$$\left[l(l+1) - l'(l'-1)\right] \int_{-1}^{1} dx\, P_l^m(x) P_{l'}^{m'}(x) = \left(m^2 - m'^2\right) \int_{-1}^{1} \frac{dx}{1-x^2} P_l^m(x) P_{l'}^{m'}(x) \tag{4.69}$$

d.h. für $l = l'$

$$\int_{-1}^{1} \frac{dx}{1-x^2} P_l^m(x) P_l^{m'}(x) = 0 \text{falls } m \neq m' . \tag{4.70}$$

Für $m = m'$ folgt

$$\int_{-1}^{1} dx\, P_l^m(x) P_{l'}^m(x) = 0 \qquad \text{falls } l \neq l' \tag{4.71}$$

Das Normierungsintegral $\int_{-1}^{1} dx \left[P_l^m(x)\right]^2$ lässt sich mithilfe einer Rekursionsformel auf das Normierungsintegral für $P_l(x)$ zurückführen.

Kugelflächenfunktionen $Y_l^m(\vartheta, \varphi)$

Physikalisches Problem:
$Y_l^m(\vartheta, \varphi)$, $l \in \mathbb{N}_0$, $m = -l, -l+1, \ldots, l-1, l$, $0 \leqslant \vartheta \leqslant \pi$, $0 \leqslant \varphi \leqslant 2\pi$ gibt den Winkelanteil einer Partikulärlösung der Laplace- oder Schwingungsgleichung in Kugelkoordinaten r, ϑ, φ an.
Das elektrische Potential $\phi(\vec{r}')$, $\vec{r}' \in \mathbb{R}^3$ einer Ladungsverteilung $\rho(\vec{r})$, $\vec{r} \in V \in \mathbb{R}^3$,

$$\phi(\vec{r}') = \int_V d^3r \frac{\rho(\vec{r})}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \tag{4.72}$$

besitzt für $r' = |\vec{r}'| > r = |\vec{r}|$ die Multipolentwicklung

$$\phi(\vec{r}') = \sum_{ml} \frac{4\pi}{2l+1} \frac{c_{lm}}{r'^{l+1}} Y_l^m\left(\frac{\vec{r}'}{r'}\right) \quad \text{mit } c_{lm} = \int_V d^3r\, \rho(\vec{r}) r^l Y^{*m}_l\left(\frac{\vec{r}}{r}\right) \tag{4.73}$$

(der Einheitsvektor als Argument von Y_l^m repräsentiert die beiden Winkel ϑ und φ).

In der Quantenmechanik sind die Kugelflächenfunktionen die Eigenfunktionen des Drehimpulsoperators $\hat{L} = \frac{\hbar}{i}\vec{r} \times \nabla$

$$\begin{aligned}
\hat{L}^2 Y_l^m(\vartheta, \varphi) &= -\hbar^2\left[\frac{\partial^2}{\partial^2\vartheta} + \cot\vartheta\,\frac{\partial}{\partial\vartheta} + (1+\cot^2\vartheta)\frac{\partial^2}{\partial^2\varphi}\right] Y_l^m(\vartheta,\varphi) \\
&= \hbar^2 l(l+1) Y_l^m(\vartheta,\varphi) \qquad (4.74) \\
\hat{L}_z Y_l^m(\vartheta,\varphi) &= \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\varphi} Y_l^m(\vartheta,\varphi) = \hbar m Y_l^m(\vartheta,\varphi) \qquad (4.75)
\end{aligned}$$

Definition der Kugelflächenfunktionen:

$$Y_l^m(\vartheta,\varphi) = (-1)^m\sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}\frac{(l-m)!}{(l+m)!}} P_l^m(\cos\vartheta) e^{im\varphi} \qquad (4.76)$$
$$m = -l, -l+1, \ldots, l-1, l; \quad l \in \mathbb{N}_0$$

d.h. für die ersten drei l-Werte

$$\begin{aligned}
Y_0^0(\vartheta,\varphi) &= \sqrt{\frac{1}{4\pi}} \\
Y_1^0(\vartheta,\varphi) &= \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\vartheta \qquad Y_1^{\pm1}(\vartheta,\varphi) = \mp\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\vartheta\, e^{\pm i\varphi} \\
Y_2^0(\vartheta,\varphi) &= \frac{1}{2}\sqrt{\frac{5}{4\pi}}\left(3\cos^2\vartheta - 1\right) \qquad Y_2^{\pm1}(\vartheta,\varphi) = \mp\sqrt{\frac{15}{8\pi}}\cos\vartheta\sin\vartheta\, e^{\pm i\varphi} \\
Y_2^{\pm2}(\vartheta,\varphi) &= \frac{1}{2}\sqrt{\frac{15}{8\pi}}\sin^2\vartheta\, e^{\pm 2i\varphi}
\end{aligned} \qquad (4.77)$$

Die Beträge der ersten Kugelflächenfunktionen sind in Abb. 4.3 dargestellt. Durch Bildung von Linearkombinationen lassen sich die Kugelflächenfunktionen auch zu einem vollständigen Orthonormalsystem von reellen Funktionen kombinieren; dabei identifizieren wir die Komponenten des Einheitsvektors in Kugelkoordinaten $\vec{e}_r \equiv (x, y, z) = (\sin\vartheta\cos\varphi, \sin\vartheta\sin\varphi, \cos\vartheta)$,

um die Symmetrie festzustellen:

$$\begin{aligned}
Y_0^0(\vartheta,\varphi) &= \sqrt{\frac{1}{4\pi}} \\
Y_z(\vartheta,\varphi) &= Y_1^0(\vartheta,\varphi) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\vartheta = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}z \\
Y_y(\vartheta,\varphi) &= \frac{Y_1^1(\vartheta,\varphi) + Y_1^{-1}(\vartheta,\varphi)}{-i\sqrt{2}} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\sin\vartheta\sin\varphi = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}y \\
Y_x(\vartheta,\varphi) &= \frac{Y_1^1(\vartheta,\varphi) - Y_1^{-1}(\vartheta,\varphi)}{-\sqrt{2}} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\sin\vartheta\cos\varphi = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}x \\
Y_{z^2}(\vartheta,\varphi) &= Y_2^0(\vartheta,\varphi) = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{5}{4\pi}}\left(3\cos^2\vartheta - 1\right) = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{5}{4\pi}}(3z^2-1) \\
Y_{yz}(\vartheta,\varphi) &= \frac{Y_2^1(\vartheta,\varphi) + Y_2^{-1}(\vartheta,\varphi)}{-i\sqrt{2}} = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{15}{\pi}}\sin\vartheta\cos\vartheta\sin\varphi = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{15}{\pi}}yz \\
Y_{xz}(\vartheta,\varphi) &= \frac{Y_2^1(\vartheta,\varphi) - Y_2^{-1}(\vartheta,\varphi)}{-\sqrt{2}} = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{15}{\pi}}\sin\vartheta\cos\vartheta\cos\varphi = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{15}{\pi}}xz \\
Y_{xy}(\vartheta,\varphi) &= \frac{Y_2^2(\vartheta,\varphi) - Y_2^{-2}(\vartheta,\varphi)}{i\sqrt{2}} = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{15}{\pi}}\sin^2\vartheta\sin\varphi\cos\varphi = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{15}{\pi}}xy \\
Y_{x^2-y^2}(\vartheta,\varphi) &= \frac{Y_2^2(\vartheta,\varphi) + Y_2^{-2}(\vartheta,\varphi)}{\sqrt{2}} = \frac{1}{4}\sqrt{\frac{15}{\pi}}\sin^2\vartheta(\sin^2\varphi - \cos^2\varphi) \\
&= \frac{1}{4}\sqrt{\frac{15}{\pi}}(x^2-y^2)
\end{aligned} \qquad (4.78)$$

Diese Funktionen sind in Abb. 4.4 dargestellt. In der chemischen Notation repräsentiert Y_0^0 eine s-Wellenfunktion, Y_x, Y_y und Y_z stehen für p_x, p_y und p_z; Y_{z^2}, Y_{yz}, Y_{xz}, Y_{xy} und $Y_{x^2-y^2}$ stehen für die fünf d-Wellenfunktionen d_{z^2}, d_{yz}, d_{xz}, d_{xy} und $d_{x^2-y^2}$.
Orthonormalität der Kugelflächenfunktionen:

$$\int_0^\pi d\vartheta\, \sin\vartheta \int_0^{2\pi} d\varphi\, Y^{*m}_{\ l}(\vartheta,\varphi) Y_{l'}^{m'}(\vartheta,\varphi) = \delta_{ll'}\delta_{mm'} \qquad (4.79)$$

Die Kugelflächenfunktionen bilden ein vollständiges Orthonormalsystem auf der Kugeloberfläche.

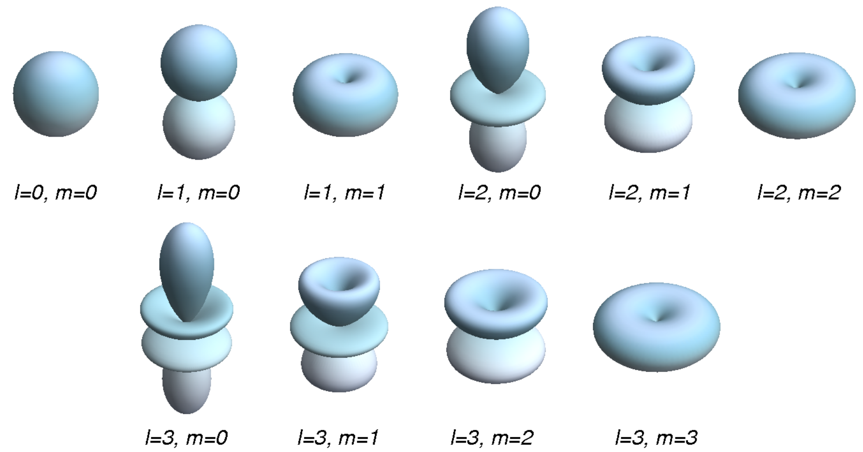

Abbildung 4.3: Der Betrag der ersten Kugelflächenfunktionen, dargestellt als Radius $r = |Y_l^m(\vartheta, \varphi)|$. Durch den Betrag gilt $|Y_l^{-m}(\vartheta, \varphi)| = |Y_l^m(\vartheta, \varphi)|$.

Relationen:

$$Y_l^0(\vartheta, \varphi) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} P_l(\cos\vartheta) \tag{4.80}$$
$$Y_l^{-m}(\vartheta, \varphi) = (-1)^m Y^{*m}_l(\vartheta, \varphi) \tag{4.81}$$

Additionstheorem:

$$\sum_{m=-l}^{l} Y^{*m}_l(\vartheta, \varphi) Y_l^m(\vartheta', \varphi') = \frac{2l+1}{4\pi} P_l(\sin\Theta) \tag{4.82}$$
$$\text{mit } \cos\Theta = \cos\vartheta\cos\vartheta' + \sin\vartheta\sin\vartheta'\cos(\varphi - \varphi')$$

Beweis der Orthonormalität:

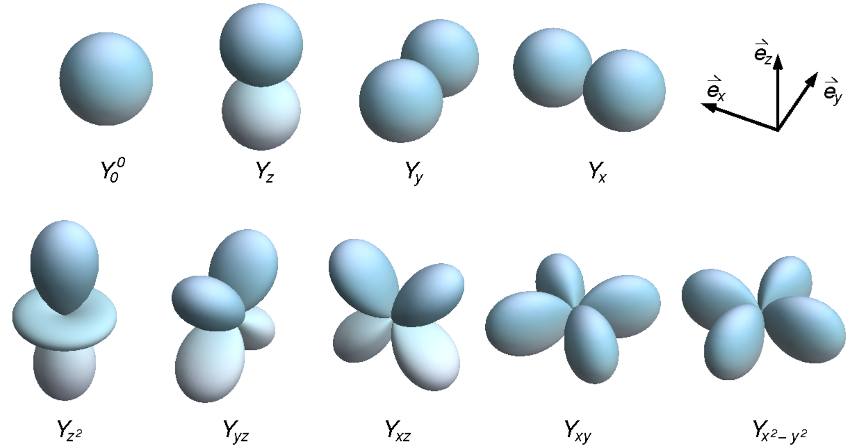

Abbildung 4.4: Der Betrag der ersten reellen Linearkombinationen von Kugelflächenfunktionen, dargestellt als Radius $r = |Y_\alpha(\vartheta, \varphi)|$ wobei α die Orbitalsymmetrie darstellt.

Wegen der Orthogonalität von $e^{im\varphi}$ und $P_l^m(x)$ mit $x = \cos\vartheta$ gilt

$$\begin{aligned}
&\int_0^\pi d\vartheta\, \sin\vartheta \int_0^{2\pi} d\varphi Y^{*m}_l(\vartheta, \varphi) Y_{l'}^{m'}(\vartheta, \varphi) \\
&= (-1)^{m+m'} \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}\frac{(l-m)!}{(l+m)!}} \sqrt{\frac{2l'+1}{4\pi}\frac{(l'-m')!}{(l'+m')!}} \times \\
&\quad \times \underbrace{\int_0^{2\pi} d\varphi e^{i(m'-m)\varphi}}_{2\pi\delta_{mm'}} \underbrace{\int_0^\pi d\vartheta\, \sin\vartheta P_l^m(\vartheta) P_{l'}^{m'}(\vartheta)}_{\delta_{ll'}\frac{2}{2l+1}\frac{(l+m)!}{(l-m)!}\ \text{für}\ m\neq m'} = \delta_{ll'}\delta_{mm'}
\end{aligned} \tag{4.83}$$

Lösbarkeit des allgemeinen Randwertproblems

Zum Abschluss der Diskussion einiger orthogonaler Funktionensysteme der Physik, die wir als physikalisch sinnvolle Partikulärlösungen von linearen Differentialgleichungen 2. Ordnung gefunden haben, wollen wir noch kurz einen Blick auf die allgemeine Lösung solcher Differentialgleichungen werfen.
Die Lösung einer Differentialgleichung 2. Ordnung wird erst durch Festlegung von zwei Anfangs- oder Randbedingungen festgelegt. Bestehen diese

Nebenbedingungen aus Forderungen an die Funktion $y(x)$ und ihre Ableitung an derselben Stelle x_0, so spricht man von einem Anfangswertproblem. Wenn diese zwei Forderungen an die Funktion oder an ihre Ableitungen an zwei verschiedenen Stellen gestellt werden, spricht man von einem Randwertproblem.

Wir betrachten die lineare Differentialgleichung 2. Ordnung

$$y''(x) + a_1(x)y'(x) + a_2(x)y(x) = h(x) \qquad a \leqslant x \leqslant b \tag{4.84}$$

in einem Intervall $[a, b]$, in dem die Funktionen a_1, a_2 und h stetig sind. Die Randbedingungen seien in der Form

$$\begin{aligned} \alpha_1 y(a) + \beta_1 y'(a) &= \gamma_1 \\ \alpha_2 y(b) + \beta_2 y'(b) &= \gamma_2 \end{aligned} \tag{4.85}$$

mit reellen Konstanten α_i, β_i, γ_i $(i = 1, 2)$ gegeben, wobei α_1 und β_1 (genauso wie α_2 und β_2) nicht beide gleichzeitig verschwinden dürfen. Spezialfälle sind die sogenannte

$$\begin{aligned} &\text{1. Randwertaufgabe} \;\; y(a) = \gamma_1\,, \quad y(b) = \gamma_2 \\ &\text{2. Randwertaufgabe} \;\; y'(a) = \gamma_1\,, \quad y'(b) = \gamma_2 \end{aligned}$$

Man spricht von einem homogenen Randwertproblem, wenn

$$h \equiv 0 \quad \text{und} \quad \gamma_1 = \gamma_1 = 0\,,$$

andernfalls von einem inhomogenen Randwertproblem. Ein homogenes Randwertproblem besitzt daher stets die triviale Lösung $y \equiv 0$. Allgemein ist jedoch ein Randwertproblem nicht immer lösbar.

Die allgemeine Lösung der Differentialgleichung

$$\hat{A}y(x) = y''(x) + a_1(x)y'(x) + a_2(x)y(x) = h(x) \tag{4.86}$$

lautet

$$y_{\text{allg}}(x) = y_{\text{spez}}(x) + c_1 y_1(x) + c_2 y_2(x) \tag{4.87}$$

mit einer spezielle Lösung

$$\hat{A}y_{\text{spez}}(x) = h(x)\,. \tag{4.88}$$

(diese entfällt für $h \equiv 0$) und einem Fundamentalsystem $\{y_1, y_2\}$ der zugehörigen homogenen Gleichung

$$\hat{A}y_{1,2} = 0\,. \tag{4.89}$$

Wann lassen sich nun die willkürlichen Konstanten c_1, c_2 so bestimmen, dass die Randbedingungen erfüllt sind? Dazu ist erforderlich, dass

$$\begin{aligned} c_1\left[\alpha_1 y_1(a) + \beta_1 y_1'(a)\right] + c_2\left[\alpha_1 y_2(a) + \beta_1 y_2'(a)\right] &= \gamma_1 - \left[\alpha_1 y_{\text{spez}}(a) + \beta_1 y_{\text{spez}}'(a)\right] \\ c_1\left[\alpha_2 y_1(b) + \beta_2 y_1'(b)\right] + c_2\left[\alpha_2 y_2(b) + \beta_2 y_2'(b)\right] &= \gamma_2 - \left[\alpha_2 y_{\text{spez}}(b) + \beta_2 y_{\text{spez}}'(b)\right] \end{aligned}$$

wobei beim homogenen Randwertproblem die rechte Seite verschwindet. Das Kriterium für die Lösbarkeit dieses linearen Gleichungssystems für c_1 und c_2 liefert die Determinante

$$\Delta := \begin{vmatrix} \alpha_1 y_1(a) + \beta_1 y_1'(a) & \alpha_1 y_2(a) + \beta_1 y_2'(a) \\ \alpha_2 y_1(b) + \beta_2 y_1'(b) & \alpha_2 y_2(b) + \beta_2 y_2'(b) \end{vmatrix} \tag{4.90}$$

Es gibt die zwei Fälle:

a) $\Delta \neq 0$: Dann ist das inhomogene Randwertproblem eindeutig lösbar, während das homogene Randwertproblem nur die triviale Lösung $y \equiv 0$ zulässt.

b) $\Delta = 0$: Jetzt existiert für das homogene Randwertproblem eine nichttriviale Lösung, aber sie ist nicht eindeutig, weil jedes Vielfache einer Lösung wieder eine Lösung ergibt. Das inhomogene Problem ist dagegen nur in Spezialfällen lösbar.

Das homogene Randwertproblem besitzt also nur für $\Delta = 0$ eine nichttriviale Lösung. Nun kommt es in den physikalischen Anwendungen häufig vor, dass die in die Differentialgleichung eingehenden Funktionen a_i einen Parameter λ enthalten: $a_i = a_i(x, \lambda)$.

Damit wird auch die Determinante Δ λ-abhängig: $\Delta = \Delta(\lambda)$. Verschwindet nun Δ für bestimmte λ-Werte,

$$\Delta(\lambda_n) = 0 \qquad n = 1, 2, \ldots$$

so ist das Problem genau für diese λ_n nichttrivial lösbar. Man nennt dann die $\lambda_1, \lambda_2, \ldots$ Eigenwerte und die zugehörigen Lösungen $y(x; \lambda_1), y(x; \lambda_2), \ldots$ Eigenfunktionen des Problems.