
Mathematische Ergänzungen zur
Vorlesung Theoretische Physik 4 -
Quantenmechanik 1

SS 2009



Harald Jeschke
Institut für Theoretische Physik
Goethe-Universität Frankfurt

0. Einführung

0.1 Mittelpunkt der Quantenmechanik: Die Schrödingergleichung

Die Gleichung, die eine entscheidende Rolle in der Quantenmechanik spielt, ist die Schrödingergleichung; sie ist eine partielle Differentialgleichung, die in der Form

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

geschrieben werden kann (mit Masse m , Planckschem Wirkungsquantum $\hbar = h/(2\pi)$) wobei die Funktion $V : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}$ die physikalische Situation repräsentiert (V ist zunächst als zeitunabhängig angenommen).

Aus dieser Gleichung ergeben sich die mathematischen Probleme, die Thema dieser Vorlesung sind:

a) Ebene Wellen

Wellen spielen insgesamt in der Quantenmechanik eine wichtige Rolle; monochromatische ebene Wellen sind als vollständiges Funktionensystem geeignet zur Darstellung beliebiger Lösungen der Schrödingergleichung.

b) Fourieranalyse, Diracsche Deltafunktion

Bei der Überlagerung von monochromatischen ebenen Wellen zu Wellenpaketen hat man es mit Fourierintegralen zu tun, und die Umkehrung der Fouriertransformation führt zur Diracschen Deltafunktion; beides nimmt in der Quantenmechanik einen zentralen Platz ein.

c) Hilbertraumstruktur der Quantenmechanik

Definition eines Hilbertraums: Ein Hilbertraum ist ein linearer Vektorraum über den komplexen Zahlen, in dem eine positiv-definite Hermite-sche Bilinearform (Skalarprodukt) definiert ist und der in Bezug auf die durch diese Bilinearform erzeugte Norm vollständig ist.

Die quantenmechanischen Zustände $\psi(x, y, z, t)$, d.h. die Lösungen von Gl. (1), stellen einen Vektor in einem Hilbertraum dar.

d) Differentialgleichungen

Verschiedene Lösungsmethoden (z.B. der Separationsansatz) spielen für Gl. (1) eine Rolle. Wir werden uns mit der Sturm-Liouville-Theorie beschäftigen, die einen Zusammenhang zwischen der Theorie der Operatoren in Hilberträumen und der Lösung von Differentialgleichungen herstellt.

e) Orthogonale Funktionensysteme

Insbesondere orthogonale Polynome spielen bei der Lösung der Schrödingergleichung eine wichtige Rolle, und zwar

- Hermite-Funktion beim Harmonischen Oszillator
- Laguerre-Funktion im Wasserstoffatom
- Legendre-Funktion bei Drehimpuls und Spin

0.2 Literatur

Die Vorlesung basiert unter anderem auf folgenden Monographien:

1. H. Fischer, H. Kaul, *Mathematik für Physiker* (Teubner, Stuttgart).
2. K. F. Riley, M. P. Hobson, S. J. Bence, *Mathematical Methods for Physics and Engineering* (Cambridge University Press).
3. G. Behrendt, E. Weimar, *Mathematik für Physiker I, II* (Physik-Verlag, Weinheim).
4. G. B. Arfken, H. J. Weber, *Mathematical Methods for Physicists* (Elsevier Academic Press).
5. T. L. Chow, *Mathematical Methods for Physicists* (Cambridge University Press).
6. C. Harper, *Analytic Methods in Physics* (Wiley-VCH, Berlin).
7. B. W. Roos, *Analytic Functions and Distributions in Physics and Engineering* (John Wiley & Sons, New York).
8. R. M. Dreizler, C. S. Lüdde, *Theoretische Physik 3* (Springer, Berlin).

Außerdem fanden folgende Skripte Verwendung:

1. Michael Karbach, *Mathematische Methoden der Physik*.

2. Andreas Ruffing, *Mathematische Methoden der Quantenmechanik*.
3. Cornelius Noack, *Hilbertraum-Kompendium*.
4. H. G. Evertz, W. von der Linden, *Quantenmechanik*.
5. Kim Boström, *Quantenmechanische Konzepte*.

0.3 Ebene Wellen

Dieses Kapitel liefert eine kurze Wiederholung von Erkenntnissen aus der Elektrodynamik über ebene Wellen und Wellenpakete, die in der Quantenmechanik wieder Verwendung finden.

In der Elektrodynamik hat man Differentialgleichungen vom Typ

$$\square f(\vec{x}, t) = 0 \quad (2)$$

mit der Abkürzung

$$\square = \Delta - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \quad (3)$$

für den *d'Alembert-Operator* \square zu lösen, wobei f für irgendeine Komponente vom elektrischen Feld \vec{E} , von der magnetischen Induktion \vec{B} oder vom Vektorpotential \vec{A} steht. Die Lösungen für \vec{E} , \vec{B} und \vec{A} sind dann wegen der Coulombgleichung noch der Nebenbedingung unterworfen, dass die Divergenz verschwindet (Transversalitätsbedingung).

Allgemeine ebene Wellen

Ein allgemeiner wichtiger Lösungstyp von (2) sind ebene Wellen:

$$f(\vec{x}, t) = f(\vec{n} \cdot \vec{x} \mp ct) \quad (4)$$

für beliebige (mindestens zweifach differenzierbare) Funktionen f und dem Einheitsvektor \vec{n} in einer beliebigen Raumrichtung, mit $|\vec{n}| = 1$. Um zu zeigen, dass Gl. (4) eine Lösung der Wellengleichung ist, verwenden wir die Abkürzung

$$\xi = \vec{n} \cdot \vec{x} \mp ct \quad (5)$$

und bilden:

$$\begin{aligned} (\nabla f)_\alpha &= \frac{\partial f}{\partial x_\alpha} = \frac{\partial f}{\partial \xi} n_\alpha \rightsquigarrow \nabla f = \vec{n} \frac{df}{d\xi}; & \Delta f &= \vec{n}^2 \frac{d^2 f}{d\xi^2} = \frac{d^2 f}{d\xi^2}; \\ \frac{\partial f}{\partial t} &= \frac{\partial f}{\partial \xi} (\mp c) \rightsquigarrow \mp \frac{1}{c} \frac{\partial f}{\partial t} = \frac{df}{d\xi} & \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 f}{\partial t^2} &= \frac{d^2 f}{d\xi^2}. \end{aligned} \quad (6)$$

und somit

$$\Delta f - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 f}{\partial t^2} = 0. \quad (7)$$

Damit ist

$$\vec{E} = \vec{E}_0 f(\vec{x}, t) \quad (8)$$

Lösung der Gleichung $\square \vec{E} = 0$; analog für \vec{B} und \vec{A} .

Zum Begriff „Ebene Wellen“

Funktionen vom Typ (4) beschreiben Wellen, deren Wellenfronten Ebenen sind: Die Punkte \vec{x} , in denen $f(\vec{x}, t)$ zu einer festen Zeit t den gleichen Wert annimmt, liegen auf einer Ebene (Hesse'sche Normalform)

$$\vec{n} \cdot \vec{x} = \text{const}, \quad (9)$$

die senkrecht zu \vec{n} steht. Je nach Wahl des Vorzeichens in (4) erhält man Wellen, die in $\pm \vec{n}$ -Richtung laufen.

Monochromatische ebene Wellen

Eine spezielle Form der ebenen Welle ist die Wahl

$$f(\xi) = \exp\left(i \frac{\omega}{c} \xi\right)$$

mit der man z.B. die elektrische Feldstärke in der Form

$$\vec{E} = \vec{E}_0 \exp(i(\vec{k} \cdot \vec{x} \mp \omega t)) \quad (10)$$

erhält. Dabei ist

$$\vec{k} = k \vec{n}, \quad (11)$$

und ω und \vec{k} hängen über die *Dispersionsrelation*

$$\omega^2 = k^2 c^2 \quad (12)$$

zusammen, wie man durch Einsetzen von Gl. (10) in die Wellengleichung $\square \vec{E} = 0$ sofort sieht. Eine ebene Welle vom Typ (10) nennt man *monochromatisch*, da sie nur eine (Kreis-)Frequenz ω enthält. Entsprechende Lösungen findet man für \vec{A} und \vec{B} .

Terminologie

Wellenvektor	\vec{k}	
Wellenzahl	k	$k = \vec{k} $
Kreisfrequenz	ω	$\omega = c k$
Frequenz	ν	$\nu = \omega/(2\pi)$
Wellenlänge	λ	$\lambda = (2\pi)/k = c/\nu$
Schwingungsdauer	T	$T = (2\pi)/\omega = 1/\nu$

Anhand von Gl. (10) sieht man, dass T die zeitliche Periodizität der Welle bei festgehaltenem Ort \vec{x} beschreibt,

$$\exp(i\omega(t+T)) = \exp(i\omega t + 2\pi i) = \exp(i\omega t); \quad (13)$$

analog gibt die Wellenlänge λ die räumliche Periodizität an:

$$\exp(ik(z+\lambda)) = \exp(ikz + 2\pi i) = \exp(ikz) \quad (14)$$

für eine Welle in z -Richtung zu fester Zeit t .

Phasengeschwindigkeit

Die Größe

$$\phi = \vec{k} \cdot \vec{x} - \omega t \quad (15)$$

nennt man die *Phase* der Welle. Unter der Phasengeschwindigkeit v_{ph} versteht man die Geschwindigkeit, mit der sich ein Wellenpunkt mit vorgegebener fester Phase bewegt. Um v_{ph} zu bestimmen, betrachten wir wieder eine ebene Welle in z -Richtung und bilden das totale Differential von $\phi(z, t)$:

$$d\phi = k dz - \omega dt. \quad (16)$$

Für $\phi = \text{const.}$ folgt dann:

$$v_{ph} = \frac{dz}{dt} = \frac{\omega}{k} = c; \quad (17)$$

die Phasengeschwindigkeit ist also gleich der Lichtgeschwindigkeit c .

Wellenpakete, Phasen und Gruppengeschwindigkeit

Zur Vereinfachung betrachten wir jetzt zunächst ein Wellenpaket, das sich nur in einer Koordinatenrichtung, z.B. in z -Richtung ausbreitet. $\mathbf{u}(z, t)$ sei eine Komponente von \vec{E} oder \vec{B} .

Aus $\square \mathbf{u} = 0$ folgt die Darstellung

$$\mathbf{u}(z, t) = \int_{-\infty}^{\infty} dk \left\{ \tilde{\mathbf{u}}(k) e^{i(kz - \omega(k)t)} + \tilde{\mathbf{u}}^*(k) e^{-i(kz - \omega(k)t)} \right\} \quad (18)$$

mit $\omega(k) = ck$ für elektromagnetische Wellen, wobei $\mathbf{u}(z, t)$ so gewählt ist, dass die Überlagerung ebener Wellen reell ist, wie für eine reelle Feldkomponente erforderlich. Da aber das folgende im Prinzip auch für Wellen mit anderer Dispersion $\omega(k)$ gilt, bleiben wir zunächst bei der Schreibweise $\omega(k)$. Wir nehmen jetzt an, dass die auftretenden Wellenzahlen aus einem *Band*, d.h. einem begrenzten Bereich in der Nähe der Wellenzahl k_0 stammen. Wir wählen als Amplitudenfunktion $\tilde{\mathbf{u}}(k)$ eine Gaußfunktion

$$\tilde{\mathbf{u}}(k) = \frac{\mathbf{u}_0}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp\left(-\frac{(k-k_0)^2}{2\sigma^2}\right)$$

mit Maximum $k = k_0$ und Breite σ , die auf $\int dk \tilde{\mathbf{u}}(k) = \mathbf{u}_0$ normiert ist. Das bedeutet auch, dass

$$\lim_{\sigma \rightarrow 0} \frac{\tilde{\mathbf{u}}(k)}{\mathbf{u}_0} = \delta(k - k_0).$$

Wir setzen $\tilde{\mathbf{u}}(k)$ in das erste Integral von Gl. (18) ein und substituieren dabei $\kappa = (k - k_0)/\sigma$, d.h. $d\kappa = dk/\sigma$ und $k = k_0 + \sigma\kappa$:

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} dk \tilde{\mathbf{u}}(k) e^{i(kz - \omega(k)t)} &= \frac{\mathbf{u}_0}{\sqrt{2\pi}\sigma} \int_{-\infty}^{\infty} dk \exp\left[-\frac{(k-k_0)^2}{2\sigma^2} + i(kz - \omega(k)t)\right] \\ &= \frac{\mathbf{u}_0}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} d\kappa \exp\left[-\frac{\kappa^2}{2} + i(k_0 + \sigma\kappa)z - i\omega(k_0 + \sigma\kappa)t\right]. \end{aligned}$$

Hier kommen wir ohne Kenntnis von $\omega(k)$ nicht weiter; aber für eine hinreichend schmale Gaußkurve (für kleines σ) können wir $\omega(k_0 + \sigma\kappa)$ nach $\sigma\kappa$ entwickeln und mit der linearen Näherung arbeiten:

$$\omega(k_0 + \sigma\kappa) \approx \omega(k_0) + \nu\sigma\kappa \quad \text{mit} \quad \nu = \left(\frac{d\omega(k)}{dk}\right)_{k=k_0}$$

Für elektromagnetische Wellen ist $\omega(k) = ck$ linear, und diese Näherung wird exakt. Einsetzen ergibt

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} dk \tilde{\mathbf{u}}(k) e^{i(kz - \omega(k)t)} &= \frac{\mathbf{u}_0}{\sqrt{2\pi}} e^{i(k_0 z - \omega(k_0)t)} \int_{-\infty}^{\infty} d\kappa \exp\left[-\frac{\kappa^2}{2} + i\sigma(z - \nu t)\kappa\right] \\ &= \mathbf{u}_0 e^{i(k_0 z - \omega(k_0)t)} \exp\left[-\frac{\sigma^2}{2}(z - \nu t)^2\right] \end{aligned}$$

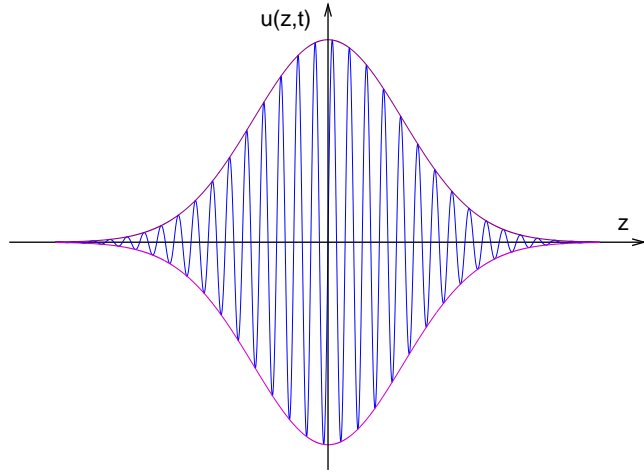


Abbildung 1:
Momentaufnahme
des Wellenpakets für eine
feste Zeit t .

(19)

wegen

$$\begin{aligned} -\frac{\kappa^2}{2} + i\sigma(z - vt)\kappa &= \frac{1}{2} \{ (i\kappa)^2 + 2i\sigma(z - vt)\kappa + \sigma^2(z - vt)^2 \} - \frac{1}{2} \sigma^2(z - vt)^2 \\ &= \frac{1}{2} (i\kappa + \sigma(z - vt))^2 - \frac{1}{2} \sigma^2(z - vt)^2 \end{aligned} \quad (20)$$

und

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\kappa \exp \left[\frac{1}{2} (i\kappa + \sigma(z - vt))^2 \right] = \sqrt{2\pi} \quad (21)$$

Der zweite Teil von Gl. (18) liefert das konjugiert Komplexe davon. End-
ergebnis:

$$\mathbf{u}(z, t) = 2u_0 \cos[k_0 z - \omega(k_0)t] \exp \left[-\frac{\sigma^2}{2} (z - vt)^2 \right] \quad (22)$$

Abb. 1 zeigt die z -Abhängigkeit der Lösung für eine feste Zeit t .

Die Welle

$$\propto \cos[k_0 z - \omega(k_0)t] = \cos \left[k_0 \left(z - \frac{\omega(k_0)}{k_0} t \right) \right]$$

bewegt sich mit Phasengeschwindigkeit

$$v_{\text{ph}} = \frac{\omega(k_0)}{k_0}$$

in z -Richtung. Sie wird begrenzt durch den z -abhängigen Amplitudenfaktor

$$\pm \exp \left[-\frac{\sigma^2}{2} (z - vt)^2 \right]$$

der Breite $1/\sigma$, der sich mit der Gruppengeschwindigkeit

$$v_{\text{gr}} = v = \left(\frac{d\omega(k)}{dk} \right)_{k=k_0}$$

in z -Richtung bewegt. Der Amplitudenfaktor formt das Wellenpaket. Im Allgemeinen sind Phasengeschwindigkeit und Gruppengeschwindigkeit verschieden; dann gleitet die Welle durch das Wellenpaket hindurch. Im Fall elektromagnetischer Wellen jedoch sind beide gleich der Lichtgeschwindigkeit:

$$\begin{aligned} \text{Phasengeschwindigkeit} \quad v_{\text{ph}} &= \frac{\omega(k)}{k} = c \\ \text{Gruppengeschwindigkeit} \quad v_{\text{gr}} &= \frac{\partial \omega(k)}{\partial k} = c \end{aligned} \quad (23)$$

Welle und Wellenpaket sind hier also starr verbunden. Die Verallgemeinerung auf eine allgemeine Ausbreitungsrichtung \vec{k} ist unproblematisch; das Wellenpaket wird dann durch

$$\mathbf{u}(\vec{x}, t) = \int d^3k \tilde{\mathbf{u}}(\vec{k}) e^{i(\vec{k}\vec{x} - \omega(\vec{k})t)} \quad (24)$$

dargestellt, und man erhält für das Wellenpaket die Gleichung

$$\text{Re } \mathbf{u}(\vec{x}, t) = \cos [\vec{k}_0 \vec{x} - \omega(\vec{k}_0)t] \int d^3k f(\vec{k} - \vec{k}_0) \cos [(\vec{k} - \vec{k}_0)(\vec{x} - \vec{v}t)] \quad (25)$$

mit einer um \vec{k}_0 zentrierten Amplitudenfunktion $\tilde{\mathbf{u}}(\vec{k}) = f(\vec{k} - \vec{k}_0)$.

1. Fourierreihe und Fouriertransformation

1.0 Motivation

Die Fourieranalyse hat in der Quantenmechanik mehrere wichtige Anwendungen.

a) **Basistransformation:** Durch Fouriertransformation kann man zwischen Ortsraum ($\psi(\vec{r}, t)$) und Impulsraum ($\psi(\vec{p}, t)$) wechseln. Das hat z.B. den Vorteil, dass der Impulsoperator im Impulsraum ebenso einfach wird wie der Ortsoperator im Ortsraum.

b) **Spektralanalyse/Reihenentwicklung:** Die Fourieranalyse erlaubt es zum Beispiel, festzustellen, welche Frequenzen zu einem komplizierten zeitabhängigen Messsignal gehören.

c) **Lösung von Differentialgleichungen:** Fouriertransformation vereinfacht Differentialgleichungen oft stark, indem sie Ableitungen durch Produkte ersetzt.

1.1 Fourierreihen

Periodische Funktionen lassen sich nach „Teilfrequenzen“ zerlegen; dieses Verfahren ist unter den Namen Fourieranalyse bekannt.

Definition der periodischen Funktionen: Eine Funktion $f(t)$ heißt periodisch mit Periode T ($T > 0$), wenn für alle t gilt: $f(t + T) = f(t)$. Der kleinste Wert von T , für das das erfüllt ist, heißt kleinste Periode oder einfach Periode von $f(t)$. Die Fourieranalyse beruht auf dem Fouriertheorem:

Jede eindeutige Funktion $f(t)$, die auf dem geschlossenen Intervall $[-\pi, \pi]$ definiert ist, kann auf diesem Intervall durch die trigonometrische Reihe

$$f(t) = \frac{a_0}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} [a_n \cos(nt) + b_n \sin(nt)] \quad (1.1)$$

dargestellt werden, wobei die Entwicklungskoeffizienten nach den Euler-

schen Formeln

$$\begin{aligned} a_n &= \frac{1}{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} dt f(t) \cos(nt), & n = 0, 1, 2, \dots \\ b_n &= \frac{1}{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} dt f(t) \sin(nt), & n = 1, 2, \dots \end{aligned} \quad (1.2)$$

bestimmt werden (Existenz dieser Integrale ist also erforderlich). Diese Reihenentwicklung der Funktion $f(t)$ heißt Fourierreihe. Die punktweise Konvergenz dieser Reihe wird durch das Dirichlet-Theorem bewiesen, wobei die Funktion $f(t)$ den Dirichletbedingungen genügen muß ($f(t)$ beschränkt im Intervall, nur endlich viele Unstetigkeiten, nur endlich viele Maxima und Minima).

Veränderung der Intervalls von $[-\pi, \pi]$ auf $[-T/2, T/2]$ (d.h. Periode T statt 2π): Dann ist

$$\begin{aligned} f(t) &= \frac{a_0}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} \left[a_n \cos\left(\frac{2\pi n t}{T}\right) + b_n \sin\left(\frac{2\pi n t}{T}\right) \right] \\ \text{mit } a_n &= \frac{2}{T} \int_{-T/2}^{T/2} dt f(t) \cos\left(\frac{2\pi n t}{T}\right), & n = 0, 1, \dots \\ b_n &= \frac{2}{T} \int_{-T/2}^{T/2} dt f(t) \sin\left(\frac{2\pi n t}{T}\right), & n = 1, 2, \dots \end{aligned} \quad (1.3)$$

Übergang zur komplexen Form: Wir ersetzen \cos und \sin durch die komplexe Exponentialfunktion:

$$\begin{aligned} f(t) &= \frac{a_0}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} \left[a_n \frac{\exp\left(i\frac{2\pi n t}{T}\right) + \exp\left(-i\frac{2\pi n t}{T}\right)}{2} + b_n \frac{\exp\left(i\frac{2\pi n t}{T}\right) - \exp\left(-i\frac{2\pi n t}{T}\right)}{2i} \right] \\ &= \frac{a_0}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{a_n - ib_n}{2} \exp\left(i\frac{2\pi n t}{T}\right) + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{a_n + ib_n}{2} \exp\left(-i\frac{2\pi n t}{T}\right) \\ &= \sum_{n=-\infty}^{\infty} f_n \exp\left(i\frac{2\pi n t}{T}\right) \\ \text{mit } f_0 &= \frac{a_0}{2}, \quad f_n = \frac{a_n - ib_n}{2}, \quad f_{-n} = \frac{a_n + ib_n}{2}. \end{aligned} \quad (1.4)$$

Mit der Benennung $\omega_n = 2\pi n/T$ gelangen wir also zur komplexen Fou-

rierreihe

$$f(t) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} f_n \exp(i\omega_n t). \quad (1.5)$$

Die Fourierreihe (1.5) konvergiert gleichmäßig (und damit auch punktweise), wenn $f(t)$ periodisch mit der Periode T und stückweise glatt ist. Die (schwächere) Forderung der Konvergenz im quadratischen Mittel ist erfüllt für periodische, in $[-T/2, T/2]$ stetige Funktionen $f(t)$.

Die **Fourierkoeffizienten** f_n sind durch

$$f_n = \frac{1}{T} \int_{-T/2}^{T/2} dt f(t) \exp(-i\omega_n t) \quad (1.6)$$

gegeben. Für den Beweis verwenden wir die Orthonormalitätsrelation

$$\frac{1}{T} \int_{-T/2}^{T/2} dt \exp(i\omega(n-m)t) = \delta_{mn} \quad \text{wobei } \omega_n = \omega_m = \frac{2\pi n}{T} \quad (1.7)$$

und finden, wenn wir $f(t)$ mit $\exp(-i\omega_m t)$ multiplizieren und über das Intervall $[-T/2, T/2]$ integrieren:

$$\begin{aligned} \int_{-T/2}^{T/2} dt f(t) \exp(-i\omega_m t) &= \int_{-T/2}^{T/2} dt \sum_{n=-\infty}^{\infty} f_n \exp(i(\omega_n - \omega_m)t) \\ &= T \sum_n f_n \delta_{mn} = T f_m. \end{aligned} \quad (1.8)$$

Damit ist Gl. (1.6) bewiesen.

1.2 Fourierintegrale

Nicht-periodische Funktionen lassen sich i.a. durch Fourierintegrale darstellen, die sich aus Gl. (1.5) im Limes $T \rightarrow \infty$ ergeben, d.h. das Periodizitätsintervall ist $[-T/2, T/2]_{T \rightarrow \infty}$, und damit muss die Summe über ω_n durch ein Integral über ω ersetzt werden. $T \rightarrow \infty$ bedeutet dann, dass $\Delta\omega = 2\pi/T \rightarrow 0$ geht, d.h. Schritte zwischen benachbarten Frequenzen werden immer kleiner, und die erlaubten Frequenzen werden zu einem Kontinuum. Da die unendliche Summe der Fourierreihe in ein Integral übergeht, werden auch die Koeffizienten f_n zu kontinuierlichen Funktionen $\tilde{f}(\omega)$.

Sei $\Delta\omega = 2\pi/T$ der Abstand benachbarter Frequenzen ω_n , so ist

$$f(t) = \sum_n \frac{\sqrt{2\pi}\Delta\omega}{\sqrt{2\pi}\Delta\omega} f_n \exp(i\omega_n t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \Delta\omega \tilde{f}(\omega_n) \exp(i\omega_n t) \quad (1.9)$$

mit

$$\tilde{f}(\omega_n) = \frac{\sqrt{2\pi}f_n}{\Delta\omega} = \frac{T}{\sqrt{2\pi}} f_n \quad (1.10)$$

und im Grenzübergang $T \rightarrow \infty$

$$\tilde{f}(\omega_n) \xrightarrow{T \rightarrow \infty} \tilde{f}(\omega), \quad \Delta\omega \xrightarrow{T \rightarrow \infty} d\omega, \quad \omega_n \xrightarrow{T \rightarrow \infty} \omega \quad (1.11)$$

Also kann man Gl. (1.9) als *Riemannsumme* des *Fourierintegrals*

$$f(t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \tilde{f}(\omega) \exp(i\omega t) \quad (1.12)$$

auffassen. Für die Umkehrung von Gl. (1.12) zeigt der Vergleich von Gl. (1.6) und (1.10):

$$\tilde{f}(\omega) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dt f(t) \exp(-i\omega t). \quad (1.13)$$

$\tilde{f}(\omega)$ heißt die *Fouriertransformierte* zu $f(t)$. Sie existiert und (1.12) konvergiert im quadratischen Mittel für alle quadratintegrablen Funktionen $f(t)$, für die

$$\int_{-\infty}^{\infty} dt |f(t)|^2 < \infty; \quad (1.14)$$

$\tilde{f}(\omega)$ ist dann auch quadratintegrabel.

Beispiel 1: Fouriertransformierte der Exponentialfunktion

Wir suchen die Fouriertransformierte $\tilde{f}(\omega)$ zur Funktion

$$f(t) = \begin{cases} 0 & t < 0 \\ A \exp(-\lambda t) & t \geq 0, \lambda > 0 \end{cases} \quad (1.15)$$

Dann gilt nach Gl. (1.13):

$$\begin{aligned}\tilde{f}(\omega) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dt \exp(-i\omega t) f(t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_0^{\infty} dt \exp(-i\omega t) \exp(-\lambda t) \\ &= \frac{A}{\sqrt{2\pi}} \left[-\frac{\exp(-(i\omega + \lambda)t)}{i\omega + \lambda} \right]_0^{\infty} = \frac{A}{\sqrt{2\pi}} \frac{1}{i\omega + \lambda}\end{aligned}\quad (1.16)$$

Man sieht, dass der Vorfaktor A nur die Amplitude, nicht die Form der Fouriertransformierten beeinflusst.

Beispiel 2: Rechteckförmige Frequenzverteilung

Wir betrachten die Rechteckverteilung von Frequenzen

$$\tilde{f}(\omega) = \begin{cases} 1 & |\omega| < \Omega \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \quad (1.17)$$

und suchen die zugehörige Zeitentwicklung $f(t)$. Diese ergibt sich durch inverse Fouriertransformation (Gl. (1.12))

$$\begin{aligned}f(t) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \tilde{f}(\omega) \exp(i\omega t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\Omega}^{\Omega} d\omega \exp(i\omega t) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \left[\frac{\exp(i\omega t)}{it} \right]_{-\Omega}^{\Omega} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{e^{i\Omega t} - e^{-i\Omega t}}{it} = \frac{2\Omega}{\sqrt{2\pi}} \frac{\sin(\Omega t)}{\Omega t}\end{aligned}\quad (1.18)$$

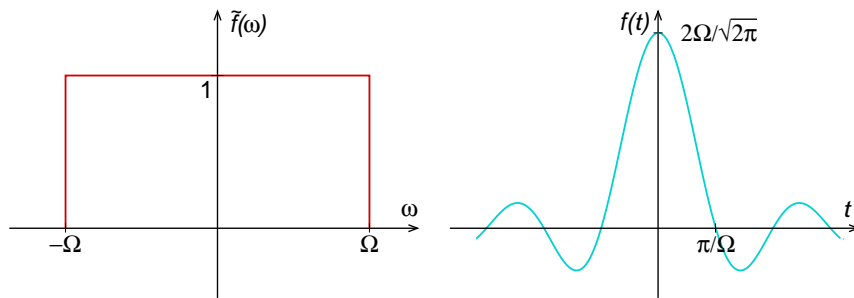


Abbildung 1.1: Rechteckfunktion und ihre Fouriertransformierte.

Die Dauer Δt des kurzen Wellenzuges von $f(t)$ schätzt man aus Figur 1.1 ab zu:

$$\Delta t \approx \frac{\pi}{\Omega} \quad \text{und mit} \quad \Delta\omega = 2\Omega \quad \curvearrowright \quad \Delta\omega \Delta t \approx 2\pi. \quad (1.19)$$

Je schmaler (breiter) das Signal $f(t)$ werden soll, desto breiter (schmäler) ist das Frequenzspektrum, das man benötigt. Diese *Unschärferelation* ist nicht an das Beispiel (1.17) gebunden, sondern ist ein charakteristisches Merkmal der Fouriertransformation.

Bemerkung

Die symmetrische Aufteilung des Faktors $1/\sqrt{2\pi}$ ist nicht zwingend; es gibt ebenso die Möglichkeit der Konvention

$$f(t) = \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \dots \quad \text{und} \quad \tilde{f}(\omega) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dt \dots$$

oder

$$f(t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \dots \quad \text{und} \quad \tilde{f}(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} dt \dots$$

Ob die Fouriertransformierte als Integral über $\exp(-i\omega t)$ oder $\exp(i\omega t)$ definiert wird, kann auch von Autor zu Autor variieren. Man kann sich diese Freiheit klarmachen, indem man Gl. (1.13) in Gl. (1.12) einsetzt:

$$f(t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \exp(i\omega t) \int_{-\infty}^{\infty} dt' \exp(-i\omega t') f(t') \quad (1.20)$$

Diese Beziehung heißt Fourierintegraltheorem. Durch die Substitution $\omega = -\omega'$ kann man es auch in die Form

$$f(t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' \exp(-i\omega' t) \int_{-\infty}^{\infty} dt' \exp(i\omega' t') f(t') \quad (1.21)$$

bringen, sodass klar wird, dass alle vorher genannten Konventionen für die Fouriertransformierte gleichberechtigt sind.

Fouriertransformation in mehreren Dimensionen

Bisher haben wir nur die Fouriertransformation von der Zeit- zur Frequenzachse und zurück betrachtet; wir können die Fouriertransformation auch im dreidimensionalen Ortsraum durchführen. Die Fouriertransformation von $f(x, y, z)$ ist definiert als

$$\tilde{f}(k_x, k_y, k_z) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int dx e^{-ik_x x} \int dy e^{-ik_y y} \int dz e^{-ik_z z} f(x, y, z) \quad (1.22)$$

Die inverse Transformation lautet

$$f(x, y, z) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int dk_x e^{ik_x x} \int dk_y e^{ik_y y} \int dk_z e^{ik_z z} \tilde{f}(k_x, k_y, k_z) \quad (1.23)$$

Das lässt sich kompakter schreiben als

$$\tilde{f}(\vec{k}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int d^3x e^{-i\vec{k}\cdot\vec{x}} f(\vec{x}) \quad (1.24)$$

$$f(\vec{x}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int d^3k e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}} \tilde{f}(\vec{k}) \quad (1.25)$$

wobei die Integrale über den gesamten Orts- oder Wellenvektorraum (\vec{k} -Raum) laufen. Je nach Art der Funktionen $f(\vec{x})$ und $\tilde{f}(\vec{k})$ bieten sich andere als kartesische Koordinaten bei der Berechnung der Integrale an. In Gleichung (1.25) können wir die Entwicklung der Funktion $f(\vec{x})$ in ebene Wellen aus Kap. 0.3 wiedererkennen, mit $\tilde{f}(\vec{k})$ als Amplitude der Wellen $e^{-i\vec{k}\cdot\vec{x}}$.

Fouriertransformation von Ableitungen

Wir bilden, analog zur Fouriertransformation von $f(t)$

$$\tilde{f}(\omega) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dt f(t) e^{-i\omega t} \quad (1.26)$$

die Fouriertransformation der Ableitung $\frac{df(t)}{dt}$

$$\tilde{f}_1(\omega) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dt \frac{df(t)}{dt} e^{-i\omega t} \quad (1.27)$$

und erhalten durch partielle Integration

$$\tilde{f}_1(\omega) = \left[\frac{1}{\sqrt{2\pi}} f(t) e^{-i\omega t} \right]_{-\infty}^{\infty} - \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dt f(t) (-i\omega) e^{-i\omega t} = i\omega \tilde{f}(\omega) \quad (1.28)$$

wobei wir annehmen konnten, daß $f(t) \rightarrow 0$ für $t \rightarrow \pm\infty$ (das ist Voraussetzung für die Existenz der Fouriertransformation, denn sonst wäre $f(t)$ nicht quadratintegrabel). Die gefundene Beziehung lässt sich leicht auf die l -te Ableitung verallgemeinern,

$$\tilde{f}_l(\omega) = (i\omega)^l \tilde{f}(\omega), \quad (1.29)$$

vorausgesetzt, daß alle integrierten Terme für $t \rightarrow \pm\infty$ verschwinden. Diese Beziehung macht die Fouriertransformation nützlich bei der Lösung von Differentialgleichungen. Die Ableitung ist durch eine Multiplikation in ω -Raum ersetzt worden.

Fouriertransformation einer Differentialgleichung

Wir betrachten die Differentialgleichung einer erzwungenen Schwingung

$$\ddot{x} + a\dot{x} + bx = f(t) \quad (1.30)$$

$x(t)$ ist die Auslenkung aus der Ruhelage als Funktion der Zeit und $f(t)$ ist die treibende Kraft; gedämpft wird die Schwingung durch eine geschwindigkeitsabhängige Reibungskraft, und b ist proportional zur Stärke der Rückstellkraft. Wir stellen nun die Auslenkung durch ihre Fouriertransformation dar:

$$x(t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{i\omega t} \tilde{x}(\omega) \quad (1.31)$$

Nun Fouriertransformieren wir die Differentialgleichung (1.30):

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{-i\omega t} (\ddot{x} + a\dot{x} + bx) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{-i\omega t} f(t) \quad (1.32)$$

$$\curvearrowright (i\omega)^2 \tilde{x}(\omega) + (i\omega) a \tilde{x}(\omega) + b \tilde{x}(\omega) = \tilde{f}(\omega) \quad (1.33)$$

$$\curvearrowright \tilde{x}(\omega) = \frac{\tilde{f}(\omega)}{-\omega^2 + ai\omega + b} \quad (1.34)$$

Wir transformieren $\tilde{x}(\omega)$ zurück auf die Zeitachse:

$$x(t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{i\omega t} \tilde{x}(\omega) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \frac{e^{i\omega t} \tilde{f}(\omega)}{b + ai\omega - \omega^2} \quad (1.35)$$

Für eine gegebene treibende Kraft $f(t)$ und damit ihrer Fouriertransformierten $\tilde{f}(\omega)$ müssen wir also nur noch das Integral (1.35) ausführen, wozu allerdings etwas Funktionentheorie erforderlich ist.

Fouriertransformation als Beispiel einer Integraltransformation

Die Fouriertransformation ist nur ein Vertreter einer allgemeineren Transformation, der Integraltransformation

$$\tilde{f}(\alpha) = \int_a^b dt K(\alpha, t) f(t) \quad (1.36)$$

wobei $\tilde{f}(\alpha)$ die Transformation von $f(t)$ bezüglich des Kerns $K(\alpha, t)$ ist, und α ist die Transformationsvariable. Zum Beispiel ist die Laplacetransformation definiert durch $K(\alpha, t) = e^{-\alpha t}$, $a = 0$, $b = \infty$:

$$\tilde{f}(\alpha) = \int_0^{\infty} dt e^{-\alpha t} f(t) \quad (1.37)$$

Die Laplacetransformation kann wichtig werden, wenn die Fouriertransformation nicht existiert, z. B. weil $f(t)$ nicht gegen null geht für $t \rightarrow \infty$. Für die Umkehrung der Laplacetransformation sind Kurvenintegrale in der komplexen Ebene (Funktionentheorie) erforderlich. Allerdings sind viele Laplacetransformationspaare tabelliert. Die Laplacetransformation verwandelt ebenso wie die Fouriertransformation Ableitungen in Multiplikationen und eignet sich daher ebenfalls zur Vereinfachung oder Lösung von Differentialgleichungen.

1.3 δ -Distribution

Die Fouriertransformation (1.12), (1.13) führt auf das folgende mathematische Problem: Setzt man Gl. (1.13) in (1.12) ein, so muss (nach Vertauschung der Integrationsreihenfolge)

$$f(t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dt' f(t') \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \exp(i\omega(t-t')) = \int_{-\infty}^{\infty} dt' f(t') \delta(t-t') \quad (1.38)$$

mit

$$\delta(t-t') = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \exp(-i\omega(t-t')) \quad (1.39)$$

für beliebige quadratintegrale Funktionen $f(t)$ gelten. Die hier eingeführte Größe $\delta(t-t')$ ist offensichtlich keine gewöhnliche Funktion, sondern eine *Distribution*, die streng genommen nicht für sich alleine stehen darf, sondern nur in Verbindung mit der Integration in (1.38) erklärt ist. Die grundlegende Beziehung für $\delta(t)$ ist

$$\int_{-\infty}^{\infty} dt f(t) \delta(t) = f(0) \quad (1.40)$$

Das bedeutet eine Verallgemeinerung des Begriffs der Funktion $f(x)$, die jedem $x \in \mathbb{R}$ einen Wert zuweist; stattdessen weist eine Distribution $f(x)$ der Größe $\int dx f(x) g(x)$ für jede geeignet gewählte Testfunktion $g(x)$ einen Wert zu.

Darstellungen

Die δ -Distribution, als deren Definition wir im folgenden Gl. (1.38) betrachten wollen, kann durch jede Folge stetiger Funktionen δ_n , für die

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \int_{-\infty}^{\infty} dt' f(t') \delta_n(t-t') = f(t) \quad (1.41)$$

gilt, dargestellt werden. Beispiele:

1.) Rechteck

$$\delta_n(t) = n \quad \text{für } |t| < \frac{1}{2n}; \quad \delta_n(t) = 0 \quad \text{sonst.} \quad (1.42)$$

2.) Gauß-Funktion („Glockenkurve“)

$$\delta_n(t) = n \exp(-\pi t^2 n^2). \quad (1.43)$$

3.) Die Darstellung

$$\delta_n(t) = \frac{1}{\pi} \frac{\sin(\pi n t)}{t} = \frac{1}{2\pi} \int_{-n}^n d\omega \exp(i\omega t) \quad (1.44)$$

führt gerade auf die Schreibweise (1.39).

Vorsicht: Die Gleichungen (1.41) - (1.44) sind so zu verstehen, dass die t' -Integration vor der Limes-Bildung $n \rightarrow \infty$ auszuführen ist!

Rechenregeln

1.) $\delta(t) = \delta(-t)$

2.) $\delta(at) = \frac{1}{|a|} \delta(t)$

Beweis:

a) Fall $a > 0$: Für beliebige Funktionen $f(t)$ gilt

$$\int_{-\infty}^{\infty} dt f(t) \delta(at) = \frac{1}{a} \int_{-\infty}^{\infty} dt' f\left(\frac{t'}{a}\right) \delta(t') = \frac{f(0)}{a} = \int_{-\infty}^{\infty} dt f(t) \frac{\delta(t)}{a}$$

wobei wir $t' = at$ substituiert haben. Durch Vergleich der Integranden folgt die Behauptung.

b) Fall $a = -b < 0$: Wiederum gilt für beliebiges $f(t)$

$$\int_{-\infty}^{\infty} dt f(t) \delta(at) = \frac{1}{-b} \int_{-\infty}^{\infty} dt' f\left(\frac{t'}{-b}\right) \delta(t') = \frac{f(0)}{b} = \int_{-\infty}^{\infty} dt f(t) \frac{\delta(t)}{|a|}$$

wobei wir $t' = at = -bt$ substituiert haben. Beide Fälle zusammen ergeben obige Beziehung.

$$3.) \delta(t^2 - a^2) = \frac{\delta(t+a) + \delta(t-a)}{2|a|}; \quad a \neq 0.$$

Dies ist ein Spezialfall der allgemeineren Beziehung

$$\delta(h(t)) = \sum_i \frac{\delta(t-t_i)}{|h'(t_i)|}$$

wobei t_i die Nullstellen der Funktion $h(t)$ sind.

4.) Ableitung der Deltafunktion $\delta'(t)$

Man findet

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} dt f(t) \delta'(t) &= [f(t) \delta(t)]_{-\infty}^{\infty} - \int_{-\infty}^{\infty} dt f'(t) \delta(t) = -f'(0) \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dt f'(t) \delta(t) \end{aligned}$$

Allgemein gilt

$$\int_{-\infty}^{\infty} dt f(t) \delta^{(n)}(t) = (-1)^n \int_{-\infty}^{\infty} dt f^{(n)}(t) \delta(t); \quad (1.45)$$

d.h. die δ -Distribution ist (beliebig oft) differenzierbar, vorausgesetzt, dass f (beliebig oft) differenzierbar ist. Die Ableitung wird von der Deltafunktion also abgewälzt auf die Funktion $f(t)$, mit der die Deltafunktion unter dem Integral steht.

5.) Heaviside-Funktion

$$\theta(t) = \begin{cases} 1 & \text{für } t > 0 \\ 0 & \text{für } t < 0 \end{cases}$$

Es gilt $\theta'(t) = \delta(t)$, denn

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} dt f(t) \theta'(t) &= [f(t) \theta(t)]_{-\infty}^{\infty} - \int_{-\infty}^{\infty} dt f'(t) \theta(t) = f(\infty) - \int_0^{\infty} dt f'(t) \\ &= f(\infty) - [f(t)]_0^{\infty} = f(0) = \int_{-\infty}^{\infty} dt f(t) \delta(t) \end{aligned}$$

2. Grundlagen der Funktionalanalysis

Die Funktionalanalysis beschäftigt sich mit Vektorräumen und stetigen Abbildungen auf diesen. Wichtig ist dabei der Begriff des Funktionals, d.h. einer Abbildung von Vektoren auf Skalare (Beispiele: Norm, bestimmtes Integral) und des Operators, d.h. einer Abbildung von Vektoren auf Vektoren (Beispiele: Differentiation, unbestimmtes Integral). Man kann die Funktionalanalysis als eine Erweiterung der Linearen Algebra auffassen. Ein wichtiger Spezialfall der in der Funktionalanalysis untersuchten Vektorräume sind normierte Vektorräume, z.B. Hilberträume.

2.1 Vektorräume

Vektorräume sind in der Physik von besonderer Bedeutung, da sie oft die zugrundeliegende mathematische Struktur des physikalischen Problems widerspiegeln. Wir beginnen mit einer kurzen Wiederholung der grundlegenden Definitionen.

Definition 2.1 (Vektorraum). Es sei K ein Körper (\mathbb{R} oder \mathbb{C}) und eine Menge V gegeben mit einer inneren Verknüpfung (Addition):

$$+ : V \times V \mapsto V, \quad (|v_1\rangle, |v_2\rangle) \mapsto |v_1\rangle + |v_2\rangle$$

und einer äußeren Verknüpfung (Multiplikation mit Skalaren),

$$\cdot : K \times V \mapsto V, \quad (\alpha, |v\rangle) \mapsto \alpha \cdot |v\rangle,$$

dann heißt V Vektorraum über K , wenn gilt:

V1: V zusammen mit der Addition $+$ ist eine Abelsche Gruppe.

V2: Für die Multiplikation mit Skalaren gilt

- Distributivität: $(\alpha + \beta) \cdot |v\rangle = \alpha \cdot |v\rangle + \beta \cdot |v\rangle$
- Distributivität: $\alpha \cdot (|v_1\rangle + |v_2\rangle) = \alpha \cdot |v_1\rangle + \alpha \cdot |v_2\rangle$
- Assoziativität: $\alpha \cdot (\beta |v\rangle) = (\alpha\beta) \cdot |v\rangle$

– Existenz eines neutralen Elements: $1 \cdot |v\rangle = |v\rangle$

$\forall \alpha, \beta \in \mathbb{K}$ und $|v\rangle, |v_1\rangle, |v_2\rangle \in V$.

Die Elemente $|v\rangle \in V$ heißen **Vektoren**. Als Schreibweise für Vektoren wählen wir $|v\rangle$, nach Dirac auch **ket** genannt.

Definition 2.2 (Untervektorraum). Sei V ein \mathbb{K} -Vektorraum. Die Teilmenge $W \in V$ heißt Untervektorraum von V , wenn gilt

UV1: $W \neq \emptyset$

UV2: Abgeschlossenheit bezüglich Addition : $|w_1\rangle, |w_2\rangle \in W \Rightarrow (|w_1\rangle + |w_2\rangle) \in W$

UV3: Abgeschlossenheit bezüglich Multiplikation mit Skalaren: $|w\rangle \in W, \alpha \in \mathbb{K} \Rightarrow (\alpha \cdot |w\rangle) \in W$

Dadurch wird in W eine Vektorraumstruktur induziert.

Beispiele:

- a) \mathbb{K}^n : Die Menge \mathbb{K}^n aller n -Tupel $|\alpha\rangle = (\alpha_1, \dots, \alpha_n)$, $\alpha_i \in \mathbb{K}$ (d.h. der gewohnte n -dimensionale \mathbb{K} -Vektorraum, $\mathbb{K} = \mathbb{R}$ oder $\mathbb{K} = \mathbb{C}$)
- b) l^p : Die Menge $l^p (1 \leq p < \infty)$ aller Folgen für die gilt $\sum_{n=1}^{\infty} |\alpha_n|^p < \infty$
- c) $C([a, b])$: Die Menge $C([a, b])$ aller auf dem Intervall $[a, b]$ stetigen Funktionen.
- d) $C^{(n)}([a, b])$: Die Menge $C^{(n)}([a, b])$ aller auf dem Intervall $[a, b]$ n -mal stetig differenzierbaren Funktionen.
- e) L^p : Die Menge $L^p (1 \leq p < \infty)$ aller auf dem Intervall $[a, b]$ messbaren Funktionen $f : t \mapsto f(t)$, für die das Integral $\int_a^b dt |f(t)|^p$ existiert.

2.2 Normierte Räume

In Form einer Norm führen wir eine Struktur in Vektorräumen ein; es wird sich zeigen, dass es viele verschiedene Realisierungen von Normen gibt. Normen quantifizieren den Begriff des Abstandes zwischen Vektoren.

Definition 2.3 (Norm). Es sei ein \mathbb{K} -Vektorraum V gegeben, auf dem eine Abbildung $\|\cdot\| : V \mapsto \mathbb{R}$ definiert sei. Diese Abbildung nennen wir **Norm**, wenn die folgenden Axiome gelten (wir verwenden die Schreibweise $\||v\rangle\| \equiv \|v\|$):

N1: $\|v\| \geq 0$, wobei $\|v\| = 0 \Leftrightarrow |v\rangle = 0$

N2: Homogenitätseigenschaft: $\|\alpha \cdot v\| = |\alpha| \cdot \|v\|$

N3: Dreiecksungleichung: $\|v_1 + v_2\| \leq \|v_1\| + \|v_2\|$

Einen Vektorraum mit einer Norm nennen wir **normierten Raum** und bezeichnen ihn mit $(V, \|\cdot\|)$.

Lemma 2.1. Sei $\|\cdot\|$ eine Norm auf V , dann gilt für alle $|v_1\rangle, |v_2\rangle \in V$:

$$\|v_1 \pm v_2\| \geq | \|v_1\| - \|v_2\| |.$$

Wir betrachten jetzt Folgen in Vektorräumen. Unter dem Limes der Folge $|v_n\rangle \xrightarrow{n \rightarrow \infty} |v\rangle$ verstehen wir, dass gilt: $\|v_n - v\| \xrightarrow{n \rightarrow \infty} 0$.

Normierte Räume haben die folgenden Stetigkeitseigenschaften:

Satz 2.1. Es sei ein normierter Raum $(V, \|\cdot\|)$ gegeben mit den Folgen $|v_n\rangle, |v'_n\rangle \in V$ und $\alpha_n \in \mathbb{K}$ und den Konvergenzeigenschaften $|v_n\rangle \xrightarrow{n \rightarrow \infty} |v\rangle, |v'_n\rangle \xrightarrow{n \rightarrow \infty} |v'\rangle, \alpha_n \xrightarrow{n \rightarrow \infty} \alpha$, dann gilt:

- 1) $|v_n\rangle + |v'_n\rangle \xrightarrow{n \rightarrow \infty} |v\rangle + |v'\rangle$.
- 2) $\alpha_n |v_n\rangle \xrightarrow{n \rightarrow \infty} \alpha |v\rangle$
- 3) $\|v_n\| \xrightarrow{n \rightarrow \infty} \|v\|$

Das beweist man mit den Normeigenschaften (N1)-(N3), z.B. für 1)

$$\|v_n + v'_n - (v + v')\| = \|v_n - v + v'_n - v'\| \leq \|v_n - v\| + \|v'_n - v'\| \xrightarrow{n \rightarrow \infty} 0$$

Beispiele:

Aus den Vektorraumbeispielen lassen sich z.B. mit folgenden Normen normierte Vektorräume konstruieren:

a) Euklidische Norm $\|\cdot\|_2$:

$$(\mathbb{K}^n, \|\cdot\|_2) : \|\alpha\|_2 := \sqrt{\sum_{l=1}^n |\alpha_l|^2}, \quad |\alpha\rangle \equiv |\alpha_1, \dots, \alpha_n\rangle \in \mathbb{K}^n$$

$$(C([a, b]), \|\cdot\|_2) : \|f\|_2 := \sqrt{\int_a^b dt |f(t)|^2}, \quad |f\rangle \in C([a, b])$$

b) p -Norm $\|\cdot\|_p$, ($1 \leq p < \infty$):

$$(\mathbb{R}^p, \|\cdot\|_p) : \|\alpha\|_p := \left(\sum_{l=1}^{\infty} |\alpha_l|^p \right)^{1/p}, \quad |\alpha\rangle \equiv |\alpha_1, \dots, \alpha_n, \dots\rangle \in \mathbb{R}^p$$

$$(\mathbb{R}^p([a, b]), \|\cdot\|_p) : \|f\|_p := \left(\int_a^b dt |f(t)|^p \right)^{1/p}, \quad |f\rangle \in \mathbb{R}^p([a, b])$$

Die Vektorräume \mathbb{R}^p und \mathbb{R}^p , insbesondere \mathbb{R}^2 und \mathbb{R}^2 spielen eine wichtige Rolle in der Quantenmechanik.

Skalarprodukt

Eng verbunden mit der Norm ist das Skalarprodukt in Vektorräumen.

Definition 2.4 (Skalarprodukt). Es sei ein \mathbb{K} -Vektorraum gegeben, auf dem eine Abbildung $\langle \cdot | \cdot \rangle : \mathbb{V} \times \mathbb{V} \mapsto \mathbb{K}$ (\mathbb{R} oder \mathbb{C}) definiert sei. Wir nennen diese Abbildung **Skalarprodukt**, wenn folgende Axiome für alle $|v\rangle, |v_1\rangle, |v_2\rangle \in \mathbb{V}$ und $\alpha \in \mathbb{K}$ gelten:

S1: $\langle v | v \rangle \geq 0$, wobei $\langle v | v \rangle = 0 \Leftrightarrow |v\rangle = 0$ (Skalarprodukt ist positiv definit)

S2: $\langle v_1 | \alpha v_2 \rangle = \alpha \langle v_1 | v_2 \rangle$

S3: $\langle v | v_1 + v_2 \rangle = \langle v | v_1 \rangle + \langle v | v_2 \rangle$

S4: $\langle v_1 | v_2 \rangle = (\langle v_2 | v_1 \rangle)^*$ (Skalarprodukt ist Hermitesch)

Gilt $\langle v_1 | v_2 \rangle = 0$, so heißen die Vektoren $|v_1\rangle$ und $|v_2\rangle$ **orthogonal** zueinander.

Aus diesen Definitionen folgt, dass mit $\|v\| = \sqrt{\langle v | v \rangle}$, $|v\rangle \in \mathbb{V}$ eine Norm auf \mathbb{V} erklärt wird, die **kanonische Norm** auf \mathbb{V} genannt wird. Die Normaxiome (N1)-(N3) folgen dann aus (S1)-(S3).

Beispiele:

$$a) (\mathbb{R}^2, \|\cdot\|_2) : \langle \alpha | \beta \rangle := \sum_{n=1}^{\infty} \alpha_n^* \beta_n, \quad |\alpha\rangle \equiv |\alpha_1, \dots, \alpha_n, \dots\rangle, |\beta\rangle \equiv |\beta_1, \dots, \beta_n, \dots\rangle \in \mathbb{R}^2$$

Das so definierte Skalarprodukt erzeugt die Euklidische Norm $\|\cdot\|_2$ als kanonische Norm. Man vergewissert sich leicht, dass es sich bei $\langle \alpha | \beta \rangle$ um ein Skalarprodukt handelt:

$$1) \langle \alpha | \alpha \rangle = \sum_n \alpha_n^* \alpha_n = \sum_n |\alpha_n|^2 \geq 0, \text{ und } \sum_n |\alpha_n|^2 = 0 \Leftrightarrow \alpha_n = 0 \forall n \Leftrightarrow |\alpha\rangle = |0\rangle.$$

$$2) \langle \alpha | c\beta \rangle = \sum_n \alpha_n^* (c\beta_n) = c \sum_n \alpha_n^* \beta_n = c \langle \alpha | \beta \rangle.$$

$$3) \langle \alpha | \beta + \gamma \rangle = \sum_n \alpha_n^* (\beta_n + \gamma_n) = \sum_n \alpha_n^* \beta_n + \sum_n \alpha_n^* \gamma_n = \langle \alpha | \beta \rangle + \langle \alpha | \gamma \rangle.$$

$$4) \langle \alpha | \beta \rangle = \sum_n \alpha_n^* \beta_n = \sum_n (\beta_n^* \alpha_n)^* = \langle \beta | \alpha \rangle^*.$$

$$b) (C([a, b]), \|\cdot\|_2) : \langle f | g \rangle := \int_a^b dt f(t)^* g(t), \quad |f\rangle, |g\rangle \in C([a, b])$$

Auch in diesem Fall erzeugt die Euklidische Norm $\|\cdot\|_2$ die kanonische Norm.

$$c) (C([a, b]), \|\cdot\|_2^w) : \langle f | g \rangle := \int_a^b dt w(t) \cdot f(t)^* g(t), \quad |f\rangle, |g\rangle \in C([a, b])$$

mit einer Gewichtsfunktion $w(t) \in C([a, b])$, für die $w(t) > 0$ gilt.

Einen Vektorraum mit einem Skalarprodukt nennt man auch einen **Prä-hilbertraum**.

Eine Norm, die durch ein Skalarprodukt erzeugt wird, hat folgende Eigenschaften:

Satz 2.2. Sei ein \mathbb{K} -Vektorraum gegeben mit $|v_1\rangle, |v_2\rangle \in \mathbb{V}$, $\alpha \in \mathbb{K}$, mit einer kanonischen Norm $\|\cdot\|$, die durch das Skalarprodukt $\langle \cdot | \cdot \rangle$ erzeugt wird, dann gilt:

$$1) \text{ Schwarzsche Ungleichung: } |\langle v_1 | v_2 \rangle| \leq \|v_1\| \|v_2\|.$$

$$2) \|v_1 + v_2\| = \|v_1\| + \|v_2\| \Leftrightarrow \exists \alpha \geq 0 \text{ mit } |v_1\rangle = \alpha |v_2\rangle \text{ oder } |v_2\rangle = \alpha |v_1\rangle.$$

$$3) \text{ Parallelogrammidentität: } \|v_1 + v_2\|^2 + \|v_1 - v_2\|^2 = 2(\|v_1\|^2 + \|v_2\|^2).$$

4) Polarisierungsidentität

$$a) \mathbb{K} = \mathbb{R} \quad \langle v_1 | v_2 \rangle = \frac{1}{4} (\|v_1 + v_2\|^2 - \|v_1 - v_2\|^2).$$

$$b) \mathbb{K} = \mathbb{C} \quad \langle v_1 | v_2 \rangle = \frac{1}{4} (\|v_1 + v_2\|^2 - \|v_1 - v_2\|^2 + i\|v_1 - iv_2\|^2 - i\|v_1 + iv_2\|^2).$$

Duale Vektoren und Dualräume

Wir untersuchen nun die Linearitätseigenschaften des Skalarproduktes. Wir beginnen mit dem zweiten Argument des Skalarprodukts und setzen

$$|v_1\rangle = \alpha |v_2\rangle + \beta |v_3\rangle.$$

Dann ist nach (S2), (S3)

$$\langle v|v_1 \rangle = \langle v|(\alpha|v_2 \rangle + \beta|v_3 \rangle) = \alpha\langle v|v_2 \rangle + \beta\langle v|v_3 \rangle,$$

d.h. $\langle v|v_1 \rangle$ ist eine lineare Funktion von α und β , das Skalarprodukt ist linear im zweiten Argument.

Jetzt wenden wir uns dem ersten Argument zu und setzen

$$|v \rangle = \alpha|v_2 \rangle + \beta|v_3 \rangle.$$

Wir bilden dasselbe Skalarprodukt (unter Verwendung von (S2)-(S4)):

$$\begin{aligned} \langle v|v_1 \rangle &= \langle v_1|v \rangle^* = (\alpha\langle v_1|v_2 \rangle + \beta\langle v_1|v_3 \rangle)^* = \alpha^*\langle v_1|v_2 \rangle^* + \beta^*\langle v_1|v_3 \rangle^* \\ &= \alpha^*\langle v_2|v_1 \rangle + \beta^*\langle v_3|v_1 \rangle. \end{aligned} \tag{2.1}$$

Wir finden also, dass $\langle v|v_1 \rangle$ im ersten Argument keine lineare Funktion von α und β ist. Man nennt das Skalarprodukt **antilinear** im ersten Argument. Die durch das Skalarprodukt definierte Form ist daher nicht bilinear sondern **sesquilinear**.

Um diese Asymmetrie bezüglich erstem und zweitem Argument des Skalarprodukts aufzulösen, interpretieren wir die sogenannten **bra-Vektoren** $\langle |$ als Elemente eines anderen Vektorraums. Dabei gibt es eine direkte Korrespondenz zwischen Vektoren beider Räume. Es gibt also einen Raum der kets und einen dazu **dualen Raum** der bras. $\langle v|$ heißt dann der zu $|v \rangle$ **duale Vektor**; sie tragen den identischen Namen v . Die Multiplikation eines bra mit einem ket wird jetzt durch

$$\langle v_1| \cdot |v_2 \rangle \equiv \langle v_1|v_2 \rangle$$

erklärt. Wenn wir

$$\langle v| = \langle v_2|\alpha^* + \langle v_3|\beta^*$$

setzen, finden wir

$$\langle v|v_1 \rangle = \alpha^*\langle v_2|v_1 \rangle + \beta^*\langle v_3|v_1 \rangle,$$

d.h. dasselbe Resultat wie in (2.1). Somit ist $\langle v| = \langle v_2|\alpha^* + \langle v_3|\beta^*$ der zu $|v \rangle = \alpha|v_2 \rangle + \beta|v_3 \rangle$ **duale Vektor**. Unser Skalarprodukt ist also ausschließlich zwischen bras und kets, d.h. zwischen Elementen zweier unterschiedlicher aber eng verwandter Vektorräume definiert.

Die mathematische Grundlage für die Diracsche Bra-Ket-Notation ist der Zusammenhang des Skalarprodukts auf normierten Vektorräumen (später dann Hilberträumen) mit linearen Abbildungen oder **linearen Funktionalen** auf diesen:

Zu jedem linearen Vektorraum V existiert ein sogenannter **Dualraum** linearer Funktionale auf V . Ein Funktional weist jedem Vektor $|v \rangle \in V$ einen skalaren Wert $a \in \mathbb{K}$ zu. Ein lineares Funktional erfüllt zusätzlich:

$$F(\alpha|v \rangle + \beta|w \rangle) = \alpha F(|v \rangle) + \beta F(|w \rangle) \quad \forall \alpha, \beta \in \mathbb{K} \text{ und } |v \rangle, |w \rangle \in V. \tag{2.2}$$

(Beispiel für ein lineares Funktional: das bestimmte Integral; es weist jeder Funktion f einen Skalar zu und ist linear.)

Die Menge aller linearen Funktionale bilden einen Vektorraum V^* (den **Dualraum**), wenn wir auch die Summe definieren:

$$(F_1 + F_2)(|v \rangle) = F_1(|v \rangle) + F_2(|v \rangle). \tag{2.3}$$

Der folgende Satz stellt jetzt die eindeutige Beziehung zwischen Vektorraum und zugehörigem Dualraum her:

Satz 2.3 (Riesz'sches Theorem). V und V^* sind isomorph, d.h. es gibt eine eineindeutige Beziehung zwischen den linearen Funktionalen F in V^* und den Vektoren $|w \rangle$ in V . Alle linearen Funktionale haben die Form $F(|v \rangle) = \langle w|v \rangle$, wobei $|w \rangle$ ein fester Vektor und $|v \rangle$ ein beliebiger Vektor ist.

Deshalb können wir ein Funktional F mit einem bra-Vektor $\langle w| \in V^*$ identifizieren, der auf einen Vektor $|v \rangle \in V$ wirkt, mit der Schreibweise $\langle w|v \rangle$. Man darf dabei nie die Antilinearität aus dem Auge verlieren: der Vektor (ket) $\alpha|v \rangle$ korrespondiert zum Funktional (bra) $\alpha^*\langle v|$.

2.3 Hilberträume

Hilberträume sind von zentraler Bedeutung in der Quantenmechanik. Zu ihrer Definition brauchen wir zunächst den Begriff der **Cauchyfolge**:

Definition 2.5 (Cauchyfolge). Es sei ein normierter Raum $(V, \|\cdot\|)$ gegeben mit einer Folge $|v_n \rangle \in V$, $n \in \mathbb{N}$. Diese Folge heißt Cauchyfolge, wenn zu jedem $\epsilon > 0$ ein $n_0 \in \mathbb{N}$ existiert, sodass für alle $n, n' > n_0$ gilt: $\|v_n - v_{n'}\| \leq \epsilon$. Wir schreiben dafür kurz: $\|v_n - v_{n'}\| \xrightarrow{n, n' \rightarrow \infty} 0$.

Wir sagen $\{v_n\} \in V$ **konvergiert**, wenn gilt: $\|v_n - v\| \xrightarrow{n \rightarrow \infty} 0$ und $v \in V$. Man macht sich leicht klar, dass es höchstens ein solches Element in V gibt, denn falls es ein weiteres Element $v' \in V$ gäbe, würde nach der Dreiecksungleichung (N3) gelten: $\|v - v'\| \leq \|v - v_n\| + \|v_n - v'\| \rightarrow 0$ und zusammen mit (N1) $v = v'$.

Lemma 2.2. Jede konvergente Folge ist eine Cauchyfolge.

Beweis: Es konvergiere $\{v_n\}$ gegen v , dann gilt:

$$\|v_n - v_{n'}\| \leq \|v_n - v\| + \|v - v_{n'}\| \xrightarrow{n, n' \rightarrow \infty} 0.$$

Für den Hilbertraum benötigen wir den Begriff der **Vollständigkeit**:

Definition 2.6. Ein normierter Raum $(V, \|\cdot\|)$ heißt **vollständig**, wenn in ihm jede Cauchyfolge konvergiert.

Das ist nicht selbstverständlich, denn es gibt ja z.B. im Körper der rationalen Zahlen Cauchyfolgen, die nicht gegen eine rationale Zahl konvergieren; erst die Erweiterung des Körpers auf nichtrationale Zahlen - die reellen Zahlen - macht ihn vollständig.

Nun haben wir alles parat für die Definition des Hilbertraums:

Definition 2.7 (Hilbertraum). Einen normierten Raum $(V, \|\cdot\|)$ mit einem Skalarprodukt $\langle \cdot | \cdot \rangle$ (Prähilbertraum), der vollständig ist, nennen wir **Hilbertraum** und bezeichnen ihn mit $H \equiv \langle V, \|\cdot\| \rangle$.

Beispiele:

- 1) Der Prähilbertraum $(\mathcal{L}^2, \|\cdot\|_2)$ mit Skalarprodukt $\langle \alpha | \beta \rangle = \sum_n \alpha_n^* \beta_n$, $|\alpha\rangle, |\beta\rangle \in \mathcal{L}^2$ ist ein Hilbertraum. Er wird auch der **Hilbertsche Folgenraum** genannt. Der Beweis der Vollständigkeit ist ein wenig knifflig (\rightarrow Literatur).
- 2) Der Prähilbertraum $(\mathcal{L}^2, \|\cdot\|_2)$ mit Skalarprodukt $\langle f | g \rangle = \int_a^b dx f^*(x)g(x)$, $|f\rangle, |g\rangle \in \mathcal{L}^2$ ist ein Hilbertraum. Er wird auch der **Hilbertsche Funktionenraum** genannt.

Auch hier ist der Beweis der Vollständigkeit nicht ganz einfach; schon für die Positiv-Definitheit des Skalarprodukts muß man vom Riemann-Integral zum Lebesgue-Integral übergehen; dieses konvergiert im Mittel auch für Funktionen mit endlich vielen Unstetigkeitsstellen.

Der Hilbertraum ist dann der Raum aller Lebesgue-integrierbaren Funktionen, wobei wir Funktionen identifizieren, die sich nur auf einer Menge

vom Maß Null unterscheiden; das Skalarprodukt ist auf diesem Quotientenraum eindeutig definiert und positiv-definit. Dieser Raum heißt **Lebesgueraum** und ist definiert durch

$$L([a, b]) \equiv \hat{L}^2([a, b]) := L^2([a, b]) / \mathcal{N}([a, b]) \quad (2.4)$$

mit der Nullmenge $\mathcal{N}([a, b]) := \{f \in L^2([a, b]) \mid \langle f | f \rangle = 0\}$. Dies bildet eine Äquivalenzklasse in $L^2([a, b])$, bei der Funktionen zur gleichen Klasse gehören, wenn sie fast überall übereinstimmen.

2.4 Orthogonalität

Definition 2.8. Sei H ein Hilbertraum mit Unterräumen $W, W' \subset H$. Die Vektoren $|v\rangle, |v'\rangle \in H$ heißen **orthogonal** ($|v\rangle \perp |v'\rangle$), wenn gilt: $\langle v | v' \rangle = 0$. Wir schreiben $|v\rangle \perp W$, wenn $\langle v | w \rangle = 0 \forall |w\rangle \in W$. Zwei Unterräume $W, W' \subset H$ heißen orthogonal, wenn $\langle w | w' \rangle = 0 \forall |w\rangle \in W, |w'\rangle \in W'$. Den Unterraum $W^\perp := \{|v\rangle \in H \mid |v\rangle \perp W\}$ nennen wir **Orthogonalraum** von W .

Wir bezeichnen mit $W + W' := \{|w\rangle + |w'\rangle \mid |w\rangle \in W, |w'\rangle \in W', W \cap W' = \{0\}\}$ die **direkte Summe** zweier Unterräume und nennen sie **orthogonale Summe**, falls die Unterräume auch noch orthogonal sind ($W \perp W'$) und schreiben dafür $W \oplus W'$. Für den durch die Vektoren $\{|w_i\rangle\}$, $|w_i\rangle \in W$ aufgespannten Unterraum schreiben wir auch $\langle |w_1\rangle, |w_2\rangle, \dots \rangle$. Die abzählbare Teilmenge $|v_i\rangle_{i=1,2,\dots} \subset H$ nennen wir ein **Orthogonalsystem**, wenn paarweise gilt: $|v_i\rangle \perp |v_j\rangle, i \neq j$. Gilt zusätzlich $\langle v_i | v_j \rangle = \delta_{ij}$, so nennen wir dies ein **Orthonormalsystem** (ONS).

Viele der folgenden Sätze und Definitionen sind aus der linearen Algebra bekannt:

Definition 2.9 (Lineare Unabhängigkeit). Eine Menge von Vektoren $|v_i\rangle, i = 1, \dots, n$ heißt **linear unabhängig**, wenn gilt:

$$\sum_{i=1}^n \alpha_i |v_i\rangle = |0\rangle \Leftrightarrow \alpha_i \equiv 0 \quad (2.5)$$

Ansonsten heißen sie **linear abhängig**.

Lemma 2.3. Jede Teilmenge eines Orthogonalsystems ist linear unabhängig.

Beweis: Sei eine beliebige Teilmenge eines ONS gegeben: $\{|v_{i_1}\rangle, |v_{i_2}\rangle, \dots, |v_{i_n}\rangle\}$, dann folgt aus $0 = \sum_{i=1}^n \alpha_i |v_{i_i}\rangle, \alpha_i \in \mathbb{K}$

$$0 = \langle v_{i_k} | \sum_{l=1}^n \alpha_l v_{i_l} \rangle = \sum_{l=1}^n \alpha_l \langle v_{i_k} | v_{i_l} \rangle = \sum_{l=1}^n \alpha_l \delta_{kl} = \alpha_k$$

d.h. die Koeffizienten müssen alle null sein.

Definition 2.10 (Dimension). Ein Vektorraum hat die **Dimension** n , wenn es in ihm maximal n linear unabhängige Vektoren gibt.

Die Dimension eines Vektorraums ist unabhängig von der Wahl der Basis. In der Quantenmechanik haben wir es oft mit unendlich-dimensionalen Vektorräumen zu tun.

Es gilt die Verallgemeinerung des Satzes von Pythagoras:

Lemma 2.4 (Pythagoras). Sei $\{v_i\}_{i=1,2,\dots,n}$ ein Orthogonalsystem in H und $\|\cdot\|$ die kanonische Norm, dann gilt:

$$\left\| \sum_{i=1}^n v_i \right\|^2 = \sum_{i=1}^n \|v_i\|^2$$

Beweis: $\|\sum_i v_i\|^2 = \langle \sum_i v_i | \sum_j v_j \rangle = \sum_{ij} \langle v_i | v_j \rangle = \sum_{ij} \delta_{ij} \|v_i\|^2 = \sum_i \|v_i\|^2$

Beispiele:

a) **Trigonometrisches Orthonormalsystem:**

Sei $H = \langle L([a, b]), \|\cdot\|_2 \rangle$, dann ist

$$f_n(t) := \frac{1}{\sqrt{b-a}} \exp\left(i \frac{2\pi n}{b-a} t\right), \quad n \in \mathbb{Z} \quad (2.6)$$

ein ONS, da gilt:

$$\langle f_n | f_{n'} \rangle = \frac{1}{b-a} \int_a^b dt \exp\left(i \frac{2\pi(n-n')}{b-a} t\right) = \delta_{nn'}$$

b) **Legendrefunktionen:** Sei $H = \langle L^2([-1, 1]), \|\cdot\|_2 \rangle$, dann führen die Legendreschen Polynome

$$P_n(t) := \frac{1}{2^n n!} \frac{d^n}{dt^n} (t^2 - 1)^n, \quad n \in \mathbb{N}_0 \quad (2.7)$$

(d.h. die ersten fünf sind $P_0(t) = 1$, $P_1(t) = t$, $P_2(t) = \frac{1}{2}(3t^2 - 1)$, $P_3(t) = \frac{1}{2}(5t^3 - 3t)$, $P_4(t) = \frac{1}{8}(35t^4 - 30t^2 + 3)$) auf das Orthonormalsystem der Legendreschen Funktionen

$$\eta_n(t) := \sqrt{n + \frac{1}{2}} P_n(t). \quad (2.8)$$

Die Legendrefunktionen treten beispielsweise auf, wenn man die Laplacegleichung $\Delta\varphi = 0$ in Kugelkoordinaten löst.

c) **Hermitefunktionen:** Sei $H = \langle L^2(\mathbb{R}), \|\cdot\|_2^w \rangle$ mit $w(t) = e^{-t^2}$, d.h.

$$\|f(t)\|_2^w = \sqrt{\int_{-\infty}^{\infty} dt w(t) |f(t)|^2},$$

dann führen die Hermiteischen Polynome

$$H_n(t) := (-1)^n e^{t^2} \frac{d^n}{dt^n} e^{-t^2}, \quad n \in \mathbb{N}_0 \quad (2.9)$$

(d.h. die ersten fünf sind $H_0(t) = 1$, $H_1(t) = 2t$, $H_2(t) = 4t^2 - 2$, $H_3(t) = 8t^3 - 12t$, $H_4(t) = 16t^4 - 48t^2 + 12$) auf das ONS der Hermiteischen Funktionen

$$\psi_n(t) := \frac{e^{-\frac{t^2}{2}}}{\sqrt{2^n n! \sqrt{\pi}}} H_n(t). \quad (2.10)$$

Diese Funktionen treten als Eigenfunktionen des harmonischen Oszillators auf.

d) **Laguerrefunktionen:** Sei $H = \langle L^2([0, \infty]), \|\cdot\|_2^w \rangle$ mit $w(t) = e^{-t^2}$, dann führen die Laguerreschen Polynome

$$L_n(t) := e^t \frac{d^n}{dt^n} (t^n e^{-t}), \quad n \in \mathbb{N}_0 \quad (2.11)$$

auf das ONS der Laguerreschen Funktionen

$$\phi_n(t) := \frac{e^{-\frac{t}{2}}}{n!} L_n(t). \quad (2.12)$$

Die Laguerreschen Funktionen gehen in die Eigenfunktionen des Wasserstoffatoms ein.

Als nächstes müssen wir die Frage beantworten, wie man in einem gegebenen Hilbertraum ein Orthonormalsystem konstruiert.

Satz 2.4 (Gram-Schmidtsches Orthonormalisierungsverfahren). Es sei ein System $\{|v_1\rangle, \dots, |v_n\rangle\}$ linear unabhängiger Elemente aus H gegeben, dann gibt es ein Orthonormalsystem $\{|e_1\rangle, \dots, |e_n\rangle\}$ mit

$$\langle |v_1\rangle, \dots, |v_n\rangle \rangle = \langle |e_1\rangle, \dots, |e_n\rangle \rangle$$

(d.h. von den $|v_i\rangle$ und den $|e_i\rangle$ wird derselbe Unterraum aufgespannt).

Beweis: Wir setzen

$$|e_1\rangle := \frac{|v_1\rangle}{\|v_1\|}$$

und führen den konstruktiven Beweis durch Induktion. Sei nun ein ONS $\{|e_i\rangle\}_{i=1, \dots, l < n}$ schon bestimmt, sodass gilt: $\langle |v_1\rangle, \dots, |v_l\rangle \rangle = \langle |e_1\rangle, \dots, |e_l\rangle \rangle$. Dann setzen wir

$$|\tilde{e}_{l+1}\rangle := |v_{l+1}\rangle - \sum_{i=1}^l |e_i\rangle \langle e_i | v_{l+1} \rangle \quad (2.13)$$

und zeigen, dass dieser Vektor orthogonal zu allen Vektoren $\{|e_1\rangle, \dots, |e_l\rangle\}$ ist:

$$\langle e_j | \tilde{e}_{l+1} \rangle = \langle e_j | v_{l+1} \rangle - \sum_{i=1}^l \langle e_j | e_i \rangle \langle e_i | v_{l+1} \rangle = \langle e_j | v_{l+1} \rangle - \sum_{i=1}^l \delta_{ij} \langle e_i | v_{l+1} \rangle = 0$$

für alle $j = 1, \dots, l$. Da $|v_{l+1}\rangle$ linear unabhängig ist, ist $|\tilde{e}_{l+1}\rangle \neq 0$. Nun setzen wir

$$|e_{l+1}\rangle := \frac{|\tilde{e}_{l+1}\rangle}{\|\tilde{e}_{l+1}\|}$$

und erhalten das ONS $\{|e_1\rangle, \dots, |e_{l+1}\rangle\}$.

Beispiel:

Wir betrachten den Hilbertraum $H = \langle L([-1, 1]), \|\cdot\| \rangle$, und den Unterraum der linear unabhängigen Polynome $\{|v_n\rangle = t^n\}_{n=0,1,\dots}$. Dann ergibt das Gram-Schmidtsche Orthonormalisierungsverfahren das ONS der Legendrefunktionen.

Die ersten Schritte der Orthonormierung (wir beginnen mit Index 0 statt 1 im Satz 2.4):

$$|v_0\rangle = 1, |v_1\rangle = t, |v_2\rangle = t^2. \quad \langle v_0 | v_0 \rangle = \int_{-1}^1 dt = [t]_{-1}^1 = 2 \Rightarrow |e_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \checkmark$$

$$|\tilde{e}_1\rangle = |v_1\rangle - |e_0\rangle \langle e_0 | v_1 \rangle = t - \frac{1}{2} \int_{-1}^1 dt t = t \quad \langle \tilde{e}_1 | \tilde{e}_1 \rangle = \int_{-1}^1 dt t^2 = \frac{2}{3} \Rightarrow |e_1\rangle = \sqrt{\frac{3}{2}} t \checkmark$$

$$|\tilde{e}_2\rangle = |v_2\rangle - |e_0\rangle \langle e_0 | v_2 \rangle - |e_1\rangle \langle e_1 | v_2 \rangle = t^2 - \frac{1}{2} \int_{-1}^1 dt t^2 - \frac{3}{2} t \int_{-1}^1 dt t^3 = t^2 - \frac{1}{3}$$

$$\langle \tilde{e}_2 | \tilde{e}_2 \rangle = \int_{-1}^1 dt \left(t^2 - \frac{1}{3}\right)^2 = \int_{-1}^1 dt \left(t^4 - \frac{2}{3}t^2 + \frac{1}{9}\right) = \frac{2}{5} - \frac{4}{9} + \frac{2}{9} = \frac{8}{45}$$

$$\Rightarrow |e_2\rangle = \sqrt{\frac{45}{8}} \left(t^2 - \frac{1}{3}\right) = \sqrt{\frac{5}{2}} \frac{1}{2} (3t^2 - 1) \checkmark$$

Die folgende Ungleichung besagt, dass die Norm eines Vektors mindestens so groß ist wie die einer beliebigen Projektion auf einen Unterraum:

Lemma 2.5 (Besselungleichung). Es sei $\{|e_1\rangle, |e_2\rangle, \dots\}$ ein (nicht notwendig vollständiges) ONS in H , dann gilt für alle $|v\rangle \in H$:

$$\|v\|^2 \geq \sum_i |\langle e_i | v \rangle|^2 \quad (2.14)$$

Das Gleichheitszeichen gilt genau dann, wenn

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \left\| v - \sum_{i=1}^n \langle e_i | v \rangle e_i \right\|^2 = 0$$

(wobei wie üblich die ket-Klammern unter der Norm weggelassen sind).

Beweis: Wir spalten $\|v\|^2$ in zwei zueinander orthogonale Anteile auf und verwenden Lemma 2.4 (Pythagoras):

$$\|v\|^2 = \left\| v - \sum_{i=1}^n e_i \langle e_i | v \rangle + \sum_{i=1}^n e_i \langle e_i | v \rangle \right\|^2 = \left\| v - \sum_{i=1}^n e_i \langle e_i | v \rangle \right\|^2 + \sum_{i=1}^n |\langle e_i | v \rangle|^2 \geq 0$$

und damit folgt die Behauptung.

Definition 2.11 (Orthonormalbasis). Ein gegebenes Orthonormalsystem $\{|e_1\rangle, |e_2\rangle, \dots\}$ heißt **vollständig** oder eine **Orthonormalbasis** (ONB), wenn für alle $|v\rangle \in H$ die **Parsevalsche Gleichung** gilt:

$$\|v\|^2 = \sum_n |\langle v | e_n \rangle|^2 \quad (2.15)$$

Lemma 2.6. Ein ONS $\{|e_1\rangle, |e_2\rangle, \dots\}$ in H ist genau dann vollständig, wenn aus $\langle e_i | v \rangle = 0 \forall i$ folgt, dass $|v\rangle = 0$ ist.

Lemma 2.7. Jeder Vektor $|v\rangle$ in einem n -dimensionalen Vektorraum kann als Linearkombination von n linear unabhängigen Vektoren $|e_i\rangle$, $i = 1, \dots, n$ geschrieben werden:

$$|v\rangle = \sum_{i=1}^n \alpha_i |e_i\rangle \quad (2.16)$$

Die Entwicklungskoeffizienten α_i heißen auch Koordinaten des Vektors in der gewählten Basis.

Lemma 2.8. Die Entwicklung eines Vektors in einer linear unabhängigen Basis ist eindeutig.

$|v\rangle$ ist die abstrakte Notation eines Vektors. Erst in einer gewählten Basis wird der Vektor durch konkrete Koeffizienten spezifiziert. In den Komponenten gelten die vertrauten Rechenregeln:

$$|v\rangle = \sum_{i=1}^n \alpha_i |e_i\rangle, \quad |w\rangle = \sum_{i=1}^n \beta_i |e_i\rangle \Rightarrow |v\rangle + |w\rangle = \sum_{i=1}^n (\alpha_i + \beta_i) |e_i\rangle$$

Für das Skalarprodukt in einer ONB gilt $\langle v | w \rangle$ wie oben):

$$\langle v | w \rangle = \sum_{ij} \alpha_i^* \beta_j \langle e_i | e_j \rangle = \sum_{ij} \alpha_i^* \beta_j \delta_{ij} = \sum_i \alpha_i^* \beta_i$$

Diese Form hat das Skalarprodukt in jeder ONB; während die Koeffizienten α_i, β_i von der Basis abhängen, ist $\sum_i \alpha_i^* \beta_i$ basisunabhängig.

Entwicklung in einer Orthonormalbasis: Ausgehend von der Darstellung des Vektors $|v\rangle$ in einer ONB $\{|e_i\rangle\}$

$$|v\rangle = \sum_{i=1}^n \alpha_i |e_i\rangle$$

berechnen wir die Koeffizienten α_i in dieser Basis durch Multiplikation mit den bras $\langle e_j |$:

$$\langle e_j | v \rangle = \langle e_j | \left(\sum_{i=1}^n \alpha_i |e_i\rangle \right) = \sum_{i=1}^n \alpha_i \langle e_j | e_i \rangle = \sum_{i=1}^n \alpha_i \delta_{ij} = \alpha_j$$

d.h. $\alpha_j = \langle e_j | v \rangle$, die Entwicklungskoeffizienten ergeben sich als Skalarprodukte mit den Basisvektoren.

Lemma 2.9 (Vollständigkeitsrelation). Sei $\{|e_1\rangle, |e_2\rangle, \dots\}$ eine Orthonormalbasis im Hilbertraum H , dann gilt für alle $|v\rangle, |v'\rangle \in H$ die Parsevalsche Gleichung für das Skalarprodukt:

$$\langle v | v' \rangle = \sum_i \langle v | e_i \rangle \langle e_i | v' \rangle \quad (2.17)$$

Beweis: Der Beweis folgt aus der Stetigkeit des Skalarprodukts, zusammen mit $|v\rangle = \sum_i |e_i\rangle \langle e_i | v \rangle$ und $|v'\rangle = \sum_i |e_i\rangle \langle e_i | v' \rangle$, denn:

$$\langle v | v' \rangle = \lim_{n \rightarrow \infty} \sum_{i=1}^n \langle e_i | \langle e_i | v \rangle^* \cdot \sum_{i'=1}^n |e_{i'}\rangle \langle e_{i'} | v' \rangle = \sum_i \langle v | e_i \rangle \langle e_i | v' \rangle$$

Die nächste wichtige Eigenschaft von normierten Räumen ist die Separabilität; wenn ein Hilbertraum separabel ist, dann ist er im wesentlichen abzählbar-unendlichdimensional.

Definition 2.12 (Separabilität). Ein normierter Raum $(V, \|\cdot\|)$ heißt separabel, wenn es in V eine abzählbare dichte Teilmenge W gibt, d.h. für alle $\varepsilon > 0$ und $|v\rangle \in V$ existiert ein $|v_\varepsilon\rangle \in W$ mit $\|v - v_\varepsilon\| < \varepsilon$.

In der Quantenmechanik haben wir es fast immer mit separablen Hilberträumen zu tun.

Beispiele:

- a) $(\mathbb{K}^n, \|\cdot\|_2)$ ($\mathbb{K} = \mathbb{R}, \mathbb{C}$) ist separabel, da die Menge \mathbb{Q} abzählbar dicht in \mathbb{R} liegt.
- b) $(\mathbb{R}^2, \|\cdot\|_2)$ ist separabel.
- c) $L(\mathbb{R})$ ist separabel.
- d) $(L^p([a, b]), \|\cdot\|_p)$, $1 \leq p < \infty$ ist separabel.

Das Besondere an separablen Hilberträumen gibt das folgende Lemma wieder:

Lemma 2.10. In jedem separablen Hilbertraum H existiert eine Orthonormalbasis.

Damit kann man also jeden Vektor eines separablen Hilbertraums in eine Reihe, d.h. eine abzählbare Summe entwickeln.

An dieser Stelle klären wir einige Begriffe, die wir auch im folgenden Kapitel benötigen:

Definition 2.13 (Homomorphismus). Eine Abbildung $f : V \mapsto W$ zwischen zwei Vektorräumen V und W heißt **Homomorphismus**, wenn sie linear ist, d.h. additiv

$$\forall_{|v_1\rangle, |v_2\rangle \in V} f(|v_1\rangle + |v_2\rangle) = f(|v_1\rangle) + f(|v_2\rangle)$$

und homogen

$$\forall_{|v\rangle \in V, \alpha \in \mathbb{K}} f(\alpha|v\rangle) = \alpha f(|v\rangle)$$

Homomorphismen heißen auch lineare Operatoren.

Ein **Endomorphismus** ist ein Homomorphismus $V \mapsto V$.

Ein **Isomorphismus** ist ein bijektiver (d.h. injektiver und surjektiver) Homomorphismus. Die zwei Räume V und W heißen **isomorph**, wenn zwischen ihnen ein Isomorphismus existiert.

Ein **Automorphismus** ist ein isomorpher Endomorphismus.

Definition 2.14 (Normisomorphismus). Ein normerhaltender Isomorphismus $f : V \mapsto W$ zwischen zwei normierten Räumen V und W , d.h.

$$\forall_{|v\rangle \in V} \|f(|v\rangle)\| = \||v\rangle\|$$

heißt **Normisomorphismus**. Zwei Räume heißen **normisomorph**, wenn zwischen ihnen ein Normisomorphismus existiert.

Definition 2.15 (Isometrie). Ein Homomorphismus zwischen zwei Räumen V und W mit Skalarprodukt, der das Skalarprodukt erhält, d.h.

$$\forall_{|v_1\rangle, |v_2\rangle \in V} \langle f(|v_1\rangle) | f(|v_2\rangle) \rangle = \langle |v_1\rangle | |v_2\rangle \rangle$$

heißt Isometrie.

Eine **unitäre Abbildung** ist ein isometrischer Isomorphismus.

Mit diesen Begriffen wird die Tragweite des folgenden Satzes deutlich:

Satz 2.5 (Isomorphiesatz separabler Hilberträume). Es sei H ein unendlichdimensionaler \mathbb{C} -Hilbertraum mit Skalarprodukt $\langle \cdot | \cdot \rangle_H$. Falls es eine höchstens abzählbare Menge gibt, die dicht in H liegt, so existiert eine bijektive lineare Abbildung $T : H \rightarrow \mathfrak{l}^2$, sodass für alle $|u\rangle, |v\rangle \in H$ gilt:

$$\langle |v\rangle | |v\rangle \rangle_H = \langle Tv | Tv \rangle$$

wobei $\langle \cdot | \cdot \rangle$ das Standardskalarprodukt im \mathfrak{l}^2 bedeutet.

Der Satz besagt also, dass jeder separable unendlichdimensionale \mathbb{C} -Hilbertraum normisomorph zu \mathfrak{l}^2 ist.

Für die Quantenmechanik bedeutet das, dass das Studium der Schrödinger-Gleichung sowohl im $L^2(\mathbb{R})$ durchgeführt werden kann (Schrödingersche Wellenmechanik) also auch im \mathfrak{l}^2 (Heisenbergsche Matrizenmechanik).

3. Operatoren

3.0 Motivation

Um das Grundkonzept der Quantenmechanik zu vervollständigen, benötigen wir jetzt die linearen Operatoren auf Hilberträumen. Das wird sofort deutlich, wenn man sich die grundlegenden Axiome der Quantenmechanik ansieht. In einer Formulierung (von vielen) lauten sie:

1) Der Raum der Zustände ist ein Hilbertraum H , auf dem ein selbstadjungierter Hamiltonoperator \hat{H} definiert ist. Das System wird zu jeder Zeit t durch einen Strahl im Hilbertraum beschrieben; ein Strahl $\psi(t)$ ist die Äquivalenzklasse von normierten Vektoren ψ mit $\langle \psi | \psi \rangle = 1$, wobei $\psi_1 \sim \psi_2$, falls $\psi_1 = e^{i\alpha} \psi_2$.

2) Die Zeitentwicklung wird durch die Schrödingergleichung

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(t) = \hat{H} \psi(t)$$

beschrieben.

3) Observable werden durch selbstadjungierte Operatoren \hat{A} beschrieben.

4) Die möglichen Ergebnisse einer Messung von \hat{A} sind die verschiedenen Eigenwerte λ_n von \hat{A} .

5) Die Wahrscheinlichkeit, dass als Messergebnis λ auftritt, ist

$$W(\lambda) = \sum_{\lambda_m = \lambda} |\langle \psi_m | \psi \rangle|^2.$$

Der Erwartungswert von \hat{A} im Zustand ψ ist $\langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle$.

Uns werden die folgenden Klassen von Operatoren begegnen:

- Die selbstadjungierten Operatoren garantieren den Zusammenhang mit dem Experiment.

- Die inversen Operatoren spielen die Rolle von Resolventen, als formale Basis der Greenschen Funktionen.
- Die unitären Operatoren vermitteln Transformationen von Basissätzen des Hilbertraums und erweitern damit das Konzept der orthogonalen Transformationen in endlichdimensionalen Vektorräumen.
- Die Projektionsoperatoren erlauben es, den Hilbertraum in Teilräume zu segmentieren.
- Die Zeitentwicklungsoperatoren treten auf, wenn Quantensysteme eine nichttriviale Zeitentwicklung haben.

3.1 Definitionsbereich

Operatoren in der Quantenmechanik sind in der Regel Homomorphismen $\hat{A} : D_A \mapsto H$, wobei H der Hilbertraum des betrachteten Systems und $D_A \subseteq H$ ein dichter Unterraum von H ist. (Man sagt von einer Teilmenge, sie liegt dicht in einem metrischen Raum, wenn man jeden Punkt des Gesamtraums beliebig genau durch einen Punkt der Teilmenge approximieren kann.) Obwohl es natürlich wünschenswert wäre, Operatoren auf ganz H anwenden zu können, ist dies für viele praktisch interessante Operatoren nicht möglich; damit der Operatorbegriff sinnvoll bleibt, sollte allerdings zumindest D_A in H dicht sein.

Eine Abbildung $\hat{A} : |v\rangle \mapsto |w\rangle := \hat{A}|v\rangle$ heißt lineare Transformation oder linearer Operator, wenn gilt:

$$\hat{A}(\alpha_1 |v_1\rangle + \alpha_2 |v_2\rangle) = \alpha_1 \hat{A}|v_1\rangle + \alpha_2 \hat{A}|v_2\rangle$$

Unter den so definierten Operatoren sind zwei spezielle:

$$\text{Nulloperator } \mathbf{0} : \mathbf{0}|v\rangle = |0\rangle \quad \forall |v\rangle \in H$$

$$\text{Einsoperator } \mathbf{1} : \mathbf{1}|v\rangle = |v\rangle \quad \forall |v\rangle \in H$$

Beispiel:

Im Fall $H = L^2(\mathbb{R})$ lassen sich viele wichtige Operatoren ausdrücken als Polynome von x (der Operator, der die Funktion $\psi(x)$ mit x multipliziert) und $\frac{\partial}{\partial x}$. Ein wichtiges Beispiel ist der Impulsoperator $\hat{p} : \psi \mapsto -i\hbar \psi'$. Funktionen im Definitionsbereich müssen nicht nur differenzierbar sein, sondern ihre Abbildung muss außerdem quadratintegrierbar sein. Maximaler

Definitionsbereich von \hat{p} ist daher

$$D_p = \left\{ \phi \in L^2(\mathbb{R}) \mid \phi \text{ differenzierbar und } \phi' \in L^2(\mathbb{R}) \right\}$$

oder knapper

$$D_p = \left\{ \phi \in L^2(\mathbb{R}) \mid \int dx \left| \frac{\partial \phi(x)}{\partial x} \right|^2 < \infty \right\}$$

unter impliziter Forderung der Existenz von Ableitung und Integral.

Im Folgenden sei $\hat{A} : D_A \mapsto H$ ein linearer Operator mit Definitionsbereich $D_A \subseteq H$; der Definitionsbereich D_A sei ein dichter Unterraum von H , und H sei separabel.

Zwei Operatoren werden als gleich bezeichnet ($\hat{A} = \hat{B}$), wenn sie sowohl in ihren Werten wie in ihren Definitionsbereichen übereinstimmen:

$$D_A = D_B; \quad \hat{A}|v\rangle = \hat{B}|v\rangle \quad \forall |v\rangle \in D_A$$

3.2 Inverser Operator

Für einen Operator $\hat{A} : D_A \mapsto H$ nennen wir die Menge

$$R_A := \{ \hat{A}|v\rangle \mid |v\rangle \in D_A \}$$

das Bild des Operators \hat{A} (R von Englisch range). Wenn D_A ein Vektorraum ist, dann ist R_A auch ein Vektorraum.

Inverser Operator: Ist \hat{A} injektiv, so existiert eine Umkehrung

$$\hat{A}^{-1} : R_A \mapsto D_A, \quad \hat{A}^{-1}\hat{A} = \mathbb{1}_{D_A}$$

Für alle $|w\rangle \in R_A$, $|w\rangle = \hat{A}|v\rangle$ gilt

$$\hat{A}\hat{A}^{-1}|w\rangle = \hat{A}\hat{A}^{-1}\hat{A}|v\rangle = \hat{A}|v\rangle = |w\rangle$$

und damit

$$\hat{A}\hat{A}^{-1} = \mathbb{1}_{R_A}$$

Der Operator \hat{A}^{-1} ist stets ein Isomorphismus, und fall \hat{A} isometrisch ist, so ist es auch \hat{A}^{-1} . Insbesondere gilt: unitäre Operatoren sind stets umkehrbar, und ihre Umkehrung ist wieder unitär. Im allgemeinen müsste man sogar zwischen rechts- und linksinversen Operatoren unterscheiden.

3.3 Adjungierter Operator

Wir stellen die Definition eines symmetrischen Operators voran:

Der Operator \hat{A} heißt symmetrisch, wenn gilt:

$$\forall_{|v_1\rangle, |v_2\rangle \in D_A} \langle v_1 | \hat{A} | v_2 \rangle = \langle v_2 | \hat{A} | v_1 \rangle^*$$

Bislang haben wir den Operator \hat{A} als etwas aufgefasst, das „nach rechts“ wirkt, also auf einen Vektor: $\hat{A} : |v\rangle \mapsto \hat{A}|v\rangle$. Für die Wahl des Definitionsbereichs $D_A \subseteq H$ ist es dabei entscheidend, dass die Wirkung von \hat{A} sinnvoll erklärt ist und das Ergebnis wieder in H liegt.

Da zu jedem Element $|v\rangle$ des Hilbertraums eine dazu duale Linearform (lineares Funktional) $\langle v|$ existiert, deren Wirkung durch das Skalarprodukt $\langle v| : H \mapsto \mathbb{C}$, $|u\rangle \mapsto \langle v|u\rangle$ erklärt ist, kann man auch die Wirkung des Operators „nach links“, also auf Linearformen, untersuchen:

$$\hat{A} : \langle v| \mapsto \langle v| \hat{A} \equiv \langle v| \circ \hat{A}$$

Wir definieren nun den **adjungierten** Operator \hat{A}^\dagger mit dem Definitionsbereich

$$D_{A^\dagger} := \left\{ |v\rangle \in H \mid \langle v| \hat{A} \text{ ist beschränkt auf } D_A \right\}$$

und mit der Wirkung

$$\hat{A}^\dagger : |v\rangle \mapsto \hat{A}^\dagger |v\rangle \quad \text{mit} \quad \left(\hat{A}^\dagger |v\rangle \right)^\dagger \Big|_{D_A} = \langle v| \hat{A}$$

Ab sofort verwenden wir das Symbol \dagger („dagger“) für die kanonische eindeutige Abbildung (vgl. Kap. 2.2) zwischen H und $H^* \equiv H^\dagger$:

$$|u\rangle^\dagger = \langle u|, \quad \langle u|^\dagger = |u\rangle$$

Die Schreibweise $\Big|_{D_A}$ bedeutet „eingeschränkt auf D_A “. Die Dichtheit von D_A in H garantiert dabei die Eindeutigkeit dieser Definition. Für Operatoren, die auf dem gesamten Hilbertraum definiert sind, also mit $D_A = H$, ist $\langle v| \hat{A}$ für beliebiges $\langle v|$ bereits eine wohldefinierte Linearform auf ganz H , und somit beschränkt; es gilt daher auch $D_{A^\dagger} = H$.

Wenn wir eine abzählbare orthonormierte Basis $\{ |e_n\rangle \}$ von H mit $|e_n\rangle \in D_A$ kennen, dann können wir den Definitionsbereich alternativ formulieren. Dazu stellen wir fest, dass

$$\langle v| \hat{A} = \langle v| \hat{A} \mathbb{1}_{D_A} = \sum_n \langle v| \hat{A} |e_n\rangle \langle e_n| \Big|_{D_A}$$

für beliebiges $|\nu\rangle \in \mathbf{H}$ eine wohldefinierte Linearform auf \mathbf{D}_A ist. Ohne die Einschränkung auf \mathbf{D}_A ist $\sum_n \langle \nu | \hat{A} | e_n \rangle \langle e_n |$ eine wohldefinierte Linearform auf ganz \mathbf{H} , also ein bra, genau dann, wenn

$$\sum_n |\langle \nu | \hat{A} | e_n \rangle|^2 < \infty.$$

Folglich gilt:

$$\mathbf{D}_{A^\dagger} := \left\{ |\nu\rangle \in \mathbf{H} \mid \sum_n |\langle \nu | \hat{A} | e_n \rangle|^2 < \infty \right\}$$

Auch die Wirkung von \hat{A}^\dagger können wir mithilfe der Basis $\{|e_n\rangle\}$ angeben:

$$\hat{A}^\dagger |\nu\rangle = \sum_n |e_n\rangle \langle e_n | \hat{A}^\dagger |\nu\rangle = \sum_n \left((\hat{A}^\dagger |\nu\rangle)^\dagger |e_n\rangle \right)^* |e_n\rangle = \sum_n \langle \nu | \hat{A} | e_n \rangle^* |e_n\rangle \quad (3.1)$$

Eigenschaften

Definition 3.1. Die **Norm** eines Operators $\hat{A} : (\mathbf{V}, \|\cdot\|_{\mathbf{V}}) \mapsto (\mathbf{W}, \|\cdot\|_{\mathbf{W}})$ ist definiert durch

$$\|\hat{A}\| := \sup_{|\nu\rangle \neq 0} \frac{\|\hat{A}|\nu\rangle\|_{\mathbf{W}}}{\|\nu\rangle\|_{\mathbf{V}}} = \sup_{\|\nu\rangle\|_{\mathbf{V}}=1} \|\hat{A}|\nu\rangle\|_{\mathbf{W}} \quad (3.2)$$

Aus dieser Definition folgt sofort $\|\hat{A}|\nu\rangle\| \leq \|\hat{A}\| \cdot \|\nu\rangle\|$.

Definition 3.2. Wir betrachten einen Operator $\hat{A} : (\mathbf{V}, \|\cdot\|_{\mathbf{V}}) \mapsto (\mathbf{W}, \|\cdot\|_{\mathbf{W}})$. Wir nennen dann den Operator \hat{A} **beschränkt**, wenn ein $\lambda > 0$ existiert, sodass gilt $\|\hat{A}\| < \lambda$. Wir nennen den Operator **stetig** in $|\nu_0\rangle \in \mathbf{V}$, wenn aus $|\nu_n\rangle \xrightarrow{n \rightarrow \infty} |\nu_0\rangle$ folgt $\hat{A}|\nu_n\rangle \xrightarrow{n \rightarrow \infty} \hat{A}|\nu_0\rangle$. Wir nennen den Operator stetig, wenn er in allen Punkten $|\nu\rangle \in \mathbf{V}$ stetig ist.

Satz 3.1. Es sei ein linearer Operator $\hat{A} : (\mathbf{V}, \|\cdot\|_{\mathbf{V}}) \mapsto (\mathbf{W}, \|\cdot\|_{\mathbf{W}})$ gegeben, dann sind die folgenden Aussagen äquivalent:

- 1) \hat{A} ist stetig.
- 2) \hat{A} ist stetig in $|\nu_0\rangle \in \mathbf{V}$.
- 3) \hat{A} ist beschränkt.

Beweis:

1 \Rightarrow 2 ist offensichtlich.

2 \Rightarrow 3: OBdA nehmen wir \hat{A} stetig in $|\nu_0\rangle = 0$. Angenommen, \hat{A} ist unbeschränkt, dann existiert für jedes $n \in \mathbb{N}$ ein $|\nu_n\rangle \in \mathbf{D}_A$, sodass $\|\hat{A}|\nu_n\rangle\| > n\|\nu_n\rangle\|$. Daraus folgt, dass $|\nu_n\rangle \neq 0$; oBdA können wir annehmen, dass $\|\nu_n\rangle\| = \frac{1}{n}$; damit gilt $|\nu_n\rangle \xrightarrow{n \rightarrow \infty} 0$ und $\|\hat{A}|\nu_n\rangle\| > n \cdot \frac{1}{n} = 1$, in Widerspruch zur Stetigkeit in $|\nu_0\rangle = 0$

3 \Rightarrow 1: Wir nehmen an, dass \hat{A} beschränkt ist, d.h. $\|\hat{A}|\nu\rangle\| \leq \lambda\|\nu\rangle\|$ für alle $|\nu\rangle \in \mathbf{D}_A$. Wenn $|\nu\rangle \in \mathbf{D}_A$ ist und $(|\nu_n\rangle)_{n \in \mathbb{N}}$ eine Folge aus \mathbf{D}_A , sodass $|\nu_n\rangle \xrightarrow{n \rightarrow \infty} |\nu\rangle$, dann haben wir

$$\|\hat{A}|\nu_n\rangle - \hat{A}|\nu\rangle\| = \|\hat{A}(|\nu_n\rangle - |\nu\rangle)\| \leq \lambda\|\nu_n\rangle - |\nu\rangle\| \xrightarrow{n \rightarrow \infty} 0$$

d.h. $\hat{A}|\nu_n\rangle \xrightarrow{n \rightarrow \infty} \hat{A}|\nu\rangle$, womit die Stetigkeit von \hat{A} bewiesen ist.

Wegen dieses Satzes wird in gängigen Darstellungen mal Stetigkeit, mal Beschränktheit von linearen Operatoren diskutiert, wobei es um gleichwertige Eigenschaften geht.

Satz 3.2. Es sei ein linearer Operator $\hat{A} : (\mathbf{V}, \|\cdot\|_{\mathbf{V}}) \mapsto (\mathbf{W}, \|\cdot\|_{\mathbf{W}})$ gegeben mit der Dimension $\dim \mathbf{V} = n_{\mathbf{V}} < \infty$, dann ist \hat{A} beschränkt.

Für unendlichdimensionale Räume gilt dieser Satz allerdings nicht, und in der Quantenmechanik sind viele physikalische Operatoren nicht beschränkt (nicht stetig). Die Unstetigkeit eines linearen Operators $\hat{A} : \mathbf{D}_A = \mathbf{V} \mapsto \mathbf{H}$, der auf einem Teilraum \mathbf{V} des Hilbertraums \mathbf{H} definiert ist, kann wie folgt interpretiert werden: Es existiert eine Folge von normierten Vektoren $(|e_n\rangle)_{n \in \mathbb{N}_0}$, sodass die Folge $(\alpha_n)_{n \in \mathbb{N}_0}$, gegeben durch $\alpha_n := \|\hat{A}|e_n\rangle\|$ unbeschränkt ist.

Beispiel:

Wir betrachten den Hamiltonoperator

$$\mathbf{H} := -\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{x^2}{2}$$

auf dem Unterraum \mathbf{U} vom Hilbertraum L^2 der quadratintegrablen Funktionen

$$\mathbf{U} := \left\{ f \in C^2(\mathbb{R}) \cap L^2(\mathbb{R}) \mid x \mapsto f(x) = g(x) \sum_{j=0}^n c_j x^j, c_j \in \mathbb{R}, n \in \mathbb{N}_0, g(x) = e^{-\frac{x^2}{2}} \right\}$$

Wenn wir dann als Folge $(|e_n\rangle)_{n \in \mathbb{N}_0}$ die normierten Hermitefunktionen wählen, dann gilt $\alpha_n := \|He_n\| = n + \frac{1}{2}$ mit $n \in \mathbb{N}$; diese Folge ist offensichtlich nicht beschränkt, sodass H kein stetiger Operator ist.

Satz 3.3. Für beschränkte oder symmetrische Operatoren \hat{A} gilt stets: $D_{\hat{A}^\dagger} \supseteq D_A$.

Definition 3.3 (selbstadjungierter Operator). Ist $\hat{A} = \hat{A}^\dagger$, also insbesondere $D_{\hat{A}^\dagger} = D_A$ und D_A liegt dicht in H , so heißt \hat{A} **selbstadjungiert**. Selbstadjungierte Operatoren sind stets symmetrisch.

Definition 3.4 (Hermitizität). Ein beschränkter selbstadjungierter Operator heißt **hermitesch**.

Matrizelemente: Für $|\phi\rangle \in D_{\hat{A}^\dagger}$ und $|\psi\rangle \in D_A$ gilt:

$$\langle \psi | \hat{A}^\dagger | \phi \rangle = \langle \phi | \hat{A} | \psi \rangle^*$$

Für die Matrizen gilt dann:

$$A^\dagger = A^{*T}$$

3.4 Unitäre Operatoren

Für unitäre Operatoren \hat{U} mit $D_U = H$ ist auch $D_{U^\dagger} = H$; ferner gilt für alle $|v_1\rangle, |v_2\rangle \in H$:

$$(\hat{U}^\dagger \hat{U} |v_1\rangle)^\dagger |v_2\rangle \stackrel{\text{Definition}}{=} (\hat{U} |v_1\rangle)^\dagger \hat{U} |v_2\rangle \stackrel{\text{Isometrie}}{=} (|v_1\rangle)^\dagger |v_2\rangle$$

und damit $\hat{U}^\dagger \hat{U} = \mathbb{1}$, also $\hat{U}^\dagger = \hat{U}^{-1}$ und auch $\hat{U} \hat{U}^\dagger = \mathbb{1}$.

Die Umkehrung gilt ebenfalls und ergibt einen Test auf Unitarität: Sei $\hat{A} : H \mapsto H$ ein Operator mit $\hat{A} \hat{A}^\dagger = \mathbb{1}$. Dann gilt für alle $|v_1\rangle, |v_2\rangle \in H$:

$$(\hat{A}^\dagger |v_1\rangle)^\dagger \hat{A}^\dagger |v_2\rangle = \langle v_1 | \hat{A} \hat{A}^\dagger |v_2\rangle = \langle v_1 | v_2\rangle$$

\hat{A}^\dagger ist also isometrisch und damit insbesondere injektiv, da normerhaltend. Gilt zusätzlich $\hat{A}^\dagger \hat{A} = \mathbb{1}$, so ist \hat{A}^\dagger auch surjektiv, also ein isometrischer Isomorphismus, also unitär; \hat{A} muss dann ebenfalls unitär sein.

Es ist wichtig, tatsächlich beide Voraussetzungen, $\hat{A} \hat{A}^\dagger = \mathbb{1}$ und $\hat{A}^\dagger \hat{A} = \mathbb{1}$, zu prüfen, wie das folgende kanonische Gegenbeispiel zeigt:

Beispiel:

Hilbert's Hotel: Sei H ein separabler Hilbertraum mit orthonormierter Basis $\{|e_n\rangle\}$. Sei $\hat{A} : H \mapsto H$ ein Operator mit der Wirkung

$$\hat{A}|e_n\rangle = |e_{n+1}\rangle.$$

Dieser Operator eignet sich als Lösung des Problems: Was tut man in einem Hotel mit abzählbar vielen Zimmern, wenn alle Zimmer belegt sind und ein weiterer Gast eintrifft? Der Operator setzt den Bewohner von Zimmer 1 nach Zimmer 2 um, den von Zimmer 2 nach Zimmer 3 usw., und der neue Gast kann in Zimmer 1 einziehen; das ist eine Lösung, die in einem Hotel mit nur endlich vielen bereits besetzten Zimmern nicht funktioniert hätte. Der dazu adjungierte Operator \hat{A}^\dagger ist dann nach Gl. (3.1):

$$\begin{aligned} \hat{A}^\dagger &= \sum_{n'=1}^{\infty} \langle e_n | \hat{A} | e_{n'} \rangle^* | e_{n'} \rangle = \langle e_n | e_{n'+1} \rangle^* | e_{n'} \rangle = \sum_{n'=1}^{\infty} \delta_{n, n'+1} | e_{n'} \rangle \\ &= \begin{cases} 0 & \text{falls } n = 1 \\ \sum_{n''=2}^{\infty} \delta_{n, n''} | e_{n''-1} \rangle & \text{sonst} \end{cases} = \begin{cases} 0 & \text{falls } n = 1 \\ | e_{n-1} \rangle & \text{sonst} \end{cases} \end{aligned}$$

Offenbar ist $\hat{A}^\dagger \hat{A} = \mathbb{1}$, aber \hat{A} ist nicht unitär, da $\hat{A} \hat{A}^\dagger \neq \mathbb{1}$. Der Operator \hat{A} ist also injektiv, aber nicht surjektiv; andererseits ist \hat{A}^\dagger surjektiv, aber nicht injektiv.

Eine praktische Anwendung unitärer Operatoren ist die vielbenutzte unitäre Basistransformation. Für die Vektoren eines vollständigen diskreten Orthonormalsystems $\{|e_n\rangle\}$ gilt bei Einwirkung eines unitären Operators:

$$|\tilde{e}_n\rangle = \hat{U}|e_n\rangle = \sum_m |e_m\rangle \langle e_m | \hat{U} | e_n \rangle \quad (3.3)$$

Die transformierten Vektoren erfüllen die Relationen

$$\begin{aligned} \langle \tilde{e}_n | \tilde{e}_m \rangle &= \langle e_n | \hat{U}^\dagger \hat{U} | e_m \rangle = \langle e_n | e_m \rangle = \delta_{mn}, \\ \sum_n |\tilde{e}_n\rangle \langle \tilde{e}_n| &= \sum_n \hat{U} | e_n \rangle \langle e_n | \hat{U}^\dagger = \hat{U} \hat{U}^\dagger = \mathbb{1}. \end{aligned} \quad (3.4)$$

Die transformierten Vektoren sind also orthonormal und vollständig. Sie stellen ebenfalls eine Basis des Hilbertraums dar. Hat man eine beliebige (diskrete) Matrixdarstellung $\langle e_m | \hat{A} | e_n \rangle$ eines Operators \hat{A} , so kann man eine unitäre Basistransformation benutzen, um eine Eigendarstellung

$$\langle \tilde{e}_m | \hat{A} | \tilde{e}_n \rangle = a_n \delta_{mn}$$

zu finden. Das ist für eine unendlichdimensionale Matrixdarstellung im allgemeinen nicht möglich, aber die Methode der unitären Basistransformationen wird für Näherungen bei der Berechnung von Energiespektren komplexer Systeme verwendet.

3.5 Grundlagen der Spektraltheorie

In folgenden diskutieren wir wichtige Begriffe der Spektraltheorie, die für die Quantenmechanik von besonderer Bedeutung ist.

Definition 3.5. Sei $H = \langle V, \|\cdot\| \rangle$ ein Hilbertraum, sowie ein (im allgemeinen unbeschränkter) Operator $\hat{A} : V \rightarrow W$ gegeben, dann nennen wir $z \in \mathbb{K}$ den **Eigenwert** von \hat{A} , wenn ein $|v\rangle \in D_A$, ($|v\rangle \neq 0$) existiert, das die **Eigenwertgleichung**

$$\hat{A}|v\rangle = z|v\rangle$$

erfüllt.

In diesem Fall ist der Operator $z\mathbb{1} - \hat{A}$ nicht injektiv, da

$$(z\mathbb{1} - \hat{A})|v\rangle = 0,$$

und man nennt den Kern, d.h. die Vektoren, die vom Operator $z\mathbb{1} - \hat{A}$ auf 0 abgebildet werden, $K(z\mathbb{1} - \hat{A}) \neq \{0\}$ den **Eigenraum**, und seine Dimension $\dim K(z\mathbb{1} - \hat{A})$ ist die **Vielfachheit** (Entartungsgrad) des Eigenwertes z . Den Vektor $|v\rangle$ nennt man den **Eigenvektor** zum Eigenwert z . Nun zum Fall, dass z kein Eigenwert von \hat{A} ist. Wenn es einen auf einer dichten Teilmenge des Raumes H definierten, beschränkten Operator $\hat{R}(z, \hat{A})$ gibt mit

$$\hat{R}(z, \hat{A})(\hat{A} - z\mathbb{1}) = (\hat{A} - z\mathbb{1})\hat{R}(z, \hat{A}) = \mathbb{1}$$

dann ist z Element der sog. **Resolventenmenge** von \hat{A} , d.h. der Menge

$$\rho(\hat{A}) := \{z \in \mathbb{K} \mid (z\mathbb{1} - \hat{A}) \text{ invertierbar} \}.$$

Den Operator $\hat{R}(z, \hat{A})$ definiert durch

$$\rho(\hat{A}) \rightarrow L(V), \quad z \rightarrow \hat{R}(z, \hat{A}) := (z\mathbb{1} - \hat{A})^{-1}$$

(mit dem normierten Raum $(L(V), \|\cdot\|_{\text{op}})$ der linearen Abbildungen $V \rightarrow V$) nennt man die **Resolvente** von \hat{A} im Punkt z . Die Menge

$$\sigma(\hat{A}) := \mathbb{K} \setminus \rho(\hat{A}),$$

also das Komplement der Resolventenmenge, heißt das **Spektrum** von \hat{A} .

Das Spektrum kann man jetzt einteilen, indem man verschiedene Gründe der Nichtexistenz einer beschränkten Resolvente zugrundelegt:

a) Die Menge der Eigenwerte von \hat{A} nennt man auch das **Punktspektrum** (oder **diskretes Spektrum** oder **Eigenwertspektrum**) $\sigma_p(\hat{A}) \subset \sigma(\hat{A})$:

$$\sigma_p(\hat{A}) := \{z \in \mathbb{K} \mid (z\mathbb{1} - \hat{A}) \text{ nicht injektiv} \}.$$

Diese Menge ist abzählbar, d.h. im Zusammenhang mit Eigenwerten treten Summen auf. Wenn H endlichdimensional ist, dann besteht das Spektrum von \hat{A} nur aus Eigenwerten.

b) Die Menge $\sigma_c(\hat{A}) \subset \sigma(\hat{A})$, für die $\hat{R}(z, \hat{A})$ existiert und das Bild $B(z\mathbb{1} - \hat{A})$ in H dicht ist, nennen wir das **kontinuierliche Spektrum**. Dies entspricht dem Fall, dass der Operator $z\mathbb{1} - \hat{A}$ injektiv, jedoch nicht surjektiv ist, aber ein dichtes Bild besitzt, das heißt es existiert ein Inverses, das nur auf einem dichten Teilraum des Hilbertraumes H definiert ist:

$$\sigma_c(\hat{A}) := \{z \in \mathbb{K} \mid (z\mathbb{1} - \hat{A}) \text{ injektiv, } B(z\mathbb{1} - \hat{A}) \text{ dicht in } H \}.$$

Dieser kontinuierliche Anteil des Spektrums ist eine in der Regel überabzählbar große Menge, und es treten statt der Summen beim diskreten Spektrum (Lebesgue-)Integrale auf. Das Spektrum selbstadjungierter Operatoren auf abzählbar-unendlichdimensionalen Hilberträumen besteht aus einem diskreten und einem kontinuierlichen Anteil, wobei σ_p oder σ_c leer sein können, aber nicht beide. Eine zusätzliche Komplikation besteht darin, dass wichtige Operatoren der Quantenmechanik wie Orts- und Impuls-Operator ein rein kontinuierliches Spektrum mit verallgemeinerten Eigenfunktionen besitzen, die nicht quadratintegrierbar sind. Für die kontinuierlichen Eigenwerte $z \in \sigma_c(\hat{A})$ wird die Eigenwertgleichung

$$\hat{A}|v\rangle = z|v\rangle$$

durch Distributionen $|v\rangle$ erfüllt. In der Physik bezeichnet man die Resolvente häufig als Greensche Funktion.

Satz 3.4. Es sei H ein \mathbb{C} -Hilbertraum und $\hat{A} : D_A \subseteq H \rightarrow H$ ein selbstadjungierter Operator. Falls \hat{A} Eigenwerte besitzt, so sind diese reell. Falls \hat{A} mindestens zwei verschiedene Eigenwerte besitzt, so sind die zugehörigen Eigenvektoren paarweise orthogonal:

$$\langle a_n | a_m \rangle = \delta_{nm}, \quad \langle a | a' \rangle = \delta(a - a')$$

Beweis:

Es seien $|\mathbf{u}\rangle, |\mathbf{v}\rangle$ Eigenvektoren von \hat{A} zu den Eigenwerten λ, μ :

$$\hat{A}|\mathbf{u}\rangle = \lambda|\mathbf{u}\rangle, \quad \hat{A}|\mathbf{v}\rangle = \mu|\mathbf{v}\rangle$$

Dann gilt einerseits

$$\langle \mathbf{u} | \hat{A} \mathbf{v} \rangle = \langle \mathbf{u} | \mu \mathbf{v} \rangle = \mu \langle \mathbf{u} | \mathbf{v} \rangle \quad (3.5)$$

und andererseits wegen $|\mathbf{u}\rangle, |\mathbf{v}\rangle \in \mathcal{D}_A = \mathcal{D}_{A^\dagger}$ und $\forall |\mathbf{w}\rangle \in \mathcal{D}_A$ $\hat{A}|\mathbf{w}\rangle = \hat{A}^\dagger|\mathbf{w}\rangle$:

$$\langle \mathbf{u} | \hat{A} \mathbf{v} \rangle = \langle \hat{A}^\dagger \mathbf{u} | \mathbf{v} \rangle = (\hat{A}|\mathbf{u}\rangle)^\dagger |\mathbf{v}\rangle = (\lambda|\mathbf{u}\rangle)^\dagger |\mathbf{v}\rangle = \lambda^* \langle \mathbf{u} | \mathbf{v} \rangle$$

Falls $|\mathbf{u}\rangle = |\mathbf{v}\rangle$ und $\lambda = \mu$, dann folgt daraus $\lambda = \lambda^*$, d.h. λ ist reell. Damit wissen wir also, dass es sich bei λ und μ um reelle Zahlen handelt, und wir können anstelle der letzten Gleichung schreiben

$$\langle \mathbf{u} | \hat{A} \mathbf{v} \rangle = \lambda \langle \mathbf{u} | \mathbf{v} \rangle$$

und durch Subtraktion von Gl. (3.5) folgt

$$(\lambda - \mu) \langle \mathbf{u} | \mathbf{v} \rangle = 0 \quad (3.6)$$

Also muss wegen $\lambda \neq \mu$ gelten: $|\mathbf{u}\rangle \perp |\mathbf{v}\rangle$.

Wegen dieses Satzes können wir also die Eigenwerte selbstadjungierter Operatoren mit Messwerten identifizieren. Der selbstadjungierte Operator selbst repräsentiert die Messgröße und wird **Observable** genannt. Der Zustand des Systems während der Messung wird mit einem Vektor des Hilbertraums identifiziert, der im Definitionsbereich des Operators liegt. Zugänglich sind im Prinzip nur **Erwartungswerte** eines Operators \hat{A} , gegeben durch

$$\langle \hat{A} \rangle := \langle \mathbf{v} | \hat{A} | \mathbf{v} \rangle$$

Der folgende Satz garantiert, dass die Eigenvektoren eines selbstadjungierten Operators \hat{A} den ganzen Hilbertraum aufspannen:

Satz 3.5. Die Eigenvektoren eines selbstadjungierten Operators \hat{A} auf einem endlichdimensionalen Hilbertraum sind vollständig.

Die Verallgemeinerung dieses Satzes auf unendlich viele Dimensionen machen den eigentlichen Kern der Hilbertraumtheorie aus. Wir erhalten damit

eine **Spektralzerlegung der Eins**, d.h. eine Zerlegung der Eins in der Eigenbasis des Operators \hat{A} :

$$\mathbb{1} = \sum_{\mathbf{a}_n \in \sigma_p} |\mathbf{a}_n\rangle \langle \mathbf{a}_n| + \int_{\sigma_c} d\mathbf{a} |\mathbf{a}\rangle \langle \mathbf{a}| \quad (3.7)$$

Wir schreiben für die Eins auch $\mathbb{1} = \mathbb{1}_A$, um zu betonen, dass es sich um die Zerlegung in der Eigenbasis des Operators \hat{A} handelt. Mit den Eigenwertgleichungen $\hat{A}|\mathbf{a}_n\rangle = \mathbf{a}_n|\mathbf{a}_n\rangle$ und $\hat{A}|\mathbf{a}\rangle = \mathbf{a}|\mathbf{a}\rangle$ erklärt man aus Gl. (3.7) die Spektralzerlegung von \hat{A} , d.h. die Darstellung des Operators \hat{A} in der Eigenbasis:

$$\hat{A} = \hat{A} \mathbb{1}_A = \sum_n \mathbf{a}_n |\mathbf{a}_n\rangle \langle \mathbf{a}_n| + \int d\mathbf{a} \mathbf{a} |\mathbf{a}\rangle \langle \mathbf{a}| \quad (3.8)$$

Komponentendarstellung von kets

Mit der Vollständigkeitsrelation erhält man auch die Spektralzerlegung jedes Hilbertraumvektors $|\psi\rangle$:

$$|\psi\rangle = \mathbb{1}_A |\psi\rangle = \sum_n \psi_n |\mathbf{a}_n\rangle + \int d\mathbf{a} \psi(\mathbf{a}) |\mathbf{a}\rangle \quad (3.9)$$

mit den Komponenten $\psi_n := \langle \mathbf{a}_n | \psi \rangle$ und $\psi(\mathbf{a}) := \langle \mathbf{a} | \psi \rangle$.

Wenn man den Vektor $|\psi\rangle$ in der Eigenbasis als Tupel

$$|\psi\rangle = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \vdots \\ \psi(\mathbf{a}) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \langle \mathbf{a}_1 | \psi \rangle \\ \langle \mathbf{a}_2 | \psi \rangle \\ \vdots \\ \langle \mathbf{a} | \psi \rangle \end{pmatrix}$$

schreibt, sieht man besonders deutlich, dass kets basisunabhängig sind, während Tupel und Funktionen von der Basis abhängen.

Matrixdarstellung von Operatoren

Mit der Vollständigkeitsrelation erhält man auch die Spektralzerlegung jedes Operators \hat{B} :

$$\hat{B} = \mathbb{1}_A \hat{B} \mathbb{1}_A = \sum_{nm} B_{nm} |\mathbf{a}_n\rangle \langle \mathbf{a}_m| + \int d\mathbf{a} \int d\mathbf{a}' B(\mathbf{a}, \mathbf{a}') |\mathbf{a}\rangle \langle \mathbf{a}'| \quad (3.10)$$

mit den Matrixelementen $B_{nm} := \langle \mathbf{a}_n | \hat{B} | \mathbf{a}_m \rangle$ und $B(\mathbf{a}, \mathbf{a}') = \langle \mathbf{a} | \hat{B} | \mathbf{a}' \rangle$. Diese Darstellung des Operators \hat{B} nennt man Matrixdarstellung des Operators \hat{B} ; auch sie ist basisabhängig.

3.6 Orts- und Impulsdarstellung

Der Ortsoperator hat ein rein kontinuierliches Spektrum und daher die Spektralzerlegung

$$\hat{q} = \int dx x|x\rangle\langle x|. \quad (3.11)$$

Die Spektralzerlegung eines ket $|\psi\rangle$ in der Ortsbasis lautet dann

$$|\psi\rangle = \mathbb{1}_q|\psi\rangle = \int dx \psi(x)|x\rangle \quad (3.12)$$

mit den Ortskomponenten $\psi(x) = \langle x|\psi\rangle$. Die Darstellung von $|\psi\rangle = \langle x|\psi\rangle$ nennt man **Ortsdarstellung** von $|\psi\rangle$. Offenbar ist

$$\langle x|\hat{q}|\psi\rangle = x\langle x|\psi\rangle = x\psi(x),$$

d.h. die Abbildungsvorschrift des Ortsoperators im Ortsbild ist die Multiplikation der Ortsfunktion mit ihrem Argument:

$$\langle x|\hat{q} = x\langle x|$$

Der Impulsoperator \hat{p} hat ebenfalls ein rein kontinuierliches Spektrum und lässt sich also schreiben als

$$\hat{p} = \int dp p|p\rangle\langle p|. \quad (3.13)$$

Die Spektralzerlegung eines ket $|\psi\rangle$ in der Impulsbasis lautet dann

$$|\psi\rangle = \mathbb{1}_p|\psi\rangle = \int dp \tilde{\psi}(p)|p\rangle \quad (3.14)$$

mit den Impulskomponenten $\tilde{\psi}(p) = \langle p|\psi\rangle$. Die Darstellung von $|\psi\rangle = \langle p|\psi\rangle$ nennt man **Impulsdarstellung** von $|\psi\rangle$. Nun braucht man noch eine Vorschrift zum Wechsel von einer Darstellung zur anderen. Das wird durch die Transformationselemente

$$\langle x|p\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{ipx} \quad (3.15)$$

geleistet. Damit erhält man

$$\tilde{\psi}(p) = \langle p|\psi\rangle = \langle p|\mathbb{1}_q|\psi\rangle = \int dx \langle p|x\rangle\langle x|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-ipx}\psi(x),$$

d.h. die Impulsdarstellung ist gerade die **Fouriertransformierte** der Ortsdarstellung. Umgekehrt gilt:

$$\psi(x) = \langle x|\psi\rangle = \langle x|\mathbb{1}_p|\psi\rangle = \int dp \langle x|p\rangle\langle p|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{ipx}\tilde{\psi}(p),$$

d.h. die Ortsdarstellung erhält man aus der Impulsdarstellung durch **inverse Fouriertransformation**. Die Abbildungsvorschrift für den Impulsoperator im Ortsraum ist

$$\begin{aligned} \langle x|\hat{p}|\psi\rangle &= \int dp p\langle x|p\rangle\langle p|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dp p e^{ipx}\tilde{\psi}(p) \\ &= \left(-i\frac{\partial}{\partial x}\right) \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dp e^{ipx}\tilde{\psi}(p) = \left(-i\frac{\partial}{\partial x}\right)\psi(x) \end{aligned}$$

d.h. die Abbildungsvorschrift des Impulsoperators im Ortsbild ist die Ableitung der Ortsfunktion nach ihrem Argument:

$$\langle x|\hat{p} = -i\frac{\partial}{\partial x}\langle x|. \quad (3.16)$$

3.7 Greensche Funktionen in der Quantenmechanik

Die Greensche Funktion zu einem Hamiltonoperator \hat{H} wird definiert als

$$\mathbb{1} = (z\mathbb{1} - \hat{H})G(z) = G(z)(z\mathbb{1} - \hat{H}) \quad (3.17)$$

wobei wir, wie in der Literatur üblich, in der Schreibweise von $G(z)$ nicht ausdrücklich auf den Operator \hat{H} verweisen, obwohl natürlich \hat{H} und $G(z)$ einander zugeordnet sind. Die Spektraldarstellung der Greenschen Funktion ist

$$G(z) = \sum_i \frac{|\psi_i\rangle\langle\psi_i|}{z - E_i} \quad (3.18)$$

wenn E_i und ψ_i die Eigenwertgleichung $\hat{H}|\psi_i\rangle = E_i|\psi_i\rangle$ erfüllen. Das folgt aus

$$G(z) = \frac{1}{z\mathbb{1} - \hat{H}} = \frac{1}{z\mathbb{1} - \hat{H}} \sum_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i| = \sum_i \frac{1}{z\mathbb{1} - \hat{H}} |\psi_i\rangle\langle\psi_i| = \sum_i \frac{|\psi_i\rangle\langle\psi_i|}{z - E_i}$$

wobei der letzte Schritt auf die allgemeine Relation für eine beliebige Funktion eines Operators

$$F(\hat{A})|\phi_n\rangle = F(\lambda_n)|\phi_n\rangle \quad \text{falls } \hat{A}|\phi_n\rangle = \lambda_n|\phi_n\rangle \quad (3.19)$$

zurückgreift. In der Ortsdarstellung lautet die Greensche Funktion

$$G(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; z) = \langle \mathbf{x} | G(z) | \mathbf{x}' \rangle \quad (3.20)$$

und damit in Kombination mit der Spektraldarstellung

$$\langle \mathbf{x} | G(z) | \mathbf{x}' \rangle = \sum_i \frac{\langle \mathbf{x} | \psi_i \rangle \langle \psi_i | \mathbf{x}' \rangle}{z - E_i} \quad (3.21)$$

Wir zeigen nun, dass $G(z)$ in der Spektraldarstellung tatsächlich Gl. (3.17) erfüllt:

$$(z\mathbb{1} - \hat{H})G(z) = \sum_i (z\mathbb{1} - \hat{H}) \frac{|\psi_i\rangle\langle\psi_i|}{z - E_i} = \sum_i (z - E_i) \mathbb{1} \frac{|\psi_i\rangle\langle\psi_i|}{z - E_i} = \sum_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i| = \mathbb{1}$$

wobei wir die Spektralzerlegung der Eins verwendet haben.

Aus der Greenschen Funktion kann man dann messbare Größen wie die Spektralfunktion

$$A(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; E) = -\frac{1}{\pi} \lim_{\eta \rightarrow 0} \text{Im} G(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; E + i\eta) \quad (3.22)$$

berechnen, allerdings wegen der Singularitäten auf der reellen Achse ($\text{Im} z = 0$) nur unter Zuhilfenahme von funktionentheoretischen Hilfsmitteln. Die Spektralfunktion bzw. genauer ihre Fouriertransformierte $A(\vec{k}, E)$ wird in Festkörpern durch winkelaufgelöste Photoemissionsspektroskopie (ARPES) gemessen, die Zustandsdichte

$$N(E) = \int d\mathbf{x} A(\mathbf{x}, \mathbf{x}; E) \quad (3.23)$$

durch gewöhnliche (winkelintegrierte) Photoemissionsspektroskopie. Die Ladungsdichte ergibt sich als

$$\rho(\mathbf{x}) = \int_{-\infty}^{E_F} dE A(\mathbf{x}, \mathbf{x}; E), \quad (3.24)$$

und kann an Oberflächen zum Beispiel durch Rastertunnelspektroskopie gemessen werden. Die Greensche Funktion eignet sich besonders gut für Störungstheorie. Außerdem sind Greensche Funktionen nützlich, um bei Randwertproblemen bei gewöhnlichen linearen Differentialgleichungen Lösungen zu konstruieren, die die Randbedingungen erfüllen.

Beispiel:

Greensche Funktion zum Operator $\hat{H} = -\nabla_{\vec{x}}^2$: Dieser Operator erfüllt die Eigenwertgleichung

$$\hat{H}\phi_n(\mathbf{x}) = \lambda_n \phi_n(\mathbf{x}) \quad (3.25)$$

mit den Eigenfunktionen und Eigenwerten

$$\phi_n(\mathbf{x}) = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} e^{i\vec{k}\vec{x}}, \quad \lambda_n = \vec{k}^2, \quad (3.26)$$

wobei Ω das Volumen ist, auf dem \vec{x} definiert ist; die Komponenten des Vektors \vec{k} sind reell. Also ist das Spektrum kontinuierlich und läuft von 0 bis ∞ . Die Greensche Funktion erhält man entweder als Lösung der Gleichung

$$(z + \nabla_{\vec{x}}^2)G(\vec{x}, \vec{x}'; z) = \delta(\vec{x} - \vec{x}') \quad (3.27)$$

oder aus der Spektralzerlegung

$$G(\vec{x}, \vec{x}'; z) = \sum_{\vec{k}} \frac{\langle \vec{x} | \vec{k} \rangle \langle \vec{k} | \vec{x}' \rangle}{z - k^2} = \int \frac{d\vec{k}}{(2\pi)^d} \frac{e^{i\vec{k}(\vec{x} - \vec{x}')}}{z - k^2} \quad (3.28)$$

mit der Dimensionalität d und unter Verwendung von

$$\langle \vec{x} | \vec{k} \rangle = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} e^{i\vec{k}\vec{x}}$$

und der Beziehung

$$\sum_{\vec{k}} \xrightarrow{\Omega \rightarrow \infty} \frac{\Omega}{(2\pi)^d} \int d\vec{k}.$$

Dreidimensionaler Fall ($d = 3$):

Mit $\vec{r} = \vec{x} - \vec{x}'$, $r = |\vec{x} - \vec{x}'|$, und $\vartheta = \angle(\vec{k}, \vec{r})$ finden wir für Gl. (3.28)

$$\begin{aligned} G(\vec{x}, \vec{x}'; z) &= \frac{1}{4\pi^2} \int_0^\infty dk \frac{k^2}{z - k^2} \int_0^\pi d\vartheta \sin \vartheta e^{i\vec{k}\vec{r} \cos \vartheta} \\ &= \frac{1}{4\pi^2} \int_0^\infty dk \frac{k^2}{z - k^2} \frac{e^{ikr} - e^{-ikr}}{ikr} \\ &= \frac{1}{4\pi^2 i r} \int_{-\infty}^\infty dk \frac{ke^{ikr}}{z - k^2} \end{aligned}$$

Durch Kontourintegration in der komplexen Ebene findet man dafür (außer wenn z reell und $z > 0$)

$$G(\vec{x}, \vec{x}'; z) = -\frac{e^{i\sqrt{z}|\vec{x}-\vec{x}'|}}{4\pi|\vec{x}-\vec{x}'|} \quad \text{für } \text{Im}\sqrt{z} > 0 \quad (3.29)$$

Falls $z = \lambda$ mit $\lambda \geq 0$, d.h. wenn z mit den Eigenwerten von $\hat{H} = -\nabla_{\vec{x}}^2$ übereinstimmt, dann sind nur die Grenzwerte

$$G^{\pm}(\vec{x}, \vec{x}'; \lambda) = \lim_{\eta \rightarrow 0^+} G(\vec{x}, \vec{x}'; \lambda \pm i\eta) = -\frac{e^{\pm i\sqrt{\lambda}|\vec{x}-\vec{x}'|}}{4\pi|\vec{x}-\vec{x}'|} \quad \text{für } \sqrt{\lambda}, \lambda \geq 0 \quad (3.30)$$

wohldefiniert. Im speziellen Fall $z = 0$ finden wir

$$G(\vec{x}, \vec{x}'; 0) = -\frac{1}{4\pi|\vec{x}-\vec{x}'|} \quad (3.31)$$

d.h. die Greensche Funktion der Poissongleichung für eine Punktquelle $\nabla_{\vec{x}} G(\vec{x}, \vec{x}'; 0) = \delta(\vec{x} - \vec{x}')$.

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

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

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 Randbedingungen Eigenfunktionen eines hermiteschen Operators sind. Gl. (4.1) kann als

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

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

$$(py')' + qy + \lambda \rho y = 0 \quad (4.3)$$

wobei ' die Ableitung nach x bedeutet. Damit können wir

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

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

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

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

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

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 $a \leq x \leq b$. In diesem Fall gilt

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

Falls der Sturm-Liouville-Operator die Randbedingungen

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

bzw.

$$[y_i^* p y_j']_{x=a}^{x=b} = 0 \quad (4.9)$$

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:

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

Wir integrieren den ersten Term zweimal partiell:

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

und damit

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

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

Transformation von Differentialgleichungen auf Sturm-Liouville-Form

Jede Differentialgleichung zweiter Ordnung der Form

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

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

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

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

$$[F(x)p(x)y']' + F(x)q(x)y + \lambda F(x)\rho(x)y = 0 \quad (4.12)$$

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

$$-(py')' - qy = \lambda py \quad (4.13)$$

für eine Reihe wichtiger Differentialgleichungen der Physik angegeben.

Beispiel:

Die Laguerre-Differentialgleichung

$$xy'' + (1-x)y' + ny = 0 \quad (4.14)$$

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

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

Damit lesen wir für die Koeffizienten der Sturm-Liouville-Gleichung 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

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

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

$$xy''(x) + (1-x)y'(x) + \lambda y(x) = 0 \quad (4.16)$$

eine Potenzreihenlösung

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

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:

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

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

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

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

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

$$= \sum_{k=0}^n \frac{n!}{(n-k)!} \frac{(-x)^k}{k!} \quad (4.19)$$

Die ersten sechs sind in Abb. 4.1 dargestellt.

Es gilt die Orthogonalitätsrelation

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

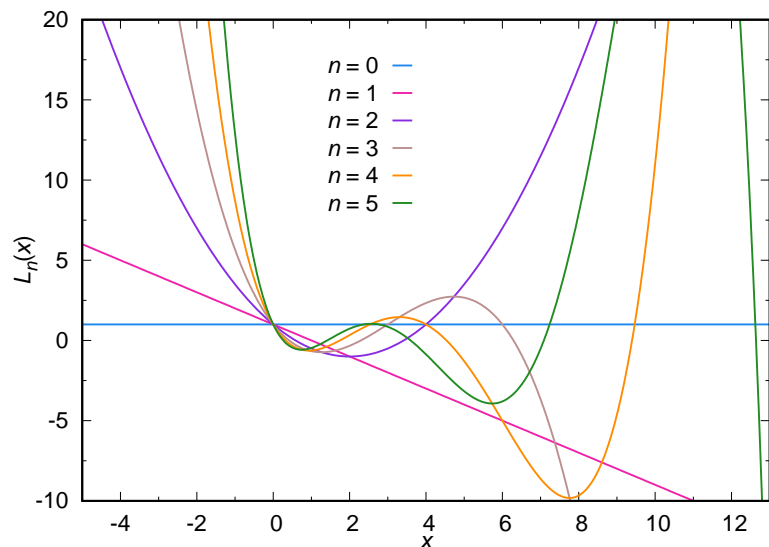


Abbildung 4.1: Die ersten sechs Laguerre-Polynome.

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

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

Beweis:

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

$$\begin{aligned} xL_m''(x) + (1-x)L_m'(x) + mL_m(x) &= 0 \\ xL_n''(x) + (1-x)L_n'(x) + nL_n(x) &= 0 \end{aligned}$$

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

$$\begin{aligned} x[L_n(x)L_m''(x) - L_m(x)L_n''(x)] \\ + (1-x)[L_n(x)L_m'(x) - L_m(x)L_n'(x)] &= (n-m)L_m(x)L_n(x) \\ \Leftrightarrow [xe^{-x}(L_n(x)L_m'(x) - L_m(x)L_n'(x))] &' = (n-m)e^{-x}L_m(x)L_n(x) \end{aligned}$$

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:

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Assoziierte Laguerre-Polynome

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

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

in herkömmlicher Form bzw.

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

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

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

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

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

mit der Gammafunktion

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

Es gilt die Rekursionsformel

$$\Gamma(p+1) = p \Gamma(p) \quad (4.31)$$

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

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

Die Formel von Rodrigues ist

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

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

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

mit den Laguerrepolynomen verknüpft.

Beweis von Orthonormalität und Normierung:

Für den selbstadjungierten Differentialoperator $\mathcal{L}y(x) = (x^{m+1} e^{-x} y'(x))'$ 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

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

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:

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

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

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

Legendre-Polynome

Bei der Lösung der Laplace- oder Schwingungsgleichung in Kugelkoordinaten r, ϑ, φ geben die Legendrepolynome $P_l(\cos \vartheta)$ den Winkelanteil in Kugelkoordinaten einer φ -unabhängigen Partikulärlösung¹ an.

$P_l(\cos \vartheta)$ ist die bei $x = \pm 1$ beschränkte Lösung der Differentialgleichung

$$(1 - x^2)y''(x) - 2xy'(x) + l(l+1)y(x) = 0 \quad -1 \leq x \leq 1 \quad (4.37)$$

oder in Sturm-Liouvilleform

$$[(1 - x^2)y'(x)]' + l(l+1)y(x) = 0 \quad -1 \leq x \leq 1 \quad (4.38)$$

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 $Q_l(x)$

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

Die explizite Darstellung der Legendrepolynome ist

$$P_l(x) = \frac{1}{2^l} \sum_{k=0}^{k_{\max}} (-1)^k \frac{(2l-2k)!}{(l-2k)!(l-k)!k!} x^{l-2k}, \quad l \in \mathbb{N}_0, \quad -1 \leq x \leq 1$$

$$\text{wobei } k_{\max} = \begin{cases} \frac{l}{2} & \text{für } l \text{ gerade} \\ \frac{l-1}{2} & \text{für } l \text{ ungerade} \end{cases} \quad (4.40)$$

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

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

Die Legendrepolynome sind orthogonal und folgendermaßen normiert:

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

¹Jede 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 homogenen linearen Differentialgleichung sind, dann ist auch die Linearkombination $c_1 y_1 + c_2 y_2$ eine Lösung dieser homogenen Differentialgleichung.

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

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

Die erzeugende Funktion ist

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

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

$$P_l(x) = (-1)^l P_l(-x) \quad (4.45)$$

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

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

In Abb. 4.2 sind die ersten sechs Legendrepolynome gezeigt.

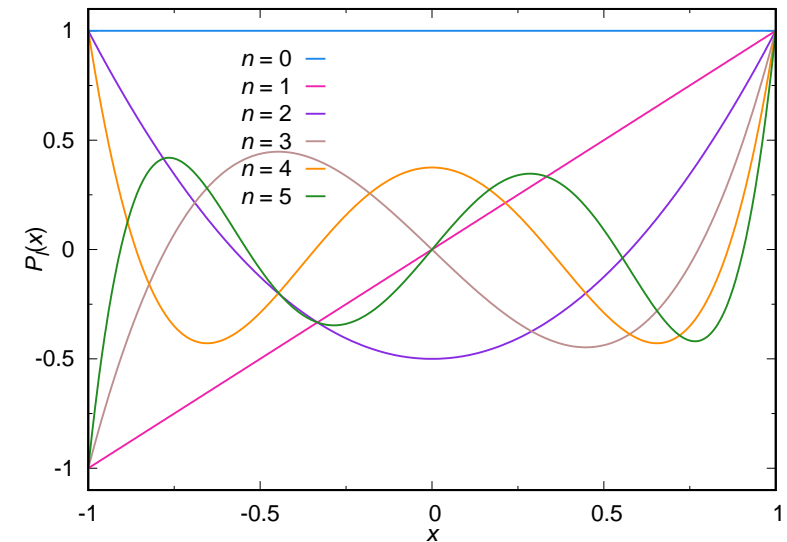


Abbildung 4.2: Die ersten sechs Legendre-Polynome.

Beweise:

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

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

unter Verwendung der Differentialgleichung (4.38). Also gilt

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

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:

$$\begin{aligned} \int_{-1}^1 dx [P_l(x)]^2 &= \frac{1}{2^{2l}(l!)^2} \int_{-1}^1 dx \frac{d^l}{dx^l} [(1-x^2)^l] \frac{d^l}{dx^l} [(1-x^2)^l] \\ &= (-1)^l \int_{-1}^1 dx \frac{d^{l-1}}{dx^{l-1}} [(1-x^2)^l] \frac{d^{l+1}}{dx^{l+1}} [(1-x^2)^l] = \dots \\ &= \frac{(-1)^l}{2^{2l}(l!)^2} \int_{-1}^1 dx (1-x^2)^l \frac{d^{2l}}{dx^{2l}} (1-x^2)^l \end{aligned}$$

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

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

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 ($k = 0, 1, \dots, 2l-1$) gilt:

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

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

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

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

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

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

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

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

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

(4.49)

oder in Sturm-Liouvilleform

$$[(1-x^2)y'(x)]' + \left[l(l+1) - \frac{m^2}{1-x^2} \right] y(x) = 0 \quad -1 \leq x \leq 1. \quad (4.50)$$

Eine von $P_l^m(x)$ linear unabhängige Lösung ist die assoziierte Legendrefunktion 2. Art $Q_l^m(x)$; sie ist bei $x = \pm 1$ singularär.

Die assoziierten Legendrefunktionen 1. Art haben die explizite Darstellung

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

wobei

$$P_l^0(x) = P_l(x) \quad (4.52)$$

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

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

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

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

Orthogonalität und Normierung:

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

$$\int_{-1}^1 \frac{dx}{1-x^2} P_l^m(x) P_{l'}^{m'}(x) = 0 \quad \text{für } m \neq m' \quad (4.56)$$

Rekursionsformeln, Beziehungen:

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

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

$$(1-x^2) \frac{d}{dx} P_l^m(x) = (l+1)xP_l^m(x) - (l-m+1)P_{l+1}^m(x) \\ = (l+m)P_{l-1}^m(x) - lxP_l^m(x) \quad (4.59)$$

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

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

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

$$(1-x^2)y_l''(x) - 2xy_l'(x) + l(l+1)y_l(x) = 0 \quad -1 \leq x \leq 1 \quad (4.62)$$

so ist

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

eine Lösung der Differentialgleichung für die assoziierten Legendrefunktionen

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

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

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

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

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

so folgt für \tilde{y} die Differentialgleichung

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

\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

$$P_l^m(x) = (1-x^2)^{\frac{m}{2}} \frac{d^m}{dx^m} P_l(x) \quad m = 0, 1, \dots, l \quad (4.68)$$

$$Q_l^m(x) = (1-x^2)^{\frac{m}{2}} \frac{d^m}{dx^m} Q_l(x) \quad m = 0, 1, \dots, l$$

Beweis von Orthonormalität und Normierung:

Wie bei den Legendrepolyomen folgt

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

d.h. für $l = l'$

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

Für $m = m'$ folgt

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

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

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

Physikalisches Problem:

$Y_l^m(\vartheta, \varphi)$, $l \in \mathbb{N}_0$, $m = -l, -l+1, \dots, l-1, l$, $0 \leq \vartheta \leq \pi$, $0 \leq \varphi \leq 2\pi$ 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 $\rho(\vec{r})$, $\vec{r} \in V \in \mathbb{R}^3$,

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

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

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

(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 $\hat{L} = \frac{\hbar}{i} \vec{r} \times \nabla$

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

$$\hat{L}_z Y_l^m(\vartheta, \varphi) = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \varphi} Y_l^m(\vartheta, \varphi) = \hbar m Y_l^m(\vartheta, \varphi) \quad (4.75)$$

Definition der Kugelflächenfunktionen:

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

d.h. für die ersten drei l -Werte

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

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 $\vec{e}_r \equiv (\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z}) = (\sin \vartheta \cos \varphi, \sin \vartheta \sin \varphi, \cos \vartheta)$,

um die Symmetrie festzustellen:

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

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:

$$\int_0^\pi d\vartheta \sin \vartheta \int_0^{2\pi} d\varphi Y_l^{*m}(\vartheta, \varphi) Y_l^{m'}(\vartheta, \varphi) = \delta_{ll'} \delta_{mm'} \tag{4.79}$$

Die Kugelflächenfunktionen bilden ein vollständiges Orthonormalsystem auf der Kugeloberfläche.

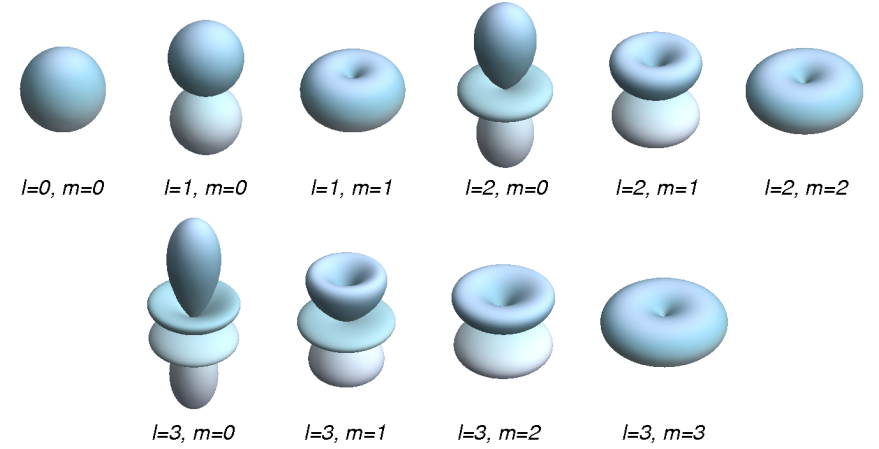


Abbildung 4.3: Der Betrag der ersten Kugelflächenfunktionen, dargestellt als Radius $r = |Y_l^m(\vartheta, \varphi)|$. Durch den Betrag gilt $|Y_l^{-m}(\vartheta, \varphi)| = |Y_l^m(\vartheta, \varphi)|$.

Relationen:

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

$$Y_l^{-m}(\vartheta, \varphi) = (-1)^m Y_l^{*m}(\vartheta, \varphi) \tag{4.81}$$

Additionstheorem:

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

mit $\cos \Theta = \cos \vartheta \cos \vartheta' + \sin \vartheta \sin \vartheta' \cos(\varphi - \varphi')$

Beweis der Orthonormalität:

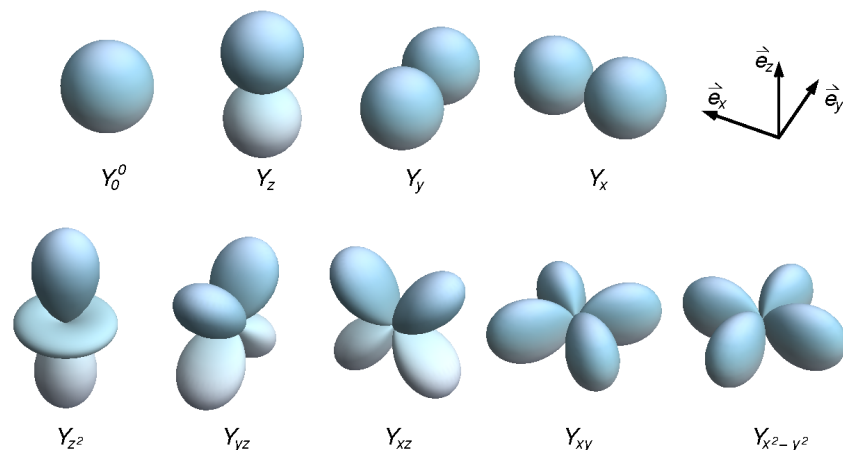


Abbildung 4.4: Der Betrag der ersten reellen Linearkombinationen von Kugelflächenfunktionen, dargestellt als Radius $r = |Y_\alpha(\vartheta, \varphi)|$ wobei α die Orbitalsymmetrie darstellt.

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

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

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

$$y''(x) + a_1(x)y'(x) + a_2(x)y(x) = h(x) \quad a \leq x \leq b \quad (4.84)$$

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

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

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

1. Randwertaufgabe $y(a) = \gamma_1$, $y(b) = \gamma_2$
2. Randwertaufgabe $y'(a) = \gamma_1$, $y'(b) = \gamma_2$

Man spricht von einem homogenen Randwertproblem, wenn

$$h \equiv 0 \quad \text{und} \quad \gamma_1 = \gamma_2 = 0,$$

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

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

lautet

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

mit einer speziellen Lösung

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

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

$$\hat{A}y_{1,2} = 0. \quad (4.89)$$

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

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

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

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

Es gibt die zwei Fälle:

- a) $\Delta \neq 0$: Dann ist das inhomogene Randwertproblem eindeutig lösbar, während das homogene Randwertproblem nur die triviale Lösung $\mathbf{y} \equiv 0$ zulässt.
- b) $\Delta = 0$: Jetzt existiert für das homogene Randwertproblem eine nicht-triviale 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 \mathbf{a}_i einen Parameter λ enthalten: $\mathbf{a}_i = \mathbf{a}_i(\mathbf{x}, \lambda)$.

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

$$\Delta(\lambda_n) = 0 \quad n = 1, 2, \dots$$

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