Handout zu Methoden der theoretischen Physik
Libisch Florian, November 2001

Selbstadjungierte Differentialoperatoren

In der linearen Algebra ist die zu einer linearen Abbildung adjungierte Abbildung über das Skalarprodukt definiert [1]: Sei V ein euklidischer Vektorraum mit Skalarprodukt $< .,. >$. Dann gilt : Zu jeder linearen Abbildung $\phi : V \to V$ existiert eine eindeutig bestimmte lineare Abbildung $\phi^\dagger : V \to V$ mit

$$\langle \phi(\vec{x}), \vec{y} \rangle = \left\langle \vec{x}, \phi^\dagger(\vec{y}) \right\rangle \tag{1}$$

$\phi^\dagger$ heißt zu ϕ adjungierte Abbildung. Dies legt eine analoge Definition für Differentialoperatoren nahe. Sei L ein allgemeiner Differentialoperator zweiter Ordnung

$$L = a(x)\frac{d^2}{dx^2} + b(x)\frac{d}{dx} + c(x) \tag{2}$$

auf dem Intervall $[A, B]$ mit stetigen, reellwertigen Funktionen $a(x)$,$b(x)$,$c(x)$ und $a(x) \neq 0$ in $]A, B[$. Als Skalarprodukt betrachtet man

$$\langle f(x), g(x) \rangle = \int_A^B dx\ f(x)g(x) \tag{3}$$

Verwendet man nun in $\langle Lf(x), g(x) \rangle$ partielle Integration, so erhält man, wobei Ableitungen nach x durch ' abgekürzt werden:

$$\begin{aligned}
\langle Lf(x), g(x) \rangle &= \int_A^B dx\ L(f) * g \\
&= \int_A^B dx\ \ (af'' + bf' + cf) * g \\
&= af'g\Big|_A^B + bfg\Big|_A^B - \int_A^B dx\ f'\,(ag)' + f\,(bg)' - cfg \\
&= \underbrace{(f'(ag) - f(ag)' + bfg)\Big|_A^B}_{\text{Oberflächenterm}} + \int_A^B dx f(ag)'' - f(bg)' + fcg \\
&= \overbrace{Q(f, g; B) - Q(f, g; A)} + \left\langle f(x), L^\dagger g(x) \right\rangle
\end{aligned} \tag{4}$$

Der Oberflächenterm ist oft durch geeignete Randbedingungen zum Verschwinden zu bringen. Für $L^\dagger$ ergibt sich durch Vergleich :

$$\begin{aligned}
L^\dagger(g) &= \frac{d^2}{dx^2}\,(a(x)g(x)) - \frac{d}{dx}\,(b(x)g(x)) + c(x)g(x) \\
&= a''g + 2a'g' + ag'' - b'g + bg' - 2bg' + cg \\
&= L(g) + 2(a' - b)g' + (a' - b)'g
\end{aligned} \tag{5}$$

Ist $L = L^\dagger$, also $a' = b$, dann heißt der Operator selbstadjungiert. Selbstadjungierte Differentialoperatoren spielen in der Quantenmechanik eine wichtige Rolle, weil sie reelle Eigenwerte besitzen, die physikalischen Observablen entsprechen.

Die Selbstadjungierte Form einer Differentialgleichung

Ist L selbstadjungiert, so kann man L laut (5) schreiben als

$$\begin{aligned} L(g(x)) = L^{\dagger}(g(x)) &= a(x)\frac{d^2}{dx^2}g(x) + \left(\frac{d}{dx}a(x)\right)\left(\frac{d}{dx}g(x)\right) + c(x)g(x) \\ &= \frac{d}{dx}\left(a(x)\frac{d}{dx}f(x)\right) + c(x)f(x) \end{aligned} \tag{6}$$

Gegeben sei nun eine Differentialgleichung zweiter Ordnung

$$f''(x) + P(x)f'(x) + Q(x)f(x) = 0 \tag{7}$$

die auf selbstadjungierte Form gebracht werden soll. Hierfür formen wir (6) um

$$\begin{aligned} (af')' + cf &= 0 \\ a\ f'' + a'\ f' + cf &= 0 \end{aligned}$$

$$f'' + \left(\frac{a'}{a}\right) f' + \frac{c}{a} f = 0 \tag{8}$$

wobei im letzten Schritt durch a(x) dividiert wurde. Vergleich mit (7) lehrt (C ist Integrationskonstante):

$$\begin{aligned} \frac{a'(x)}{a(x)} &= P(x) \\ \ln(a(x)) - \ln(C) &= \int_{x_0}^{x} dx\ P(x) \\ a(x) &= Ce^{\int dx\ P(x)} \end{aligned}$$

Für c(x) ergibt sich durch Vergleich von (7) mit (8):

$$c(x) = a(x)Q(x) = Ce^{\int dx\ P(x)}Q(x) \tag{9}$$

Damit ist aber auch c proportional zu C, die Konstante kann somit herausgekürzt werden und man erhält schlussendlich:

$$\frac{d}{dx}\left(e^{\int dx\ P(x)}\frac{df(x)}{dx}\right) + e^{\int dx\ P(x)}Q(x)f(x) = 0 \tag{10}$$

Beispiele : Siehe Übungsskriptum Bsp 1.4.3.
Quellen :

[1] G. Schranz-Kirlinger und P. Szmolyan, Vorlesungsskriptum Algebra für technische Physiker
[2] M. Schweda, Vorlesungsskriptum Methoden der theoretischen Physik