Mathematische Rechenmethoden

Version vom SS 2014*

Universität Mainz
Fachbereich 08
Theorie der kondensierten Materie
Prof. Dr. Friederike Schmid†

---

*Elektronisch: Letzte Änderung am 11.07.2014

†03-534, Tel. (06131-)39-20365, <friederike.schmid@uni-mainz.de>

Literatur

K. Hefft Mathematischer Vorkurs
(online unter http://www.thphys.uni-heidelberg.de/~hefft/vk1/)

W. Nolting Theoretische Physik Bd. 1, erstes Kapitel

S. Großmann Mathematischer Einführungskurs für die Physik

K.-H. Goldhorn, H.-P. Heinz Mathematik für Physiker 1

C. Lang, N. Pucker Mathematische Methoden in der Physik

M. L. Boas Mathematical Methods in the Physical Sciences

WolframAlpha http://www.wolframalpha.com/examples

Inhaltsverzeichnis

Kapitel 6

Die Diracsche Delta-Funktion

6.1 Motivation und Einführung

Theoretische Physik:
Begriffe des "Massenpunktes" und der "Punktladung".
Dagegen: "Massendichte" und "Ladungsdichte"

Frage: Wie kann man diese beiden Konzepte verheiraten?

Heuristische Lösung: Eine Funktion $\delta(x)$ mit den Eigenschaften
$\delta(x) = 0 \qquad \text{für} \quad x \neq 0$
$\int_{-\epsilon}^{\epsilon} \delta(x) = 1 \quad \text{für alle } \epsilon > 0$
(genauere Definition siehe 6.2)

$\rightsquigarrow$ Massenpunkt bei $\vec{r}_0$ entspricht dann einfach der Dichteverteilung
$\rho(\vec{r}, t) = m\,\delta(\vec{r} - \vec{r}_0) = m\,\delta(x - x_0)\,\delta(y - y_0)\,\delta(z - z_0)$

Probleme:
– δ-Funktion ist eine ziemlich seltsame Funktion
– Integrierbarkeit? $\quad$ ($\lim_{\text{Untersumme}} \neq \lim_{\text{Obersumme}}$!)

Aber:
- Physiker ignorieren das!
  Funktion ist einfach "sehr scharf" gepeakt, d.h. so scharf, wie man es für die konkrete Anwendung braucht. (Peak schmäler als jede andere Längenskala im System).
- Mathematiker haben mittlerweile eine saubere Theorie der δ-Funktion und ähnlicher Konstrukte konstruiert: Die Distributionentheorie.

Historie

~ 1920: Einführung der δ-Funktion durch Dirac
(im Kontext der Quantenmechanik)

~ 1950: U. Schwartz, Theorie der Distributionen
(erhielt dafür die Fields-Medaille)

Heute wird δ-Funktion in der Physik praktisch überall verwendet. Unerläss lich zur Beschreibung physikalischer Sachverhalte, aber auch zur Behandlung mathematischer Probleme, z.B. Fouriertransformation (Kapitel 7), inhomogene Differentialgleichungen (Kapitel 8.2.4) u.v.a.

6.2 Definition

Zunächst in einer Dimension.
δ-Funktion muss offenbar gemeinsam mit Integral definiert werden.

Formale Definition

δ definiert eine Abbildung

$$\begin{array}{lcl} C_\infty & \longrightarrow & \mathbb{R} \\ f(x) & \longrightarrow & \int_a^b \mathrm{d}x\, f(x)\, \delta(x - x_0) := f(x_0) \quad \text{für } a < x_0 < b \end{array}$$

im Raum C_∞ der unendlich oft differenzierbaren Funktionen auf $\mathbb{R}$ oder $\mathbb{C}$ nach $\mathbb{R}$ oder $\mathbb{C}$.

Damit ist $\delta(x)$ strenggenommen keine Funktion. Diese Subtilität kann in der Praxis aber in den allermeisten Fällen ignoriert werden. Als Physiker kann man sich unter $\delta(x)$ eine "normale" Funktion mit einem Peak vorstellen, der so schmal und hoch ist, wie man es eben braucht.

6.3 Darstellungen der Delta-Funktion

6.3.1 Darstellung als Grenzwert glatter Funktionen

Ziel:

- Bessere Veranschaulichung
- Gleichungen für δ-Funktion für praktische Anwendungen
- Umgekehrt: Aussagen über Grenzverhalten bestimmter Funktionen

Allgemeine Form: $\delta(x) = \lim_{n\to\infty} \delta_n(x)$ oder $\delta(x) = \lim_{\epsilon\to 0} \delta_\epsilon(x)$,
wobei $\delta_n(x)$ bzw. $\delta_\epsilon(x)$ differenzierbare (glatte) Funktionen sind, typischerweisee mit den Eigenschaften $\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x\, \delta_{n,\epsilon}(x) = 1$ und $\lim \delta_{n,\epsilon}(x) = 0$ für $x \neq 0$.

Konkrete Darstellungen (Beweis von $\int \mathrm{d}x\, \delta_{n,\epsilon}(x) = 1$ weiter unten).

(i) $\delta_\epsilon(x) = \sqrt{\frac{1}{2\pi}}\frac{1}{\epsilon}\, \mathrm{e}^{-x^2/2\epsilon^2}, \quad \epsilon \to 0$

(ii) $\delta_\epsilon(x) = \frac{1}{\pi}\frac{\epsilon}{x^2+\epsilon^2}, \quad \epsilon \to 0$

(iii) $\delta_n(x) = \frac{1}{\pi}\frac{n}{1+n^2x^2}, \quad n \to \infty$

(iv) $\delta_n(x) = \frac{n}{\pi}\left(\frac{\sin nx}{nx}\right)^2, \quad n \to \infty$

(v) $\delta_n(x) = \frac{1}{\pi}\left(\frac{\sin nx}{x}\right), \quad n \to \infty$

Bemerkungen:

- (ii), (iii) mit Vorsicht zu benutzen, da $\delta_{n,\epsilon}(x)$ als Funktion von x im Unendlichen sehr langsam abfällt.
  Daher ist z.B. $\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x\, \delta_\epsilon(x)\, x^2 = \frac{\epsilon}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x\, \frac{x^2}{x^2+\epsilon^2} \approx \frac{\epsilon}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x \to \infty$
  obwohl $\int \mathrm{d}x\, \delta(x)\, x^2 = 0$ sein sollte.
  Problem tritt nicht auf, wenn man Integrationsgrenzen endlich wählt.
  $(\int_{-M}^{M} \mathrm{d}x\, \delta_\epsilon(x)\, x^2 \overset{\epsilon\to 0}{\to} 0 \quad$ für $\quad \epsilon \ll M)$.
- In Darstellung (v) verschwindet $\delta_n(x)$ strenggenommen nicht für $x \neq 0, n \to \infty$. Aber: oszilliert so schnell, dass Beiträge zu Integralen verschwinden. Diese Darstellung ist in der Praxis besonders wichtig.

Beweise von $\int_{-\infty}^{\infty} \delta_{n,\epsilon}(x) = 1$ in den Darstellungen (i)–(v)

(i) folgt aus $\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}\tau\, \mathrm{e}^{-\tau^2} = \sqrt{\pi}$ (3.4.5) nach Substitution $\tau = \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{x}{\epsilon}$.

(ii) folgt aus $\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}\tau\, \frac{1}{1+\tau^2} = \pi$ (B) nach Substitution $\tau = x/\epsilon$.

(iii) Analog (ii) mit $\epsilon = 1/n$.

(v) Zeige zunächst $\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}\tau \frac{\sin\tau}{\tau} = \pi$. Rest folgt nach Substitution $\tau = \pi x$.
Benutze dazu Theorie analytischer Funktionen (siehe Anhang B).
Falls $f(z)$ analytisch innerhalb eines Gebietes G in der komplexen Ebene, das von einer Kurve C umschlossen wird, dann gilt:
$\oint_C \mathrm{d}z\, f(z) = 0$ (Cauchyscher Integralsatz)
$\oint_C \mathrm{d}z\, \frac{f(z)}{z-w} = 2\pi i\, f(w)$ für Punkte $w \in G$
(Cauchysche Integralgleichung).
Dabei wird Kurve C in $\oint_C$ gegen den Uhrzeigersinn durchlaufen.

Damit folgt:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}\tau\, \frac{\sin\tau}{\tau} = \lim_{\epsilon\to 0^+} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}\tau\, \frac{\sin\tau}{\tau - i\epsilon} = \frac{1}{2i} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}\tau \Big(\frac{\mathrm{e}^{i\tau}}{\tau-i\epsilon} - \frac{\mathrm{e}^{-i\tau}}{\tau-i\epsilon} \Big)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}\tau\, \frac{\mathrm{e}^{i\tau}}{\tau-i\epsilon} = \oint_C \mathrm{d}z \frac{\mathrm{e}^{iz}}{z-i\epsilon}$$

mit C: Schließe Integrationsweg über obere Halbebene in $\mathbb{C}$
Oberer Halbkreis trägt nicht bei, da $\mathrm{e}^{i(i\infty)} = \mathrm{e}^{-\infty} = 0$.

$$\underset{\substack{\text{Cauchysche}\\ \text{Integralgleichung}}}{=} 2\pi i \mathrm{e}^{i(i\epsilon)} = 2\pi i \mathrm{e}^{-\epsilon} \underset{\epsilon\to 0}{=} 2\pi i$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}\tau\, \frac{\mathrm{e}^{-i\tau}}{\tau-i\epsilon} = -\oint_{C'} \mathrm{d}z \frac{\mathrm{e}^{-iz}}{z-i\epsilon}$$

mit C': Schließe Integrationsweg über untere Halbebene in $\mathbb{C}$
Unterer Halbkreis trägt nicht bei, da $\mathrm{e}^{-i(-i\infty)} = \mathrm{e}^{-\infty} = 0$.

$$\underset{\substack{\text{Cauchyscher}\\ \text{Integralsatz}}}{=} 0$$

da $\frac{\mathrm{e}^{-iz}}{z-i\epsilon}$ analytisch innerhalb von C'
(einziger Pol $z_0 = i\epsilon$ liegt außerhalb von C')

$$= \frac{1}{2i} 2\pi i = \pi \quad \checkmark.$$

(iv) Zeige $\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}\tau \left(\frac{\sin\tau}{\tau}\right)^2 = \pi$. Rest folgt nach Substitution $\tau = n\pi$.
Betrachte $I = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}\tau (\frac{\sin\tau}{\tau})^2 \underset{\substack{\text{partielle}\\ \text{Integration}}}{=} \Big[\tau(\frac{\sin\tau}{\tau})^2\Big]_{-\infty}^{\infty} - \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}\tau\, \tau \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\tau}\Big((\frac{\sin\tau}{\tau})^2\Big)$

$$= 2\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}\tau\, (\frac{\sin\tau}{\tau})^2 - 2\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}\tau\, \frac{\sin\tau\, \cos\tau}{\tau} = 2I - \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}\tau \frac{\sin(2\tau)}{\tau}$$

$$\Rightarrow I = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}\tau \frac{\sin(2\tau)}{\tau} \overset{\tau'=2\tau}{=} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}\tau' (\frac{\sin\tau'}{\tau'}) = \pi \quad \text{nach (v)} \checkmark$$

6.3.2 Darstellung als Integral

$$\boxed{\delta(x) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x\, \mathrm{e}^{ikx}}$$

(Begründung:
$\delta_n(x) = \frac{1}{2\pi}\int_{-n}^{n} \mathrm{d}k\, \mathrm{e}^{ikx} = \frac{1}{2\pi}\Big[\frac{1}{ix}\mathrm{e}^{ikx}\Big]_{k=-n}^{n} = \frac{1}{2\pi ix}(\mathrm{e}^{inx} - \mathrm{e}^{-inx}) = \frac{1}{\pi}\frac{\sin nx}{x}$
entspricht Grenzwert (v) in 6.3.1.
Alternativ: $\delta_\epsilon(x) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x \mathrm{e}^{ikx-\epsilon|x|} = \frac{1}{2\pi}\int_0^\infty \mathrm{d}x\, \mathrm{e}^{-\epsilon x}(\mathrm{e}^{ikx} + \mathrm{e}^{-ikx})$
$= \frac{1}{2\pi}(\frac{1}{\epsilon - ik} + \frac{1}{\epsilon + ik}) = \frac{1}{\pi}\frac{\epsilon}{k^2+\epsilon^2}$
entspricht Grenzwert (ii) in 6.3.1.)

6.4 Rechenregeln mit der Delta-Funktion

Zusammenstellung der wichtigsten Regeln

(i)
- $\int_a^b \mathrm{d}x\, \delta(x-x_0)\, f(x) = \begin{cases} f(x_0) & : \quad x_0 \in]a,b[\\ 0 & : \quad x_0 \notin [a,b] \end{cases}$
  für alle stetigen "Testfunktionen" f (laut Definition).

(ii)
- $\delta(x) = 0$ für $x \neq 0$
- $x \cdot \delta(x) = 0$ $\big($denn: $\int \mathrm{d}x\, x\, \delta(x)\, f(x) = 0 \quad \forall \quad f(x)\big)$
- $\delta(x-y) f(x) = \delta(x-y) f(y)$ $\big($denn: $\int \mathrm{d}x\, \delta(x-y)\, f(x) = f(y) = \int \mathrm{d}x\, \delta(x-y)\, f(y)\big)$

(iii)
- $\delta(\phi(x)) = \sum_{\substack{\text{Nullstellen} \\ x_i \text{von} \phi(x)}} \frac{1}{|\phi'(x_i)|}\, \delta(x - x_i)$ $\big($Beweis folgt am Ende des Abschnitts$\big)$
- $\delta(ax) = \frac{1}{|a|}\, \delta(x)$ $\big($Folgerung mit $\phi(x) = ax$.$\big)$

(iv) "Stammfunktion" :
- $\int_{-\infty}^{x} \mathrm{d}x'\, \delta(x') = \theta(x) = \begin{cases} 1 & : \quad x > 0 \\ 1/2 & : \quad x = 0 \\ 0 & : \quad x < 0 \end{cases}$: Heaviside-Funktion

  Umgekehrt: $\mathrm{d}\theta/\mathrm{d}x = \delta(x)$.

(v) "Ableitungen" :
- $\int_a^b \mathrm{d}x\, \delta'(x-x_0)\, f(x) = \begin{cases} -f'(x_0) & : \quad x_0 \in]a,b[\\ 0 & : \quad x_0 \notin [a,b] \end{cases}$
  für alle differenzierbaren Testfunktionen f
  $\big($denn: $\delta_a^b f(x)\delta'(x-x_0) = \underbrace{[\delta(x-x_0)\, f(x)]_a^b}_{0} - \int_a^b \mathrm{d}x\, f'(x)\, \delta(x-x_0) = -f'(x_0)\ \big)$.
- $\int_a^b \mathrm{d}x\, \delta^(n)(x-x_0)\, f(x) = \begin{cases} (-1)^n\, f^{(n)}(x_0) & : \quad x_0 \in]a,b[\\ 0 & : \quad x_0 \notin [a,b] \end{cases}$
  für alle n-fach differenzierbaren Testfunktionen f $\big($denn: analog$\big)$

(vi) Symmetrien :
- $\delta(-x) = \delta(x)$: $\delta(x)$ ist gerade $\big($Folgerung aus (iii-b) mit $a = -1$.$\big)$
- $\delta'(-x) = -\delta(x)$ $\big($Kettenregel$\big)$
- $\delta^{(n)}(-x) = (-1)^n \delta^{(n)}(x)$ $\big($Kettenregel$\big)$

Nachtrag: Beweis von (iii): $\delta(\phi(x)) = \sum_{\substack{\text{Nullstellen}\\ x_i \text{von} \phi(x)}} \frac{1}{|\phi'(x_i)|} f(x_i)\,\delta(x - x_i)$

Zerlege $\phi(x)$ in monotone Teilstücke $I_\alpha = [x_{\alpha-1}, x_\alpha]$.

In jedem Teilstück ist ϕ umkehrbar. Umkehrfunktion $g_\alpha(\phi)$ ist definiert im Intervall zwischen $\phi_{\alpha-1} := \phi(x_{\alpha-1})$ und $\phi_\alpha := \phi(x_\alpha)$.

$\Rightarrow$ Für stetige Testfunktionen $f(x)$ gilt:

$\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x\, \delta(\phi(x))\, f(x) = \sum_\alpha \int_{x_{\alpha-1}}^{x_\alpha} \mathrm{d}x\, \delta(\phi(x))\, f(x)$

$\underset{\text{Substitution}}{=} \sum_\alpha \int_{\phi_{\alpha-1}}^{\phi_\alpha} \mathrm{d}\phi\, \frac{1}{\phi'(x)|_{x=g_\alpha(\phi)}} \delta(\phi) f(g_\alpha(\phi))$.

Nur Teilstücke, auf denen Nullstelle liegt, tragen zum Integral bei.

Jedes Teilstück hat maximal eine Nullstelle x_i.

Beitrag, falls ϕ monoton steigt $(\phi_{\alpha-1} < \phi_\alpha, \phi'(x) > 0)$

$\rightarrow \int_{\phi_{\alpha-1}}^{\phi_\alpha} \frac{\mathrm{d}\phi}{\phi'(x)} \delta(\phi)\, f(g_\alpha(\phi)) = f(x_i) \frac{1}{\phi'(x_i)} \underset{\phi'>0}{=} f(x_i)/|\phi'(x_i)|$

Beitrag, falls ϕ monoton fällt $(\phi_{\alpha-1} > \phi_\alpha, \phi'(x) < 0)$

$\rightarrow \int_{\phi_{\alpha-1}}^{\phi_\alpha} \mathrm{d}\phi \cdots \underset{\substack{\text{Sortiere}\\ \text{Integrationsgrenzen}}}{=} = -\int_{\phi_\alpha}^{\phi_{\alpha-1}} \mathrm{d}\phi \cdots = -\frac{f(x_i)}{\phi'(x_i)} \underset{\phi'<0}{=} f(x_i)/|\phi'(x_i)|$.

Zusammen:

$\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x\, \delta(\phi(x))\, f(x) = \sum_{\substack{\text{Nullstellen}\\ x_i \text{von} \phi(x)}} f(x_i)/|\phi'(x_i)|$

$= \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x\, \sum_{\substack{\text{Nullstellen}\\ x_i \text{von} \phi(x)}} \frac{1}{|\phi'(x_i)|} \delta(x - x_i)\, f(x)$ für alle Testfunktionen f. ✓

6.5 Verallgemeinerung für höhere (d) Dimensionen

Ortsvektoren $\vec{r} = (x_1, \cdots, x_d)$.

$$\boxed{\delta^d(\vec{r} - \vec{r}^0) = \delta(x_1 - x_1^0)\, \delta(x_2 - x_2^0) \cdots \delta(x_d - x_d^0)}$$

mit Integraldarstellung $\boxed{\delta(\vec{r}) = \left(\frac{1}{2\pi}\right)^d \int \mathrm{d}^d k\, \mathrm{e}^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}}$