Rekursionsformel: Benutze E.F. des harm. Oszillators

Beweis auf 2.41

$$a^+ \phi_n = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(u - \frac{d}{du}\right)\phi_n = \sqrt{n+1}\,\phi_{n+1} \qquad (1)$$

$$a\,\phi_n = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(u + \frac{d}{du}\right)\phi_n = \sqrt{n}\,\phi_{n-1} \qquad (2)$$

((2) zeigt man analog zu (1) über Normierungsbedingung)

$$\phi_n = \pi^{-1/4}\frac{1}{\sqrt{2^n n!}} H_n e^{-u^2/2}$$

$$(1)+(2) \Rightarrow \sqrt{2}\,u\,\phi_n = \sqrt{n+1}\,\phi_{n+1} + \sqrt{n}\,\phi_{n-1}$$

$$\Rightarrow \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{2^n\, n!}}\, u\, H_n(u) = \frac{\sqrt{n+1}}{\sqrt{2^{n+1}(n+1)!}} H_{n+1} + \frac{\sqrt{n}}{\sqrt{2^{n-1}(n-1)!}} H_{n-1}$$

$$\frac{1}{\sqrt{2^{n-1}}\sqrt{n!}}\, u\, H_n(u) = \frac{1}{\sqrt{2^{n+1}}\sqrt{n!}} H_{n+1} + \frac{n}{\sqrt{2^{n-1}}\sqrt{n!}} H_{n-1}$$

$$u\, H_n(u) = \frac{1}{2} H_{n+1}(u) + n\, H_{n-1}(u)$$

$$\therefore \quad \underline{H_{n+1}(u) = 2u\, H_n(u) - 2n\, H_{n-1}(u)}$$

$$\Rightarrow H_5(u) = 2u\, H_4 + 8\, H_3$$

$$= 2u\left(16u^4 - 48u^2 + 12\right) - 8\left(8u^3 - 12u\right)$$

$$= u^5(32) + u^3(-96 - 64) + u(24 + 96)$$

$$= 32u^5 - 160u^3 + 120u$$

Es gilt

$$H_n(-u) = (-)^n H_n(u)$$

Alternative Darstellung der Hermite-Polynome:

$$H_n(u) = e^{u^2}\left(-\frac{d}{du}\right)^n e^{-u^2}$$

Beweis (Induktion)

$$H_0(u) = e^{u^2} e^{-u^2} = 1 \quad \checkmark$$

$$H_1(u) = -e^{u^2}\frac{d}{du} e^{-u^2} = -e^{u^2}(-2u)e^{-u^2} = 2u \quad \checkmark$$

Zu zeigen:

wenn $$e^{u^2/2}\left(u-\frac{d}{du}\right)^n e^{-u^2/2} = (-)^n e^{u^2}\frac{d^n}{du^n}e^{-u^2}$$

so muss gelten

$$e^{u^2/2}\left(u-\frac{d}{du}\right)^{n+1} e^{-u^2/2} = (-)^{n+1} e^{u^2}\frac{d^{n+1}}{du^{n+1}}e^{-u^2}$$

Beweis:

$$e^{u^2/2}\left(u-\frac{d}{du}\right)^{n+1} e^{-u^2/2} = e^{u^2/2}\left(u \frac{d}{du}\right)\left(u-\frac{d}{du}\right)^n e^{-u^2/2}$$

$$= e^{u^2/2}(-)^n\left(u-\frac{d}{du}\right) e^{u^2/2}\frac{d^n}{du^n}e^{-u^2}$$

$$= (-)^n e^{u^2/2}\left\{u\, e^{u^2/2}\frac{d^n}{du^n}e^{-u^2} - \frac{d}{du}e^{u^2/2}\frac{d^n}{du^n}e^{-u^2}\right\}$$

$$= (-)^n e^{u^2/2} \left\{ \cancel{u e^{u^2/2} \frac{d^n}{du^n} e^{-u^2}} - \cancel{u e^{u^2/2} \frac{d^n}{du^n} e^{-u^2}} \right.$$

$$\left. - e^{u^2/2} \frac{d^{n+1}}{du^{n+1}} e^{-u^2} \right\}$$

$$= (-)^{n+1} e^{u^2} \frac{d^{n+1}}{du^{n+1}} e^{-u^2}$$

∎

T Wie kommt man auf die alternative Darstellung?

Betrachte $\frac{d}{du} e^{-u^2/2} f(u) = -u e^{-u^2/2} f(u) + e^{-u^2/2} \frac{df}{du}$

$$= - e^{-u^2/2} \left(u - \frac{d}{du}\right) f(u)$$

$$H_1 = e^{u^2/2} \left(u - \frac{d}{du}\right) \underbrace{e^{-u^2/2}}_{= f(u)} = - e^{u^2/2} e^{u^2/2} \frac{d}{du} e^{-u^2/2} f(u)$$

$$= - e^{u^2} \frac{d}{du} e^{-u^2}$$

usw., Rest durch Induktion ∎

Orthogonalität der Hermite-Polynome:

$$H\phi_n = E_n \phi_n \quad , \quad H = \hbar\omega\left(a^+ a + \tfrac{1}{2}\right)$$

$$E_n = \hbar\omega\left(n + \tfrac{1}{2}\right) \quad , \quad n = 0, 1, 2, \ldots$$

$$(\phi_m, H\phi_n) = \int_{-\infty}^{\infty} du\, \phi_m^* H \phi_n = E_n \int_{-\infty}^{\infty} du\, \phi_m^* \phi_n$$

$$= E_n (\phi_m, \phi_n)$$

$$\rightsquigarrow \quad E_n(\phi_m, \phi_n) = (\phi_m, H\phi_n) = (H\phi_m, \phi_n) = E_m(\phi_m, \phi_n)$$

$$\Rightarrow \quad (E_n - E_m)(\phi_m, \phi_n) = 0 \qquad (*)$$

$n = m$: $\quad E_n = E_m$, $(*)$ erfüllt

$n \neq m$: $\quad E_n \neq E_m \Rightarrow (*)$ erfüllt falls $(\phi_m, \phi_n) = 0$

Daher $\quad (\phi_m, \phi_n) = \delta_{nm} \quad$ (ϕ_n sind normiert)

$$\int_{-\infty}^{\infty} \phi_m^*(u)\, \phi_n(u)\, du = N_n N_m \int_{-\infty}^{\infty} e^{-u^2} H_n^*(u)\, H_m(u)\, du$$

motiviert Gewichtsfunktion

$$= \delta_{nm}$$

mit $N_n = \dfrac{1}{\sqrt{2^n n! \sqrt{\pi}}}$

Nun zeigen wir noch den Zusammenhang zwischen Schrödinger-Gleichung und Hermite'scher DGL:

Schrödinger-Gleichung in Variable u (dimensionslos!)

$$\frac{1}{2}\hbar\omega\left(-\frac{d^2}{du^2}+u^2\right)\phi_n = \hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right)\phi_n$$

$$\left(-\frac{d^2}{du^2}+u^2\right)\phi_n = (2n+1)\,\phi_n$$

$$\phi_n = N_n\,H_n(u)\,e^{-u^2/2}\,,\qquad N_n = \frac{1}{\sqrt{2^n\,n!\,\sqrt{\pi}}}$$

Einsetzen liefert

$$-\frac{d^2}{du^2}\phi_n = N_n\,e^{-u^2/2}\left\{2u\frac{dH_n}{du}-u^2H_n-\frac{d^2H_n}{du^2}+H_n\right\}$$

cancelled by $(+u^2\phi_n)$

Faktor $N_n\,e^{-u^2/2}$ tritt auf beiden Seiten auf

$$\Rightarrow\quad 2u\frac{dH_n}{du}-\frac{d^2H_n}{du^2}+H_n = (2n+1)\,H_n$$

$$\therefore\quad \frac{d^2H_n(u)}{du^2}-2u\frac{dH_n(u)}{du}+2n\,H_n(u) = 0$$

$y=y(x)$:
$$y''-2x\,y'+2n\,y = 0$$

Hermite'sche DGL

Erzeugende Funktion für Hermite-Polynome

Definition: Eine Funktion $g(u,t)$ heißt **erzeugende Funktion** eines Systems von Polynomen $\{P_n(u),\ n = 0,1,2,\dots\}$ wenn

$$g(u,t) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n P_n(u) t^n$$

mit gegebenen Koeffizienten a_n

Hermite-Polynome:

$$H_n(u) = \underline{e^{u^2} (-)^n \frac{d^n}{du^n} e^{-u^2}}$$

$$= \underline{e^{u^2} \left[\frac{d^n}{du^n} e^{-(t-u)^2} \right]_{t=0}}$$

Funktionentheorie: die n-te Ableitung einer analytischen Funktion $f(z)$ bei $z = z_0$ ist gegeben durch

$$f^{(n)}(z_0) = \frac{n!}{2\pi i} \oint \frac{f(z)}{(z-z_0)^{n+1}} dz$$

(Integral entlang geschl. Kurve die z_0 einschließt)

Setze $z_0 = 0$ und betrachte die komplexifizierte Funktion $f(z) = e^{-(z-u)^2}$. Damit wird

$$H_n(u) = e^{u^2} \frac{n!}{2\pi i} \oint \frac{e^{-(z-u)^2}}{z^{n+1}} dz$$

$$= \frac{n!}{2\pi i} \oint \frac{e^{u^2-(z-u)^2}}{z^{n+1}} dz$$

$$\left[g(u,t) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n P_n(u) t^n \right]$$

→ Betrachte die Reihe

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} H_n(u) t^n = \frac{1}{2\pi i} \sum_{n=0}^{\infty} \oint \frac{e^{u^2-(z-u)^2}}{z} \left(\frac{t}{z}\right)^n dz$$

Geometrische Reihe:

$$\sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{t}{z}\right)^n = \frac{1}{1-t/z}$$

und somit

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} H_n(u)\, t^n = \frac{1}{2\pi i} \oint \frac{e^{u^2-(z-u)^2}}{z(1-t/z)}\, dz$$

$$= \frac{1}{2\pi i} \oint \frac{e^{u^2-(z-u)^2}}{z-t}\, dz$$

einfacher Pol bei $z=t$

$$= \cancel{2\pi i}\, \mathrm{Res}\, \frac{1}{\cancel{2\pi i}} \frac{e^{u^2-(z-u)^2}}{z-t}\Bigg|_{z=t}$$

Cauchy

$$= \lim_{z\to t} \cancel{(z-t)} \frac{e^{u^2-(z-u)^2}}{\cancel{z-t}}\Bigg|_{z=t} = e^{u^2-(t-u)^2}$$

$$= e^{2tu-t^2}$$

$\therefore$ $g(u,t) = e^{2tu-t^2}$ ist die erzeugende Funktion der Hermite-Polynome.

2.4 Orthogonale Funktionensysteme

Motivation:

- Unendlich hoher Potenzialtopf;

  Eigenfunktionen: ← Abschnitt 2.1

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right), \quad n = 1,2,3,\ldots$$

- Harmonischer Oszillator:

$$\phi_n(u) = N_n \, e^{-u^2/2} H_n(u), \quad N_n = \frac{1}{\sqrt{2^n n! \, \pi^{1/2}}}$$

Die Eigenfunktionen in beiden Fällen sind Beispiele für Orthogonale Funktionensysteme: $(\phi_n, \phi_m) = \delta_{nm}$

$$I = \frac{2}{L} \int_0^L \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) \sin\left(\frac{m\pi x}{L}\right) dx$$

$$\underset{\text{P.I.}}{=} \frac{m^2}{n^2} I \quad ; \quad I \neq 0 \Rightarrow m = n$$

Falls $m \neq n$ muss $I = 0$

$$\therefore \quad \boxed{I = \int_0^L \psi_n^*(x)\, \psi_m(x)\, dx = \delta_{nm}}$$

c.f. Orthogonalität der Hermite polynome: $N_n N_m \int_{-\infty}^{\infty} e^{-u^2} H_n^*(u) H_m(u) du = \delta_{mn}$

Definition: Verallgemeinerte Orthogonalität

Gegeben sei Intervall $I = [a, b]$ auf reeller Achse und eine positiv semi-definite Fkt. $\rho(x): \mathbb{R} \to \mathbb{R}$, die auf I strikt positiv ist:

$$\rho(x) \geq 0 \quad \forall x \in \mathbb{R}, \qquad \rho(x) > 0, \quad x \in [a, b]$$

Außerdem fordern wir:

$$\rho(x) \leq c\, e^{-\alpha |x|} \qquad \forall x$$

d.h. $\rho(x)$ fällt für $|x| \to \infty$ exponentiell ab.

$\rho(x)$ heißt Dichte- oder Gewichtsfunktion

Eine unendliche Reihe von reellen Polynomen $P_k(x)$, $k = 0, 1, 2, \ldots$ mit der Eigenschaft

$$\int_a^b \rho(x)\, P_n(x)\, P_m(x)\, dx = \delta_{nm} \qquad (*)$$

heißt im Intervall $[a, b]$ bzgl. der Gewichtsfunktion $\rho(x)$ orthonormiert.

"Mit dieser Definition kann man ein Verfahren angeben, mit dem unter Vorgabe von $[a, b]$ und $\rho(x)$ eine Reihe von Polynomen aufgebaut werden kann."

$\varrho(x)$, $I = [a,b]$ vorgegeben ↷ kann $P_n(x)$, $n = 0,1,2,\dots$ konstruieren so dass (*) gilt:

$$\varphi_k(x) := \sqrt{\varrho(x)}\; P_k(x) \;\Rightarrow\; (\varphi_k, \varphi_l) \equiv \int_a^b dx\, \varphi_k^*(x)\, \varphi_l(x)$$

strikt + tiv in I !

$$= \delta_{kl}$$

Orthogonalisierungsverfahren von GRAM-SCHMIDT

Skalarprodukt: $(f, g) := \int_a^b dx\, f^*(x)\, g(x)$

$$g_k(x) := \sqrt{\varrho(x)}\; x^k, \quad k = 0,1,2,\dots \qquad [\varrho(x) \equiv 1 \Rightarrow g_0(x) = 1]$$

$$f_0(x) = g_0(x), \quad f_1(x) = g_1(x) - \frac{(f_0, g_1)}{(f_0, f_0)} f_0(x)$$

Projektion von g_1 auf orthogonales Komplement von $g_0 = f_0$

$f_0 \perp f_1$ denn

$$(f_0, f_1) = \left(f_0,\; g_1 - \frac{(f_0, g_1)}{(f_0, f_0)} f_0\right)$$

$$= (f_0, g_1) - \frac{(f_0, g_1)}{(f_0, f_0)} (f_0, f_0) = 0$$

$$(f_1, f_1) = (g_1, g_1) + \cancel{\frac{(f_0, g_1)^2}{(f_0, f_0)^2} (f_0, f_0)} - \cancel{\frac{(f_0, g_1)^2}{(f_0, f_0)}}$$

$$- \frac{(f_0, g_1)}{(f_0, f_0)} (g_1, f_0) \equiv c_1^2$$

$$f_2(x) = g_2(x) - \frac{(f_0, g_2)}{(f_0, f_0)} f_0(x) - \frac{(f_1, g_2)}{(f_1, f_1)} f_1(x)$$

$$\Rightarrow (f_0, f_2) = \cancel{(f_0, g_2)} - \frac{\cancel{(f_0, g_2)}}{\cancel{(f_0, f_0)}} \cancel{(f_0, f_0)} - \frac{(f_1, g_2)}{(f_1, f_1)} \underbrace{(f_0, f_1)}_{=0}$$

$$= 0$$

$$(f_1, f_2) = \cancel{(f_1, g_2)} - \frac{(f_0, g_2)}{(f_0, f_0)} \underbrace{(f_1, f_0)}_{=0} - \frac{\cancel{(f_1, g_2)}}{\cancel{(f_1, f_1)}} \cancel{(f_1, f_1)}$$

$$= 0$$

Allgemein:

$$\boxed{f_k(x) := g_k(x) - \sum_{l=0}^{k-1} \frac{(f_l, g_k)}{(f_l, f_l)} f_l(x), \quad g_k(x) = \sqrt{\rho}\, x^k}$$

Man zeigt: $(f_k, f_l) = 0, \quad k \neq l$ (Induktion)

Die Funktionen

$$\varphi_k(x) := \frac{f_k(x)}{\sqrt{(f_k, f_k)}}$$

sind orthogonal und normiert: $\int_a^b dx\, \varphi_n^*(x)\, \varphi_m(x) = \delta_{nm}$

Die Polynome $P_n(x)$ bzgl. der Gewichtsfunktion $\rho(x)$ erhält man durch

$$\int_a^b dx\ \rho(x)\, P_n^*(x) P_m(x) = \int_a^b dx\ \varphi_m^*(x)\, \varphi_n(x) = \delta_{mn}$$

$$\Rightarrow \quad P_n(x) = \frac{\varphi_n(x)}{\sqrt{\rho(x)}} \qquad \left(\rho(x) \text{ strikt positiv in } [a,b] \right)$$

Definition:

Ein System von orthonormierten Funktionen $\{\varphi_n\}$ heißt vollständig, wenn jede quadratintegrable Funktion $h(x)$ mit $(\varphi_n, h) = 0 \ \forall n$ identisch Null ist: $h \equiv 0$.

Gleichbedeutend mit der Aussage, dass sich jede quadratintegrable Funktion nach den φ_n entwickeln läßt:

$$h(x) = \sum_{k=0}^{\infty} c_k\, \varphi_k(x)$$

Illustration: kartesisches Koordinatensystem

Vektor: $\quad v = v_1 \hat{e}_1 + v_2 \hat{e}_2 + v_3 \hat{e}_3 = \sum_{i=1}^{3} v_i \hat{e}_i$

$$\Rightarrow (\hat{e}_k, v) = \sum_{i=1}^{3} v_i \underbrace{(\hat{e}_k, \hat{e}_i)}_{\delta_{ki}} = v_k$$

Falls also $(\hat{e}_k, v) = 0 \ \forall k \Rightarrow v_k = 0 \ \forall k \Rightarrow v \equiv 0$

⌈ Angenommen, es gäbe einen weiteren Einheitsvektor $\hat{\eta}$

mit $(\eta, \hat{e}_k) = 0 \quad \forall k$

Dann wäre $(\eta, v) = 0$ ohne dass $v_k = 0 \ \forall k$. ⌋

Vollständigkeit ist gleichbedeutend mit der Bedingung

$$\sum_{n=0}^{\infty} \varphi_n(x)\, \varphi_n^*(x') = \delta(x - x')$$

Das sieht man wie folgt:

Sei $h(x) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n \varphi_n(x)$, dann sind die Koeffizienten c_n

gegeben durch

$$\underline{(\varphi_m, h)} = \int_a^b \varphi_m^*(x)\, h(x)\, dx$$

$$= \int_a^b \varphi_m^*(x) \sum_{n=0}^{\infty} c_n \varphi_n(x)\, dx$$

$$= \sum_{n=0}^{\infty} c_n \int_a^b \varphi_m^*(x)\, \varphi_n(x)\, dx = \underline{c_m}$$

"denn $\{\varphi_n\}$ bilden orthonormiertes System"

Somit: $h(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \varphi_n(x)\, (\varphi_n, h) = \sum_{n=0}^{\infty} \varphi_n(x) \int_a^b dx'\, \varphi_n^*(x')\, h(x')$

$$= \int_a^b dx' \underbrace{\sum_{n=0}^{\infty} \varphi_n(x)\, \varphi_n^*(x')}_{= \delta(x - x')} h(x') \quad \Rightarrow \text{Beh.} \ \blacksquare$$