

Rekursionsformel:

Benutze E.F. des harm. Oszillators

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

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

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

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

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

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

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

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

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

$$\begin{aligned} \Rightarrow H_5(u) &= 2u H_4 + 8 H_3 \\ &= 2u (16u^4 - 48u^2 + 12) - 8 (8u^3 - 12u) \\ &= u^5 (32) + u^3 (-96 - 64) + u (24 + 96) \\ &= 32u^5 - 160u^3 + 120u \end{aligned}$$

Es gilt

$$H_n(-u) = (-1)^n H_n(u)$$

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:

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

so muss gelten

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

Beweis:

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

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

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

$$\begin{aligned}
 &= (-1)^n e^{u^2/2} \left\{ \cancel{u e^{u^2/2} \frac{d^n}{du^n} e^{-u^2}} - \cancel{u e^{u^2/2} \frac{d^n}{du^n} e^{-u^2}} \right. \\
 &\quad \left. - e^{u^2/2} \frac{d^{n+1}}{du^{n+1}} e^{-u^2} \right\} \\
 &= (-1)^{n+1} e^{u^2} \frac{d^{n+1}}{du^{n+1}} e^{-u^2} \quad \square
 \end{aligned}$$

⊞ Wie kommt man auf die alternative Darstellung?

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

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

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

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

Ww., Rest durch Induktion ||

Induktionsschritt

Orthogonalität der Hermite-Polynome:

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

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

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

$$\Rightarrow E_n (\phi_m, \phi_n) = (\phi_m, H \phi_n) = (H \phi_m, \phi_n) = E_m (\phi_m, \phi_n)$$

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

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

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

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

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} \phi_m^* \omega \phi_n \, du &= N_n N_m \int_{-\infty}^{\infty} e^{-u^2} H_n^*(u) H_m(u) \, du \\ &= \delta_{nm} \end{aligned}$$

↑  
normiert  
Gegenstandsformeln

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

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

Schrödinger-Gleichung in Variable  $u$  (Dimensionlos!)

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

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

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

Einsetzen liefert

$$-\frac{d^2}{du^2} \phi_n = N_n e^{-u^2/2} \left\{ 2u \frac{dH_n}{du} - \underbrace{u^2 H_n}_{\text{cancelled by } (+u^2 \phi_n)} - \frac{d^2 H_n}{du^2} + H_n \right\}$$

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

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

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

$$y = y(x): \quad \underline{y'' - 2x y' + 2n y = 0}$$

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:

$$H_n(w) = e^{w^2} (-1)^n \frac{d^n}{dw^n} e^{-w^2}$$

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

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 komplexwertige Funktion

$$f(z) = e^{-(z-w)^2} \quad \text{Dann ist}$$

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

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

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

→ Betrachte die Reihe

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

Geometrische Reihe:

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

Und somit

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

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

← einfacher Pol bei  $z=t$

$$= \cancel{2\pi i} \operatorname{Res} \frac{1}{\cancel{2\pi i}} \frac{e^{u^2 - (z-w)^2}}{z-t} \Big|_{z=t}$$

Cauchy

$$= \lim_{z \rightarrow t} \cancel{(z-t)} \frac{e^{u^2 - (z-w)^2}}{\cancel{z-t}} \Big|_{z=t} = e^{u^2 - (t-w)^2}$$

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

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



## 2.4 Orthogonale Funktionensysteme

Motivation:

- Unendlich hoher Potenzialtopf;

Eigenfunktionen:

← Abschnitt 2.1

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

- 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:  $(\phi_n, \phi_m) = \delta_{nm}$

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

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

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

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

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

## Definition: Verallgemeinerte Orthogonalität

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

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

Außerdem fordern wir:

$$g(x) \leq c e^{-\alpha|x|} \quad \forall x$$

d.h.  $g(x)$  fällt für  $|x| \rightarrow \infty$  exponentiell ab.

$g(x)$  heißt Dichte- oder Gewichtsfunktion

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

$$\int_a^b g(x) P_n(x) P_m(x) dx = \delta_{nm} \quad (*)$$

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

☞

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

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

$$\varphi_k(x) := \sqrt{g(x)} P_k(x) \Rightarrow (\varphi_k, \varphi_l) = \int_a^b dx \varphi_k^*(x) \varphi_l(x) = \delta_{kl}$$

↑  
sticht + tiv in  $I$  !

### Orthogonalisierungsverfahren von GRAM-SCHMIDT

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

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

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

$f_0 \perp f_1$  denn

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

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

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

$$(f_1, f_1) = (g_1, g_1) + \frac{(f_0, g_1)^2}{(f_0, f_0)^2} (f_0, f_0) - \frac{(f_0, g_1)^2}{(f_0, f_0)} - \frac{(f_0, g_1)}{(f_0, f_0)} (g_1, f_0) \equiv (c_1)^2$$

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

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

$$= 0$$

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

$$= 0$$

Allgemein:

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

Man zeigt:  $(f_k, f_l) = 0$ ,  $k \neq l$  (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  $p(x)$  erhält man durch

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

$$\Rightarrow P_n(x) = \frac{\varphi_n(x)}{\sqrt{p(x)}} \quad (p(x) \text{ nicht negativ in } [a, b])$$

### Definition:

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

Gleichbedeutend mit der Aussage, dass sich jede quadratintegrale Funktion nach den  $\varphi_n$  entwickeln lässt:

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

Illustration: kartesisches Koordinatensystem

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

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

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

Angenommen, es gäbe einen weiteren Einheitsvektor  $\hat{v}$  mit  $(\eta, \hat{e}_k) = 0 \quad \forall k$   
 Dann wäre  $(\eta, v) = 0$  ohne dass  $v_k = 0 \quad \forall k$ .  $\perp$

Vollständigkeit ist gleichbedeutend mit der Bedingung

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

Das sieht man wie folgt:

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

gegeben durch

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

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

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

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

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

$$= \int_a^b dx' \underbrace{\sum_{n=0}^{\infty} \varphi_n(x) \varphi_n^*(x')}_{= \delta(x-x')} h(x')$$

$\Rightarrow$  Beh.  $\blacksquare$