Kapitel 1

Erzeugende der Hermite-Polynome

1.1 Hermite'sche Polynome

Die *Hermite'schen Polynome* der Ordnung n sind Lösungen der Differentialgleichung

$$H_n'' - 2\xi H_n' + 2nH_n(\xi) = 0 \ . \tag{1.1}$$

mit $\epsilon = 2n+1$; sie haben die Parität $(-1)^n$. Die Hermite'schen Polynome sind so normiert, daß der Koeffizient der höchsten Potenz gerade 2^n ist.

Die Hermite'schen Polynome können dargestellt werden durch:

$$H_n(\xi) = (-1)^n e^{\xi^2} \frac{d^n}{d\xi^n} e^{-\xi^2} \ , \ \textit{Rodriguezformel} \tag{1.2}$$

wie durch Einsetzen in die DGL verifiziert werden kann.

Daraus können die folgenden expliziten Ausdrücke berechnet werden:

$$\begin{aligned} H_0(\xi) &= 1 \\ H_1(\xi) &= 2\xi \\ H_2(\xi) &= 4\xi^2 - 2 \\ H_3(\xi) &= 8\xi^3 - 12\xi \\ \vdots \quad &\ \ \vdots \qquad\qquad . \end{aligned} \tag{1.3}$$

Für die Hermite'schen Polynome kann eine wichtige Relation für die Ableitung hergeleitet werden. Dazu differenziert man die Bestimmungsgleichung für $H_n(\xi)$:

$$\begin{aligned} \frac{d^2}{d\xi^2}\frac{dH_n}{d\xi} &- 2\frac{dH_n}{d\xi} - 2\xi\frac{d}{d\xi}\frac{dH_n}{d\xi} + 2n\frac{dH_n}{d\xi} = 0 \qquad (1.4) \\ \frac{d^2}{d\xi^2}\frac{dH_n}{d\xi} &- 2\xi\frac{d}{d\xi}\frac{dH_n}{d\xi} + 2(n-1)\frac{dH_n}{d\xi} = 0 \ . \end{aligned}$$

Hieran erkennt man, daß $dH_n/d\xi$ gerade die DGL für H_{n-1} erfüllt. Dabei kann allerdings noch eine Konstante hineinmultipliziert werden, da die DGL homogen ist. Also gilt:

$$\frac{dH_n}{d\xi} = c\,H_{n-1}(\xi) \ , \tag{1.5}$$

wobei c eine Konstante ist. Diese kann bestimmt werden, indem man die höchste Potenz auf beiden Seiten der Gleichung betrachtet:

$$\frac{d}{d\xi} 2^n \xi^n = n 2^n \xi^{n-1} = c\,2^{n-1}\xi^{n-1} \ . \tag{1.6}$$

Also folgt:

$$c = 2n \tag{1.7}$$

und daher:

$$\frac{dH_n}{d\xi} = 2nH_{n-1}(\xi) \qquad \text{für} \quad n \geq 1 \ . \tag{1.8}$$

Damit ist die Ableitung eines Hermite'schen Polynoms wieder ein Hermite'sches Polynom, mit einer um "1" niedrigeren Ordnung. Dass die Differentiation eines Polynoms n-ter Ordnung wieder ein solches $n-1$-ter Ordnung liefert, ist trivial. Im Falle der Hermite'schen Polynome ist darüber hinaus aber auch dieses wieder ein eben solches.

1.2 Funktionentheoretische Herleitung der Erzeugenden

Nach der Cauchy'schen Integralformel gilt für die n-te Ableitung einer in einem gewissen Gebiet der komplexen Ebene regulären Funktion $f(z)$:

$$\frac{d^n}{d\xi^n} f(\xi) = \frac{n!}{2\pi i} \oint_C \frac{f(z)}{(z-\xi)^{n+1}} dz \ , \tag{1.9}$$

wobei die Integration über einen geschlossenen, den Punkt ξ einschließenden Weg C in der komplexen Ebene läuft, innerhalb dessen die Funktion $f(z)$ regulär ist.

In dem Regularitätsgebiet kann $f(z)$ entwickelt werden in eine Taylor Reihe

$$f(z) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n (z - z_0)^n \ , \tag{1.10}$$

wobei die Koeffizienten a_n gegeben sind durch

$$a_n = \frac{1}{n!} f^{(n)}(z) = \frac{1}{2\pi i} \oint_C \frac{f(z)}{(z-\xi)^{n+1}} dz \ . \tag{1.11}$$

Diese Sätze wenden wir jetzt an auf die Funktion $f(z) = e^{-z^2}$

$$\frac{d^n}{d\xi^n} e^{-\xi^2} = \frac{n!}{2\pi i} \oint_C \frac{e^{-z^2}}{(z-\xi)^{n+1}} dz \ , \tag{1.12}$$

Daher gilt nun unter Verwendung der Rodriguez Formel

$$e^{-\xi^2} H_n(\xi) = (-1)^n \frac{d^n}{d\xi^n} e^{-\xi^2} = (-1)^n \frac{n!}{2\pi i} \oint\limits_C \frac{e^{-z^2}}{(z-\xi)^{n+1}} \, dz \ . \tag{1.13}$$

Mit der Substitution

$$z = \xi - t \tag{1.14}$$

folgt:

$$\frac{e^{-\xi^2}}{n!} H_n(\xi) = \frac{1}{2\pi i} \oint\limits_C \frac{e^{-t^2-\xi^2+2t\xi}}{t^{n+1}} \, dt \ . \tag{1.15}$$

Der Integrationsweg schließt hier $t = 0$ ein. Division durch $\exp -\xi^2$ liefert:

$$\frac{1}{n!} H_n(\xi) = \frac{1}{2\pi i} \oint_C \frac{e^{-t^2+2t\xi}}{t^{n+1}} \, dt \ . \tag{1.16}$$

Rechts in dieser Gleichung steht der Koeffizient a_n in der Reihenentwicklung der Funktion im Zähler (betrachtet als Funktion von t mit ξ als Parameter) um $t = 0$

$$f(t, \xi) = e^{-t^2+2t\xi} = \sum_{n=0}^{\infty} a_n t^n = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} H_n(\xi) t^n \ . \tag{1.17}$$

Die Funktion $f(t; \xi)$ ist die *Erzeugende* der Hermite-Polynome.

1.2.1 Alternative Herleitung der Erzeugenden

In diesem Abschnitt soll alternativ ohne Verwendung funktionentheoretischer Hilfsmittel die erzeugende Funktion für die Hermite-Polynome berechnet werden. Diese Erzeugende ist eine Hilfsfunktion, mittels derer z.B. Integrale über Hermite-Polynome leichter berechnet werden können. Sie wird definiert durch:

$$f(t, \xi) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} H_n(\xi) t^n \ . \tag{1.18}$$

Diese Erzeugende soll nun in geschlossener Form berechnet werden. Dazu wird f einmal differenziert nach ξ. Unter Verwendung von (1.8) erhalten wir

$$\begin{aligned}
\frac{\partial f}{\partial \xi} &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \frac{\partial H_n}{\partial \xi} t^n = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} 2n H_{n-1}(\xi) t^n \\
&= 2t \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{(n-1)!} H_{n-1}(\xi) t^{n-1} \\
&= 2t \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} H_n(\xi) t^n \\
&= 2t f(t, \xi) \ .
\end{aligned} \tag{1.19}$$

Durch Integration erhält man unmittelbar:

$$f(t,\xi) = f(t,0)e^{2t\xi} \ . \tag{1.20}$$

Die bezüglich ξ konstante Größe $f(t,0)$ folgt aus:

$$f(t,0) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} H_n(0) t^n \ . \tag{1.21}$$

Für alle ungeraden n gilt:

$$H_n(0) = 0 \ , \tag{1.22}$$

da diese Polynome ungerade Funktionen sind. Benötigt wird jetzt noch $H_n(0)$ für gerade n. Diese Werte kann man aus der Rodriguezformel erhalten:

$$\begin{aligned} H_{2m}(0) &= (-1)^{2m} e^{0^2} \left. \frac{d^{2m}}{d\xi^{2m}} e^{-\xi^2} \right|_{\xi=0} \\ &= \frac{d^{2m}}{d\xi^{2m}} \sum_{k=0}^{\infty} (-1)^k \left. \frac{1}{k!} \xi^{2k} \right|_{\xi=0} \\ &= (-1)^m \frac{1}{m!} (2m)! \ . \end{aligned} \tag{1.23}$$

Dabei wurde benutzt, daß die Differentiation nur für $k = m$ einen Beitrag liefert. Der Faktor $(2m)!$ in der letzten Zeile stammt von der Differentiation her.

Also hat man schließlich für die Erzeugende:

$$f(t,\xi) = e^{-t^2+2t\xi} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} H_n(\xi) t^n \ . \tag{1.24}$$

1.3 Anwendungen der erzeugenden Funktion

Rekursionsformeln. Aus der erzeugenden Funktion kann eine wichtige *Rekursionsformel* zwischen den H_n bestimmt werden.

- Durch Differenzieren nach t erhält man:

$$\frac{\partial f}{\partial t} = (2\xi - 2t) e^{-t^2+2t\xi} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{n}{n!} H_n(\xi) t^{n-1} = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{(n-1)!} H_n(\xi) t^{n-1} \ . \tag{1.25}$$

  Werden auf der linken Seite der Gleichung die H_n eingesetzt, so erhält man:

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{2\xi}{n!} H_n(\xi) t^n - \sum_{n=0}^{\infty} \frac{2}{n!} H_n(\xi) t^{n+1} = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{(n-1)!} H_n(\xi) t^{n-1} \ . \tag{1.26}$$

  Koeffizientenvergleich liefert:

$$2\xi \frac{H_m}{m!} = 2\frac{H_{m-1}}{(m-1)!} + \frac{H_{m+1}}{m!} \tag{1.27}$$

und daher die Rekursionsrelation

$$\begin{aligned} 2\xi H_m &= 2mH_{m-1} + H_{m+1} \\ &\quad \text{für } m \geq 1 \; . \end{aligned} \tag{1.28}$$

- Differentiation der Erzeugenden nach ξ liefert:

$$\begin{aligned} \frac{\partial f}{\partial \xi} &= 2te^{-t^2+2t\xi} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} H_n'(\xi) t^n \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{2}{n!} H_n(\xi) t^{n+1} \; . \end{aligned} \tag{1.29}$$

Koeffizientenvergleich gibt das früher schon gefundene Ergebnis:

$$H_m'(\xi) = 2mH_{m-1}(\xi) \qquad \text{für} \quad m \geq 1 \; . \tag{1.30}$$

Normierungsintegral. Mit Hilfe der erzeugenden Funktion kann man *Integrale* berechnen, die die Eigenfunktionen des harmonischen Oszillators enthalten, z.B. das Normierungsintegral. Sei:

$$\begin{aligned} u_n(\xi) &= N_n e^{-\xi^{2/2}} H_n(\xi) \\ &= N_n e^{-\frac{1}{2}\alpha^2 x^2} H_n(\alpha x) \end{aligned} \tag{1.31}$$

mit N_n als Normierungsfaktor und

$$\alpha = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \; . \tag{1.32}$$

Normierung bedeutet Wahl von N_n so, daß:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |u_n(x)|^2 dx = \frac{N_n^2}{\alpha} \int_{-\infty}^{+\infty} H_n^2(\xi) e^{-\xi^2} d\xi = 1 \; . \tag{1.33}$$

Das Integral auf der rechten Seite kann erhalten werden als ein Entwicklungskoeffizient in der Entwicklung eines Integrals über das Produkt zweier erzeugenden Funktionen mit einem Gewichtsfaktor:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-t^2+2t\xi} e^{-s^2+2s\xi} e^{-\xi^2} d\xi = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{s^n}{n!} \frac{t^m}{m!} \int_{-\infty}^{+\infty} H_n(\xi) H_m(\xi) e^{-\xi^2} d\xi \; . \tag{1.34}$$

Das Integral auf der linken Seite dieser Gleichung liefert:

$$\begin{aligned} I &= e^{-t^2-s^2} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\xi^2+2\xi(s+t)} d\xi \\ &= e^{2st} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-(\xi-(s+t))^2} d\xi = e^{2st} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-x^2} dx \; ; \quad x \equiv \xi - (s+t) \\ &= \sqrt{\pi}\, e^{2st} = \sqrt{\pi} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(2st)^n}{n!} \; . \end{aligned} \tag{1.35}$$

Der Koeffizientenvergleich für die gleichen Potenzen von s und t in Gleichung (1.34) liefert dann:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} H_n^2(\xi) e^{-\xi^2} d\xi = \sqrt{\pi} 2^n n!$$
$$\int_{-\infty}^{+\infty} H_n(\xi) H_m(\xi) e^{-\xi^2} d\xi = 0 \ , m \neq n \ . \tag{1.36}$$

Daraus folgt für die Normierungsfaktoren:

$$N_n = \left(\frac{\alpha}{\sqrt{\pi} n! 2^n} \right)^{1/2} \qquad \alpha = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \ . \tag{1.37}$$

ähnlich können auch andere Integrale, zum Teil unter Benutzung der Rekursionsformeln, berechnet werden.