

3.3. Harmonischer Oszillator und Hermite-Polynome.

- "Interessante" Orthonormalbasen von Hilberträumen V entstehen oft als Eigenfunktionen von "natürlichen" selbstadjungierten Operatoren auf V .
- In der Quantenmechanik betrachtet man den harmonischen Oszillator.
- Grundzustand: die Eigenfunktion ψ_0 des Operators

$$H := -\frac{1}{2} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} x^2 : \mathcal{S}(\mathbb{R}) \ni \psi \mapsto -\frac{1}{2} \psi''(x) + \frac{1}{2} x^2 \psi(x) \in \mathcal{S}(\mathbb{R})$$

mit dem niedrigsten Eigenwert E_0 , und mit $\|\psi_0\|_2 = 1$.

Werden sehen: $\psi_0(x) = \pi^{-1/4} e^{-x^2/2}$, $E_0 = \frac{1}{2}$.

- Angeregte Zustände: Eigenfunktionen von H mit höheren Eigenwerten (=Energieeigenwerten).

Um diesen Operator H zu verstehen, schreiben wir ihn als

$$H = \underset{\substack{\uparrow \\ \text{Reduktion! } (x) \text{ unten.}}}{A^* A} + \frac{1}{2}, \quad \begin{cases} A^* = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(-\frac{d}{dx} + x \right), \\ A = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{d}{dx} + x \right). \end{cases}$$

Lemma 3.20. Sei $\varphi \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$, $H\varphi = E\varphi$. Dann gilt:

(i) $H(A^*\varphi) = (E+1)A^*\varphi$ (d.h. $A^*\varphi$ ist eine Eigenfunktion mit Eigenwert $E+1$)

(ii) $H(A\varphi) = (E-1)A\varphi$.

(iii) Gilt $\varphi \neq 0$, so ist $E \geq \frac{1}{2}$. Gleichheit gilt genau dann, wenn $A\varphi = 0$.

Beweis. • Wir verwenden folgende Tatsachen über A, A^* :

$$(a) (A\varphi, \psi) = (\varphi, A^*\psi) \quad \forall \varphi, \psi \in \mathcal{S}(\mathbb{R}).$$

(Beweis:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{\sqrt{2}} (\varphi'(x) + \varphi(x)) \psi(x) dx = \underbrace{\frac{1}{\sqrt{2}} \varphi(x) \psi(x)}_{=0, \text{ da } \varphi, \psi \in \mathcal{S}(\mathbb{R})} \Big|_{-\infty}^{\infty} + \frac{1}{\sqrt{2}} \int_{-\infty}^{\infty} \varphi(x) (-\varphi'(x) + \varphi(x)) dx.)$$

$$(b) [A, A^*] = AA^* - A^*A = I \text{ (Identitätsoperator).}$$

(Beweis: für $\varphi \in \mathcal{J}(\mathbb{R}^n)$ ist

$$\begin{aligned} A A^* \varphi &= \frac{1}{2} \left(\frac{d}{dx} + x \right) (-\varphi' + x\varphi) = \frac{1}{2} (-\varphi'' + (x\varphi' + \varphi) - x\varphi' + x^2\varphi) \\ &= \frac{1}{2} (-\varphi'' + (x^2 + 1)\varphi) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} (*) \quad A^* A \varphi &= \frac{1}{2} \left(-\frac{d}{dx} + x \right) (\varphi' + x\varphi) = \frac{1}{2} (-\varphi'' - (x\varphi' + \varphi) + x\varphi' + x^2\varphi) \\ &= \frac{1}{2} (-\varphi'' + (x^2 - 1)\varphi). \end{aligned}$$

• Wir beweisen nun Teil (i):

$$\begin{aligned} H(A^* \varphi) &= (A^* A + \tfrac{1}{2}) A^* \varphi \\ &= A^* \underbrace{(A A^* - A^* A + \tfrac{1}{2})}_{\stackrel{(*)}{=} I} \varphi + A^* A^* A \varphi \\ &= A^* \left(\tfrac{3}{2} \varphi + A^* A \varphi \right) \\ &= A^* (H + 1) \varphi \\ &= (E + 1) A^* \varphi. \end{aligned}$$

• Die Rechnung für (ii) ist ganz analog.

• (iii): o.B.d.A. $\|\varphi\|_{L^2} = 1$. Dann ist

$$\begin{aligned} (H\varphi, \varphi) &= (A^* A \varphi, \varphi) + \tfrac{1}{2} (\varphi, \varphi) \\ &\stackrel{(*)}{=} \underbrace{(A\varphi, A\varphi)}_{\geq 0} + \tfrac{1}{2} \underbrace{(\varphi, \varphi)}_{=1} \geq \tfrac{1}{2}, \end{aligned}$$

mit Gleichheit $\Leftrightarrow A\varphi = 0$.

□

• Man nennt A^* Aufsteige- oder Erzeugungsoperator,
 A Absteige- oder Vernichtungsoperator.

• Wir schliessen also:

1. Grundzustand: Lösung von $0 = A\varphi_0 = \frac{1}{\sqrt{2}} (\varphi_0' + \varphi_0)$, mit Lösung
 $\varphi_0(x) = e^{-x^2/2}$. (Kümmern uns um Normalisierung später.) $H\varphi_0 = \frac{1}{2} \varphi_0$.

2. Angeregte Zustände: setzen $\overbrace{\quad}^{n\text{-mal}}$

$$\varphi_n := (A^*)^n \varphi_0 = A^* \dots A^* \varphi_0$$

$$\Rightarrow H \varphi_n = (n + \frac{1}{2}) \varphi_n. \quad (**)$$

Für später berechnen wir umgekehrt für $n \geq 1$

$$\begin{aligned} A \varphi_n &= A A^* (A^*)^{n-1} \varphi_0 = A A^* \varphi_{n-1} = (A^* A + [A, A^*]) \varphi_{n-1} \\ &= (H - \frac{1}{2} + 1) \varphi_{n-1} = ((n - \frac{1}{2}) - \frac{1}{2} + 1) \varphi_{n-1}, \end{aligned}$$

$$\text{also } A \varphi_n = n \varphi_{n-1}. \quad (***)$$

3. Haben wir alle Eigenfunktionen gefunden?

• Ist $\varphi \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$, $\varphi \neq 0$, mit $H \varphi = E \varphi$, so gilt $E \geq \frac{1}{2}$ und

$$H(A^n \varphi) = (E - n) \varphi, \quad n \in \mathbb{N}.$$

Für $n \in \mathbb{N}$ mit $E - n < \frac{1}{2}$ folgt aus Lemma 3.20(iii): $A^n \varphi = 0. \quad (*)$

Wir werden zeigen, dass φ eine Linearkombination von $\varphi_0, \dots, \varphi_{n-1}$ sein muss. (Und damit dass φ eine Eigenfunktion von H ist, muss gelten $\varphi = c \varphi_k$ für ein $c \neq 0$, $k \in \{0, \dots, n-1\}$.)

• Um dies zu sehen, schreiben wir $(*)$ als

$$A(A^{n-1} \varphi) = 0.$$

Also gilt $A^{n-1} \varphi = c_{n-1} \varphi_0$ für ein $c_{n-1} \in \mathbb{C}$.

Aber es gilt auch $A^{n-1} \varphi_{n-1} = (n-1)! \varphi_0$ (***).

$$\Rightarrow A^{n-1} (\varphi - \frac{c_{n-1}}{(n-1)!} \varphi_{n-1}) = 0.$$

Ist $n-1 \geq 1$, fahren wir fort: $A^{n-2} (\varphi - \frac{c_{n-1}}{(n-1)!} \varphi_{n-1}) = c_{n-2} \varphi_0 \quad (\exists c_{n-2}).$

$$\Rightarrow A^{n-2} (\varphi - \frac{c_{n-1}}{(n-1)!} \varphi_{n-1} - \frac{c_{n-2}}{(n-2)!} \varphi_{n-2}) = 0,$$

usw. $\Rightarrow \varphi = \sum_{j=0}^{n-1} \frac{c_j}{j!} \varphi_j$ für geeignete $c_j \in \mathbb{C}$.

4. Normalisierung: $\cdot (\varphi_0, \varphi_0) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{x^2}{2}} \cdot e^{-\frac{x^2}{2}} dx = \sqrt{\pi}$

$\Rightarrow \psi_0 := \pi^{-\frac{1}{4}} \varphi_0$ hat $\|\psi_0\|_2 = 1$.

• Für $m \geq n$ gilt

$$(\varphi_m, \varphi_n) = (\varphi_m, (A^*)^n \varphi_0)$$

$$= (A^n \varphi_m, \varphi_0)$$

$$= (m(m-1) \cdots (m-n+1) \varphi_{m-n}, \varphi_0)$$

$$= \begin{cases} 0, & m \neq n, \\ m! \pi^{\frac{1}{2}}, & m = n. \end{cases}$$

$\Rightarrow \psi_n := (n!)^{-\frac{1}{2}} \pi^{-\frac{1}{4}} \varphi_n$ hat $\|\psi_n\| = 1$.

Wir formulieren unsere Erkenntnisse leicht um.

Definition 3.21. Das n -te Hermite-Polynom ($n=0,1,2,\dots$) ist

$$H_n(x) := (-1)^n e^{x^2} \frac{d^n}{dx^n} e^{-x^2}.$$

Bemerkung. $H_0(x) = 1$, $H_1(x) = 2x$, $H_2(x) = 4x^2 - 2$;

$H_n(x)$ = Polynom n -ten Grades = $2^n x^n + \dots$.

Satz 3.22. Für $n=0,1,2,\dots$, setze

$$\psi_n(x) = (n!)^{-\frac{1}{2}} \pi^{-\frac{1}{4}} 2^{-\frac{n}{2}} e^{-\frac{x^2}{2}} H_n(x) \in \mathcal{S}(\mathbb{R}).$$

• Dann gilt $H \psi_n = (n + \frac{1}{2}) \psi_n$ ($H = -\frac{1}{2} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} x^2$), $\|\psi_n\|_2 = 1$.

• Außerdem ist jede Schwartz-Eigenfunktion von H ein Vielfaches von ψ_n für ein n .

Beweis. Zu zeigen ist nur: $2^{-\frac{n}{2}} e^{-\frac{x^2}{2}} H_n(x) = \varphi_n(x)$.

Aber $\psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{2}^n} \left(-\frac{d}{dx} + x\right)^n e^{-\frac{x^2}{2}}$

$$= 2^{-\frac{n}{2}} e^{\frac{x^2}{2}} \left[e^{-\frac{x^2}{2}} \left(-\frac{d}{dx} + x\right) e^{\frac{x^2}{2}} \right]^n e^{-x^2}$$

$$\begin{aligned} & \left(= e^{-\frac{x^2}{2}} \left(-\frac{d}{dx} + x\right) \left(e^{\frac{x^2}{2}} \left(e^{-\frac{x^2}{2}} \left(-\frac{d}{dx} + x\right) \left(e^{\frac{x^2}{2}} (\dots (e^{-x^2}) \dots) \right) \right) \right) \right) \\ & \rightarrow = 2^{-\frac{n}{2}} e^{\frac{x^2}{2}} \left(-\frac{d}{dx}\right)^n e^{-x^2} \\ & = 2^{-\frac{n}{2}} e^{-\frac{x^2}{2}} \underbrace{(-1)^n e^{x^2} \frac{d^n}{dx^n} e^{-x^2}}_{= H_n(x)}. \end{aligned}$$

□

Gemäss unserer Heuristik — die orthonormierten Eigenfunktionen eines selbstadjungierten Operators (hier H) sind eine vollständige Orthonormalbasis des Hilbertraums (hier $L^2(\mathbb{R})$) — ist der folgende Satz nicht überraschend:

Satz 3.23. Die Funktionen $\psi_0, \psi_1, \psi_2, \dots \in \mathcal{F}(\mathbb{R}^n)$ bilden ein vollständiges orthonormales System in $L^2(\mathbb{R})$.

Beweis. Sei $f \in L^2(\mathbb{R})$, $(f, \psi_n) = 0 \quad \forall n = 0, 1, 2, \dots$. Zu zeigen: $f = 0$.

• Da $\psi_n(x) = e^{-\frac{x^2}{2}} (c_n x^n + [\text{Polynom vom Grad } n-1])$ mit $c_n \neq 0$, kann jede Funktion

$$e^{-\frac{x^2}{2}} x^n$$

als Linearkombination von ψ_0, \dots, ψ_n geschrieben werden. Also gilt

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x) e^{-\frac{x^2}{2}} x^n dx = 0, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (\#)$$

Wir bemerken, dass $f(x) e^{-\frac{x^2}{2}} \in L^1(\mathbb{R})$, da

$$\int |f(x) e^{-\frac{x^2}{2}}| dx \stackrel{\text{Cauchy-Schwarz}}{\leq} \|f\|_{L^2} \|e^{-\frac{x^2}{2}}\|_{L^2} = \pi^{\frac{1}{4}} \|f\|_{L^2} < \infty. \quad (\#\#)$$

- Für die Fouriertransformation

$$\hat{g}(k) := \int_{-\infty}^{\infty} f(x) e^{-\frac{x^2}{2}} e^{-ixk} dx$$

gelten folgende Aussagen:

- (i) $\hat{g}(k)$ ist definiert für alle $k \in \mathbb{C}$, und als solches holomorph.

Begründung: • für $k \in \mathbb{C}$ ist

$$x \mapsto |e^{-\frac{x^2}{2}} e^{-ixk}| = e^{-\frac{x^2}{2} + x \cdot \text{Im} k} \in L^2(\mathbb{R}),$$

also ist $\hat{g}(k)$ definiert nach derselben Rechnung wie (##).

- Für $k = \xi + i\eta$ ist eine Funktion $h(k) = h(\xi + i\eta)$

$$\text{holomorph} \Leftrightarrow \partial_{\bar{\xi}} h = -i \partial_{\eta} h$$

$$\Leftrightarrow \bar{\partial}_k h := \frac{1}{2} (\partial_{\bar{\xi}} + i \partial_{\eta}) h = 0.$$

$$\text{Insbesondere ist } \bar{\partial}_k (e^{-ixk}) = 0$$

$$\Rightarrow \bar{\partial}_k \hat{g}(k) = \int_{-\infty}^{\infty} \underbrace{\bar{\partial}_k (f(x) e^{-\frac{x^2}{2}} e^{-ixk})}_{=0} dx = 0.$$

Kann begründet werden für
 $f \in \mathcal{F}(\mathbb{R})$, und dann für allgemeinere
 $f \in L^2(\mathbb{R})$ mittels Approximation durch
 Schwartz-Funktionen (Übung)

- (ii) $\frac{d^n}{dk^n} \hat{g}(0) = 0 \quad \forall n$. Das folgt aus

$$\frac{d^n}{dk^n} \mathcal{F}(f(x) e^{-\frac{x^2}{2}})(k) = \mathcal{F}(f(x) e^{-\frac{x^2}{2}} x^n)(k) \cdot (-i)^n,$$

was an $k=0$ gibt

$$\frac{d^n}{dk^n} \hat{g}(0) = \int_{-\infty}^{\infty} f(x) e^{-\frac{x^2}{2}} x^n dx \cdot (-i)^n \stackrel{(\#)}{=} 0$$

$$\cdot \text{ Aus (i) folgt } \hat{g}(k) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{d^n}{dk^n} \hat{g}(0) \frac{k^n}{n!} \stackrel{(i)}{=} 0.$$

Also ist die Fourier-Transformation von $x \mapsto f(x) e^{-\frac{x^2}{2}} \in L^2(\mathbb{R})$
die Funktion $\hat{g}(k) \equiv 0 \xRightarrow{\text{Plancherel}} f(x) e^{-\frac{x^2}{2}} = 0 \Rightarrow f(x) = 0. \quad \square$

Bemerkung. In dem Beweis haben wir verwendet, dass Fouriertransformationen von sehr schnell abfallenden Funktionen (schneller als $e^{-C|x|} \forall C$) holomorph auf $k \in \mathbb{C}$ fortgesetzt werden können. Als weitere Konsequenz dieser Tatsache sieht man:

$f \in \mathcal{S}(\mathbb{R})$ und $\hat{f} \in \mathcal{S}(\mathbb{R})$ können nicht beide kompakten Träger haben.

(Warum? Weil $f \in C_c^\infty(\mathbb{R}) \Rightarrow \hat{f}(k)$ ist holomorph in $k \in \mathbb{C}$.)

Ist $\hat{f}(k) = 0$ für $|k| \geq R_0$, so folgt also durch analytische Fortsetzung $\hat{f}(k) = 0 \quad \forall k \in \mathbb{R} \Rightarrow \hat{f} = 0 \Rightarrow f = 0.$)