

Chapter 2

دالة "هيرمت" كثيرة الحدود

(Hermite Polynomials $H_n(x)$)

المعادلة التفاضلية لدالة "هيرمت" Differential equation

$$\frac{d^2 H_n(x)}{dx^2} - 2x \frac{dH_n(x)}{dx} + 2nH_n(x) = 0 \quad (1)$$

تعريف رودريجي Rodrigues' Definition

$$H_n(x) = (-1)^n e^{x^2} \frac{d^n}{dx^n} (e^{-x^2}); \quad n = 0, 1, 2, 3, \dots \quad (2)$$

تعد الدالة $H_n(x)$ زوجية أو فردية إذا كان العدد n يأخذ قيمة زوجية أو فردية بالترتيب:

$$H_n(-x) = (-1)^n H_n(x) \quad (3)$$

دالة مولدة Generating function

$$e^{-t^2+2xt} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{t^n}{\Gamma(n+1)} H_n(x) \quad |t| < 1 \quad (4)$$

علاقات تكرارية Recurrence relations

$$H'_n = \frac{dH_n}{dx} = 2nH_{n-1}$$

$$\frac{dH_n}{dx} = 2xH_n - H_{n+1} \quad (5)$$

$$H_{n+1} = 2xH_n - 2nH_{n-1}$$

علاقة التعامد Orthogonality relation

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} H_m(x) H_n(x) dx = 2^n n! \sqrt{\pi} \delta_{mn} = \sqrt{\pi} 2^n \Gamma(n+1) \delta_{mn} \quad (6)$$

لاحظ هنا وجود الحد e^{-x^2} ، ويسمى معامل اوزان (Weight factor)، والذي يجعل قيمة التكامل قيمة تقاربية (محددة).

جدول لبعض القيم

n	$H_n(x)$	n	$H_n(x)$
0	1	3	$8x^3 - 12x$
1	$2x$	4	$16x^4 - 48x^2 + 12$
2	$4x^2 - 1$	5	$32x^5 - 160x^3 + 120x$

تمثيل الدوال: يمكن تمثيل الدوال (المتصلة والمتقطعة) بدلالة دالة هيرمت كالتالي:

نفترض أن الدالة $f(x)$ يمكن كتابتها بدلالة دالة ليجندر بالعلاقة:

$$f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n H_n(x)$$

ولإيجاد صيغة للمعاملات c_n نتبع الآتي: بضرب طرفي العلاقة السابقة بالدالة $H_m(x)$ ، وإجراء التكامل، واستخدام علاقة التعامد نجد أن:

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x) H_m(x) e^{-x^2} dx = \sum_{n=0}^{\infty} c_n \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} H_m(x) H_n(x) dx}_{2^n n! \sqrt{\pi} \delta_{mn}} = c_n 2^n n! \sqrt{\pi}$$

لنحصل على المعاملات بالشكل:

$$c_n = \frac{1}{2^n n! \sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} f(x) H_m(x) e^{-x^2} dx$$

أمثلة محلولة

مثال 1: باستخدام الدالة المولدة (4) اثبت معادلة هيرمت.
الحل: بدء بالمعادلة

$$g(x, t) = e^{-t^2 + 2xt} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{t^n}{\Gamma(n+1)} H_n(x)$$

وبالتفاضل بالنسبة إلى t نحصل على

$$\frac{\partial}{\partial t} g(x, t) = (-2t + 2x) e^{-t^2 + 2xt} = \sum_{n=0}^{\infty} H_n(x) n \frac{t^{n-1}}{n!}$$

Expand the terms, and put the generating function in again:

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

Relabel:

$$-2 \sum_{n=1}^{\infty} n H_{n-1}(x) \frac{t^n}{n!} + 2x \sum_{n=0}^{\infty} H_n(x) \frac{t^n}{n!} = \sum_{n=0}^{\infty} H_{n+1}(x) \frac{t^n}{n!}$$

Equating coefficients of t^n :

$$\Rightarrow \boxed{H_{n+1}(x) = 2xH_n(x) - 2nH_{n-1}(x)} \quad (n \geq 1)$$

مثال 2: باستخدام الدالة المولدة (4) اثبت أن $H'_n = \frac{dH_n}{dx} = 2nH_{n-1}$

الحل: بدء بالمعادلة

$$g(x, t) = e^{-t^2+2xt} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{t^n}{\Gamma(n+1)} H_n(x)$$

وبالتفاضل بالنسبة الى x نحصل على

$$\frac{\partial}{\partial x} g(x, t) = 2t e^{-t^2+2tx} = \sum_{n=0}^{\infty} H'_n(x) \frac{t^n}{n!}$$

Stick in g :

$$2 \sum_{n=0}^{\infty} H_n(x) \frac{t^{n+1}}{n!} = \sum_{n=1}^{\infty} H'_n(x) \frac{t^n}{n!}$$

Relabel:

$$2 \sum_{n=1}^{\infty} H_{n-1}(x) \frac{t^n}{(n-1)!} = \sum_{n=1}^{\infty} H'_n(x) \frac{t^n}{n!}$$

Equating coefficients of t^n :

$$\Rightarrow \boxed{H'_n(x) = 2nH_{n-1}(x)} \quad (n \geq 1)$$

مثال 3: باستخدام العلاقات التكرارية اثبت معادلة هيرمت.

الحل: بدء بالمعادلات

$$\left. \begin{aligned} H_{n+1}(x) &= 2xH_n(x) - 2nH_{n-1}(x) \\ H'_n(x) &= 2nH_{n-1}(x) \end{aligned} \right\} \Rightarrow H_{n+1}(x) = 2xH_n(x) - H'_n(x)$$

وبالتفاضل بالنسبة الى x نحصل على

$$H'_{n+1}(x) = 2H_n(x) + 2xH'_n(x) - H''_n(x)$$

$$2(n+1)H_n(x) = 2H_n(x) + 2xH'_n(x) - H''_n(x)$$

$$\Rightarrow \boxed{H''_n(x) - 2xH'_n(x) + 2nH_n(x) = 0}$$

وهي معادلة هيرمت

يمكن تعريف دالة هيرمت المعدلة كالتالي:

$$\varphi_n(x) = e^{-x^2/2} H_n(x)$$

والتي تحقق علاقة التعامد بالصورة المعدلة:

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} \varphi_m(x) \varphi_n(x) dx = 2^n n! \sqrt{\pi} \delta_{mn}$$

ومن هنا نحصل على:

$$H_n(x) = e^{x^2/2} \varphi_n(x) \Rightarrow H'_n(x) = x e^{x^2/2} \varphi_n(x) + e^{x^2/2} \varphi'_n(x)$$

$$\Rightarrow H''_n(x) = e^{x^2/2} \varphi''_n(x) + 2x e^{x^2/2} \varphi'_n(x) + (1+x^2) \varphi_n(x)$$

وتصبح معادلة هيرمت بالصورة: $\frac{d^2 H_n(x)}{dx^2} - 2x \frac{dH_n(x)}{dx} + 2nH_n(x) = 0$

$$\varphi''_n(x) + (1 - x^2 + 2n) \varphi_n(x) = 0$$

نظرة ميكانيكا الكم

للتعامل مع المتذبذب التوافقي الخطي من خلال نظرية ميكانيكا الكم، نجد أن معادلة شرودنجر في بعد واحد تأخذ الصورة:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V)\psi = 0,$$

$$\Rightarrow \boxed{\frac{d^2\psi}{dx^2} + (\beta - \alpha^2 x^2)\psi = 0} \quad (7)$$

حيث $\alpha = m\omega/\hbar$, $\beta = 2mE/\hbar^2$

بالإمكان تبسيط المعادلة (7) وذلك باستخدام التعويض:

$$q = \sqrt{\alpha} x$$

واجب منزلي: باستخدام التعويض $q = \sqrt{\alpha} x$ تأكد من التفاضلات التالية:

$$\frac{d\psi}{dx} = \frac{d\psi}{dq} \frac{dq}{dx} = \sqrt{\alpha} \frac{d\psi}{dq}$$

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = \frac{d}{dq} \left(\frac{d\psi}{dx} \right) \frac{dq}{dx} = \alpha \frac{d^2\psi}{dq^2}$$

وتتحول المعادلة (7) إلى الصورة المبسطة:

$$\frac{d^2\psi}{dq^2} + (\lambda - q^2)\psi = 0 \quad (8)$$

حيث تم تعريف القيمة المميزة (عديمة الأبعاد) λ بالشكل:

$$\lambda = \frac{\beta}{\alpha} = \frac{2E}{\hbar\omega} \quad (9)$$

الحل العام للمعادلة (8) شبيه بالمعادلة $\varphi_n''(x) + (1 - x^2 + 2n)\varphi_n(x) = 0$ ويتحقق فقط لقيم منفصلة للطاقة الكلية تعبر عنها المعادلة:

$$\lambda = \frac{2E}{\hbar\omega} = 2n + 1,$$

$$\Rightarrow E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (10)$$

ومن المعادلة (10) نستنتج الآتي:

أ- طاقة المستويات هي طاقة كمّاء، حيث إنها تعتمد على العدد الصحيح n . تسمى عدد الكم الاهتزازي (Vibrational quantum number).

ب- الفروق، ΔE ، بين طاقات المستويات المتتالية تكون متساوية، وتحسب كالتالي:

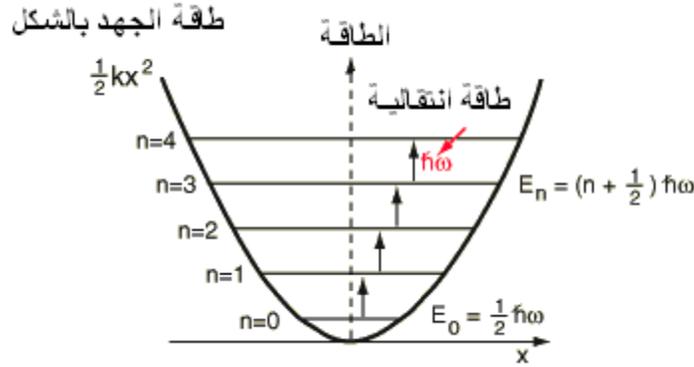
$$\Delta E = E_{n\pm 1} - E_n = \pm \hbar\omega$$

ج- للعدد $n=0$ فإن الطاقة E_0 (طاقة المستوى الأرضي أو طاقة نقطة الصفر) لا تساوي صفراً، ولكن

$E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega$ ، وهذا لا يتطابق مع نظرية بور. وعدم التطابق له دلالاته الفيزيائية المهمة وهي: أن أقل طاقة

اهتزازية (طاقة المستوى الأرضي) لأي نظام فيزيائي (مثال على ذلك الجزيئات متعددة الذرات أو الذرات بالحوامد) يوصف بجهد المتذبذب التوافقي لا يمكن أن تنعدم حتى عند درجة حرارة الصفر المطلق. لذلك فإن طاقة نقطة الصفر هذه كافية لمنع تجمد سائل الهليوم-4 تحت الضغط الجوي، مهما قللنا من درجة حرارته. وهي مرتبطة بعلاقة هيزنبرج الاتعينية، فإذا كانت طاقة الجسيم معدومة، فإن الجسيم يسكن ومن ثم فإن إحدائيات الجسيم وكميته الحركية الخطية يمكن تعيينهما في آن واحد، وهذا يتعارض مع علاقة عدم التعيين. عملياً يمكن التأكد من أن الطاقة الاهتزازية الصفرية غير منعدمة بواسطة دراسة تشتت الضوء بواسطة البلورات عند تغيير درجة الحرارة.

والشكل التالي يعبر عن مستويات الطاقة لجهد يعبر عنه بالمعادلة (4).

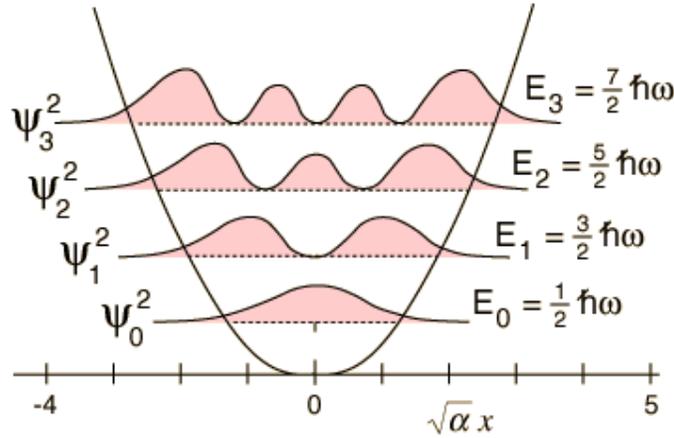


ولكل قيمة n يوجد لها دالة مميزة تعرف بالصورة:

$$\psi_n(q) = N_n e^{-q^2/2} H_n(q), \quad N_n = \sqrt{\frac{1}{2^n n! \sqrt{\pi}}} \quad (11)$$

حيث $H_n(q)$ تسمى دالة هيرمت متعددة الحدود. الأربع دوال المميزة الأوائل موضحة بالجدول والشكل التاليين.

n	$\lambda = 2n + 1$	E_n	$\psi_n(q)$
0	1	$\frac{1}{2} \hbar \omega$	$\sqrt{\frac{1}{\sqrt{\pi}}} e^{-q^2/2}$
1	3	$\frac{3}{2} \hbar \omega$	$\sqrt{\frac{2}{\sqrt{\pi}}} q e^{-q^2/2}$
2	5	$\frac{5}{2} \hbar \omega$	$\sqrt{\frac{1}{2\sqrt{\pi}}} (2q^2 - 1) e^{-q^2/2}$
3	7	$\frac{7}{2} \hbar \omega$	$\sqrt{\frac{1}{3\sqrt{\pi}}} (2q^2 - 3) q e^{-q^2/2}$



المؤثر الدرّجي:
باستخدام الدالة المميزة:

$$\varphi_n(x) = \sqrt{\frac{1}{2^n n! \sqrt{\pi}}} e^{-x^2/2} H_n(x)$$

بحيث

$$\int_{-\infty}^{\infty} \varphi_m(x) \varphi_n(x) dx = \delta_{mn}$$

نجد أن تأثير المؤثر $\frac{1}{\sqrt{2}} \left(x + \frac{d}{dx} \right)$ على الدالة السابقة يعطي:

$$\begin{aligned} \frac{1}{\sqrt{2}} \left(x + \frac{d}{dx} \right) \varphi_n(x) &= \sqrt{\frac{1}{2^{n+1} \sqrt{\pi} n!}} \left(x + \frac{d}{dx} \right) e^{-x^2/2} H_n(x) \\ &= \sqrt{\frac{1}{2^{n+1} \sqrt{\pi} n!}} \left(x e^{-x^2/2} H_n(x) - x e^{-x^2/2} H_n(x) + e^{-x^2/2} H_n'(x) \right) \\ &= \sqrt{\frac{1}{2^{n+1} \sqrt{\pi} n!}} \left(e^{-x^2/2} 2n H_{n-1}(x) \right) = \sqrt{\frac{n}{2^{n-1} \sqrt{\pi} (n-1)!}} \left(e^{-x^2/2} H_{n-1}(x) \right) \\ &= \sqrt{n} \varphi_{n-1}(x) \end{aligned}$$

هذا المؤثر يسمى بالمؤثر الدرّجي (السلمي) التنازلي (أو مؤثر الفناء) حيث أنه يهبط بالدالة المميزة $\varphi_n(x)$ الى الدالة المميزة الأسفل درجة $\varphi_{n-1}(x)$.

واجب منزلي: ادرس تأثير المؤثر $\frac{1}{\sqrt{2}} \left(x - \frac{d}{dx} \right)$ على الدالة المميزة $\varphi_n(x)$. هذا المؤثر يسمى بالمؤثر الدرّجي (السلمي) الصاعد (أو مؤثر التخليق) حيث أنه يصعد بالدالة المميزة $\varphi_n(x)$ الى الدالة المميزة الأعلى درجة $\varphi_{n+1}(x)$.

نأتي لسؤال مهم، ألا وهو: لماذا يأخذ المتذبذب التوافقي الكمي قيم صحيحة n ؟ للإجابة على هذا السؤال نعلم أن طاقة المتذبذب التوافقي تأخذ الشكل

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

وأيضاً باستخدام المؤثرات الدرجية وجدنا أننا نستطيع أن نحدد أو نهبط بالدالة المميزة $\varphi_n(x)$ بقيم صحيحة، ولكن لأن لا نجد سبب لماذا قيم صحيحة! السبب هو كالتالي:

حقيقة أن معادلة هيرمت $\frac{d^2 H_n(x)}{dx^2} - 2x \frac{dH_n(x)}{dx} + 2nH_n(x) = 0$ لها الحلول لقيم صحيحة n ، ولكن إذا استخدمنا طريقة متسلسلة القوى بالشكل:

$$H_n(x) = \sum_{k=0}^{\infty} c_k x^k = c_0 + c_1 x + c_2 x^2 + c_3 x^3 + \dots$$

لحل هذه المعادلة نجد الحل التالي:

$$H_n(x) = c_0 \left(1 + \frac{2(-n)}{2!} x^2 + \frac{2^2(-n)(2-n)}{4!} x^4 + \dots \right) + c_1 \left(x + \frac{2(1-n)}{3!} x^3 + \frac{2^2(1-n)(3-n)}{5!} x^5 + \dots \right)$$

حيث أيضاً نتحقق لقيم غير صحيحة n . (وهذه تسمى دالة هيرميت).
 لقيم صحيحة n ، نجد أن دالة هيرميت تنقطع وتتوقف لتعطي هيرميت كثيرة الحدود (فردية أو زوجية) تبعاً لقيم n (فردية أو زوجية). لقيم غير صحيحة n ، نجد أن دالة هيرميت لا تتجزأ ولا تتوقف وحدودها تكبر كما الدالة $\phi_n(x) = x^n e^{-x^2/2}$. الدالة المقترحة لا تحقق شروط ميكانيكا الكم.

المتذبذب التوافقي الخطي (حل متعددة الحدود)

تم تعريف الهاملتونيان للمتذبذب التوافقي الخطي بالمعادلة:

$$\frac{d^2 \psi}{dq^2} + (\lambda - q^2) \psi = 0 \quad (1)$$

حيث تم تعريف القيمة المميزة (العدمية الأبعاد) λ بالشكل:

$$\lambda = \frac{\beta}{\alpha} = \frac{2E}{\hbar \omega} \quad (2)$$

وقبل أن نستعرض الحل العام للمعادلة (1) دعونا نتوقف قليلاً لنبحث عن طبيعة الحل التقاربي للدالة ψ ، أي عندما $q \rightarrow \pm \infty$. بوضع $q \rightarrow \pm \infty$ بالمعادلة (1) فإننا يمكننا إهمال المقدار λ وذلك بالمقارنة مع q^2 . وعليه نحصل على المعادلة:

$$\frac{d^2 \psi_{\infty}}{dq^2} - q^2 \psi_{\infty} = 0 \quad (3)$$

التي يمكن وضع حلها بالصورة:

$$\psi_{\infty} = e^{aq^2}$$

ولإيجاد القيمة a نفاضل الدالة مرتين فنجد:

$$\frac{d^2 \psi_{\infty}}{dq^2} = (4a^2 q^2 + 2a) e^{aq^2} \approx 4a^2 q^2 e^{aq^2}$$

ومنها ومن المعادلة (3) نجد أن:

$$a^2 = \frac{1}{4} \quad \Rightarrow \quad a = \pm \frac{1}{2}$$

ومن ثم نستخلص أن:

$$\psi_{\infty} = ce^{-q^2/2} + de^{+q^2/2}$$

حيث c و d ثابتان اختياريان. الحل ($e^{+q^2/2}$) هو حل مرفوض لأن الشرط $\lim_{q \rightarrow \infty} e^{+q^2/2} = \infty$ لا يحقق شروط ميكانيكا الكم من حيث محدودية الدالة في اللانهاية. لذلك يمكننا وضع المعامل d مساوياً للصفر. وحيث إننا لم نتكلم عن معيارية الدالة فيمكننا وضع المعامل c مساوياً للواحد. من ثم فإن الحل التقاربي للدالة يصبح:

$$\psi_{\infty} = e^{-q^2/2} \quad (4)$$

دعونا نرجع مرةً أخرى للحل العام للمعادلة (1)، الذي سوف نفترضه بالشكل التالي:

$$\psi = \psi_{\infty} H(q) = e^{-q^2/2} H(q) \quad (5)$$

حيث $H(q)$ هي متسلسلة القوى للمتغير q (التي سنعرفها لاحقاً بدالة هرمت متعددة الحدود (Hermit polynomial)). وسوف نوقفها عند حد معين لا نتعداه حتى تحقق شروط ميكانيكا الكم بالنسبة لمحدودية الدالة في اللانهاية.

واجب منزلي: باستخدام $\psi = e^{-q^2/2} H(q)$ أثبت أن

$$\frac{d^2\psi}{dq^2} = \left[\frac{d^2H(q)}{dq^2} - 2q \frac{dH(q)}{dq} + (q^2 - 1)H(q) \right] e^{-q^2/2}$$

باستخدام المعادلة (5) تصبح المعادلة (1) بالشكل:

$$\frac{d^2H(q)}{dq^2} - 2q \frac{dH(q)}{dq} + (\lambda - 1)H(q) = 0 \quad (6)$$

المعادلة التفاضلية الخطية من الدرجة الثانية (6) يمكن حلها حلاً كاملاً، حيث إنها مشابهة لمعادلة هرمت، التي تأخذ الشكل:

$$\frac{d^2H_n(q)}{dq^2} - 2q \frac{dH_n(q)}{dq} + 2n H_n(q) = 0, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (7)$$

وذلك بوضع $H(q) = H_n(q)$ و $\lambda - 1 = 2n$. ومنها نجد:

$$\lambda = \frac{2E}{\hbar\omega} = 2n + 1, \quad (8)$$

$$E = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega = (n + \frac{1}{2})h\nu, \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

واجب منزلي: باستخدام المتسلسلات حل المعادلة التفاضلية (6). انظر الحل بالملحق (5.B).

وصلنا الآن إلى هدفنا الأساسي، ونستطيع هنا أن نميز دوال وطاقة المستويات بالرمز n ، الذي يدل على درجة دالة هرمت كثيرة الحدود. أخيراً:

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

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

ملحق (5.B)

حل معادلة هيرمت متعددة الحدود

معادلة هيرمت التفاضلية تُعرف بالشكل:

$$\frac{d^2H(q)}{dq^2} - 2q \frac{dH(q)}{dq} + (\lambda - 1)H(q) = 0 \quad (1)$$

وتُحل باستخدام متسلسلة القوى كالتالي:

1- نفترض الحل العام بصورة متسلسلة بالشكل:

$$H(q) = \sum_{k=0}^{\infty} e_k q^k = e_0 + e_1 q + e_2 q^2 + e_3 q^3 + \dots$$

أ- بإجراء التفاضلات:

$$\frac{dH(q)}{dq} = \sum_{k=0}^{\infty} k e_k q^{k-1} = e_1 + 2e_2 q + 3e_3 q^2 + \dots ;$$

$$\frac{d^2H(q)}{dq^2} = \sum_{k=0}^{\infty} k(k-1) e_k q^{k-2} = 2e_2 + 2 \cdot 3e_3 q + 3 \cdot 4e_4 q^2 + \dots$$

ب- بالتعويض من القيم العليا بالمعادلة (1) ومساواة معاملات كل حد من q^m له نفس الدرجة بالصفير،

نحصل على العلاقات التالية:

$$2e_2 + (\lambda - 1)e_0 = 0$$

$$2 \cdot 3e_3 + (\lambda - 1 - 2)e_1 = 0$$

$$3 \cdot 4e_4 + (\lambda - 1 - 2 \cdot 2)e_2 = 0$$

.....

وعامةً نصل إلى الحد k نجد العلاقة:

$$(k+1)(k+2)e_{k+2} + (\lambda - 1 - 2k)e_k = 0$$

ومنها نحصل على:

$$e_{k+2} = \frac{\lambda - 1 - 2k}{(k+1)(k+2)} e_k \quad (2)$$

العلاقة التكرارية (Recursion relation) (2)، وتوضح كيف نحصل على قيم المعاملات بمعلومية المعاملات الابتدائية e_0 و e_1 . ويصبح المعاملان e_0 و e_1 ثابتين اختياريين مطلوبين للحل العام للمعادلة (1). يمكننا الآن وضع الحل العام للمعادلة (1) كمجموع متسلسلتين، واحدة تحتوي على الحدود الفردية وأخرى تحتوي على الحدود الزوجية:

$$H(q) = e_0 \left(1 + \frac{e_2}{e_0} q^2 + \frac{e_4}{e_2} \frac{e_2}{e_0} q^4 + \frac{e_6}{e_4} \frac{e_4}{e_2} \frac{e_2}{e_0} q^6 + \dots \right) + e_1 \left(q + \frac{e_3}{e_1} q^3 + \frac{e_5}{e_3} \frac{e_3}{e_1} q^5 + \frac{e_7}{e_5} \frac{e_5}{e_3} \frac{e_3}{e_1} q^7 + \dots \right) \quad (3)$$

واجب منزلي:

أ- اختبر سلوك الدالة $H(q)$ مع زيادة الدرجة k ، بمعنى أن $k \gg 1$ ، وأثبت أن النسبة

$$\frac{e_{k+2}}{e_k} \rightarrow \frac{2}{k}$$

ب- قارن سلوك الدالة $H(q)$ مع سلوك الدالة $e^{q^2} = 1 + q^2 + \frac{q^4}{2} + \dots + \frac{q^{2k}}{k!} + \dots$ لتثبت أن الدالة $H(q)$ يمكن تمثيلها بالشكل $H(q) \propto e^{q^2}$.

من الواجب المنزلي نجد أن

$$\psi \propto e^{-q^2/2} e^{q^2} \propto e^{q^2/2}$$

وهي دالة تزايدية وغير محددة عندما $q \rightarrow \pm\infty$. هذا يضطرنا إلى وقف المتسلسلات عند حد معين لا نتعداه حتى تحقق الدالة ψ شروط ميكانيكا الكم بالنسبة لمحدوديتها في ما لا نهاية.

العلاقة التكرارية (2) تدلنا على أنه عندما نضع $k = n$ ، بحيث $\lambda = 2n + 1$ ، فإن واحدة من المتسلسلات (3) سوف تتوقف مع e_n ، حيث إن جميع الحدود بدءاً من e_{n+2} سوف تنعدم (أي تتساوى بالصفري). بإمكاننا حذف المتسلسلة الأخرى بوضع $e_0 = 0$ في حالة كون n فردية، أو وضع $e_1 = 0$ في حالة كون n زوجية. ونتيجةً لتوقف المتسلسلات نحصل على قيم الطاقة المميزة بالمعادلة:

$$E = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega = (n + \frac{1}{2})h\nu, \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

Series Solutions: Hermite's Equation

Hermite's Equation of order k has the form

$$y'' - 2ty' + 2ky = 0$$

where k is usually a non-negative integer.

We know from the [previous section](#) that this equation will have series solutions which both converge and solve the Differential equation everywhere.

Hermite's Equation is our first example of a differential equation, which has a polynomial solution. As usual, the generic form of a power series is

$$y(t) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n t^n$$

We have to determine the right choice for the coefficients (a_n).

As in other techniques for solving differential equations, once we have a "guess" for the solutions, we plug it into the differential equation. Recall that

$$y'(t) = \sum_{n=1}^{\infty} n a_n t^{n-1},$$

and

$$y''(t) = \sum_{n=2}^{\infty} n(n-1) a_n t^{n-2}.$$

Plugging this information into the Differential equation we obtain:

$$\sum_{n=2}^{\infty} n(n-1) a_n t^{n-2} - 2t \sum_{n=1}^{\infty} n a_n t^{n-1} + 2k \sum_{n=0}^{\infty} a_n t^n = 0,$$

or after rewriting slightly:

$$\sum_{n=2}^{\infty} n(n-1)a_n t^{n-2} - \sum_{n=1}^{\infty} 2na_n t^n + \sum_{n=0}^{\infty} 2ka_n t^n = 0.$$

Next we shift the first summation up by two units:

$$\sum_{n=0}^{\infty} (n+2)(n+1)a_{n+2} t^n - \sum_{n=1}^{\infty} 2na_n t^n + \sum_{n=0}^{\infty} 2ka_n t^n = 0.$$

Before we can combine the terms into one sum, we have to overcome another slight obstacle: the second summation starts at $n=1$, while the other two start at $n=0$.

$$2 \cdot 0 \cdot a_0 \cdot t^0 = 0$$

Evaluate the 0th term for the second sum:

. Consequently, we do not change the value of

the second summation, if we start at $n=0$ instead of $n=1$:

$$\sum_{n=1}^{\infty} 2na_n t^n = \sum_{n=0}^{\infty} 2na_n t^n.$$

Thus we can combine all three sums as follows:

$$\sum_{n=0}^{\infty} \left((n+2)(n+1)a_{n+2} - 2na_n + 2ka_n \right) t^n = 0.$$

Therefore our recurrence relations become:

$$(n+2)(n+1)a_{n+2} - 2na_n + 2ka_n = 0 \text{ for all } n = 0, 1, 2, 3, \dots$$

After simplification, this becomes

$$a_{n+2} = \frac{2(n-k)}{(n+2)(n+1)} a_n \quad \text{for all } n = 0, 1, 2, 3, \dots$$

Let us look at the special case, where $k=5$, and the initial conditions are given as:

$$y(0) = a_0 = 0, \quad y'(0) = a_1 = 1$$

. In this case, all even coefficients will be equal to zero, since $a_0=0$ and each coefficient is a multiple of its second predecessor.

$$a_0 = a_2 = a_4 = a_6 = \dots = 0.$$

What about the odd coefficients? $a_1=1$, consequently

$$a_3 = \frac{2(1-5)}{2 \cdot 3} a_1 = -\frac{4}{3},$$

and

$$a_5 = \frac{2(3-5)}{4 \cdot 5} a_3 = \left(-\frac{1}{5}\right) \left(-\frac{4}{3}\right) = \frac{4}{15}.$$

What about a_7 :

$$a_7 = \frac{2(5-5)}{6 \cdot 7} a_5 = 0.$$

Since $a_7=0$, all odd coefficients from now on will be equal to zero, since each coefficient is a multiple of its second predecessor.

$$a_7 = a_9 = a_{11} = a_{13} = \dots = 0.$$

Consequently, the solution has only 3 non-zero coefficients, and hence is a polynomial. This polynomial

$$H_5(t) = t - \frac{4}{3}t^3 + \frac{4}{15}t^5$$

(or a multiple of this polynomial) is called the **Hermit Polynomial of order 5**.

It turns out that the Hermite Equation of positive integer order k always has a polynomial solution of order k .

We can even be more precise: If k is odd, the initial value problem $a_0 = 0$, $a_1 = 1$ will have a polynomial solution, while for k even, the initial value problem $a_0 = 1$, $a_1 = 0$ will have a polynomial solution.

Exercise 1:

Find the Hermit Polynomials of order 1 and 3.

Answer.

Recall that the recurrence relations are given by

$$a_{n+2} = \frac{2(n-k)}{(n+2)(n+1)}a_n \quad \text{for all } n = 0, 1, 2, 3, \dots$$

We have to evaluate these coefficients for $k=1$ and $k=3$, with initial conditions $a_0=0$, $a_1=1$.

When $k=1$,

$$a_2 = \frac{2(1-1)}{2 \cdot 3}a_1 = 0.$$

Consequently all odd coefficients other than a_1 will be zero. Since $a_0=0$, all even coefficients will be zero, too.

Thus

$$H_1(t) = t.$$

When $k=3$,

$$a_2 = \frac{2(1-3)}{2 \cdot 3}a_1 = -\frac{2}{3},$$

and

$$a_4 = \frac{2(3-3)}{4 \cdot 5}a_2 = 0.$$

Consequently all odd coefficients other than a_1 and a_3 will be zero. Since $a_0=0$, all even coefficients will be zero, too. Thus

$$H_3(t) = t - \frac{2}{3}t^3.$$

Exercise 2:

Find the Hermit Polynomials of order 2, 4 and 6.

Answer.

Recall that the recurrence relations are given by

$$a_{n+2} = \frac{2(n-k)}{(n+2)(n+1)}a_n \quad \text{for all } n = 0, 1, 2, 3, \dots$$

We have to evaluate these coefficients for $k=2$, $k=4$ and $k=6$, with initial conditions $a_0=1$, $a_1=0$.

When $k=2$,

$$a_2 = \frac{2(0-2)}{1 \cdot 2}a_0 = -2,$$

while

$$a_4 = \frac{2(2-2)}{3 \cdot 4}a_2 = 0.$$

Consequently all even coefficients other than a_2 will be zero. Since $a_1=0$, all odd coefficients will be zero, too.

Thus

When $k=4$,

$$a_2 = \frac{2(0-4)}{1 \cdot 2} a_0 = -4,$$

$$a_4 = \frac{2(2-4)}{3 \cdot 4} a_2 = \left(-\frac{4}{12}\right)(-4) = \frac{4}{3}$$

$$a_6 = \frac{2(4-4)}{5 \cdot 6} a_4 = 0.$$

Consequently all even coefficients other than a_2 and a_4 will be zero. Since $a_1=0$, all odd coefficients will be zero, too. Thus

$$H_4(t) = 1 - 4t^2 + \frac{4}{3}t^4.$$

You can check that

$$H_6(t) = 1 - 6t^2 + 4t^4 - \frac{8}{15}t^6.$$