厄米多项式笔记

路毅 曲阜师范大学

1 母函数、罗德里格斯公式

初等函数 $G(x,z)=e^{2xz-z^2}$ 在给定 x 时，在整个 z 平面是解析函数，以原点为参考点做泰勒展开：

$$G(x,z)=e^{2xz-z^2}=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{H_n(x)}{n!}z^n, \tag{1}$$

其中，$H_n(x)$ 叫做厄米多项式。很快可以求出几个特殊情况，$n=0,1$ 时，

$$H_0(x)=G(x,z)|_{z=0}=1,$$
$$H_1(x)=\frac{\partial G(x,z)}{\partial z}|_{z=0}=2x.$$

通过母函数，还可以写出厄米多项式的罗德里格斯公式，

$$H_n(x)=\{\frac{\partial^n G(x,z)}{\partial z^n}\}_{z=0}=\{e^{x^2}\frac{\partial^n e^{-(z-x)^2}}{\partial(z-x)^n}\}_{z=0}=(-1)^n e^{x^2}\frac{d^n e^{-x^2}}{dx^n}. \tag{2}$$

从这个形式，也可以看出，$H_n(x)$是一个n阶多项式。

2 级数形式

将母函数做级数展开，可以直接得到厄米多项式的级数形式，

$$e^{-z^2+2xz}=\sum_{p=0}^{\infty}\frac{(-z^2)^p}{p!}\sum_{q=0}^{\infty}\frac{(2xz)^q}{q!}=\sum_{n=0}^{\infty}z^n\sum_{p=0}^{[n/2]}\frac{(-1)^p}{p!}\frac{(2x)^{n-2p}}{(n-2p)!}. \tag{3}$$

与(1)式相对照，可以得到

$$H_n(x)=\sum_{p=0}^{[n/2]}\frac{(-1)^p n!}{p!(n-2p)!}(2x)^{n-2p}. \tag{4}$$

所以，n为奇数时，$H_n(x)$只有奇数阶级数，$H_n(x)$是奇函数；n为偶数时，$H_n(x)$只有偶数阶级数，$H_n(x)$是偶函数。

3 递推公式

因为母函数 $G(x,z)=e^{x^2}e^{-(z-x)^2}=e^{2xz-z^2}$，可以通过计算偏导数，得到递推公式。

① $\frac{\partial G(x,z)}{\partial x} = 2zG$，将$G(x,z)$ 的级数展开式代入，有

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{H_n'(x)}{n!} z^n = 2z \sum_{n=0}^{\infty} \frac{H_n(x)}{n!} z^n,$$

两边任意n阶系数必须相等，所以有

$$\frac{H_n'(x)}{n!} = \frac{2H_{n-1}(x)}{(n-1)!},$$

即

$$H_n'(x) = 2nH_{n-1}(x), n = 1, 2, \cdots \tag{5}$$

② $\frac{\partial G(x,z)}{\partial x} = -(2z-2x)G$，将$G(x,z)$ 的级数展开式代入，有

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

即

$$\frac{H_{n+1}(x)}{n!} = -2\frac{H_{n-1}(x)}{(n-1)!} + \frac{2xH_n(x)}{n!},$$

即

$$H_{n+1}(x) - 2xH_n(x) + 2nH_{n-1}(x) = 0. \tag{6}$$

4 厄米微分方程

厄米多项式满足一个微分方程，可以由递推式(5,6)得出。 对公式(5)两边求导，得到

$$H_n''(x) = 2nH_{n-1}'(x) = 2n \cdot 2(n-1)H_{n-2}(x), \tag{7}$$

上式第二个等号又用了一次公式(5)。 对公式(6)做代换$n \to n-1$，得到

$$H_n(x) - 2xH_{n-1}(x) + 2(n-1)H_{n-2}(x) = 0,$$

所以有 $2(n-1)H_{n-2}(x) = 2xH_{n-1}(x) - H_n(x)$，代入(7)得到

$$H_n''(x) = 4nxH_{n-1}(x) - 2nH_n(x) = 2xH_n'(x) - 2nH_n(x),$$

第二个等号又使用了一次(5)。 这样，我们得到了厄米微分方程

$$H_n''(x) - 2xH_n'(x) + 2nH_n(x) = 0. \tag{8}$$

5 正交性、模方

根据斯图姆-刘维尔理论，可以将厄米微分方程乘上一个因子，使它变成一个自伴方程，这个因子如下构造，

$$\frac{1}{p_0(x)} exp[\int^x \frac{p_1(t)}{p_0(t)} dt] = exp[\int^x (-2t)dt] = e^{-x^2},$$

乘到厄米方程上，得到

$$e^{-x^2}H_n''(x) - 2xe^{-x^2}H_n'(x) + 2ne^{-x^2}H_n(x) = 0.$$

将它看作自伴算子 $\hat{L} = e^{-x^2}\frac{d^2}{dx^2} - 2xe^{-x^2}\frac{d}{dx}$ 的本征值方程

$$\hat{L}H_n(x) + 2ne^{-x^2}H_n(x) = 0,$$

本征值为$2n$，权重函数为e^{-x^2}。 对任意非负整数m, n，若$m \neq n$，有

$$e^{-x^2}(H_m(x)H_n'(x) - H_n(x)H_m'(x))|_{-\infty}^{\infty} = 0,$$

所以有正交性

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2}H_m(x)H_n(x)dx = 0. \tag{9}$$

而模方可以用罗德里格斯公式(2)得到，

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2}H_n(x)H_n(x)dx = (-1)^n\int_{-\infty}^{\infty} \frac{d^n}{dx^n}e^{-x^2}H_n(x)dx = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2}\frac{d^n}{dx^n}H_n(x)dx = 2^n n!\sqrt{2}. \tag{10}$$

上式第一个等号使用了罗德里格斯公式(2)；第二个等号使用了n次分部积分，以及$e^{-x^2}|_{\infty} = e^{-x^2}|_{-\infty} = 0$；第三个等号使用了递推式(5)，以及$H_0(x) = 1$，还有$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2}dx = \sqrt{\pi}$。

6 厄米多项式的完备性(unchecked)

在一定条件下，厄米多项式$H_n(x)$在$(-\infty, \infty$上构成完备基矢，即满足相应条件的任意函数$f(x)$可以按厄米多项式展开

$$f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} c_nH_n(x).$$

7 厄米函数

上面，我们把$H_n(x)$叫做厄米多项式，并且推导了它的正交性和模方。利用厄米多项式的正交性和模方，也可以定义``厄米函数"，

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

从$H_n(x)$的正交性、模方，可以容易得到$\psi_n(x)$的正交归一性：

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_n(x)\psi_m(x)dx = \delta_{nm}.$$

利用$H_n(x)$的微分方程，容易证明$\psi_n(x)$满足微分方程

$$\psi_n''(x) + (2n + 1 - x^2)\psi_n(x) = 0. \tag{11}$$

8 量子力学中的应用：一维谐振子

一维谐振子薛定谔方程为

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\phi''(x) + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2\phi(x) = E\phi(x).$$

即

$$\phi''(x) + (\frac{2mE}{\hbar^2} - \frac{m^2\omega^2}{\hbar^2}x^2)\phi(x) = 0.$$

记$\xi = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x, \psi(\xi) = \phi(x) = \phi(\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}\xi)$，则有

$$\frac{d^2}{d\xi^2}\psi(\xi) + (\frac{2E}{\hbar\omega} - \xi^2)\psi(\xi) = 0.$$

这个形式与(11)是完全一致的，所以，一维谐振子的本征值与本征函数为

$$E_n = (n+\frac{1}{2})\hbar\omega,\quad \psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{2^n n!\sqrt{\pi}}}e^{-x^2/2}H_n(x)..$$

参考书：

[1] 四川大学数学学院高等数学、微分方程教研室 编 《高等数学》第四册第三版，高等教育出版社。

[2] George B. Arfken, Hans J. Weber, "Mathematical Methods for Physicists", Sixth Edition, Elsevier Academic Press.