

Équation de Hermite

Mécanique Quantique

Hossein Rahimzadeh

8/19/2008

Équation de Hermite

On veut résoudre l'équation de Hermite sous la forme particulière suivante :

$$\frac{d^2}{dx^2} H_n(x) - 2x \frac{d}{dx} H_n(x) + 2n H_n(x) = 0$$

Où n est une constante.

La solution peut être exprimée comme une série de Taylor autour de $x = 0$

On cherche une solution de la forme $H_n(x) = \sum_{m=0}^{\infty} a_m x^m$ dont les dérivées sont :

$$\begin{cases} \frac{d}{dx} H_n(x) = \sum_{m=0}^{\infty} m a_m x^{m-1} \\ \frac{d^2}{dx^2} H_n(x) = \sum_{m=0}^{\infty} m(m-1) a_m x^{m-2} \end{cases}$$

En substituant dans l'équation initiale, on obtient :

$$\sum_{m=0}^{\infty} m(m-1) a_m x^{m-2} - 2x \sum_{m=0}^{\infty} m a_m x^{m-1} + 2n \sum_{m=0}^{\infty} a_m x^m = 0$$

$$\Rightarrow \sum_{m=0}^{\infty} m(m-1) a_m x^{m-2} - 2m \sum_{m=0}^{\infty} a_m x^m + 2n \sum_{m=0}^{\infty} a_m x^m = 0$$

$$\Rightarrow \sum_{m=0}^{\infty} m(m-1) a_m x^{m-2} - \sum_{m=0}^{\infty} (2m-2n) a_m x^m = 0$$

On pose $m = p+2$ dans le premier terme et $m = p$ dans le deuxième terme :

$$(p+2)(p+1) a_{p+2} x^p - (2p-2n) a_p x^p = 0$$

$$\left[(p+2)(p+1) a_{p+2} - (2p-2n) a_p \right] x^p = 0$$

Le coefficient de x^p doit être égale à zéro.

$$a_{p+2} = \frac{2p-2n}{(p+1)(p+2)} a_p$$

C'est la relation de recouvrance qui détermine les a_p , à condition de connaître a_0 et a_1 .

Conventions :

-Pour les n paires

- 1- On cherche seulement les solutions paires en commençant par $a_0 = a_0$ et $a_1 = 0$:

$$H_n(x) = a_0 + a_2x^2 + a_4x^4 + \dots + a_nx^n, \quad n \text{ paire}$$

- 2- On choisit a_0 de telle manière que le coefficient de l'ordre le plus élevé de x soit égal à 2^n .

-Pour les n impaires

- 1- On cherche seulement les solutions impaires en commençant par $a_0 = 0$ et $a_1 = a_1$:

$$H_n(x) = a_1x + a_3x^3 + a_5x^5 + \dots + a_nx^n, \quad n \text{ impaire}$$

- 2- On choisit a_1 de telle manière que le coefficient de l'ordre le plus élevé de x soit égal à 2^n .

Exemple 1

Pour $n = 0$ l'équation de Hermite s'écrit comme,

$$\frac{d^2}{dx^2} H_0(x) - 2x \frac{d}{dx} H_0(x) = 0$$

La solution de cette équation est :

$$H_0(x) = a_0$$

Par convention,

$$a_1 = 2^0 = 1$$

Donc,

$$\boxed{H_0(x) = 1}$$

Exemple 2

Pour $n = 1$ l'équation de Hermite s'écrit comme,

$$\frac{d^2}{dx^2} H_1(x) - 2x \frac{d}{dx} H_1(x) + 2H_1(x) = 0$$

La solution de cette équation est :

$$H_1(x) = a_1 x$$

Par convention,

$$a_1 = 2^1 = 2$$

Donc,

$$\boxed{H_1(x) = 2x}$$

Exemple 3

Pour $n = 2$ l'équation de Hermite s'écrit comme,

$$\frac{d^2}{dx^2} H_2(x) - 2x \frac{d}{dx} H_2(x) + 4H_2(x) = 0$$

La solution de cette équation est :

$$H_2(x) = a_0 + a_2 x^2$$

Par convention,

$$a_2 = 2^2 = 4$$

Mais, selon la relation de récurrence,

$$a_{p+2} = \frac{2p-4}{(p+1)(p+2)} a_p$$

On à :

$$a_2 = -2a_0$$

$$4 = -2a_0 \Rightarrow a_0 = -2$$

$$\boxed{H_2(x) = 4x^2 - 2}$$

Exemple 3

Pour $n = 3$ l'équation de Hermite s'écrit comme,

$$\frac{d^2}{dx^2} H_3(x) - 2x \frac{d}{dx} H_3(x) + 6H_3(x) = 0$$

La solution de cette équation est :

$$H_3(x) = a_1 x + a_3 x^3$$

Par convention,

$$a_3 = 2^3 = 8$$

Mais, selon la relation de recouvrance,

$$a_{p+2} = \frac{2p-6}{(p+1)(p+2)} a_p$$

On à :

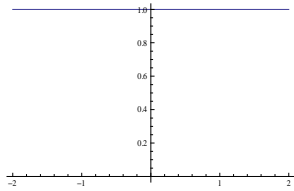
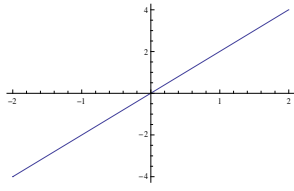
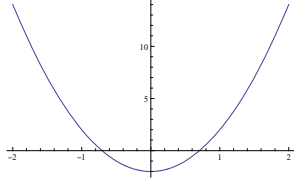
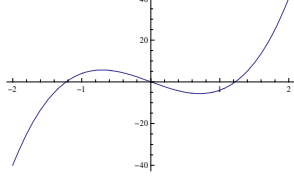
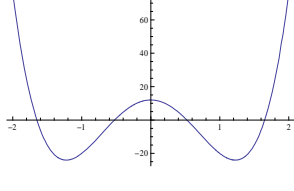
$$a_3 = -\frac{2}{3} a_1$$

$$8 = -\frac{2}{3} a_1 \Rightarrow a_1 = -12$$

$$H_3(x) = 8x^3 - 12x$$

Ainsi :

Les polynômes de Hermite

$H_0(x) = 1$	
$H_1(x) = 2x$	
$H_2(x) = 4x^2 - 2$	
$H_3(x) = 8x^3 - 12x$	
$H_4(x) = 16x^4 - 48x^2 + 12$	

Fonction génératrice des polynômes d'Hermite

On peut trouver $H_n(x)$ à l'aide de la fonction génératrice :

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

Formule de Rodrigues :

Selon la fonction génératrice :

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

On peut écrire $e^{2xt - t^2}$ comme $e^{x^2} e^{-(t-x)^2}$:

$$G(x, t) = e^{x^2} e^{-(t-x)^2} = H_0(x) + H_1(x)t + H_2(x)\frac{t^2}{2!} + H_3(x)\frac{t^3}{3!} + \dots + H_n(x)\frac{t^n}{n!}$$

On dérive :

$$\frac{\partial}{\partial t} G(x, t) = e^{x^2} \frac{\partial}{\partial t} e^{-(t-x)^2} = H_1(x) + H_2(x)t + H_3(x)\frac{t^2}{2!} + \dots + H_n(x)\frac{t^{n-1}}{(n-1)!}$$

Mais,

$$\frac{\partial}{\partial t} e^{-(t-x)^2} = -\frac{\partial}{\partial x} e^{-(t-x)^2}$$

Donc,

$$\frac{\partial}{\partial t} G(x, t) = (-1)e^{x^2} \frac{\partial}{\partial x} e^{-(t-x)^2} = H_1(x) + H_2(x)t + H_3(x)\frac{t^2}{2!} + \dots + H_n(x)\frac{t^{n-1}}{(n-1)!}$$

La deuxième dérivée :

$$\frac{\partial^2}{\partial t^2} G(x, t) = (-1)^2 e^{x^2} \frac{\partial}{\partial x} e^{-(t-x)^2} = H_2(x) + H_3(x)t + \dots + H_n(x)\frac{t^{n-2}}{(n-2)!}$$

Et la n ième dérivée :

$$\frac{\partial^n}{\partial t^n} G(x, t) = (-1)^n e^{x^2} \frac{\partial}{\partial x} e^{-(t-x)^2} = H_n(x)$$

Pour $t = 0$,

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

Exemples

$$H_0(x) = (-1)^0 e^{x^2} e^{-x^2} = 1$$

$$H_1(x) = (-1)^1 e^{x^2} \frac{d}{dx} e^{-x^2} = 2x$$

$$H_2(x) = (-1)^2 e^{x^2} \frac{d^2}{dx^2} e^{-x^2} = 4x^2 - 2$$

Orthonormalité

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{-x^2} H_m^*(x) H_n(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{-x^2} H_m(x) H_n(x)$$

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{-x^2} H_m(x) (-1)^n e^{x^2} \frac{d^n}{dx^n} e^{-x^2}$$

$$= (-1)^n \underbrace{\int_{-\infty}^{+\infty} dx H_m(x) \frac{d^n}{dx^n} e^{-x^2}}_I$$

$$I = \int_{-\infty}^{+\infty} dx H_m(x) \frac{d^n}{dx^n} e^{-x^2}$$

$$\begin{cases} u = H_m(x) & dv = dx \frac{d^n}{dx^n} e^{-x^2} \\ du = dx \frac{d}{dx} H_m(x) & v = \frac{d^{n-1}}{dx^{n-1}} e^{-x^2} \end{cases}$$

$$I = [uv]_{-\infty}^{+\infty} - \int_{-\infty}^{+\infty} v du$$

$$I = \underbrace{\left[H_m(x) \frac{d^{n-1}}{dx^{n-1}} e^{-x^2} \right]_{-\infty}^{+\infty}}_0 - \int_{-\infty}^{+\infty} dx \underbrace{\frac{d}{dx} H_m(x)}_{2mH_{m-1}(x)} \frac{d^{n-1}}{dx^{n-1}} e^{-x^2}$$

Mais,

$$\frac{d}{dx} H_m(x) = 2mH_{m-1}(x)$$

Donc,

$$I = -2m \int_{-\infty}^{+\infty} dx H_{m-1}(x) \frac{d^{n-1}}{dx^{n-1}} e^{-x^2}$$

Alors,

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx H_m(x) \frac{d^n}{dx^n} e^{-x^2} = -2m \int_{-\infty}^{+\infty} dx H_{m-1}(x) \frac{d^{n-1}}{dx^{n-1}} e^{-x^2}$$

Ainsi,

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx H_m(x) \frac{d^n}{dx^n} e^{-x^2} = -2m \left[-2(m-1) \int_{-\infty}^{+\infty} dx H_{m-2}(x) \frac{d^{n-1}}{dx^{n-1}} e^{-x^2} \right]$$

Après m fois :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx H_m(x) \frac{d^n}{dx^n} e^{-x^2} = (-1)^m 2^m m! \int_{-\infty}^{+\infty} dx \frac{d^{n-m}}{dx^{n-m}} e^{-x^2} = (-1)^m 2^m m! \sqrt{\pi} \delta_{mn}$$

Alors,

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{-x^2} H_m(x) H_n(x) = (-1)^n I = (-1)^{m+n} 2^m m! \sqrt{\pi} \delta_{mn} = \begin{cases} 0 & , \quad m \neq n \\ 2^n n! \sqrt{\pi} & , \quad m = n \end{cases}$$

Donc,

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

Pour $m = n$:

$$\boxed{\int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{-x^2} [H_n(x)]^2 = 2^n n! \sqrt{\pi}}$$