Polynomiale Basisfunktionen und Quadratur (1)

Christian Otto

Universität des Saarlandes

10.05.2016

Gliederung

Definitionen

Seien $f, g : [a; b] \longrightarrow \mathbb{R}$. Dann ist deren SKALARPRODUKT definiert durch

$$\langle f|g\rangle := \int_a^b f(x)g(x)w(x)\,dx \tag{1}$$

mit $w(x) > 0 \;\; \forall x \in [a; b]$.

Zwei Polynome f, g heißen ORTHOGONAL, wenn gilt:

$$\langle f|g\rangle = 0. \tag{2}$$

$$\gamma_n := \sqrt{\langle Q_n | Q_n \rangle} \tag{3}$$

$$P_n := \frac{Q_n}{\gamma_n} \tag{4}$$

wobei die Q_n die orthogonalen Polynome sind. Die Polynome P_n sind also NORMIERT

$$\mu_n := \int_a^b x^n w(x) dx \tag{5}$$

Die μ_n heißen MOMENTE von w(x)

Zielsetzung

- Verfahren zur Konstruktion eines orthogonales Basissystems zu einer vorgegeben Gewichtsfunktion
- Ansatz:

$$Q_n(x) = x^n + \sum_{k=0}^{N-1} Q_{nk} x^k \tag{6}$$

- Herleitung einer Rekursionsbeziehung zwischen den Koeffizienten (Drei-Term-Rekursion)

Gram-Schmidt-Verfahren

- Setze Q_n an wie oben und fordere

$$\langle Q_n | Q_k \rangle = 0 \qquad \forall n,\ k \leq n \tag{7}$$

- $\Rightarrow$ LGS mit n Variablen und n Gleichungen
- sehr umständlich! Effizienter durch Rekursionsformeln

Rekursionsformeln für Polynome

$$x|Q_n\rangle = |Q_{n+1}\rangle + \sum_{k=0}^{n} c_{nk}|Q_k\rangle \quad \| \cdot \langle Q_k| \tag{8}$$

$$c_{nk} = \frac{1}{\gamma_n}\langle Q_n|x|Q_k\rangle \tag{9}$$

$c_{nk} \neq 0$ genau dann, wenn $k = n - 1$ und $k = n$. So vereinfacht sich die Summe

$$x|Q_n\rangle = |Q_{n+1}\rangle + \alpha_n|Q_n\rangle + \beta_n|Q_{n-1}\rangle \quad \| * \langle Q_n| \tag{10}$$

$$\langle Q_n|x|Q_n\rangle = \alpha_n\gamma_n \tag{11}$$

Merke: $\alpha_n = 0$, wenn $w(x) = w(-x)$
Dies ist bei den Legendre- und Hermitepolynomen der Fall!

Rekursionsformeln für Polynome

Multipliziere nun (10) mit $\langle Q_{n-1}|$:

$$\langle Q_{n-1}|x|Q_n\rangle = \beta_n \gamma_{n-1} \tag{12}$$

Ersetze nun in (11) n durch $n-1$, multipliziere mit $\langle Q_n|$

$$\gamma_n = \langle Q_{n-1}|x|Q_n\rangle \tag{13}$$

Setze nun (12) und (13) gleich

$$\beta_n = \frac{\gamma_n}{\gamma_{n-1}} \tag{14}$$

Es folgt die

Drei-Term-Rekursion

$$|Q_{n+1}\rangle = (x-\alpha_n)|Q_n\rangle - \beta_n|Q_{n-1}\rangle \tag{15}$$

$$x|P_n\rangle = \sqrt{\beta_{n+1}}|P_{n+1}\rangle + \alpha_n|P_n\rangle + \sqrt{\beta_n}|P_{n-1}\rangle \tag{16}$$

Beurteilung des Verfahrens

- mangelt an Effizienz
- schlecht konditioniertes Problem!
  $\gamma_n = \mu_{2n} - \sum_{k=0}^{n-1} c_{nk}^2$ kann sehr klein werden
  Wegen $\beta_n = \frac{\gamma_n}{\gamma_{n-1}}$ wird durch solch eine Größe geteilt
  $\longrightarrow$ extreme Fortpflanzung von Rundungsfehlern

Berechnung der Nullstellen

Die Gautschi-Stieltjes-Methode beruht auf der numerischen Berechnung von Eigenwerten.
Definiere Jacobi-Matrix:

$$J_{nm} : \;=\; \langle P_n | x | P_m \rangle \tag{17}$$

Aus (16) folgt:

$$J_{nm} \;=\; \sqrt{\beta_{m+1}}\delta_{n,m+1} + \alpha_m \delta_{nm} + \sqrt{\beta_m}\delta_{n,m+1} \tag{18}$$

Daher sieht sie (exemplarisch) so aus ($n = 3$):

$$\begin{pmatrix} \alpha_0 & \sqrt{\beta_1} & 0 & 0 \\ \sqrt{\beta_1} & \alpha_1 & \sqrt{\beta_2} & 0 \\ 0 & \sqrt{\beta_2} & \alpha_2 & \sqrt{\beta_3} \\ 0 & 0 & \sqrt{\beta_3} & \alpha_3 \end{pmatrix} \tag{19}$$

Definiere nun :

$$-\frac{d^2 h_n(x)}{dx^2} + x^2 h_n(x) = (2n+1)h_n(x) \quad (20)$$

$$\underline{\mathbf{R}}(x) : = [P_0(x) \dots P_{n-1}(x)] \quad (21)$$

$$\underline{\mathbf{e}} : = [0, \dots, 1] \quad (22)$$

Schreibe nun () um:

$$x\underline{\mathbf{R}}(x) = \underline{\underline{\mathbf{J}}}(x) + \alpha_n P_n(x)\underline{\mathbf{e}} \quad (23)$$

Genau für $P_n(x_i) = 0$ ergibt sich Eigenwertgleichung:

$$x_i\underline{\mathbf{R}}(x_i) = \underline{\underline{\mathbf{J}}}(x_i) \quad (24)$$

Also sind die Nullstellen x_i von P_n genau die EW von $\underline{\underline{\mathbf{J}}}$.
$\longrightarrow$ stabile und effiziente Berechnung der x_i, da es für Diagonalisierung stabile und effiziente Verfahren gibt.

Was sind Quadraturen?

- Ziel: Algorithmus gewinnen, um Integral einer Funktion näherungsweise zu berechnen, wenn nur die Funktionswerte an diskreten Stützstellen x_i gegeben sind.
- Methode: Interpoliere Funktion durch Polynom und integriere dieses
- Wahl der Stützstellen hat entscheidenden Einfluss auf die Genauigkeit

Lagrange-Interpolation

Gegeben: Funktionswerte f(x_i) an den Stellen $x_1 \dots x_i \dots x_n$. Dann wird f(x) durch Polynom n-ten Grades interpoliert:

$$f(x) \approx f_n(x) \quad := \quad \sum_{i=1}^{n} f(x_i) l_i(x) \tag{25}$$

$$l_i(x) \quad := \quad \prod_{\substack{j=1 \\ j \neq n}}^{n} \frac{x - x_j}{x_i - x_j} \tag{26}$$

Man sieht, dass die Interpolation an den Stützstellen exakt ist:

$$l_i(x_j) \quad = \quad \delta_{ij} \tag{27}$$

Definition:

$$P_n(x) \quad := \quad \prod_{j=1}^{n} (x - x_j) \tag{28}$$

Gaußsche Quadratur: Methode

- Ziel: Polynom $q(x)$ vom Grade $2n-1$ oder kleiner folgendermaßen integrieren

$$\int_a^b q(x)w(x)dx \tag{29}$$

- Wähle ONB von $\mathbb{R}_{\leq n}[x]$ aus Polynomen P_n, die bzgl. $w(x)$ auf $[a\,;\,b]$ orthogonal sind.
Achtung: Intervall $[a\,;\,b]$ und Gewichtsfunktion $w(x)$ geben eindeutig vor, welche Polynome zu wählen sind!
- Wähle dessen Nullstellen x_i als Stützstellen für Lagrange-Interpolation
- Dann weiter wie bisher

Methode

Approximiere also wieder $q(x)$ mithilfe von Lagrange-Interpolation:

$$q(x) \approx \sum_{i=1}^{n} q(x_i) l_i(x)$$

Integriere nun

$$\int_a^b w(x) q(x) dx \approx \sum_{i=1}^{n} q(x_i) w_i \tag{30}$$

mit

$$w_i := \int_a^b w(x) l_i(x) dx \tag{31}$$

Frage : Wie bestimmt man die w_i und die x_i möglichst effizient?

Fehleranalyse für Gauß-Quadratur

Der Vorteil der Gauß-Quadratur ist, dass sie *exakt* ist! Betrachte Restglied:

$$\begin{aligned} R(x) &:= q(x) - q_n(x) \\ \deg R(x) &\leq 2n - 1 \end{aligned} \tag{32}$$

Da $R(x_i) = 0$ existiert Teilerpolynom $d(x)$, sodass:

$$\begin{aligned} R(x) &= d(x) P_n(x) \\ \deg d(x) &\leq n - 1 \end{aligned} \tag{33}$$

Also ist $d(x)$ als LK von Polynomen P_k mit $\deg P_k \leq n$ orthogonal zu P_n.

Fehleranalyse für Gauß-Quadratur

Daher verschwindet der Fehler ϵ:

$$\begin{aligned} \epsilon &:= \int_b^a R(x)w(x)dx \\ &= \int_a^b d(x)w(x)P_n(x)dx \\ &= 0 \end{aligned} \tag{34}$$

Christoffel-Darboux-Relation

Was fehlt noch?

- Berechnung der Nullstellen
  $\longrightarrow$ schon erledigt durch Gautschi-Stieltjes-Methode!
- Berechnung der Quadraturgewichte w_i
  $\longrightarrow$ Herleitung der *Christoffel-Darboux-Relation*

Man betrachte wieder die *Drei-Term-Rekursion* ():

$$
\begin{aligned}
xP_k(x) &= \sqrt{\beta_{k+1}}P_{k+1}(x) + \alpha_k P_k(x) + \sqrt{\beta_k}P_{k-1}(x) \\
yP_k(y) &= \sqrt{\beta_{k+1}}P_{k+1}(y) + \alpha_k P_k(y) + \sqrt{\beta_k}P_{k-1}(y)
\end{aligned}
$$

Christoffel-Darboux-Relation

Nun multipliziere man mit $P_k(x)$ bzw. $P_k(y)$:

$$
\begin{aligned}
xP_k(x)P_k(y) &= \sqrt{\beta_{k+1}}P_{k+1}(x)P_k(y) + \alpha_k P_k(x)P_k(y) \\
&\quad + \sqrt{\beta_k}P_{k-1}(x)P_k(y) \\
yP_k(y)P_k(x) &= \sqrt{\beta k+1}P_{k+1}(y)P_k(x) + \alpha_k P_k(x)P_k(y) \\
&\quad + \sqrt{\beta_k}P_{k-1}(y)P_k(x) \qquad (35)
\end{aligned}
$$

Subtrahiere beide Gleichungen voneinander:

$$
\begin{aligned}
(x-y)P_k(x)P_k(y) &= \sqrt{\beta_{k+1}}[\underline{P_k(y)P_{k+1}(x)} - \overline{P_k(x)P_{k+1}(y)}] \\
&\quad \sqrt{\beta_k}[\underline{-(P_k(x)P_{k-1}(y))} + \overline{P_k(y)P_{k-1}(x)}]
\end{aligned}
$$

Christoffel-Darboux-Relation

Summiere über k von 0 bis n und beachte, dass sich jeweils unterstrichene und überstrichene Terme wegheben!

$$\sum_{k=0}^{n} P_k(y)P_k(x) = \frac{\sqrt{\beta_{n+1}}}{x-y}[P_n(y)P_{n+1}(x) - P_n(x)P_{n+1}(y)] \quad (36)$$

Setze $y = x_i$ und beachte $P_n(x_i) = 0$:

$$\sum_{k=0}^{n} P_k(x_i)P_k(x) = \frac{\sqrt{\beta_{n+1}}}{x - x_i} \cdot (-P_n(x)P_{n+1}(x_i)) \quad (37)$$

Multipliziere mit $w(x)P_0(x)$ und integriere:

$$\underbrace{P_0(x_i)}_{1} = -\sqrt{\beta_{n+1}}P_{n+1}(x_i)\int_a^b \frac{P_n(x)}{x - x_i}w(x)dx \quad (38)$$

Christoffel-Darboux-Relation

Wir betrachten den Integranden genauer:

$$\frac{P_n(x)}{x - x_i} = \frac{\prod_{j=1}^{n}(x - x_j)}{x - x_i} = \prod_{\substack{j=0 \\ j \neq i}}^{n} (x - x_j) \tag{39}$$

Außerdem gilt

$$P_n'(x_i) = \prod_{\substack{j=0 \\ j \neq i}}^{n} (x_i - x_j) \tag{40}$$

Aus (39), (40) und der Definition von $l_i(x)$ (26) folgt:

$$\frac{P_n(x)}{x - x_i} = l_i(x) \cdot P_n'(x_i) \tag{41}$$

Christoffel-Darboux-Relation

Damit lässt sich das Integral (38) auswerten:

$$\begin{aligned} 1 &= -\sqrt{\beta_{n+1}} P_{n+1} \int_a^b \frac{w(x) P_n(x)}{x - x_i} dx \\ &= -\sqrt{\beta_{n+1}} P_{n+1} \int_a^b w(x) l_i(x) P_n'(x_i) dx \\ &= -\sqrt{\beta_{n+1}} P_n'(x_i) P_{n+1}(x_i) \underline{w_i} \end{aligned}$$

Nun kann man umstellen und erhält:

$$w_i = -\frac{1}{\sqrt{\beta_{n+1}} P_{n+1}(x_i) P_n'(x_i)} \tag{42}$$

Wir wollen den Nenner auf eine andere Form bringen. Betrachte (37) und bilde mithilfe von L'Hopital's Regel den $\lim_{x \longrightarrow x_i}$.

Christoffel-Darboux-Relation

Es folgt:

$$-\sqrt{\beta_{n+1}} P_{n+1}(x_i) P_n'(x_i) = \sum_{k=0}^{n-1} P_k(x_i)^2 \qquad (43)$$

Man erhält durch Einsetzen in (42):

Christoffel-Darboux-Relation

$$w_i = \frac{1}{\sum_{k=0}^{n-1} P_k(x_i)^2} \qquad (44)$$

Dieser Ausdruck lässt sich leicht mithilfe der Gautschi-Stieltjes Methode berechnen!

Gautschi-Stieltjes-Methode (2)

Erinnerung (Gautschi-Stieltjes-Methode):

$$\underline{\mathbf{R}}(x) := (P_0(x) \dots P_{n-1}(x))$$

$$\begin{aligned} \underline{\mathbf{R}}(x_i) \cdot \underline{\mathbf{R}(x_i)}^\top &= \sum_{k=0}^{n-1} P_k(x_i)^2 \\ &= \frac{1}{w_i} && (45) \\ (\sqrt{w_i}\underline{\mathbf{R}}(x_i)) \cdot (\sqrt{w_i}\underline{\mathbf{R}}(x_i))^\top &= 1 && (46) \end{aligned}$$

Also ist $\sqrt{w_i}\underline{\mathbf{R}}(x_i)$ ein ganz spezieller Vektor: der normierte Eigenvektor zum Eigenwert x_i!

Gautschi-Stieltjes-Methode (2)

Dieser ist numerisch berechenbar und wird im Folgenden als $\underline{\mathbf{u}}$ bezeichnet. Indem man berücksichtigt, dass $P_0(x) = \frac{1}{\mu_0}$ und die erste Komponente betrachtet, findet man:

$$\begin{aligned} \sqrt{w_i} P_0 &= \frac{\sqrt{w_i}}{\mu_0} \\ &= (\underline{\mathbf{u}})_0 \end{aligned}$$

Numerische Bestimmung der Quadraturgewichte

$$w_i = (\underline{\mathbf{u}})_0 \mu_0^2 \tag{47}$$

$\longrightarrow$ fertiger Algorithmus für numerische Quadratur!

Legendre-Polynome

Wir wollen in diesem Kapitel die wichtigsten Eigenschaften einiger klassischer Polynombasen studieren und beginnen mit den Legendre-Polynomen.

- Gewichtsfunktion: $w(x) = 1$
- Definitionsbereich $[-1\ ;\ 1]$
- Normquadrat: $\gamma_l = \frac{2}{2l+1}$
- Rekursionskoeffizienten: $\alpha_l = 0$ und $\beta_l = \frac{2l-1}{2l+1}$
- Sturm-Liouville-Problem: LEGENDRE-DGL :

$$\frac{d}{dx}\left[(1-x^2)\frac{dP_l}{dx}\right] = -l(l+1)P_l \qquad (48)$$

- Momente der Gewichtsfunktion: $\mu_n = \frac{2}{n+1}$ für gerade n, sonst 0.

Half-range-Legendre-Polynome

Gesucht: Polynome, die auf $[0\,;\,1]$ bzgl. $w(x) = 1$ orthogonal sind!
Lösung durch Variablensubstitution:

$$P_l^{hr}(x) = P_l(2x - 1) \tag{49}$$

Da die P_l^{hr} auf den P_l basieren, lassen sich deren Eigenschaften leicht aus denen der P_l gewinnen:

- Gewichtsfunktion $w(x) = 1$
- Definitionsbereich $[0\,;\,1]$
- Normquadrat: $\gamma_l = \frac{1}{2l+1}$
- Rekursion: wie bei Legendre-Polynomen
- Momente: $\mu_n = \frac{1}{n+1}$

Assoziierte Legendre-Polynome

Will man LEGENDRES VERALLGEMEINERTE DGL lösen, benötigt man ein Orthogonalsystem, das nicht mehr aus Polynomen besteht.

- Gewichtsfunktion $w(x) = 1$
- Definitionsbereich $[-1\,;\,1]$
- Normquadrat: $\gamma_n = \frac{2(l+m)!}{(2l+1)(l-m)!}$
- Rekursionskoeffizkienten: $\alpha_n = 0$ und $\beta_n = \frac{2l-1}{2l+1}\frac{l+m}{l-m}$

Assoziierte Legendre-Polynome

- Sturm-Liouville-Problem (Legendres verallgemeinerte DGL):

$$\frac{d}{dx}\left[(1-x^2)\frac{dP_l^m}{dx}\right] - \frac{m^2}{1-x^2}P_l^m = -l(l+1)P_l^m \quad (50)$$

- Momente: wie bei Legendre
- Bedeutung: VLDG tritt z.B. nach Variablentrennung in Quantenmechanik und Elektrodynamik auf. Außerdem führen die ALP auf die Kugelflächenfunktionen.

Fourier-Funktionen

Um im nächsten Schritt die Kugelflächenfunktionen zu konstruieren, brauchen wir noch ein weiteres Orthogonalsystem:

- Gewichtsfunktion: $w(x) = 1$
- Definitionsbereich: $[0\,;\,2\pi]$
- explizite Formel:

  $$\Phi_m(\varphi) = e^{im\varphi}$$

  mit $m \in \mathbb{Z}$
- Sturm-Liouville-Problem:

$$\frac{d^2\Phi_m(\varphi)}{d\varphi^2} = -m^2\Phi(\varphi) \tag{51}$$

Kugelflächenfunktionen

Als Funktionen, die von φ und $\cos(\vartheta)$ abhängen und auf $[0\,;\,\pi] \times [0\,;\,2\pi]$ orthonormal sind, definieren wir die Kugelflächenfunktionen:

$$Y_{lm}(\varphi,\vartheta) \quad := \quad \sqrt{(2l+1)\frac{(l-m)!}{(l+m)!}}\,P_l^m\big(\cos(\vartheta)\big)\,e^{im\varphi} \tag{52}$$

Eigenschaften:

- orthonormal:

$$\int_{\varphi=0}^{\varphi=2\pi}\int_{\vartheta=0}^{\vartheta=\pi} Y^*_{lm}(\varphi,\vartheta)\,Y_{l'm'}(\varphi,\vartheta)\underline{\sin(\vartheta)}\,d\vartheta\,d\varphi \quad = \quad \delta_{ll'}\delta_{mm'}$$

- Eigenfunktionen des Winkelanteils des Laplace-Operators

$$\Delta_\Omega Y_{lm}(\varphi,\vartheta) \quad = \quad l(l+1)\,Y_{lm}(\varphi,\vartheta) \tag{53}$$

$$\Delta_\Omega \quad := \quad \frac{1}{\sin(\vartheta)}\frac{\partial}{\partial\vartheta}\Big[\sin(\vartheta)\frac{\partial}{\partial\vartheta}\Big] + \frac{1}{\sin^2(\vartheta)}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} \tag{54}$$

Kugelflächenfunktionen

- Eigenfunktionen des ∂_φ-Operators:

$$\frac{\partial Y_{lm}(\varphi,\vartheta)}{\partial\varphi} = mY_{lm}(\varphi,\vartheta) \quad (55)$$

- Daher Anwendungen: Lösungen der Schrödinger-Gleichung der QM oder der Laplace-Gleichung der E-Dynamik

Assoziierte Laguerre-Polynome

- Gewichtsfunktion: $w(x) = x^{\alpha} e^{-x}$
- Definitionsbereich $[0\,;\,\infty)$
- Normquadrat: $\gamma_n = \frac{\Gamma(n+\alpha+1)}{n!}$
- Rekursionsformel:

$$L_n^{(\alpha)}(x) = (2 + \frac{\alpha - x - 1}{n}) L_{n-1}^{(\alpha)}(x) - (1 + \frac{\alpha - 1}{n}) L_{n-2}^{(\alpha)}(x)$$

- Anwendungen:
  - Radialgleichung der Atomorbitale beim Wasserstoffatom
  - Eigenfunktionen des Kollisionsoperators der Boltzmann-Gleichung

Anwendung: Schrödingergleichung

Die (stationäre) Schrödingergleichung für ein Teilchen mit Masse μ und Energie E im Potential $V(r)$ lautet allgemein:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta + V(r)\right]\psi(\mathbf{r}) \quad = \quad E\psi(\mathbf{r}) \tag{56}$$

Für ein Elektron im Coulompotential des Kerns lautet das Potential

$$V(r) \quad = \quad -\frac{k}{r} \tag{57}$$

Schreibt man den Laplace-Operator in Kugelkoordinaten, erhält man:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left[\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}(r^2\frac{\partial}{\partial r}) + \frac{1}{r^2\sin(\vartheta)}\frac{\partial}{\partial\vartheta}\left(\sin(\vartheta)\frac{\partial}{\partial\vartheta}\right) + \frac{1}{\sin(\vartheta)^2}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right] + E - V(r)\right)\Psi \quad = \quad 0 \tag{58}$$

Anwendung: Schrödingergleichung

Man setze an

$$\psi(\mathbf{r}) = R(r)\Phi(\varphi)\Theta(\vartheta) \tag{59}$$

Setzt man diesen Ansatz ein und teilt durch $\frac{\hbar^2}{2\mu}$, erhält man:

$$\begin{aligned}
&\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR(r)}{dr}\right)\Theta(\vartheta)\Phi\varphi \\
&+\frac{1}{r^2\sin(\vartheta)}\frac{d}{d\vartheta}\left(\sin(\vartheta)\frac{d\Theta(\vartheta)}{d\vartheta}\right)R(r)\Phi(\varphi) \\
&+\frac{1}{r^2\sin^2(\vartheta)}\frac{d^2\Phi(\varphi)}{d\varphi^2}R(r)\Theta(\vartheta) \\
&+\frac{2\mu}{\hbar^2}\Big(E-V(r)\Big)R(r)\Theta(\vartheta)\Phi(\varphi) = 0
\end{aligned} \tag{60}$$

Anwendung: Schrödingergleichung

Nun multipliziere man mit $\sin^2(\vartheta) r^2$

$$\begin{aligned}
&\sin(\vartheta)^2 \frac{d}{dr}\left(r^2 \frac{dR(r)}{dr}\right)\Theta(\vartheta)\Phi(\varphi) \\
&+\sin(\vartheta)\frac{d}{d\vartheta}\left(\sin(\vartheta)\frac{d\Theta(\vartheta)}{d\vartheta}\right)R(r)\Phi(\varphi) \\
&+\frac{d^2\Phi(\varphi)}{d\varphi}R(r)\Theta(\vartheta) \\
&+\frac{2\mu}{\hbar^2}\Big(E - V(r)\Big)r^2 \sin(\vartheta)R(r)\Theta(\vartheta)\Phi(\varphi) \quad = \quad 0 \qquad (61)
\end{aligned}$$

Als nächstes teile man durch $R\Phi\Theta$. Zur Abkürzung werden Argumente der Funktionen nicht mitangeschrieben.

Anwendung: Schrödingergleichung

$$\frac{\sin^2(\vartheta)}{R}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR}{dr}\right)+\frac{\sin(\vartheta)}{\Theta}\frac{d}{d\vartheta}\left(\sin(\vartheta)\frac{d\Theta}{d\vartheta}\right)$$
$$+\underbrace{\frac{1}{\Phi}\frac{d^2\Phi}{d\varphi^2}}_{-m^2}+\frac{2\mu}{\hbar^2}\Big(E-V(r)\Big)r^2\sin^2(\vartheta) \quad = \quad 0 \qquad (62)$$

Da die Gleichung bzgl φ komplett separiert ist, muss der unterklammerte Term konstant sein. Daraus ergibt sich für $\Phi(\varphi)$ die DGL:

$$\frac{d^2\Phi}{d\varphi^2} \quad = \quad -m^2\Phi \qquad (63)$$

Da die Lösung auch 2π-periodisch sein muss, ergeben sich als Lösungen die Fourierfunktionen und $m \in \mathbb{N}$.

Anwendung: Schrödingergleichung

Nun setze man also für $\frac{1}{\Phi}\frac{d^2\Phi}{d\varphi^2}$ den Eigenwert $-m^2$ ein, teile durch $\sin^2(\vartheta)$ und sortiere nach Variablen:

$$\begin{aligned} &\frac{1}{R}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{d^2R}{dr^2}\right)+\frac{2\mu}{\hbar^2}\Big(E-V(r)\Big)r^2 \\ &+\frac{1}{\sin(\vartheta)\Theta}\frac{d}{d\vartheta}\left(\sin(\vartheta)\frac{d\Theta}{d\vartheta}\right)-\frac{m^2}{\sin^2(\vartheta)} = 0 \end{aligned} \tag{64}$$

Beachtet man nun, dass

$$\frac{d}{d\vartheta} = -\frac{\sin(\vartheta)}{d\cos(\vartheta)} \tag{65}$$

und dass

$$\sin^2(\vartheta) = 1-\cos^2(\vartheta) \tag{66}$$

Anwendung: Schrödingergleichung

dann erhält man:

$$
\begin{aligned}
&\frac{1}{R}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{d^2R}{dr^2}\right)+\frac{2m}{\hbar^2}\Big(E-V(r)\Big)r^2 \\
&+\underbrace{\frac{d}{d\cos(\vartheta)\Theta}\left[1-\cos^2(\vartheta)\frac{d\Theta}{d\cos(\vartheta)}\right]-\frac{m^2}{1-\cos^2(\vartheta)}}_{=C} \quad = \quad 0 \qquad (67)
\end{aligned}
$$

Da der unterstrichene Teil nur von Θ abhängt, muss er gleich einer Konstanten C sein sein. Diese Bedingung ergibt wieder *Legendre's VDG* zum Eigenwert C, und die Lösungen sind:

$$\Theta(\vartheta) = P_l^m(\cos(\vartheta)) \qquad (68)$$

$$C = -l(l+1) \qquad (69)$$

Man setzt also den Eigenwert für C ein und erhält eine nur noch von r abhängige Gleichung.

Anwendung: Schrödingerleichung

$$\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR}{dr}\right)+\frac{2m}{\hbar^2}\Big(E-V(r)\Big)r^2R \quad = \quad CR \tag{70}$$

Diese hat die Lösung (für gegebene l):

$$R_{nl}(r) \quad = \quad e^{-kr}(2kr)^l L_{n-l-1}^{2l+1}(2kr) \tag{71}$$

$$k \quad := \quad \frac{\sqrt{-2mE}}{\hbar} \tag{72}$$

$$E \quad \propto \quad -\frac{c}{n^2} \tag{73}$$

Die Lösung wurde über einen Separationsansatz gewonnen. Ihre Allgemeinheit folgt aus physikalischen Randbedingungen, algebraischen Überlegungen und Konvergenzbetrachtungen.

Anwendung: Schrödingergleichung

Wir fassen nochmal zusammen:

Schrödingergleichung für $\frac{1}{r}$-Potential

Die Lösungen der stationären Schrödingergleichung

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta - \frac{k}{r}\right]\Psi(\mathbf{r}) \quad = \quad E\Psi(\mathbf{r})$$

lauten

$$\Psi_{nlm}(r, \varphi, \vartheta) \quad = \quad e^{-kr}(2kr)^l L_{n-l-1}^{2l+1}(r) P_l^m(\cos(\vartheta)) \qquad (74)$$

Sonin-Polynome

- Gewichtsfunktion: $w(x) = x^{2\alpha+1}e^{-x^2}$
- Definitionsbereich: $[0\ ;\ \infty)$
- *Achtung*: Nehme als Variable nicht x, sondern x^2!
- Normierung

$$\gamma_n = \frac{\Gamma(n+\alpha+1)}{2n!} \tag{75}$$

- Anwendung in der kinetischen Gastheorie, wobei x die Rolle einer reduzierten Geschwindigkeit spielt

Hermite-Polynome

- Gewichtsfunktion $w(x) = e^{-x^2}$
- Definitionsbereich $(-\infty\ ;\ \infty)$
- Normierung $\gamma_n = \sqrt{\pi} 2^n n!$
- Rekursionsbeziehungen

$$
\begin{aligned}
H_{n+1}(x) &= 2xH_n(x) - 2nH_{n-1}(x) && (76)\\
H_{n+1}(x) &= 2xH_n(x) - \frac{dH_n(x)}{dx} && (77)\\
\frac{dH_n(x)}{dx} &= 2nH_{n-1} && (78)
\end{aligned}
$$

- Rekursionskoeffizienten: $\alpha_n = 0$ und $\beta_n = 2n$

Hermite-Polynome

- Sturm-Liouville-Problem

$$-\frac{d}{dx}\left[e^{-x^2}H_n'(x)\right] \quad = \quad 2ne^{-x^2}H_n(x) \tag{79}$$

Orthonormale Hermite-Polynome

Aus den Hermite-Polynomen kann man auch die sogenannten *orthonormalen Hermite-Polynome* ableiten:

$$h_n(x) \quad := \quad \frac{H_n(x)}{\sqrt{\sqrt{\pi}2^n n!}} \tag{80}$$

Diese haben folgende Eigenschaften:

- Gewichtsfunktion $w(x) = 1$
- Definitionsbereich $(-\infty\ ;\ \infty)$
- Normierung $\gamma_n = 1$
- Rekursionskoeffizienten: $\alpha_n = 0$ und $\beta_n = \frac{n}{2}$

Orthonormale Hermite-Polynome

- Anwendung: Die OHP lösen die Schrödingergleichung für einen harmonischen Oszillator.

$$-\frac{d^2 h_n(x)}{dx^2} + x^2 h_n(x) = (2n+1) h_n(x) \qquad (81)$$

Gegenbauer-Polynome

- Gewichtsfunktion: $w(x) = (1 - x^2)^{\lambda - \frac{1}{2}}$
- Definitionsbereich: $[-1\ ;\ 1]$
- Normierung $\gamma_n = \frac{2^{1-2\lambda}\pi\Gamma(n+2\lambda)}{n!(n+\lambda)[\Gamma(\lambda)]^2}$
- Rekursionskoeffizienten: $\alpha_n = 0$ und $\beta_n = \frac{\Gamma(l+2\lambda)}{\Gamma(l+2\lambda-1}\frac{l-1+\lambda}{l+\lambda}\frac{1}{l}$