Příprava 3. 3. 2021

Mějme funkce

$$
\begin{aligned}
f_0(x) = &\quad \tfrac{1}{\sqrt[4]{\pi}} e^{-\frac{x^2}{2}} \\
f_1(x) = &\quad \sqrt{\tfrac{2}{\sqrt{\pi}}} x e^{-\frac{x^2}{2}} \\
f_2(x) = &\quad \tfrac{2}{\sqrt{3\sqrt{\pi}}} x^2 e^{-\frac{x^2}{2}} \,,
\end{aligned}
$$

funkce načrtněte.

Definujme skalární součin jako

$$f_i \cdot f_j = \int_{-\infty}^{\infty} f_i^*(x) f_j(x) \mathrm{d}x \,,$$

budeme značit také $\langle i|j\rangle$. Hvězdička značí komplexní sdružení, které v tomto případě nehraje roli, ale obecně je třeba na něj nezapomínat. S touto definicí skalárního součinu jsou funkce f_i normované na 1. Normalizaci ověřte pro jednu funkci dle vlastního výběru, integrály přes gaussovky jsou níže. Pozn.: *Povšimněte si faktoru $\pi^{-1/4}$, který vystupuje u všech funkcí f_i. Tento faktor (umocněný na druhou neboť skalární součin) se většinou vykrátí po integraci s faktorem $\sqrt{\pi}$ pocházejícím z integrálů přes gaussovky. Pokud se nám nevykrátí, je lepší výpočet překontrolovat.*

Funkce f_i jsou normované, ale netvoří nutně ortonormální bázi. S pomocí náčrtu funkcí tedy určete, zda je báze také ortonormální (tj. zda $\langle i|j\rangle = \delta_{ij}$). Kolmost jedné funkce na ostatní dvě je možné určit užitím symetrie, o kterou funkci se jedná?

Pomocí Gram-Schmidtovy ortogonalizace vypočtěte funkci $f_{2'}$, která je kolmá na funkci f_0. Pozor, po prvním kroku GS ortogonalizace (výpočet $f_2^{\mathrm{GS}} = f_2 - f_0 f_0 \cdot f_2$) je třeba výsledek normalizovat.

$$
\begin{aligned}
\int_{-\infty}^{\infty} e^{-Bx^2} dx &= \sqrt{\frac{\pi}{B}} \\
\int_{-\infty}^{\infty} x^2 e^{-Bx^2} dx &= \frac{1}{2B}\sqrt{\frac{\pi}{B}} \\
\int_{-\infty}^{\infty} x^4 e^{-Bx^2} dx &= \frac{3}{4B^2}\sqrt{\frac{\pi}{B}} \\
\int_{-\infty}^{\infty} x^6 e^{-Bx^2} dx &= \frac{15}{8B^3}\sqrt{\frac{\pi}{B}} \\
\int_{-\infty}^{\infty} x^8 e^{-Bx^2} dx &= \frac{105}{16B^4}\sqrt{\frac{\pi}{B}}
\end{aligned}
$$