 Revista Mexicana de Física 36 No. 2(1990) 310-314

Representación integral de los polinomios de Laguerre

Violeta Gaftoi N., José L. López B., Tomás D. Navarrete G. y Jesús Morales R.*

Area de Físca, Departamento de Ciencias Básicas e Ingeniería, Universidad Autónoma Metropolitana-Azcapotzalco Av. San Pablo 180, 02200 México, D.F.

(Recibido el 30 de octubre de 1989; aceptado el 17 de enero de 1990)

Resumen. Se indica cómo los polinomios asociados de Laguerre pueden representarse mediante cierta integral sobre los polinomios de Hermite. Este hecho permite determinar en forma simple elementos de matriz para los estados cuánticos del oscilador armónico unidimensional y también permite obtener la parte radial de la función de onda para el potencial de Morse.

PACS: 02.90.+p; 03.65.Fd

1. Introducción

Emplearemos la notación y convenciones de [1]. En la literatura no hemos localizado una relación directa entre los polinomios de Laguerre $L_n(z)$ y de Hermite $H_n(x)$. Aquí indicamos cómo al integrar los H_m podemos obtener los L_m, y posteriormente aplicamos este resultado a dos problemas de interés en mecánica cuántica. En efecto, si $z \geq 0$ entonces es simple probar (no lo haremos aquí) que

$$L_n(-z) = \frac{1}{2^n\sqrt{\pi}n!}\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\left(x+\sqrt{\frac{z}{2}}\right)^2}\left(H_n(x)\right)^2 dx, \quad n=0,1,2,\ldots. \tag{1}$$

Por ejemplo, si $n=0$, entonces $L_0(-z)=1$, si $n=1$ resulta $L_1(-z)=1+z$ así $L_1(z)=1-z$, si $n=2$ obtenemos $L_2(-z)=\frac{1}{2}(2+4z+z^2)$ por lo tanto, $L_2(z)=\frac{1}{2}(2-4z+z^2)$, etc., en esta forma pueden generarse los polinomios de Laguerre a partir de los de Hermite. Es claro que (1) constituye una representación integral para los L_n.

A partir de la Ec. (1) es inmediata la expresión integral correspondiente para los polinomios asociados de Laguerre ($m \geq n$, $z>0$)

$$L_n^{m-n}(-z) = \frac{(-1)^{m-n}}{z^{\frac{m-n}{2}}2^n n!\sqrt{\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\left(x+\sqrt{\frac{z}{2}}\right)^2} H_m(x)H_n(x)\,dx. \tag{2}$$

*Instituto Mexicano del Petróleo, Subdirección de Investigación Aplicada, México, D.F.

Si en (2) hacemos $n = m$ recuperamos (1). No afirmamos que (2) sea más eficaz computacionalmente que la fórmula de Rodrigues; lo que sí opinamos es que (2) parece ser de gran utilidad en diversas aplicaciones de mecánica cuántica. Esto lo mostraremos en las próximas dos secciones al calcular elementos de matriz para el oscilador armónico (OA) y al resolver la ecuación de Schrödinger para el potencial de Morse.

2. Elementos de matriz para el oscilador armónico unidimensional

En la literatura [2,3] encontramos que ha habido necesidad de elaborar métodos especiales para evaluar integrales entre estados cuánticos del OA; aquí mostraremos que (2) es muy útil en este tipo de cálculos, evitando así el uso de alguna técnica especial. Para tal fin, empleamos unidades naturales de manera que la constante de Planck $\hbar$, la masa y la frecuencia del OA son iguales a uno.

Las funciones de onda normalizadas del OA están dadas por

$$\Psi_n(x) = \left[\frac{1}{2^n n! \sqrt{\pi}}\right]^{1/2} e^{-\frac{x^2}{2}} H_n(x), \quad n = 0, 1, 2, \ldots. \tag{3}$$

Por otro lado, calcular los elementos de matriz del OA para la función exponencial significa determinar la integral

$$\langle m | e^{-\gamma x} | n \rangle \equiv \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_m(x) e^{-\gamma x} \Psi_n(x)\, dx, \tag{4.a}$$

donde γ es un parámetro arbitrario independiente de x tal que $\gamma \geq 0$. Es evidente que (4.a) es simétrica en m y n, así que sin pérdida de generalidad aceptaremos $m \geq n$. Entonces al sustituir (3) en (4.a) y utilizar (2) es inmediato que

$$\langle m | e^{-\gamma x} | n \rangle = \sqrt{\frac{n!}{m!}} \left(-\frac{\gamma}{2}\right)^{m-n} e^{\frac{\gamma^2}{4}} L_n^{m-n}\left(-\frac{\gamma^2}{2}\right), \tag{4.b}$$

lo cual coincide con las expresiones reportadas en la literatura [2,3]. En [2] se prueba que una vez obtenidos los elementos (4.b) entonces es sencillo deducir los elementos para las funciones x^k, $k = 0, 1, 2, \ldots$; o para la función gaussiana $e^{-\gamma x^2}$, etc.

Es interesante señalar, antes de finalizar esta sección, que en virtud de la ecuación que define a los L_q^p (consúltese [1], pág. 781), es posible demostrar que la función (para m y n dados)

$$f(\gamma) = \langle m | e^{-\gamma x} | n \rangle, \tag{5.a}$$

cumple la ecuación diferencial

$$\frac{d^2 f}{d\gamma^2} + \frac{1}{\gamma}\frac{df}{d\gamma} - \frac{1}{4\gamma^2}(\gamma^4 + 4T\gamma^2 + 4A)f = 0, \tag{5.b}$$

donde $A = (m-n)^2$ y $T = m + n + 1$, es decir, (4.*b*) es una solución de (5.*b*). La Ec. (5.*b*) coincide con (2.5) de [2] encontrada con el teorema hipervirial.

3. Función de onda de Morse

El principal objetivo de esta sección consiste en probar que al estar calculando (4.*a*) [cuyo resultado fue (4.*b*)] simultáneamente estamos resolviendo la ecuación de Schrödinger para la parte radial de la función de onda asociada al potencial de Morse [4,5,6,7]. Morse [4] propuso la función

$$V(r) = D\left[e^{-2a(r-r_0)} - 2e^{-a(r-r_0)}\right], \tag{6}$$

como una aproximación al potencial internuclear de una molécula diatómica, donde D es la energía de disociación (así que D tiene que ver con la profundidad del pozo de potencial), r_0 es la separación nuclear de equilibrio y a es un parámetro asociado con el ancho del pozo de manera que $\frac{a}{2\pi}\sqrt{2D}$ da la frecuencia de pequeñas vibraciones clásicas respecto a r_0. Si hacemos el cambio de variable $u = r - r_0$ y empleamos unidades naturales entonces la correspondiente ecuación de Schrödinger nos queda ($\underset{\mathrm{M}}{\Psi}$ = función de onda radial de Morse)

$$\frac{d^2}{dU^2}\underset{\mathrm{M}}{\Psi} + 2\left[E - D(e^{-2au} - 2e^{-au})\right]\underset{\mathrm{M}}{\Psi} = 0, \tag{7.a}$$

donde a su vez realizamos el cambio de variable independiente

$$\gamma = i\sqrt{2k}e^{-\frac{au}{2}}, \quad i = \sqrt{-1}, \quad K = \frac{2}{a}\sqrt{2D}; \tag{7.b}$$

nótese que la constante $K > 0$ no necesariamente es un entero, así (7.*a*) adquiere la forma

$$\frac{d^2}{d\gamma^2}\underset{\mathrm{M}}{\Psi} + \frac{1}{\gamma}\frac{d}{d\gamma}\underset{\mathrm{M}}{\Psi} - \frac{1}{4\gamma^2}\left(\gamma^4 + 4K\gamma^2 - \frac{32E}{a^2}\right)\underset{\mathrm{M}}{\Psi} = 0, \tag{7.c}$$

¡que resulta tener la misma estructura que (5.*b*) para los elementos de matriz del oscilador armónico (OA)!

Por lo tanto, al comparar (5.*b*) con (7.*c*) tenemos la asociación

$$m + n + 1 = K, \quad E_n = -\frac{a^2}{8}(m-n)^2 = -\frac{a^2}{8}(K - 2n - 1)^2, \tag{8.a}$$

esto indica que no podemos tener $n = m$ porque entonces la energía valdría cero, lo cual no es posible para estados ligados, en consecuencia $(n + m) > 0$ y así (8.*a*) implica $K > 1$ que es precisamente la condición para tener un espectro discreto de energía (véase [4] pág. 60). Además, como $E_n \neq 0$ y $K > 1$ entonces (8.*a*) implica $(K - 2n - 1) > 0$, es decir,

$$0 \leq 2n < (K - 1); \tag{8.b}$$

esto significa que n toma un número finito de valores enteros: el valor mínimo de n es cero y su máximo valor no debe rebasar $\frac{K-1}{2}$.

Las Ecs. (5.*b*, 7.*c*) son homogéneas, asi que $\underset{\mathrm{M}}{\Psi}$ es proporcional a (5.*a*) dada por (4.*b*), en consecuencia

$$\underset{\mathrm{M}}{\Psi}{}_n(r) = \left(\frac{abn!}{\Gamma(K-n)}\right)^{1/2} q^{b/2} e^{-\frac{q}{2}} L_n^b(q), \tag{8.c}$$

con

$$q = Ke^{-a(r-r_0)}, \qquad b = m - n = K - 2n - 1, \tag{8.d}$$

y donde ya hemos efectuado la normalización $\int_0^\infty \psi_n^2(r)dr = 1$. Con (8.*c*) queda resuelta la Ecuación de Schrödinger para la parte radial correspondiente al potencial de Morse. Para concluir esta sección es conveniente hacer las siguientes observaciones:

i) En la Sec. 2 las cantidades m y n toman valores enteros porque están asociados a los niveles de energía del OA, sin embargo, en esta sección sólo n resultó entero, en efecto, de (8.*a*) tenemos $m = K - n - 1$ y como K no necesariamente es entero [véase (7.*b*)] entonces en general m no será entero, y esto a su vez, por (8.*d*) implica que b no tomará valores enteros.

El hecho de que m y b no sean enteros no invalida las expresiones (2, 4.*b*, 8.*c*) porque éstas tienen perfecto sentido si empleamos derivadas fraccionarias [4,8], por ejemplo, para todo m real tiene sentido definir

$$H_m(x) = (-1)^m e^{x^2} \frac{d^m}{dx^m} e^{-x^2}, \tag{9}$$

y sólo cuando $m = 0, 1, 2, \ldots$ la expresión (9) conduce a los polinomios de Hermite. Así, (9) puede utilizarse en (2) para dar sentido a L_n^{m-n} para toda m real, lo mismo puede hacerse en (4.*b*, 8.*c*).

ii) En las Secs. 1 y 2 empleamos $z \geq 0$ y $\gamma \geq 0$, sin embargo, un análisis cuidadoso muestra la validez de las expresiones cuando $z < 0$ y γ es imaginario [véase (7.b)], por esto es que podemos comparar (7.c) con (5.b) y llegar a la expresión correcta (8.c).

iii) En virtud de (2, 8.c) es inmediato que

$$\underset{\mathrm{M}}{\Psi}_n(r) = \frac{(-1)^{b/2}}{2^n\sqrt{\pi}} \left[\frac{ab}{n!\Gamma(K-n)}\right]^{1/2} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2-i\sqrt{2q}x} H_{b+n}(x) H_n(x)\,dx, \tag{10}$$

la cual constituye una representación integral de la función de onda de Morse.

Agradecemos al M. en C. Antonio Rivera F., del Departamento de Matemáticas, Escuela Superior de Física y Matemáticas, IPN, el habernos informado de la Ref. [8].

Referencias

1. M. Abramowitz y I.A. Stegun, *Handbook of mathematical functions*. John Wiley and Sons (1972) Chap. XXII.
2. J. Morales, J. López-Bonilla y A. Palma, *J. Math. Phys.* **28** (1987) 1032.
3. J. Morales y A. Flores-Riveros, *J. Math. Phys.* **30** (1989) 393.
4. P. Morse, *Phys. Rev.* **34** (1929) 57.
5. D.R. Childs, *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* **4** (1964) 283.
6. J.N. Huffaker y P.H. Dwivedi, *J. Math. Phys.* **16** (1975) 862.
7. M. Berrondo, A. Palma, J. López-Bonilla, *Int. J. Quantum. Chem.* **31** (1987) 243.
8. K.B. Oldham y J. Spanier, *The fractional calculus*. Academic Press (1974).

Abstract. We show that the associated Laguerre polynomials may be represented by a certain integral over the Hermite polynomials. This fact allows determining in a simple way the matrix elements of the onedimensional harmonic oscillator, and also the radial part of the wave function for the Morse potential.