Sara Benítez Berrocal
Sara Gutiérrez López

Hoja 2: Problema 10

En espectroscopía molecular suelen aparecer con frecuencia integrales de la forma

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx\, e^{-x^2}\, x^r\, H_n(x)\, H_{n+p}(x)$$

Con n, p y r enteros no negativos y $p \geq r$. Evaluar dicha integral.

Para resolver esta integral vamos a utilizar la ecuación de Hermite,

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

Comparando las dos ecuaciones vemos que difiere en el término x^r.

Sabiendo que las dos relaciones de recurrencia de los polinomios de Hermite son,

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

trabajaremos con la segunda, dando lugar a,

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

Como nuestro término problema es x^r, multiplicaremos nuestra relación de recurrencia por x tantas veces como sea necesario para poder sustituirla en la integral.

$$x^2\, H_n(x) = x\, x\, H_n(x) = \frac{1}{2} x\, H_{n+1}(x) + n\, x\, H_{n-1}(x) =$$
$$= \frac{1}{2}\left[\frac{1}{2} H_{n+2}(x) + (n+1)\, H_n(x)\right] + n\left[\frac{1}{2} H_n(x) + (n-1)\, H_{n-2}(x)\right] =$$
$$= \frac{1}{2^2} H_{n+2}(x) + \frac{1}{2}(2n+1)\, H_n(x) + n(n-1)\, H_{n-2}(x)$$

$$x^3\,H_n(x)=\frac{1}{2}x^2\,H_{n+1}(x)+n\,x^2\,H_{n-1}(x)=$$
$$=\frac{1}{2^2}\left[\frac{1}{2}H_{n+3}(x)+\left(n+2\right)H_{n+1}(x)\right]+\frac{1}{2}\left(2n+1\right)\left[\frac{1}{2}H_{n+1}(x)+n\,H_{n-1}(x)\right]+$$
$$+n\left(n-1\right)\left[\frac{1}{2}H_{n-1}(x)+\left(n-2\right)H_{n-3}(x)\right]=$$
$$=\frac{1}{2^3}H_{n+3}(x)+\frac{1}{2^2}\left(3n+3\right)H_{n+1}(x)+\frac{1}{2}\left(3n^2\right)H_{n-1}(x)+\left(n^3-3n^2+2n\right)H_{n-3}(x)$$

.

.

.

$$x^p\,H_n(x)=\frac{1}{2}x^p\,H_{n+1}(x)+n\,x^p\,H_{n-1}(x)=\frac{1}{2^p}H_{n+p}(x)+\frac{1}{2^{p-1}}\left(pn+p\right)H_{n+p-2}(x)...$$

Como vemos, hemos llegado al término $H_{n+p}(x)$ que aparece en nuestra integral. Por tanto, los posibles resultados que podemos obtener son,

$$\int_{-\infty}^{+\infty}dx\,e^{-x^2}\,x^r\,H_n(x)\,H_{n+p}(x)=\begin{cases}0 & ,si\ p>r\\ \frac{1}{2^p}\left\|H_{n+p}\right\|^2=\delta_{r,p}\,\sqrt{\pi}\,2^n\left(n+p\right)! & ,si\ p=r\end{cases}$$

En el caso de $p > r$, la integral es 0 ya que el producto escalar de $H_{n+(p+t)}$ (siendo t = 1,2,3….) y de H_{n+p} sería igual a 0.
En el caso de $p = r$, se cumple el resultado anterior.