Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

В. В. Пупышев, Двумерное кулоновское рассеяние
квантовой частицы: низкоэнергетические асимптотики,
ТМФ, 2016, том 188, номер 1, 49–75

DOI: <https://doi.org/10.4213/tmf9026>

Использование Общероссийского математического портала Math-Net.Ru подразумевает, что вы прочитали и согласны с пользовательским соглашением
<http://www.mathnet.ru/rus/agreement>

Параметры загрузки:

IP: 54.198.64.247

26 апреля 2023 г., 11:35:22

© 2016 г.

В. В. Пупышев*

ДВУМЕРНОЕ КУЛОНОВСКОЕ РАССЕЯНИЕ КВАНТОВОЙ ЧАСТИЦЫ: НИЗКОЭНЕРГЕТИЧЕСКИЕ АСИМПТОТИКИ

Рассматривается задача о рассеянии заряженной квантовой частицы, движущейся в двумерной плоскости трехмерного координатного пространства, на неподвижном кулоновском центре, лежащем в той же плоскости. Выведены и исследованы разложения волновой функции и всех радиальных волновых функций частицы по целым степеням волнового числа и функциям Бесселя вещественного порядка. Доказано, что конечные суммы таких разложений являются асимптотиками в пределе низких энергий.

Ключевые слова: двумерное кулоновское рассеяние, волновые функции, низкоэнергетические асимптотики.

DOI: 10.4213/tmf9026

1. ВВЕДЕНИЕ

В современной теории рассеяния [1] принято использовать термины “двумерный атом водорода” и “двумерное резерфордское рассеяние”. Первый из них означает связанное состояние заряженной квантовой частицы p_1 , взаимодействующей только в двумерной плоскости $\mathcal{P}$ с неподвижным кулоновским силовым центром O посредством потенциала $z_1 Z/r$, где по определению z_1 и Z – противоположные по знаку кулоновские заряды частицы и силового центра, а r – расстояние между ними в плоскости $\mathcal{P}$. Под вторым термином подразумевается кулоновское рассеяние частицы p_1 силовым центром O в той же плоскости $\mathcal{P}$, причем не только в случае кулоновского притяжения ($z_1 Z < 0$), но и в случае кулоновского отталкивания ($z_1 Z > 0$).

Двумерный атом водорода изучен довольно подробно. Известно точное и исчерпывающее решение задач на связанные состояния для двумерных уравнений Шредингера [2], [3] и Дирака [4], [5] с потенциалом $z_1 Z/r$. Для всего спектра нерелятивистских связанных состояний в работе [3] вычислены дипольные матричные элементы; выведены формулы, определяющие вероятность одно- и двухфотонных переходов между такими состояниями; исследованы сдвиги собственных значений,

*Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Московская обл., Россия.
E-mail: pupyshev@theor.jinr.ru

порожденные включением постоянного электрического поля, и выявлено сверхтонкое расщепление собственных значений. Анализ спектра двумерного атома водорода в сильном магнитном поле выполнен в работе [6].

Двумерное резерфордское рассеяние исследовано не столь детально, как двумерный атом водорода. При любой положительной энергии E квантовой частицы известны точные регулярные решения Ψ^c и $\tilde{\Psi}^c$ задач рассеяния для двумерных уравнений Шредингера [7], [8] и Дирака [9] с потенциалом $z_1 Z/r$. Аналитические продолжения таких решений в область комплексных значений энергии E неизвестны. Кулоновская функция Грина G^c , соответствующая нерелятивистской волновой функции Ψ^c рассеяния квантовой частицы p_1 , исследовалась в работах [10] и [11]. Функцию G^c в импульсном пространстве удалось выразить через элементарные функции [10], а в координатном пространстве записать в виде однократного интеграла [11]. Оценки функции G^c снизу и сверху и ее представление в координатном пространстве через известные специальные функции до сих пор не выведены.

Давно известно [2], что двумерное уравнение Шредингера с потенциалом $z_1 Z/r$ допускает разделение переменных в полярных координатах (r, φ) и с помощью проецирования на базис $\cos m\varphi$, $m = 0, 1, \dots$, сводится к счетной совокупности незацепляющихся одномерных уравнений Шредингера на полупрямой $r > 0$. В работе [12] дан анализ регулярного F_λ и нерегулярного G_λ решений таких уравнений (здесь $\lambda \equiv m - 1/2$).

Низкоэнергетические (при $E \rightarrow +0$) асимптотики волновых функций Ψ^c , F_λ и G_λ ранее не исследовались. Главная цель настоящей работы – построение и исследование таких асимптотик в области $0 \leq r < \infty$. В разделе 2 перечисляются основные определения и обозначения. Низкоэнергетические асимптотики регулярных и нерегулярных волновых функций Кулона F_λ и G_λ полуцелого порядка выводятся в разделах 3 и 4. Раздел 5 посвящен построению низкоэнергетической асимптотики волновой функции Ψ^c . В заключении перечисляются основные результаты.

2. ОПРЕДЕЛЕНИЯ И ОБОЗНАЧЕНИЯ

Пусть $\hbar$ – постоянная Планка, m_1 – масса квантовой частицы p_1 , а (r, φ) – ее полярные координаты в плоскости $\mathcal{P}$. Положим

$$k \equiv \sqrt{\frac{2m_1 E}{\hbar^2}}, \quad R \equiv \frac{\hbar^2}{2m_1 z_1 Z}, \quad \alpha \equiv \operatorname{sgn} R, \quad \eta \equiv \frac{1}{2kR} = \frac{\alpha}{2q},$$

$$x \equiv \frac{r}{|R|}, \quad \rho \equiv kr = qx, \quad v \equiv \sqrt{8|\eta|\rho} = 2\sqrt{x}, \quad w \equiv v \sin \frac{\varphi}{2} = 2\sqrt{x} \sin \frac{\varphi}{2}.$$

В этих формулах и далее k и q – размерное и безразмерное волновые числа частицы p_1 , η – параметр Зоммерфельда, x , ρ , v и w – безразмерные неотрицательные переменные.

Как пояснялось в работе [11], волновая функция $\Psi^c(\rho, \varphi, \eta)$ двумерного кулоновского рассеяния частицы p_1 в плоскости $\mathcal{P}$ подчиняется уравнению Шредингера

$$\left[\partial_\rho^2 + \frac{1}{\rho} \partial_\rho + \frac{1}{\rho^2} \partial_\varphi^2 - \frac{2\eta}{\rho} \right] \Psi^c(\rho, \varphi, \eta) = -\Psi^c(\rho, \varphi, \eta) \quad (1)$$

с граничным условием

$$\Psi^c(\rho, \varphi, \eta) \sim e^{i\rho \cos \varphi + i\eta \ln[\rho(1 - \cos \varphi)]} + r^{-1/2} e^{i\rho - i\eta \ln 2\rho} f^c(\varphi; k, \eta), \quad \rho \rightarrow \infty. \quad (2)$$

Сумма всех операторов, заключенная в уравнении (1) в квадратные скобки, является полным гамильтонианом H^c . Он коммутирует с оператором дифференцирования ∂_φ^2 . Поэтому множество $e^{im\varphi}$, $m = 0, \pm 1, \dots$, всех собственных функций оператора ∂_φ^2 является полным базисом по угловой переменной. Следовательно, волновую функцию Ψ^c можно представить в виде разложения по такому базису:

$$\Psi^c(\rho, \varphi, \eta) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\rho}} \left\{ \sum_{m=-\infty}^{\infty} u_m(\rho, \eta) \cos m\varphi + i \sum_{\substack{n=-\infty \\ n \neq 0}}^{\infty} \tilde{u}_n(\rho, \eta) \sin n\varphi \right\}. \quad (3)$$

Пусть P_φ – оператор инверсии угла φ , действующий на любую функцию $B(\rho, \varphi, \eta)$ по правилу $P_\varphi B(\rho, \varphi, \eta) = B(\rho, -\varphi, \eta)$. Оператор P_φ имеет два собственных числа $p_\varphi = \pm 1$ и коммутирует с гамильтонианом H^c . Поэтому четность p_φ относительно инверсии $\varphi \rightarrow -\varphi$ является сохраняющимся квантовым числом. Искомая волновая функция Ψ^c имеет четную ($p_\varphi = +1$) относительно такой инверсии асимптотику (2) и, следовательно, является четной функцией угла φ во всей плоскости $\mathcal{P}$. Поэтому любая проекция $\tilde{u}_n$ функции Ψ^c на нечетную функцию $\sin n\varphi$ угла φ тождественно равна нулю, а разложение (3) вырождается в косинус-ряд Фурье:

$$\Psi^c(\rho, \varphi, \eta) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\rho}} \left\{ u_0(\rho, \eta) + 2 \sum_{m=1}^{\infty} u_m(\rho, \eta) \cos m\varphi \right\}.$$

Следуя работам [11], [12], вместо целого индекса $m = 0, 1, \dots$ введем полуцелый индекс $\lambda = m - 1/2$ и запишем косинус-ряд Фурье функции Ψ^c в следующем виде:

$$\Psi^c(\rho, \varphi, \eta) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\rho}} \left\{ u_{-1/2}(\rho, \eta) + 2 \sum_{2\lambda=1}^{\infty} u_\lambda(\rho, \eta) \cos \frac{(2\lambda + 1)\varphi}{2} \right\}. \quad (4)$$

В уравнении Шредингера (1) заменим искомую функцию Ψ^c ее разложением (4). Полученное уравнение спроецируем на каждую базисную функцию $\cos[(2\lambda + 1)\varphi/2]$ и таким образом выведем счетную ($2\lambda = -1, 1, 3, \dots$) последовательность не зацепляющихся друг за друга уравнений Кулона с полуцелым индексом λ :

$$\left[\partial_\rho^2 - \frac{\lambda(\lambda + 1)}{\rho^2} + 1 - \frac{2\eta}{\rho} \right] u_\lambda(\rho, \eta) = 0, \quad \rho > 0, \quad \eta \in (-\infty, \infty). \quad (5)$$

Для уравнений Шредингера (1) и Кулона (5) пределом нулевой энергии мы назовем предел $E \rightarrow +0$ при фиксированных значениях параметра $R \neq 0$ и порядка $\lambda \geq -1/2$. В таком пределе оба волновых числа k и q сходятся к нулю справа, а модуль параметра Зоммерфельда η неограниченно возрастает. Под низкоэнергетической асимптотикой исследуемой кулоновской функции мы подразумеваем ее асимптотику в пределе нулевой энергии рассеяния, понимаемом в указанном выше смысле.

Напомним определение ряда Маклорена [13]. Пусть функция $T(q)$ имеет непрерывные производные порядка $p = 0, 1, \dots, n$ на отрезке $[0, b]$, где $0 < b < \infty$. Тогда ее можно представить в виде ряда Тейлора с центром в точке $q = 0$:

$$T(q) = \sum_{p=0}^{n-1} \frac{q^p}{p!} \partial_q^p T(q)|_{q=0} + R_n(q, t), \quad R_n(q, t) = \frac{q^n}{n!} \partial_q^n T(q)|_{q=t}.$$

Здесь $q \in [0, b]$, $t \in (0, b)$. Такой ряд называется рядом Маклорена. В пределе $q \rightarrow 0$ его остаточное слагаемое $R_n(q, t)$ убывает, как $O(q^n)$. Если $T(-q) = T(q)$, $q \in [0, b]$, то ряд Маклорена содержит только четные степени аргумента q .

Будем использовать известный в теории рядов [14] признак равномерной сходимости бесконечного ряда S : если ряд $\tilde{S}$, все слагаемые которого положительные, превосходит модуль ряда S и сходится, то ряд S сходится равномерно. Ряд $\tilde{S}$ принято называть мажорантой ряда S .

Ключевым в наших рассуждениях является известный асимптотический метод [15] построения решения дифференциального уравнения второго порядка в виде бесконечного разложения по известным специальным функциям.

Следует различать два случая: случай $\alpha = 1$ кулоновского отталкивания и случай $\alpha = -1$ кулоновского притяжения. Для краткости далее мы используем символы и формулы с верхними и нижними знаками плюс и (или) минус, подразумевая, что в таких формулах все верхние знаки берутся в случае $\alpha = 1$, а все нижние – в случае $\alpha = -1$. Например, формула

$$A^\pm = a^\pm + \left\{ \begin{matrix} b \\ c \end{matrix} \right\}$$

означает, что в случае $\alpha = 1$ верно равенство $A^+ = a^+ + b$, а в случае $\alpha = -1$ верно равенство $A^- = a^- + c$.

3. НИЗКОЭНЕРГЕТИЧЕСКИЕ АСИМПТОТИКИ РЕГУЛЯРНЫХ ФУНКЦИЙ КУЛОНА

В настоящем разделе регулярные функции Кулона F_λ считаются функциями переменных v и q . В п. 3.1 приводятся известные представления [12] этих функций через функции Куммера [16]–[18]. Пункт 3.2 содержит вывод формул дифференцирования функций Куммера по переменной q . В п. 3.3 эти формулы применяются, чтобы представить функции F_λ в виде рядов Маклорена по переменной q . Эти конечные ряды позволят нам далее построить искомые представления функций F_λ в виде бесконечных рядов, содержащих заранее неизвестные числовые коэффициенты b_{ns} , функции Бесселя [16]–[18] первого рода $J_\mu(v)$ и $I_\mu(v)$ и целые степени переменных v и q . В п. 3.4 выводится и исследуется цепочка рекуррентных уравнений для коэффициентов b_{ns} . Свойства этих коэффициентов используются в п. 3.5 для доказательства и анализа сходимости полученных разложений функций F_λ по функциям Бесселя.

3.1. Представления и свойства регулярных функций Кулона. Регулярные волновые функции Кулона F_λ полуцелого порядка λ подробно обсуждались в работе [12]. Напомним определение функций F_λ и приведем некоторые формулы из этой работы.

Регулярной волновой функцией Кулона полуцелого порядка $\lambda = -1/2, 1/2, \dots$ называется вещественное решение $F_\lambda(\rho, \eta)$ уравнения (5), обладающее асимптотиками

$$\begin{aligned} F_\lambda(\rho, \eta) &= O(\rho^{\lambda+1}), & \rho \rightarrow 0, \\ F_\lambda(\rho, \eta) &= \sin \left[\rho - \eta \ln 2\rho - \pi \frac{\lambda}{2} + \delta_\lambda^\xi(\eta) \right] + O\left(\frac{1}{\rho}\right), & \rho \rightarrow \infty, \end{aligned}$$

где $\delta_\lambda^c(\eta)$ – кулоновская фаза, равная аргументу гамма-функции $\Gamma(1 + \lambda + i\eta)$. Функция F_λ выражается через функцию Куммера [16]

$$\Phi(\alpha, \gamma; z) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\alpha)_n}{(\gamma)_n} \frac{z^n}{n!}, \quad (\alpha)_n = \alpha(\alpha+1)\dots(\alpha+n-1), \quad (\alpha)_0 = 1,$$

следующим образом:

$$F_\lambda(\rho, \eta) = C_\lambda(\eta) \rho^{\lambda+1} e^{i\rho} \Phi(\lambda+1+i\eta, 2\lambda+2, -2i\rho). \quad (6)$$

Эта формула содержит кулоновский множитель

$$C_\lambda(\eta) = 2^\lambda \frac{|\Gamma(\lambda+1+i\eta)|}{\Gamma(2\lambda+2)} e^{-\pi\eta/2} \quad (7)$$

и после замены функции Φ ее разложением в степенной ряд приобретает вид

$$F_\lambda(\rho, \eta) = C_\lambda(\eta) \rho^{\lambda+1} e^{i\rho} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\lambda+1+i\eta)_n}{(2\lambda+2)_n} \frac{(-2i\rho)^n}{n!}. \quad (8)$$

Из этого равенства следует представление

$$F_\lambda(\rho, \pm|\eta|) = q^{\lambda+1} C_\lambda(\eta) (2\lambda+1)! \frac{v}{2} f_\lambda^\pm(v, q), \quad (9)$$

в котором

$$f_\lambda^\pm(v, q) \equiv e^{iqv^2/4} \left(\frac{v}{2}\right)^\nu \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\lambda+1 \pm i/2q)_n}{\Gamma(\nu+n+1) n!} \left(-2iq \frac{v^2}{4}\right)^n, \quad \nu \equiv 2\lambda+1. \quad (10)$$

В отличие от функции F_λ функция $f_\lambda^\pm$ является четной функцией волнового числа q . Это свойство сыграет важную роль в п. 3.3 и 3.4.

3.2. Ряды Маклорена для функций Куммера. В соответствии с представлением (6), (7) волновая функция F_λ является произведением, один из множителей которого – функция Куммера $\Phi(a, c; \xi)$. Ее параметр $a = \lambda+1+i\eta$, где $\eta = \alpha/2q$, и аргумент $\xi = -i2\rho = -i2qx$ зависят от волнового числа q , а параметр $c = 2\lambda+2$ не зависит от этого числа. Ниже нам потребуются производные $\partial_q^n \Phi(a, c; \xi)$, $n = 0, 1, \dots$, функции $\Phi(a, c; \xi)$ по волновому числу q в точке $q = 0$. Такие производные нетрудно вычислить, если найдены производные этой же функции $\Phi(a, c; \xi)$ по параметру a и по аргументу ξ . В теории специальных функций [16] известны формулы дифференцирования функции Куммера по аргументу, но формулы дифференцирования по параметрам неизвестны. Поэтому для вычисления производных $\partial_q^n \Phi(a, c; \xi)$, $n = 0, 1, \dots$, мы предлагаем довольно простой способ. Опишем его.

Представим исследуемую функцию Куммера в виде суммы:

$$\Phi(\lambda+1+i\alpha|\eta|, 2\lambda+2, -2i\rho) = \nu! \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\lambda+1+i\alpha/2q)_n}{\Gamma(\nu+n+1) n!} \left(-2iq \frac{v^2}{4}\right)^n. \quad (11)$$

Каждое ее слагаемое содержит произведение двух множителей, зависящих от переменной q . Запишем такое произведение в виде

$$\left(\lambda+1+\frac{i\alpha}{2q}\right)_n \left(-2iq \frac{v^2}{4}\right)^n = \left(\alpha \frac{v^2}{4}\right)^n A_n(t; \lambda), \quad t \equiv \frac{2q}{i\alpha} = -2i\alpha q. \quad (12)$$

Теперь решим следующую задачу: найти коэффициенты a_p , $p \leq 4$, полинома

$$A_n(t; \lambda) \equiv \prod_{j=1}^n [(\lambda + j)t + 1] = 1 + a_1 q + a_2 q^2 + \dots + a_n q^n. \quad (13)$$

Все коэффициенты a_p являются функциями $a_p(\lambda, n, \alpha)$ трех дискретных аргументов $\lambda, n = 1, 2, \dots$ и $\alpha = \pm 1$. Для сокращения записи эти аргументы мы далее не указываем. Коэффициенты a_p связаны с производными полинома A_n по переменной t :

$$a_p = \frac{(-2i\alpha)^p}{p!} \partial_t^p A_n(t; \lambda) \Big|_{t=0}, \quad p = 1, 2, \dots \quad (14)$$

Для вычисления таких производных введем суммы

$$S_m(t; \lambda) \equiv \sum_{j=1}^n \frac{(\lambda + j)^m}{[(\lambda + j)t + 1]^m}, \quad m = 1, 2, 3, 4.$$

Эти суммы обладают двумя свойствами: при любых t и λ верны соотношения

$$\partial_t S_1(t; \lambda) = -S_2(t; \lambda), \quad \partial_t S_2(t; \lambda) = -2S_3(t; \lambda), \quad \partial_t S_3(t; \lambda) = -3S_4(t; \lambda),$$

а в частном случае $t = 0$ имеют место представления

$$\begin{aligned} S_1(t; \lambda) &= n\lambda + s_1, \\ S_2(t; \lambda) &= n\lambda^2 + 2\lambda s_1 + s_2, \\ S_3(t; \lambda) &= n\lambda^3 + 3\lambda(\lambda s_1 + s_2) + s_3, \\ S_4(t; \lambda) &= n\lambda^4 + 4\lambda(\lambda^2 s_1 + s_3) + 6\lambda^2 s_2 + s_4 \end{aligned} \quad (15)$$

через известные табличные суммы [19]

$$\begin{aligned} s_m &\equiv \sum_{j=1}^n j^m, \quad m = 1, 2, 3, 4; \\ s_1 &= \frac{1}{2}n(n+1), \quad s_2 = \frac{1}{6}n(n+1)(2n+1), \\ s_3 &= \frac{1}{2}n^2(n+1)^2, \quad s_4 = \frac{n}{30}(n+1)(2n+1)(3n^2+3n-1). \end{aligned} \quad (16)$$

Используя первое из указанных выше свойств сумм S_m и последовательно увеличивая порядок $p = 1, 2, 3, 4$ производных $\partial_t^p A_n$, выведем следующие равенства:

$$\begin{aligned} \partial_t A_n &= A_n S_1, \quad \partial_t^2 A_n = A_n(S_1^2 - S_2), \quad \partial_t^3 A_n = A_n(S_1^3 - 3S_1 S_2 + 2S_3), \\ \partial_t^4 A_n &= A_n(S_1^4 - 6S_1^2 S_2 + 3S_2^2 + 8S_1 S_3 - 6S_4), \end{aligned} \quad (17)$$

где для краткости записи аргумент t и параметр λ опущены. Теперь в этих равенствах положим $t = 0$ и применим второе свойство сумм S_m . В результате найдем производные $\partial_t^p A_n(t; \lambda)$, $p = 1, 2, 3, 4$, в точке $t = 0$. Затем по формулам (14) получим искомые представления для коэффициентов a_p полинома $A_n(t; \lambda)$. Положив

$a \equiv 2\lambda + n + 1$, запишем эти представления:

$$\begin{aligned} a_1 &= -i\alpha n, & a_2 &= -\frac{n}{6}(n-1)(n+1-3a^2), \\ a_3 &= i\alpha a \frac{n}{6}(n-1)(n-2)(n+1-a^2), \\ a_4 &= \frac{n}{360}(n-1)(n-2)(n-3)[15a^2(a^2-2a-4\lambda) + (n+1)(5n+7)]. \end{aligned} \quad (18)$$

Итак, доказано вспомогательное разложение

$$\left(\lambda + 1 + \frac{i\alpha}{2q}\right)_n \left(-2iq\frac{v^2}{4}\right)^n = \left(\alpha\frac{v^2}{4}\right)^n \left[1 + \sum_{p=1}^m a_p q^p + O(q^{m+1})\right], \quad (19)$$

где $m = 1, 2, 3, 4$, а a_p – функции (18) дискретных переменных λ , n и α . Используя это разложение, нетрудно выразить производные $\partial_q^m \Phi$ исследуемой функции Куммера (11) в точке $q = 0$ для $m \leq 4$ через функции Бесселя первого рода J_μ и I_μ .

Для примера найдем производную первого порядка в точке $q = 0$. В ряде (11) заменим все произведения множителей, зависящих от переменной q , правыми частями равенств (19). Полученный ряд продифференцируем почленно по аргументу q . Положим $q = 0$. Коэффициент a_1 выразим по первой из формул (18) через дискретные аргументы λ , n и α . Итоговое соотношение запишем в виде равенства

$$\partial_q \Phi|_{q=0} = -i\alpha \nu! \left\{ \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(2\lambda+2)n + n(n-1)}{\Gamma(\nu+1+n) n!} \left(\alpha\frac{v^2}{4}\right)^n \right\}, \quad \nu = 2\lambda + 1.$$

Это равенство с помощью двух ($m = 0, 1$) однотипных цепочек преобразований

$$\begin{aligned} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\alpha v^2/4)^n}{\Gamma(\nu+n+1)} \frac{n(n-1) \dots (n-m)}{n!} &= \\ &= \sum_{n=m+1}^{\infty} \frac{(\alpha v^2/4)^n}{\Gamma(\nu+n+1)} \frac{1}{(n-m-1)!} = \left(\alpha\frac{v^2}{4}\right)^{m+1} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\alpha v^2/4)^n}{\Gamma(\nu+m+n+1) n!} \end{aligned} \quad (20)$$

сведем к сумме двух бесконечных рядов:

$$\begin{aligned} \partial_q \Phi|_{q=0} &= \\ &= -i\alpha \nu! \left(\alpha\frac{v^2}{4}\right) \left\{ (\nu+1) \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\alpha v^2/4)^n}{\Gamma(\nu+2+n) n!} + \left(\alpha\frac{v^2}{4}\right) \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\alpha v^2/4)^n}{\Gamma(\nu+3+n) n!} \right\}. \end{aligned}$$

Сравнив эти ряды с известными разложениями [16] функций Бесселя первого рода

$$\left(\frac{v}{2}\right)^\mu \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\pm v^2/4)^n}{\Gamma(n+\mu+1) n!} = Z_\mu^\pm(v) = \begin{cases} I_\mu(v), \\ J_\mu(v), \end{cases} \quad (21)$$

заключаем, что имеет место равенство

$$\partial_q \Phi(\lambda + 1 \pm |\eta|, 2\lambda + 2, -2i\rho)|_{q=0} = \mp i \nu! \left(\frac{v}{2}\right)^{1-\nu} \left[(\nu+1) Z_{\nu+1}^\pm(v) \pm \frac{v}{2} Z_{\nu+2}^\pm(v) \right].$$

Функции Бесселя $Z_{\nu+1}^{\pm}(v)$ ограничены при $v < \infty$. Следовательно, при $v < \infty$ модуль правой части этого равенства является мажорантой первой производной исходного ряда (11) в точке $q = 0$. Поэтому такой ряд сходится равномерно, если $v < \infty$. Таким образом, его почленное дифференцирование, использованное выше, правомерно.

Продолжим исследование производных ряда Куммера (11) по переменной q . Последовательно выведем заведомо завышенные, но зато простые мажорантные оценки сумм $S_m(t; \lambda)$, полинома $A_n(t; \lambda)$ и его производных $\partial_t^m A_n(t; \lambda)$.

Для начала заметим, что $|(\lambda + j)t + 1| > 1$ при любых λ , j и t , поэтому модуль суммы $S_m(t; \lambda)$ никогда не превосходит значения этой же суммы в точке $t = 0$:

$$|S_m(t; \lambda)| \leq S_m(t; \lambda)|_{t=0}, \quad m = 1, 2, 3, 4.$$

Далее, из определения (13) полинома A_n и соотношений

$$|(\lambda + j)t + 1| = |(\lambda + j)(-2i\alpha q) + 1| = [4(\lambda + j)^2 q^2 + 1]^{1/2} \leq 2(\lambda + j)q + 1$$

следует, что для $\lambda \geq -1$, $n = 0, 1, \dots$ и $q \geq 0$ верно неравенство

$$\left| \left(\alpha \frac{v^2}{4} \right)^n A_n(t; \lambda) \right| \leq (\lambda + 1 + |\eta|)_n (2\rho)^n.$$

Используя упомянутые выше неравенства, из представлений (17) производных полинома A_n получаем следующие справедливые при любых t , n и λ оценки:

$$\begin{aligned} |\partial_q A_n(t; \lambda)| &\leq (\lambda + 1 + |\eta|)_n (2\rho)^n S_1, \\ |\partial_q^2 A_n(t; \lambda)| &\leq 2(\lambda + 1 + |\eta|)_n (2\rho)^n (S_1^2 + S_2), \\ |\partial_q^3 A_n(t; \lambda)| &\leq 8(\lambda + 1 + |\eta|)_n (2\rho)^n (S_1^3 + 3S_1 S_2 + 2S_3), \\ |\partial_q^4 A_n(t; \lambda)| &\leq 16(\lambda + 1 + |\eta|)_n (2\rho)^n (S_1^4 + 6S_1^2 S_2 + 3S_2^2 + 8S_1 S_3 + 6S_4). \end{aligned} \quad (22)$$

В этих оценках символами S_m обозначены суммы $S_m(t; \lambda)$, взятые в точке $t = 0$. Такие суммы нетрудно выразить через индексы λ , n и m по формулам (15) и (16).

Теперь решим следующую задачу: используя первую из оценок (22), показать, что функция Куммера Φ , заданная равенством (11), имеет непрерывную производную $\partial_q \Phi$ при любых конечных значениях аргументов q и v .

Для решения этой задачи сначала в исходном ряде Куммера (11) заменим все произведения множителей, зависящих от переменной q , правыми частями равенств (12). Полученный ряд продифференцируем почленно по аргументу q и таким образом получим ряд $\partial_q \Phi$, слагаемые которого содержат функции $\partial_q A_n(q; \lambda)$. Модуль ряда $\partial_q \Phi$ не превосходит ряда Куммера, содержащего вместо функций $\partial_q A_n$ их модули $|\partial_q A_n|$. Каждый такой модуль заменим правой частью первого из неравенств (22), в котором предварительно выразим сумму S_1 через индексы λ и n по формулам (15) и (16). Полученный ряд обозначим как Q и представим равенствами

$$Q(v, q) \equiv \frac{\nu!}{2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{n(\nu + n)(\lambda + 1 + |\eta|)_n}{\Gamma(\nu + n + 1) n!} (2\rho)^n = (\lambda + 1 + |\eta|) \rho \Phi(\lambda + 1 + |\eta|, 2\lambda + 2; 2\rho).$$

Заметим, что в этих равенствах согласно справочнику [16] функция Куммера неограничена только в пределе $\rho \rightarrow \infty$. Поэтому аналогичным свойством обладает и функция Q . По построению эта функция является верхней оценкой ряда $|\partial_q \Phi|$. Следовательно, если $\rho < \infty$, то исходный ряд $\partial_q \Phi$ сходится равномерно и является непрерывной функцией переменной q , что и требовалось показать.

Сделаем несколько полезных замечаний.

С помощью оценок (22) производных полинома A_n несложно доказать, что производные $\partial_q^m \Phi$, $m = 2, 3, 4$, исследуемой функции Куммера (11) непрерывны и ограничены при любых конечных значениях аргументов v и q . Доказательство принципиально не отличается от рассмотренного выше случая $m = 1$.

Предложенный и поясненный в настоящем пункте метод можно обобщить на случай $m > 4$ и убедиться в том, что функция Куммера (11) имеет непрерывные по переменной q производные любого конечного порядка m при $q < \infty$, $v < \infty$. Поэтому при $q < \infty$, $v < \infty$ и любом $m < \infty$ для такой функций существует ряд Маклорена, содержащий производные $\partial_q^p \Phi$, $p \leq m$, в точке $q = 0$ и остаточное слагаемое, которое в пределе $q \rightarrow +0$ убывает, как $O(q^{m+1})$. Упомянутое обобщение – довольно трудоемкое занятие. Более простой способ разложения функции Куммера (11) в ряд Маклорена с большим числом слагаемых ($m > 4$) основан на методе, предложенном ниже в п. 5.2.

3.3. Ряды Маклорена для регулярных функций Кулона. Как отмечалось в п. 3.1, $f_\lambda^\pm(v, q)$ – четная функция (10) переменной q . Следовательно, ряд Маклорена функции $f_\lambda^\pm(v, q)$ по переменной q при любом числе $m = 0, 1, \dots$ слагаемых должен содержать только слагаемые с четными степенями $2m$ переменной q . Проверим это следствие в трех случаях $m = 0$, $m = 1$ и $m = 2$. Для этого построим ряды Маклорена функции $f_\lambda^\pm(v, q)$ по ее аргументу q . Используем все результаты предыдущего пункта.

Приступим к построению. Сначала в разложении (10) функции $f_\lambda^\pm$ заменим экспоненциальный множитель его известным рядом Маклорена [13],

$$e^{ip} = e^{iqv^2/4} = 1 + \sum_{p=1}^4 \frac{(iq)^p}{p!} \left(\frac{v^2}{4} \right)^p + O(q^5), \quad v < \infty, \quad (23)$$

а каждое слагаемое, стоящее под знаком суммы, преобразуем по формуле (12), в которой заменим полином A_n суммой (13) с коэффициентами a_n , заданными формулами (18). Затем в полученном представлении функции $f_\lambda^\pm$ приведем подобные члены с одинаковой зависимостью от переменной q и каждый из них соответствующей цепочкой преобразований (20) сведем к произведениям целой степени переменной v и функции Бесселя $I_\mu(v)$ или $J_\mu(v)$. В результате получим три ($m = 0, 1, 2$) разложения функции $f_\lambda^\pm$:

$$f_\lambda^\pm(v, q) = f_{\lambda m}^\pm(v, q) + R_{\lambda m}^\pm(v, q). \quad (24)$$

В каждом из них $R_{\lambda m}^\pm = O(q^{m+1})$ – остаточный член, а $f_{\lambda m}^\pm$ – конечная сумма,

$$f_{\lambda m}^\pm(v, q) = \sum_{n=0}^m \left(-\frac{q^2}{8} \right)^n \frac{1}{n!} \sum_{s=2n}^{3n} b_{ns} v^s \left\{ \begin{matrix} (-1)^s I_{\nu+s}(v) \\ J_{\nu+s}(v) \end{matrix} \right\}, \quad (25)$$

в которой коэффициенты b_{ns} вычисляются по формулам

$$\begin{aligned} b_{00} &= 1, & b_{12} &= \nu + 1, & b_{13} &= \frac{1}{3}, \\ b_{24} &= (\nu + 3)(\nu + 1), & b_{25} &= \frac{2}{3} \left(\nu + \frac{11}{5} \right), & b_{26} &= \frac{1}{9} \end{aligned} \quad (26)$$

и поэтому зависят только от целых индексов n и s и целого числа $\nu = 2\lambda + 1 \geq 0$.

Теперь в формуле (8) заменим функцию $f_\lambda^\pm$ суммой (24) со слагаемыми (25) и таким образом для функций F_λ выведем искомые ряды Маклорена:

$$F_\lambda(\rho, \pm|\eta|) = F_{\lambda m}(\rho, \pm|\eta|) + q^{\lambda+1} C_\lambda(\eta) \nu! \frac{v}{2} R_{\lambda m}^\pm(v, q), \quad (27)$$

где $m = 0, 1, 2$ и для краткости записи мы положили

$$\begin{aligned} F_{\lambda m}(\rho, \pm|\eta|) &\equiv q^{\lambda+1} C_\lambda(\eta) \nu! \frac{v}{2} f_{\lambda m}^\pm(v, q) = \\ &= q^{\lambda+1} C_\lambda(\eta) \nu! \frac{v}{2} \sum_{n=0}^m \left(-\frac{q^2}{8} \right)^n \frac{1}{n!} \sum_{s=2n}^{3n} b_{ns} v^s \left\{ \frac{(-1)^s I_{\nu+s}(v)}{J_{\nu+s}(v)} \right\}. \end{aligned} \quad (28)$$

Согласно выводам, сделанным в конце п. 3.2, разложения (27), (28) функций F_λ являются рядами Маклорена при $q < \infty$ и $v < \infty$, а в пределе $q \rightarrow +0$ функция $R_{\lambda m}$ сходится к нулю, как $O(q^{m+1})$, если $v < \infty$. Поэтому функции $F_{\lambda m}$, $m = 0, 1, 2$, являются низкоэнергетическими асимптотиками функции $F_\lambda(\rho, \eta)$ в области $\rho < \infty$.

Изложенный выше способ разложения функций Кулона F_λ в ряды Маклорена непрактичен при большом числе слагаемых таких рядов. В этом случае выгоднее использовать метод, предложенный в следующем пункте.

3.4. Разложения регулярных функций Кулона по функциям Бесселя.

Построение разложений регулярных функций Кулона F_λ по функциям Бесселя I_μ или J_μ начнем с вывода и качественного анализа вспомогательного уравнения.

Подстановками

$$u_\lambda(\rho, \pm|\eta|) = v y_\nu^\pm(v, \tau), \quad \tau \equiv \left(\frac{q}{2} \right)^2, \quad \nu = 2\lambda + 1, \quad v = \sqrt{2|\eta|\rho} = 2\sqrt{x} \quad (29)$$

сведем исходное уравнение Кулона (5) к уравнению

$$\left[\partial_v^2 + \frac{1}{v} \partial_v \mp 1 - \frac{\nu^2}{v^2} + \tau v^2 \right] y_\nu^\pm(v, \tau) = 0, \quad v > 0. \quad (30)$$

При $\tau = 0$ данное уравнение вырождается в уравнение Бесселя целого порядка $\nu = 2\lambda + 1$. Если $\tau \neq 0$, то формальным решением обсуждаемого уравнения будет бесконечный ряд по целым степеням $n = 0, 1, 2, \dots$ параметра τ . Чтобы угадать структуру такого разложения искомого регулярного решения $y_\nu^\pm = f_\lambda^\pm$, вернемся к представлению (24)–(26) функции $f_\lambda^\pm$. Это представление позволяет предположить, что функция $f_\lambda^\pm$ является следующей двойной суммой: в первой бесконечной сумме индекс n принимает значения $0, 1, \dots$, а во второй (конечной) сумме при каждом n индекс суммирования s пробегает все целые значения от $2n$ до $3n$ включительно. Воспользуемся этим предположением и следующим замечанием: для искомого регулярного решения $f_\lambda^\pm(v, q)$ уравнения (30) сумма трех первых слагаемых

(при $n = 0, 1, 2$) бесконечного разложения по целым степеням параметра τ должна совпадать с функцией $f_{\lambda m}^{\pm}(v, q)$, заданной формулой (25) при $m = 2$. Поэтому решение $f_{\lambda}^{\pm}$ будем искать в виде бесконечного ряда

$$f_{\lambda}^{\pm}(v, q) = \sum_{n=0}^{\infty} \left(-\frac{q^2}{8} \right)^n \frac{1}{n!} \sum_{s=2n}^{3n} b_{ns} v^s \left\{ \begin{matrix} (-1)^s I_{\nu+s}(v) \\ J_{\nu+s}(v) \end{matrix} \right\}, \quad (31)$$

в котором коэффициенты b_{ns} при $n \leq 2$ определены формулами (26), а все остальные коэффициенты b_{ns} пока неизвестны.

Докажем, что исследуемый ряд (31) формально удовлетворяет уравнению (30), если коэффициенты b_{ns} подчиняются рекуррентной цепочке уравнений

$$sb_{ns} = n[b_{n-1, s-3} + 2(\nu + s - 1)b_{n-2, s-2}], \quad n = 0, 1, \dots, \quad s = 2n, 2n+1, \dots, 3n, \quad (32)$$

в которой $b_{00} = 1$ и $b_{mt} = 0$, если $t < 2m$ или $t > 3m$.

Схема доказательства простая, но ее реализация – довольно трудоемкая и малоинтересная процедура. Поэтому ограничимся лишь описанием основных этапов. В уравнении (30) заменим функцию $y_{\nu}^{\pm}$ соответствующим рядом (31). Полученное уравнение запишем в виде полинома по целым степеням переменной τ . Каждый из коэффициентов этого полинома приравняем нулю. Затем, применив известные рекуррентные соотношения для функций Бесселя и их производных [16], убедимся в том, что каждое из полученных равенств, вырождается в тождество по переменной v , если коэффициенты b_{ns} подчиняются цепочке уравнений (32). Следовательно, при данном условии ряд (31) представляет собой формальное решение уравнения (30).

Исследуем коэффициенты b_{ns} . Считаем, что по определению $(-1)!! = 1$. Заметим, что все коэффициенты (26) удовлетворяют уравнениям (32). Положим в этих уравнениях $s = 3n$, а $n = m, m-1, m-2, \dots, 1$. В результате получим цепочку равенств

$$b_{n, 3n} = \frac{1}{3} b_{n-1, 3(n-1)} = \frac{1}{3} \cdot \frac{1}{3} b_{n-2, 3(n-2)} = \dots = \frac{1}{3^{n-1}} b_{13},$$

последнее из которых содержит коэффициент $b_{13} = 1/3$ согласно формулам (26). Следовательно, $b_{n, 3n} = 3^{-n}$ при любом $n = 1, 2, \dots$. Аналогичным способом, положив $s = 2n$, $n = m, m-1, \dots, 1$, из соотношений (26) и (32) получаем

$$b_{n, 2n} = \prod_{m=0}^{n-1} [(\nu - 1 + 2(n - m))] = \frac{(\nu + 2n - 1)!!}{(\nu - 1)!!}, \quad n = 1, 2, \dots$$

Докажем по индукции два утверждения: все коэффициенты b_{ns} положительные и при каждом n убывают с ростом s . В качестве первого этапа индукции заметим, что согласно формулам (26) эти утверждения верны при $n \leq 2$.

Докажем первое утверждение. Предположим, что $b_{n-1, s} > 0$ при некотором n и любом s , таком что $2(n-1) \leq s \leq 3(n-1)$. Тогда из цепочки уравнений (32) следует, что $b_{ns} > 0$ при любом целом s , удовлетворяющем условию $2n \leq s \leq 3n$.

Теперь докажем второе утверждение. Предположим, что $b_{n-1, s} > b_{n-1, s'}$ при некотором n и при $s < s'$. Сравним равенство (32) с равенством, полученным из

него заменой $s \mapsto s + 1$. Для этого последнее запишем как

$$b_{n,s+1} = \frac{n}{s+1} b_{n-1,s-2} + 2n \left(1 + \frac{\nu-1}{s+1} \right) b_{n-1,s-1}.$$

Согласно нашему предположению $b_{n-1,s-3} > b_{n-1,s-2}$ и $b_{n-1,s-2} > b_{n-1,s-1}$. Следовательно, $b_{n,s+1} < b_{ns}$ при любом s , что и требовалось показать.

Суммируя доказанные свойства всех коэффициентов b_{ns} , запишем цепочку неравенств

$$\frac{1}{3^n} = b_{n,3n} < b_{n,3n-1} < \dots < b_{n,2n+1} < b_{n,2n} = \frac{(\nu+2n-1)!!}{(\nu-1)!!}. \quad (33)$$

Следовательно, при данном n из всех коэффициентов b_{ns} , $s = 2n, 2n+1, \dots, 3n$, наибольшим является коэффициент $b_{n,2n}$. Это свойство окажется далее ключевым.

3.5. Свойства разложений регулярных функций Кулона по функциям Бесселя. Самое важное свойство разложений (9), (31) функций Кулона F_λ по функциям Бесселя заключается в их равномерной сходимости. Докажем и исследуем это свойство сначала в случае $\alpha = -1$, а затем в случае $\alpha = 1$.

Найдем мажоранту ряда (31) в случае $\alpha = -1$. Для этого рассмотрим ряд, все слагаемые которого равны модулям слагаемых исходного ряда (31). В этом ряде при каждом n заменим все коэффициенты b_{ns} наибольшим из них коэффициентом $b_{n,2n}$. Чтобы оценить сверху каждое слагаемое получившегося ряда, последовательно применим неравенство Ватсона [16]

$$|J_\mu(v)| \leq \frac{(v/2)^\mu}{\Gamma(\mu+1)}, \quad \mu \geq -\frac{1}{2}, \quad (34)$$

и два очевидных соотношения

$$\begin{aligned} \frac{1}{(\nu+2n+m)!} &\leq \frac{1}{(\nu+2n)!} \frac{1}{(\nu+2n+1)^m}, \\ \frac{(\nu+2n-1)!!}{(\nu-1)!!} \frac{1}{(\nu+2n)!} &= \frac{1}{\nu!} \prod_{m=0}^{n-1} \frac{1}{\nu+2n-2m} \leq \frac{1}{\nu!} \frac{1}{(\nu+2)^n}. \end{aligned}$$

В итоге получим следующую оценку:

$$|f_\lambda^-(v, q)| \leq \frac{1}{\nu!} \left(\frac{v}{2} \right)^\nu \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{\rho^2}{2(\nu+2)} \right)^n \frac{1}{n!} B_n(v).$$

Заменив в ней конечную сумму $B_n(v)$ табличной суммой [19] по формулам

$$B_n(v) \equiv \sum_{m=0}^n \left[\frac{v^2}{2(\nu+2n+1)} \right]^m \leq \sum_{m=0}^n t^m = \frac{1-t^{n+1}}{1-t}, \quad t \equiv \frac{v^2}{2(\nu+1)},$$

получим искомую мажоранту бесконечного ряда (31) в случае $\alpha = -1$.

Мажоранту этого ряда в случае $\alpha = 1$ построим аналогичным способом, но вместо неравенства Ватсона (34) используем оценки [18]

$$0 \leq I_\mu(v) \leq \frac{(v/2)^\mu}{\Gamma(\mu+1)} \operatorname{ch} v, \quad \mu > -\frac{1}{2}, \quad v \geq 0. \quad (35)$$

Итоговые соотношения, полученные в обоих случаях, представим в виде

$$|f_{\lambda}^{\pm}(v, q)| \leq \frac{1}{\nu!} \left(\frac{v}{2}\right)^{\nu} \frac{e^z - te^{zt}}{1-t} \begin{Bmatrix} \text{ch } v \\ 1 \end{Bmatrix}, \quad z \equiv \frac{\rho^2}{2(\nu+2)}. \quad (36)$$

В силу этой формулы бесконечные ряды $f_{\lambda}^{\pm}(v, q)$ сходятся равномерно по обоим неотрицательным аргументам v и q , если эти аргументы ограничены и $\nu = 2\lambda + 1 > 0$.

Выясним скорость такой сходимости. Для этого оценим разность между бесконечным рядом $f_{\lambda}^{\pm}(v, q)$ и его частичной суммой $f_{\lambda m}^{\pm}(v, q)$ порядка $m < \infty$, заданной формулой (25). Способом, использованным при доказательстве неравенств (36), получаем оценку остаточного слагаемого $R_{\lambda m}^{\pm}$ суммы (24):

$$|R_{\lambda m}^{\pm}(v, q)| = |f_{\lambda}^{\pm}(v, q) - f_{\lambda m}^{\pm}(v, q)| \leq \chi(v, q) \equiv \frac{1}{\nu! m!} \left(\frac{v}{2}\right)^{\nu} \frac{z^m}{1-t_m} [e^z - t_m^{m+1} e^{zt_m}] \begin{Bmatrix} \text{ch } v \\ 1 \end{Bmatrix}, \quad t_m \equiv \frac{v^2}{2(\nu+1+2m)}. \quad (37)$$

Из нее следует, что в пределе $\rho \rightarrow 0$ конечная сумма $f_{\lambda m}^{\pm}(v, q)$ также приближает ряд $f_{\lambda}^{\pm}(v, q)$ с точностью порядка $O(z^m) = O(\rho^{2m})$.

Вернемся к представлению (9) функции $F_{\lambda}(\rho, \pm|\eta|)$ через функцию $f_{\lambda}^{\pm}(v, q)$. Заменяя в нем функцию $f_{\lambda}^{\pm}$ бесконечным рядом (31), получим искомое разложение функции Кулона F_{λ} по функциям Бесселя:

$$F_{\lambda}(\rho, \pm|\eta|) = q^{\lambda+1} C_{\lambda}(\eta) \nu! \frac{v}{2} \sum_{n=0}^{\infty} \left(-\frac{q^2}{8}\right)^n \frac{1}{n!} \sum_{s=2n}^{3n} b_{ns} v^s \begin{Bmatrix} (-1)^s I_{\nu+s}(v) \\ J_{\nu+s}(v) \end{Bmatrix}. \quad (38)$$

Оценим модуль разности этого ряда и его частичной суммы $F_{\lambda m}$, $m < \infty$, определенной формулой (28). Применив равенства (27) и (37), находим

$$|F_{\lambda}(\rho, \pm|\eta|) - F_{\lambda m}(\rho, \pm|\eta|)| \leq q^{\lambda+1} C_{\lambda}(\eta) \nu! \frac{v}{2} \chi(v, q). \quad (39)$$

Следовательно, в пределе $q \rightarrow +0$ функция $F_{\lambda m}$ приближает функцию F_{λ} в области $\rho < \infty$ с абсолютной точностью $O(q^{\lambda+1} C_{\lambda}(\eta) \rho^{2m})$.

Для полноты опишем способ численного анализа качества приближения

$$F_{\lambda}(\rho, \pm|\eta|) \approx F_{\lambda m}(\rho, \pm|\eta|). \quad (40)$$

Начнем с обсуждения функции

$$D_{\lambda m}(\rho, \pm|\eta|, \varepsilon) \equiv \lg \frac{|F_{\lambda}(\rho, \pm|\eta|) - F_{\lambda m}(\rho, \pm|\eta|)| + \varepsilon}{|F_{\lambda}(\rho, \pm|\eta|)| + \varepsilon}, \quad \varepsilon > 0. \quad (41)$$

Функция $D_{\lambda m}$ непрерывна по любому своему аргументу, равна нулю в точке $\rho = 0$ и имеет локальный максимум или локальный минимум в той точке, в которой функция F_{λ} или разность функций F_{λ} и $F_{\lambda m}$ обращается в нуль. В пределе $\varepsilon \rightarrow +0$ обсуждаемая функция $D_{\lambda m}$ есть логарифм относительной точности аппроксимации (40). Следовательно, при достаточно малом, но положительном значении ε функция $D_{\lambda m}$ близка к такому логарифму.

Наглядное представление об абсолютной и относительной точности аппроксимации (40) в случаях $2\lambda = -1$, $\alpha = \pm 1$ и $q = 0.1, 0.5$ дают рис. 1 и рис. 2. На рис. 1 изображены графики функции F_{λ} и аппроксимирующих ее функций $F_{\lambda m}$, $m = 0, 2, 5$,

Рис. 1. График функции $F_{-1/2}(\rho, \alpha|\eta|)$ – сплошная кривая и графики функций $F_{-1/2,m}(\rho, \alpha|\eta|)$ для $m = 0$, $m = 2$ и $m = 5$ – соответственно штриховая, штрихпунктирная и пунктирная кривые. Выбраны следующие значения параметров: $\alpha = 1$, $q = 0.5$ (а); $\alpha = 1$, $q = 0.1$ (б); $\alpha = -1$, $q = 0.5$ (в) и $\alpha = -1$, $q = 0.1$ (г).

заданных формулами (28). На рис. 2 представлены графики функции $D_{\lambda m}$, рассчитанные по формулам (41) при $m = 0, 2, 5$ и малом значении $\varepsilon = 10^{-12}$. Согласно рис. 1 и рис. 2 абсолютная и относительная точности аппроксимации (40) соответственно на отрезке $0 \leq \rho \leq 10$ и на отрезке $0 \leq \rho \leq 5$ улучшаются с ростом m при фиксированном значении переменной q и с уменьшением значения этой переменной при данном m .

Уместным представляется следующее замечание. При выводе неравенств (37) и (39) все коэффициенты b_{ns} заменялись наибольшим коэффициентом $b_{n,2n}$, а для функций Бесселя J_μ и I_μ использовались оценки (34) и (35), которые становятся излишне завышенными при больших значениях аргумента v . Поэтому тем же недостатком обладают и правые части мажорантных оценок (37) и (39) скорости сходимости рядов (31) и (38). Этот вывод также подтверждают результаты численного анализа, указывающие на сходимость этих рядов по числу m их слагаемых не только при малых, но и при весьма больших значениях аргумента ρ .

Рис. 2. Графики функции $D_{-1/2,m}(\rho, \alpha|\eta)$ для $m = 0$, $m = 2$ и $m = 5$ – соответственно штриховая, штрихпунктирная и пунктирная кривые. Различные рисунки отвечают тем же различным значениям параметров α и q , что и на рис. 1.

Кроме установленной выше равномерной сходимости, разложение (38) функции Кулона F_λ полуцелого порядка по функциям Бесселя обладает двумя особыми свойствами. Во-первых, согласно формулам (26) и (32) все коэффициенты b_{ns} этого разложения зависят только от их номеров n , s и порядка λ . Во-вторых, зависимость любого слагаемого обсуждаемого разложения от переменной q и от переменной v выделяется в явном виде и представляется произведением четной степени аргумента q и соответствующей функции Бесселя аргумента v . Известные разложения [17] функций Кулона $F_\ell(\rho, \alpha|\eta)$ целого порядка $\ell = 0, 1, \dots$ по функциям Бесселя–Клиффорда в случае $\alpha = 1$ или по сферическим функциям Бесселя в случае $\alpha = -1$ не обладают аналогичными свойствами, потому что коэффициенты b_k таких разложений зависят от переменной η , но в явном виде эта зависимость до сих пор не выписана.

Если $2\lambda \geq -1$, то для исходного уравнения Кулона (5) точка $\rho = 0$ является регулярной. Поэтому все без исключения представления (8)–(10) и (38) регулярного в этой точке решения F_λ такого уравнения остаются в силе при любых вещественных $\lambda \geq -1/2$, в том числе и в случае $\lambda = \ell$, где ℓ – целое число.

Следует отметить, что в частном случае $\alpha = 1 > 0$ и $\lambda = \ell = 0$ сумма слагаемых разложения (38) с номерами $n = 0, 1, 2$ приобретает вид давно известного приближения, предложенного Фрёбергом в работе [20].

4. НИЗКОЭНЕРГЕТИЧЕСКИЕ АСИМПТОТИКИ НЕРЕГУЛЯРНЫХ ФУНКЦИЙ КУЛОНА

В настоящем разделе исследования выполняются по той же схеме, что и в предыдущем, но объектами исследования являются нерегулярные в точке $\rho = 0$ решения уравнения Кулона (5) – функции $G_\lambda(\rho, \eta)$ и $\Theta_\lambda(\rho, \eta)$. В п. 4.1 приводятся определения [11] и известные разложения [12] этих функций в бесконечные ряды, содержащие целые степени переменной v и ее логарифм. Пункт 4.2 целиком посвящен выводам и пояснениям вспомогательных формул. В п. 4.3 эти формулы используются для представления функции Θ_λ в виде ряда Маклорена по переменной q с остаточным слагаемым $O(q^4)$. В п. 4.4 для функции Θ_λ выводится формальное разложение по функциям Бесселя первого и второго рода.

4.1. Представления и свойства нерегулярных функций Кулона. Следуя работе [11], нерегулярной вещественной волновой функцией Кулона полуцелого порядка $\lambda = -1/2, 1/2, \dots$ мы считаем решение $G_\lambda(\rho, \eta)$ уравнения (5), удовлетворяющее граничным условиям

$$G_\lambda(\rho, \eta) = \begin{cases} O(\sqrt{\rho} \ln \rho), & 2\lambda = -1, \\ O(\rho^{-\lambda}), & 2\lambda > -1, \end{cases} \quad \rho \rightarrow 0,$$

$$G_\lambda(\rho, \eta) = \cos \left[\rho - \eta \ln(2\rho) - \pi \frac{\lambda}{2} + \delta_\lambda^c(\eta) \right] + O\left(\frac{1}{\rho}\right), \quad \rho \rightarrow \infty.$$

Функцию G_λ можно представить в виде суммы [12]:

$$G_\lambda(\rho, \eta) = -\frac{h^c(\eta)}{C_{-1/2}^2(\eta)} F_\lambda(\rho, \eta) + \frac{1}{q^\lambda C_\lambda(\eta)} \Theta_\lambda(\rho, \eta). \quad (42)$$

Эта сумма содержит неаналитическую функцию $h^c \equiv \operatorname{Re} \Psi(1/2 + i\eta) - \ln |\eta|$ и функцию Θ_λ , которую можно записать в виде произведения,

$$\Theta_\lambda(\rho, \pm|\eta|) = \frac{v}{(2\lambda + 1)!} \theta_\lambda^\pm(v, q), \quad \rho = qx = q \frac{v^2}{4}, \quad \eta = \frac{\alpha}{2q}. \quad (43)$$

В этом произведении множитель $\theta_\lambda^\pm(v, q)$ есть ряд [12]

$$\begin{aligned} \theta_\lambda^\pm(v, q) \equiv & -\frac{1}{2} [(2\lambda + 1)!]^2 P_\lambda(q^2) e^{iqv^2/4} \times \\ & \times \left(\frac{v}{2}\right)^\nu \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{(\nu + n)! n!} \left(\lambda + 1 \pm \frac{i}{2q}\right)_n \left(-2iq \frac{v^2}{4}\right)^n \times \\ & \times \left[\sum_{p=0}^{n+\lambda-1/2} \frac{1}{n + \lambda - p \pm i/2q} - \Psi(n + 1) - \Psi(\nu + n + 1) + 2 \ln \frac{v}{2} \right] + \\ & + \frac{1}{2} e^{iqv^2/4} \left(-\frac{2}{v}\right)^\nu \sum_{n=0}^{\nu-1} \frac{(\nu - n - 1)!}{n!} \left(-\lambda \pm \frac{i}{2q}\right)_n \left(2iq \frac{v^2}{4}\right)^n, \end{aligned} \quad (44)$$

где полином P_λ степени $\lambda + 1/2$ от переменной q^2 определяется равенством

$$P_\lambda(q^2) = q^{2\lambda+1} \left[\frac{C_\lambda(\eta)}{C_{-1/2}(\eta)} \right]^2 = \frac{1}{[(2\lambda+1)!]^2} \times \\ \times \left\{ 1 + \frac{2}{3} \lambda(\lambda+1)(2\lambda+1)q^2 \left[1 + \frac{1}{15}(\lambda-1)(2\lambda-1)(5\lambda+6)q^2 + \dots \right] \right\}. \quad (45)$$

В (44) последняя сумма полагается равной нулю в случае $2\lambda = -1$, $\nu \equiv 2\lambda + 1 = 0$.

Перечислим важные свойства функции $\theta_\lambda^\pm$. Вследствие представления (44) в пределе $v \rightarrow 0$ эта функция неограниченно возрастает при $q < \infty$:

$$\theta_\lambda^\pm(v, q) \sim \begin{cases} -\ln \frac{v}{2}, & 2\lambda = -1, \\ \left(\frac{2}{v}\right)^{2\lambda+1} \frac{(2\lambda)!}{2}, & 2\lambda > -1, \end{cases} \quad v \rightarrow 0, \quad q < \infty. \quad (46)$$

Так как функция Θ_λ удовлетворяет исходному уравнению Кулона (5) и связана с функцией $\theta_\lambda^\pm$ равенством (43), то функция $\theta_\lambda^\pm$ является нерегулярным решением $y_\nu^\pm$, $\nu = 2\lambda + 1$, уравнения (30). Действительно, функция $\theta_\lambda^\pm$ имеет расходящуюся асимптотику (46), а уравнение Кулона (5) сводится к уравнению (30) подстановкой

$$u_\lambda(\rho, \pm|\eta|) = \Theta_\lambda(\rho, \pm|\eta|) = \frac{v}{(2\lambda+1)!} \theta_\lambda^\pm(v, q), \quad y_\nu^\pm(v, q) = \theta_\lambda^\pm(v, q).$$

В отличие от функции G_λ обе функции Θ_λ и $\theta_\lambda^\pm$ являются четными функциями волнового числа q . Это свойство и вспомогательные соотношения, перечисленные в следующем пункте, окажутся ключевыми в п. 4.3 и 4.4.

4.2. Вспомогательные соотношения. Разложение (44) функции $\theta_\lambda^\pm$ содержит уже исследованное в п. 3.2 произведение функций $(\lambda + 1 + i\alpha/2q)_n$ и $(-2iqv^2/4)^n$ и произведение функций $(-\lambda + i\alpha/2q)_n$ и $(2iqv^2/4)^n$. Построим ряд Маклорена для последнего произведения. Для этого используем определение (13) полинома $A_n(t; \lambda)$ по переменной $t = -2i\alpha q$ и равенства

$$\left(-\lambda + \frac{i\alpha}{2q}\right)_n \left(2iq \frac{v^2}{4}\right)^n = \left(-\alpha \frac{v^2}{4}\right)^n \prod_{j=1}^n [(-\lambda - 1)t + j] = \\ = \left(-\alpha \frac{v^2}{4}\right)^n A_n(t; -\lambda - 1) = \left(-\alpha \frac{v^2}{4}\right)^n \left(1 + \sum_{p=1}^4 a_p q^p + \dots\right). \quad (47)$$

Эти равенства содержат коэффициенты a_p полинома $A_n(t; -\lambda - 1)$. Представления таких коэффициентов через номер n и индекс λ можно получить из формул (18) для коэффициентов a_p полинома $A_n(t; \lambda)$ заменой $\lambda \mapsto -\lambda - 1$, при которой сумма $a = n + (2\lambda + 1)$ перейдет в разность $a = n - (2\lambda + 1)$.

В разложении (44) функции $\theta_\lambda^\pm$ имеется конечная сумма $\tilde{S}_n(q; \lambda)$ по индексу p . Покажем, что эту сумму можно представить в следующем виде:

$$\begin{aligned} \tilde{S}_n(q; \lambda, \alpha) &\equiv \sum_{p=0}^{n+\lambda-1/2} \frac{1}{n+\lambda-p+i\alpha/2q} = \\ &= -i\alpha(2n+\nu)q + \frac{1}{2}(2n+\nu)^2q^2 - \sum_{m=3}^{\infty} \left[\sum_{p=0}^{n+\lambda-1/2} (n+\lambda-p)^{m-1} \right] (2i\alpha q)^m. \end{aligned} \quad (48)$$

Введем переменную $t \equiv -2i\alpha q$. В терминах этой переменной функция $\tilde{S}_n$ записывается как

$$\tilde{S}_n(q; \lambda, \alpha) = \sum_{p=0}^{n+\lambda-1/2} \frac{t}{n+\lambda-p+t},$$

поэтому имеют место равенства

$$\partial_t^m \tilde{S}_n(q; \lambda, \alpha) = (-1)^{m+1} m! \sum_{p=0}^{n+\lambda-1/2} \frac{(n+\lambda-p)^{m-1}}{[(n+\lambda-p)t+1]^{m+1}}, \quad m \geq 1.$$

Благодаря этим равенствам в точке $t = 0$ исследуемая функция $\tilde{S}_n$ и все ее производные $\partial_t^m \tilde{S}_n$ для $m \leq 4$ сводятся к табличным суммам (16). Используя их, построим ряд Маклорена для функции $\tilde{S}_n$ по переменной t , а затем перейдем к переменной $q = i\alpha t/2$. В итоге получим формулу (48), которую и требовалось доказать.

Напомним известные соотношения [16]: свойство пси-функции

$$\Psi(t+n) = \sum_{p=1}^n \frac{1}{t+p-1} + \Psi(t) \quad (49)$$

и разложения нерегулярных функций Бесселя $K_\mu(v)$ и $Y_\mu(v)$ целого порядка μ

$$\begin{aligned} \left\{ \begin{array}{l} 2(-1)^\mu K_\mu(v) \\ -\pi Y_\mu(v) \end{array} \right\} &= \left(\mp \frac{v}{2} \right)^\mu \sum_{n=0}^{\infty} [\Psi(n+1) + \Psi(\nu+n+1)] \frac{(\pm v^2/4)^n}{(\nu+n)! n!} - \\ &- 2 \ln \frac{v}{2} \left\{ \begin{array}{l} I_\mu(v) \\ J_\mu(v) \end{array} \right\} + \left(\frac{2}{v} \right)^\mu \sum_{n=0}^{\mu-1} \frac{(\mu-n-1)!}{n!} \left(\pm \frac{v^2}{4} \right)^n. \end{aligned} \quad (50)$$

При $\mu = 0$ конечные суммы в этих разложениях полагаются равными нулю.

4.3. Ряды Маклорена для нерегулярных функций Кулона. Перейдем к выводу разложения функции $\theta_\lambda^\pm$, заданной формулой (44), в ряд Маклорена по переменной q . Согласно этой формуле функция $\theta_\lambda^\pm$ содержит бесконечный ряд S_1 и конечную сумму S_2 . Модуль суммы S_2 неограниченно возрастает только в случае $v \rightarrow +0$. Поэтому далее придется положить $v \neq 0$. Все производные суммы S_2 по переменной q непрерывны при $q < \infty$. Способом, изложенным в п. 3.2, нетрудно показать, что таким же свойством обладают и производные $\partial_q^m S_1$ ряда S_1 порядка $m \leq 4$. Следовательно, функцию $\theta_\lambda^\pm$ можно представить рядом Маклорена по переменной q с остаточным слагаемым $R_{\lambda m} = O(q^m)$ при $m = 4$ в области $v \in (0, \infty)$, $q \in [0, \infty)$. Осталось построить такой ряд.

Предлагаемое построение принципиально ничем не отличается от подробно изложенного в п. 3.3 вывода разложений (24)–(26) для функции $f_\lambda^\pm$. Поэтому ограничимся только перечислением основных преобразований.

При любом λ в качестве исходного используем разложение (44) функции $\theta_\lambda^\pm$. Заменим в нем экспоненциальную функцию ее рядом Маклорена (23). Затем применим формулы (19) и (47), используем равенство (48) и свойство пси-функции (49). В полученном разложении выделим слагаемое, не зависящее от q , и слагаемые, пропорциональные q^2 и q^4 . Бесконечные ряды по переменной v , содержащиеся в таких слагаемых, просуммируем в функции Бесселя первого и второго рода. Для этого используем соответствующие ряды (21) и (50) и определения (26) коэффициентов b_{ns} . В результате получим искомое разложение функции $\theta_\lambda^\pm(v, q)$ в ряд Маклорена при $q \in [0, \infty)$ и $v \in (0, \infty)$:

$$\begin{aligned} \theta_\lambda^\pm(v, q) = & \sum_{n=0}^1 \left(-\frac{q^2}{8} \right)^n \frac{1}{n!} \sum_{s=2n}^{3n} (-1)^s b_{ns} v^s \left\{ \frac{K_{\nu+s}(v)}{(-\pi/2)Y_{\nu+s}(v)} \right\} + \\ & + \frac{2}{3} \lambda(\lambda+1)(2\lambda+1) q^2 \left\{ \frac{K_\nu(v)}{(-\pi/2)Y_\nu(v)} \right\} - \frac{q^2}{12} b_{00} \left\{ \frac{I_\nu(v)}{J_\nu(v)} \right\} + R_{\lambda 4}(v, q) \end{aligned} \quad (51)$$

с остаточным слагаемым $R_{\lambda 4} = O(q^4)$.

Данный ряд в отличие от ряда Маклорена (24)–(26) для функции $f_\lambda^\pm$ содержит нерегулярные функции Бесселя наряду с регулярными. Поясним, почему это так. В исходном представлении (44) функции $\theta_\lambda^\pm$ имеется конечная сумма по индексу p и алгебраическая сумма двух пси-функций и логарифмической функции. Первая и вторая из этих сумм при выводе ряда Маклорена (51) для функции $\theta_\lambda^\pm$ порождают соответственно разложения (21) и (50) регулярных и нерегулярных функций Бесселя.

Ряды Маклорена для функций G_λ и Θ_λ с остаточными слагаемыми $O(q^4)$ построить нетрудно. Для этого нужно в правых частях равенств (42) и (43) заменить функции F_λ и $\theta_\lambda^\pm$ соответствующими суммами (27), (28) и (51).

4.4. Разложения нерегулярных функций Кулона по функции Бесселя.

Наша следующая задача – представить функцию $\theta_\lambda^\pm(v, q)$ в виде такого бесконечного ряда по четным степеням q^{2n} аргумента q , у которого частичная сумма порядка $n = 2$ совпадает с правой частью равенства (51). Решение этой задачи начнем со следующих предположений. Пусть все коэффициенты b_{ns} подчинены цепочке рекуррентных уравнений (32), а ряд

$$g_\lambda^\pm(v, q) \equiv \sum_{n=0}^{\infty} \left(-\frac{q^2}{8} \right)^n \frac{1}{n!} \sum_{s=2n}^{3n} (-1)^s b_{ns} v^s \left\{ \frac{K_{\nu+s}(v)}{(-\pi/2)Y_{\nu+s}(v)} \right\} \quad (52)$$

равномерно сходится при $0 \leq q < \infty$ и $0 < v < \infty$.

Выведем основные свойства этого ряда. Сначала найдем старшее слагаемое его асимптотики в пределе $v \rightarrow 0$. Для этого в представлении (52) заменим все функции Бесселя старшими слагаемыми их разложений (50) и в случае $2\lambda = -1$ получим формулу

$$g_\lambda^\pm(v, q) = -\ln \frac{v}{2} + \frac{1}{2} \sum_{n=0}^{\infty} \left(-\frac{q^2}{8} \right)^n \frac{1}{n!} \sum_{s=2n}^{3n} (-2)^s b_{ns} + O(v^2 \ln v), \quad v \rightarrow 0, \quad (53)$$

а в случае $2\lambda \geq 1$ – формулу

$$g_{\lambda}^{\pm}(v, q) = 2 \left(\frac{2}{v} \right)^{\nu} \sum_{n=0}^{\infty} \left(-\frac{q^2}{8} \right)^n \frac{1}{n!} \sum_{s=2n}^{3n} (-2)^s b_{ns} (\nu + s - 1)! + O(v^{-\nu+1}), \quad v \rightarrow 0. \quad (54)$$

Теперь в уравнении (30) заменим функцию $y_{\nu}^{\pm}$ рядом $g_{\lambda}^{\pm}$. Используя для функций Бесселя K_{μ} и Y_{μ} и их производных известные рекуррентные соотношения [16], убедимся в том, что ряд $g_{\lambda}^{\pm}$ является решением уравнения (30). Согласно асимптотикам (53) и (54) это решение нерегулярно в точке $v = 0$ и поэтому линейно не зависит от уже исследованного в п. 3.3–3.5 регулярного решения $f_{\lambda}^{\pm}$ уравнения (30).

Перейдем к построению решения $\theta_{\lambda}^{\pm}$ уравнения (30) в виде разложения по функциям Бесселя. Это уравнение имеет два линейно независимых решения $f_{\lambda}^{\pm}$ и $g_{\lambda}^{\pm}$, и любое другое решение можно представить в виде линейной комбинации этих решений с коэффициентами $c_{\lambda}^{\pm}$ и $d_{\lambda}^{\pm}$, которые в общем случае зависят от q . Представим искомое решение $\theta_{\lambda}^{\pm}$ в виде такой комбинации,

$$\theta_{\lambda}^{\pm}(v, q) = c_{\lambda}^{\pm}(q) f_{\lambda}^{\pm}(v, q) + d_{\lambda}^{\pm}(q) g_{\lambda}^{\pm}(v, q), \quad (55)$$

и приступим к определению коэффициентов $c_{\lambda}^{\pm}$ и $d_{\lambda}^{\pm}$.

Сначала найдем функцию $d_{\lambda}^{\pm}(q)$. Для этого применим самый простой способ: в соотношении (55) перейдем к пределу $v \rightarrow 0$, $q < \infty$. В этом пределе согласно представлению (10) функция $f_{\lambda}^{\pm}$ ограничена, а функции $\theta_{\lambda}^{\pm}$ и $g_{\lambda}^{\pm}$ неограниченно возрастают в соответствии с формулами (46) и (53), (54). Поэтому в обсуждаемом пределе соотношение (55) вырождается в уравнение относительно неизвестной функции $d_{\lambda}^{\pm}$. Это уравнение не содержит функции $c_{\lambda}^{\pm}$ и имеет единственное решение:

$$d_{\lambda}^{\pm}(q) \equiv 1, \quad 2\lambda = -1; \\ d_{\lambda}^{\pm}(q) = \left\{ \sum_{n=0}^{\infty} \left(-\frac{q^2}{8} \right)^n \frac{1}{n!} \sum_{s=2n}^{3n} (-2)^s b_{ns} \frac{(2\lambda + s)!}{(2\lambda)!} \right\}^{-1}, \quad 2\lambda > -1. \quad (56)$$

Теперь найдем функцию $c_{\lambda}^{\pm}$. Согласно формулам (21), (31), (44), (50) и (52) левая и правая части соотношения (55) являются бесконечными разложениями по системе линейно независимых функций v^n , $v^m \ln v$ с целыми номерами n и m . Следовательно, это соотношение верно тогда и только тогда, когда каждое слагаемое $s_n(q)v^n$ или $t_n(q)v^m \ln v$ разложения (44) функции $\theta_{\lambda}^{\pm}$ равно соответствующему слагаемому $\tilde{s}_n(q)v^n$ или $\tilde{t}_n(q)v^m \ln v$ разложения функции $c_{\lambda}^{\pm} f_{\lambda}^{\pm} + d_{\lambda}^{\pm} g_{\lambda}^{\pm}$. В частности, должно выполняться равенство $s_n(q)v^n = \tilde{s}_n(q)v^n$ с номером $n = \nu$. Из этого условия следует представление функции $c_{\lambda}^{\pm}$ через уже найденную функцию $d_{\lambda}^{\pm}$: в случае $2\lambda = -1$ имеем

$$c_{\lambda}^{\pm}(q) = -\frac{1}{2} \sum_{n=1}^{\infty} \left(-\frac{q^2}{8} \right)^n \frac{1}{n!} \sum_{s=2n}^{3n} (-2)^s b_{ns} (s-1)!,$$

а в случае $2\lambda > -1$

$$2c_{\lambda}^{\pm}(q) = [(2\lambda + 1)!]^2 [P_{\lambda}(q^2) - d_{\lambda}^{\pm}(q)] [\Psi(1) + \Psi(2\lambda + 2)] - \\ - [(2\lambda + 1)!]^2 P_{\lambda}(q^2) \sum_{p=0}^{\lambda-1/2} \frac{1}{\lambda - p \pm i/2q} + (iq)^{2\lambda+1} (2\lambda)! \sum_{n=0}^{2\lambda} \frac{2^n}{n!} \left(-\lambda \pm \frac{i}{2q} \right)_n.$$

Обсудим теперь свойства функций $c_\lambda^\pm(q)$ и $d_\lambda^\pm(q)$. Согласно полученным выше представлениям эти функции являются четными, удовлетворяют равенствам $c_\lambda^+(q) = c_\lambda^-(q)$, $d_\lambda^+(q) = d_\lambda^-(q)$ и имеют следующие асимптотики:

$$c_\lambda^\pm(q) = -\frac{q^2}{12} + O(q^2), \quad d_\lambda^\pm(q) = 1 + \frac{2}{3}\lambda(\lambda+1)(2\lambda+1)q^2 + O(q^4), \quad q \rightarrow +0.$$

Заметим, что благодаря таким асимптотикам и определению (45) полинома P_λ из представления (55) функции θ_λ следует ее ряд Маклорена (51). Тем самым мы решили задачу, поставленную в начале настоящего пункта.

Теперь выведем низкоэнергетическую асимптотику нерегулярной функции Кулона Θ_λ , заданную рядом (44). Символами $f_{\lambda m}^\pm$ и $g_{\lambda m}^\pm$ обозначим частичные суммы порядка m для бесконечных рядов (31) и (52). Введем функции $\theta_{\lambda m}^\pm$ и $\Theta_{\lambda m}$ соотношениями

$$\theta_{\lambda m}(v, q) \equiv c_\lambda(q)f_{\lambda m}^\pm(v, q) + d_\lambda(q)g_{\lambda m}^\pm(v, q), \quad \Theta_{\lambda m}(\rho, \pm|\eta|) \equiv \frac{v}{(2\lambda+1)!}\theta_{\lambda m}^\pm(v, q).$$

Используя эти определения, запишем нерегулярную функцию Кулона Θ_λ в низкоэнергетическом пределе как

$$\Theta_\lambda(\rho, \pm|\eta|) = \Theta_{\lambda m}(\rho, \pm|\eta|) + O(q^{2m+2}), \quad q \rightarrow +0, \quad 0 < v < \infty, \quad (57)$$

где первое слагаемое задано формулой

$$\begin{aligned} \Theta_{\lambda m}(\rho, \pm|\eta|) = & \frac{v}{(2\lambda+1)!} \sum_{n=0}^m \left(-\frac{q^2}{8}\right)^n \frac{1}{n!} \times \\ & \times \sum_{s=2n}^{3n} (-1)^s b_{ns} v^s \left\{ (-1)^s c_\lambda^+(q) I_{\nu+s}(v) + d_\lambda^+(q) K_{\nu+s}(v) \right. \\ & \left. - (-1)^s c_\lambda^-(q) J_{\nu+s}(v) + d_\lambda^-(q) (-\pi/2) Y_{\nu+s}(v) \right\}. \end{aligned} \quad (58)$$

Сформулируем основной результат настоящего пункта: если ряд (52) сходится равномерно, то функция $\Theta_{\lambda m}$, $m > 2$, является низкоэнергетической асимптотикой нерегулярной функции Кулона Θ_λ .

Доказать равномерную сходимость этого ряда не удалось из-за отсутствия в справочной литературе [16]–[18] равномерных по аргументу v мажорантных оценок функций $Y_\mu(v)$ и $K_\mu(v)$. Итоги численного сравнения функций Θ_λ , $2\lambda = \pm 1, 3$, с функциями $\Theta_{\lambda m}$, $m = 0, 5, 10$, проведенного по методике, изложенной в п. 3.5, подтверждают справедливость приближения $\Theta_\lambda \approx \Theta_{\lambda m}$ при $0 < v < \infty$ и $q \rightarrow +0$ и указывают на улучшение точности этого приближения при увеличении числа m .

Следует отметить, что предложенный в настоящем пункте способ разложения нерегулярных функций Кулона Θ_λ полуполого порядка λ по функциям Бесселя применим и в случае целых значений $\lambda = \ell$, где $\ell = 0, 1, \dots$.

5. НИЗКОЭНЕРГЕТИЧЕСКАЯ АСИМПТОТИКА ВОЛНОВОЙ ФУНКЦИИ

В работе [7] показано, что уравнение Шредингера (1) имеет точное решение

$$\Psi^c(\rho, \varphi, \eta) = C(\eta) e^{i\rho \cos \varphi} \Phi(-i\eta, 1/2, \xi), \quad \xi \equiv 2i\rho \sin^2 \frac{\varphi}{2}, \quad (59)$$

где функция $C(\eta)$ определена равенством

$$C(\eta) = \frac{\Gamma(1/2 + i\eta)}{\Gamma(1/2)} e^{-\pi\eta/2}. \quad (60)$$

Как пояснялось в работе [11], функция Ψ^c , заданная формулами (59), (60), является физически приемлемой волновой функцией двумерного кулоновского рассеяния квантовой частицы неподвижным силовым центром. В п. 5.1 и 5.2 мы получим в явном виде асимптотику функции Ψ^c в пределе $q \rightarrow +0$, сохранив множители $C(\eta)$ и $e^{i\rho \cos \varphi}$. Понятно, что для решения такой задачи достаточно заменить в формуле (59) функцию Куммера ее рядом Маклорена по переменной q .

5.1. Приближение волновой функции конечной суммой ряда Маклорена. Построим ряд Маклорена методом, предложенным в п. 3.2. Будем использовать переменную $w \equiv \sqrt{2\xi/iq}$ и прежние обозначения функций Бесселя (21) первого рода $Z_\mu^+ \equiv I_\mu$, $Z_\mu^- \equiv J_\mu$. Применив известные равенства [16]

$$\left(\frac{1}{2}\right)_n = \frac{\Gamma(1/2 + n)}{\Gamma(1/2)} = \frac{\Gamma(1/2 + n)}{\sqrt{\pi}},$$

получим для исследуемой функции Куммера представление в виде ряда:

$$\Phi(-i\alpha|\eta|, 1/2; \xi) = \sqrt{\pi} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-i\alpha/2q)_n}{\Gamma(1/2 + n) n!} \left(2iq \frac{w^2}{4}\right)^n, \quad \eta = \frac{\alpha}{2q}, \quad \xi = iq \frac{w^2}{2}. \quad (61)$$

Каждое слагаемое этого ряда содержит произведение символа Похгаммера и четной степени переменной w . Если $t = -2i\alpha q$, а $A_n(t; \lambda)$ – полином (13), то для такого произведения верна цепочка равенств

$$\begin{aligned} \left(-\frac{i\alpha}{2q}\right)_n \left(2iq \frac{w^2}{4}\right)^n &= \left(\alpha \frac{w^2}{4}\right)^n \prod_{j=1}^n \left[(j-1)(-t) + 1\right] = \\ &= \left(\alpha \frac{w^2}{4}\right)^n A_n(-t, \lambda)|_{\lambda=-1} = \left(\alpha \frac{w^2}{4}\right)^n \left[1 + \sum_{j=1}^4 a_j q^j + \dots + (n-1)! (2i\alpha q)^{n-1}\right], \end{aligned} \quad (62)$$

в которой коэффициенты a_j выражаются через номер n и произведение $a = n(n-1)$ с помощью следующих формул:

$$\begin{aligned} a_1 &= i\alpha a, & a_2 &= -\frac{a}{6}(n-2)(3n-1), & a_3 &= -i\alpha \frac{a^2}{6}(n-2)(n-3), \\ a_4 &= \frac{a}{360}(n-2)(n-3)(n-4)(15n^3 - 30n^2 + 5n + 2). \end{aligned} \quad (63)$$

Действительно, полином $A_n(-t; \lambda)|_{\lambda=-1}$ получается из полинома $A_n(t; \lambda)$ заменой $\alpha \mapsto -\alpha$ и $\lambda \mapsto -1$, а после такой замены коэффициенты (18) полинома $A_n(t; \lambda)$ становятся коэффициентами (63) полинома $A_n(-t; \lambda)|_{\lambda=-1}$.

Теперь преобразуем ряд (61). Используем равенства (20) с индексом $\nu = -1/2$, разложения функций Бесселя $Z_\mu^\pm$ в степенные ряды (21) и формулы (62), (63). В результате получим искомый ряд Маклорена:

$$\begin{aligned} \Phi(\mp i|\eta|, 1/2; \xi) = \sqrt{\pi} \left(\frac{w}{2} \right)^{1/2} \left\{ Z_{-1/2}^\pm(w) \pm \left(i \frac{q}{2} \right) \frac{w}{2} Z_{3/2}^\pm(w) + \right. \\ \left. + \left(i \frac{q}{2} \right)^2 w^3 \left[\pm \frac{2}{3} Z_{5/2}^\pm(w) + \frac{w}{8} Z_{7/2}^\pm(w) \right] - \right. \\ \left. - \left(i \frac{q}{2} \right)^3 w^4 \left[\pm Z_{7/2}^\pm(w) + \frac{w}{3} Z_{9/2}^\pm(w) \pm \frac{w^2}{48} Z_{11/2}^\pm(w) \right] + R_4^\pm(w, q) \right\}. \end{aligned} \quad (64)$$

Согласно выводам, сформулированным в конце п. 3.2, остаток $R_4^\pm$ этого ряда убывает, как $O(q^4)$, если $q \rightarrow +0$ и $w < \infty$.

При тех же условиях формула, полученная заменой в произведении (59) функции Куммера правой частью равенства (63), есть низкоэнергетическая асимптотика волновой функции Ψ^c . Обсудим физически интересные следствия такой асимптотики.

Первое следствие заключается в том, что правая часть равенства

$$\lim_{q \rightarrow +0} \frac{\Psi^c(\rho, \varphi, \pm|\eta|)}{C(\eta)e^{i\rho \cos \varphi}} = \sqrt{\pi} \left(\frac{w}{2} \right)^{1/2} Z_{-1/2}^\pm(w) \quad (65)$$

является точным и физически приемлемым решением уравнения Шредингера (1) при нулевой энергии квантовой частицы p_1 .

Используя определение (60) функции $C(\eta)$ и предельное соотношение (65), выведем еще два следствия: в точке $r = 0$ волновая функция Ψ^c удовлетворяет равенствам

$$\Psi^c(\rho, \varphi, \eta) = C(\eta), \quad |\Psi^c(\rho, \varphi, \eta)|^2 = C^2(\eta) = \frac{e^{-\pi\eta}}{\text{ch}(\pi\eta)};$$

эти равенства порождают следующие приближения при $r = 0$ и $q \ll 1$:

$$|\Psi^c(\rho, \varphi, \pm|\eta|)|^2 \approx 2 \begin{cases} e^{-2\pi\eta}, \\ 1. \end{cases}$$

Полученные приближения означают, что в пределе нулевой энергии в точке $r = 0$ квадрат модуля волновой функции Ψ^c квантовой частицы p_1 быстро сходится к нулю в случае кулоновского отталкивания и имеет конечный ненулевой предел, равный двум, в случае кулоновского притяжения.

5.2. Разложение волновой функции по функциям Бесселя. Функция Куммера $\Phi(-i\eta, 1/2; \xi)$ является регулярным решением следующего гипергеометрического уравнения [16]:

$$\left[\xi \partial_\xi^2 + \left(\frac{1}{2} - \xi \right) \partial_\xi + i\eta \right] \Phi(-i\eta, 1/2; \xi) = 0.$$

Построим формальное разложение этого решения по функциям Бесселя $Z_\mu^\pm(w)$ аргумента $w \equiv \sqrt{2\xi/iq}$ и полуцелого порядка $\mu \geq -1/2$. Для этого подстановкой

$$\Phi(\mp i|\eta|, 1/2; \xi) = \sqrt{\pi} \left(\frac{w}{2} \right)^{1/2} \phi^\pm(w, q), \quad \xi = iq \frac{w^2}{2}, \quad (66)$$

сведем упомянутое выше гипергеометрическое уравнение к уравнению

$$\left[\partial_w^2 + \frac{1}{w} \partial_w \mp 1 - \frac{1}{4w^2} \right] \phi^\pm(w, q) - i \frac{q}{2} (2w \partial_w + 1) \phi^\pm(w, q) = 0, \quad (67)$$

которому при $q = 0$ удовлетворяет функция Бесселя $Z_{-1/2}^\pm(w)$.

Далее, используя известные рекуррентные соотношения для функций Бесселя [17], убедимся в том, что уравнение (67) имеет формальное решение

$$\phi^\pm(w, q) = Z_{-1/2}^\pm(w) + \sum_{n=1}^{\infty} \left(i \frac{q}{2} \right)^n \sum_{s=n+1}^{2n} (\pm 1)^{n+s} p_{ns} w^s Z_{s-1/2}^\pm(w), \quad (68)$$

если $p_{00} = 1$, а все остальные коэффициенты p_{ns} , $n = 1, 2, \dots$, подчиняются следующей цепочке уравнений:

$$\begin{aligned} (n+1)p_{n,s} &= 2np_{n-1,s-1}, & s &= n+1; \\ sp_{ns} &= 2(s-1)p_{n-1,s-1} + p_{n-1,s-2}, & s &= n+2, n+3, \dots, 2n-1; \\ 2np_{n,s} &= p_{n-1,s-2} = 0, & s &= 2n. \end{aligned}$$

Из этой цепочки следуют равенства

$$p_{12} = \frac{1}{2}, \quad p_{23} = \frac{2}{3}, \quad p_{24} = \frac{1}{8}, \quad p_{34} = 1, \quad p_{35} = \frac{1}{3}, \quad p_{36} = \frac{1}{48} \quad (69)$$

и соотношения

$$\frac{1}{2^n n!} = p_{n,2n} < p_{n,2n-1} < \dots < p_{n,n+2} < p_{n,n+1} = \frac{2^{n-1}}{n+1}, \quad n = 1, 2, \dots, \quad (70)$$

согласно которым все коэффициенты p_{ns} положительные и $p_{n,n+1} > p_{ns}$ при каждом фиксированном n и при $s > n+1$.

Теперь, применив формулы (66) и (68), запишем искомое формальное разложение функции Куммера $\Phi(-i\eta, 1/2; \xi)$ по функциям Бесселя в следующем виде:

$$\begin{aligned} \Phi(\mp i\eta, 1/2; \xi) &= \sqrt{\pi} \left(\frac{w}{2} \right)^{1/2} (Z_{-1/2}^\pm(w) + T^\pm(w, q)), \\ T^\pm(w, q) &\equiv \sum_{n=1}^{\infty} \left(i \frac{q}{2} \right)^n \sum_{s=n+1}^{2n} (\pm 1)^{n+s} p_{ns} w^s Z_{s-1/2}^\pm(w). \end{aligned} \quad (71)$$

Отметим, что благодаря равенствам (69) частичная сумма полученного ряда (71), слагаемые которой содержат целые степени q^n , $n = 0, 1, 2, 3$, переменной q , совпадает с рядом Маклорена (63) функции $\Phi(\mp i\eta, 1/2; \xi)$.

Докажем следующее утверждение: если $0 \leq w < \infty$ и $0 \leq q < \infty$, то ряд $T^\pm(w, q)$ сходится равномерно. Доказательство разобьем на три этапа.

Первый этап – построение мажоранты $T_1^\pm(w, q)$ модуля ряда $T^\pm(w, q)$. Для этого в $T^\pm(w, q)$ заменим все функции $(iq/2)^n$ и $Z_{s-1/2}^\pm$ их модулями, а затем выполним еще две замены. При каждом n заменим все коэффициенты p_{ns} наибольшим коэффициентом $p_{n,n+1}$, который согласно формулам (70) равен $2^{n-1}/(n+1)$. Модули всех функций Бесселя $Z_\mu^-(w) = J_\mu(w)$ и $Z_\mu^+(w) = I_\mu(w)$ для $\mu = s - 1/2$ заменим

правыми частями соответствующих оценок (34) и (35). Полученный ряд обозначим как $T_1^\pm$. Согласно выполненным преобразованиям имеем

$$|T^\pm(w, q)| < T_1^\pm(w, q),$$

$$T_1^\pm(w, q) \equiv \left\{ \begin{matrix} \text{ch } w \\ 1 \end{matrix} \right\} \frac{1}{\sqrt{2w}} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{q^n}{n+1} \sum_{s=n+1}^{2n} \left(\frac{w^2}{2} \right)^{2s} \frac{1}{\Gamma(s+1/2)}.$$

Второй этап – построение мажоранты $T_2^\pm$ ряда $T_1^\pm$. На этом этапе ключевыми будут следующие известные свойства гамма-функции [17]:

$$\Gamma(s-1) = (s-2)! < \Gamma(s+1/2) = \sqrt{\pi} 2^{-s} (2s-1)!! , \quad s = 2, 3, \dots$$

Преобразуем ряд $T_1^\pm$. Каждое число $\Gamma(s+1/2)$, $s = n+1, n+2, \dots, 2n$, заменим меньшим числом $(s-2)!$. Затем перейдем от индекса суммирования s к индексу $m = s - n - 1$. Наконец, воспользуемся неравенством $(m+n-1)! \leq (n-1)! m!$ и известным разложением экспоненциальной функции в бесконечный ряд Маклорена [13]. В итоге из ряда T_1 получим мажорирующую его функцию T_2 :

$$T_1^\pm(w, q) < T_2^\pm(w, q) \equiv \left\{ \begin{matrix} \text{ch } w \\ 1 \end{matrix} \right\} \left(\frac{w}{2} \right)^{3/2} (1 - e^{qw^2/2}) e^{w^2/2}.$$

Третий этап – мажорантная оценка исходного ряда $T^\pm$, заданного в формуле (71). Согласно предыдущим этапам верны неравенства

$$|T^\pm(w, q)| < T_1^\pm(w, q) < T_2^\pm(w, q),$$

а функция $T_2^\pm$ принимает конечные значения, если $0 \leq w \leq \infty$ и $0 \leq q \leq \infty$. Следовательно, при тех же условиях ряд $T^\pm$ сходится равномерно, что и требовалось доказать.

Символом $T_m^\pm(w, q)$, $m = 1, 2, \dots$, $m < \infty$, обозначим частичную сумму ряда $T^\pm$, содержащую все целые степени q^n , $n = 1, 2, \dots, m$, аргумента q . Применив изложенный выше поэтапный способ, нетрудно доказать следующее асимптотическое соотношение:

$$T^\pm(w, q) = T_m^\pm(w, q) + O(q^{m+1}), \quad q \rightarrow +0, \quad 0 \leq w < \infty. \quad (72)$$

Завершим настоящий пункт выводом разложения волновой функции Ψ^c по функциям Бесселя и обсуждением ее низкоэнергетического приближения. Используя формулы (59) и (71), представим искомое разложение в следующем виде:

$$\Psi^c(\rho, \varphi, \pm|\eta|) = C(\eta) e^{i\rho \cos \varphi} \sqrt{\pi} \left(\frac{w}{2} \right)^{1/2} \times$$

$$\times \left\{ Z_{-1/2}^\pm(w) + \sum_{n=1}^{\infty} \left(i \frac{q}{2} \right)^n \sum_{s=n+1}^{2n} (\pm 1)^{n+s} p_{ns} w^s Z_{s-1/2}^\pm(w) \right\}, \quad (73)$$

где $w = \sqrt{8|\eta|\rho} \sin(\varphi/2)$.

Пусть $\Psi_m^c(\rho, \varphi, \pm|\eta|)$ – конечная ($m < \infty$) сумма разложения (73), содержащая функции q^n , $n = 0, 1, \dots, m$. Тогда благодаря свойству (72) ряда $T^\pm$ верно равенство

$$\Psi^c(\rho, \varphi, \pm|\eta|) = \Psi_m^c(\rho, \varphi, \pm|\eta|) + O(C(\eta)e^{i\rho \cos \varphi} q^{m+1}), \quad q \rightarrow +0, \quad 0 \leq \rho < \infty.$$

Это равенство означает, что функция Ψ_m^c аппроксимирует волновую функцию Ψ^c в пределе низких энергий при $0 \leq \rho < \infty$.

6. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Просуммируем основные результаты настоящей работы, полученные впервые.

Для всех регулярных волновых функций F_λ и Ψ^c двумерного кулоновского рассеяния квантовой частицы силовым центром выведены и исследованы разложения (38) и (73) по функциям Бесселя первого рода. Равномерная сходимость таких разложений доказана для $\rho \in [0, \infty)$, $q \in [0, \infty)$. Показано, что конечные (порядка $m < \infty$) суммы $F_{\lambda m}$ и Ψ_m^c таких разложений являются низкоэнергетическими (при $q \rightarrow +0$) асимптотиками функций F_λ и Ψ^c в области $\rho < \infty$.

Установлено, что низкоэнергетические асимптотики нерегулярных решений Θ_λ уравнения Кулона (5) при $\rho \in (0, \infty)$ определяются формулами (43), (51). Для таких решений получены формальные разложения (58) по функциям Бесселя первого и второго рода. Сходимость этих разложений в области $\rho \in (0, \infty)$ подтверждена численным анализом.

Полученные представления (38), (51) и (73) волновых функций F_λ , Θ_λ и Ψ^c предлагается использовать для теоретической обработки результатов экспериментальных исследований [21] столкновений ультрахолодных атомов и ионов в магнитооптических ловушках дискообразной формы.

Список литературы

- [1] Н. Friedrich, *Scattering Theory, Lecture Notes in Physics*, **872**, Springer, Berlin, 2013.
- [2] B. Zaslav, M. E. Zandler, *Amer. J. Phys.*, **35**:12 (1967), 1118–1119.
- [3] X. L. Yang, S. H. Guo, F. T. Chan, K. W. Wong, W. Y. Ching, *Phys. Rev. A*, **43**:3 (1991), 1186–1196.
- [4] S. H. Guo, X. L. Yang, F. T. Chan, K. W. Wong, W. Y. Ching, *Phys. Rev. A*, **43**:3 (1991), 1197–1205.
- [5] R. E. Moss, *Amer. J. Phys.*, **55**:5 (1987), 397–311.
- [6] M. Robnik, V. G. Romanovski, *J. Phys. A: Math. Gen.*, **36**:29 (2003), 7923–7951.
- [7] G. Barton, *Amer. J. Phys.*, **51**:5 (1983), 420–422.
- [8] D. Yafaev, *J. Phys. A: Math. Gen.*, **30**:19 (1997), 6981–6992.
- [9] Q.-G. Lin, *Phys. Lett. A*, **260**:1–2 (1999), 17–23, arXiv: quant-ph/9910044.
- [10] W. Dittrich, *Amer. J. Phys.*, **67**:9 (1999), 768–775, arXiv: physics/9902070.
- [11] В. В. Пупышев, *ТМФ*, **186**:2 (2016), 252–271.
- [12] В. В. Пупышев, *ТМФ*, **186**:1 (2016), 123–141.
- [13] В. И. Смирнов, *Курс высшей математики*, т. 1, Наука, М., 1974.
- [14] Б. М. Будак, С. В. Фомин, *Кратные интегралы и ряды*, Физматлит, М., 2002.
- [15] М. В. Федорюк, *Асимптотические методы для линейных обыкновенных дифференциальных уравнений*, Наука, М., 1983.
- [16] Г. Бейтмен, А. Эрдейи, *Высшие трансцендентные функции*, т. 1: *Гипергеометрическая функция. Функции Лежандра*, Наука, М., 1973.

- [17] М. Абрамовиц, И. Стиган (ред.), *Справочник по специальным функциям с формулами, графиками и математическими таблицами*, Наука, М., 1979.
- [18] Ю. Люк, *Специальные математические функции и их аппроксимации*, Мир, М., 1980.
- [19] А. П. Прудников, Ю. А. Брычков, О. И. Маричев, *Интегралы и ряды. Элементарные функции*, Наука, М., 1981; *Интегралы и ряды. Специальные функции*, Наука, М., 1983.
- [20] С.-Е. Fröberg, *Rev. Modern Phys.*, **27**:4 (1955), 399–411.
- [21] Z. Idziaszek, T. Calarso, P. Zoller, *Phys. Rev. A*, **76**:3 (2007), 033409, 16 pp.

Поступила в редакцию 17.08.2015,
после доработки 28.09.2015