Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

В. В. Пупышев, Кулоновское рассеяние медленной квантовой частицы в пространстве произвольной размерности, *ТМФ*, 2018, том 195, номер 1, 64–74

DOI: <https://doi.org/10.4213/tmf9308>

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: 34.239.49.27

26 апреля 2023 г., 15:03:41

© 2018 г.

В. В. Пупышев*

КУЛОНОВСКОЕ РАССЕЯНИЕ МЕДЛЕННОЙ КВАНТОВОЙ ЧАСТИЦЫ В ПРОСТРАНСТВЕ ПРОИЗВОЛЬНОЙ РАЗМЕРНОСТИ

Считается, что заряженная квантовая частица движется в пространстве размерности $d = 2, 3, \dots$ и рассеивается неподвижным кулоновским центром. Введены и исследованы разложения волновой функции и всех радиальных волновых функций такой частицы по целым степеням волнового числа и функциям Бесселя вещественного порядка. Доказано, что конечные суммы таких разложений являются асимптотиками волновых функций в пределе низких энергий.

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

DOI: <https://doi.org/10.4213/tmf9308>

1. ВВЕДЕНИЕ

Явные представления волновой функции Ψ_μ^c и радиальной волновой функции F_λ кулоновского рассеяния квантовой частицы p_1 в координатном пространстве $\mathbb{R}^d$ произвольной размерности $d = 2, 3, \dots$ впервые получены в работе [1]. Низкоэнергетические асимптотики функций Ψ_μ^c и F_λ известны [2] только в случае $d = 2$.

Главная цель настоящей работы – вывод и анализ таких асимптотик при любом $d \geq 2$. В разделе 2 поясняются обозначения и основные определения. В разделе 3 известные представления [1] функций Ψ_μ^c и F_λ через функции Куммера [3] записываются в обозначениях, принятых в разделе 2. В разделе 4 выводятся и исследуются низкоэнергетические аппроксимации волновых функций Ψ_μ^c и F_λ . В заключении перечисляются основные результаты.

Настоящая работа является сокращенной версией препринта [4].

2. ОПРЕДЕЛЕНИЯ И ОБОЗНАЧЕНИЯ

Поясним используемые в настоящей работе обозначения и определения, а затем приведем соотношения, известные в теории высших трансцендентных функций [3] и в теории гипергармоник [5], [6].

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

Предположим, что квантовая частица p_1 имеет массу m_1 , обладает кулоновским зарядом z_1 и движется в координатном пространстве $\mathbb{R}^d$ некоторой размерности $d \geq 2$. В этом пространстве введем правую декартову систему координат S^d с начальной точкой O и единичными направляющими ортами $\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \dots, \mathbf{e}_d$, один из которых коллинеарен волновому вектору $\mathbf{k}_0$ начального состояния частицы p_1 . Пусть $\mathbf{r}$ – ее радиус-вектор. Используем его гиперсферические координаты (r, Ω) , где r – гиперрадиус, а Ω – некоторый набор всех гиперсферических углов.

Считаем, что точка O является неподвижным силовым центром, который имеет кулоновский заряд Z и воздействует на частицу p_1 посредством кулоновского потенциала $V^c(r) = z_1 Z/r$. Символом $\mathbf{k}$ обозначим волновой вектор конечного состояния частицы p_1 , а углом ее рассеяния назовем угол θ между векторами $\mathbf{k}_0$ и $\mathbf{r}$. Сохраним все принятые в работе [2] обозначения:

$$\begin{aligned} k &= \sqrt{\frac{2m_1 E}{\hbar^2}}, & R &\equiv \frac{\hbar^2}{2m_1 z_1 Z}, & q &= k|R|, & \alpha &\equiv \operatorname{sgn} R, \\ \eta &\equiv \frac{1}{2kR} = \frac{\alpha}{2q}, & \rho &\equiv kr, & v &\equiv \sqrt{8|\eta|\rho}, & w &\equiv v \sin \frac{\theta}{2}. \end{aligned} \quad (1)$$

Здесь и далее $\hbar$ – постоянная Планка, E – полная энергия частицы p_1 , а k и q – ее размерное и безразмерное волновые числа, η – параметр Зоммерфельда, ρ , v и w – безразмерные неотрицательные переменные. Согласно принятым обозначениям

$$\rho = q \frac{v^2}{4} = \frac{q\omega^2}{2(1 - \cos \theta)}.$$

Для краткости используем символы и формулы с верхними и нижними знаками плюс и минус. В таких формулах все верхние знаки берутся в случае кулоновского отталкивания ($\alpha = 1$), а все нижние – в случае кулоновского притяжения ($\alpha = -1$). Символами $Z_c^+(t)$ и $Z_c^-(t)$ обозначим функции Бесселя $I_c(t)$ и $J_c(t)$. Если W – некоторый бесконечный ряд с общим множителем g и слагаемыми w_n , то символом W_m обозначаем конечную ($n = 0, 1, \dots, m, m < \infty$) подсумму этого ряда:

$$W = g \sum_{n=0}^{\infty} w_n, \quad W_m \equiv g \sum_{n=0}^m w_n.$$

Согласно теории гипергармоник [5], [6] в пространстве $\mathbb{R}^d$ гипергармоники $Y_{LM}(\Omega)$ являются собственными функциями квадрата $\mathbf{L}^2(\Omega)$ оператора гипермомента $\mathbf{L}(\Omega)$:

$$\mathbf{L}^2 Y_{LM}(\Omega) = L(L + d - 2) Y_{LM}(\Omega), \quad L = 0, 1, \dots$$

Гипергармоники образуют полный и ортонормированный базис в пространстве функций, квадратично суммируемых на единичной сфере $\mathbb{S}^{d-1}$ с центром в точке O . Оператор $-\mathbf{L}^2(\Omega)$ равен угловой части оператора Лапласа, которая часто называется оператором Лапласа–Бельтрами в пространстве $\mathbb{R}^d$. Если $d \geq 3$, то множество $\mathbf{M}$ содержит все квантовые числа гипергармоники Y_{LM} , за исключением гипермомента L . Количество таких чисел равно $d - 2$. Поэтому в случае $d = 2$ множество $\mathbf{M}$ пусто.

Напомним, что функция Куммера $\Phi(a, c; \xi)$ удовлетворяет тождеству (преобразованию) Куммера [3]

$$\Phi(a, c; \xi) \equiv e^\xi \Phi(c - a, c; -\xi). \quad (2)$$

Введем функции μ , λ и ν дискретных переменных d и L . По определению

$$\mu \equiv \frac{d-3}{2}, \quad d = 2, 3, \dots; \quad \lambda \equiv L + \mu, \quad \nu \equiv 2\lambda + 1, \quad L = 0, 1, \dots$$

Поэтому μ и λ – полуцелые числа при четном d и целые при нечетном d , причем $\mu > 0$ и $\lambda > 0$, если $d \geq 4$. Два случая $d = 2$ и $d = 3$ являются особыми. Если $d = 2$, то $\mu = -1/2$, а $\lambda = -1/2$ при $L = 0$. Если $d = 3$, то $\mu = 0$, а $\lambda = 0$ только при $L = 0$.

Под низкоэнергетической асимптотикой исследуемой функции подразумеваем ее асимптотику в пределе нулевой энергии рассеяния ($E \rightarrow 0+$) при фиксированных значениях отличного от нуля кулоновского параметра R и порядков μ и λ . В таком пределе $q \rightarrow 0+$, а $|\eta| \rightarrow \infty$.

3. ИСХОДНЫЕ ПРЕДСТАВЛЕНИЯ ВОЛНОВЫХ ФУНКЦИЙ

Исходными для наших исследований являются известные представления [1] полной и радиальной волновых функций Ψ_μ^c и F_λ упругого кулоновского рассеяния частицы p_1 в пространстве $\mathbb{R}^d$ произвольной размерности $d \geq 2$. Запишем такие представления в обозначениях, принятых в предыдущем разделе.

Волновая функция Ψ_μ^c кулоновского рассеяния частицы p_1 в пространстве $\mathbb{R}^d$ определяется как непрерывное в области $\{\rho \geq 0, 0 < \theta \leq \pi\}$ решение d -мерного уравнения Шредингера

$$\left[\partial_\rho^2 + \frac{d-1}{\rho} \partial_\rho - \frac{\mathbf{L}^2(\Omega)}{\rho^2} + 1 - \frac{2\eta}{\rho} \right] \Psi_\mu^c(\rho, \theta, \eta) = 0, \quad \eta \in (-\infty, \infty), \quad (3)$$

с граничным условием

$$\begin{aligned} \Psi_\mu^c(\rho, \theta, \eta) &= e^{i\rho \cos \theta + i\eta \ln[\rho(1-\cos \theta)]} + \\ &+ r^{-\mu-1} e^{i\rho - i\eta \ln(2\rho)} f^c(\theta, \eta) + O(\rho^{-\mu-2}), \quad \rho \rightarrow \infty, \quad \theta \neq 0. \end{aligned}$$

Такое решение содержит искомую амплитуду кулоновского рассеяния f^c и записывается в виде произведения

$$\Psi_\mu^c(\rho, \theta, \eta) = B_\mu(\eta) e^{i\rho} \Phi(\mu + 1 + i\eta, \mu + 1; \xi), \quad \xi = i\rho(\cos \theta - 1), \quad (4)$$

в котором

$$B_\mu(\eta) \equiv \frac{\Gamma(\mu + 1 + i\eta)}{\Gamma(\mu + 1)} e^{-\pi\eta/2}. \quad (5)$$

Представление (4) после преобразования Куммера (2) принимает вид

$$\Psi_\mu^c(\rho, \theta, \eta) = B_\mu(\eta) e^{i\rho \cos \theta} \Phi(-i\eta, \mu + 1; -\xi). \quad (6)$$

В уравнении (3) кулоновский потенциал $2\eta/\rho$ не зависит ни от одного гиперугла из полного набора Ω . Поэтому это уравнение подстановкой

$$\Psi_\mu^c(\rho, \theta, \eta) = \rho^{-\mu-1} \sum_{\lambda=\mu}^{\infty} i^\lambda e^{i\delta_\lambda^\xi(\eta)} F_\lambda(\rho, \eta) \sum_{\mathbf{M}} Y_{\mathbf{LM}}(\Omega)$$

сводится к счетной ($\lambda = L + \mu$, $L = 0, 1, \dots$) совокупности уравнений Кулона

$$\left[\partial_\rho^2 - \frac{\lambda(\lambda+1)}{\rho^2} + 1 - \frac{2\eta}{\rho} \right] F_\lambda(\rho, \eta) = 0, \quad \rho > 0, \quad \eta \in (-\infty, \infty), \quad (7)$$

с условиями $F_\lambda \sim \rho^{\lambda+1}$, $\rho \rightarrow 0$, и условиями

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

в которых символом $\delta_\lambda^c(\eta)$ обозначен аргумент гамма-функций $\Gamma(\lambda + 1 + i\eta)$.

Решение F_λ уравнения Кулона с такими условиями является произведением

$$F_\lambda(\rho, \eta) = C_\lambda(\eta) \rho^{\lambda+1} e^{i\rho} \Phi(\lambda + 1 + i\eta, 2\lambda + 2; -2i\rho), \quad (8)$$

в котором

$$C_\lambda(\eta) \equiv 2^\lambda \frac{|\Gamma(\lambda + 1 + i\eta)|}{\Gamma(2\lambda + 2)} e^{-\pi\eta/2}. \quad (9)$$

Это произведение считается регулярной радиальной волновой функцией кулоновского рассеяния частицы p_1 в состоянии $|q, \lambda, \mathbf{M}\rangle$ с квантовыми числами q , λ и $\mathbf{M}$.

4. НИЗКОЭНЕРГЕТИЧЕСКИЕ АСИМПТОТИКИ

Наша главная задача – построить низкоэнергетические асимптотики функции Ψ_μ^c и F_λ в виде конечных сумм $\Psi_{\mu m}^c$ и $F_{\lambda m}$ бесконечных рядов, содержащих вполне определенные коэффициенты a_{ns} , b_{ns} , c_{ns} , d_{ns} , p_{ns} , t_{ns} , функции Бесселя $Z_b^\pm(t)$ вещественного порядка b , целые степени t^s аргумента $t = \omega$ или $t = v$ и целые степени q^n волнового числа q .

Представления (4)–(6) и (8), (9) функций Ψ_μ^c и F_λ содержат в качестве множителей экспоненциальные функции и функции Куммера. Поэтому функции Ψ_μ^c и F_λ можно представить в виде бесконечных рядов двух типов. Разложения первого типа содержат экспоненциальные множители, в разложениях второго типа такие множители отсутствуют. Разложения обоих типов выводятся по однотипной схеме. Сначала в уравнении Шредингера (3) или в уравнении Кулона (7) волновая функция Ψ_μ^c или F_λ заменяется искомым бесконечным рядом, содержащим известные функции и заранее неизвестные коэффициенты a_{ns} , b_{ns} , c_{ns} , d_{ns} , p_{ns} , t_{ns} . Затем с помощью рекуррентных соотношений для функций Бесселя [3] выводятся алгебраические уравнения, определяющие такие коэффициенты. Подробный вывод и исчерпывающий анализ разложений функций Ψ_μ^c и F_λ даны в препринте [4]. Поэтому ниже мы перечисляем такие разложения, а для доказательства их равномерной сходимости воспользуемся результатами работы [2]. Такую сходимость проиллюстрируем вычислениями в физически наиболее интересном случае трехмерного ($d = 3$, $\mu = 0$) кулоновского рассеяния.

4.1. Асимптотики волновой функции. Представлению (4) функции Ψ_μ^c отвечает следующее разложение первого типа:

$$\Psi_\mu^c(\rho, \theta, \pm|\eta|) = B_\mu(\eta) \Gamma(\mu + 1) e^{i\rho} \left(\frac{2}{w}\right)^\mu \sum_{n=0}^{\infty} \left(\mp i \frac{q}{2}\right)^n \sum_{s=n}^{2n} a_{ns} (\pm w)^s Z_{\mu+s}^\pm(w). \quad (10)$$

В этом разложении все коэффициенты a_{ns} определяются бесконечной цепочкой рекуррентных уравнений $sa_{ns} = 2(\mu + s)a_{n-1,s-1} + a_{n-1,s-2}$, $n = 1, 2, \dots$. В этих уравнениях при каждом значении индекса n полагается, что $s = n, n+1, \dots, 2n$, и подразумевается, что $a_{00} = 1$ и $a_{nm} = 0$, если $m < n$ или $m > 2n$.

Представлению (6) волновой функции Ψ_μ^c соответствует разложение первого типа

$$\begin{aligned} \Psi_\mu^c(\rho, \theta, \pm|\eta|) &= B_\mu(\eta) \Gamma(\mu + 1) e^{i\rho \cos \theta} \left(\frac{2}{w} \right)^\mu [Z_\mu^\pm(w) + T_\mu^\pm(w, q)], \\ T_\mu^\pm(w, q) &\equiv \sum_{n=1}^{\infty} \left(\pm i \frac{q}{2} \right)^n \sum_{s=n+1}^{2n} p_{ns} (\pm w)^s Z_{\mu+s}^\pm(w). \end{aligned} \quad (11)$$

Коэффициент p_{00} этого разложения равен единице, а все остальные коэффициенты p_{ns} удовлетворяют рекуррентной цепочке ($n = 1, 2, \dots$) уравнений

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

Эти уравнения не содержат никаких параметров. Поэтому коэффициенты p_{ns} являются универсальными в следующем смысле: при любой размерности d пространства $\mathbb{R}^d$ разложение (11) волновой функции Ψ_μ^c содержит одни и те же коэффициенты p_{ns} . В работе [2] была доказана равномерная сходимость ряда $T^\pm \equiv T_\mu^\pm$ в области $\rho < \infty$. Следовательно, при любых $\mu = (d-3)/2$ и $\rho < \infty$ разложение (11) сходится равномерно. Это означает, что в области $\rho < \infty$ любая, но конечная ($n = 0, 1, \dots, m < \infty$) подсумма

$$\begin{aligned} \Psi_{\mu m}^c(\rho, \theta, \pm|\eta|) &\equiv B_\mu(\eta) \Gamma(\mu + 1) e^{i\rho \cos \theta} \left(\frac{2}{w} \right)^\mu \times \\ &\times \left[Z_\mu^\pm(w) + \sum_{n=1}^m \left(\pm i \frac{q}{2} \right)^n \sum_{s=n+1}^{2n} p_{ns} (\pm w)^s Z_{\mu+s}^\pm(w) \right] \end{aligned}$$

этого разложения является низкоэнергетической асимптотикой функции Ψ_μ^c :

$$\Psi_\mu^c(\rho, \theta, \pm|\eta|) = \Psi_{\mu m}^c(\rho, \theta, \pm|\eta|) + O(B_\mu(\eta) e^{i\rho \cos \theta} q^{m+1}), \quad q \rightarrow 0, \quad \rho < \infty.$$

Для волновой функции Ψ_μ^c верно следующее разложение второго типа:

$$\Psi_\mu^c(\rho, \theta, \pm|\eta|) = B_\mu(\eta) \Gamma(\mu + 1) \left(\frac{2}{w} \right)^\mu \sum_{n=0}^{\infty} \left[\pm \frac{iq}{2(1-\vartheta)} \right]^n \sum_{s=n}^{2n} t_{ns}(\vartheta) (\pm w)^s Z_{\mu+s}^\pm(w). \quad (12)$$

В этом разложении $\vartheta \equiv \cos \theta$, все функции $t_{ns}(\vartheta)$ непрерывны на отрезке $-1 \leq \vartheta \leq 1$ и определяются рекуррентной цепочкой ($n = 1, 2, \dots$; $s = n, n+1, \dots, 2n$) уравнений

$$\begin{aligned} st_{ns}(\vartheta) &= 2[s-1 + (s+\mu)\vartheta]t_{n-1,s-1}(\vartheta) + (1+\vartheta)t_{n-1,s-2}(\vartheta) - \\ &- 2\vartheta[2(\mu+s-1)t_{n-2,s-2}(\vartheta) + t_{n-2,s-3}(\vartheta)], \end{aligned}$$

в которой $t_{00}(\vartheta) \equiv 1$ и полагается $t_{nm}(\vartheta) \equiv 0$, если $m < n$ или $m > 2n$.

Как упоминалось выше, разложение (11) волновой функции Ψ_μ^c сходится равномерно при любых μ и $\rho < \infty$. Следовательно, оба разложения (10) и (12) этой же функции обладают таким же свойством. Поэтому любые конечные суммы $\Psi_{\mu m}^c$ разложений (10) и (12) можно использовать как низкоэнергетические ($q \rightarrow 0$) асимптотики волновой функции Ψ_μ^c в области $\rho < \infty$.

4.2. Асимптотики радиальных волновых функций. При любом $\lambda = L + \mu$, $L = 0, 1, \dots$, для радиальной волновой функции F_λ имеет место следующее разложение первого типа:

$$F_\lambda(\rho, \pm|\eta|) = q^{\lambda+1} C_\lambda(\eta) \Gamma(2\lambda + 2) e^{i\rho \frac{v}{2}} \sum_{n=0}^{\infty} \left(\mp i \frac{q}{2} \right)^n \sum_{s=n}^{2n} c_{ns} (\pm v)^s Z_{2\lambda+1+s}^\pm(v). \quad (13)$$

Все коэффициенты c_{ns} этого разложения подчиняются рекуррентной цепочке уравнений

$$s c_{ns} = 2(\lambda + s) c_{n-1, s-1} + c_{n-1, s-2}, \quad n = 1, 2, \dots$$

В этих уравнениях при каждом значении индекса n полагается $s = n, n+1, \dots, 2n$ и подразумевается, что $c_{00} = 1$ и $c_{nm} = 0$, если $m < n$ или $m > 2n$.

Для каждой функции F_λ ($\lambda = L + \mu$, $L = 0, 1, \dots$) верно разложение второго типа

$$F_\lambda(\rho, \pm|\eta|) = q^{\lambda+1} C_\lambda(\eta) \Gamma(2\lambda + 2) \frac{v}{2} \sum_{n=0}^{\infty} \left(-i \frac{q}{2} \right)^{2n} \sum_{s=2n}^{3n} d_{ns} (\pm v)^s Z_{2\lambda+1+s}^\pm(v). \quad (14)$$

Коэффициенты d_{ns} этого разложения удовлетворяют рекуррентным уравнениям

$$2s d_{ns} = 2(2\lambda + s) d_{n-1, s-2} + d_{n-1, s-3},$$

в которых $s = 2n, 2n+1, \dots, 3n$ при каждом $n = 1, 2, \dots$ и по определению $d_{00} = 1$, а $d_{nm} = 0$, если выполнено условие $m < 2n$ или условие $m > 3n$.

Обсудим представление (14). Для этого подстановкой

$$\nu = 2\lambda + 1, \quad d_{ns} = \frac{b_{ns}}{2^n n!}, \quad n = 1, 2, \dots, \quad s = n, n+1, \dots, 2n,$$

сведем его к известному (см. [2]), но полученному другим способом разложению

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

Как доказано в работе [2], при условии $\rho < \infty$ такое разложение сходится абсолютно и равномерно. Следовательно, исходное разложение (14), а значит и разложение (13), обладает таким же свойством. Поэтому при условии $\rho < \infty$ любые, но конечные суммы $F_{\lambda m}$ разложений (13) и (14) являются искомыми низкоэнергетическими асимптотиками функции F_λ .

Рис. 1. Графики функций $K_{0m}(\omega, \eta, \varepsilon)$ для разложения (11); $\varepsilon = 10^{-14}$, значениям $m = 0, 2, 5$ соответствуют кривые 1, 2 и 3 при $\eta = 5$ (а), при $\eta = -5$ (б).

4.3. Численный анализ приближений волновых функций. Как показано в п. 4.1 и п. 4.2, волновые функции Ψ_μ^c и F_λ являются бесконечными рядами (10)–(12) и (13), (14). Предложим и реализуем метод, позволяющий оценить относительную точность приближения таких рядов их конечными суммами $\Psi_{\mu t}^c$ и $F_{\lambda t}$. В этом методе функции Ψ_μ^c и F_λ , вычисленные по формулам (4), (5) и (8), (9), сравниваются с подсуммами $\Psi_{\mu t}^c$ и $F_{\lambda t}$ соответствующих рядов (10)–(14). Для такого сравнения используются функции $K_{\mu t}$, $L_{\mu t}$ или $D_{\lambda t}$, близкие к десятичному логарифму относительной точности приближения $\Psi_\mu^c \approx \Psi_{\mu t}^c$ или приближения $F_\lambda \approx F_{\lambda t}$.

Для анализа сходимости рядов (10) и (11) предлагается использовать функцию

$$K_{\mu t}(w, \eta, \varepsilon) \equiv \ln \frac{|\Psi_\mu^c(\rho, \theta, \eta) - \Psi_{\mu t}^c(\rho, \theta, \eta)| + \varepsilon}{|\Psi_\mu^c(\rho, \theta, \eta)| + \varepsilon}, \quad \rho = \frac{qw^2}{2(1 - \cos \theta)}, \quad \varepsilon > 0.$$

Эта функция в пределе $\varepsilon \rightarrow 0+$ становится десятичным логарифмом относительной точности приближения $\Psi_\mu^c \approx \Psi_{\mu t}^c$, а при достаточно малом ε близка к такой точности.

Рис. 1 иллюстрирует сходимость ряда (11) в случаях трехмерных ($d = 3$, $\mu = 0$) отталкивающего ($q = 0.1$, $\eta = 5$) и притягивающего ($q = 0.1$, $\eta = -5$) кулоновского рассеяний квантовой частицы p_1 . На рис. 1 изображены графики трех ($m = 0, 2, 5$) функций $K_{\mu t}(w, \eta, \varepsilon)$, $\mu = 0$, $\varepsilon = 10^{-14}$. Как видно, на отрезке $0 \leq w \leq 5$ относительная точность приближения $\Psi_\mu^c \approx \Psi_{\mu t}^c$ быстро улучшается с ростом числа t .

Результаты расчета функции $K_{\mu t}$, $\mu = 0$, подтвердили быструю сходимость разложения (10) на отрезке $0 \leq w \leq 5$ в обоих случаях $\eta = 5$ и $\eta = -5$.

Для исследования сходимости ряда (12) удобно использовать функцию

$$L_{\mu t}(\rho, \theta, \eta, \varepsilon) \equiv \ln \frac{|\Psi_\mu^c(\rho, \theta, \eta) - \Psi_{\mu t}^c(\rho, \theta, \eta)| + \varepsilon}{|\Psi_\mu^c(\rho, \theta, \eta)| + \varepsilon}, \quad \varepsilon > 0.$$

Для примера эта функция вычислялась в случае $\theta = \pi/4$ и при тех же значениях μ , t , η и ε , что и функция $K_{\mu t}$. Результаты вычислений представлены на рис. 2

Рис. 2. Графики функций $L_{0m}(\rho, \theta, \eta, \varepsilon)$; $\varepsilon = 10^{-14}$, $\theta = \pi/4$, значениям $m = 0, 2, 5$ соответствуют кривые 1, 2 и 3 при $\eta = 5$ (а), $\eta = -5$ (б).

Рис. 3. Графики функций $D_{0m}(\rho, \eta, \varepsilon)$ для разложения (13); $\varepsilon = 10^{-14}$, значениям $m = 0, 2, 5$ соответствуют кривые 1, 2 и 3 при $\eta = 5$ (а), $\eta = -5$ (б).

в виде графиков, иллюстрирующих сходимость частичных сумм $\Psi_{\mu m}^c$ ряда (12) при $\mu = 0$ к этому ряду с ростом числа m при условии $\rho \leq 5$.

Для исследования сходимости обоих разложений (13) и (14) радиальной волновой функции F_λ выгодно вычислять функцию

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

Функция $D_{\lambda m}$ 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. При достаточно малом, но положительном значении аргумента ε обсуждаемая функция $D_{\lambda m}$ близка к десятичному логарифму относительной точности аппроксимации $F_\lambda \approx F_{\lambda m}$.

Рис. 4. Графики функций $D_{0m}(\rho, \eta, \varepsilon)$ для разложения (14); $\varepsilon = 10^{-14}$, значениям $m = 0, 2, 5$ соответствуют кривые 1, 2 и 3 при $\eta = 5$ (а), при $\eta = -5$ (б).

Рис. 3 дает наглядное представление об относительной точности приближения функции F_λ конечной суммой $F_{\lambda m}$ разложения (13). На этом рисунке изображены графики трех ($m = 0, 2, 5$) функций $D_{\lambda m}(\rho, \eta, \varepsilon)$, $\varepsilon = 10^{-14}$, $\eta = \pm 5$, вычисленных в случае трехмерного кулоновского рассеяния квантовой частицы p_1 в состоянии $|q, \lambda\rangle$ с нулевым угловым моментом $\lambda = 0$.

Для иллюстрации сходимости ряда (14) функции $D_{\lambda m}(\rho, \eta, \varepsilon)$, $m = 0, 2, 5$, вычислялись в случае $\varepsilon = 10^{-14}$, $\eta = \pm 5$ и $\lambda = 0$. Графики таких функций представлены на рис. 4.

4.4. Асимптотики кулоновских множителей и парциальных фаз. Выведем и обсудим низкоэнергетические ($q \rightarrow 0$, $|\eta| \rightarrow \infty$) асимптотики кулоновской фазы δ_λ^c и множителей B_μ и C_λ , заданных формулами (5) и (9). В качестве ключевых равенств используем известные свойства гамма-функции [3]

$$\Gamma(t+1) = t\Gamma(t), \quad |\Gamma(1/2 + i\eta)| = \sqrt{\frac{\pi}{\operatorname{ch} \pi\eta}}, \quad |\Gamma(i\eta)| = \sqrt{\frac{\pi\eta}{\operatorname{sh} \pi\eta}}, \quad (15)$$

формулу Муавра $t = |t|e^{i \arg t}$ и формулу Стирлинга

$$\Gamma(t) = \sqrt{2\pi} \exp[-t + (t - 1/2) \ln t] (1 + O(t^{-1})), \quad |t| \rightarrow \infty, \quad |\arg t| < \pi.$$

По определению фаза δ_λ^c равна аргументу гамма-функции $\Gamma(t)$ переменной

$$t \equiv \lambda + 1 + i\eta = \sqrt{(\lambda + 1)^2 + \eta^2} \exp \left[i \operatorname{arctg} \frac{\eta}{\lambda + 1} \right].$$

В рассматриваемом пределе модуль переменной t неограниченно возрастает. Поэтому можно применить формулу Стирлинга и затем получить искомую асимптотику

$$\delta_\lambda^c(\eta) = \left\{ \frac{\eta}{2} \ln[(\lambda + 1)^2 + \eta^2] - \eta + \left(\lambda + \frac{1}{2} \right) \operatorname{arctg} \frac{\eta}{\lambda + 1} \right\} \left[1 + O\left(\frac{1}{\eta} \right) \right]. \quad (16)$$

Заметим, что слагаемое этой асимптотики, содержащее арктангенс, обращается в нуль только в случае $\lambda = -1/2$, который реализуется лишь при $d = 2$.

Теперь из определения (5) множителя B_μ выведем два представления. Для этого символами $\delta_\mu(\eta)$ и $\tilde{\delta}_\mu(\eta)$ обозначим аргумент функции $\Gamma(\mu + 1 + i\eta)$ и сумму, заключенную в равенстве (16) в фигурные скобки в случае $\lambda = \mu$. Затем воспользуемся формулой Муавра и свойствами (15). В итоге при четном d получаем представление

$$B_\mu(\eta) = \frac{\sqrt{2\pi}}{\Gamma(\mu + 1)} \frac{e^{i\delta_\mu(\eta)}}{\sqrt{e^{2\pi\eta} + 1}} \prod_{k=1}^{\mu+1/2} [(\mu + 1 - k)^2 + \eta^2]^{1/2},$$

а при нечетном d – представление

$$B_\mu(\eta) = \frac{\sqrt{2\pi\eta}}{\Gamma(\mu + 1)} \frac{e^{i\delta_\mu(\eta)}}{\sqrt{e^{2\pi\eta} - 1}} \prod_{k=1}^{\mu} [(\mu + 1 - k)^2 + \eta^2]^{1/2}.$$

Из таких представлений следуют искомые асимптотики

$$B_\mu(\eta) \sim \frac{\sqrt{2\pi}}{\Gamma(\mu + 1)} |\eta|^{\mu+1/2} e^{i\tilde{\delta}_\mu(\eta)} \begin{cases} e^{-\pi\eta}, & \eta \rightarrow \infty, \\ (-2\pi\eta)^p, & \eta \rightarrow -\infty, \end{cases}$$

в которых по определению $p = 0$ при четном d и $p = -1/2$ при нечетном d .

Асимптотику множителя C_λ найдем тем же способом, который использовался для вывода асимптотики множителя B_μ . Из определения (9) множителя C_λ в силу свойств (15) следует, что

$$C_\lambda(\eta) \sim \frac{\sqrt{\pi}}{\Gamma(2\lambda + 2)} |2\eta|^{\lambda+1/2} \begin{cases} e^{-\pi\eta}, & \eta \rightarrow \infty, \\ (-2\pi\eta)^p, & \eta \rightarrow -\infty, \end{cases}$$

где $p = 0$ при четном d и $p = -1/2$ при нечетном d .

Отметим одну особенность найденных асимптотик множителей B_μ и C_λ : в случае кулоновского притяжения ($\eta < 0$) эти асимптотики содержат множитель $(-2\pi\eta)^p$, равный единице при четном d и функции $(-2\pi\eta)^{-1/2}$ при нечетном d .

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Просуммируем основные результаты настоящей работы, полученные впервые. Для всех волновых функций Ψ_μ^c и F_λ кулоновского рассеяния квантовой частицы p_1 в пространстве $\mathbb{R}^d$ произвольной размерности $d = 2, 3, \dots$ выведены и исследованы разложения (10)–(14) по функциям Бесселя первого рода. Доказано и подтверждено вычислениями следующее утверждение: конечные суммы $\Psi_{\mu m}^c$ и $F_{\lambda m}$ таких разложений являются низкоэнергетическими ($q \rightarrow 0+$) асимптотиками функций Ψ_μ^c и F_λ в области $\rho < \infty$.

Список литературы

- [1] D. Yafaev, “On the classical and quantum Coulomb scattering”, *J. Phys. A: Math. Gen.*, **30**:19 (1997), 6981–6992.
- [2] В. В. Пупышев, “Двумерное кулоновское рассеяние квантовой частицы: низкоэнергетические асимптотики”, *ТМФ*, **188**:1 (2016), 49–75.

- [3] Г. Бейтмен, А. Эрдейи, *Высшие трансцендентные функции*, т. 1: *Гипергеометрическая функция. Функции Лежандра*, Наука, М., 1973.
- [4] В. В. Пупышев, *Кулоновское рассеяние медленной квантовой частицы в пространстве произвольной размерности*, Препринт Р4-2016-83, ОИЯИ, Дубна, 2016.
- [5] Р. И. Джибути, К. В. Шитикова, *Метод гиперсферических функций в атомной и ядерной физике*, Энергоатомиздат, М., 1993.
- [6] J. Avery, *Hyperspherical Harmonics. Application in Quantum Theory*, Reidel Texts in the Mathematical Sciences, **5**, Springer, Dordrecht, 1989.

Поступила в редакцию 25.11.2016,
после доработки 31.05.2017