ФИЗИКА

УДК 517.589, 539.192
DOI: 10.31040/2222-8349-2018-0-3-22-27

Т-МАТРИЧНЫЕ ЭЛЕМЕНТЫ РАССЕЯНИЯ ДЛЯ КУЛОНОВСКИХ СИСТЕМ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ

© Р.Ф. Ахметьянов, Е.С. Шиховцева

Содержится вывод представления двухчастичных Т-матричных элементов рассеяния для кулоновского взаимодействия по специальным базисам без разложения по парциальным волнам. Полученные результаты применимы к малочастичным системам. Преимущество данного разложения возникает и в задачах трех тел при решении уравнения Фаддеева для трехчастичных систем. Основной проблемой при решении уравнения Фаддеева является приближенный выбор аппроксимации потенциалов взаимодействия, при котором Т-матричные элементы рассеяния приобретали сепарабельный вид. Однако даже в таком случае решение уравнения Фаддеева не всегда становится практичным ввиду того, что входящие Т-матричные элементы в интегральные уравнения уже не факторизуются. Здесь мы представим результаты, в котором Т-матричные элементы представляются в базисе, для которых существует теорема сложения, и вследствие чего интегральные уравнения Фаддеева приводятся к к факторизованному виду.

Ключевые слова: кулоновские системы, матрица рассеяния, гипергеометрическая функция.

1. Введение. Применение разложения обратно степенных потенциалов взаимодействия от трехмерных векторов по сферическим функциям широко используется в физических и математических задачах, обладающих сферической симметрией. Однако, возможно, особый интерес в физических и математических приложениях и задачах представляет не разделение по отдельности угловым и пространственным переменным, а разделение по полным векторам. Как было показано в [1], такое разделение существует для двух трехмерных векторов, и в конечных результатах угловые и пространственные переменные входят равноправно. К примеру, в задачах многих тел [2, 3] появляется возможность не разделять отдельно гиперсферические угловые функции и решать отдельно систему по пространственным координатам, а решать общую систему по полным векторам. В работе рассматривается двухчастичная *T*-матрица в импульсном представлении, определяемая интегральным уравнением [3]:

$$\left\langle \mathbf{k}_2 \middle| T(z) \middle| \mathbf{k}_1 \right\rangle = \left\langle \mathbf{k}_2 \middle| V \middle| \mathbf{k}_1 \right\rangle + \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \frac{\left\langle \mathbf{k}_2 \middle| V \middle| \mathbf{p} \right\rangle \left\langle \mathbf{p} \middle| T(z) \middle| \mathbf{k}_1 \right\rangle}{z - \dfrac{\hbar^2 p^2}{2m}}, \quad (1.1)$$

$$(z = E + i0),$$

здесь E – энергия относительного движения двух частиц, m – приведенная масса. Отметим, что амплитуда упругого рассеяния частиц выражается через *T*-матрицу как [3]

$$f(\mathbf{q}_2, \mathbf{q}_1) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \left\langle \mathbf{q}_2 \middle| T(E + i0) \middle| \mathbf{q}_1 \right\rangle$$

на энергетической поверхности $E = \dfrac{\hbar^2 q_1^{\,2}}{2m} = \dfrac{\hbar^2 q_2^{\,2}}{2m}$, где $\mathbf{q}_1$ – налетающий импульс, $\mathbf{q}_2$ – рассеянный. Для кулоновского поля $V(\mathbf{r}) = \dfrac{\sigma\alpha}{r}$ потенциал взаимодействия в импульсном представлении есть как

$$\left\langle \mathbf{k} \middle| V \middle| \mathbf{p} \right\rangle = \int \frac{d\mathbf{r}}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} V(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{r}(\mathbf{k}-\mathbf{p})} = \sigma\alpha \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{1}{|\mathbf{k}-\mathbf{p}|^2} = \frac{\sigma\alpha}{\gamma^2} \sqrt{\frac{2}{\pi}} \left| \frac{\mathbf{k}}{\gamma} - \frac{\mathbf{p}}{\gamma} \right|^{-2}, \quad (1.2)$$

$$\alpha = \left| \frac{Z_1 Z_2 e^2}{4\pi\varepsilon_0} \right|, \quad \sigma = \pm 1,$$

где в последнем выражении мы используем условие однородности функции, γ – любое число, которое можно задать в дальнейшем. Здесь $\sigma = +1$ соответствует потенциалу отталкивания двух зарядов $Z_1 e$ и $Z_2 e$, а $\sigma = -1$ – потенциалу притяжения.

АХМЕТЬЯНОВ Роберт Фанилович, Институт физики молекул и кристаллов Уфимского федерального исследовательского центра РАН, e-mail: robertu@mail.ru
ШИХОВЦЕВА Елена Сергеевна – д.ф.-м.н., Институт физики молекул и кристаллов Уфимского федерального исследовательского центра РАН, e-mail: elshik@anrb.ru

2. Матричная формулировка. Представим (1.2) в виде разложения из [1, 4] для трехмерных векторов как (здесь и далее для сокращенной записи $\sum\limits_{n,l,m}=\sum\limits_{n=0}^{\infty}\sum\limits_{l=0}^{\infty}\sum\limits_{m=-l}^{l}$):

$$\langle\mathbf{k}|V|\mathbf{p}\rangle=\frac{\sigma\alpha}{2\gamma^4}(2\pi)^{\frac{3}{2}}\sqrt{k^2+\gamma^2}\sqrt{p^2+\gamma^2}\times$$

$$\times\sum_{n,l,m}\upsilon_{n,l}\mathrm{H}_{n,l,m}\left(\frac{\mathbf{k}}{\gamma}\right)\mathrm{H}^*_{n,l,m}\left(\frac{\mathbf{p}}{\gamma}\right),\qquad(2.1)$$

$$\upsilon_{n,l}=\frac{1}{n+l+1},$$

где функции $\mathrm{H}_{n,l,m}(\mathbf{k})$ определяются в виде

$$\mathrm{H}_{n,l,m}(\mathbf{k})=\eta_{n,l}(k)Y_{l,m}(\hat{\mathbf{k}}),\qquad(2.2)$$

здесь $Y_{l,m}(\hat{\mathbf{k}})$ – сферическая функция от единичного трехмерного вектора $\hat{\mathbf{k}}=\dfrac{\mathbf{k}}{k}$.

$$\eta_{n,l}(x)=\frac{2}{\Gamma\left(l+\frac{3}{2}\right)}\sqrt{\frac{(n+l+1)\Gamma(n+2l+2)}{\Gamma(n+1)}}\times$$

$$\times\frac{x^l}{(x^2+1)^{l+\frac{3}{2}}}\,{}_2F_1\left[\begin{matrix}-n & n+2l+2\\ & l+\frac{3}{2}\end{matrix}\middle|\frac{1}{x^2+1}\right].\qquad(2.3)$$

Здесь и далее ${}_2F_1[\ldots|z]$ – гипергеометрическая функция Гаусса, $(a)_n=\Gamma(a+n)/\Gamma(a)$ – символ Похгаммера. Отметим, что $\eta_{n,l}(k)$-функции ортонормированы с весом k^2 на всей действительной оси $k\geq 0$ и, соответственно, ортогональны (2.2) ($d\mathbf{k}=k^2dk\,d\Omega_{\hat{\mathbf{k}}}$ – элемент объема, $d\Omega_{\hat{\mathbf{k}}}$ – элемент телесного угла):

$$\int d\mathbf{k}\,\mathrm{H}_{n_1,l_1,m_1}\left(\frac{\mathbf{k}}{\gamma}\right)\mathrm{H}^*_{n_2,l_2,m_2}\left(\frac{\mathbf{k}}{\gamma}\right)=$$

$$=\gamma^3\delta_{n_1,n_2}\delta_{l_1,l_2}\delta_{m_1,m_2}.\qquad(2.4)$$

Здесь $\gamma\in\mathbb{R}$. Очевидно, что из вида представления (2.1) решение интегрального уравнения (1.1) можно представить в виде

$$\langle\mathbf{k}_2|T(z)|\mathbf{k}_1\rangle=\frac{\alpha}{2\gamma^4}(2\pi)^{\frac{3}{2}}\sqrt{k_2^2+\gamma^2}\sqrt{k_1^2+\gamma^2}\times$$

$$\times\sum_{n_2,n_1,l,m}\sqrt{\upsilon_{n_2,l}\upsilon_{n_1,l}}\,\tau_{n_2,n_1;l}(z)\mathrm{H}_{n_2,l,m}\left(\frac{\mathbf{k}_2}{\gamma}\right)\mathrm{H}^*_{n_1,l,m}\left(\frac{\mathbf{k}_1}{\gamma}\right),\qquad(2.5)$$

где элементы $\tau_{n_2,n_1;l}(z)$ из условия (2.4) определяются системой алгебраических уравнений.

$$\tau_{n_2,n_1;l}(z)=\sigma\delta_{n_2,n_1}+\sigma\sum_{n_3=0}^{\infty}A^{-1}_{n_2,n_3;l}\tau_{n_3,n_1;l}(z),\qquad(2.6)$$

где

$$A^{-1}_{n_2,n_3;l}=\frac{\alpha m}{\gamma\hbar^2}\sqrt{\upsilon_{n_2,l}\upsilon_{n_3,l}}\times$$

$$\times\int_0^{\infty}dx\,x^2\frac{x^2+1}{\frac{2mz}{\gamma^2\hbar^2}-x^2}\eta_{n_2,l}(x)\eta_{n_3,l}(x)\qquad(2.7)$$

или в одной из матричных форм:

$$\boldsymbol{\tau}=\sigma\left(\mathbf{E}-\sigma\mathbf{A}^{-1}\right)^{-1},$$

$$\boldsymbol{\tau}=\sigma(\mathbf{A}-\sigma\mathbf{E})^{-1}\mathbf{A},\qquad(2.8)$$

(**E** – единичная матрица). Из полноты ортогональных функций элементы матрицы **A** представляются в виде

$$A_{n_1,n_2;l}=\frac{\gamma\hbar^2}{\alpha m\sqrt{\upsilon_{n_1,l}\upsilon_{n_2,l}}}\times$$

$$\times\int_0^{\infty}dx\,x^2\frac{\frac{2mz}{\gamma^2\hbar^2}-x^2}{1+x^2}\eta_{n_1,l}(x)\eta_{n_2,l}(x).\qquad(2.9)$$

Используя рекуррентное соотношение для гипергеометрической функции Гаусса [5, гл. 2] в (2.3), где верхние индексы отличаются на единицу, можно получить рекуррентное соотношение для функции $\eta_{n,l}(x)$ в виде

$$\frac{x^2-1}{x^2+1}\eta_{n,l}(x)=\frac{1}{2}\sqrt{\frac{(n+1)(n+2l+2)}{(n+l+1)(n+l+2)}}\eta_{n+1,l}(x)+$$

$$+\frac{1}{2}\sqrt{\frac{n(n+2l+1)}{(n+l)(n+l+1)}}\eta_{n-1,l}(x),$$

учитывая условие ортогональности $\eta_{n,l}(x)$-функции, а также вводя вспомогательные элементы

$$\phi_n=i\sqrt{\frac{y+1}{2\rho}}\sqrt{\frac{\Gamma\left(\frac{n+2}{2}\right)\Gamma\left(\frac{n+3}{2}+l\right)}{\Gamma\left(\frac{n+1}{2}\right)\Gamma\left(\frac{n+2}{2}+l\right)}},\qquad(2.10)$$

где $y=\dfrac{2mz}{\gamma^2\hbar^2}$, $\rho=\dfrac{\alpha m}{\gamma\hbar^2}$,

представим (2.9) в простом матричном виде

$$A_{n_1,n_2;l}=\frac{y-1}{2\rho}(n_1+l+1)\delta_{n_1,n_2}+$$

$$+\phi_{n_1}\phi_{n_2}\left(\delta_{n_1+1,n_2}+\delta_{n_1-1,n_2}\right).\qquad(2.11)$$

Для введения вспомогательного элемента ϕ_n мы воспользовались соотношением вида [6, гл. 1, п. 1.2]

$$\Gamma\left(\frac{n}{2}+z\right)\Gamma\left(\frac{n+1}{2}+z\right)=2^{-2z-n+1}\sqrt{\pi}\Gamma\left(n+2z\right).$$

Отметим, что матрица $\mathbf{A}^{-1}$ в (2.7), как и $\mathbf{A}$ в (2.11) – бесконечномерные. Интеграл в (2.7) сходится всегда и сходится даже для потенциалов $\sim r^{-\nu}$ при $\nu < 5/2$. Однако его значение сильно зависит от z, и может принимать разный вид как для действительных положительных, действительных отрицательных и комплексных значении z. Хотя мы всегда можем выбрать такой параметр γ для однозначного вида интеграла, но при комплексном значении γ теряется свойство ортогональности (2.4), что крайне нежелательно в дальнейшем, и поэтому лучше придерживаться условия $\gamma^2 > 0$. Преимущество (2.9) перед (2.7) заключается в том, что z может входить как параметр и не влиять на интегралы, что и было получено в (2.11).

В самом простом частном случае, когда $z = -E\in\mathbb{R}$, выбирая параметр $\gamma^2 = \dfrac{2mE}{\hbar^2}$, получим, что матричные элементы (2.7) (как и (2.11)) – диагональные, а элементы (2.6) представятся в простом виде как

$$\tau_{n_2,n_1;l}\left(-E\right)=\delta_{n_2,n_1}\sigma\left(1+\sigma\sqrt{\frac{E_{n,l}}{E}}\right)^{-1},$$

$$E_{n,l}=\frac{E_b}{\left(n+l+1\right)^2},$$

где $E_b = 13.6$ эВ – энергия основного состояния. При $\sigma=-1$, $\tau_{n_2,n_1;l}\left(-E\right)$ имеет полюс $E=E_{n,l}$ с вычетом $-2\sqrt{\left(E_{n,l}\right)^3}$.

Теперь определим $\boldsymbol{\tau}$ из (2.8) при любом z (принимающие комплексные или действительные значения) и с произвольным параметром $\gamma\in\mathbb{R}$. Из (2.11) видим, что $\mathbf{A}$ симметричная и трехдиагональная. Поэтому представим ее в виде произведения от двух бесконечномерных верхнеугольных матриц

$$\mathbf{A}=\mathbf{b}\mathbf{b}^T, \qquad (2.12)$$

где элементы $\mathbf{b}$ представим в виде

$$b_{n,m}=\delta_{n+1,m}\,\phi_n\sqrt{\beta_m}+\delta_{n,m}\frac{\phi_n}{\sqrt{\beta_m}}.$$

Данное представление (2.12) будет справедливым, если β_n будут удовлетворять рекуррентному соотношению вида

$$\phi_n^2\left(\beta_{n+1}+\frac{1}{\beta_n}\right)=\frac{y-1}{2\rho}\left(n+l+1\right)-\sigma=\lambda_n \qquad (2.13)$$

$$n=0,\ 1,\ 2,\ \ldots.$$

Таким образом, (2.8) можно представить в виде

$$\boldsymbol{\tau}=\sigma\mathbf{B}^T\mathbf{B}\mathbf{A}, \qquad (2.14)$$

где $\mathbf{B}=\mathbf{b}^{-1}$ и его элементы имеют вид

$$B_{n,m}=\begin{cases}\dfrac{(-1)^{n+m}}{\phi_m\,\beta_n}\displaystyle\prod_{k=n}^{m}\beta_k, & m\ge n\\ 0, & m<n\end{cases} \qquad (2.15)$$

и, соответственно, легко получить

$$\left(\mathbf{A}-\sigma\mathbf{E}\right)^{-1}=\mathbf{B}^T\mathbf{B}=$$

$$=\begin{cases}\dfrac{(-1)^{n+m}}{\phi_n\,\phi_m}\left(1+\displaystyle\sum_{i=0}^{m-1}\prod_{j=0}^{i}\beta_{m-j}\beta_{m-j-1}\right)\prod_{k=m}^{n}\beta_k, & n\ge m\\ \textit{то же самое при перестановке } n\leftrightarrow m, & n<m.\end{cases}$$

Представление (2.14) не очень практично, даже в случае конечномерных матриц. Поэтому сделаем следующим образом. Представим в (2.14) произведение

$$\mathbf{B}\mathbf{A}=\mathbf{S}\mathbf{B}, \qquad (2.16)$$

где элементы $\mathbf{S}$ есть

$$S_{n,m}=\left(\sigma+\frac{\phi_n^2}{\beta_n}+\beta_n\phi_{n-1}^2\right)\delta_{n,m}+$$

$$+\phi_n^2\sqrt{\frac{\beta_m}{\beta_n}}\delta_{n+1,m}+\phi_m^2\sqrt{\frac{\beta_n}{\beta_m}}\delta_{n,m+1}.$$

Так как $\mathbf{S}$ – симметрична, разобьем выражение:

$$\mathbf{S}=\mathbf{s}^T\mathbf{G}\mathbf{s}, \qquad (2.17)$$

где $G_{n,m}=\dfrac{g_n}{1-g_n}\delta_{n,m}$,

$$s_{n,m}=\frac{\phi_n}{\sqrt{\beta_n}}\delta_{n,m}+\frac{1-g_n}{g_n}\phi_n\sqrt{\beta_m}\,\delta_{n+1,m}. \qquad (2.18)$$

Объединяя (2.17), (2.16) с (2.14), запишем

$$\boldsymbol{\tau}=\sigma\mathbf{C}^T\mathbf{G}\mathbf{C},$$

где $\mathbf{C}=\mathbf{s}\mathbf{B}$, а из (2.18) и (2.15) его элементы будут иметь вид

$$C_{n,m}=\begin{cases}\dfrac{(-1)^{n+m}\phi_n}{\phi_m}\dfrac{2g_n-1}{g_n}\prod\limits_{k=n+1}^{m}\beta_k, & m>n\\ 1, & m=n\\ 0 & m<n.\end{cases} \quad (2.19)$$

Отметим, что в разбиении (2.17) g_n должны удовлетворять рекуррентным соотношениям вида

$$\frac{2g_{n+1}-1}{1-g_{n+1}}\frac{\phi_{n+1}^2}{\beta_{n+1}}-\frac{2g_n-1}{g_n}\beta_{n+1}\phi_n^2-\sigma=0, \quad (2.20a)$$

$$n=0,1,2,\dots$$

с начальным условием

$$g_0=\frac{\phi_0^2+\sigma\beta_0}{2\phi_0^2+\sigma\beta_0}. \quad (2.20b)$$

Введем новые функции вида

$$\Phi_{n,l,m}(\mathbf{k},z)=\sqrt{\frac{\alpha}{2}}\frac{\sqrt{k^2+\gamma^2}}{\gamma^2}\sum_{n_1=n}^{\infty}C_{n,n_1}\sqrt{\upsilon_{n_1,l}}\mathrm{H}_{n_1,l,m}\left(\frac{\mathbf{k}}{\gamma}\right), \quad (2.21a)$$

тогда (2.5) можно представить в диагональном виде как

$$\langle\mathbf{k}_2|T(z)|\mathbf{k}_1\rangle=$$
$$=-(2\pi)^{\frac{3}{2}}\sigma\sum_{n,l,m}\frac{g_n}{1-g_n}\bar{\Phi}_{n,l,m}(\mathbf{k}_1,z^*)\Phi_{n,l,m}(\mathbf{k}_2,z),$$

где под $\bar{\Phi}_{n,l,m}$ подразумевается транспонирование и комплексное сопряжение, или в виде

$$\bar{\Phi}_{n,l,m}(\mathbf{k},z^*)=\sqrt{\frac{\alpha}{2}}\frac{\sqrt{k^2+\gamma^2}}{\gamma^2}\sum_{n_1=n}^{\infty}C_{n,n_1}\sqrt{\upsilon_{n_1,l}}\mathrm{H}^*_{n_1,l,m}\left(\frac{\mathbf{k}}{\gamma}\right). \quad (2.21b)$$

Отметим, что при $\sigma=0$ из (2.20) все $g_n=1/2$ и элементы $\mathbf{C}$, как видно из (2.19), будут единичными, что и следовало ожидать из (2.8).

3. Определение β_n из (2.13). Из (2.13) видим, что общее решение для β_n определяется в виде бесконечной цепной дроби, если начальное значение β_0 не задано. Или в виде конечной цепной дроби, если β_0 задано. Здесь мы рассмотрим второй случай.

Представим β_n в виде $(n=0,1,2,\dots)$

$$\beta_n=\phi_n^2\frac{2\rho}{y+1}\frac{2}{n+2l+1}\frac{R_n}{R_{n-1}}=$$
$$=\phi_n^2\frac{2\rho}{y+1}\frac{\Gamma\left(\frac{n+1}{2}+l\right)}{\Gamma\left(\frac{n+3}{2}+l\right)}\frac{R_n}{R_{n-1}}. \quad (3.1a)$$

Подставляя сюда (2.10), мы также можем представить в другом виде

$$\beta_n=\frac{Q_n}{Q_{n-1}},$$
$$Q_n=(-1)^n\frac{\Gamma\left(\frac{n+2}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{n+2}{2}+l\right)}R_n=\frac{(-1)^n}{\left(\frac{n+2}{2}\right)_l}R_n. \quad (3.1b)$$

Данные представления удобны тем, что $\prod\limits_{k=n}^{m}\beta_k=\dfrac{Q_m}{Q_{n-1}}$. Так, из (2.19) получим для функции (2.21a) простой вид

$$\Phi_{n,l,m}(\mathbf{k},z)=\sqrt{\frac{\alpha}{2}}\frac{\sqrt{k^2+\gamma^2}}{\gamma^2}\sqrt{\upsilon_{n,l}}\mathrm{H}_{n,l,m}\left(\frac{\mathbf{k}}{\gamma}\right)+$$
$$+(-1)^n\sqrt{\frac{\alpha}{2}}\frac{\sqrt{k^2+\gamma^2}}{\gamma^2}\frac{\phi_n}{Q_n}\frac{2g_n-1}{g_n}\times \quad (3.2)$$
$$\times\sum_{n_1=n+1}^{\infty}(-1)^{n_1}\frac{Q_{n_1}}{\phi_{n_1}}\sqrt{\upsilon_{n_1,l}}\mathrm{H}_{n_1,l,m}\left(\frac{\mathbf{k}}{\gamma}\right)$$

и аналогично для (2.21b). Из (3.1a) и (2.13) получим рекуррентное соотношения для R_n $(n=0,1,2,\dots)$

$$(n+1)R_{n+1}-2x\left(n+l+1-\frac{2\sigma\rho}{y-1}\right)R_n+$$
$$+(n+2l+1)R_{n-1}=0, \quad (3.3)$$
$$n=0,1,2,\dots,$$

где $x=\dfrac{y-1}{y+1}$

с начальными условиям при $R_{-1}\neq0$ и $R_0\neq0$, так как из (3.1b) β_0 должно быть регулярным. Производящую функцию для R_n

$$g(w)=\sum_{n=0}^{\infty}R_nw^n$$

можно получить методами как в [6], которая будет соответствовать виду

$$g(w)=R_0\left(1-\frac{w}{w_1^*}\right)^{-l-1+i\frac{\rho\sigma}{\sqrt{y}}}\left(1-\frac{w}{w_1}\right)^{-l-1-i\frac{\rho\sigma}{\sqrt{y}}}-$$

$$-R_{-1}(2l+1)\left(1-\frac{w}{w_1^*}\right)^{-l-1+i\frac{\rho\sigma}{\sqrt{y}}}\left(1-\frac{w}{w_1}\right)^{-l-1-i\frac{\rho\sigma}{\sqrt{y}}}\times$$

$$\times\int_0^w d\xi\left(1-\frac{\xi}{w_1^*}\right)^{l-i\frac{\rho\sigma}{\sqrt{y}}}\left(1-\frac{\xi}{w_1}\right)^{l+i\frac{\rho\sigma}{\sqrt{y}}},$$

где при любых комплексных значениях y

$$w_1=\frac{y-1}{y+1}-i\frac{2\sqrt{y}}{y+1}.$$

Разлагая $g(w)$ в ряд по w, можно получить общее выражение для $R_{-1},R_0,R_n,n=1,2,\ldots$ при любых комплексных (и положительных действительных) числах y

$$R_n=R_{-1}\frac{w_1^{n+1}(2l+1)_{n+1}}{\left(l+1+i\frac{\rho\sigma}{\sqrt{y}}\right)_{n+1}}\,{}_2F_1\left[\left.\begin{matrix}n+1 & -l+i\frac{\rho\sigma}{\sqrt{y}}\\ n+l+2+i\frac{\rho\sigma}{\sqrt{y}} & \end{matrix}\right| w_1^2\right] \quad (3.4)$$

$$n=-1,0,1,2,\ldots$$

и когда y принимает действительные отрицательные значения $y=-t,\quad t>0$

$$R_n=R_{-1}\left(\frac{\sqrt{t}-1}{\sqrt{t}+1}\right)^{n+1}\frac{(2l+1)_{n+1}}{\left(l+1+\frac{\rho\sigma}{\sqrt{t}}\right)_{n+1}}\times$$

$$\times\,{}_2F_1\left[\left.\begin{matrix}n+1 & -l+\frac{\rho\sigma}{\sqrt{t}}\\ n+l+2+\frac{\rho\sigma}{\sqrt{t}} & \end{matrix}\right|\left(\frac{\sqrt{t}-1}{\sqrt{t}+1}\right)^2\right], \quad (3.5)$$

$$n=-1,0,1,2,\ldots.$$

Отметим, что R_n в (3.4) комплексное, а R_{-1} задается из (3.1b) при заданном начальном значении β_0. Так как в (3.1) и (3.2) Q_n (как и R_n) входят в виде отношения, то во всех приведенных формулах β_n и $\Phi_{n,l,m}(\mathbf{k})$ уже не зависит от начального заданного β_0. Ввиду линейности рекуррентного соотношения (3.3), кроме общего выражения (3.4), при $\operatorname{Im}y=0$ мы можем взять по отдельности как действительные, так и мнимые части. Соответственно представим асимптотическое поведение в сумме (3.2) при больших n_1. Для (3.4) (при $\operatorname{Im}y=0$)

$$(-1)^{n_1}\frac{Q_{n_1}}{\phi_{n_1}}\sqrt{\upsilon_{n_1,l}}=R_{-1}\frac{2^{l+\frac{1}{2}}\Gamma\left(l+1+i\frac{\rho\sigma}{\sqrt{y}}\right)}{\Gamma(2l+1)}\times$$

$$\times e^{-i\left(\theta(n_1+1)+\frac{\rho\sigma}{\sqrt{y}}\ln n_1\right)}\left(1-e^{-i2\theta}\right)^{l-i\frac{\rho\sigma}{\sqrt{y}}}\frac{1}{n_1}\left(1+O\left(\frac{1}{n_1}\right)\right),$$

где $\cos\theta=\dfrac{y-1}{y+1}$. И для (3.5)

$$(-1)^{n_1}\frac{Q_{n_1}}{\phi_{n_1}}\sqrt{\upsilon_{n_1,l}}=R_{-1}\frac{2^{l+\frac{1}{2}}\Gamma\left(l+1+\frac{\rho\sigma}{\sqrt{t}}\right)}{\Gamma(2l+1)}\times$$

$$\times\left(\frac{\sqrt{t}-1}{\sqrt{t}+1}\right)^{n_1+1}n_1^{-\frac{\rho\sigma}{\sqrt{t}}}\left(\frac{4\sqrt{t}}{\left(\sqrt{t}+1\right)^2}\right)^{l-\frac{\rho\sigma}{\sqrt{t}}}\frac{1}{n_1}\left(1+O\left(\frac{1}{n_1}\right)\right).$$

Для быстро осциллирующей функции $e^{-i\left(\theta(n_1+1)+\frac{\rho\sigma}{2\sqrt{y}}\ln n_1\right)}<1$ коэффициент в первом выражении будет убывать как $1/n_1$. Для второго выражения сходимость в (3.2) будет быстрее только для отталкивательного потенциала $(\sigma=+1)$.

Литература

1. Ахметьянов Р.Ф., Шиховцева Е.С. Разложение степенного потенциала на основе обобщенной формулы Гейне // Известия Уфимского научного центра РАН. 2016. № 1. С. 24–31.
2. Джибути Р.И., Крупенникова Н.Б. Метод гиперсферических функций в квантовой механике нескольких тел. Тбилиси: Мецниереба, 1984.
3. Шмидт Э., Цигельман Х. Проблема трех тел в квантовой механике. М.: Наука, 1979.
4. Akhmetyanov R.F., Shikhovtseva E.S. Expansion into a many-dimensional rational series for scalar power functions of vector arguments. 2017. ArXiv: 1711.07337 [math.GA].
5. Бейтмен Г., Эрдейи А. Высшие трансцендентные функции. Гипергеометрическая функция. Функции Лежандра. Т. 1. М.: Наука, 1965.
6. Джоунс У., Трон В. Непрерывные дроби. Аналитическая теория и приложения. М.: Мир, 1985.

References

1. Akhmetyanov R.F., Shikhovtseva E.S. Expansion of power potential on the basis of generalized Heine formula. Izvestiya Ufimskogo nauchnogo tsentra RAN, 2016, no. 1, pp. 24–31.

2. Dzhibuti R.I., Krupennikova N.B. Method of hyperspherical functions in few-body quantum mechanics. Tbilisi, Metsniereba, 1984.

3. Schmidt E., Ziegelman H. The quantum mechanical three-body problem. Russian Edition. Moscow, Nauka, 1979.

4. Akhmetyanov R.F., Shikhovtseva E.S. Expansion into a many-dimensional rational series for scalar power functions of vector arguments. 2017. ArXiv: 1711.07337 [math.GA].

5. Bateman H., Erdélyi A. Higher transcendental functions. Hypergeometric functions. Legendre functions. Russian edition. Vol. 1. Moscow, Nauka, 1965.

6. Jones W., Thron W. Continued fractions. Analytic theory and applications. Russian edition. Moscow, Mir, 1985.

T-MATRIX SCATTERING ELEMENTS FOR COULOMB INTERACTION SYSTEMS

© R.F. Akhmetyanov, E.S. Shikhovtseva

Institute of Molecule and Crystal Physics – Subdivision of the Ufa Federal Research Centre
of the Russian Academy of Sciences,
151, prospect Oktyabrya, 450075, Ufa, Russian Federation

The paper derives the representation of the two-particle T-matrix scattering elements for the Coulomb interaction with respect to special bases without expansion in terms of partial waves. The results obtained are applicable to small-particle systems. The advantage of this expansion also arises in three-body problems when solving the Faddeev equation for three-particle systems. The main problem in solving the Faddeev equation is the approximate choice of approximation for the interaction potentials, at which the T-matrix scattering elements acquire a separable form. However, even in this case the solution to the Faddeev equation does not always become practical in view of the fact that the T-matrix elements themselves do not factor in the integral equations. Here we give the results with the T-matrix elements represented in the basis, for which there is an addition theorem and hence the integral Faddeev equations are reduced to a factored form.

Key words: Coulomb systems, scattering matrix, hypergeometric function.