



**Analitikus és numerikus számítási
módszerek néhánytest-rendszerek
kvantummechanikai modelljében**

Doktori (PhD) értekezés

Hornyák István

Témavezető: Dr. Kruppa András Tibor

DEBRECENI EGYETEM
Természettudományok Doktori Tanács
Informatikai Tudományok Doktori Iskola

Debrecen, 2015

Ezen értekezést a Debreceni Egyetem Informatikai Tudományok Doktori Iskola Elméleti számítástudomány, adatvédelem és kriptográfia programja keretében készítettem 2010–2015 között és ezúton benyújtom a Debreceni Egyetem doktori PhD fokozatának elnyerése céljából. Kijelentem, hogy ezt a doktori értekezést magam készítettem és abban csak a megadott forrásokat használtam fel.

Debrecen, 2015. január 20.

.....
Hornják István
jelölt

Tanúsítom, hogy Hornják István doktorjelölt 2010–2015 között a fent megnevezett Doktori Iskola Elméleti számítástudomány, adatvédelem és kriptográfia programja keretében irányításommal végezte munkáját. Az értekezésben foglaltak a jelölt önálló munkáján alapulnak, az eredményekhez önálló alkotó tevékenységével meghatározóan hozzájárult. Az értekezés elfogadását javaslom.

Debrecen, 2015. január 20.

.....
Dr. Kruppa András Tibor
témavezető

**Analitikus és numerikus számítási módszerek
néhánytest-rendszerek kvantummechanikai modelljében**

Értekezés a doktori (PhD) fokozat megszerzése érdekében
az informatika tudományágban

Írta: Hornyák István okleveles fizikus

Készült a Debreceni Egyetem Informatikai Tudományok Doktori
Iskolája (Elméleti számítástudomány, adatvédelem és
kriptográfia programja) keretében

Témavezető: Dr. Kruppa András Tibor

A doktori szigorlati bizottság:

elnök: Dr. Végh János

tagok: Dr. Györfi László

Dr. Huszti Andrea

A doktori szigorlat időpontja: 2014. március 28.

Az értekezés bírálói:

Dr.

Dr.

A bírálóbizottság:

elnök: Dr.

tagok: Dr.

Dr.

Dr.

Dr.

Az értekezés védésének időpontja: 20.... ..

Tartalomjegyzék

1. Bevezetés	1
2. Szóráselméleti és matematikai alapok	7
2.1. Szóráselméleti alapok	7
2.1.1. Időfüggő szóráselmélet	9
2.1.2. Időfüggetlen szóráselmélet	14
2.1.3. Felületi integrálos formalizmus	17
2.2. Komplex skálázás	21
2.3. Az aszimptotikus analízis alapfogalmai	23
2.3.1. A O - és o -szimbólumok	23
2.3.2. Aszimptotikus sorozatok és sorok	24
2.3.3. Aszimptotikus hatványsorok	25
2.4. Speciális függvények	26
2.4.1. A gamma- és a nem teljes gamma-függvény	27
2.4.2. Hipergeometrikus függvények	30
3. Matematikai eredmények: a ${}_2F_2(a, a; a + l + 1, a - l; z)$ függvény vizsgálata	33
4. A háromdimenziós Coulomb-módosított síkhullám vezető rendű aszimptotikája	41
5. Hatékony FORTRAN-90 kód a ${}_2F_2(a, a; a + l + 1, a - l; z)$ függvény numerikus számításához	45
5.1. $ z < 1$	47
5.2. Aszimptotika	53
5.3. Algoritmus	57

5.4. Elemzés	58
6. Kéttest-Coulomb-szórás komplex skálázással	63
6.1. A kéttest-Coulomb-probléma egzakt megoldása	64
6.2. Az irányított Schrödinger-egyenlet	66
6.3. A Coulomb-módosított síkhullám	69
6.4. A bejövő hullámon alapuló felbontás	72
6.5. Numerikus eredmények	75
7. Összefoglalás	79
8. Summary	81
9. Köszönetnyilvánítás	83
Képletgyűjtemény	85
Irodalomjegyzék	89
A jelölt publikációi	95

1. fejezet

Bevezetés

A kvantumfizika legfontosabb kísérleti módszere a szórás kísérlet [1–3]. Az atomfizikában példaként említhetjük Rutherford szórás kísérletét, melyben alfa-részecskéket szórattott arany fólián, és az eredmények elemzése vezetett az atommag felfedezéséhez. A magfizikában az atommagok szerkezetéről szintén szórás kísérletekből szerezhetünk információt [4, 5]. Az elemi részek fizikájában pedig szórás kísérletek révén új részecskéket találhatunk. Erre a legfrissebb példa a 2012-ben proton-proton ütközések során is megfigyelt Higgs-bozon (ld.: [6–8]), amit az ún. standard modell jósolt meg.

Az időfüggetlen szóráselméletben parciális differenciálegyenletet, a hullámfüggvényre vonatkozó Schrödinger-egyenletet, kell megoldani megfelelő határfeltétellel. A vektorváltozók száma lineárisan nő az ütközésben részt vevő részecskék számával. Többrészecskés rendszerekre vonatkozó „ab initio” szórás számítások még manapság sem kivitelezhetők, annak ellenére, hogy a formális elmélet, a Faddeev–Yakubovsky-egyenletek formájában már az 1960-as években kidolgozásra került [9–11]. A jelenlegi szuperszámítógépekkel is csak három-, vagy négytest-rendszerre végezhető el ezeken az elveken alapuló szórás számítás.

Összetett rendszerek szórásának leírásakor legtöbbször úgy járhatunk el, hogy közelítések bevezetésével visszavezetjük a leírást két- vagy háromtest-szórásra. A legnyilvánvalóbb közelítés, hogy elhanyagoljuk a céltárgy belső szerkezetét. Ha gyengén kötött lövedékkel bombázzuk a céltárgyat, mint például a deuteron, ${}^6\text{He}$ vagy ${}^{11}\text{Be}$, akkor feltételezhetjük, hogy a lövedék két szerkezet nélküli klaszterből áll, és ezeket pontszerűeknek tekinthetjük. Az előbbi példák során a következő háromtest-rendszereket kapjuk (n , p , céltárgy), (${}^4\text{He}$,

di-neutron, céltárgy) és (^{10}Be , n , céltárgy). A kölcsönhatást a „részecskék” között fenomenologikus potenciállal közelíthetjük.

A szórásszámításnak két fő nehézsége van. Egyrészt meg kell adni a parciális differenciálegyenlet határfeltételeit, ami a tekintett fizikai folyamatnak megfelel. Másrészt ismerni kell azt a formulát, ahogy a hullámfüggvényből meghatározzuk a mérhető fizikai mennyiséget. Szórási kísérleteknél ez a mennyiség általában a folyamat hatáskeresztmetszete. A stacionárius szórási hullámfüggvényt vagy direkt módon a Schrödinger-féle differenciálegyenletből vagy a Lippmann–Schwinger-integrálegyenletből lehet meghatározni. Az integrálegyenlet már magába foglalja a határfeltételt, de elvárjuk, hogy kompakt magfüggvényű integrálegyenletet kapjunk, ugyanis csak ekkor tudjuk biztosítani a megoldás egyértelműségét, és a numerikus eljárások stabilitását. Matematikailag korrekt formájú háromtest-szórási egyenlet a Faddeev-egyenlet, ami 1963-ban született meg [9, 10].

Ismert, hogy a konvencionális szóráselmélet csak akkor érvényes, ha a részecskék közötti kölcsönhatás rövid hatótávolságú [1]. A legtöbb atom- és magfizikai kísérletben azonban töltött részecskékkel van dolgunk, és a hosszú hatótávolságú Coulomb-kölcsönhatás nem hanyagolható el. Töltött részecskék esetén a standard elméletet módosítani kell. Szemléletesen azt mondhatjuk, hogy a hosszú hatótávolságú Coulomb-kölcsönhatás eltorzítja mind a bejövő, mind a szórt hullámot. Az időfüggő leírás keretében Dollard 1964-ben megmutatta [12, 13], hogy hogyan kell az időfejlesztő operátort módosítani, hogy a szórást leíró Møller-operátor létezzen. Ez az eredmény alapvető jelentőségű, de a tényleges numerikus számítások az időfüggetlen leírást használják.

A kéttest-Coulomb-szórás problémája analitikus formában egzaktul megoldható. A koordinátatérbeli háromdimenziós Schrödinger-egyenlet, a radiális egyenlet és az impulzustérbeli megoldások mind ismertek. Hasonló módon analitikus formában megadható a rezolvens (Green-operátor), az „off shell” T -mátrix és az energiahéjon vett szórási amplitúdó. Azonban a hosszú hatótávolság miatt ezeknek a mennyiségeknek a definíciója, és egymás közötti kapcsolata eltér a rövid hatótávolságú potenciálokra megszokott definícióktól, kifejezésektől [14, 15].

Például, a szórási hullámfüggvény jól ismert aszimptotikája (bemenő síkhullám plusz kimenő gömbhullám) megváltozik. A szórási amplitúdó és a szórási függvény parciális hullámok szerinti sorfejtése nem konvergens. Disztribúcióelméleti értelemben vett konvergenciát lehet csak bizonyítani [16]. Továbbá a Lippmann–Schwinger-egyenlet alkalmazhatósága is gondos vizsgálatot követel. A Coulomb-szórási hullámfüggvény az inhomogén helyett homogén egyenletnek tesz eleget [17]. További nehézség, hogy Coulomb-szórás

esetén a T -mátrix nem létezik az energiahéjon [18]. Szintén nem érvényes Coulomb-kölcsönhatás esetén a szórás amplitúdóra használt szokásos kifejezés, amely a síkhullámot, a potenciált és a szórás megoldást tartalmazza.

Egy fizikailag és matematikailag is rokonszenves megközelítése a kéttest-Coulomb-problémának a Coulomb-kölcsönhatás leáryékolása. A legegyszerűbb esetben levágást alkalmazunk, azaz egy elegendően nagy távolság után nullával tesszük egyenlővé a kölcsönhatást. Ily módon véges hatótávolságú kölcsönhatást kapunk, és a szokásos módon járhatunk el. Naívan azt várnánk, hogy a levágási távolság növelésével az eredmények konvergálnak. Ez azonban nem így van. Megmutatható, hogy egy, a levágási sugártól függő mennyiséggel korrigálva (renormálva) kaphatjuk csak meg az elvárt eredményt. Ezt az eljárást szokás árnyékolási-renormálási módszernek nevezni. Az eljárás korrekt hatáskeresztmetszetre vezet kéttest-probléma esetén, de korántsem tekinthető kielégítőnek. A különböző árnyékolási függvények a szórás függvény különböző aszimptotikus viselkedéséhez vezetnek, és ezek eltérnek az egzakt formától. Az eljárás leggyengébb pontja, hogy határértékben az energiahéjon vett szórás amplitúdó nem létezik, azaz a szórás hatáskeresztmetszet nem határozható meg. A határértékben számolt amplitúdó olyan faktort tartalmaz, amely nem konvergens az energiahéjon. Ezeket a tényezőket el kell távolítani, renormálni kell, mielőtt az energiahéjon vett értéket meghatározzuk. Ennek a módszernek az általánosítása tette lehetővé, hogy töltött háromtest-rendszerekre realiztikus számításokat lehessen végezni [19, 20].

A helyzet tehát az, hogy használnunk kell az árnyékolást, de ugyanakkor az eredményeket renormálni is kell. Nagyon jó lenne olyan formalizmust találni, amely egyszerre működik rövid hatótávolságú és Coulomb-potenciál esetén is. Egy ilyen lehetőség a felületi integrálos formalizmus, amit 2005-ben vezettek be. Először kéttest-rendszerre mutatták meg [21], hogy megadható olyan formula a szórás amplitúdó kiszámítására, amely egyszerre működik rövid és Coulomb esetben is, és nem tartalmaz semmilyen renormálási tényezőt. A felületi integrálos formalizmust később általánosították háromtest-rendszerekre is [22]. A felületi integrálos formalizmusban alapvető szerepet játszik az ún. Coulomb-módosított síkhullám CDPW (Coulomb-distorted plane wave). Az ismeretlen szórás függvényt ugyanis két tag összegére bontják, és az egyik, az ismert tag éppen a CDPW. A szórás amplitúdót felületi integrál formájában is meg lehet adni, és ebben a kifejezésben is szerepel a CDPW.

Munkám egyik célkitűzése volt, hogy ennek a függvénynek a tulajdonságait alaposan megismerjem, majd pedig erre alapozva nagy pontosságú számítógépes programot készítsék a CDPW numerikus meghatározására.

A koordinátatérbeli szórás számítás nehézségét az okozza, hogy a hullámfügg-

vény megfelelő aszimptotikáját biztosítani kell. Minden olyan módszer, ami egyszerűsíti, vagy akár triviálissá teszi a határfeltételt, nagy jelentőségű. Optimális esetben azt szeretnénk elérni, hogy az aszimptotika explicit konstrukcióját elkerüljük, és csupán négyzetesen integrálható függvényeket használjunk. Kötött állapotok leírására kifinomult, nagy pontosságú többtest-módszereket fejlesztettek ki az utóbbi időkben: „no core” héjmodell, „coupled cluster” sorfejtés, Green-függvényes Monte-Carlo-eljárás. A kötött állapotú függvényeket használva megkíséreltek szórásinformációt is meghatározni [23–25]. A Lorentz-féle integráltranszformációs módszerrel három- és négytest-rendszerek fotoabszorpciós tulajdonságait vizsgálták [23, 24]. A kontinuum állapotok sűrűségét, amelyből a szórásfázistolás származtatható, is sikerült csak négyzetesen integrálható bázist használva meghatározni [26–28]. Az előbbi módszert és a komplex skálázást kombinálva pedig csatolt csatornás szórásiszámításokat is végeztek [29]. A kontinuum állapotok sűrűség meghatározásán alapuló eljárást tovább fejlesztették mind kéttest-, mind háromtest-rendszerek leírására [30].

A komplex skálázásnak nevezett technika számunkra azért érdekes, mert segítségével meg lehet változtatni a hullámfüggvény aszimptotikus viselkedését. A komplex skálázást az 1960-as évek végétől alkalmazzák a fizikában. Először az atom- és molekulafizikában használták rezonanciaállapotok meghatározására [31–33]. Később az atommagfizikában is elterjedt, amelyben főleg néhánytest-rendszerek leírására [34–37] vagy a mikroszkopikus klasztermo­dellben használják [38–41]. Többtest-rendszer esetén a komplex skálázás az egyik legmegbízhatóbb módszer rezonanciaállapotok tanulmányozására.

Felmerül a kérdés, lehet-e alkalmazni szórásproblémára a komplex skálázást. Már nagyon korán, a rezonanciaszámításokkal egy időben elkezdtek használni a komplex skálázást szórásproblémák megoldására [42, 43]. A legnagyobb előnye az eljárásnak az, hogy nincs szükség a bonyolult aszimptotikus határfeltétel explicit biztosítására. Ez azt jelenti, hogy a szórásprobléma megoldásának nehézsége a kötött állapotú problémák megoldásának szintjére redukálódik, azaz csupán kötött állapotú aszimptotika biztosításáról kell gondoskodni, ez pedig sokkal könnyebben elérhető, mint a szórás aszimptotika biztosítása. Félreértés ne essék, a szórás hullámfüggvény aszimptotikus alakját ismernünk kell! Az eljárás során azonban transzformációk révén olyan egyenletet kapunk, amelyben a keresendő megoldás viselkedése már igen egyszerű az aszimptotikus tartományban.

Sajnos azonban igen hamar kiderült, hogy csak abban az esetben alkalmazható biztonságosan a komplex skálázás szórásproblémára, ha a kölcsönhatás rövid hatótávolságú [42, 44]. Ez igen nagy hátrány, hiszen szinte mindig töltött

részecskék szórását vizsgáljuk, a Coulomb-kölcsönhatás nem hanyagolható el az atom- és a magfizikában. Volt néhány javaslat [45, 46], hogyan lehet ezt a problémát leküzdeni, de ezek nem nyertek széleskörű alkalmazást. A kezdeti próbálkozások után nagyon sokáig semmilyen előrehaladás nem történt a komplex skálázás szóráselméletben való alkalmazására.

Az áttörést a [47] munka hozta meg, ahol az ún. külső komplex skálázást alkalmazták kéttest-rendszerre, és megmutatták, hogy az eljárás működik Coulomb-potenciál jelenléte esetén. Ezen úttörő munka után a módszert kiterjesztették atomfizikai háromtest-feladatra, és a külső komplex skálázást sokféle atomfizikai problémára alkalmazták [48, 49], sőt, a teljes felbomlási küszöb felett is sikeres számításokat végeztek [50–52]. Az atomfizikában a külső komplex skálázás az egyik legsikeresebb eljárás, ami a felbomlási küszöb felett is alkalmazható. A módszernek azonban van egy gyenge pontja: a Coulomb-kölcsönhatást egy bizonyos elegendően nagy távolság után elhanyagolják. Ezt a hiányosságot mostanában az irodalomban is kritizálták, az eredeti eljárás módosítását javasolták, és azt kéttest-feladat esetében ellenőrizték is [53, 54]. Később pedig az új eljárást vázolták háromtest-problémára is [55].

Az irodalomban elterjedt az a vélekedés, hogy a standard komplex skálázással hosszú hatótávolságú kölcsönhatás esetén a szórási probléma nem oldható meg. Ebből egy kiutat javasoltak az [56] munkában, később pedig ezt részletesen is kidolgozták és alkalmazták [57]. Ez az eljárás az ún. kétpotenciál-formalizmuson alapszik. Itt feltesszük, hogy a kölcsönhatás rövid hatótávolságú és Coulomb-kölcsönhatási tagokat egyaránt tartalmaz. Ekkor a Coulomb-korrigált szórási amplitúdóra vonatkozó egyenletre már sikeresen alkalmazható a standard komplex skálázás. Az atom- és molekulafizikai rendszerek azonban csak tiszta Coulomb-kölcsönhatást tartalmaznak. Alkalmazható-e a standard komplex skálázás ilyen esetben, vagy pedig a külső komplex skálázásra vagyunk utalva? Erre a kérdésre válaszoltunk az [58] cikkünkben, ahol megmutattuk annak a módját, hogy hogyan lehet a standard komplex skálázással megoldani, egyszerűsíteni a Coulomb-kéttestszórási problémát.

Dolgozatom szerkezete a következő. A matematikai és fizikai alapokat, valamint a kutatási téma előzményeit a 2. fejezet tárgyalja. Az új és tisztán matematikai jellegű eredményeimet a 3. fejezet tartalmazza. Ezen eredmények CDPW-re való alkalmazását mutatja be a 4. fejezet. A CDPW numerikus meghatározásáról szól az 5. fejezet. A komplex skálázásnak tiszta Coulomb-rendszerekre való alkalmazhatóságát a 6. fejezetben mutatom be. Munkám eredményeit a 7. fejezetben foglalom össze.

2. fejezet

Szóráselméleti és matematikai alapok

Ebben a fejezetben a doktori munkám háttérét képező ismeretek rövid áttekintése található. Írása során eredményeim könnyen érthetővé tétele volt a legfőbb szempont, ezért mind a fizikának, mind a matematikának az eredmények szempontjából érdekléses részét próbáltam kiemelni, és az azokhoz nem szorosan kapcsolódó anyagot csak a legszükségesebb mértékben ismertetni.

2.1. Szóráselméleti alapok

Ezen fejezet alapja John R. Taylor [2] könyve. A kvantummechanika mikrofizikai rendszerek leírására komplex szeparábilis Hilbert-teret használ. A rendszer állapotait teljes mértékben jellemzik a Hilbert-tér 1-re normált vektorai. Ezeket a vektorokat szokás még állapotvektoroknak vagy hullámfüggvényeknek nevezni. Ez utóbbi elnevezés arra utal, hogy legtöbbször a tekintett Hilbert-tér valamilyen függvényter. A kvantummechanikai leírás kitüntet egy a Hilbert-téren értelmezett lineáris önadjungált operátort, a H Hamilton-operátort. Ennek az operátornak kettős szerepe van. Egyrésztől meghatározza az időfejlesztő operátort, és így a rendszer időbeli fejlődését. Másrészt a Hamilton-operátor sajátérték-egyenlete – az időfüggetlen Schrödinger-egyenlet – meghatározza a rendszer stacionárius, ún. kötött állapotait és sajátértékei megadják a rendszer energiájának lehetséges értékeit. Az időfüggetlen szóráselméletben a stacionárius szórás hullámfüggvény szintén megoldása az időfüggetlen

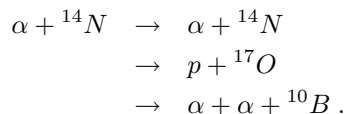
Schrödinger-egyenletnek, azonban olyan határfeltétellel, hogy a megoldás nem négyzetesen integrálható. Az ilyen megoldásokat a továbbiakban nem valódi sajátfüggvényeknek fogjuk nevezni. Szigorú matematikai értelemben csak a kötött állapotok hullámfüggvényei felelnek meg a rendszer sajátfüggvényeinek. Ennek egyszerűen az az oka, hogy matematikai értelemben a sajátfüggvény mindig eleme a Hilbert-térnek.

Kötött állapotok leírása során a leggyakrabban alkalmazott közelítő módszer, hogy felvesszünk egy bázist a Hilbert-térben, és a kötött állapot ismeretlen hullámfüggvényét sorbafejtjük a bázisállapotok szerint. Az ismeretlen sorfejtési együtthatókat pedig variációs módszerrel határozzuk meg. Ez a standard közelítés azonban nem működik szórási állapotokra, mivel a hullámfüggvény nem négyzetesen integrálható, nem eleme a Hilbert-térnek. Szórási állapotok leírása során biztosítani kell, hogy a hullámfüggvény aszimptotikusan megfelelően viselkedjen. Ennek a feladatnak a megoldása pedig numerikusan nehézséget jelent. Természetesen egytest-feladat esetén a Schrödinger-egyenlet numerikus megoldása adott határfeltétellel nem jelent problémát. A szórásprobléma numerikus megoldásának nehézségei akkor mutatkoznak meg, amikor kettőnél több részecske szórását akarjuk vizsgálni.

Az árnyékolási-renormálási módszert sikeresen alkalmazták olyan háromtest-feladatokra, amelyekben csak két részecske töltött. Az eljárást kiterjesztették arra az esetre is amikor mind a három részecske töltött, feltéve, hogy a bemenő és kijövő szórási csatornák csak két fragmentumból állnak [20, 59]. Jelenleg nem ismerünk olyan integrálegyenleten alapuló formalizmust, amely három töltött részecske esetén, a teljes felbomlási küszöb felett megbízhatóan működik. A magfizikában kifinomult numerikus módszerek léteznek, melyekkel két töltött részecskét tartalmazó háromtest-szórási problémát oldanak meg [60–66]. Ilyenek például a Faddeev formalizmuson [67–69] vagy az Alt–Grassberger–Sandhas-egyenleten [59, 70] alapuló eljárások. Más módszerek a szórási függvényre vonatkozó Schrödinger-egyenletet próbálják numerikusan megoldani [64, 66] vagy variációs módszert alkalmaznak [65, 71, 72]. A nehézségeket jól mutatja, hogy például proton-deuteron szórás esetén a két proton között Coulomb-kölcsönhatást teljes mértékben figyelembe vevő első számolást csak 2005-ben végeztek először [73]. A töltött háromtest-rendszer felbomlási küszöb feletti hullámfüggvényének teljes aszimptotikus alakját is csak nemrég sikerült meghatározni [74–76]. Az atomfizikában a külső komplex skálázást és az ún. konvergens szoros csatolós módszert használják leggyakrabban háromtest-rendszerek szórásának leírására. Ezen módszerek elméleti megalapozásában alapvető szerepet játszott a szóráselmélet felületi integrálos formalizmusa.

A nem relativisztikus szóráselmélet két részre bontható: időfüggetlen és

időfüggetlen tárgyalásra. Ezeken belül pedig megkülönböztethetünk egycsatornás és többcsatornás feladatot. A legtöbb ütközés során a végállapotban különböző részecskék – atommagok – keletkeznek. Amikor például elegendően nagy energiájú alfa-részecskét ütköztetünk nitrogén magokon, többek között a következő folyamatok jöhetnek létre:



Az ilyen esetet nevezzük többcsatornás problémának. Tipikus példája az egycsatornás feladatnak, amikor egyetlen részecske szóródik potenciálon, vagy amikor két szerkezet nélküli részecske egymáson való szórását vizsgáljuk. Az egycsatornás szórásra jó példa az alacsonyenergiás elektron-proton ütközés vagy az alfa-neutron szórás. Ilyen esetekben csak elasztikus szórás történik. Ha az alfa-neutron szórás energiáját 20 MeV fölé visszük, akkor már az alfa-részecske felbomolhat és sokcsatornás problémával állunk szemben. Az egycsatornás formalizmus sokkal egyszerűbb, mint a többcsatornás, de már ebben is megjelenik minden szóráselméleti fogalom.

A szórás kísérlet tipikusan időfüggő folyamat. Az ütköző részecskéket valahogy létrehozzuk, azokat ütköztetjük, majd pedig az ütközés megtörténte után detektorokkal megvizsgáljuk a végállapotot. Nagyon sok idővel az ütközés előtt és nagyon sok idővel az ütközés után az aktuális rendszer részecskéi szabad részecskéként viselkednek. A kezdő- és végállapotú aszimptotikus állapotokat az S szórás operátor köti össze. A gyakorlatban minden mérés – az ütközés időtartamához viszonyítva – sokkal az ütközési folyamat előtt vagy után történik, ezért a szórás operátor segítségével minden kísérletileg fontos információt megkaphatunk. Az időfüggő szóráselmélet az időfüggő Schrödinger-egyenleten alapul, és időfüggő állapotvektorokat használ a leírás során. Az időfüggetlen szóráselmélet az időfüggő leírásból származtatható, de heurisztikusan is bevezethető. A gyakorlatban az időfüggetlen hullámfüggvényt sorba fejtjük a Schrödinger-egyenlet bizonyos tulajdonságoknak eleget tevő megoldásai szerint.

2.1.1. Időfüggő szóráselmélet

Amikor egyetlen részecske szóródik egy potenciálon, vagy amikor a kéttest-problémát visszavezetjük redukált egytest-feladatra, akkor a Hamilton-operátor

$$H = H_0 + V(\mathbf{r}) \quad (2.1.1)$$

alakú, ahol H_0 a szabad mozgást leíró kinetikus energia operátora, és $V(\mathbf{r})$ vagy a potenciáltér, vagy a két részecske között ható kölcsönhatás operátora. A szabad mozgás Hamilton-operátora a Laplace-operátor segítségével adható meg

$$H_0 = -\frac{1}{2m}\Delta_{\mathbf{r}}, \quad (2.1.2)$$

ahol m a részecske tömege, vagy a kéttest-rendszer redukált tömege és $\hbar = 1$. A vastagon szedett betűk vektorokat jelölnek, a konkrét esetben \mathbf{r} a részecske helyét jelöli, vagy a két részecske relatív helyvektorát, továbbá \mathbf{r} a háromdimenziós \mathbb{R}^3 tér vektora, és ennek a vektornak a nagysága r .

Ebben a fejezetben használni fogjuk a Dirac-féle jelölési módot, azaz a \mathcal{H} Hilbert-tér elemeit $|\rangle$ jelöli. A $H_0|\mathbf{k}\rangle = E_k|\mathbf{k}\rangle$ Schrödinger-egyenlet leírja a szabad mozgást. Ennek az

$$\langle \mathbf{r}|\mathbf{k}\rangle = (2\pi)^{-3/2}e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} \quad (2.1.3)$$

megoldása. Azonban $(2\pi)^{-3/2}e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}$ nem eleme a Hilbert-térnek, azt szokás mondani, hogy (2.1.3) síkhullám nem valódi sajátfüggvénye H_0 -nak $E_k = k^2/(2m)$ sajátérték mellett. A (2.1.3) síkhullám nem csak H_0 -nak nem valódi sajátfüggvénye, de egyúttal az impulzus operátornak is nem valódi sajátfüggvénye, és a $\mathbf{k} \in \mathbb{R}^3$ impulzusvektor a megfelelő sajátérték.

Mint láttuk, a szórás folyamat időfüggő, ezért a kvantummechanikai leírás természetes kiindulópontja az időfüggő Schrödinger-egyenlet

$$i\frac{d}{dt}|\psi_t\rangle = H|\psi_t\rangle. \quad (2.1.4)$$

Az időfüggő $|\psi_t\rangle$ állapotvektort pályának fogjuk nevezni. Természetesen ennek semmi köze nincs a klasszikus fizikában megszokott részecskepályához. A (2.1.4) egyenlet általános megoldása a

$$|\psi_t\rangle = U(t)|\psi\rangle = e^{-iHt}|\psi\rangle \quad (2.1.5)$$

alakban írható, ahol $U(t)$ az unitér időfejllesztő operátor. Minden pálya egyértelműen jellemezhető egyetlen állapotvektorral, a $t = 0$ időpontbeli $|\psi\rangle$ állapottal. Feltételezhetjük, hogy nagyon sok idővel az ütközés előtt a rendszer úgy viselkedik, mintha szabad állapotban lenne. A szabad részecske mozgását az $U_0(t)$ szabad unitér időfejllesztő operátor írja le $U_0(t) = \exp(-iH_0t)$. Sejtésünket az

$$U(t)|\psi\rangle \xrightarrow[t \rightarrow -\infty]{} U_0(t)|\psi_{\text{in}}\rangle \quad (2.1.6)$$

formában fogalmazhatjuk meg, ahol $|\psi_{\text{in}}\rangle$ -t a rendszer bemenő aszimptotikus állapotának tekinthetjük. Hasonló módon képzelhetjük el a folyamatot nagyon sok idővel az ütközés után, bevezetve a megfelelő $|\psi_{\text{out}}\rangle$ aszimptotikus kimenő állapotvektort írhatjuk, hogy

$$U(t)|\psi\rangle \xrightarrow[t \rightarrow \infty]{} U_0(t)|\psi_{\text{out}}\rangle. \quad (2.1.7)$$

A $|\psi_{\text{in}}\rangle$ ($|\psi_{\text{out}}\rangle$) állapotvektort a $|\psi_t\rangle$ pálya bemenő (kimenő) aszimptotájának nevezzük. Rögtön felemerül az a kérdés, hogy vajon minden pályának van-e bemenő és kimenő aszimptotája. Erre a kérdésre az a válasz, hogy nem. Kötött állapotnak megfelelő $\exp(-iE_b t)|\varphi_b\rangle$ pályának nincs aszimptotája; itt E_b a kötött állapot sajátenergiája és $|\varphi_b\rangle$ a kötött állapot sajátfüggvénye.

A szóráselméletben fontos szerepet játszik három bizonyítandó állítás: az aszimptotikussági feltevés, a kötött és szórási állapotok ortogonalitása és az aszimptotikus teljesség. A kölcsönhatásra tett szigorú feltételek mellett kimondhatjuk, hogy bármely $|\psi_{\text{in}}\rangle \in \mathcal{H}$ állapot bemenő aszimptotikus állapot lehet, azaz van olyan $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ vektor és hozzá tartozó pálya, hogy $\lim_{t \rightarrow -\infty} U(t)|\psi\rangle = U_0(t)|\psi_{\text{in}}\rangle$. Hasonló állítás igaz a kimenő aszimptotára. Jelöljük \mathcal{R}_+ -szal és \mathcal{R}_- -szal a Hilbert-tér azon állapotait amelyeknek van bemenő illetve kimenő aszimptotája. Ekkor az \mathcal{R}_+ és \mathcal{R}_- alterek ortogonálisak a kötött állapotok \mathcal{B} alterére. Az aszimptotikus teljesség pedig azt jelenti, hogy $\mathcal{R}_+ = \mathcal{R}_- = \mathcal{R}$ és $\mathcal{H} = \mathcal{R} \oplus \mathcal{B}$, azaz a teljes Hilbert-tér a szórási állapotok és a kötött állapotok direkt összege.

Gömbszimmetrikus $V(r)$ potenciál esetén az előbbi állítások teljesülésének feltételei a következők: I. $V(r) = O(r^{-3-\epsilon})$, amint $r \rightarrow \infty$ ($\epsilon > 0$); II. $V(r) = O(r^{-3/2+\epsilon})$, amint $r \rightarrow 0$ ($\epsilon > 0$); III. $V(r)$ legfeljebb véges sok pont kivételével folytonos a $0 < r < \infty$ intervallumon [2]. Nyilvánvalóan ezek a feltételek a Coulomb-potenciálra nem teljesülnek.

A szóráselmélet egyik igen fontos alapfogalma a Møller-féle hullámoperátor. Az aszimptotikussági feltevés garantálja, hogy minden $|\psi_{\text{in}}\rangle \in \mathcal{H}$ bemenő aszimptotához létezik pálya. A pálya a $t = 0$ időpontban a $|\psi\rangle$ állapottal jellemezhető. A Møller-operátor összeköti az aszimptotát a tényleges pálya $t = 0$ időpontbeli állapotával

$$\Omega_+|\psi_{\text{in}}\rangle = \lim_{t \rightarrow -\infty} U^\dagger(t)U_0(t)|\psi_{\text{in}}\rangle = |\psi\rangle. \quad (2.1.8)$$

A kimenő aszimptotából is megkaphatjuk a rendszer $t = 0$ időpontbeli állapotát

$$\Omega_-|\psi_{\text{out}}\rangle = \lim_{t \rightarrow \infty} U^\dagger(t)U_0(t)|\psi_{\text{out}}\rangle = |\psi\rangle. \quad (2.1.9)$$

Az izometrikus Møller-operátorok a teljes Hilbert-teret képezik le a szórás állapotok \mathcal{R} alterére.

Vezessük még be a következő jelölést, ha a kísérletek során a gyorsító előállít egy bemenő $|\varphi\rangle$ hullámcsomagot ($|\psi_{in}\rangle = |\varphi\rangle$), akkor a tényleges pálya $t = 0$ időpontbeli állapotát $|\varphi+\rangle$ -al fogjuk jelölni ($\Omega_+|\varphi\rangle = |\varphi+\rangle$). Hasonlóképpen, ha a szórás után a mérőberendezés $|\chi\rangle$ szabad hullámcsomagot mér, akkor az ennek megfelelő tényleges pálya állapota a $t = 0$ időpontban $|\chi-\rangle$ ($\Omega_-|\chi\rangle = |\chi-\rangle$).

A bejövő és a kimenő szabad aszimptotikus állapotokat – az aszimptotákat – a szórás operátor kapcsolja össze

$$S|\psi_{in}\rangle = \Omega_-^\dagger \Omega_+ |\psi_{in}\rangle = |\psi_{out}\rangle . \quad (2.1.10)$$

Mivel szórás kísérletek során csak a bejövő és kimenő szabad állapotokat figyelik meg, a szórás operátor minden információt tartalmaz a szórás folyamatról. A gyorsítóból kilépő részecske az $U_0(t)|\psi_{in}\rangle$ szabad pályán mozog, ahol $|\psi_{in}\rangle = |\varphi\rangle$ a gyorsítóra jellemző hullámcsomag. Az ütközés után a mérőberendezés pedig valamilyen $|\psi_{out}\rangle = |\chi\rangle$ aszimptotát észlel. A kérdés, amire az elméletnek válaszolnia kell, az, hogy milyen $w(\chi \leftarrow \varphi)$ valószínűséggel észlelünk kimenő $|\chi\rangle$ aszimptotát, ha a bejövő aszimptotikus állapotot a $|\varphi\rangle$ hullámcsomag jellemzi. A keresett valószínűség nyilvánvalóan a

$$w(\chi \leftarrow \varphi) = |\langle \chi - | \varphi + \rangle|^2 = |\langle \chi | \Omega_-^\dagger \Omega_+ | \varphi \rangle|^2 = |\langle \chi | S | \varphi \rangle|^2 \quad (2.1.11)$$

módon számolható. Az S szórás operátor fontos tulajdonsága, hogy S unitér leképezés, valamint teljesíti az energiamegmaradást. Ez utóbbi a következőt jelenti. Mivel a Hamilton-operátor időtől független, az energiamegmaradás érvényben van: a Hamilton-operátor átlagértéke bármely pálya esetén független az időtől. Aszimptotikusan az energia a mozgási energia, ezért azt várjuk, hogy az S -operátor felcserélhető a szabad mozgás H_0 Hamilton-operátorával. Ez az állítás ($[S, H_0] = SH_0 - H_0S = 0$) be is bizonyítható felhasználva az ún. „intertwining” összefüggést:

$$H\Omega_\pm = \Omega_\pm H_0 . \quad (2.1.12)$$

A szórás formalizmusban az energiamegmaradás azt jelenti, hogy a bejövő állapot $\langle \psi_{in} | H_0 | \psi_{in} \rangle$ energiája megegyezik a kimenő aszimptotikus állapot $\langle \psi_{out} | H_0 | \psi_{out} \rangle$ energiájával.

Mivel a H_0 és az S -operátor felcserélhető, célszerű a H_0 kinetikus energia nem valódi sajátfüggvényeit használni a mátrixelemek kiszámításánál. Megmutatható, hogy az S -operátor impulzustérbeli alakja a

$$\langle \mathbf{k}' | S | \mathbf{k} \rangle = \delta(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) - i2\pi\delta(E_{k'} - E_k)t(\mathbf{k}' \leftarrow \mathbf{k}) \quad (2.1.13)$$

formában írható. Amikor a részecske szóródik az impulzusa megváltozhat, az energiája viszont nem. A $\delta(E_{k'} - E_k)$ Dirac-delta tényező miatt a $t(\mathbf{k}' \leftarrow \mathbf{k})$ függvény csak akkor definiált, ha $\mathbf{k}'^2 = \mathbf{k}^2$, ezért azt mondjuk, hogy $t(\mathbf{k}' \leftarrow \mathbf{k})$ nem más, mint a T -mátrixelem az energiahéjon. Történeti okok miatt be szokták vezetni az

$$f(\mathbf{k}' \leftarrow \mathbf{k}) = -(2\pi)^2 m t(\mathbf{k}' \leftarrow \mathbf{k}) \quad (2.1.14)$$

szórási amplitúdót. Gömbszimmetrikus potenciál esetén a $\mathbf{k}' \leftarrow \mathbf{k}$ kifejezés tulajdonképpen a \mathbf{k}' és \mathbf{k} vektorok által bezárt szögtől (ϑ) való függést jelöli, ezért szokásos még a $\cos(\vartheta)$ és a $\hat{\mathbf{k}}' \cdot \hat{\mathbf{k}}$ ekvivalens jelölés is, ahol $\hat{\mathbf{k}}'$ és $\hat{\mathbf{k}}$ a \mathbf{k}' és \mathbf{k} vektorok irányába mutató egységvektorok. A kísérletileg mérhető differenciális szórási hatáskeresztmetszet a

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}(\mathbf{k}' \leftarrow \mathbf{k}) = |f(\mathbf{k}' \leftarrow \mathbf{k})|^2 \quad (2.1.15)$$

módon írható.

Az időfüggetlen szóráselmélet bevezetéséhez szükségünk van még két operátorra. A Green-operátor definíciója:

$$G(z) = (z - H)^{-1}, \quad (2.1.16)$$

ahol z olyan komplex szám, amire az inverzképzés létezik. A matematikai szakirodalomban ezt az operátort rezolvens operátornak nevezik. A szabad Green-operátor definíciója hasonló: $G_0(z) = (z - H_0)^{-1}$. A $G(z)$ Green-operátor a H Hamilton-operátor spektrumától eltekintve minden z komplex számra létezik. A Green-operátor ismerete ekvivalens H sajátérték problémájának teljes megoldásával. A szabad és a teljes Green-operátor között fennáll az ún. Lippmann–Schwinger-egyenlet:

$$G(z) = G_0(z) + G_0(z)VG(z). \quad (2.1.17)$$

A T -operátor definíciója

$$T(z) = V + VG(z)V, \quad (2.1.18)$$

amiből levezethető, hogy

$$G(z) = G_0(z) + G_0(z)T(z)G_0(z). \quad (2.1.19)$$

A T -operátor ismerete tehát ekvivalens a Green-operátor ismeretével. A Lippmann–Schwinger-egyenlet a T -operátorra:

$$T(z) = V + G_0(z)VT(z). \quad (2.1.20)$$

Ezt az utóbbi integrálegyenletet szokták T mátrixelemeinek meghatározására használni numerikus számításokban. Egy másik lehetőség erre az iterációval nyerhető

$$T(z) = V + VG_0(z)V + VG_0(z)VG_0(z)V + \dots \quad (2.1.21)$$

ún. Born-sor valahány első tagjának meghatározása. Ha csak a jobb oldal első tagját használjuk T mátrixelemeinek közelítésére, akkor azt Born-közelítésnek szokás nevezni.

A Green-operátor segítségével megadhatjuk a Møller-féle hullámoperátor hatását tetszőleges bemenő/kimenő aszimptota esetén. Legyen a kimenő aszimptota $|\chi\rangle$, és a pálya $t = 0$ időpontbeli állapota $|\chi-\rangle$. Bebizonyítható a következő egyenlet:

$$\Omega_-|\chi\rangle = |\chi-\rangle = |\chi\rangle + \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \int G(E_k - i\epsilon)V|\mathbf{k}\rangle\langle\mathbf{k}|\chi\rangle d\mathbf{k} . \quad (2.1.22)$$

A bemenő aszimptotikus állapotból pedig az

$$\Omega_+|\varphi\rangle = |\varphi+\rangle = |\varphi\rangle + \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \int G(E_k + i\epsilon)V|\mathbf{k}\rangle\langle\mathbf{k}|\varphi\rangle d\mathbf{k} \quad (2.1.23)$$

formulával kaphatjuk meg a pálya állapotát a $t = 0$ időpontban.

Megmutatható, hogy az S -operátor a T -operátorral hozható kapcsolatba:

$$\langle\mathbf{k}'|S|\mathbf{k}\rangle = \delta(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) - i2\pi\delta(E_{k'} - E_k) \lim_{\epsilon \rightarrow +0} \langle\mathbf{k}'|T(E_k + i\epsilon)|\mathbf{k}\rangle . \quad (2.1.24)$$

A kísérletileg mérhető szórási hatáskeresztmetszetet meghatározó T -mátrixelem a T -operátor segítségével, tehát a

$$t(\mathbf{k}' \leftarrow \mathbf{k}) = \lim_{\epsilon \rightarrow +0} \langle\mathbf{k}'|T(E_k + i\epsilon)|\mathbf{k}\rangle \quad (2.1.25)$$

alakban adható meg.

2.1.2. Időfüggetlen szóráselmélet

Az időfüggetlen szóráselmélet alapfogalma az ún. stacionárius szórási hullámfüggvény. Ez a hullámfüggvény hasonlóan a $|\mathbf{k}\rangle$ impulzus „saját-függvényekhez” nem eleme a Hilbert-térnek. Ennek ellenére az időfüggetlen szóráselmélet az a leírási mód, amelyet a tényleges numerikus vizsgálatok leggyakrabban használnak. A stacionárius szórási állapotot a Møller-operátor segítségével definiáljuk:

$$|\mathbf{k}\pm\rangle = \Omega_\pm|\mathbf{k}\rangle . \quad (2.1.26)$$

Az „intertwining” összefüggés felhasználásával megmutatható, hogy ezek az állapotok „sajátfüggvényei” a Hamilton-operátornak, azaz

$$H|\mathbf{k}\pm\rangle = E_k|\mathbf{k}\pm\rangle. \quad (2.1.27)$$

Természetesen a fenti egyenletnek csak az alakja olyan, mint egy sajátérték-egyenleté, szigorú matematikai értelemben $|\mathbf{k}\pm\rangle$ nem sajátfüggvénye a Hamilton-operátornak. A $|\mathbf{k}\rangle$ impulzus „sajátfüggvények” a H_0 operátornak nem valódi sajátfüggvényei, a $|\mathbf{k}\pm\rangle$ stacionárius szórási állapotok H nem valódi sajátfüggvényei, a megfelelő sajátértékek azonban megegyeznek, értékük $E_k = k^2/(2m)$.

A stacionárius szórási állapotokra a (2.1.22) és (2.1.23) egyenletek segítségével a

$$|\mathbf{k}\pm\rangle = |\mathbf{k}\rangle + \lim_{\epsilon \rightarrow +0} G(E_k \pm i\epsilon)V|\mathbf{k}\rangle \quad (2.1.28)$$

egyenletet kapjuk. Ezt az egyenletet, valamint a T -operátor (2.1.18) definícióját felhasználva kapjuk, hogy

$$\lim_{\epsilon \rightarrow +0} T(E_k \pm i\epsilon)|\mathbf{k}\rangle = V|\mathbf{k}\pm\rangle. \quad (2.1.29)$$

A (2.1.25) szórási T -mátrixelem tehát a

$$t(\mathbf{k}' \leftarrow \mathbf{k}) = \langle \mathbf{k}' | V | \mathbf{k} + \rangle \quad (2.1.30)$$

alakban írható vagy pedig a

$$t(\mathbf{k}' \leftarrow \mathbf{k}) = \langle \mathbf{k}' - | V | \mathbf{k} \rangle \quad (2.1.31)$$

formában. Az előbbit poszt az utóbbit pedig prior összefüggésnek szokás nevezni. A stacionárius formalizmusban az utóbbi két kifejezés valamelyikének meghatározásával szokás a mérhető hatáskeresztmetszetet kiszámolni (ld.: (2.1.15)).

Az explicit (2.1.28) kifejezés helyett a stacionárius szórási függvényeket a

$$|\mathbf{k}\pm\rangle = |\mathbf{k}\rangle + \lim_{\epsilon \rightarrow +0} G_0(E_k \pm i\epsilon)V|\mathbf{k}\pm\rangle \quad (2.1.32)$$

Lippmann–Schwinger-egyenletből szokás meghatározni. Ez az egyenlet integrálegyenlet a stacionárius szórási hullámfüggvényre. A szabad Green-operátor konkrét alakja ugyanis ismert, zárt formában megadható [2]. Ha a stacionárius Schrödinger-egyenletet szeretnénk használni $|\mathbf{k}\pm\rangle$ kiszámítására, akkor

meg kell adnunk, hogy milyen határfeltétellel kell megoldanunk a parciális differenciálegyenlet formájú (2.1.27) stacionárius Schrödinger-egyenletet. A szabad Green-operátor konkrét alakjából, felhasználva a (2.1.32) egyenletet a következő aszimptotikus formula vezethető le:

$$\langle \mathbf{r} | \mathbf{k} + \rangle \xrightarrow{r \rightarrow \infty} (2\pi)^{-3/2} \left(e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} + f(k\hat{\mathbf{r}} \leftarrow \mathbf{k}) \frac{e^{ikr}}{r} \right). \quad (2.1.33)$$

A fenti egyenlet az elemi szóráselmélet jól ismert egyenlete. A szokásos fizikai interpretáció szerint a stacionárius szórási hullámfüggvény aszimptotikusan bemenő síkhullámból és szórt gömbhullámból áll össze. A gömbhullám együtt-hatója pedig meghatározza a hatás keresztmetszetet.

Ha a potenciál gömbszimmetrikus, azaz V csak r -től függ, akkor a parciális hullámok módszerét alkalmazva a (2.1.27) parciális differenciálegyenlet átmeny közönséges differenciálegyenletbe, az ún. radiális Schrödinger-egyenletbe. A síkhullám

$$\langle \mathbf{r} | \mathbf{k} \rangle = (2\pi)^{-3/2} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} = (2\pi)^{-3/2} \frac{1}{kr} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) i^l \hat{j}_l(kr) P_l(\hat{\mathbf{r}} \cdot \hat{\mathbf{k}}) \quad (2.1.34)$$

alakú sorfejtése jól ismert [77]. Itt a Riccati–Bessel-függvényt $\hat{j}_l(z)$ jelöli és $P_l(z)$ a Legendre-polinom. Az ismeretlen stacionárius szórási függvényt írjuk az

$$\langle \mathbf{r} | \mathbf{k} + \rangle = \psi_{\mathbf{k}}^+(\mathbf{r}) = (2\pi)^{-3/2} \frac{1}{kr} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) i^l \psi_{l,k}^+(r) P_l(\hat{\mathbf{r}} \cdot \hat{\mathbf{k}}) \quad (2.1.35)$$

formában. Az előző sorfejtést a (2.1.27) egyenletbe helyettesítve a redukált radiális Schrödinger-egyenletet kapjuk:

$$\left[\frac{1}{2m} \left(-\frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)}{r^2} \right) + V(r) - E_k \right] \psi_{l,k}^+(r) = 0. \quad (2.1.36)$$

Írjuk a szórási amplitúdót az

$$f(\mathbf{k}' \leftarrow \mathbf{k}) = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) f_l(k) P_l(\hat{\mathbf{k}}' \cdot \hat{\mathbf{k}}) \quad (2.1.37)$$

alakban, ahol $f_l(k)$ az ún. parciális szórási amplitúdó. Szokás még bevezetni az $s_l(k)$ parciális S -mátrixelemet és a $\delta_l(k)$ parciális fázistolást a következő definíciókkal:

$$f_l(k) = \frac{s_l(k) - 1}{2ik} = \frac{e^{i\delta_l(k)} \sin(\delta_l(k))}{k}. \quad (2.1.38)$$

Ha a differenciális hatáskeresztmetszetet integráljuk a térszögre, akkor a teljes hatáskeresztmetszetre a

$$\sigma = 4\pi \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) |f_l(k)|^2 \quad (2.1.39)$$

kifejezést kapjuk.

A $\psi_{l,k}^+(r)$ radiális szórási hullámfüggvény aszimptotikus viselkedése leszámaztatható a (2.1.33)-ból, és azt kapjuk, hogy

$$\psi_{l,k}^+(r) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \hat{j}_l(kr) + k f_l(k) e^{i(kr - l\pi/2)}. \quad (2.1.40)$$

Érdemes ezt az eredményt ekvivalens alakokba is átírni. Ha a fázistolással jellemezzük a szórási hullámfüggvényt, akkor az aszimptotika a

$$\psi_{l,k}^+(r) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} e^{i\delta_l(k)} \sin(kr - l\pi/2 + \delta_l(k)) \quad (2.1.41)$$

formában írható. Az aszimptotika fenti alakja mutatja a fázistolás jelentőségét. Nagy r értékekre a szórási hullámfüggvény ugyanis arányos a szabad megoldással

$$\hat{j}_l(kr) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \sin(kr - l\pi/2), \quad (2.1.42)$$

azzal a különbséggel, hogy az oszcillációk fázisa $\delta_l(k)$ -val eltolódott. Ha a parciális S -mátrixelemet használjuk, akkor a szórási függvény aszimptotikája

$$\psi_{l,k}^+(r) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \frac{i}{2} \left(\hat{h}_l^-(kr) - s_l(k) \hat{h}_l^+(kr) \right), \quad (2.1.43)$$

ahol $\hat{h}_l^\pm(z)$ a bejövő/kimenő Riccati–Hankel-függvény.

2.1.3. Felületi integrálos formalizmus

A szóráselmélet időfüggetlen leírási módjának egy új megközelítése jelent meg a [21] munkában, melyben a kéttest-feladatot vizsgálják a felületi integrálos formalizmusban. Később ezt a megközelítést kiterjesztették háromtest-problémára is [22]. A felületi integrálos formalizmus jellemzője, hogy nem hivatkozik a Green-operátorra. Továbbá olyan formulát ad a T -operátor mátrixelemére, ami egyaránt alkalmazható rövid hatótávolságú és Coulomb-kölcsönhatás esetén. A T -operátor mátrixelemére két formula is levezethető. Az egyik egy integrális alak, ahol az integrálás a teljes térre vonatkozik, egy

másik formula felületi integrál segítségével fejezi ki a T -operátor mátrixelemét. A felületi integrálos formalizmus előnye, hogy a hullámfüggvény szórt részét csak aszimptotikusan kell ismernünk. A felületi integrálos formalizmus a szóráselmélet egy új fejezete, amit csupán néhány éve fejlesztettek ki, ezért az alábbiakban részletesebben ismertetem az elméletet.

Tekintsünk rövid hatótávolságú potenciállal kölcsönható két részecskét. A rendszer stacionárius szórási hullámfüggvénye eleget tesz az időfüggetlen

$$(E - H)\psi_{\mathbf{k}}^{\pm}(\mathbf{r}) = 0 \quad (2.1.44)$$

Schrödinger-egyenletnek. A (2.1.44) egyenlet megoldásai közül azt keressük, amely aszimptotikusan eleget tesz a

$$\psi_{\mathbf{k}}^{+}(\mathbf{r}) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} (2\pi)^{-3/2} \left(e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} + f(k\hat{\mathbf{r}} \leftarrow \mathbf{k}) \frac{e^{ikr}}{r} \right) \quad (2.1.45)$$

formulának. A bejövő gömbhullámot tartalmazó, de szintén E energiájú $\psi_{\mathbf{k}}^{-}(\mathbf{r})$ megoldás így írható:

$$\psi_{\mathbf{k}}^{-}(\mathbf{r}) = (\psi_{-\mathbf{k}}^{+}(\mathbf{r}))^{*} . \quad (2.1.46)$$

A $\psi_{\mathbf{k}}^{-}(\mathbf{r})$ megoldás aszimptotikus alakja:

$$\psi_{\mathbf{k}}^{-}(\mathbf{r}) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} (2\pi)^{-3/2} \left(e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} + f^{*}(-k\hat{\mathbf{r}} \leftarrow \mathbf{k}) \frac{e^{-ikr}}{r} \right) . \quad (2.1.47)$$

Bontsuk fel a $\psi_{\mathbf{k}}^{\pm}(\mathbf{r})$ megoldásokat bemenő és szórt hullámra

$$\psi_{\mathbf{k}}^{\pm}(\mathbf{r}) = \phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) + \psi_{\mathbf{k}}^{sc\pm}(\mathbf{r}), \quad (2.1.48)$$

ahol

$$\phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \langle \mathbf{r} | \mathbf{k} \rangle = (2\pi)^{-3/2} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} \quad (2.1.49)$$

a bemenő síkhullám, a szórt hullámok pedig aszimptotikusan a

$$\psi_{\mathbf{k}}^{sc+}(\mathbf{r}) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} (2\pi)^{-3/2} f(k\hat{\mathbf{r}} \leftarrow \mathbf{k}) \frac{e^{ikr}}{r} \quad (2.1.50)$$

és

$$\psi_{\mathbf{k}}^{sc-}(\mathbf{r}) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} (2\pi)^{-3/2} f^{*}(-k\hat{\mathbf{r}} \leftarrow \mathbf{k}) \frac{e^{-ikr}}{r} \quad (2.1.51)$$

formába írhatók. A szórt hullámra a következő egyenletet kapjuk:

$$(E - H)\psi_{\mathbf{k}}^{sc\pm}(\mathbf{r}) = (H - E)\phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) . \quad (2.1.52)$$

Tekintsük most először a kimenő gömbhullámot tartalmazó $\psi_{\mathbf{k}}^{sc+}(\mathbf{r})$ függvényt. A (2.1.52) egyenletből azt kaphatjuk, hogy

$$\langle \psi_{\mathbf{k}'}^- | (E - H) \psi_{\mathbf{k}}^{sc+} \rangle_{r_0} = \langle \psi_{\mathbf{k}'}^- | (H - E) \phi_{\mathbf{k}} \rangle_{r_0}. \quad (2.1.53)$$

A mátrixelemekhez írt alsó r_0 index azt jelenti, hogy az integrálás nem a teljes térre történik, hanem az origó középpontú r_0 sugarú gömb belsejére.

A $\psi_{\mathbf{k}'}^-$ megoldás eleget tesz az

$$\langle (E - H) \psi_{\mathbf{k}'}^- | \psi_{\mathbf{k}}^{sc+} \rangle_{r_0} = 0 \quad (2.1.54)$$

egyenletnek. Vonjuk ki (2.1.53)-ból a (2.1.54) egyenletet; az eredmény:

$$\langle \psi_{\mathbf{k}'}^- | (E - H) \psi_{\mathbf{k}}^{sc+} \rangle_{r_0} - \langle (E - H) \psi_{\mathbf{k}'}^- | \psi_{\mathbf{k}}^{sc+} \rangle_{r_0} = \langle \psi_{\mathbf{k}'}^- | (H - E) \phi_{\mathbf{k}} \rangle_{r_0}. \quad (2.1.55)$$

Mivel az integrálás véges térrészre vonatkozik az előző egyenlet a

$$-\langle \psi_{\mathbf{k}'}^- | H_0 \psi_{\mathbf{k}}^{sc+} \rangle_{r_0} + \langle H_0 \psi_{\mathbf{k}'}^- | \psi_{\mathbf{k}}^{sc+} \rangle_{r_0} = \langle \psi_{\mathbf{k}'}^- | (H - E) \phi_{\mathbf{k}} \rangle_{r_0} \quad (2.1.56)$$

módon is írható. Végezzük most el az $r_0 \rightarrow \infty$ határátmenetet, ekkor azt kapjuk, hogy

$$\lim_{r_0 \rightarrow \infty} [-\langle \psi_{\mathbf{k}'}^- | H_0 \psi_{\mathbf{k}}^{sc+} \rangle_{r_0} + \langle H_0 \psi_{\mathbf{k}'}^- | \psi_{\mathbf{k}}^{sc+} \rangle_{r_0}] = \lim_{r_0 \rightarrow \infty} \langle \psi_{\mathbf{k}'}^- | (H - E) \phi_{\mathbf{k}} \rangle_{r_0}. \quad (2.1.57)$$

A fenti egyenlet bal oldalán álló térfogati integrált átalakíthatjuk felületi integrállá, (2.1.57) bal oldala a következő formában írható:

$$\lim_{r_0 \rightarrow \infty} \left[-\frac{r}{2m} \int_{r=r_0} f(k\hat{\mathbf{r}} \leftarrow \mathbf{k}) e^{ikr} e^{-i\mathbf{k}'\mathbf{r}} (-ik - i\mathbf{k}'\hat{\mathbf{r}}) d\hat{\mathbf{r}} \right]. \quad (2.1.58)$$

Ha figyelembe vesszük a síkhullám

$$e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} \sim \frac{2\pi}{ikr} \left(e^{ikr} \delta(\hat{\mathbf{r}} - \hat{\mathbf{k}}) - e^{-ikr} \delta(\hat{\mathbf{r}} + \hat{\mathbf{k}}) \right) \quad (2.1.59)$$

aszimptotikus ($r \rightarrow \infty$) alakját (2.1.58)-ban, akkor azt kapjuk, hogy

$$\lim_{r_0 \rightarrow \infty} \left[-\frac{\pi}{mk'} \left(f(\hat{\mathbf{k}}' \cdot \hat{\mathbf{k}}) e^{i(k-k')r} (k+k') - f(-\hat{\mathbf{k}}' \cdot \hat{\mathbf{k}}) e^{i(k+k')r} (k-k') \right) \right]_{r=r_0}. \quad (2.1.60)$$

Az energiamegmaradás miatt $k = k'$, így végül (2.1.57) bal oldalára kapjuk, hogy

$$\frac{-2\pi}{m} f(\hat{\mathbf{k}}' \cdot \hat{\mathbf{k}}), \quad (2.1.61)$$

ami pedig nem más, mint $t(\mathbf{k}' \leftarrow \mathbf{k})$, azaz a T -operátor mátrixeleme. A (2.1.57) egyenlet tehát így írható:

$$t(\mathbf{k}' \leftarrow \mathbf{k}) = \lim_{r_0 \rightarrow \infty} \langle \psi_{\mathbf{k}'}^- | (H - E) \phi_{\mathbf{k}} \rangle_{r_0}. \quad (2.1.62)$$

Az egész levezetés megismételhető, ha a kiindulási függvény $\psi_{\mathbf{k}}^{sc-}(\mathbf{r})$. Ekkor a következő eredményt kapjuk:

$$t(\mathbf{k}' \leftarrow \mathbf{k}) = \lim_{r_0 \rightarrow \infty} \langle (H - E) \phi_{\mathbf{k}'} | \psi_{\mathbf{k}}^+ \rangle_{r_0}. \quad (2.1.63)$$

A (2.1.62) egyenlet a következő alakban is írható:

$$t(\mathbf{k}' \leftarrow \mathbf{k}) = \lim_{r_0 \rightarrow \infty} \left[\langle (H - E) \phi_{\mathbf{k}'} | \psi_{\mathbf{k}}^- \rangle_{r_0} + \langle (E - H) \psi_{\mathbf{k}'}^- | \phi_{\mathbf{k}} \rangle_{r_0} \right]. \quad (2.1.64)$$

Ennek az egyenletnek a jobb oldalán levő térfogati integrált szintén felírhatjuk felületi integrálként, és eredményül a következőt kapjuk:

$$t(\mathbf{k}' \leftarrow \mathbf{k}) = -\frac{1}{2m} \lim_{r_0 \rightarrow \infty} r_0^2 \int \left(\psi_{\mathbf{k}'}^{-*} \frac{\partial \phi_{\mathbf{k}}}{\partial r} - \phi_{\mathbf{k}} \frac{\partial \psi_{\mathbf{k}'}^{-*}}{\partial r} \right) d\hat{\mathbf{r}}. \quad (2.1.65)$$

Hasonlóan átalakítva a (2.1.63) kifejezést, írhatjuk, hogy

$$t(\mathbf{k}' \leftarrow \mathbf{k}) = -\frac{1}{2m} \lim_{r_0 \rightarrow \infty} r_0^2 \int \left(\psi_{\mathbf{k}}^+ \frac{\partial \phi_{\mathbf{k}'}^*}{\partial r} - \phi_{\mathbf{k}'}^* \frac{\partial \psi_{\mathbf{k}}^+}{\partial r} \right) d\hat{\mathbf{r}}. \quad (2.1.66)$$

A T -operátor mátrixelemének (2.1.62) kifejezését prior alaknak, a (2.1.63) formulát pedig poszt alaknak nevezzük. A teljes térre vett integrális alakok a következők:

$$t^{prior}(\mathbf{k}' \leftarrow \mathbf{k}) = \langle \psi_{\mathbf{k}'}^- | (H - E) \phi_{\mathbf{k}} \rangle \quad (2.1.67)$$

és

$$t^{poszt}(\mathbf{k}' \leftarrow \mathbf{k}) = \langle (H - E) \phi_{\mathbf{k}'} | \psi_{\mathbf{k}}^+ \rangle. \quad (2.1.68)$$

A felületi integrál alakú prior és poszt formulákat a (2.1.65) és (2.1.66) egyenletek adják.

Ha a részecskék között Coulomb-kölcsönhatás hat, akkor az előzőekben végzett levezetési lépések megismételhetők, azzal a különbséggel, hogy a (2.1.49) síkhullám helyett az

$$e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} (kr \mp \mathbf{k}\mathbf{r})^{\pm i\gamma} \quad (2.1.69)$$

Coulomb-módosított síkhullámot kell alkalmaznunk. Az előző formulában a felső előjelek a poszt, az alsók pedig a prior alakhoz tartoznak, valamint γ a

Sommerfeld-paraméter. Coulomb-potenciál esetén a szórási függvény következő felbontását kell használnunk:

$$\psi_{\mathbf{k}}^{\pm}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}(kr \mp \mathbf{k}\mathbf{r})^{\pm i\gamma} + \psi_{\mathbf{k}}^{sc\pm}(\mathbf{r}). \quad (2.1.70)$$

A T -operátor mátrixelemére korábban levezetett integrális (2.1.67), (2.1.68) formulák és (2.1.65), (2.1.66) felületi integrál kifejezések továbbra is érvényben maradnak, feltéve, hogy a bennük szereplő $\phi_{\mathbf{k}}$ síkhullámot a megfelelő Coulomb-módosított síkhullámra cseréljük.

2.2. Komplex skálázás

A komplex skálázás igen bonyolult matematikai megalapozása a [78, 79] munkákban történt meg. Ebben a fejezetben mi nem ezt a vonalat követjük, hanem a [80, 81] áttekintő cikkek leírási módját.

Rövid hatótávolságú potenciál esetén rezonanciaállapot az

$$\left[\frac{1}{2m} \left(-\frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)}{r^2} \right) + V(r) - E \right] \psi(r) = 0 \quad (2.2.1)$$

radiális Schrödinger-egyenlet olyan megoldása, amely aszimptotikusan a

$$\psi(r) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} e^{ikr} \quad (2.2.2)$$

alakban írható és $r = 0$ -ban reguláris. Itt $E = k^2/(2m)$. Ha a k impulzus $\kappa - i\gamma$ ($\kappa, \gamma > 0$) alakú, akkor a (2.2.1) megoldása nem négyzetesen integrálható, a hullámfüggvény nem eleme a Hilbert-térnek. Tételezzük fel, hogy a $\psi(r)$ rezonanciaállapotot leíró megoldás r függvényében analitikusan kiterjeszhető a komplex síkra. Vezessünk be egy új függvényt a

$$\psi_{\theta}(r) = e^{i\theta/2} \psi(re^{i\theta}) \quad (2.2.3)$$

definícióval. Ezt a transzformációt szokás komplex skálázásnak nevezni. Könnyű belátni, hogy a most bevezetett függvény megoldása a komplexskálázott radiális Schrödinger-egyenletnek

$$\left[e^{-2i\theta} \frac{1}{2m} \left(-\frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)}{r^2} \right) + V(re^{i\theta}) - E \right] \psi_{\theta}(r) = 0. \quad (2.2.4)$$

A (2.2.4) sajátérték-egyenletnek a rezonanciák helyén lehetnek olyan E komplex energiájú megoldásai, amelyek már négyzetesen integrálhatók. Ez abból látszik,

hogya a rezonanciaállapotoknak megfelelő komplexskálázott megoldás aszimptotikusan

$$\psi_\theta(r) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \exp(-r[\kappa \sin(\theta) - \gamma \cos(\theta)] + ir[\kappa \cos(\theta) + \gamma \sin(\theta)]) \quad (2.2.5)$$

alakban írható, azaz a hullámfüggvény nagy r értékekre lecseng, ha $\gamma/\kappa > \text{tg}(\theta)$. A komplexskálázott rezonancia-hullámfüggvény tehát aszimptotikusan úgy viselkedik, mint egy kötött állapotú hullámfüggvény, azaz a végtelenben nullához tart. A híres ABC tétel [78, 79] a komplexskálázott Schrödinger-egyenlet spektrumának tulajdonságairól szól, illetve arról, hogy a komplex energiájú sajátértékek megfelelnek a Green-operátor nem fizikai síkon levő pólusainak. Ezek a pólusok viszont jelentős hatással vannak a rendszer fizikai tulajdonságaira.

A komplex skálázás természetesen bevezethető soktest-rendszerekre is. A komplex skálázás előnye, hogy segítségével minden olyan módszer, amely alkalmas kötött állapotok helyének meghatározására, alkalmazható rezonanciaállapotokra is, ha ezeket a komplexskálázott Schrödinger-egyenlettel írjuk le. Például a (2.2.4) egyenlet rezonancia-sajátfüggvényeit kifejtethetjük négyzetesen integrálható bázison. Többtest-feladat esetén ez a leggyakrabban alkalmazott módszer rezonanciaenergiák meghatározására.

Az ötletet, hogy hogyan lehet a komplex skálázást a szóráselméletben alkalmazni, a szórás hullámfüggvény (2.1.40) aszimptotikus alakja adja. Nagy r értékre a függvény két tagból áll $\hat{j}_l(kr) + A \exp(ikr)$, a második tag $A \exp(ikr)$ komplex skálázás után $A \exp(-kr \sin(\theta) + ikr \cos(\theta))$ formában írható, tehát négyzetesen integrálhatóvá válik, ha $0 < \theta < \pi$ és $k > 0$ valós szám. Keressük tehát a szórás hullámfüggvényt

$$\psi^+(r) = \hat{j}_l(kr) + \psi^{sc+}(r) \quad (2.2.6)$$

alakban, ahol a szóródást leíró $\psi^{sc+}(r)$ rész ismeretlen függvény, de tudjuk róla, hogy komplex skálázás után négyzetesen integrálhatóvá válik. A $\psi^+(r)$ függvény a (2.1.36) egyenletben szereplő $\psi_{l,k}^+(r)$ függvénynek felel meg, csak az l és k indexeket az átláthatóság kedvéért elhagytuk. A (2.2.6) alakot helyettesítsük (2.1.36)-ba, ekkor a következő inhomogén egyenletet kapjuk:

$$\left[E_k - \frac{1}{2m} \left(-\frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)}{r^2} \right) - V(r) \right] \psi^{sc+}(r) = \hat{j}(kr)V(r). \quad (2.2.7)$$

A hullámfüggvény szórt részére vonatkozó egyenlet komplex skálázás után így írható:

$$\left[E_k - \frac{1}{2m} e^{-2i\theta} \left(-\frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)}{r^2} \right) - V(re^{i\theta}) \right] \psi_\theta^{sc+}(r) =$$

$$= e^{i\theta/2} \hat{j}(kre^{i\theta}) V(re^{i\theta}), \quad (2.2.8)$$

ahol bevezettük a

$$\psi_{\theta}^{sc+}(r) = e^{i\theta/2} \psi^{sc+}(re^{i\theta}) \quad (2.2.9)$$

jelölést. A $\psi_{\theta}^{sc+}(r)$ négyzetesen integrálható, ezért közelíthető négyzetesen integrálható, aszimptotikusan nullához tartó függvények szerinti sorfejtéssel. A komplex skálázás igen nagy előnye az, hogy a (2.1.40) határfeltételt nem kell explicit módon beépíteni a próbafüggvénybe.

Észrevehetjük, hogy nagy különbség van a komplex skálázás alkalmazási módjában attól függően, hogy rezonanciaállapotot vagy szórási állapotot akarunk meghatározni. Az első esetben a teljes rezonancia-hullámfüggvényre, míg a második esetben csak a szórt hullámfüggvényre kell a komplex skálázást alkalmazni.

Amikor rövid hatótávolságú és Coulomb-potenciál egyszerre van jelen, akkor ismert, hogyan kell az előbbieken rövid hatótávolságú esetre ismertetett módszert általánosítani [57]. Tiszta Coulomb-kölcsönhatás esetére mi mutattuk meg [58] először, hogy a komplex skálázás hogyan alkalmazható a Coulomb-szórási problémára.

2.3. Az aszimptotikus analízis alapfogalmai

Ebben a fejezetben az aszimptotikus analízis alapvető fogalmait tekintjük át. Az anyag összeállításánál dolgozatomban következő fejezeteinek jól érthetősége volt a legfőbb szempont, ezért nem bocsátkozom részletes leírásba, csupán a legszükségesebb, a témához szorosan kapcsolódó alapismereteket foglalom össze. A további részletek iránt érdeklődő olvasóknak ajánlom a [82, 83] hivatkozású könyveket.

2.3.1. A O - és o -szimbólumok

A következőkben legyen $K \subset \mathbb{C}$, továbbá f , f_i és g , g_i K -n értelmezett függvények minden $i = 1, \dots, n$ -re ($n \in \mathbb{N}$), valamint z_0 a K halmaz egy torlódási pontja.

2.1 Definíció. Ha létezik olyan $A > 0$ valós szám, hogy $|f(z)| \leq A|g(z)|$ minden z -re K -ban, akkor azt mondjuk, hogy f „nagy ordó” g , azaz $f = O(g)$.

2.2 Definíció. Ha létezik olyan $A > 0$ valós szám és z_0 -nak olyan $U \subset K$ környezete, hogy $|f(z)| \leq A|g(z)|$ minden z -re U -ban, akkor azt mondjuk, hogy $f = O(g)$, amint $z \rightarrow z_0$.

2.3 Definíció. Ha minden $\epsilon > 0$ valós számhoz létezik z_0 -nak olyan $U_\epsilon \subset K$ környezete, hogy $|f(z)| \leq \epsilon |g(z)|$ minden z -re U_ϵ -ban, akkor azt mondjuk, hogy f „kis ordó” g , azaz $f = o(g)$, amint $z \rightarrow z_0$.

A következő három állítás $z \rightarrow z_0$ esetén érvényes.

2.4 Állítás. Ha $f = o(g)$ és $g = o(h)$ teljesülnek, akkor egyrészt $f = O(g)$, másrészt $f = o(h)$. A tranzitivitás hasonlóan igaz a O -szimbólumra is.

2.5 Állítás. Ha $f = O(g)$, és $a > 0$ valós szám, akkor $|f|^a = O(|g|^a)$.

2.6 Állítás. Legyen $f_i = O(g_i)$ minden $i = 1, \dots, n$ -re, ekkor tetszőleges $\{a_i\}_{i=1}^n$ komplex számsorozat esetén

$$\sum_{i=1}^n a_i f_i = O\left(\sum_{i=1}^n |a_i| |g_i|\right). \quad (2.3.1)$$

2.3.2. Aszimptotikus sorozatok és sorok

A következőkben legyen $K \subset \mathbb{C}$, továbbá $i \geq 0$ esetén $\{f_i\}$ a K -n értelmezett függvények sorozata, valamint z_0 a K halmaz egy torlódási pontja.

2.7 Definíció. Ha létezik z_0 -nak olyan $U \subset K$ környezete, hogy minden U -beli $z \neq z_0$ komplex számra $f_i(z) \neq 0$, és minden i -re $f_{i+1} = o(f_i)$, amint $z \rightarrow z_0$, akkor $\{f_i\}$ -t aszimptotikus sorozatnak nevezzük.

2.8 Állítás. Egy aszimptotikus sorozat bármely részsorozata is aszimptotikus sorozat.

2.9 Állítás. Ha $\{f_i\}$ egy aszimptotikus sorozat és $a > 0$ valós szám, akkor $\{|f_i|^a\}$ is aszimptotikus sorozat.

Ezentúl $\{f_i\}$ aszimptotikus sorozatot jelöl $z \rightarrow z_0$ esetre, a Ψ szimbólum pedig függvényt. Az $\{a_i\}$ ($i \geq 0$) számsorozat tagjai z -től független, komplex számok lesznek.

2.10 Definíció. (Poincaré) Azt mondjuk, hogy a $\sum_i a_i f_i(z)$ formális sor a $\Psi(z)$ függvény $\{f_i\}$ aszimptotikus sorozathoz tartozó aszimptotikus sora, amint $z \rightarrow z_0$, ha bármely $N \geq 0$ egész számra

$$\Psi(z) = \sum_{i=0}^N a_i f_i(z) + o(f_N) , \quad (2.3.2)$$

amint $z \rightarrow z_0$. Ezt formálisan a

$$\Psi(z) \sim \sum_{i=0}^{\infty} a_i f_i(z) \quad (2.3.3)$$

kifejezéssel jelöljük.

Fontos megjegyezni, hogy az aszimptotikus sorok nem szükségképpen konvergensek! Együtthatóikat a definícióból fakadóan az

$$a_N = \lim_{z \rightarrow z_0} \frac{\Psi(z) - \sum_{i=0}^{N-1} a_i f_i(z)}{f_N(z)} \quad (2.3.4)$$

képlettel számolhatjuk. Megmutatható, hogy az abszolút hiba az első elhagyott tag nagyságrendjébe esik, azaz:

$$\Psi(z) = \sum_{i=0}^{N-1} a_i f_i(z) + O(f_N) . \quad (2.3.5)$$

2.11 Állítás. *Egy függvény valamely aszimptotikus sorozathoz tartozó aszimptotikus sora egyértelmű, de az a függvényt nem határozza meg egyértelműen.*

2.3.3. Aszimptotikus hatványsorok

Ebben a részben z_0 -t végtelen távoli pontnak tekintjük, és a $K \subset \mathbb{C}$ halmazt az $\alpha < \arg(z) < \beta$ szektorral adjuk meg. Továbbá legyenek Ψ és Φ K -n értelmezett függvények, valamint az $\{a_i\}$, $\{b_i\}$ ($i \geq 0$) számsorozatok tagjai komplex, z -től független konstansok.

2.12 Definíció. Amennyiben létezik a Ψ függvény $\{z^{-i}\}$ ($i \geq 0$) aszimptotikus sorozathoz tartozó aszimptotikus sora, akkor azt a Ψ aszimptotikus hatványsorának nevezzük.

2.13 Állítás. Ha a Ψ és Φ függvényeknek létezik K -n aszimptotikus hatványsora, azaz

$$\Psi(z) \sim \sum_{i=0}^{\infty} a_i z^{-i} \quad \text{és} \quad \Phi(z) \sim \sum_{i=0}^{\infty} b_i z^{-i}, \quad (2.3.6)$$

amint $|z| \rightarrow \infty$, akkor igazak a következők:

(a) tetszőleges A és B komplex számok esetén

$$A\Psi(z) + B\Phi(z) \sim \sum_{i=0}^{\infty} (Aa_i + Bb_i) z^{-i}, \quad (2.3.7)$$

(b) szorzatukra

$$\Psi(z)\Phi(z) \sim \sum_{i=0}^{\infty} \left(\sum_{j=0}^i a_{i-j} b_j \right) z^{-i}, \quad (2.3.8)$$

(c) $a_0 \neq 0$ esetén létezik Ψ reciproka

$$\frac{1}{\Psi(z)} \sim \frac{1}{a_0} + \sum_{i=1}^{\infty} c_i z^{-i}, \quad (2.3.9)$$

ahol a c_i együtthatókat az a_i együtthatókból szukcesszíve kapjuk.

2.14 Állítás. Ha Ψ folytonosan differenciálható és deriváltjának létezik aszimptotikus hatványsora $|z| \rightarrow \infty$ esetén, akkor

$$\Psi'(z) \sim - \sum_{i=1}^{\infty} i a_i z^{-(i+1)}, \quad (2.3.10)$$

amint $|z| \rightarrow \infty$.

2.4. Speciális függvények

Itt olyan speciális függvényekről lesz szó, melyek ismerete elengedhetetlen a Matematikai eredmények című fejezet megértéséhez.

2.4.1. A gamma- és a nem teljes gamma-függvény

A gamma-függvény tulajdonképpen a faktoriális általánosítása. Eulertől származik a

$$\Gamma(z) \equiv \int_0^{\infty} t^{z-1} e^{-t} dt \quad (2.4.1)$$

definíció [84,85], mely $\operatorname{Re}[z] > 0$ esetén érvényes. A definícióból fakadóan teljesül a

$$\Gamma(z+1) = z\Gamma(z), \quad (2.4.2)$$

és pozitív egész n -ek esetén a

$$\Gamma(n) = (n-1)! \quad (2.4.3)$$

kifejezés.

A gamma-függvény egy analitikus folytatását – a bal félsíkra – a (2.4.2) képlet ismételt alkalmazásával kapjuk. Ezen a módon olyan, a nempozitív egészek kivételével az egész komplex síkon jól definiált függvényt kapunk, melynek a $z = -n$, $n = 0, 1, 2, \dots$ pontokban elsőrendű pólusai vannak, és ezeken a helyeken a reziduum $(-1)^n/n!$. A következő formula $z \in \mathbb{C}$, de $z \neq 0, -1, -2, \dots$ esetén érvényes

$$\Gamma(z) = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{n! n^z}{z(z+1)\dots(z+n)}. \quad (2.4.4)$$

Igaz továbbá a

$$\Gamma(nz) = (2\pi)^{(1-n)/2} n^{nz-1/2} \prod_{k=0}^{n-1} \Gamma\left(z + \frac{k}{n}\right) \quad (2.4.5)$$

azonosság, ahol $n = 1, 2, \dots$

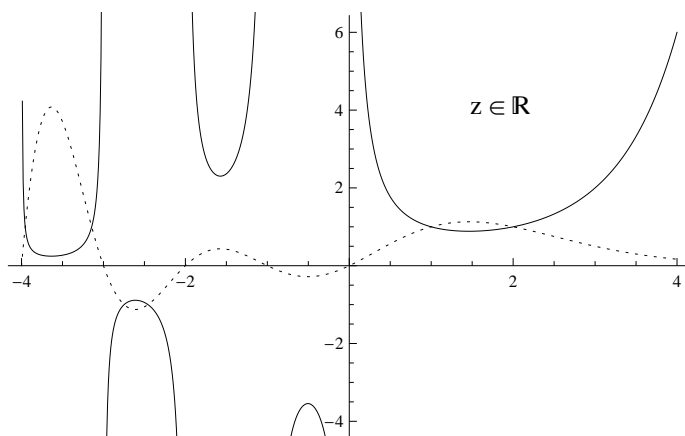
A 2.1 ábrán a valós gamma-függvény és reciproka van kirajzolva. A folytonos vonal a $\Gamma(z)$, míg a szaggatott vonal az $1/\Gamma(z)$ függvényt mutatja. Jól láthatóak a szingularitások.

Itt érdemes bevezetni a Pochhammer-szimbólumot [85, 86]:

$$(a)_n \equiv a(a+1) \cdot \dots \cdot (a+n-1), \quad (2.4.6)$$

$n > 0$ egészre és $(a)_0 = 1$, ahol $a \in \mathbb{C}$. A definícióból rögtön következik, hogy

$$(a)_n = \frac{\Gamma(a+n)}{\Gamma(a)}. \quad (2.4.7)$$



2.1. ábra. A valós — $\Gamma(z)$ és $\cdots 1/\Gamma(z)$ függvények.

Negatív indexekre írhatjuk, hogy

$$(a)_{-n} = \frac{\Gamma(a-n)}{\Gamma(a)} = \frac{(-1)^n}{(1-a)_n}, \quad (2.4.8)$$

ahol $a \neq 1, 2, \dots, n$ és $n = 1, 2, \dots$. Továbbá az n és k nemnegatív egészekkel igaz, hogy

$$(a)_{n+k} = (a+n)_k (a)_n; \quad (2.4.9)$$

$$(a)_{n-k} = \frac{(-1)^k (a)_n}{(1-a-n)_k}, \quad a \neq 1-n, 2-n, \dots, k-n; \quad (2.4.10)$$

$$(a+n)_k = \frac{(a)_k (a+k)_n}{(a)_n}, \quad a \neq 0, 1, \dots, n-1; \quad (2.4.11)$$

$$(a-n)_k = \frac{(a)_k (1-a)_n}{(1-a-k)_n}, \quad a \neq 1-k, 2-k, \dots, n-k. \quad (2.4.12)$$

Amennyiben az utóbbi három egyenlőség valamelyikének a jobb oldalán található nevező Pochhammer-szimbóluma 0 indexű, a kiegészítő feltételnek nem kell teljesülnie, mivel $(0)_0 = 1$.

A nem teljes gamma-függvény központi szerepet játszik a ${}_2F_2(a, a; a+l+1, a-l; z)$ függvénnyel kapcsolatos további vizsgálatainkban, így erről is ejtek

néhány szót. A nem teljes gamma-függvényt definiáló

$$\gamma(a, z) \equiv \int_0^z t^{a-1} e^{-t} dt, \quad \operatorname{Re}[a] > 0 \quad (2.4.13)$$

képletből jól látszik, hogy a függvény neve az integrálási határokból fakad. A definícióból könnyen kapjuk, hogy

$$\gamma(a, z) = z^a \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-z)^n}{(a+n)n!} \quad (2.4.14)$$

$\operatorname{Re}[a] > 0$ esetén. Ezen alak segítségével elvégezhetjük a γ -függvény analitikus kiterjesztését a -ban az egész komplex síkra, kivéve természetesen az $a = 0, -1, -2, \dots$ pontokat, hiszen itt elsőrendű pólusok vannak. Igaz továbbá a

$$\gamma(a+1, z) = a\gamma(a, z) - z^a e^{-z}, \quad \operatorname{Re}[a] > 0 \quad (2.4.15)$$

rekurzió.

A nem teljes gamma-függvény komplementere

$$\Gamma(a, z) \equiv \int_z^{\infty} t^{a-1} e^{-t} dt \quad (2.4.16)$$

már az egész komplex síkon értelmezhető a -ban és z -ben is. Könnyen belátható a

$$\Gamma(a+1, z) = a\Gamma(a, z) + z^a e^{-z} \quad (2.4.17)$$

rekurzió, valamint a $\gamma(a, z)$ -t és $\Gamma(a, z)$ -t összekötő

$$\Gamma(a) = \gamma(a, z) + \Gamma(a, z), \quad \operatorname{Re}[a] > 0 \quad (2.4.18)$$

azonosság. Programozási szempontból fontos még például a

$$\Gamma(a, z) = \frac{z^a e^{-z}}{z + \frac{1-a}{1 + \frac{1}{z + \frac{2-a}{1 + \frac{2}{z + \frac{3-a}{\dots}}}}}} \quad (2.4.19)$$

länctört, mely bármely a -ra és $z \neq 0$ -ra érvényes.

2.4.2. Hipergeometrikus függvények

Az általánosított hipergeometrikus függvényt a

$${}_pF_q \left(\begin{matrix} a_1, & \dots, & a_p \\ b_1, & \dots, & b_q \end{matrix} \middle| z \right) \equiv \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(a_1)_n \dots (a_p)_n}{(b_1)_n \dots (b_q)_n} \frac{z^n}{n!} \quad (2.4.20)$$

képlet definiálja, ahol $p, q = 0, 1, 2, \dots$, továbbá $z, a_i, b_j \in \mathbb{C}$, ahol $i = 1, \dots, p$ és $j = 1, \dots, q$, valamint $b_j \neq 0, -1, -2, \dots$ (ld.: [84–87]). Használni fogjuk még a

$${}_pF_q \left(\begin{matrix} a_1, & \dots, & a_p \\ b_1, & \dots, & b_q \end{matrix} \middle| z \right) = {}_pF_q(a_1, \dots, a_p; b_1, \dots, b_q; z) = {}_pF_q((a_p); (b_q); z) \quad (2.4.21)$$

ekvivalens jelöléseket is.

A (2.4.20) sor akkor és csak akkor konvergens, ha a következő feltételek közül egy teljesül:

$$1) \quad p \leq q \quad \text{és} \quad |z| < \infty; \quad (2.4.22)$$

$$2) \quad p = q + 1 \quad \text{és} \quad |z| < 1; \quad (2.4.23)$$

$$3) \quad p = q + 1, \quad |z| = 1, \quad \psi_q \equiv \operatorname{Re} \left[\sum_{j=1}^q b_j - \sum_{i=1}^{q+1} a_i \right] > 0; \quad (2.4.24)$$

$$4) \quad p = q + 1, \quad |z| = 1, \quad z \neq 1, \quad -1 < \psi_q \leq 0. \quad (2.4.25)$$

Az első feltétel teljesülése esetén az abszolút konvergencia is belátható. A hipergeometrikus függvények értéke független az a_i -k és b_j -k sorrendjétől. Teljesül rájuk a

$${}_pF_q \left(\begin{matrix} a_1, & \dots, & a_p \\ b_1, & \dots, & b_q \end{matrix} \middle| 0 \right) = {}_pF_q \left(\begin{matrix} 0, & a_2, & \dots, & a_p \\ b_1, & b_2, & \dots, & b_q \end{matrix} \middle| z \right) = 1, \quad (2.4.26)$$

és a

$${}_pF_q((a_{p-r}), (c_r); (b_{q-r}), (c_r); z) = {}_{p-r}F_{q-r}((a_{p-r}); (b_{q-r}); z) \quad (2.4.27)$$

összefüggés, ahol $(c_r) \in \mathbb{C}$ és $r = 1, 2, \dots, \min[p, q]$. Legyen $m \geq 0$, $1 \leq s \leq p$ és $n \geq m + 1$ egészek, ekkor $a_s = -m$ esetén $(-m)_n = (-m)(-m+1) \dots (-m+m-1)0(-m+m+1) \dots (-m+n-1) = 0$, ebből fakadóan átindexelés után a

$${}_pF_q(-m, (a_{p-1}); (b_q); z) = \sum_{n=0}^m \frac{(-m)_n (a_1)_n \dots (a_{p-1})_n}{(b_1)_n \dots (b_q)_n} \frac{z^n}{n!} \quad (2.4.28)$$

képlethez jutunk. A z szerinti n -edik deriváltra pedig igaz, hogy

$$\frac{d^n}{dz^n} {}_pF_q((a_p); (b_q); z) = \frac{(a_1)_n \cdots (a_p)_n}{(b_1)_n \cdots (b_q)_n} {}_pF_q((a_p) + n; (b_q) + n; z) . \quad (2.4.29)$$

Gyakran és sokrétűen használják például az első- és másodfajú konfluens hipergeometrikus függvényeket, melyeket rendre az

$$M(a, b, z) \equiv {}_1F_1(a; b; z) \equiv \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(a)_n}{(b)_n} \frac{z^n}{n!} , \quad (2.4.30)$$

ahol $|z| < \infty$ és $b \neq 0, -1, -2, \dots$, valamint az

$$\begin{aligned} U(a, b, z) &\equiv \frac{\Gamma(1-b)}{\Gamma(a-b+1)} M(a, b, z) + \frac{\Gamma(b-1)}{\Gamma(a)} z^{1-b} M(a-b+1, 2-b, z) \\ &= z^{-a} {}_2F_0(a, 1+a-b; ; -1/z) , \end{aligned} \quad (2.4.31)$$

ahol $|z| < \infty$ és $b \neq 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ képletek definiálnak.

Sok fontos függvény előállítható hipergeometrikus függvények segítségével, ilyen például a nem teljes gamma-függvény és komplementere, melyekre

$$\gamma(a, z) = a^{-1} z^a {}_1F_1(a, 1+a, -z) , \quad (2.4.32)$$

$$\Gamma(a, z) = e^{-z} U(1-a, 1-a, z) = e^{-z} z^{-a} {}_2F_0(a, 1+a-b; ; -1/z) . \quad (2.4.33)$$

3. fejezet

Matematikai eredmények: a ${}_2F_2(a, a; a + l + 1, a - l; z)$ függvény vizsgálata

Ezen fejezet tartalmazza a későbbiekben felhasználni kívánt új matematikai állításokat és azok bizonyításait, melyeket a [88] hivatkozású cikkben publikáltunk. Sikerült felírnom a ${}_2F_2(a, a; a + l + 1, a - l; z)$ hipergeometrikus függvény három ekvivalens alakját, ahol l nemnegatív egész, $z \in \mathbb{C} \setminus \{0\}$, $a \in \mathbb{C} \setminus \mathbb{Z}$ és $\operatorname{Re}[a] > 0$. Ennek az eredménynek a függvény numerikus számításában, programozásában van jelentősége, megkönnyíti azt. Továbbá meghatároztam a függvény aszimptotikáját. Eredményeim például a szóráselméleti felületi integrálos formalizmusban hasznosulhatnak.

A három ekvivalens alak megadásához szükségünk lesz a következő lemmára.

3.1 Lemma. *Legyen l nemnegatív egész és $\mathbb{X}_l := \{x \in \mathbb{Z} \mid x \leq l\}$. Ha $z \in \mathbb{C} \setminus \{0\}$ és $a \in \mathbb{C} \setminus \mathbb{X}_l$, akkor*

$$\begin{aligned} \sum_{k=0}^l (-1)^k \binom{l}{k} (l+1)_k (1-a)_k {}_1F_1(-k, a-k; z) \frac{z^{-k}}{k!} &= \\ &= (-1)^l {}_3F_1(1-a, -l, l+1; 1; -1/z). \end{aligned} \tag{3.0.1}$$

Bizonyítás. A konfluens hipergeometrikus függvény definíciójából adódóan a fenti feltételek mellett

$${}_1F_1(-k, a - k; z) = \sum_{s=0}^k (-1)^s \binom{k}{s} \frac{z^s}{(a - k)_s}. \quad (3.0.2)$$

Ezt felhasználva (3.0.1) bal oldalán a

$$\sum_{k=0}^l \sum_{s=0}^k (-1)^{k+s} \binom{l}{k} \binom{k}{s} \frac{(l+1)_k (1-a)_k}{k! (a-k)_s} z^{s-k} \quad (3.0.3)$$

képlethez jutunk, majd használva a jól ismert

$$\sum_{s=0}^k c_s = \sum_{s=0}^k c_{k-s} \quad (3.0.4)$$

és a könnyen belátható

$$\sum_{k=0}^l \sum_{s=0}^k c_{k,s} = \sum_{s=0}^l \sum_{k=s}^l c_{k,s} = \sum_{s=0}^l \sum_{k=0}^{l-s} c_{l-k,s} \quad (3.0.5)$$

formulákat, a (3.0.1) egyenlet bal oldalát szeparálhatóvá tehetjük, így a

$$(-1)^l \sum_{s=0}^l \binom{l}{s} (l+1)_s (1-a)_s \frac{z^{-s}}{s!} \varepsilon_l(s) \quad (3.0.6)$$

kifejezést kapjuk, ahol

$$\varepsilon_l(s) = \sum_{k=0}^{l-s} (-1)^k \binom{l-s}{k} \frac{(l+1)_{l-k} s!}{(l+1)_s (l-k)!}. \quad (3.0.7)$$

A

$$\sum_{r=0}^n (-1)^r \binom{n}{r} \frac{\Gamma(r+g)}{\Gamma(r+f)} = \frac{\Gamma(n+f-g)\Gamma(g)}{\Gamma(f-g)\Gamma(n+f)} \quad (3.0.8)$$

(ld.: 0.160.2 [89]) formula révén $\varepsilon_l(s) = 1$, így a (3.0.6) összeg $(-1)^l {}_3F_1(1 - a, -l, l + 1; 1; -1/z)$ lesz. \square

A három ekvivalens alakra vonatkozó állítás a következő:

3.2 Állítás. Legyen l nemnegatív egész, $z \in \mathbb{C} \setminus \{0\}$, $a \in \mathbb{C} \setminus \mathbb{Z}$ és $\operatorname{Re}[a] > 0$, ekkor ${}_2F_2(a, a; a + l + 1, a - l; z)$ felírható a következő ekvivalens alakokban:

$$(-1)^l \frac{(a)_{l+1}}{(1-a)_l} \sum_{k=0}^l (-1)^k \binom{l}{k} \frac{(l+1)_k}{(a)_{k+1}} {}_1F_1(a, a+k+1; z), \quad (3.0.9)$$

$$(-z)^{-a} \frac{(a)_{l+1}}{(1-a)_l} \sum_{k=0}^l \binom{l}{k} \frac{(l+1)_k}{k!} \gamma(a+k, -z) z^{-k}, \quad (3.0.10)$$

$$\frac{(a)_{l+1}}{(1-a)_l} (-z)^{-a} (\kappa_l^+(a, z) + e^z \kappa_l^-(a, z)), \quad (3.0.11)$$

ahol

$$\kappa_l^-(a, z) = (-1)^{l+1} \sum_{n=0}^l \frac{(l+n)!}{n!(l-n)!} \frac{(-1)^n}{z^n} U(-a+1, -a-n+1, -z) \quad (3.0.12)$$

és

$$\kappa_l^+(a, z) = \Gamma(a) {}_3F_1(a, -l, l+1; 1; -1/z). \quad (3.0.13)$$

Itt $U(a, b, z)$ a másodfajú konfluens hipergeometrikus függvény (ld.: (2.4.31)) és $\gamma(a, z)$ a nem teljes gamma-függvény (ld.: (2.4.13)).

Bizonyítás. Először megmutatjuk, hogy a fenti feltételek mellett (3.0.9) és (3.0.10) ekvivalensek. Használva a (2.4.32) és a (K-1) azonosságokat, (3.0.9)-re azt kapjuk, hogy

$$(-z)^{-a} \frac{(a)_{l+1}}{(1-a)_l} \sum_{k=0}^l \sum_{s=0}^k (-1)^{l+k+s} \binom{l}{k} \binom{k}{s} \frac{(l+1)_k}{k!} \gamma(a+s, -z) (-z)^{-s}. \quad (3.0.14)$$

Az összeget (3.0.5) segítségével átrendezve a

$$(-z)^{-a} \frac{(a)_{l+1}}{(1-a)_l} \sum_{s=0}^l (-1)^s \binom{l}{s} \frac{(l+1)_s}{s!} \gamma(a+s, -z) (-z)^{-s} \varepsilon_l(s) \quad (3.0.15)$$

alakhoz jutunk, ami a 3.1 lemma bizonyításában található $\varepsilon_l(s) = 1$ miatt (3.0.10) lesz.

Most megmutatjuk, hogy ${}_2F_2(a, a; a + l + 1, a - l; z)$ és (3.0.10) azonosak. Használva a

$${}_pF_q \left(\begin{matrix} (a_{p-1}), & \sigma + l \\ (b_{q-1}), & \sigma \end{matrix} \middle| z \right) = \sum_{k=0}^l \binom{l}{k} \frac{z^k}{(\sigma)_k} \frac{\prod (a_{p-1})_k}{\prod (b_{q-1})_k} {}_{p-1}F_{q-1} \left(\begin{matrix} (a_{p-1}) + k \\ (b_{q-1}) + k \end{matrix} \middle| z \right) \quad (3.0.16)$$

azonosságot (ld.: [90]) ${}_2F_2(a, a; a + l + 1, a - l; z)$ -re azt kapjuk, hogy

$$(-z)^{-a} \sum_{k=0}^l \sum_{s=0}^l (-1)^{k+s} \binom{l}{k} \binom{l}{s} \frac{(a)_{l+1}}{l!(a-l)_k} \gamma(a+k+s, -z) (-z)^{-s}. \quad (3.0.17)$$

A következő, $k > 0$ -ra igaz formula könnyen levezethető a (2.4.15) alapján

$$\gamma(b+k, z) = (b)_k \gamma(b, z) - e^{-z} z^b \sum_{m=0}^{k-1} \frac{(b)_k}{(b)_{m+1}} z^m, \quad (3.0.18)$$

és $k = 0$ -ra $\gamma(b+0, z) = (b)_0 \gamma(b, z) = \gamma(b, z)$. A (3.0.18) egyenletben $b = a + s$ választással és (3.0.17)-be való behelyettesítéssel azt kapjuk, hogy

$$\begin{aligned} & (-z)^{-a} \frac{(a)_{l+1}}{(1-a)_l} \sum_{s=0}^l (-1)^s \binom{l}{s} \frac{(l+1)_s}{s!} \gamma(a+s, -z) (-z)^{-s} - \frac{(a)_{l+1}}{l!} e^z \times \\ & \times \sum_{k=1}^l \sum_{m=0}^{k-1} (-1)^k \binom{l}{k} \frac{\Gamma(a+k)\Gamma(l+m+1-k)(-z)^m}{(a-l)_k \Gamma(l+a+m+1)} \frac{1}{\Gamma(-[k-1-m])}. \end{aligned} \quad (3.0.19)$$

Ennek levezetése során felhasználtuk a (3.0.8) azonosságot. Mivel $l \geq k \geq 1$ és $k-1 \geq m \geq 0$, így $k-1-m$ nemnegatív egész. Azt kapjuk tehát, hogy a kétszeres összeg (3.0.19)-ben eltűnik, ezért ${}_2F_2(a, a; a + l + 1, a - l; z)$ megegyezik (3.0.10)-el.

Végül megmutatjuk, hogy (3.0.11) és (3.0.9) megegyeznek. A (2.4.31) alkalmazásával (3.0.11)-et az

$$\frac{(a)_{l+1}}{(1-a)_l} \left(\sum_{n=0}^l (-1)^{n+l} \binom{l}{n} \frac{(l+1)_n}{(a)_{n+1}} {}_1F_1(a, a+1+n; z) + (-z)^{-a} \Gamma(a) \epsilon_l(a, z) \right) \quad (3.0.20)$$

módon átírjuk, ahol

$$\begin{aligned} \epsilon_l(a, z) &= {}_3F_1(a, -l, l+1; 1; -1/z) \\ &\quad - (-1)^l \sum_{n=0}^l (-1)^n \binom{l}{n} (l+1)_n (a)_n {}_1F_1(-n, -a+1-n; z) \frac{z^{-n}}{n!}. \end{aligned} \quad (3.0.21)$$

A 3.1 lemma miatt $\epsilon_l(a, z) = 0$, így (3.0.9) és (3.0.11) azonosságára jutunk. \square

A ${}_2F_2(a, a; a+l+1, a-l; z)$ függvény aszimptotikáját adja meg a következő állítás.

3.3 Állítás. *Ha $l \geq 0$ egész, $a \in \mathbb{C}$ és $0 < \operatorname{Re}[a] < l+2$, akkor ${}_2F_2(a, a; a+l+1, a-l; z)$ aszimptotikus alakja $|z| \rightarrow \infty$ esetén a következő*

$$\begin{aligned} {}_2F_2(a, a; a+l+1, a-l; z) &\sim \frac{(a)_{l+1}}{(1-a)_l} (-z)^{-a} \kappa_l^+(a, z) + \\ &(-1)^l \frac{(a)_{l+1}}{(1-a)_l} \frac{e^z}{z} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(1-a)_n (a)_l}{(a-n)_l} {}_3F_2 \left(\begin{matrix} -l, & -l, & -n \\ 1, & 1-a-l & \end{matrix} \middle| 1 \right) \frac{1}{z^n}. \end{aligned} \quad (3.0.22)$$

Bizonyítás. Az aszimptotika kifejezéséhez (3.0.11)-et fogjuk használni. A $\kappa_l^+(a, z)$ egy l -ed rendű polinom $1/z$ változóval, ennek megfelelően az $\frac{(a)_{l+1}}{(1-a)_l} (-z)^{-a} \kappa_l^+(a, z)$ függvény z^{-a}/z^n aszimptotikus sorozathoz (ld.: [82]) tartozó aszimptotikus sornak tekinthető, amint $|z| \rightarrow \infty$. A $\kappa_l^-(a, z)$ másodfajú konfluens hipergeometrikus függvények véges lineáris kombinációja (ld.: (3.0.12)). Az $U(a, b, z)$ függvény (K-2) aszimptotikus kifejezése alapján

$$\kappa_l^-(a, z) \sim (-1)^l \frac{(-z)^a}{z} \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^l (-1)^m \frac{(l+m)!}{m!(l-m)!} \frac{(1-a)_n (m+1)_n}{n!} z^{-(n+m)}. \quad (3.0.23)$$

Legyen

$$\Sigma_l(a, z) \equiv \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^l \Phi_{n,m}^l(a) z^{-(n+m)}, \quad (3.0.24)$$

ahol

$$\Phi_{n,m}^l(a) \equiv (-1)^m \frac{(l+m)!}{m!(l-m)!} \frac{(1-a)_n (m+1)_n}{n!}. \quad (3.0.25)$$

Ekkor a $\nu = n + m$, $\lambda = m$ választással élve és figyelembe véve, hogy a végtelen sor abszolút konvergencia, elvégezzük a következő átrendezést:

$$\begin{aligned}
\Sigma_l(a, z) &= \Phi_{0,0} z^0 \\
&\quad + (\Phi_{1,0} + \Phi_{0,1}) z^{-1} \\
&\quad \dots \\
&\quad + (\Phi_{l-1,0} + \Phi_{l-2,1} + \dots + \Phi_{0,l-1}) z^{-(l-1)} \\
&\quad + \sum_{\nu=l}^{\infty} z^{-\nu} \sum_{\lambda=0}^l \Phi_{\nu-\lambda,\lambda}^l(a) \\
&= \sum_{\nu=0}^{\infty} z^{-\nu} \sum_{\lambda=0}^{\min\{\nu,l\}} \Phi_{\nu-\lambda,\lambda}^l(a).
\end{aligned} \tag{3.0.26}$$

Könnyen belátható, hogy

$$\sum_{\lambda=0}^{\min\{\nu,l\}} \Phi_{\nu-\lambda,\lambda}^l(a) = (1-a)_\nu {}_3F_2 \left(\begin{matrix} -l, & l+1, & -\nu \\ 1, & a-\nu \end{matrix} \middle| 1 \right) \tag{3.0.27}$$

a $\operatorname{Re}[a] > 0$ konvergenciafeltétellel. Felhasználva a (3.0.16), aztán a

$${}_2F_1(e, f; g; 1) = \frac{\Gamma(g)\Gamma(g-e-f)}{\Gamma(g-e)\Gamma(g-f)} \tag{3.0.28}$$

(ld.: 7.3.5 [86]) formulákat, a $\operatorname{Re}[g-e-f] > 0$ feltétel teljesülése esetén (ami most egybeesik a $\operatorname{Re}[a] > 0$ kritériummal)

$$\sum_{\lambda=0}^{\min\{\nu,l\}} \Phi_{\nu-\lambda,\lambda}^l(a) = (1-a)_\nu \frac{(a)_l}{(a-\nu)_l} {}_3F_2 \left(\begin{matrix} -l, & -l, & -\nu \\ 1, & 1-a-l \end{matrix} \middle| 1 \right) \tag{3.0.29}$$

adódik, és a konvergencia feltétele $\operatorname{Re}[2+l+\nu-a] > 0$. Végül kapjuk, hogy

$$\kappa_l^-(a, z) \sim (-1)^l \frac{(-z)^a}{z} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(1-a)_n (a)_l}{(a-n)_l} {}_3F_2 \left(\begin{matrix} -l, & -l, & -n \\ 1, & 1-a-l \end{matrix} \middle| 1 \right) \frac{1}{z^n}. \tag{3.0.30}$$

□

3.4 Megjegyzés. A (3.0.22) kifejezésben $\operatorname{Re}[z] < 0$ esetén az első tag, míg $\operatorname{Re}[z] > 0$ esetén a második tag dominál. Nullához közeli $\operatorname{Re}[z]$ -re a két tag összemérhető.

3.5 Megjegyzés. A ${}_2F_2(a_1, a_2; b_1, b_2; z)$ függvény aszimptotikus alakja megtalálható Luke [85] könyvében (ld.: 5.11.3 fejezet), ám az általunk használni kívánt paraméterekre nem alkalmazható. Kifejezhető azonban a ${}_2F_2(a, a; a + l + 1, a - l; z)$ függvény a Meijer-féle G-függvény segítségével is (ld.: (K-3)), ennek megfelelően

$${}_2F_2(a, a; a+l+1, a-l; z) = \frac{(-1)^l (a)_{l+1}}{(1-a)_l} G_{2,3}^{1,2} \left(-z \left| \begin{array}{c} 1-a, \quad 1-a \\ 0, \quad -a-l, \quad l+1-a \end{array} \right. \right). \quad (3.0.31)$$

A Meijer-féle G-függvény aszimptotikája meghatározható az 5.10(10), 5.7.(13-15) formulák és az 5.9.2 fejezet [85] alkalmazásával, ennek eredményeként kapjuk, hogy

$${}_2F_2(a, a; a+l+1, a-l; z) \sim -\frac{(-1)^l (a)_{l+1}}{(1-a)_l} H_{2,3}(-z). \quad (3.0.32)$$

Majd az 5.11.1(18) és 5.11.3(4) [85] képleteket használva a

$$H_{2,3}(-z) = -\frac{e^z}{z} \sum_{n=0}^{\infty} d_n^{(l)} 2^n \frac{1}{z^n} \quad (3.0.33)$$

azonossághoz jutunk, ahol $d_n^{(l)}$ kielégíti a

$$4(n+1)d_{n+1}^{(l)} = 2(2n^2 - n(2a-3) - l^2 - l - a + 1)d_n^{(l)} - n(n-l-a)(n+l+1-a)d_{n-1}^{(l)} \quad (3.0.34)$$

(ld.: 5.11.3(6) [85]) rekurziót a

$$d_0^{(l)} = 1, \quad d_1^{(l)} = \frac{1}{2}(1 - l^2 - l - a) \quad (3.0.35)$$

(ld.: 5.11.1(18-20) [85]) kezdeti értékekkel. A kapott aszimptotikus kifejezés a $\operatorname{Re}[z] > 0$ tartományban érvényes.

3.6 Állítás. *Ha l és n nemnegatív egészek, valamint $a \in \mathbb{C}$ és $0 < \operatorname{Re}[a] < l + 2$ teljesülnek, akkor*

$$d_n^{(l)} = \frac{(1-a)_n (a)_l}{2^n (a-n)_l} {}_3F_2 \left(\begin{matrix} -l, & -l, & -n \\ 1, & -a-l+1 \end{matrix} \middle| 1 \right). \quad (3.0.36)$$

Bizonyítás. Teljes indukcióval bizonyítunk. Az $n = 0, 1, 2$ esetek könnyen igazolhatók. Feltéve, hogy (3.0.36) igaz az $n = s$ és $n = s + 1$ esetekre, az

$$\begin{aligned} & (s+2)(s+2-l-a) {}_3F_2 \left(\begin{matrix} -l, & -l, & -s-2 \\ 1, & -a-l+1 \end{matrix} \middle| 1 \right) = \\ & [2(s+1)^2 - (s+1)(2a-3) - l^2 - l - a] {}_3F_2 \left(\begin{matrix} -l, & -l, & -s-1 \\ 1, & -a-l+1 \end{matrix} \middle| 1 \right) \\ & - (s+1)(s+2+l-a) {}_3F_2 \left(\begin{matrix} -l, & -l, & -s \\ 1, & -a-l+1 \end{matrix} \middle| 1 \right) \end{aligned}$$

formulával (ld.: [91]) igazolható az $n = s + 2$ eset is. \square

3.7 Következmény. *A 3.6 állításból látható, hogy az általunk bevezetett (3.0.22) aszimptotika második tagja, ami a $\operatorname{Re}[z] > 0$ tartományban dominál; és a Luke könyvében megadott (3.0.32) aszimptotika, ami ugyancsak a $\operatorname{Re}[z] > 0$ tartományban érvényes, megegyeznek.*

Coulomb-kölcsönhatás hiányában a CDPW síkhullám alakú lesz, ennek bizonyításában segít a 3.8 lemma.

3.8 Lemma. *Legyen l nemnegatív egész, $z \in \mathbb{C} \setminus \{0\}$, $a \in \mathbb{C} \setminus \mathbb{Z}$ és $\operatorname{Re}[a] > 0$, ekkor*

$$\lim_{a \rightarrow 1} (1-a)_l {}_2F_2(a, a; a+l+1, a-l; z) = i^l (l+1)! e^{z/2} j_l(iz/2). \quad (3.0.37)$$

Bizonyítás. A (K-4) és (K-5) képletek felhasználásával könnyen belátható, hogy $(1)_{l+1} e^z \kappa_l^-(1, z)/z = -i^l (l+1)! e^{z/2} h_l^{(2)}(iz/2)/2$ és $(1)_{l+1} \kappa_l^+(1, z)/z = -i^l (l+1)! e^{z/2} h_l^{(1)}(iz/2)/2$. Ezekből és (3.0.11)-ből következik az állítás. \square

4. fejezet

A háromdimenziós Coulomb-módosított síkhullám vezető rendű aszimptotikája

Ebben a fejezetben a [88] cikk fő eredményéről lesz szó, azaz a háromdimenziós Coulomb-módosított síkhullám vezető rendű aszimptotikájának meghatározásáról.

A Coulomb-módosított síkhullámnak a felületi integrálos formalizmusban van nagy jelentősége, melyet a 2.1.3 fejezet tárgyal. A CDPW háromdimenziós vezető rendű aszimptotikáját disztribúciós értelemben Kadyrov és munkatársai [21, 22] már megadták a Taylor [16] hivatkozású munkájában tárgyalt függvénytéren (ld.: (4.0.13)). Ezt az eredményt speciális esetként adja vissza az általunk levezetett aszimptotikus formula.

A CDPW-t

$$e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}(kr \mp \mathbf{k}\mathbf{r})^{\pm i\gamma} = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1)\tau_l^{(\pm)}(\gamma, kr) P_l(\cos(\vartheta)) \quad (4.0.1)$$

formában írhatjuk fel parciális hullámok segítségével, ahol a felső előjelek a poszt, az alsók pedig a prior alakhoz tartoznak. A \mathbf{k} és \mathbf{r} vektorok által bezárt szöget ϑ , a Sommerfeld-paramétert γ , az impulzusvektort \mathbf{k} , valamint

a Legendre-polinomot $P_l(x)$ jelöli. A radiális $\tau_l^{(\pm)}(\gamma, kr)$ függvényt a

$$\tau_l^{(\pm)}(\gamma, kr) = \frac{1}{2}(kr)^{\pm i\gamma} \int_{-1}^1 e^{\pm ikrx} (1 \mp x)^{\pm i\gamma} P_l(x) dx \quad (4.0.2)$$

integrállal számolhatjuk. A (4.0.2) és a (K-6) képletek felhasználásával kapjuk, hogy

$$\begin{aligned} \tau_l^{(+)}(\gamma, kr) &= \frac{(-i\gamma)_l}{(1+i\gamma)_{l+1}} (2kr)^{i\gamma} e^{ikr} \times \\ &\times {}_2F_2(1+i\gamma, 1+i\gamma; l+2+i\gamma, 1+i\gamma-l; -2ikr) \end{aligned} \quad (4.0.3)$$

és

$$\begin{aligned} \tau_l^{(-)}(\gamma, kr) &= (-1)^l \frac{(i\gamma)_l}{(1-i\gamma)_{l+1}} (2kr)^{-i\gamma} e^{-ikr} \times \\ &\times {}_2F_2(1-i\gamma, 1-i\gamma; l+2-i\gamma, 1-i\gamma-l; 2ikr), \end{aligned} \quad (4.0.4)$$

ahol $(a)_n$ a Pochhammer-szimbólum, a ${}_2F_2$ pedig egy általánosított hipergeometrikus függvény [84, 87]. A (4.0.3) és a (4.0.4) következménye az, hogy

$$\tau_l^{(-)}(\gamma, kr) = (-1)^l \tau_l^{(+)}(\gamma, kr)^* . \quad (4.0.5)$$

A CDPW poszt alakja esetén az $a = 1 + i\gamma$ és $z = -2ikr$ (a prior alak esetén az $a = 1 - i\gamma$ és $z = 2ikr$) helyettesítéssel élve a 3.2 állításban, és felhasználva a (4.0.3) kifejezést a

$$\tau_l^{(+)}(\gamma, kr) = \frac{e^{ikr+\gamma\pi/2}}{2ikr} \sum_{n=0}^l (-1)^n \binom{l}{n} \frac{(l+1)_n}{n!} \gamma (1+i\gamma+n, 2ikr) (2ikr)^{-n}, \quad (4.0.6)$$

$$\begin{aligned} \tau_l^{(+)}(\gamma, kr) &= (-1)^l (2kr)^{i\gamma} e^{ikr} \times \\ &\times \sum_{n=0}^l (-1)^n \binom{l}{n} \frac{(l+1)_n}{(1+i\gamma)_{n+1}} {}_1F_1(1+i\gamma, 2+i\gamma+n; -2ikr), \end{aligned} \quad (4.0.7)$$

$$\tau_l^{(+)}(\gamma, kr) = \frac{e^{\gamma\pi/2}}{2ikr} (e^{ikr} \kappa_l^+(1+i\gamma, -2ikr) + e^{-ikr} \kappa_l^-(1+i\gamma, -2ikr)) \quad (4.0.8)$$

ekvivalens kifejezéseket kapjuk a poszt alakra.

Coulomb-erő hiányában ($\gamma = 0$) a CDPW síkhullám alakot vesz fel. A 3.8 lemma felhasználásával az l -edik parciálshullám-komponensre a $\tau_l^{(\pm)}(0, kr) = i^l j_l(kr)$ – elvárt – eredményt kapjuk, a poszt és prior alakok pedig megegyeznek.

A 3.3 állítás felhasználásával, és $r \rightarrow \infty$ figyelembevételével jutunk a

$$\begin{aligned} \tau_l^{(+)}(\gamma, kr) &\sim \frac{e^{ikr}}{2ikr} e^{\gamma\pi/2} \Gamma(1+i\gamma) {}_3F_1(1+i\gamma, -l, l+1; 1; (2ikr)^{-1}) \\ &\quad - \frac{e^{-ikr}}{2ikr} (2kr)^{i\gamma} (-1)^l \sum_{n=0}^{\infty} d_n^{(l)} \frac{1}{(-ikr)^n} \end{aligned} \quad (4.0.9)$$

és a

$$\begin{aligned} \tau_l^{(-)}(\gamma, kr) &\sim -(-1)^l \frac{e^{-ikr}}{2ikr} e^{\gamma\pi/2} \Gamma(1-i\gamma) {}_3F_1(1-i\gamma, -l, l+1; 1; (-2ikr)^{-1}) \\ &\quad + \frac{e^{ikr}}{2ikr} (2kr)^{-i\gamma} \sum_{n=0}^{\infty} \left(d_n^{(l)}\right)^* \frac{1}{(ikr)^n} \end{aligned} \quad (4.0.10)$$

aszimptotikus formulára. A $d_n^{(l)}$ a (3.0.34-3.0.35) rekurzióknak tesz eleget, és felírható zárt alakban is (ld.: (3.0.36)). A poszt alak képletében $\text{Re}[-ikr] < 0$ esetén az első tag, $\text{Re}[-ikr] > 0$ esetén pedig a második tag dominál. A prior alak képletében $\text{Re}[ikr] < 0$ esetén a második tag, $\text{Re}[ikr] > 0$ esetén pedig az első tag dominál.

Megjegyezzük, hogy a (4.0.9) és (4.0.10) formulák – a $\tau_l^{(\pm)}(\gamma, kr)$ explicit tanulmányozását kikerülve – közvetlenül a (4.0.2) egyenletből is származtathatók a [92] könyv 227. állításának felhasználásával.

A háromdimenziós Coulomb-módosított síkhullám vezető rendű aszimptotikáját kapjuk, ha a (4.0.9) és (4.0.10) formulákat behelyettesítjük a (4.0.1) képletbe, és csak a vezető rendű tagot hagyjuk meg, így az

$$e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}(kr \mp \mathbf{k}\mathbf{r})^{\pm i\gamma} \sim \pm \frac{2\pi}{ikr} \left(e^{\pm ikr} e^{\gamma\pi/2} \Gamma(1 \pm i\gamma) \delta(\hat{\mathbf{r}} \mp \hat{\mathbf{k}}) - e^{\mp ikr} (2kr)^{\pm i\gamma} \delta(\hat{\mathbf{r}} \pm \hat{\mathbf{k}}) \right) \quad (4.0.11)$$

eredményhez jutunk.

Ismert, hogy a prior alakot meg kell kapjuk a poszt alakból, ha a teljes kifejezésre vonatkozólag elvégezzük a következő két műveletet: \mathbf{k} kicserélése $-\mathbf{k}$ -ra és komplex konjugálás. Ez a szabály az általunk adott (4.0.11) formulára teljesül.

Coulomb-kölcsönhatás hiányában a (4.0.11) háromdimenziós aszimptotikus

kifejezés a jól ismert [77]

$$e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} \sim \frac{2\pi}{ikr} \left(e^{ikr} \delta(\hat{\mathbf{r}} - \hat{\mathbf{k}}) - e^{-ikr} \delta(\hat{\mathbf{r}} + \hat{\mathbf{k}}) \right) \quad (4.0.12)$$

alakot ölti, ami szintén elvárható volt.

A (4.0.11) formula – első tagjának eltűnésével – a D^\pm teszt-függvénytéren a Kadyrov [22] cikkében a (197) és (198) egyenletekkel megadott

$$e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} (kr \mp \mathbf{k}\mathbf{r})^{\pm i\gamma} \sim \mp \frac{2\pi}{ikr} e^{\mp ikr} (2kr)^{\pm i\gamma} \delta(\hat{\mathbf{r}} \pm \hat{\mathbf{k}}) \quad (4.0.13)$$

alakba megy át, azaz speciális esetként tartalmazza azt.

5. fejezet

Hatékony FORTRAN–90

kód a

$${}_2F_2(a, a; a + l + 1, a - l; z)$$

függvény numerikus

számításához

A (4.0.3) és (4.0.4) képletekben látható, hogy a CDPW megadható a ${}_2F_2(a, a; a + l + 1, a - l; z)$ függvény segítségével. Ez motiválta munkám jelen fejezetének elkészítését. Olyan FORTRAN–90 kódot írtam a fizikusok vagy bárki más számára, mely a fenti függvényt számolja. Mivel sikerült a CDPW-hez szükségesnél általánosabb esetben megadnom az említett hipergeometrikus függvény numerikusan használhatóbb három ekvivalens alakját és aszimptotikáját, így erre az általánosabb esetre írtam programot, remélve, hogy más feladatok elvégzésére is alkalmas lesz. Tudomásom szerint ehhez hasonló forráskód nem létezik, amit az is valószínűsít, hogy saját matematikai eredményeimet is használtam megírásához. A FORTRAN kódon kívül készítettem Mathematica programot is. Algoritmusuk megegyezik. Az itt található eredmények publikálása a dolgozat bekötésének időpontjában még nem történt meg, de remélhetőleg a védésig megjelenik valamelyik folyóiratban.

A FORTRAN program megírása során felhasználtam kutatási célra szabadon

hozzáférhető két kódot, melyekkel a gamma-függvényt és a nem teljes gamma-függvény komplementerét lehet számolni.

A komplex gamma-függvényt számoló FORTRAN-90 nyelven írt cgamma nevű szubrutin forrása az A. H. Morris által készített CGAMMA nevű FORTRAN-77 szubrutin, ami a Naval Surface Warfare Center (NSWC) Library of Mathematics Subroutines könyvtárában szabadon elérhető. A [93–95] munkákban található a CGAMMA algoritmusának pontos leírása, itt csak annyit említek meg róla, hogy legfeljebb 14 tizedesjegy pontossággal képes számolni. A FORTRAN-90 nyelven írt cgamma.f90 verziót Alan Miller készítette [96], tulajdonképpen csak konvertálta a CGAMMA-ból.

A komplex nem teljes gamma-függvény komplementerét számoló FORTRAN-90 nyelven írt cincgam.f90 nevű kódot szintén Alan Miller [96] konvertálta át az Eric Kostlan és Dmitry Gokhman által készített FORTRAN-77 nyelvű algoritmusból [97]. Ez a kód tetszőleges pontossággal számol és leginkább a (2.4.19) láncfolytást használja (bővebben ld.: [97]).

Annak ellenére, hogy a nem teljes gamma-függvény komplementeréből maga a gamma-függvény is számolható, az általunk írt kód a fenti két külön algoritmust használja ezek kiszámítására. Ennek az az oka, hogy a gamma-függvényt számoló algoritmus gyorsabb, így a pontosság csökkenésének árán ugyan, de gyorsabb algoritmust kapunk. A CDPW számításánál ez az ésszerű döntés, hiszen általában sokszor kell kiszámítani a függvény értékét. Ellentétes érdekek esetén könnyen kicserélhetőek a felhasznált algoritmusok.

Az említett fizikai alkalmazásokhoz nem szükséges foglalkozni a nagy paraméterek esetével, mivel ezekben jellemzően $l < 20$ és $|a| < 100$. Foglalkozni kell azonban a z változó kis és nagy értékeivel, ezért $|z| < 1$ esetre bevezettem egy olyan közelítést (ld.: 5.1 rész), amely a hipergeometrikus függvény végtelen sorát használja, valamint aszimptotikus z esetére (ld.: 5.2 rész) alkalmaztam a (3.0.11) kifejezést.

A Hyp2F2 (programom neve) általában ($|z| \geq 1$ és z -ben nem aszimptotikus tartományokban) a

$${}_2F_2(a, a; a + l + 1, a - l; z) = (-z)^{-a} \frac{(a)_{l+1}}{(1-a)_l} \sum_{k=0}^l \binom{l}{k} \frac{(l+1)_k}{k!} \gamma(a+k, -z) z^{-k} \quad (5.0.1)$$

alakot használja (ld.: (3.0.10)) a hipergeometrikus függvény értékének kiszámításához. Ezen formula nagy előnye, hogy viszonylag kevés ($l < 20$), numerikusan gyorsan és pontosan számolható tag összegeként áll elő közelítések nélkül, így a tekintett fizikai alkalmazásokhoz ideális algoritmus elkészítését teszi

lehetővé.

A Hyp2F2 bármely $z \in \mathbb{C} \setminus \{0\}$ -re $l \geq 0$ egész, $a \in \mathbb{C} \setminus \mathbb{Z}$ és $\operatorname{Re}[a] > 0$ feltételek teljesülése esetén működik jól.

5.1. $|z| < 1$

Itt tehát a $|z| < 1$ esetet fogjuk tárgyalni, de nem a fenti feltételek mellett. A Hyp2F2 $|z| < 1$ és $z \in \mathbb{C}$ esetén az $l \geq 0$ egész és $a \in \mathbb{C} \setminus \mathbb{Z}$ feltételek mellett az helyes eredményt. Az átláthatóság kedvéért vezessük be az

$$F_{22}(a, l, z) \equiv {}_2F_2(a, a; a + l + 1, a - l; z) \quad (5.1.1)$$

jelölést.

Az $F_{22}(a, l, z)$ függvény analitikus ezen a tartományon, így létezik a Taylor-sora – tulajdonképpen ezzel van definiálva (ld.: (2.4.20)). Felírhatjuk az

$$F_{22}(a, l, z) = \sum_{k=0}^n \frac{F_{22}^{(k)}(a, l, z=0)}{k!} z^k + R_n \quad (5.1.2)$$

formában, ahol $F_{22}^{(k)}(a, l, z=0)$ az $F_{22}(a, l, z)$ függvény k -adik z szerinti deriváltja a $z=0$ helyen, R_n a hibatag. A (2.4.26) és (2.4.29) azonosságokat az előző kifejezésben felhasználva azt írhatjuk, hogy

$$F_{22}(a, l, z) \sim \sum_{k=0}^n \frac{(a)_k^2}{(a+l+1)_k (a-l)_k} \frac{z^k}{k!} \pm |R_n|. \quad (5.1.3)$$

Jól ismert, hogy az $|R_n|$ abszolút hibára igaz a következő [98]:

$$|R_n| \leq \frac{Mr_c}{r_c - |z|} \left(\frac{|z|}{r_c} \right)^{n+1}, \quad (5.1.4)$$

ahol r_c -t választhatjuk $r_c = |z| + \delta_c$ módon, ahol $\delta_c > 0$ valós szám. Az M pedig olyan pozitív valós szám, hogy a $z=0$ középpontú és r_c sugarú C kör bármely z_c pontjára az $|F_{22}(a, l, z_c)| \leq M$ reláció igaz legyen.

Ha meg tudjuk határozni az M értékét adott z esetén, akkor az $F_{22}(a, l, z)$ abszolút konvergenciája és végtelen konvergenciasugara miatt tetszőleges $\epsilon > 0$ -ra tudunk mondani egy olyan N_0 természetes számot, hogy bármely $N > N_0$ természetes számra

$$\frac{Mr_c}{r_c - |z|} \left(\frac{|z|}{r_c} \right)^{N+1} < \epsilon \quad (5.1.5)$$

teljesüljön. A legkisebb ilyen N_0 :

$$N_0 = \left\lceil \frac{\ln[\epsilon(1 - |z|/r_c)/M]}{\ln[|z|/r_c]} - 1 \right\rceil, \quad (5.1.6)$$

ahol $\lceil \cdot \rceil$ a felső egészrészt jelöli. Ezzel az abszolút hibát elvben tetszőlegesen kicsivé tehetjük.

Vezessük be az

$$f_i(z) \equiv \frac{(a)_i^2}{(a+l+1)_i(a-l)_i} \frac{z^i}{i!} \quad (5.1.7)$$

jelölést, amivel $F_{22}(a, l, z)$ az

$$F_{22}(a, l, z) = \sum_{i=0}^{\infty} f_i(z) \quad (5.1.8)$$

módon írható. A hányadoskritérium, sőt a

$$q_n \equiv \left| \frac{f_{n+1}(z)}{f_n(z)} \right| \xrightarrow{n \rightarrow \infty} 0 \quad (5.1.9)$$

teljesülése miatt $|z| < \infty$ esetén adott $0 < q < 1$ valós számhoz létezik olyan n_f természetes szám, hogy bármely $n \geq n_f$ természetes számra

$$\left| \frac{f_{n+1}(z)}{f_n(z)} \right| < q. \quad (5.1.10)$$

Emiatt igaz az

$$|F_{22}(a, l, z)| = \left| \sum_{i=0}^{\infty} f_i(z) \right| < \left| \sum_{i=0}^{n_f-1} f_i(z) \right| + \frac{|f_{n_f}(z_c')|}{1-q} \quad (5.1.11)$$

felső korlátot adó egyenlőtlenség, ha $|z| < |z_c'|$. Itt ugyanis az n_f -edik tagtól kezdve kihasználtuk, hogy $|f_{n_f+m}| < |f_{n_f}|q^m$, $m = 1, 2, \dots$. Nekünk a C kör minden pontjára érvényes felső korlátra van szükségünk, ezért az

$$|F_{22}(a, l, z_c)| < \sum_{i=0}^{n_f-1} |f_i(z_c)| + \frac{|f_{n_f}(z_c')|}{1-q} \quad (5.1.12)$$

egyenlőtlenségre alapozva válasszuk M -et a következőnek:

$$M \equiv \sum_{i=0}^{n_f-1} \left| \frac{(a)_i^2}{i!(a+l+1)_i(a-l)_i} \right| r_c^i + \frac{\left| \frac{(a)_{n_f}^2}{n_f!(a+l+1)_{n_f}(a-l)_{n_f}} \right| r_c'^{n_f}}{1-q}, \quad (5.1.13)$$

ahol $r_c < r'_c = |z'_c| = r_c + \delta'_c$ és $\delta'_c > 0$ valós szám. Tehát ha tudunk mondani egy olyan n_f -et, hogy bármely $n \geq n_f$ -re $q_n < q < 1$, ahol q -t előre megadtuk, akkor kiszámolhatjuk M -et (5.1.13)-ból. Természetesen minél kisebb M elérése a cél, ezt pedig a q és n_f paraméterek optimalizálásával érhetjük el. Kisebb q -ra n_f nagyobb lesz és fordítva.

Tehát adott a , l és z'_c esetén

$$q_n = \frac{|z'_c|}{n+1} \frac{c_2^2}{c_1 c_3}, \quad (5.1.14)$$

ahol

$$c_1 \equiv \sqrt{(\operatorname{Re}[a] + n - l)^2 + \operatorname{Im}[a]^2}, \quad (5.1.15)$$

$$c_2 \equiv \sqrt{(\operatorname{Re}[a] + n)^2 + \operatorname{Im}[a]^2}, \quad (5.1.16)$$

$$c_3 \equiv \sqrt{(\operatorname{Re}[a] + n + l + 1)^2 + \operatorname{Im}[a]^2}. \quad (5.1.17)$$

Az $a \in \mathbb{C} \setminus \mathbb{Z}$ feltétel miatt $c_1 \neq 0$ és $c_3 \neq 0$. Vezessük be az $x \equiv \operatorname{Re}[a] + n$ jelölést. Módszerünk lényege az lesz, hogy az x -re nézve bevezetünk három intervallumot, melyeken a

$$\frac{|z'_c|}{q} \frac{c_2^2}{c_1 c_3} - 1 \quad (5.1.18)$$

kifejezést fölülről becsüljük egy-egy konstanssal. A három intervallum

$$x \in] - \infty, \chi_B[, \quad (5.1.19)$$

$$x \in [\chi_B, \chi_A[, \quad (5.1.20)$$

$$x \in [\chi_A, +\infty[, \quad (5.1.21)$$

a három felső korlát pedig rendre

$$B_\delta^{\max} \frac{|z'_c|}{q} - 1, \quad (5.1.22)$$

$$A_\delta^{\max} \frac{|z'_c|}{q} - 1, \quad (5.1.23)$$

$$2 \frac{|z'_c|}{q} - 1 \quad (5.1.24)$$

lesz. A χ_A , χ_B , A_δ^{\max} , B_δ^{\max} meghatározását később végezzük el, egyenlőre az a fontos, hogy χ_A és χ_B valós számok, és a – pozitív valós – felső korlátok értéke

a fenti sorrendben monoton csökken. Ekkor könnyen látszik, hogy megadhatjuk n_f -et az

$$n_f = \begin{cases} \left[B_\delta^{\max} \frac{|z'_c|}{q} - 1 \right] & , \text{ ha } \operatorname{Re}[a] < \chi_B - B_\delta^{\max} \frac{|z'_c|}{q} + 1 \\ \lceil \chi_B - \operatorname{Re}[a] \rceil & , \text{ ha } \chi_B - B_\delta^{\max} \frac{|z'_c|}{q} + 1 \leq \operatorname{Re}[a] < \chi_B - A_\delta^{\max} \frac{|z'_c|}{q} + 1 \\ \left[A_\delta^{\max} \frac{|z'_c|}{q} - 1 \right] & , \text{ ha } \chi_B - A_\delta^{\max} \frac{|z'_c|}{q} + 1 \leq \operatorname{Re}[a] < \chi_A - A_\delta^{\max} \frac{|z'_c|}{q} + 1 \\ \lceil \chi_A - \operatorname{Re}[a] \rceil & , \text{ ha } \chi_A - A_\delta^{\max} \frac{|z'_c|}{q} + 1 \leq \operatorname{Re}[a] < \chi_A - 2 \frac{|z'_c|}{q} + 1 \\ \left[2 \frac{|z'_c|}{q} - 1 \right] & , \text{ ha } \chi_A - 2 \frac{|z'_c|}{q} + 1 \leq \operatorname{Re}[a] \end{cases} \quad (5.1.25)$$

módon.

A továbbiakban a $c_2^2/(c_1 c_3)$ kifejezéssel fogunk foglalkozni, pontosabban felső becslést adunk rá, és meghatározzuk az imént bevezetett χ_A , χ_B , A_δ^{\max} és B_δ^{\max} értékeit.

Könnyen belátható, hogy

- ha $c_1 < c_2$, akkor $c_1 < c_2 < c_3$,
- ha $c_1 \geq c_2$ és $c_3 < c_2$, akkor $c_3 < c_2 \leq c_1$,
- ha $c_1 \geq c_2$ és $c_3 \geq c_2$, akkor $c_2^2/(c_1 c_3) \leq 1$,

és az is, hogy

- $0 < c_1 < c_2 < c_3$ akkor és csak akkor, ha $l/2 < x$,
- $0 < c_3 < c_2 \leq c_1$ akkor és csak akkor, ha $x < -(l+1)/2$,
- $c_2^2/(c_1 c_3) \leq 1$ biztos igaz, ha $-(l+1)/2 \leq x \leq l/2$.

Tehát a $-(l+1)/2 \leq x \leq l/2$ intervallumra van egy felső korlátunk.

Foglalkozzunk most az $x > l/2$ esettel. Ekkor a

$$c'_3 \equiv \sqrt{(x+l)^2 + \operatorname{Im}[a]^2} \quad (5.1.26)$$

és

$$A(x) \equiv \frac{c_2^2}{c_1 c'_3} \quad (5.1.27)$$

definíciók bevezetésével a következő

$$\frac{c_2^2}{c_1 c_3} < A(x) \quad (5.1.28)$$

felülről korlátozó kifejezést kapjuk. Az $A(x)$ nem konstans függvény, de a számunkra fontos esetben tudunk rá analitikus úton pontos felső korlátot adni. Ha $l = 0$, akkor $A(x) = 1$. Önkényesen azt mondhatjuk, hogy nekünk megfelel, ha a 2 a $c_2^2/(c_1c_3)$ kifejezés felső korlátja, mert ekkor elég kis n_f -et kapunk. Fontos, hogy a $\{B_\delta^{\max}, A_\delta^{\max}, 2\}$ sorozat monoton csökkenő legyen, mivel minden $n \geq n_f$ esetén igaznak kell lennie a felső korlátnak. Vizsgáljuk az $A(x)$ függvényt úgy, mintha x folytonos változó lenne, ti. adott a -ra csak n változik, tehát ebből a szempontból diszkrét változóról van szó. Ekkor azt kapjuk, hogy $A(x) > 2$ akkor és csak akkor, ha $l > 0$, $|\text{Im}[a]| < l/\sqrt{12}$ és $x_2^A < x < x_1^A$, ahol

$$\begin{aligned} x_1^A &= \sqrt{\frac{4}{3}l^2 - \text{Im}[a]^2 + \frac{2}{3}l\sqrt{l^2 - 12\text{Im}[a]^2}}, \\ x_2^A &= \sqrt{\frac{4}{3}l^2 - \text{Im}[a]^2 - \frac{2}{3}l\sqrt{l^2 - 12\text{Im}[a]^2}}. \end{aligned} \quad (5.1.29)$$

Minden más esetben $A(x) \leq 2$. A függvény maximumának helye:

$$x_{\max}^A = \sqrt{l^2 + 3\text{Im}[a]^2}. \quad (5.1.30)$$

Az $A(x)$ függvény x_{\max}^A bal oldalán szigorúan monoton nő, jobb oldalán szigorúan monoton csökken $x > l/2$ és $l > 0$ esetén. χ_A -t úgy választjuk, hogy $x \geq \chi_A$ esetén $A(x) \leq 2$ legyen. Figyelembe véve a numerikus pontatlanságokból eredő hibát, a

$$\chi_A = \begin{cases} \lceil x_1^A \rceil & , \text{ ha } l > 0 \text{ és } |\text{Im}[a]| < l/\sqrt{12} \\ \lfloor l/2 \rfloor & \text{ egyébként} \end{cases} \quad (5.1.31)$$

választással élünk.

Vezessük be a

$$\delta \equiv \text{Re}[a] - \lfloor \text{Re}[a] \rfloor \quad (5.1.32)$$

jelölést ($\delta \in [0, 1[$), ahol $\lfloor \cdot \rfloor$ az alsó egészrész. A pontos felső korlát meghatározásához kihasználjuk, hogy rögzített a -ra $x = \lfloor \text{Re}[a] \rfloor + \delta + n$, tehát $n = 0$ -ról indulva x diszkrét értékeit kapjuk, és csak ezeket figyelembe véve kell meghatároznunk $l > 0$ és $|\text{Im}[a]| < l/\sqrt{12}$ esetén $A(x)$ maximumát. Nyilvánvaló, hogy ha $\lfloor x_{\max}^A \rfloor + \delta < x_{\max}^A$, akkor $\lfloor x_{\max}^A \rfloor + 1 + \delta > x_{\max}^A$, és ha $\lfloor x_{\max}^A \rfloor + \delta \geq x_{\max}^A$, akkor $\lfloor x_{\max}^A \rfloor - 1 + \delta < x_{\max}^A$. Az is világos, hogy adott δ -ra, ha létezik olyan x , hogy $x_2^A < x < x_1^A$, akkor $A(x)$ a δ -hoz tartozó legnagyobb értékét az $\lfloor x_{\max}^A \rfloor - 1 + \delta$, $\lfloor x_{\max}^A \rfloor + \delta$ és $\lfloor x_{\max}^A \rfloor + 1 + \delta$ helyek valamelyikén veszi fel. Nem biztos azonban, hogy ezen helyek mindegyike az $]x_2^A, x_1^A[$ intervallumba

esik, tehát az sem, hogy nagyobbak $l/2$ -nél, ezért egy kicsit körülményesen tudjuk csak megadni a maximumot. Az $A(x)$ függvény A_δ^{\max} felső korlátja tehát:

$$A_\delta^{\max} = \begin{cases} \max \left\{ A \left(\left\lfloor x_{\max}^A \right\rfloor + 1 + \delta \right), 2 \right\} & , \text{ ha } f_A^1 \\ \max \left\{ A \left(\left\lfloor x_{\max}^A \right\rfloor + \delta \right), A \left(\left\lfloor x_{\max}^A \right\rfloor + 1 + \delta \right) \right\} & , \text{ ha } f_A^2 \\ \max \left\{ A \left(\left\lfloor x_{\max}^A \right\rfloor + \delta \right), 2 \right\} & , \text{ ha } f_A^3 \\ \max \left\{ A \left(\left\lfloor x_{\max}^A \right\rfloor - 1 + \delta \right), A \left(\left\lfloor x_{\max}^A \right\rfloor + \delta \right) \right\} & , \text{ ha } f_A^4 \\ 2 & \text{egyébként,} \end{cases} \quad (5.1.33)$$

ahol

$$\begin{aligned} f_A^0 & : l > 0 \text{ és } |\text{Im}[a]| < l/\sqrt{12} \\ f_A^1 & : f_A^0 \text{ és } \delta \leq x_2^A - \lfloor x_{\max}^A \rfloor \\ f_A^2 & : f_A^0 \text{ és } \delta < x_{\max}^A - \lfloor x_{\max}^A \rfloor \text{ és } \delta > x_2^A - \lfloor x_{\max}^A \rfloor \\ f_A^3 & : f_A^0 \text{ és } \delta \geq x_{\max}^A - \lfloor x_{\max}^A \rfloor \text{ és } \delta \leq x_2^A + 1 - \lfloor x_{\max}^A \rfloor \\ f_A^4 & : f_A^0 \text{ és } \delta \geq x_{\max}^A - \lfloor x_{\max}^A \rfloor \text{ és } \delta > x_2^A + 1 - \lfloor x_{\max}^A \rfloor . \end{aligned} \quad (5.1.34)$$

Hasonló eljárást alkalmazva meghatározhatjuk χ_B és B_δ^{\max} értékeit az $x < -(l+1)/2$ esetben. Ekkor

$$\frac{c_2^2}{c_1 c_3} \leq \frac{c_2}{c_3} , \quad (5.1.35)$$

mivel $c_2/c_1 \leq 1$. Legyen

$$B(x) \equiv \frac{c_2}{c_3} . \quad (5.1.36)$$

A felső korlátok monoton csökkenésének szükségessége miatt a $B(x) > \Lambda$ kifejezést vizsgáljuk, ahol $\Lambda = A_\delta^{\max} \geq 2$. Erre kapjuk, hogy $B(x) > \Lambda$ akkor és csak akkor igaz, ha $|\text{Im}[a]| < \frac{(l+1)\Lambda}{\Lambda^2-1}$ és $x_2^B < x < x_1^B$, ahol

$$\begin{aligned} x_1^B & = -\frac{(l+1)\Lambda^2}{\Lambda^2-1} + \sqrt{\frac{(l+1)^2\Lambda^2}{(\Lambda^2-1)^2} - \text{Im}[a]^2} , \\ x_2^B & = -\frac{(l+1)\Lambda^2}{\Lambda^2-1} - \sqrt{\frac{(l+1)^2\Lambda^2}{(\Lambda^2-1)^2} - \text{Im}[a]^2} . \end{aligned} \quad (5.1.37)$$

Minden más esetben $B(x) \leq \Lambda$. A függvény maximumának helye:

$$x_{\max}^B = -\frac{l+1}{2} - \sqrt{\left(\frac{l+1}{2}\right)^2 + \text{Im}[a]^2} . \quad (5.1.38)$$

Legyen továbbá

$$\chi_B = \begin{cases} \begin{bmatrix} x_1^B \\ -\frac{l+1}{2} \end{bmatrix} & , \text{ ha } |\operatorname{Im}[a]| < \frac{(l+1)\Lambda}{\Lambda^2-1} \\ \text{egyébként.} & \end{cases} \quad (5.1.39)$$

A $B(x)$ függvény B_δ^{\max} felső korlátja:

$$B_\delta^{\max} = \begin{cases} \max \left\{ B \left(\begin{bmatrix} x_{\max}^B \\ -1 + \delta \end{bmatrix}, \Lambda \right) \right\} & , \text{ ha } f_B^1 \\ \max \left\{ B \left(\begin{bmatrix} x_{\max}^B \\ +\delta \end{bmatrix}, B \left(\begin{bmatrix} x_{\max}^B \\ -1 + \delta \end{bmatrix} \right) \right) \right\} & , \text{ ha } f_B^2 \\ \max \left\{ B \left(\begin{bmatrix} x_{\max}^B \\ +\delta \end{bmatrix}, B \left(\begin{bmatrix} x_{\max}^B \\ +1 + \delta \end{bmatrix} \right) \right) \right\} & , \text{ ha } f_B^3 \\ \max \left\{ B \left(\begin{bmatrix} x_{\max}^B \\ +\delta \end{bmatrix}, \Lambda \right) \right\} & , \text{ ha } f_B^4 \\ \Lambda & \text{egyébként,} \end{cases} \quad (5.1.40)$$

ahol

$$\begin{aligned} f_B^0 & : l > 0 \text{ és } |\operatorname{Im}[a]| < \frac{(l+1)\Lambda}{\Lambda^2-1} \\ f_B^1 & : f_B^0 \text{ és } \delta \geq x_1^B - \lfloor x_{\max}^B \rfloor \\ f_B^2 & : f_B^0 \text{ és } \delta \geq x_{\max}^B - \lfloor x_{\max}^B \rfloor \text{ és } \delta < x_1^B - \lfloor x_{\max}^B \rfloor \\ f_B^3 & : f_B^0 \text{ és } \delta < x_{\max}^B - \lfloor x_{\max}^B \rfloor \text{ és } \delta < x_1^B - 1 - \lfloor x_{\max}^B \rfloor \\ f_B^4 & : f_B^0 \text{ és } \delta < x_{\max}^B - \lfloor x_{\max}^B \rfloor \text{ és } \delta \geq x_1^B - 1 - \lfloor x_{\max}^B \rfloor . \end{aligned} \quad (5.1.41)$$

Az $l = 0$ esetén lehet és érdemes az egyszerűbb

$$B_\delta^{\max} = \max \left\{ B \left(\begin{bmatrix} x_{\max}^{B,0} \\ -1 + \delta \end{bmatrix}, B \left(\begin{bmatrix} x_{\max}^{B,0} \\ +\delta \end{bmatrix}, B \left(\begin{bmatrix} x_{\max}^{B,0} \\ +1 + \delta \end{bmatrix}, 2 \right) \right) \right) \right\} \quad (5.1.42)$$

kifejezést használni, ahol

$$x_{\max}^{B,0} = -\frac{1}{2} - \frac{\sqrt{1 + 4\operatorname{Im}[a]^2}}{2} . \quad (5.1.43)$$

Összefoglalva, először meghatározzuk A_δ^{\max} -ot (5.1.33) alapján, majd B_δ^{\max} -ot (5.1.40) és (5.1.42) alapján, azután χ_A -t (5.1.31) és χ_B -t (5.1.39) alapján. Ezután megadjuk az (5.1.10)-beli $0 < q < 1$ értékét, és előállítjuk n_f -et az (5.1.25) által megadott módon.

5.2. Aszimptotika

A ${}_2F_2(a, a; a + l + 1, a - l; z)$ függvény aszimptotikáját a (3.0.11) alak aszimptotikájával adtuk meg a 3.3 állításban. Most ennek az aszimptotikának egy átrendezett alakját fogjuk használni, pontosabban a (3.0.23) képletet azzal

a különbséggel, hogy a végtelen összegben az első M tagot tartjuk meg, a maradékra pedig F. W. J. Oliver [99] munkájában leírt hibabecslést használjuk. Ez a cikk a másodfajú konfluens hipergeometrikus függvények aszimptotikus sorának hibatagjával foglalkozik. Tehát a (3.0.11) alakra lesz szükségünk. Emlékeztetőül:

$${}_2F_2(a, a; a + l + 1, a - l; z) = \frac{(a)_{l+1}}{(1-a)_l} (-z)^{-a} (\kappa_l^+(a, z) + e^z \kappa_l^-(a, z)) , \quad (5.2.1)$$

ahol

$$\kappa_l^-(a, z) = (-1)^{l+1} \sum_{k=0}^l \frac{(l+k)!}{k!(l-k)!} \frac{(-1)^k}{z^k} U(-a+1, -a-k+1, -z) \quad (5.2.2)$$

és

$$\kappa_l^+(a, z) = \Gamma(a) {}_3F_1(a, -l, l+1; 1; -1/z) . \quad (5.2.3)$$

A következőkben Oliver hibabecslésével foglalkozunk. Tekintsük az $U(f, g, z)$ másodfajú konfluens hipergeometrikus függvényt, és legyen $r = |g - 2f|$. Akkor fogadjuk el, hogy z az aszimptotikus tartományba esik, ha az 5.1 ábrán szemléltetett tartományokkal kifejezve teljesül, hogy $z \in \mathbf{R}_1 \cup \mathbf{R}_2 \cup \overline{\mathbf{R}}_2 \cup \mathbf{R}_3 \cup \overline{\mathbf{R}}_3$.

Az $U(f, g, z)$ függvényt az

$$U(f, g, z) = z^{-f} \sum_{s=0}^{n-1} \frac{(f)_s (f-g+1)_s}{s!} (-z)^{-s} + \varepsilon_n(z) \quad (5.2.4)$$

alakban írjuk föl (ld.: [84]), ahol az abszolút hibára az

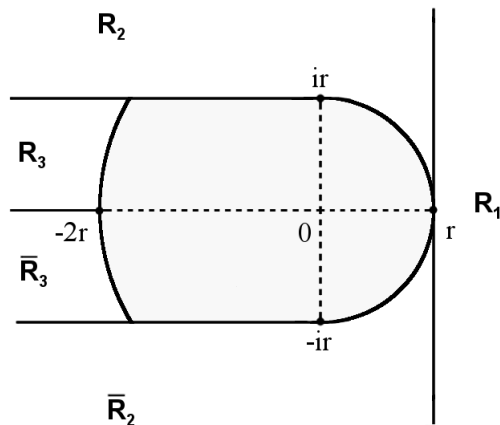
$$|\varepsilon_n(z)| \leq 2\alpha C_n \left| \frac{(f)_n (f-g+1)_n}{n! z^{f+n}} \right| \exp\left(\frac{2\alpha \rho C_1}{|z|}\right) \quad (5.2.5)$$

felső korlát adható, továbbá

$$C_n = \begin{cases} 1 & , \text{ ha } z \in \mathbf{R}_1 \\ \chi(n) & , \text{ ha } z \in \mathbf{R}_2 \cup \overline{\mathbf{R}}_2 \\ (\chi(n) + \sigma \nu^2 n) \nu^n & , \text{ ha } z \in \mathbf{R}_3 \cup \overline{\mathbf{R}}_3 \end{cases} \quad (5.2.6)$$

ahol

$$\sigma = \left| \frac{g-2f}{z} \right| , \quad (5.2.7)$$



5.1. ábra. Az \mathbf{R}_1 , \mathbf{R}_2 , $\bar{\mathbf{R}}_2$, \mathbf{R}_3 , $\bar{\mathbf{R}}_3$ olyan tartományokat jelölnek, melyeket már aszimptotikusnak tekintünk. A besatírozott rész a nem aszimptotikus tartomány.

$$\nu = \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{2} \sqrt{1 - 4\sigma^2} \right)^{-\frac{1}{2}}, \quad (5.2.8)$$

$$\chi(n) = \sqrt{\pi} \Gamma\left(\frac{1}{2}n + 1\right) / \Gamma\left(\frac{1}{2}n + \frac{1}{2}\right). \quad (5.2.9)$$

Ha $z \in \mathbf{R}_1 \cup \mathbf{R}_2 \cup \bar{\mathbf{R}}_2$, akkor

$$\alpha = \frac{1}{1 - \sigma}, \quad (5.2.10)$$

$$\beta = \frac{1 - \sigma^2 + \sigma|z|^{-1}}{2(1 - \sigma)}, \quad (5.2.11)$$

$$\rho = \frac{1}{2} |2f^2 - 2fg + f| + \frac{\sigma(1 + \frac{1}{4}\sigma)}{(1 - \sigma)^2}. \quad (5.2.12)$$

Ha $z \in \mathbf{R}_3 \cup \overline{\mathbf{R}}_3$, akkor ki kell cserélni (5.2.10), (5.2.11) és (5.2.12)-ben σ -t ν -ra és $|z|^{-1-t}$ -t $\nu|z|^{-1}$ -re (ld.: [100]).

Adott $U(-a + 1, -a - k + 1, -z)$ esetén a tartományok

$$\begin{aligned} \mathbf{R}_1 &= \{z \in \mathbb{C} : \operatorname{Re}[z] \leq -r\} \\ \mathbf{R}_2 \cup \overline{\mathbf{R}}_2 &= \{z \in \mathbb{C} : |\operatorname{Im}[z]| \geq r \text{ és } \operatorname{Re}[z] \geq 0\} \cup \\ &\cup \{z \in \mathbb{C} : -r < \operatorname{Re}[z] < 0 \text{ és } |z| \geq r\} \\ \mathbf{R}_3 \cup \overline{\mathbf{R}}_3 &= \{z \in \mathbb{C} : |\operatorname{Im}[z]| < r \text{ és } \operatorname{Re}[z] \geq 0 \text{ és } |z| \geq 2r\} \end{aligned} \tag{5.2.13}$$

lesznek, ahol $r = |a - k - 1|$. Ha minden k -ra azonos n -et választunk, azaz minden $U(-a + 1, -a - k + 1, -z)$ függvényt azonos számú tag összegeként írunk fel, mégpedig M tag összegeként ($n = M$), akkor

$$\begin{aligned} \kappa_l^-(a, z) &= (-1)^{l+1} \sum_{k=0}^l \frac{(l+k)!}{k!(l-k)!} \frac{(-1)^k}{z^k} U(-a+1, -a-k+1, -z) \\ &= \frac{(a)_{l+1}}{(1-a)_l} (-1)^{l+1} \sum_{k=0}^l \frac{(l+k)!}{k!(l-k)!} e^z (-z)^{-k-1} \sum_{s=0}^{M-1} \frac{(1-a)_s (k+1)_s}{s!} z^{-s} + \\ &\quad + H_M(a, l, z), \end{aligned} \tag{5.2.14}$$

ahol

$$H_M(a, l, z) \equiv \frac{(a)_{l+1}}{(1-a)_l} (-1)^{l+1} \sum_{k=0}^l \frac{(l+k)!}{k!(l-k)!} e^z (-z)^{-a-k} \varepsilon_M(-z) \tag{5.2.15}$$

a hibatag. Könnyen látható, hogy az abszolút hibára

$$\begin{aligned} |H_M(a, l, z)| &\leq \left| \frac{2(a)_{l+1}(1-a)_M}{M!(1-a)_l} \right| \sum_{k=0}^l \frac{(l+k)!}{k!(l-k)!} e^{\operatorname{Im}[a](\arg(-z) - \arg(z))} \times \\ &\quad \times |z|^{M-k-1} e^{|z| \cos(\arg(z))} E_M(z) \end{aligned} \tag{5.2.16}$$

teljesül, ahol

$$E_M(a, l, z) \equiv \alpha C_M \exp\left(\frac{2\alpha\rho C_1}{|z|}\right). \tag{5.2.17}$$

Ezt az aszimptotikus kifejezést csak akkor fogjuk használni, ha z minden k -ra ($0 \leq k \leq l$) az (5.2.13) által definiált aszimptotikus tartományba esik, és az általunk előre megadott $\epsilon > 0$ -val és M -mel igaz az abszolút hibára, hogy $|H_M(a, l, z)| < \epsilon$. Ellenkező esetben az (5.0.1) alakkal számolunk.

5.3. Algoritmus

A Hyp2F2 $|z| \geq 1$ esetén az $l \geq 0$ egész, $a \in \mathbb{C} \setminus \mathbb{Z}$ és $\operatorname{Re}[a] > 0$ feltételekkel, míg $|z| < 1$ esetén az $l \geq 0$ egész és $a \in \mathbb{C} \setminus \mathbb{Z}$ feltételekkel ad helyes eredményt.

Az (5.1.25) képlettel definiált n_f helyett az $n_f + 1$ értéket használjuk, mivel egészhez közeli értékek esetén a numerikus pontatlanság miatt előfordulhat, hogy az egészrész-képzés nem a megfelelő számot választja ki. Az (5.1.10) módon bevezetett q értéke 0.6 lesz. Az 5.1 fejezetben szereplő δ_c -re és δ'_c -re $\delta_c = \delta'_c = 0.1$ lesz.

Az aszimptotikus hibatagra vonatkozó $M \geq 1$ egész számot, ami az (5.2.14) alakot határozza meg, az $E \geq 0$ egész számon keresztül az $\epsilon = 10^{-E}$ megengedett abszolút hibát, valamint az a , l , z értékeket a Hyp2F2(a, l, z, M, E) függvény mint bemenő paramétereket tartalmazza.

A Hyp2F2(a, l, z, M, E) algoritmus:

Deklaráció: Az a, l, z, M, E értékek deklarációja.

Ha $|z| < 1$:

- $r_c = |z| + \delta_c$ és $r'_c = r_c + \delta'_c$ kiszámítása;
- A_δ^{\max} meghatározása (5.1.33) alapján;
- B_δ^{\max} meghatározása (5.1.40) és (5.1.42) segítségével;
- χ_A meghatározása (5.1.31), és χ_B meghatározása (5.1.39) használatával;
- n_f^0 előállítás az (5.1.25) által megadott módon;
- $n_f = n_f^0 + 1$ (5.1.13)-ban;
- N_0 meghatározása (5.1.6) és (5.1.13) alapján;
- ${}_2F_2(a, a; a + l + 1, a - l; z)$ meghatározása (5.1.3) képlet segítségével, ahol $n = N_0 + 1$.

Ha $|z| \geq 1$:

- Ha z minden k -ra ($0 \leq k \leq l$) az (5.2.13) által definiált aszimptotikus tartományba esik, és az abszolút hibára $|H_M(a, l, z)| < \epsilon$ teljesül az által, hogy ϵ nagyobb, mint az (5.2.16) egyenlőtlenség jobb oldala, akkor az (5.2.1), (5.2.3) és (5.2.14) felhasználása által ${}_2F_2(a, a; a + l + 1, a - l; z)$ meghatározása.

- Egyébként ${}_2F_2(a, a; a + l + 1, a - l; z)$ -nek az (5.0.1) kifejezés felhasználásával való kiszámítása.

Mint már említettük, a CGAMMA függvény felhasználása miatt az elvi pontosság legfeljebb 14 tizedesjegy lehet, így E értékét 14-nél nem választhatjuk nagyobbra. Viszont a számolási pontosság növelése érdekében a program többi moduljában 32 tizedesjegy pontosságot alkalmazunk.

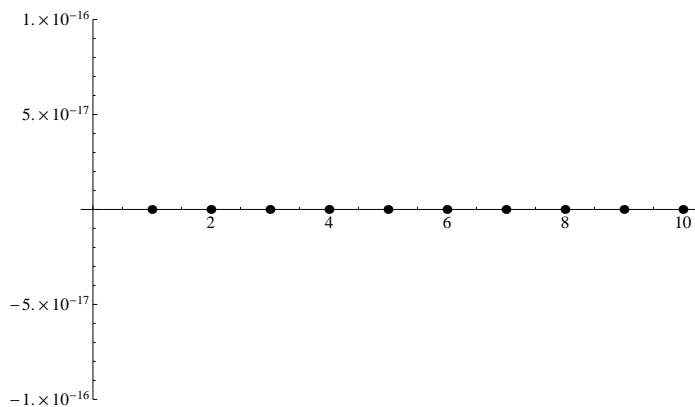
5.4. Elemzés

Itt néhány ábra segítségével megvizsgáljuk a Hyp2F2 program működését. A következőkben a számítási pontosság 32 tizedesjegy, $\epsilon = 10^{-14}$ és $M = 10$ lesz.

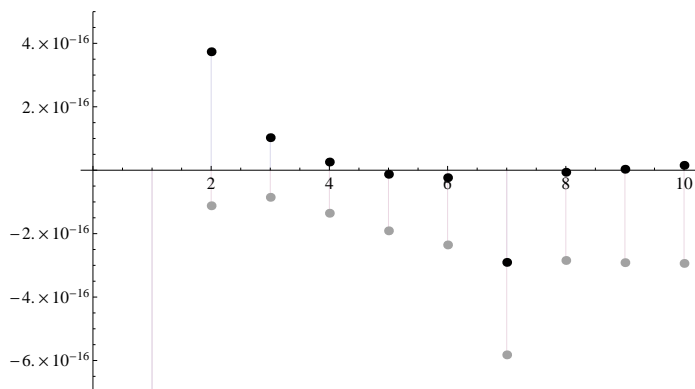
Először a Wolfram Mathematica 9.0.1.0 szoftver beépített hipergeometrikus függvényével hasonlítjuk össze a Hyp2F2-t. Az 5.2, 5.3 és 5.4 ábrák esetén $a = 1 - 0.3i$ és $l = 5$ lesz. Az 5.2 ábrán z értéke $-0.0301 + 0.0183i$ -ről indul és az n -edik lépésben n -szeresére nő, ahol $n = 1, \dots, 10$. Ugyanez mondható el az 5.3 és 5.4 ábrákra, azzal a különbséggel, hogy z kezdő értéke rendre $-3.01 + 1.83i$ és $-301 + 183i$. Mindhárom ábrán fekete pont jelöli a Hyp2F2-vel számolt és a Mathematica beépített HypergeometricPFQ függvényével számolt értékek különbségének valós részét és szürke pont a képzetes részét, a vízszintes tengelyen pedig n -t mérjük.

Mindhárom 5.2, 5.3 és 5.4 ábra esetén, azaz minden tartományban jól látható, hogy a 10^{-14} -es hibahatáron belül megegyezik a Hyp2F2 és a HypergeometricPFQ függvények értéke, sőt, az 5.2 ábra esetében tulajdonképpen az értékek egyezése látható. Természetesen ez csak egy kiragadott példa, de a kiterjedtebb ellenőrzések is hasonló eredményre vezettek.

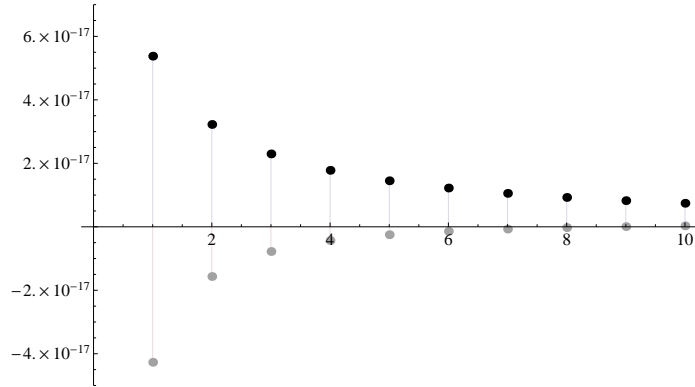
Általában is igaz, hogy különösen jó az egyezés $|z| < 1$ esetén. Ezt szemlélteti az 5.5 ábra, ami a $z = x + yi \in [-1, 1] \times [-1, 1]$ négyzeten mutatja a $|HypergeometricPFQ - Hyp2F2|$ érték alakulását. Az 1 sugarú körön kívül szignifikánsan megnő a két függvény közti eltérés.



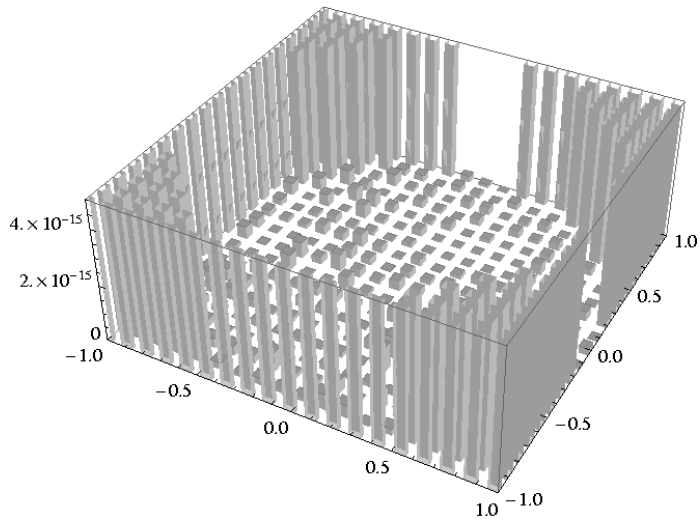
5.2. ábra. A Hyp2F2 és HypergeometricPFQ függvények különbségének valós (fekete pontok) és képzetes (szürke pontok) része $|z| < 1$, $n = 1, \dots, 10$ és $z = -0.0301 + 0.0183i$ kezdő érték esetén.



5.3. ábra. A Hyp2F2 és HypergeometricPFQ függvények különbségének valós (fekete pontok) és képzetes (szürke pontok) része nem aszimptotikus $|z| \geq 1$, $n = 1, \dots, 10$ és $z = -3.01 + 1.83i$ kezdő érték esetén.

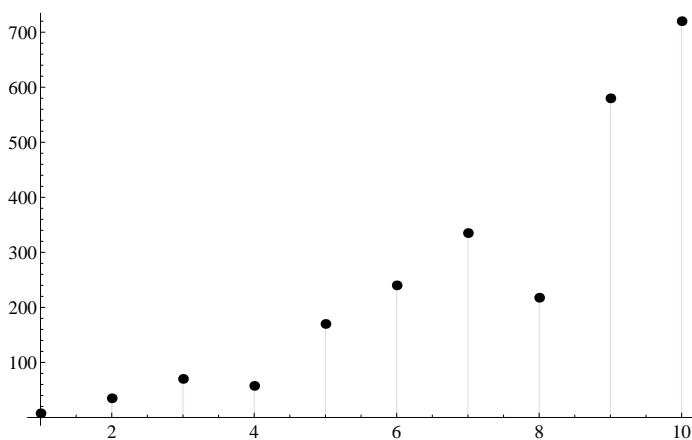


5.4. ábra. A Hyp2F2 és HypergeometricPFQ függvények különbségének valós (fekete pontok) és képzetes (szürke pontok) része aszimptotikus $|z| \geq 1$, $n = 1, \dots, 10$ és $z = -301 + 183i$ kezdő érték esetén.



5.5. ábra. A $z = x + yi \in [-1, 1] \times [-1, 1]$ négyzeten a $|\text{HypergeometricPFQ} - \text{Hyp2F2}|$ érték változása.

A Hyp2F2 algoritmus gyorsasága a $|z| < 1$ és $|z| \geq 1$ nem aszimptotikus tartományokban nem tér el számottevően a HypergeometricPFQ függvény gyorsaságától. A különbség az aszimptotikus tartományban válik igen jelentőssé, ezt szemlélteti az 5.6 ábra. Itt 32 helyett 14 tizedesjegy pontossággal számol a HypergeometricPFQ függvény, míg a Hyp2F2 továbbra is 32 tizedesjegy pontossággal. A HypergeometricPFQ és Hyp2F2 függvények aszimptotikus $|z| \geq 1$, $n = 1, \dots, 10$ és $z = -301 + 183i$ kezdő érték esetére lettek kiszámolva egy négyszázas kétmagos Intel(R) Core(TM) i5-4200M CPU @ 2.50GHz processzorral. Jelölje $Time(f(z))$ az $f(z)$ függvény egyetlen értékének kiszámításához szükséges időt. Az ábrán a $Time(HypergeometricPFQ)/Time(Hyp2F2)$ arány látható. Az ábrázolt függvényértékek esetén, az ezek kiszámításához szükséges időtartamok átlaga Hyp2F2-vel 0.00046875s, HypergeometricPFQ-val 0.08734s. Jól látható, hogy z növekedésével egyre szignifikánsabban gyorsabb a Hyp2F2 a HypergeometricPFQ-nál, $|z| \approx 3400$ esetén már 700-szor gyorsabb a Hyp2F2.



5.6. ábra. Az ábrán a $Time(HypergeometricPFQ)/Time(Hyp2F2)$ arány látható aszimptotikus $|z| \geq 1$, $n = 1, \dots, 10$ és $z = -301 + 183i$ kezdő érték esetén. Az ábrázolt függvényértékek kiszámításához szükséges időtartamok átlaga Hyp2F2-vel 0.00046875s, HypergeometricPFQ-val 0.08734s.

6. fejezet

Kéttest-Coulomb-szórás komplex skálázással

Ebben a fejezetben a szükséges ismeretek rövid áttekintése (6.1, 6.2 szakasz) után az [58] cikkben közölt eredményeket mutatom be. A 2.2 fejezetben leírtak szerint szórási problémára a komplex skálázás jól használható rövid hatótávolságú potenciálok jelenléte esetén, ám tiszta Coulomb-potenciál kezelésére eddig nem sikerült a standard komplex skálázás keretein belül használható módszert kifejleszteni. A 6.4 és 6.5 szakaszok eredménye éppen erre kínál egy lehetséges megoldást. Erről bebizonyítottuk, hogy kéttest-Coulomb-szórás esetén működik, és reményeink szerint nagyobb részecskeszám esetén is használható valamilyen módosított formában. A 6.3 szakasz eredménye pedig megmutatja, hogy a felületi integrálos formalizmus alapfüggvénye, a Coulomb-módosított síkhullám (CDPW) nem használható erre a célra.

A komplex skálázási módszer célja a Schrödinger-egyenlet olyan alternatívájának a megtalálása, melyhez egyszerűbb határfeltételek tartoznak. Emiatt az alternatív egyenlettől elvárjuk, hogy megoldásai négyzetesen integrálhatók és kötött állapot típusú bázisfüggvényekkel közelíthetők legyenek, ugyanis ezen feltételek teljesülése esetén elkerülhető a bonyolult szórási határfeltétel explicit alkalmazása. Az egyszerűsödés következménye, hogy lényegesen könnyebbé válnak a numerikus számítások.

A teljes szórási megoldást egy ismert és egy ismeretlen – szórt – tagra bontott

$$\psi^+(\mathbf{k}, \mathbf{r}) = \phi_0(\mathbf{k}, \mathbf{r}) + \psi^{sc+}(\mathbf{k}, \mathbf{r}) \quad (6.0.1)$$

alakban keressük, ahol $\phi_0(\mathbf{k}, \mathbf{r})$ az általunk előre megadott, ismert függvény, valamint \mathbf{k} és \mathbf{r} a szokásos vektorok. Ezek alapján maga a Schrödinger-egyenlet is átalakítható az

$$(E - H)\psi^{sc+}(\mathbf{k}, \mathbf{r}) = S(\mathbf{k}, \mathbf{r}) \quad (6.0.2)$$

ún. irányított Schrödinger-egyenletté (driven Schrödinger equation), ahol az

$$S(\mathbf{k}, \mathbf{r}) = (H - E)\phi_0(\mathbf{k}, \mathbf{r}) \quad (6.0.3)$$

kifejezést forrástagnak nevezzük, továbbá a szokásos módon H a Hamilton-operátor, E az energia.

Megjegyezzük, hogy a jobb átláthatóság kedvéért a függvények jelölését egy kicsit megváltoztattuk a 2.1.2 fejezethez képest. Lényegében a \mathbf{k} alsó indexből az argumentum paramétere lett.

Az $f(x)$ ($x \in \mathbb{R}$) függvény komplex skálázásakor az

$$f_\theta(x) = e^{i\theta/2} f(xe^{i\theta}) \quad (6.0.4)$$

transzformációt hajtjuk végre (ld.: (2.2.3) definíció), ahol $0 < \theta < \pi$. Ha a $\psi^{sc+}(\mathbf{k}, \mathbf{r})$ szórt tag aszimptotikusan csupán kimenő gömbhullámot tartalmaz, akkor komplex skálázás után a hullámfüggvény szórt része a részecskék közti távolság növelésével nullához tart, tehát a szórási határfeltételek egyszerűsödnek. A következőkben ezt a tulajdonságot fogjuk vizsgálni különböző $\phi_0(\mathbf{k}, \mathbf{r})$ függvények esetére.

6.1. A kétttest-Coulomb-probléma egzakt megoldása

A kétttest-Coulomb-szórás egzakt tárgyalását Haeringen [15] cikke alapján végezzük. Legyen $\hbar = m = e = 1$ (m a redukált tömeg), az energia $E = k^2/2 > 0$ és a Coulomb-potenciál $\gamma k/r$, ahol γ a Sommerfeld-paraméter. A Schrödinger-egyenlet tiszta kétttest-Coulomb-kölcsönhatás esetén

$$\left(-\frac{1}{2}\Delta_{\mathbf{r}} + \frac{\gamma k}{r} - \frac{k^2}{2} \right) \psi(\mathbf{k}, \mathbf{r}) = 0 \quad (6.1.1)$$

módon írható, ahol $\Delta_{\mathbf{r}}$ a Laplace-operátor. A

$$\psi_c^+(\mathbf{k}, \mathbf{r}) = e^{-\pi\gamma/2} \Gamma(1 + i\gamma) e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} M(-i\gamma, 1, ikr - i\mathbf{k}\mathbf{r}) \quad (6.1.2)$$

Coulomb-szórás hullámfüggvény a (6.1.1) megoldása. $M(a, b, z)$ az elsőfajú konfluens hipergeometrikus függvény (ld.: (2.4.30)). A parciális hullámok segítségével felírt alak

$$\psi_c^+(\mathbf{k}, \mathbf{r}) = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \psi_l^+(k, r) P_l(\cos \vartheta), \quad (6.1.3)$$

ahol $P_l(z)$ a Legendre-polinom, ϑ a \mathbf{k} és \mathbf{r} vektor által bezárt szög. A $\psi_l^+(k, r)$ teljes radiális hullámfüggvény felírható az $F_l(k, r)$ reguláris Coulomb-függvény segítségével:

$$\psi_l^+(k, r) = \frac{1}{kr} i^l e^{i\sigma_l} F_l(k, r). \quad (6.1.4)$$

Az explicit formula

$$\psi_l^+(k, r) = \frac{\Gamma(l+1+i\gamma)}{\Gamma(2l+2)} e^{-\gamma\pi/2} e^{-ikr} (2ikr)^l M(l+1-i\gamma, 2l+2, 2ikr), \quad (6.1.5)$$

a Coulomb-fázistolás $e^{2i\sigma_l} = \Gamma(l+1+i\gamma)/\Gamma(l+1-i\gamma)$ alakban írható. A $\psi_l^+(k, r)$ parciálshullám-komponens kielégíti a

$$\left[-\frac{1}{2r} \frac{d^2}{dr^2} r + \frac{l(l+1)}{2r^2} + \frac{\gamma k}{r} - \frac{k^2}{2} \right] \psi_l(k, r) = 0 \quad (6.1.6)$$

radiális Schrödinger-egyenletet.

A Coulomb-szórás függvény felbontható bejövő és szórt hullámokra [101]. Ezt a

$$\psi_c^+(\mathbf{k}, \mathbf{r}) = \psi_i(\mathbf{k}, \mathbf{r}) + \psi_s(\mathbf{k}, \mathbf{r}) \quad (6.1.7)$$

módon írhatjuk, ahol

$$\psi_i(\mathbf{k}, \mathbf{r}) = e^{\pi\gamma/2} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} U(-i\gamma, 1, ikr - i\mathbf{k}\mathbf{r}) \quad (6.1.8)$$

és

$$\psi_s(\mathbf{k}, \mathbf{r}) = e^{\pi\gamma/2} \frac{\Gamma(1+i\gamma)}{\Gamma(-i\gamma)} e^{ikr} U(1+i\gamma, 1, i\mathbf{k}\mathbf{r} - ikr). \quad (6.1.9)$$

Itt $U(a, b, z)$ a másodfajú konfluens hipergometrikus függvény (ld.: (2.4.31)). Érdekes módon nem csak $\psi_c^+(\mathbf{k}, \mathbf{r})$ megoldása a (6.1.1) 3D Schrödinger-egyenletnek, hanem $\psi_i(\mathbf{k}, \mathbf{r})$ és $\psi_s(\mathbf{k}, \mathbf{r})$ is.

A [101] munkában megtalálható a bejövő és szórt tagok parciális hullámok szintjén felírt alakja, melyekre

$$\psi_{i,l}(k, r) = \omega_{i,l}(k, r) + \chi_l(k, r) \quad (6.1.10)$$

és

$$\psi_{s,l}(k, r) = \omega_{s,l}(k, r) - \chi_l(k, r) . \quad (6.1.11)$$

Megjegyezzük, hogy az itt definiált $\omega_{i,l}$, $\omega_{s,l}$ és χ_l konstansszorosai az eredeti [101] cikkben található megfelelőiknek. A definíciók tehát a következők:

$$\omega_{i,l}(k, r) = e^{-ikr} e^{\gamma\pi/2} (-1)^{l+1} (2ikr)^l U(l+1-i\gamma, 2l+2, 2ikr) , \quad (6.1.12)$$

$$\omega_{s,l}(k, r) = e^{ikr} e^{2i\sigma_l + \gamma\pi/2} (-1)^{l+1} (2ikr)^l U(l+1+i\gamma, 2l+2, -2ikr) \quad (6.1.13)$$

és

$$\chi_l(k, r) = \frac{e^{ikr + \gamma\pi/2}}{2ikr} \frac{(-1)^l}{(2ikr)^l} \frac{\Gamma(2l+1)}{\Gamma(l+1-i\gamma)} \sum_{n=0}^l \frac{(-1)^n (i\gamma-l)_n}{(-2l)_n n!} (2ikr)^n . \quad (6.1.14)$$

Írhatjuk továbbá azt is, hogy

$$\psi_l^+(k, r) = \omega_{i,l}(k, r) + \omega_{s,l}(k, r) . \quad (6.1.15)$$

Annak ellenére, hogy $\psi_i(\mathbf{k}, \mathbf{r})$ és $\psi_s(\mathbf{k}, \mathbf{r})$ megoldása a (6.1.1) 3D Schrödinger-egyenletnek, a $\psi_{i,l}(k, r)$ és $\psi_{s,l}(k, r)$ parciálshullám-komponensek már nem megoldásai a (6.1.6) radiális Schrödinger-egyenletnek (részletesebben ld.: [101]). Ezt a tényt későbbi vizsgálataink során kihasználjuk majd.

A (K-2) képlet felhasználásával megkapjuk a Coulomb-szórási hullámfüggvény jól ismert

$$\begin{aligned} \psi_c^+(\mathbf{k}, \mathbf{r}) &= e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} (kr - \mathbf{k}\mathbf{r})^{i\gamma} \left[1 + O\left(\frac{1}{kr}\right) \right] + \\ &+ f_c(\cos(\vartheta)) \frac{e^{ikr - i\gamma \ln(2kr)}}{r} \left[1 + O\left(\frac{1}{kr}\right) \right] \end{aligned} \quad (6.1.16)$$

aszimptotikus alakját, ahol $f_c(\cos(\vartheta))$ a Coulomb-szórási amplitúdó. Mint már láttuk, az $e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} (kr - \mathbf{k}\mathbf{r})^{i\gamma}$ függvényt CDPW-nek nevezzük.

6.2. Az irányított Schrödinger-egyenlet

Tiszta Coulomb-szórás esetén a (6.1.1) felbontás alkalmazásával kapjuk a

$$\left(\frac{k^2}{2} + \frac{1}{2} \Delta_{\mathbf{r}} - \frac{\gamma k}{r} \right) \psi^{sc+}(\mathbf{k}, \mathbf{r}) = S(\mathbf{k}, \mathbf{r}) \quad (6.2.1)$$

irányított Schrödinger-egyenletet, ahol a forrástag

$$S(\mathbf{k}, \mathbf{r}) = \left(-\frac{1}{2}\Delta_{\mathbf{r}} + \frac{\gamma k}{r} - \frac{k^2}{2} \right) \phi_0(\mathbf{k}, \mathbf{r}). \quad (6.2.2)$$

Megjegyezzük, hogy a (6.2.1) irányított Schrödinger-egyenletet a [102] munkában tanulmányozták részletesebben.

A (6.1.16) aszimptotikus formula motiválja $\phi_0(\mathbf{k}, \mathbf{r})$ -re a

$$\phi_0(\mathbf{k}, \mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} (kr - \mathbf{k}\mathbf{r})^{i\gamma} \quad (6.2.3)$$

választást. Ezt a felbontást használja a felületi integrálos formalizmus is (ld.: [21, 22]). Descartes-féle koordináta-rendszerben könnyen átírhatjuk a forrástagot explicit formára:

$$S(\mathbf{k}, \mathbf{r}) = \frac{\gamma^2 k}{r(kr - \mathbf{k}\mathbf{r})} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} (kr - \mathbf{k}\mathbf{r})^{i\gamma}. \quad (6.2.4)$$

Megpróbálhatjuk használni a Coulomb hullámfüggvény bejövő részét is

$$\phi_0(\mathbf{k}, \mathbf{r}) = \psi_i(\mathbf{k}, \mathbf{r}), \quad (6.2.5)$$

ebben az esetben azonban $S(\mathbf{k}, \mathbf{r}) = 0$ lesz, ami abból következik, hogy $\psi_i(\mathbf{k}, \mathbf{r})$ kielégíti a (6.1.1) egyenletet. Tehát nem kapunk irányított Schrödinger-egyenletet, $\psi^{sc+}(\mathbf{k}, \mathbf{r})$ a (6.1.1) homogén egyenlet megoldása lesz, valamint $\psi^{sc+}(\mathbf{k}, \mathbf{r}) = \psi_s(\mathbf{k}, \mathbf{r})$.

Ha meg akarjuk kapni a (6.2.1) irányított Schrödinger-egyenlet parciális hullámok szintjére vonatkozó alakját, szükségünk lesz a parciális hullámokkal megadott forrástagra

$$S(\mathbf{k}, \mathbf{r}) = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) S_l(k, r) P_l(\cos(\vartheta)) \quad (6.2.6)$$

és a $\phi_0(\mathbf{k}, \mathbf{r})$ ilyen alakjára

$$\phi_0(\mathbf{k}, \mathbf{r}) = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \phi_{0,l}(k, r) P_l(\cos(\vartheta)). \quad (6.2.7)$$

Felhasználva a

$$\Delta_{\mathbf{r}} = \frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} r - \frac{L^2}{r^2} \quad (6.2.8)$$

azonosságot (ld.: [77]), ahol L^2 a pálya-impulzusmomentum operátor négyzete, megkapjuk a

$$\left[\frac{k^2}{2} + \frac{1}{2r} \frac{d^2}{dr^2} r - \frac{l(l+1)}{2r^2} - \frac{\gamma k}{r} \right] \psi_l^{sc+}(k, r) = S_l(k, r), \quad (6.2.9)$$

parciális hullámokra vonatkozó irányított Schrödinger-egyenletet, ahol

$$\psi^{sc+}(\mathbf{k}, \mathbf{r}) = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \psi_l^{sc+}(k, r) P_l(\cos(\vartheta)). \quad (6.2.10)$$

Megjegyezzük, hogy a (6.2.8) operátorazonosság csak az $r = 0$ pontban korlátos függvényekre alkalmazható (ld.: 496. oldal [77]).

A későbbiekben látni fogjuk, hogy a szórási hullámfüggvény háromdimenziós alakjának (6.0.1) felosztása helyett hasznosabb lehet a felbontást parciális hullámok szintjén elvégezni. Keressük tehát a szórási hullámfüggvény parciálishullám-komponensét a

$$\psi_l^+(k, r) = \tilde{\phi}_{0,l}(k, r) + \tilde{\psi}_l^{sc+}(k, r) \quad (6.2.11)$$

alakban, ahol $\tilde{\phi}_{0,l}(k, r)$ ismert és $\tilde{\psi}_l^{sc+}(k, r)$ ismeretlen függvény. A parciális hullámokra vonatkozó Schrödinger-egyenletből a

$$\left[\frac{k^2}{2} + \frac{1}{2r} \frac{d^2}{dr^2} r - \frac{l(l+1)}{2r^2} - \frac{\gamma k}{r} \right] \tilde{\psi}_l^{sc+}(k, r) = \tilde{S}_l(k, r) \quad (6.2.12)$$

inhomogén differenciálegyenletet kapjuk, amiben

$$\tilde{S}_l(k, r) = \left[-\frac{1}{2r} \frac{d^2}{dr^2} r + \frac{l(l+1)}{2r^2} + \frac{\gamma k}{r} - \frac{k^2}{2} \right] \tilde{\phi}_{0,l}(k, r) \quad (6.2.13)$$

a forrástag.

Mint már láttuk, a (6.2.5) választás nem vezet irányított Schrödinger-egyenlethez, viszont ha a parciális hullámokra a

$$\psi_l^+(k, r) = \psi_{i,l}(k, r) + \tilde{\psi}_l^{sc+}(k, r) \quad (6.2.14)$$

felbontást választjuk, azaz $\tilde{\phi}_{0,l}(k, r)$ -t $\psi_{i,l}(k, r)$ -el azonosítjuk, akkor irányított Schrödinger-egyenlethez jutunk. Ebben az esetben a forrástagot

$$\tilde{S}_l(k, r) = \left[-\frac{1}{2r} \frac{d^2}{dr^2} r + \frac{l(l+1)}{2r^2} + \frac{\gamma k}{r} - \frac{k^2}{2} \right] [\omega_{i,l}(k, r) + \chi_l(k, r)] \quad (6.2.15)$$

alakban írhatjuk. Mivel az $\omega_{i,l}(k, r)$ a Coulomb-probléma ún. Jost-megoldása (ld.: [15, 101]), így a forrástag rá vonatkozó része nulla. Bevezetve a $z = 2ikr$ jelölést, azt kapjuk, hogy

$$\tilde{S}_l(k, r) = \left[-\frac{k^2}{2} + \frac{2k^2}{z} \frac{d^2}{dz^2} z - \frac{2k^2 l(l+1)}{z^2} + \frac{2i\gamma k^2}{z} \right] \chi_l(z), \quad (6.2.16)$$

ahol

$$\chi_l(z) = \frac{e^{\gamma\pi/2}}{\Gamma(1-i\gamma)} \frac{e^{z/2}}{z} \sum_{n=0}^l \frac{(l+1)_n (-l)_n (1)_n}{(1-i\gamma)_n} \frac{z^{-n}}{n!} \quad (6.2.17)$$

(vö. (6.1.14)). Kisebb átalakítás után az

$$\tilde{S}_l(k, r) = \frac{2k^2 e^{\gamma\pi/2}}{\Gamma(1-i\gamma)} \frac{e^{z/2}}{z^2} \sum_{n=0}^l \frac{(l+1)_n (-l)_n}{(1-i\gamma)_n} \left(i\gamma - n + \frac{n(n+1) - l(l+1)}{z} \right) z^{-n} \quad (6.2.18)$$

formához jutunk, amit átrendezve

$$\begin{aligned} \tilde{S}_l(k, r) &= \frac{2k^2 e^{\gamma\pi/2}}{\Gamma(1-i\gamma)} \frac{e^{z/2}}{z^2} \times \\ &\quad \times \left\{ i\gamma + \sum_{n=0}^{l-1} \left[\frac{(l+1)_n (-l)_n}{(1-i\gamma)_n} [n(n+1) - l(l+1)] + \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + (i\gamma - n - 1) \frac{(l+1)_{n+1} (-l)_{n+1}}{(1-i\gamma)_{n+1}} \right] z^{-n-1} \right\} \quad (6.2.19) \end{aligned}$$

módon írhatunk. A Pochhammer-szimbólum $(a)_{n+1} = (a)_n (a+n)$ tulajdonsága miatt pedig a szögletes zárójelben levő kifejezés eltűnik. Tehát ebben az esetben a forrástag

$$\tilde{S}_l(k, r) = \frac{e^{ikr + \gamma\pi/2}}{2r^2 \Gamma(-i\gamma)} \quad (6.2.20)$$

lesz, érdekes módon az l -től függetlenül.

6.3. A Coulomb-módosított síkhullám

Ebben a részben megvizsgáljuk, hogy a komplex skálázás szempontjából használható-e a CDPW. Ahogy már láttuk, felírhatjuk a CDPW-t parciális

hullámok segítségével

$$e^{i\mathbf{kr}}(kr - \mathbf{kr})^{i\gamma} = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1)\tau_l(k, r)P_l(\cos(\vartheta)) , \quad (6.3.1)$$

és a radiális függvényt a

$$\tau_l(k, r) = \frac{1}{2}(kr)^{i\gamma} \int_{-1}^1 e^{ikrx}(1-x)^{i\gamma} P_l(x) dx \quad (6.3.2)$$

integrális alakkal. Ezt az integrált megadhatjuk hipergeometrikus függvény segítségével, ha felhasználjuk a (K-6) azonosságot; ekkor az eredmény

$$\tau_l(k, r) = \frac{(-i\gamma)_l}{(1+i\gamma)_{l+1}} (2kr)^{i\gamma} e^{ikr} {}_2F_2(1+i\gamma, 1+i\gamma; l+2+i\gamma, 1+i\gamma-l; -2ikr) . \quad (6.3.3)$$

Az itt szereplő $\tau_l(k, r)$ a (4.0.2) kifejezés poszt alakjának felel meg, csak az egyszerűség kedvéért elhagytuk a + jelet, és a komplex skálázás szemléletesebbé tétele érdekében módosítottuk az argumentumát.

A komplex skálázáshoz szükségünk lesz a $\psi_l^{sc+}(k, r)$ aszimptotikájára ($r \rightarrow \infty$). A (K-2) alak segítségével az

$$\omega_{i,l}(k, r) \sim \frac{e^{-ikr}(2kr)^{i\gamma}}{2ikr} (-1)^{l+1} \sum_{n=0}^{\infty} a_{i,n}^l \frac{1}{(2ikr)^n} \quad (6.3.4)$$

és

$$\omega_{s,l}(k, r) \sim \frac{e^{ikr}(2kr)^{-i\gamma}}{2ikr} e^{2i\sigma_l} \sum_{n=0}^{\infty} a_{s,n}^l \frac{1}{(2ikr)^n} \quad (6.3.5)$$

aszimptotikus kifejezéseket kapjuk, ahol az együtthatók

$$a_{i,n}^l = (-1)^n (l+1-i\gamma)_n (-l-i\gamma)_n / n! \quad (6.3.6)$$

és

$$a_{s,n}^l = (l+1+i\gamma)_n (-l+i\gamma)_n / n! . \quad (6.3.7)$$

A $\tau_l(k, r)$ aszimptotikus kifejezésének meghatározása előtt fejezzük ki $\tau_l(k, r)$ -t a Meijer-féle G-függvény segítségével a (K-3) képlet alapján:

$$\tau_l(k, r) = e^{ikr}(2kr)^{i\gamma} (-1)^l G_{2,3}^{1,2} \left(2ikr \left| \begin{array}{c} -i\gamma, \quad -i\gamma \\ 0, \quad -1-i\gamma-l, \quad l-i\gamma \end{array} \right. \right) . \quad (6.3.8)$$

A (6.3.8) formában megadott $\tau_l(k, r)$ függvény komplexskálázott $\tau_l(k, re^{i\theta})$ aszimptotikus alakja a (K-7) felhasználásával nyerhető:

$$\tau_l(k, re^{i\theta}) \sim \frac{e^{-ikre^{i\theta}}}{2ikre^{i\theta}} (2kre^{i\theta})^{i\gamma} (-1)^{l+1} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{d_n^l}{(-ikre^{i\theta})^n}, \quad (6.3.9)$$

ahol a d_n^l együtthatók kielégítik a

$$4(n+1)d_{n+1}^l = 2[2n^2 - n(2i\gamma - 1) - l^2 - l - i\gamma]d_n^l - n(n-l-i\gamma-1)(n+l-i\gamma)d_{n-1}^l \quad (6.3.10)$$

rekurziót és $d_0^l = 1$ (ld.: (3.0.34)). Itt figyelni kellett arra, hogy a $0 < \theta < \pi$ feltétel miatt komplex skálázás után a $-\pi/2 < \arg(-2ikr \exp(i\theta)) < \pi/2$, azaz a $\operatorname{Re}[-2ikr \exp(i\theta)] > 0$ feltétellel megadott aszimptotikát használjuk (ld.: 3.5 megjegyzés).

Amikor tehát a parciálishullám-komponensek felbontását a

$$\psi_l^+(k, r) = \tau_l(k, r) + \psi_l^{sc+}(k, r) \quad (6.3.11)$$

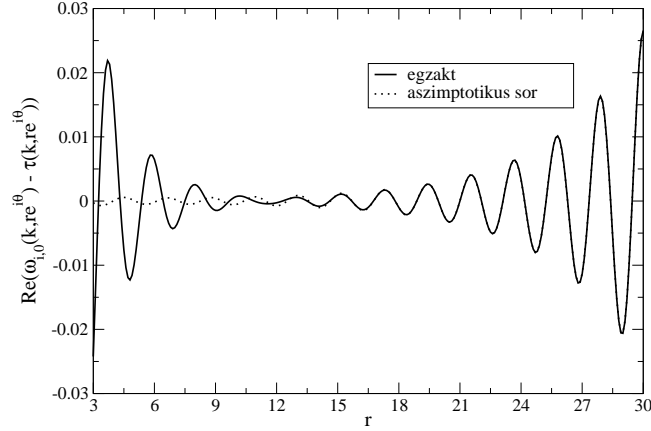
formában végezzük el a (6.1.15) képlet felhasználásával, azt kapjuk, hogy

$$\psi_l^{sc+}(k, r) = [\omega_{i,l}(k, r) - \tau_l(k, r)] + \omega_{s,l}(k, r). \quad (6.3.12)$$

A (6.3.12) alakban $\omega_{s,l}(k, r)$ csak kimenő gömbhullámot tartalmaz (ld.: (6.3.5)), így a komplex skálázás használhatósága az $\omega_{i,l}(k, re^{i\theta}) - \tau_l(k, re^{i\theta})$ függvény aszimptotikus ($r \rightarrow \infty$) viselkedésétől függ. Megkönnyíti a dolgunkat, hogy az $\omega_{i,l}(k, r)$ és $\tau_l(k, r)$ függvények aszimptotikája azonos $\{e^{-ikr}(2kr)^{i\gamma}(-1)^{l+1}/(2ikr)^n, n = 0, 1, 2, \dots\}$ aszimptotikus sorozattal kifejezhető, így az aszimptotikus sorfejtések egyszerűen kivonhatóak egymásból (ld.: [82] és 2.13 állítás). A (6.3.4) és (6.3.9) azonosságok felhasználásával kapjuk a kérdéses rész

$$[\omega_{i,l}(k, re^{i\theta}) - \tau_l(k, re^{i\theta})] \sim \frac{e^{-ikre^{i\theta}}}{2ikre^{i\theta}} (2kre^{i\theta})^{i\gamma} (-1)^{l+1} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{a_{i,n}^l - d_n^l (-2)^n}{(2ikre^{i\theta})^n} \quad (6.3.13)$$

aszimptotikus alakját. Látható, hogy $a_{i,0}^l = d_0^l$, ami miatt $\psi_l^{sc+}(k, re^{i\theta})$ nuladik rendű ($n = 0$) aszimptotikája nem tartalmaz komplexskálázott bejövő gömbhullámot. Mivel azonban magasabb rendű tagjaiban van komplexskálázott bejövő gömbhullám ($e^{-ikr}/r^n, n > 0$), ezért a hullámfüggvény $\psi_l^{sc+}(k, re^{i\theta})$ komplexskálázott szórt tagja nem tűnik el $r \rightarrow \infty$ esetén.



6.1. ábra. Az $\omega_{i,0}(k, r) - \tau_0(k, r)$ függvényt és annak első rendű aszimptotikus kifejezését komplex skáláztuk $\theta = 0.1$ szerint. Az így kapott függvények valós részét ábráztuk $k = 3$, $\gamma = 1/3$ és $l = 0$ esetén. A folytonos vonal mutatja az egzakt, a szaggatott vonal a (6.3.13) aszimptotikus kifejezés viselkedését.

Az $\omega_{i,l}(k, r e^{i\theta}) - \tau_l(k, r e^{i\theta})$ kifejezésre kapott eredményt a 6.1 ábra szemlélteti. A nulladik rendű tag eltűnése miatt az első rendű tag valós részének, illetve kéttesz-rendszeréről lévén szó, az egzakt megoldás ezen részének viselkedését mutatja. Aszimptotikus sortól elvárt módon r növelésével javul a közelítés. Látható továbbá, hogy az $\omega_{i,l}(k, r e^{i\theta}) - \tau_l(k, r e^{i\theta})$ függvény aszimptotikusan oszcillálva divergál.

Azt kaptuk tehát, hogy a CDPW használatával nyert komplexskálázott szórt tag aszimptotikusan nem tűnik el, mivel bejövő és kimenő gömbhullámot is tartalmaz. Ennek következtében pedig a CDPW mint a felbontás ismert része nem alkalmazható komplex skálázásra, mivel használata nem egyszerűsíti a szórási határfeltételt.

6.4. A bejövő hullámon alapuló felbontás

Használjuk most a (6.2.14) felbontást. A hullámfüggvény szórt részére a (6.1.10), (6.1.15) és (6.2.14) képletek felhasználásával írhatjuk, hogy

$$\tilde{\psi}_l^{sc+}(k, r) = \omega_{s,l}(k, r) - \chi_l(k, r). \quad (6.4.1)$$

A (6.3.5) aszimptotikus alakból és a $\chi_l(k, r)$ függvény (6.1.14) kifejezéséből láthatjuk, hogy a hullámfüggvény szórt része csak kimenő gömbhullámot tartalmaz, így használhatjuk a komplex skálázást. A (6.1.14) és (6.3.5) formulákból kapjuk vezető rendben, hogy

$$\begin{aligned} \tilde{\psi}_l^{sc+}(k, r) = e^{2i\sigma_l} \frac{e^{ikr} (2kr)^{-i\gamma}}{2ikr} \left[1 + O\left(\frac{1}{|2ikr|}\right) \right] + \\ - \frac{e^{ikr + \gamma\pi/2} (-1)^l \Gamma(2l+1)}{2ikr \Gamma(l+1-i\gamma)} \left[\frac{(i\gamma-l)_l}{\Gamma(2l+1)} + O\left(\frac{1}{|2ikr|}\right) \right]. \end{aligned} \quad (6.4.2)$$

A (6.2.9) egyenlet komplex skálázása és a

$$\tilde{\psi}_{l,\theta}^{sc+}(k, r) = e^{i3\theta/2} \tilde{\psi}_l^{sc+}(k, re^{i\theta}) \quad (6.4.3)$$

függvény bevezetése után a

$$\left(\frac{k^2}{2} + e^{-2i\theta} \frac{1}{2r} \frac{d^2}{dr^2} r - e^{-2i\theta} \frac{l(l+1)}{2r^2} - e^{-i\theta} \frac{\gamma k}{r} \right) \tilde{\psi}_{l,\theta}^{sc+}(k, r) = \tilde{S}_{l,\theta}(k, r) \quad (6.4.4)$$

egyenletet kapjuk, ahol a komplexskálázott forrástag:

$$\tilde{S}_{l,\theta}(k, r) = e^{i3\theta/2} \tilde{S}_l(k, re^{i\theta}). \quad (6.4.5)$$

A (6.4.4) egyenlet a komplexskálázott irányított Schrödinger-egyenlet, melynek egyszerű aszimptotikájú megoldását keressük. A $0 < \theta < \pi$ feltétel mellett (6.4.2)-ből azt kapjuk, hogy

$$\lim_{r \rightarrow \infty} \tilde{\psi}_{l,\theta}^{sc+}(k, r) = 0. \quad (6.4.6)$$

Továbbá a (6.4.2) kifejezésből a Coulomb S -mátrix lokális reprezentánsát is megkapjuk:

$$e^{2i\sigma_l} \sim (2kre^{i\theta})^{i\gamma} \left[e^{-ikre^{i\theta}} 2ikre^{-i\theta/2} \tilde{\psi}_{l,\theta}^{sc+}(k, r) + \frac{e^{\gamma\pi/2} (-1)^l (i\gamma-l)_l}{\Gamma(l+1-i\gamma)} \right], \quad (6.4.7)$$

amint $r \rightarrow \infty$. A fázistolás [53] munkában található lokális reprezentánsa különbözik a (6.4.7) képletben szereplőtől, mivel ott más felbontást használtak.

A $\tilde{\psi}_l^{sc+}(k, r)$ függvény nem reguláris $r = 0$ -ban, ellenben

$$\lim_{r \rightarrow 0} r^{l+1} \tilde{\psi}_l^{sc+}(k, r) = 0 \quad (6.4.8)$$

könnyen bizonyítható. A (6.4.1) képlet miatt elég megmutatni, hogy

$$\lim_{r \rightarrow 0} r^{l+1} \omega_{s,l}(k, r) = \lim_{r \rightarrow 0} r^{l+1} \chi_l(k, r) . \quad (6.4.9)$$

A (6.1.14) definícióból

$$\lim_{r \rightarrow 0} r^{l+1} \chi_l(k, r) = e^{\gamma\pi/2} \frac{(-1)^l}{(2ik)^{l+1}} \frac{\Gamma(2l+1)}{\Gamma(l+1-i\gamma)} \quad (6.4.10)$$

következik. Figyelembe véve a (6.1.13) és (K-8) képleteket kapjuk, hogy

$$r^{l+1} \omega_{s,l}(k, r) = A_l(k, r) + B_l(k, r) + C_l(k, r) , \quad (6.4.11)$$

ahol

$$A_l(k, r) = -K_l(k) \frac{M(l+1+i\gamma, 2l+2, -2ikr)}{\Gamma(2l+2)\Gamma(i\gamma-l)} (-2ikr)^{2l+1} \log(-2ikr) e^{ikr} , \quad (6.4.12)$$

$$B_l(k, r) = -K_l(k) \frac{e^{ikr}}{\Gamma(2l+2)\Gamma(i\gamma-l)} \sum_{n=0}^{\infty} f_n^l \frac{(l+1+i\gamma)_n}{(2l+2)_n} \frac{(-2ikr)^{n+2l+1}}{n!} , \quad (6.4.13)$$

$$C_l(k, r) = -K_l(k) \frac{(2l)! e^{ikr}}{\Gamma(l+1+i\gamma)} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(i\gamma-l)_n}{(-2l)_n} \frac{(-2ikr)^n}{n!} , \quad (6.4.14)$$

és

$$K_l(k) = \frac{(-1)^{l+1}}{(2ik)^{l+1}} e^{2i\sigma_l + \gamma\pi/2} , \quad (6.4.15)$$

$$f_n^l = \Psi(l+1+i\gamma+n) - \Psi(n+1) - \Psi(2l+2+n) . \quad (6.4.16)$$

Itt $\Psi(z)$ a digamma-függvény. Világos, hogy $\lim_{r \rightarrow 0} A_l(k, r) = 0$ és $\lim_{r \rightarrow 0} B_l(k, r) = 0$. A $C_l(k, r)$ függvény $r \rightarrow 0$ esetén éppen (6.4.10) jobb oldalával egyezik meg, így kapjuk a (6.4.8) eredményt.

Vezessük be a $h_{l,\theta}^{sc+}(k, r) = r^{l+1} \tilde{\psi}_{l,\theta}^{sc+}(k, r)$ függvényt, hogy $r = 0$ -ban egyszerű határfeltételt kapjunk, ezzel ugyanis a fõnt elmondottak miatt $r = 0$ -ban reguláris függvényhez jutunk. Természetesen $h_{l,\theta}^{sc+}(k, r)$ -re is igaz marad, hogy $r \rightarrow \infty$ esetén eltûnik. Az új függvényre a

$$\left(\frac{k^2}{2} + e^{-2i\theta} \frac{1}{2} \frac{d^2}{dr^2} - e^{-2i\theta} \frac{l}{r} \frac{d}{dr} - e^{-i\theta} \frac{\gamma k}{r} \right) h_{l,\theta}^{sc+}(k, r) = r^{l+1} \tilde{S}_{l,\theta}(k, r) \quad (6.4.17)$$

differenciálegyenlet írható fel.

Ha a potenciál a Coulomb-tag mellett egy $V_s(r)$ rövid hatótávolságú potenciátagot is tartalmaz, akkor az inhomogén differenciálegyenletünk

$$\left(\frac{k^2}{2} + e^{-2i\theta} \frac{1}{2} \frac{d^2}{dr^2} - e^{-2i\theta} \frac{l}{r} \frac{d}{dr} - e^{-i\theta} \frac{\gamma k}{r} - V_s(re^{i\theta}) \right) h_{l,\theta}^{sc+}(k, r) = r^{l+1} S_{l,\theta}^{tot}(k, r) \quad (6.4.18)$$

alakúra módosul, ahol

$$S_{l,\theta}^{tot}(k, r) = \tilde{S}_{l,\theta}(k, r) + e^{i3\theta/2} \psi_{i,l}(k, re^{i\theta}) V_s(re^{i\theta}) . \quad (6.4.19)$$

A (6.4.17) és (6.4.18) differenciálegyenleteket a következő határfeltételek mellett kell megoldanunk:

$$h_{l,\theta}^{sc+}(k, 0) = 0 , \quad (6.4.20)$$

és

$$\lim_{r \rightarrow \infty} h_{l,\theta}^{sc+}(k, r) = 0 . \quad (6.4.21)$$

Elértük tehát a kitűzött célt. Tudunk a hosszú hatótávolságú Coulomb-szórás problémára olyan differenciálegyenletet felírni (6.4.17) és (6.4.18) formájában, melyhez egyszerű határfeltétel tartozik a (6.4.20) és (6.4.21) egyenletekben megadott módon.

6.5. Numerikus eredmények

Numerikus számításokban a (6.4.21) feltétel helyett a

$$h_{l,\theta}^{sc+}(k, R) = 0 \quad (6.5.1)$$

határfeltételt használjuk, ahol R egy tetszőlegesen nagy pozitív valós szám. Természetesen a (6.5.1) határfeltétel közelítés, tehát vizsgálni kell, hogy az eredmények hogyan függnék R -től. R értéke a (6.4.2) aszimptotikus alakhoz tartozó hibatag nagyságrendjéhez tartozó aszimptotikus tartományba kell eszen.

A következőkben leírom a témához kapcsolódó numerikus eredményeinket.

A (6.4.17) és (6.4.18) egyenletek megoldásához a végeselem-módszert használtuk. Az eljárás és a használt bázisfüggvények megtalálhatók a [103] munkában. Megemlítjük még, hogy hasonló módszert használtak az [53] cikkben is. Az elemek hosszát egységesen 1-nek választottuk. A Lobatto-függvények fokszámát N -el jelöltük, és minden elem esetén ugyanazt a fokszámot használtuk. A θ értéke 0.1 radián volt.

Először a tiszta Coulomb esetet vizsgáltuk az $1/r$ potenciállalakkal. Az impulzus $k = 3$, a pálya-impulzusmomentum $l = 0$ volt. A fázistolást a (6.4.7) képlet segítségével vizsgáltuk. Másodszor a tiszta Coulomb-potenciálhoz hozzáadtuk a $V_s(r) = 7.5r^2 \exp(-r)$ rövid hatótávolságú potenciált, mivel pontosan ezt a két potenciált vizsgálták az [53] cikkben is egy másik felbontással és a külső komplex skálázással. Ezt a potenciálváltást az összehasonlítás lehetősége motiválta, hiszen ebben az esetben egzakt megoldás nem létezik.

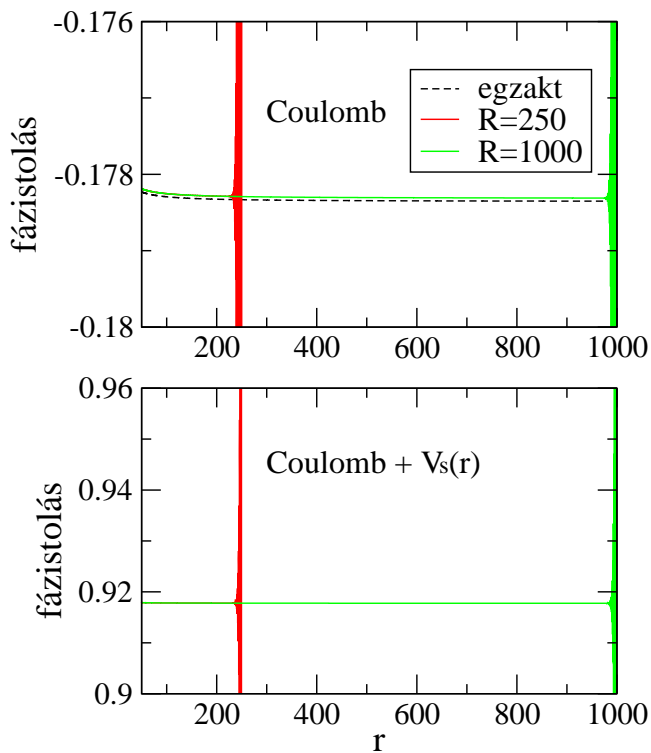
A 6.2 ábra felső része mutatja a tiszta Coulomb eset fázistolásának változását az r függvényében. Az egzakt eredményt a szaggatott fekete vonal ábrázolja. A végeelem-módszernél használt (6.5.1) feltételben két különböző R értékkel számoltunk ($R = 250$ és $R = 1000$). Az $r > R$ esetén a végeelem-módszer nincs értelmezve, ezért mutatnak torzulást a fázistolások görbéi $r = R$ környékén. A fázistolás lokális reprezentánsának értéke gyorsan konvergál az egzakt értékhez.

A 6.2 ábra alsó része mutatja a rövid hatótávolságú potenciállal kiegészített Coulomb-potenciálra vonatkozó eredményeket. A végeelem-módszerből fakadó torzulásokról elmondhatjuk ugyanazt, mint az imént. Itt nincs ugyan egzakt megoldás, amihez viszonyíthatnánk az eredményeket, de az [53] munka eredményeivel jó egyezést kaptunk. A konvergencia szintén gyors.

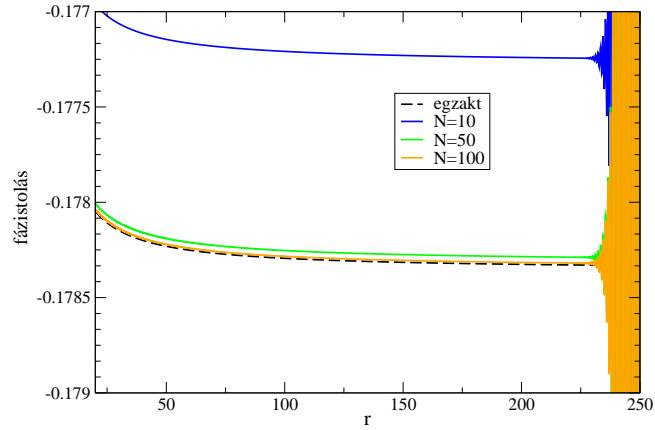
A 6.2 ábra értékeit elemenként 50 Lobatto-függvénnyel számolva kaptuk. Megvizsgáltuk a fázistolás lokális reprezentánsának viselkedését tiszta Coulomb-szórás esetén a Lobatto-függvények számának változása szempontjából. A (6.5.1) határfeltételben R értékét 250-nek választottuk. Az eredményeket a 6.3 ábra mutatja. Az $r = 250$ érték körül $N = 50$ esetén három tizedesjegy pontossággal kaptuk vissza az egzakt eredményt, míg $N = 100$ esetén már majdnem mindenütt elértük a négy tizedesjegy pontosságot, ami ezen a területen nagyon jó eredménynek számít.

Megvizsgáltuk még a θ komplex skálázási paraméter hatását a fázistolásra. A 6.4 ábra mutatja az egzakt (ld.: (6.4.7)) hullámfüggvényhez tartozó fázistolás lokális reprezentánsának viselkedését tiszta Coulomb-szórás esetén a θ komplex skálázási paraméter függvényében, négy különböző r esetén. Látható, hogy ha r az aszimptotikus tartományba ($r = 550$ körülől) esik, akkor a fázistolás független a θ paramétertől. Kis r -re nagyobb θ -t kell használni az egzakt fázistolás eléréséhez.

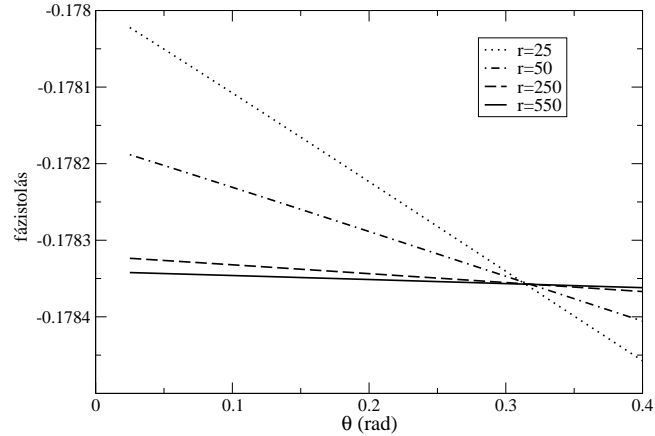
Megmutattuk tehát, hogy standard komplex skálázással hogyan oldható meg a kétttest-Coulomb-szórás probléma. A szórás határfeltételt nagyban egyszerűsítettük, így numerikusan meglehetősen könnyen megoldható problémára vezettük vissza az eredeti szórás feladatot. Módszerünk rövid hatótávolságú potenciállal kiegészített Coulomb-potenciál esetén is alkalmazható.



6.2. ábra. A fázistolás lokális reprezentánsának viselkedése tiszta Coulomb-potenciál (felső ábra), és a $V_s(r)$ rövid hatótávolságú potenciállal kiegészített Coulomb-potenciál (alsó ábra) jelenléte esetén. Az első esetben ismert az egzakt fázistolás, ezt szaggatott fekete vonal ábrázolja. A numerikus eredményeket két görbe mutatja, $R = 250$ (piros folytonos vonal) és $R = 1000$ (zöld folytonos vonal) esetén.



6.3. ábra. A fázistolás lokális reprezentációjának viselkedése tiszta Coulomb-szórás esetén a Lobatto-függvények számának tükrében. Az ábra az egzakt és a numerikus eredményeket mutatja $R = 250$ esetén.



6.4. ábra. Az egzakt hullámfüggvényhez tartozó fázistolás lokális reprezentációjának viselkedése tiszta Coulomb-szórás esetén a θ komplex skálázási paraméter függvényében. A számolás során négy különböző r értéket használtunk.

7. fejezet

Összefoglalás

A szóráselmélet felületi integrálos formalizmusa azért nagy jelentőségű, mert egyformán alkalmazható rövid hatótávolságú és Coulomb-potenciál esetén. Ez a formalizmus lehetővé tette töltött háromtest-rendszerek esetén a szórási amplitúdó poszt formájának megadását a teljes felbomlási küszöb felett. A felületi integrálos formalizmus alapvetően fontos függvénye a Coulomb-módosított síkhullám (CDPW).

Munkám egyik célkitűzése volt, hogy a CDPW függvény tulajdonságait alaposan megismerjem, majd pedig erre alapozva nagy pontosságú számítógépes programot készítsek a CDPW numerikus meghatározására. Először meghatároztam a CDPW parciális hullámok szerinti sorfejtését, majd három ekvivalens alakot adtam meg a parciálishullám-komponensekre, felhasználva, hogy sikerült felírnom a ${}_2F_2(a, a; a + l + 1, a - l; z)$ hipergeometrikus függvény három ekvivalens alakját l nemnegatív egész, $z \in \mathbb{C} \setminus \{0\}$, $a \in \mathbb{C} \setminus \mathbb{Z}$ és $\text{Re}[a] > 0$ esetén. Ezek után meghatároztam a parciálishullám-komponensek aszimptotikus viselkedését a fenti hipergeometrikus függvényre vonatkozó aszimptotika meghatározása révén. Az aszimptotika háromtagú rekurzió alapuló formuláját sikerült egyszerűsíteni. Zárt alakban megadtam a rekurzió megoldását. A parciális hullámokra vonatkozó aszimptotikából pedig leszámaztattam a háromdimenziós CDPW vezető rendű aszimptotikus alakját. Ennek az aszimptotikus formulának igen jelentős szerepe van a felületi integrálos formalizmusban. Eredményem pontosította a [21, 22] munkában megadott aszimptotikát. Ezt a [88] hivatkozású cikkben publikáltuk.

A numerikus számításokhoz szükséges a CDPW parciálishullám-komponenseinek megbízható számítása. Ennek érdekében hibabecslést adtam a CDPW

Taylor-sorfejtésének maradék tagjára. A Taylor-sorfejtés, valamint a három ekvivalens alak közül kettőnek a segítségével FORTRAN–90 és Mathematica programot készítettem a CDPW numerikus meghatározására. Ezen eredmények a dolgozat bekötéséig még nem jelentek meg, de remélhetőleg a védésig megjelennek.

A szórási számítások nehézségét az okozza, hogy a Schrödinger-egyenlet keresett megoldásának aszimptotikus alakja nem egyszerű. A Schrödinger-egyenlet transzformációja révén olyan inhomogén egyenletet kaphatunk, ahol a keresett megoldás aszimptotikusan eltűnik. Egy ilyen típusú egyenlet numerikus megoldása sokkal egyszerűbb, mint az eredeti szórási aszimptotika biztosítása. A komplex skálázás alkalmazása ilyen egyszerűsítésre vezet rövid hatótávolságú potenciálok esetén.

Megmutattuk annak a módját, hogy hogyan lehet a standard komplex skálázással megoldani, egyszerűsíteni a kéttest-Coulomb-szórási problémát. A módszer általános esetben is működik, azaz amikor Coulomb-kölcsönhatás mellett a potenciál rövid hatótávolságú tagot is tartalmaz. Eredményünket az [58] cikkben publikáltuk. Az új eljárásához nem szükséges az ún. kétpotenciál-formalizmus, amelyen a korábbi komplex skálázásos módszer alapult. Az árnyékolási-renormálási módszert, a külső komplex skálázást és a felületi integrálos formalizmust is először kéttest-feladatra dolgozták ki, s csak később terjesztették ki őket háromtest-feladatra. Most azon dolgozunk, hogy a tiszta Coulomb-kölcsönhatás esetére kidolgozott eljárás is kiterjeszthető legyen háromtest-rendszerekre.

Ebben a munkában azt is kimutattam, hogy a CDPW használatával nyert komplexskálázott szórt hullámfüggvény aszimptotikusan nem tűnik el, mivel bejövő és kimenő gömbhullámot is tartalmaz. Ennek következtében pedig a CDPW, mint a felbontás ismert része, nem alkalmazható komplex skálázásra, mivel használata nem egyszerűsíti a szórási határfeltételt.

8. fejezet

Summary

The main virtue of the surface integral formalism of scattering theory is that it provides formulae for the scattering amplitude valid for both short-range potential and long-range Coulomb potential. This formalism has also made it possible to develop the post form of the break-up amplitude for three-body scattering of charged particles. The basic notion of the surface integral formalism is the so called Coulomb-distorted plane wave (CDPW).

One of the aims of my work was to investigate the mathematical properties of this function and, based upon these results, to develop an efficient FORTRAN-90 computer code. First I formulated the partial wave components of the CDPW and gave three equivalent forms for these functions. These formulae rely on the three equivalent forms of the hypergeometric function ${}_2F_2(a, a; a+l+1, a-l; z)$, which have been found by me. These are valid for non-negative integer l and $z \in \mathbb{C} \setminus \{0\}$, $a \in \mathbb{C} \setminus \mathbb{Z}$ and $\text{Re}[a] > 0$. I determined the asymptotic form of the function ${}_2F_2(a, a; a+l+1, a-l; z)$ and I gave a closed analytic form of a three-term recursion relation for the asymptotic expansion. From these results I deduced the asymptotic form of the CDPW. From the asymptotic form of the partial wave components of the CDPW I derived the leading-order asymptotic expression of the three-dimensional problem. This form plays an important role in the derivation of the surface integral formalism. This result was published [88]; it is a refinement of the asymptotic form given in [21, 22].

To facilitate the numerical calculation of the CDPW it is necessary to develop a reliable computer code. For this purpose, I gave an upper bound for the remainder of the Taylor expansion of the function ${}_2F_2(a, a; a+l+1, a-l; z)$. Based on this result and using two of the three equivalent forms of ${}_2F_2(a, a; a+l+1, a-l; z)$

$l + 1, a - l; z$) chosen so as to suit the arguments of the function, I have written a FORTRAN-90 and a Mathematica code for the numerical calculation. These results have not been published before the submission of my thesis.

The difficulty of the scattering calculation is due to the complicated form of the asymptotics of the scattering wave function. A special transformation of the Schrödinger equation, however, may lead to an asymptotic form that is extremely simple: the function goes to zero at large distances. The solution of the differential equation with such a boundary condition is much simpler than the solution of the original problem. For short-range potentials, the application of the complex scaling method leads to such a simplification.

We explain how to use the standard complex scaling for the pure two-body Coulomb problem in order to simplify the boundary condition. The new method is also valid for the general case in which a short-range potential is added to the Coulomb interaction. The new procedure does not rely on the so-called two-potential formalism. This result was published [58]. It is considered the first step towards a new formalism of few-body scattering with Coulomb potential. The standard methods, such as the screening and renormalization, exterior complex scaling and surface integral formalism were first introduced and tested for two-body problems as well, and they were extended to three-body problems later on. Presently we are working on how to extend our method to the problem of three charged particles.

It has also been shown that the splitting of the wave function based on the CDPW does not simplify the boundary condition if the standard complex scaling is applied. This is so since in this case the scattered part of the wave function contains both incoming and outgoing waves.

9. fejezet

Köszönetnyilvánítás

Köszönöm témavezetőmnek, dr. Kruppa András Tibornak doktori munkám során nyújtott kiváló szakmai és őszinte emberi támogatását.

Köszönöm dr. Lovas Rezső György professzor úrnak dolgozatom gondos áttekintését és hasznos tanácsait.

Köszönöm családom bátorító és kitartó szeretetét.

Képletgyűjtemény

Itt találhatóak azok a képletek, melyekre hivatkozok ugyan dolgozatomban, de az átláthatóság kedvéért nem írom fel őket alkalmazásuk helyén vagy azelőtt.

Ha nem mondunk mást, a hipergeometrikus függvényekre vonatkozó feltételek a 2.4.2 fejezetben elmondottaknak megfelelően alakulnak. Általában $a, b, z \in \mathbb{C}$, $x, y \in \mathbb{R}$ és k, m, n, N nemnegatív egészek lesznek.

5.3.5.4, 3. kötet [86]:

$$\begin{aligned} \sum_{k=0}^n (-1)^k \binom{n}{k} \frac{(a)_k}{(b)_k} {}_{p+m}F_{q+m} \left(\begin{matrix} (a_p), & \Delta(m, a+k) \\ (b_q), & \Delta(m, b+k) \end{matrix} \middle| z \right) = \\ = \frac{(b-a)_n}{(b)_n} {}_{p+m}F_{q+m} \left(\begin{matrix} (a_p), & \Delta(m, a) \\ (b_q), & \Delta(m, b+n) \end{matrix} \middle| z \right), \end{aligned} \quad (\text{K-1})$$

ahol

$$\Delta(m, a) = \frac{a}{m}, \frac{a+1}{m}, \dots, \frac{a+m-1}{m}.$$

13.5.2 [84]:

$$U(a, b, z) = z^{-a} \left\{ \sum_{n=0}^{N-1} \frac{(a)_n (1+a-b)_n}{n!} (-z)^{-n} + O(|z|^{-N}) \right\}, \quad (\text{K-2})$$

ahol $-3/2\pi < \arg(z) < 3/2\pi$.

5.11.1(1) [85]:

$${}_pF_q((a_p); (b_q); -z) = \frac{\Gamma(b_1) \cdot \dots \cdot \Gamma(b_q)}{\Gamma(a_1) \cdot \dots \cdot \Gamma(a_p)} G_{p,q+1}^{1,p} \left(z \left| \begin{matrix} 1 - (a_p) \\ 0, \quad 1 - (b_q) \end{matrix} \right. \right) \quad (\text{K-3})$$

10.1.16 [84]:

$$h_n^{(1)}(z) = i^{-n-1} z^{-1} e^{iz} \sum_{k=0}^n \left(n + \frac{1}{2}, k \right) (-2iz)^{-k}, \quad (\text{K-4})$$

ahol

$$\left(n + \frac{1}{2}, k \right) = \frac{(n+k)!}{k! \Gamma(n-k+1)}.$$

10.1.17 [84]:

$$h_n^{(2)}(z) = i^{n+1} z^{-1} e^{-iz} \sum_{k=0}^n \left(n + \frac{1}{2}, k \right) (2iz)^{-k} \quad (\text{K-5})$$

2.17.5.6, 2. kötet [86]:

$$\begin{aligned} \int_{-y}^y (x+y)^{a-1} e^{-bx} P_n \left(\frac{x}{y} \right) dx &= \\ &= (-1)^n \frac{(1-a)_n}{(a)_{n+1}} (2y)^a e^{yb} {}_2F_2 \left(\begin{matrix} a, & a \\ a+n+1, & a-n \end{matrix} \middle| -2yb \right), \end{aligned} \quad (\text{K-6})$$

ahol $y, \operatorname{Re}[a] > 0$.

6.5.32 [84]:

$$\Gamma(a, z) \sim z^{a-1} e^{-z} \left[1 + \frac{a-1}{z} + \frac{(a-1)(a-2)}{z^2} + \dots \right], \quad (\text{K-7})$$

ha $|z| \rightarrow \infty$ és $|\arg(z)| < 3\pi/2$.

7.2.2.3, 3. kötet [86]:

$$\begin{aligned}
 U(a, n+1, z) = & \frac{(-1)^{n-1}}{n! \Gamma(a-n)} \left({}_1F_1(a; n+1; z) \ln(z) + \right. \\
 & \left. + \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(a)_k}{(n+1)_k} [\Psi(a+k) - \Psi(k+1) - \Psi(n+k+1)] \frac{z^k}{k!} \right) + \\
 & + \frac{(n-1)!}{\Gamma(a)} \sum_{k=0}^{n-1} \frac{(a-n)_k}{(1-n)_k} \frac{z^{k-n}}{k!}
 \end{aligned}
 \tag{K-8}$$

Irodalomjegyzék

- [1] R.G. Newton, *Scattering Theory of Waves and Particles* (Springer-Verlag, New York, 1982).
- [2] John R. Taylor, *Scattering Theory: The Quantum Theory on Nonrelativistic Collisions* (John Wiley & Sons, Inc. , New York, 1972).
- [3] A. Bohm, *Quantum Mechanics Foundations and Applications* (Springer-Verlag, New York, 1993).
- [4] I.J. Thompson, F. Nunes, *Nuclear Reactions for Astrophysics Principles, Calculation and Applications of Low-Energy Reactions* (Cambridge University Press, Cambridge, England, 2009).
- [5] G.R. Satchler, *Direct Nuclear Reactions* (Clarendon Press, London, 1983).
- [6] F. Englert, R. Brout, Phys. Rev. Lett. **13** 321 (1964).
- [7] Peter W. Higgs, Phys. Rev. Lett. **13** 508 (1964).
- [8] G.S. Guralnik, C.R. Hagen, T.W.B. Kibble, Phys. Rev. Lett. **13** 585 (1964).
- [9] L.D. Faddeev, Tr. Mat. Inst. Akad. Nauk SSSR **69**, 1 (1963).
- [10] L.D. Faddeev, *Mathematical aspects of the three-body problem in the quantum scattering* (Israel Program for Scientific Translations, Jerusalem, 1965).
- [11] O.A. Yakobuvsky, Yad. Fiz. **5**, 1312 (1967).
- [12] J.D. Dollard, J. Math. Phys. **5**, 729 (1964).

- [13] J.D. Dollard, *J. Math.* **1**, 5 (1971).
- [14] W.O. Amrein, J.M. Jauch, K.B. Sinha, *Scattering Theory in Quantum Mechanics* (W. A. Benjamin, Inc.; London, 1977).
- [15] H. van Haeringen, *Charged-particle interactions: theory and formulas* (Coulomb Press, Leyden, 1985).
- [16] J.R. Taylor, *Il Nuo. Cimento B* **23**, 313 (1974).
- [17] G.B. West, *J. Math. Phys.* **8**, 942 (1967).
- [18] J.C.Y. Chen, A.C. Chen, *Advances in Atomic and Molecular Physics* (D.R. Bates, I. Esterman, eds.), Vol. 8 (Academic Press, New York, 1972), p. 71.
- [19] E.O. Alt, W. Sandhas, H. Ziegelmann, *Phys. Rev. C* **17**, 1981 (1978).
- [20] E.O. Alt, W. Sandhas, *Collision theory for two- and three-particle system interacting via short-range and Coulomb forces*, in: *F.S. Levin, D. Micha (Eds.) Coulomb Interactions in Nucleat and Atomic Few-Body Collision* (Plenum Press, New York, 1996, pp. 1-95., 1996).
- [21] A.S. Kadyrov, I. Bray, A.M. Mukhamedzhanov, A.T. Stelbovics, *Phys. Rev. A* **72**, 032712 (2005).
- [22] A.S. Kadyrov, I. Bray, A.M. Mukhamedzhanov, A.T. Stelbovics, *Ann. Phys. (N.Y.)* **324**, 1516 (2009).
- [23] V.D. Efros, W. Leidemann, G. Orlandini, N. Barnea, *J. Phys. G.: Nucl. Part. Phys.* **34**, R459 (2007).
- [24] G. Bampa, W. Leidemann, H. Arenhödvel, *Phys. Rev. C* **84**, 034005 (2011).
- [25] G. Hagen, N. Michel, *Phys. Rev. C* **86**, 021602(R) (2012).
- [26] A.T. Kruppa, *Phys. Lett. B* **431**, 237 (1998).
- [27] A.T. Kruppa, K. Arai, *Phys. Rev. A* **59**, 053556 (1999).
- [28] K. Arai, A.T. Kruppa, *Phys. Rev. C* **60**, 064315 (1999).
- [29] R. Suzuki, A.T. Kruppa, B.G. Giraud, K. Kato, *Prog. Theor. Phys* **19**, 949 (2008).

- [30] O.A. Rubstova, V.I. Kukulín, V.N. Pomerantsev, A. Faessler, Phys. Rev. C **81**, 064003 (2010).
- [31] G.D. Doolen, J. Phys. **B8** 525 (1975).
- [32] G.D. Doolen, M. Hidalgo, J. Nuttall, R. Stagat, *Atomic Physics 3* (Plenum, New York 1973) p. 257.
- [33] G.D. Doolen, J. Nuttall, R.W. Stagat, Phys. Rev. A **10**, 1612 (1974).
- [34] S. Aoyama, T. Myo, K. Kato, K. Ikeda, Prog. Theor. Phys. **116**, 1 (2006).
- [35] H. Witala, W. Glöckle, Phys. Rev. C **60**, 024002 (1999).
- [36] E.A. Kolganova, A.K. Motovilv, Y.K. Ho, Nucl. Phys. A **684**, 623c (2001).
- [37] D.V. Fedorov, E. Garrido, A.S. Jensen, Few-Body Syst. **33**, 153 (2003).
- [38] A.T. Kruppa, R.G. Lovas, B. Gyarmati, Phys. Rev. C **37**, 382 (1988).
- [39] A.T. Kruppa, K. Kato, Prog. Theor. Phys. **84**, 1145 (1990).
- [40] K. Kato, K. Ikeda, Prog. Theor. Phys. **89**, 623 (1993).
- [41] C. Kurokawa, K. Kato, Phys. Rev. C **71**, 021301 (R) (2005).
- [42] J. Nuttall and H.L. Cohen, Phys. Rev. **188**, 1542 (1969).
- [43] J.A. Hendry, Nucl. Phys. A **198**, 391 (1972).
- [44] R.T. Baumel, M.C. Crocker, J. Nuttall, Phys. Rev. A **12**, 486 (1975).
- [45] B.R. Johnson, W.P. Reinhardt, Phys. Rev. A **29**, 2933 (1984).
- [46] T.N. Rescigno, C.W. McCurdy, Phys. Rev. A **31**, 624 (1985).
- [47] T.N. Rescigno, M. Baertschy, D. Byrum, C.W. McCurdy, Phys. Rev. A **55**, 4253 (1997).
- [48] C.W. McCurdy, T.N. Rescigno, Phys. Rev. A **56**, R4369 (1997).
- [49] M. Baertschy, T.N. Rescigno, W.A. Isaacs, C.W. McCurdy, Phys. Rev. A **60**, R13 (1999).

- [50] C.W. McCurdy, D.A. Horner, T.N. Rescigno, F. Martín, Phys. Rev. A **69**, 032707 (2004).
- [51] C.W. McCurdy, M. Baertschy, T.N. Rescigno, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **37**, R137 (2004).
- [52] M. Baertschy, T.N. Rescigno, W.A. Isaacs, X. Li, C.W. McCurdy, Phys. Rev. A **63**, 022712 (2001).
- [53] M.V. Volkov, N. Elander, E. Yarevsky, S.L. Yakovlev, Europhys. Lett. **85**, 30001 (2009).
- [54] S.L. Yakovlev, M.V. Volkov, E. Yarevsky, N. Elander, J. Phys. A: Math. Theor. **43**, 245302 (2010).
- [55] N. Elander, M.V. Volkov, A. Larson, M. Stenrup, J.Z. Mezei, E. Yarevsky, S. Yakovlev, Few-Body Syst. **45**, 197 (2009).
- [56] C.W. McCurdy, F. Martin, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **37**, 917 (2004).
- [57] A.T. Kruppa, R. Suzuki, K. Kato, Phys. Rev. C **75**, 044602 (2007).
- [58] I. Hornyak, A.T. Kruppa, Phys. Rev. A **85**, 022702 (2012).
- [59] E.O. Alt, W. Sandhas, Phys. Rev. C **21**, 1733 (1980).
- [60] E.O. Alt, A.M. Mukhamedzhanov, M.M. Nishonov, A.I. Sattarov, Phys. Rev. C **65**, 064613 (2002).
- [61] E.O. Alt, L.D. Blokhintsev, A.M. Mukhamedzhanov, A.I. Sattarov, Phys. Rev. C **75**, 054003 (2007).
- [62] A. Deltuva, A.C. Fonseca, P.U. Sauer, Phys. Rev. C **71**, 054005 (2005).
- [63] W. Glockle, H. Witala, D. Huber, H. Kamada, J. Golak, Phys. Rep. **274**, 107 (1996).
- [64] N. Austern, Y. Iseri, M. Kamimura, M. Kawai, G. Rawitscher, M. Yahiro, Phys. Rep. **154**, 125 (1987).
- [65] A. Kievsky, S. Rosati, M. Viviani, Phys. Rev. Lett. **82**, 3759 (1999).
- [66] J.A. Tostevin, F.M. Nunes, I.J. Thompson, Phys. Rev. C **63**, 024617 (2001).

- [67] L.D. Faddeev, Zh. Eksp. Teor. Fiz. **39**, 1459 (1960).
- [68] L.D. Faddeev, Sov. Phys.-JETP **12**, 1014 (1961).
- [69] L.D. Faddeev, S.P. Merkuriev, *Quantum Scattering Theory for Several Particle Systems* (Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, 1993).
- [70] E.O. Alt, P. Grassberger, W. Sandhas, Nucl. Phys. B **2**, 167 (1967).
- [71] L. Rosenberg, Phys. Rev. D **8**, 1833 (1973).
- [72] L. Rosenberg, Phys. Scr. **77**, 015305 (2008).
- [73] A. Deltuva, A.C. Fonseca, P.U. Sauer, Phys. Rev. Lett. **95**, 092301 (2005).
- [74] A.S. Kadyrov, A.M. Mukhamedzhanov, A.T. Stelbovics, I. Bray, F. Pirlepesov, Phys. Rev. A **68**, 022703 (2003).
- [75] A.S. Kadyrov, A.M. Mukhamedzhanov, A.T. Stelbovics, I. Bray, Phys. Rev. A **70**, 062703 (2004).
- [76] E.O. Alt, A.M. Mukhamedzhanov, Phys. Rev. A **47**, 2004 (1993).
- [77] A. Messiah, *Quantum Mechanics* (Dover Publications, Mineola, 1999).
- [78] J. Aguilar, J.M. Combes, Commun. Math. Phys. **22**, 269 (1971).
- [79] E. Balslev, J.M. Combes, Commun. Math. Phys. **22**, 280 (1971).
- [80] Y.K. Ho, Phys. Rep. **99**, 1 (1983).
- [81] N. Moiseyev, Phys. Rep. **302**, 211 (1998).
- [82] A. Erdélyi, *Asymptotic Expansions* (Dover Publications, New York, 1956).
- [83] E.T. Copson, *Asymptotic Expansions (Cambridge Tracts in Mathematics)* (Cambridge University Press, London, 1965).
- [84] M. Abramowitz, I.A. Stegun, *Handbook of Mathematical Functions* (Dover, New York, 1964).
- [85] Y.L. Luke, *The special functions and their approximations Vol. I* (Academic Press, San Diego, 1969).

- [86] A.P. Prudnikov, Yu.A. Brychkov, O.I. Marichev, *Integrals and Series* (Gordon and Breach Science Publishers, New York, 1990).
- [87] L.J. Slater, *Generalized Hypergeometric Functions* (Cambridge University Press, London, 1966).
- [88] I. Hornyak, A.T. Kruppa, *J. Math. Phys.* **54**, 053502 (2013).
- [89] I.S. Gradshteyn, I.M. Ryzhik, *Table of Integrals, Series, and Products 7. ed.* (Elsevier Academic Press, San Diego, 2007).
- [90] Per W. Karlsson, *J. Math. Phys.* **12**, 270 (1971).
- [91] <http://functions.wolfram.com/07.27.17.0001.01>.
- [92] L. Sirovich, *Techniques of Asymptotic Analysis* (Springer-Verlag, New York, 1971).
- [93] H. Kuki, *Comm. ACM* **15**, 262 (1972).
- [94] R. Spira, *Math. Comp.* **25**, 317 (1971).
- [95] A.R. DiDonato, A.H. Morris, *ACM Trans. Math. Software* **12**, 377 (1986).
- [96] Alan Miller's Fortran Software, <http://jblevins.org/mirror/amiller/>
- [97] Eric Kostlan és Dmitry Gokhman,
<http://zeta.math.utsa.edu/~gokhman/ftp/papers/igf.pdf>
<http://zeta.math.utsa.edu/~gokhman/ftp/code/cdig.f>
- [98] W. Rudin, *Real and Complex Analysis* (McGraw-Hill Book Company, New York, 1987).
- [99] F.W.J. Olver, *J. Soc. Indust. Appl. Math. Ser. B Numer. Anal.* **2**, 225 (1965).
- [100] NIST Digital Library of Mathematical Functions, <http://dlmf.nist.gov/13.7>
- [101] H. van Haeringen, *Il Nuovo Cimento* **34B**, 53 (1976).
- [102] G. Gasaneo, L.U. Ancarani, *Phys. Rev. A* **82**, 042706 (2010).
- [103] T.N. Rescigno, C.W. McCurdy, *Phys. Rev. A* **62**, 032706 (2000).

A jelölt publikációi

A PhD értekezés alapjául szolgáló közlemények:

Nemzetközi referált folyóiratcikkek

- I. Hornyák, A.T. Kruppa, *Physical Review A* **85**, 022702 (2012), IF: 3,042
- I. Hornyák, A.T. Kruppa, *Journal of Mathematical Physics* **54**, 053502 (2013), IF: 1,176

Nemzetközi referált konferenciakiadvány

- I. Hornyák, *Two-body Coulomb scattering and complex scaling*, *J. Phys.: Conf. Ser.* **436**, 012032 (2013), Proceedings of 10th International Conference on Clustering Aspects of Nuclear Structure and Dynamics (Cluster12), 24-28 September, 2012, Debrecen, Hungary

Nemzetközi konferencián bemutatott poszter

- I. Hornyák, *Two-body Coulomb scattering and complex scaling*, Second European Nuclear Physics Conference (EuNPC2012), September 17-21, 2012, Bucharest, Romania

Hazai konferencián tartott előadások

- I. Hornyák, *Komplex skálázás alkalmazása Coulomb-szórásra*, XV. Magfizikus Találkozó, Jávorkút, Bükk, 2012. szeptember 3-5.

- I. Hornyák, *Kéttest-Coulomb-szórás*, Informatika Kar PhD Konferencia, Hollókő, 2013. április 4-5.

További közlemények:

Nemzetközi referált folyóiratcikkek

- I. Hornyák, Á. Nagy, *Chemical Physics Letters* **437**, 132 (2007), IF: 2,207
- I. Hornyák, Á. Nagy, *International Journal of Quantum Chemistry*, **112**, 1285 (2012), IF: 1,306

Nemzetközi referált konferenciakiadvány

- V. Halász, L. Hegedüs, I. Hornyák, Benedek Nagy, *Solving application oriented graph theoretical problems with DNA computing*, J. C. Bansal et al. (eds.), *Proceedings of Seventh International Conference on Bio-Inspired Computing: Theories and Applications (BIC-TA 2012): Volume 1 (Advances in Intelligent Systems and Computing)*, Springer, India, 2013

Nemzetközi konferenciakiadványok

- V. Halász, L. Hegedüs, I. Hornyák, Benedek Nagy, *Solving application oriented graph theoretical problems with DNA computing*, *How the world computes : Turing Centenary Conference And 8th Conference On Computability In Europe, CIE 2012, Cambridge, UK, June 18-23, 2012 : abstracts of informal presentations*, Computer Laboratory, University of Cambridge, Cambridge, 105, 2012.
- I. Hornyák, Á. Nagy, *Phase space Fisher information*, *Proceedings of the Japanese-Hungarian Symposium (in the frame of the MTA-JSPS bilateral research cooperation project No 97, Debrecen, October 16, 2006.)* pp. 46-54, MTA-JSPS 2006-2008, Japan.