Семинар 5. Точно решаемые потенциалы. Часть 1

6 октября 2018 года

Функции Бесселя $J_m(z)$, $Y_m(z)$, $H_m^{(1,2)}(z)$, $I_m(z)$, $K_m(z)$

Преамбула

Функций Бесселя, как вынесено в заглавие, достаточно много. Они носят следующие названия и естественным образом объединяются в пары (мы увидим дальше, по какому признаку):

- Функция Бесселя $J_m(z)$ и функция Неймана $Y_m(z)$
- Функции Ганкеля первого и второго рода $H_m^{(1,2)}(z)$
- Функция Инфильда (модифицированная функция Бесселя первого рода) $I_m(z)$ и функция Макдональда (модифицированная функция Бесселя второго рода) $K_m(z)$

Возникают эти функции очень часто в самых различных задачах, но наибольшее значение они имеют при рассмотрении двумерного уравнения Лапласа и обсуждении двумерного уравнения Шрёдингера в цилиндрических координатах.

Задача

Обсуждать функции Бесселя мы будем на примере конкретной задачи. Предлагается найти уровни энергии для частицы массы M в двумерной прямоугольной яме:

$$U(\boldsymbol{r}) = \begin{cases} -U_0, & r < a \\ 0, & r > a \end{cases} \tag{1}$$

Уравнение Шрёдингера в цилиндрических координатах $\psi(r,\varphi)$ запишется следующим образом:

$$-\frac{\hbar^2}{2M}\left(\frac{\partial^2\psi}{\partial r^2} + \frac{1}{r}\frac{\partial\psi}{\partial r} + \frac{1}{r^2}\frac{\partial^2\psi}{\partial\varphi^2}\right) + U(r)\psi(r) = E\psi(r) \tag{2}$$

Мы интересуемся связанными состояниями, поэтому введём $\frac{\hbar^2\varkappa^2}{2M} = -E = |E|$. Заметим, что переменные r и φ разделяются, поэтому сделаем стандартную подстановку $\psi(r,\varphi) = \psi(r)e^{im\varphi}$:

$$\psi''(r) + \frac{1}{r}\psi'(r) - \left(\frac{2MU(r)}{\hbar^2} + \varkappa^2 + \frac{m^2}{r^2}\right)\psi(r) = 0 \tag{3}$$

(величина m носит название углового квантового числа, и обязана быть целым числом в силу периодичности по $\varphi \mapsto \varphi + 2\pi$).

Отрицательная энергия ($r > a$)

Вне ямы мы имеем $U(r) = 0$; вводя координату $z = \varkappa r$, мы приходим к уравнению:

$$\psi''(z) + \frac{1}{z}\psi'(z) - \left(1 + \frac{m^2}{z^2}\right)\psi(z) = 0 \tag{4}$$

Двумя линейно-независимыми решениями этого уравнения являются модифицированные функции Бесселя:

$$\psi(z) = A_1 I_m(z) + A_2 K_m(z) \tag{5}$$

Асимптотики при больших аргументах у этих функций соответствуют затухающим и возрастающим экспонентам:

$$\boxed{I_m(z) \approx \frac{1}{\sqrt{2\pi z}}e^z, \quad K_m(z) \approx \sqrt{\frac{\pi}{2z}}e^{-z}, \quad z \gg 1} \tag{6}$$

В свою очередь, при малых значениях аргумента одна из функций регулярна, а другая — расходится[1] ($\gamma \approx 0.577$ — постоянная Эйлера-Маскерони)

$$\boxed{I_m(z) \approx \frac{1}{m!}\left(\frac{z}{2}\right)^m, \quad K_m(z) \approx \begin{cases} \frac{(m-1)!}{2}\left(\frac{2}{z}\right)^m, & m \neq 0 \\ \ln\frac{2}{z} - \gamma, & m = 0 \end{cases}, \quad z \ll 1} \tag{7}$$

Для нашей задачи поиска связанных состояний коэффициент $A_1 \equiv 0$, поскольку волновая функция должна затухать на бесконечности. Значит $\psi(r > a) = AK_m(\varkappa r)$.

Положительная энергия ($r < a$)

Внутри ямы мы имеем $U(r) = -U_0$. Введём эффективный волновой вектор внутри ямы $k^2 = \frac{2M(U_0 - |E|)}{\hbar^2} = \frac{2MU_0}{\hbar^2} - \varkappa^2$ и сделаем подстановку подстановку $z = kr$. Получаем похожее уравнение, отличающееся лишь знаком единицы (эквивалентно, эти уравнения связаны заменой $z \mapsto iz$):

$$\psi''(z) + \frac{1}{z}\psi'(z) + \left(1 - \frac{m^2}{z^2}\right)\psi(z) = 0 \tag{8}$$

Уравнение очень похоже на предыдущее; в качестве его линейно-независимых решения, как правило, выбирают либо функции Бесселя и Неймана, либо функции Ганкеля[2]:

$$\psi(z) = B_1 J_m(z) + B_2 Y_m(z) = C_1 H_m^{(1)}(z) + C_2 H_m^{(2)}(z) \tag{9}$$

Функции Бесселя и Неймана при больших значениях аргумента ведут себя подобно косинусу и синусу с дополнительным фазовым сдвигом:

$$\boxed{J_m(z) \approx \sqrt{\tfrac{2}{\pi z}}\cos(z - \tfrac{m\pi}{2} - \tfrac{\pi}{4}), \quad Y_m(x) \approx \sqrt{\tfrac{2}{\pi z}}\sin(z - \tfrac{m\pi}{2} - \tfrac{\pi}{4}) \ , \quad z \gg 1} \tag{10}$$

Как и в прошлом случае, функция Бесселя в нуле регулярна, а Неймана — сингулярна[3]:

$$\boxed{J_m(z) \approx \frac{1}{m!}\left(\frac{z}{2}\right)^m, \quad Y_m(z) \approx \begin{cases} -\frac{(m-1)!}{\pi}\left(\frac{2}{z}\right)^m, & m \neq 0 \\ -\frac{2}{\pi}\left(\ln\frac{2}{z} - \gamma\right), & m = 0 \end{cases}, \quad x \ll 1} \tag{11}$$

Другой выбор линейно-независимой комбинации решений — функции Ганкеля, которые определяются как $H_m^{(1,2)}(x) = J_m(x) \pm iY_m(x)$. Они обе, естественно, сингулярны в нуле, но представляет интерес их асимптотика на бесконечности — она соответствует сходящейся и расходящейся цилиндрическим волнам:

$$\boxed{H_m^{(1,2)}(z) \approx \sqrt{\frac{2}{\pi z}} e^{\pm i(z - m\pi/2 - \pi/4)}, \quad z \gg 1} \tag{12}$$

$$\boxed{H_m^{(1,2)}(z) \approx \begin{cases} \mp i\frac{(m-1)!}{\pi}\left(\frac{2}{z}\right)^m, & m \neq 0 \\ \mp\frac{2i}{\pi}(\ln\frac{2}{z} - \gamma) + 1, & m = 0 \end{cases}, \quad z \ll 1} \tag{13}$$

Опять-таки, возвращаясь к нашей задаче — нас интересует решение, которое в нуле регулярно, поэтому естественный выбор — это функция Бесселя $\psi(x < a) = BJ_m(kr)$.

[1] Одно из решений непременно обязано расходиться в нуле, поскольку вронскиан этого уравнения, по формуле Лиувилля-Остроградского, с точностью до произвольной постоянной равен $1/x$. Функция Инфильда определяется как регулярное в нуле решение, а функция Макдональда — как решение, затухающее на бесконечности.

[2] Конечно, можно их перемешивать, рассматривая, например, любые другие линейные комбинации; но, как будет показано ниже, это не несет большого смысла

[3] Опять-таки, функция Бесселя определяется именно как решения соответствующего уравнения, регулярное в нуле. Функция Неймана же определяется по асимптотике на бесконечности, выписанной выше

Ремарка о регулярности в нуле В действительности, требование на связанные состояние накладывается одно — а именно, функция в нуле (да и вообще везде) должна быть интегрируема. Это исключает возможность иметь степенные сингулярности (которые имеют функции $Y_m(z)$ и $H_m^{(1,2)}(z)$ при $m > 0$), но не исключает возможность иметь лишь логарифмическую особенность (которая имеется при $m = 0$). Аргумент, по которому эту логарифмическую особенность нужно отбросить, немного иной. С физической точки зрения, конечно, очевидно, что поскольку потенциал в нуле вполне себе регулярен, то было бы как минимум странно иметь там сингулярность волновой функции. Математически же это связано с тем, что[4] $\nabla^2 \ln \frac{1}{r} = 2\pi\delta(r)$ — поэтому функция Неймана, в действительности, решает задачу о двумерной дельта-яме. В исходном потенциале такой сингулярности нет, и именно по этой причине мы можем отсеять $Y_m(z)$ также и при $m = 0$.

Аналогия с одномерным движением Об этом «зоопарке» функций Бесселя очень удобно думать, проводя аналогии с одномерным свободным движением. Эта аналогия может быть записана в виде следующей таблицы:

1D:	e^x	e^{-x}	$\cos x$	$\sin x$	e^{ix}	e^{-ix}
2D:	$I_m(x)$	$K_m(x)$	$J_m(x)$	$Y_m(x)$	$H_m^{(1)}(x)$	$H_m^{(2)}(x)$

Таблица 1: Аналогия между 1D и 2D свободным движением

Она же подтверждается следующими тривиальными соотношениями между этими функциями (как было отмечено выше, уравнения переходят друг в друга при замене $z \mapsto iz$):

$$H_m^{(1,2)}(x) = J_m(x) \pm iY_m(x), \quad K_m(x) = \frac{\pi}{2} i^{m+1} H_m^{(1)}(ix) = \frac{\pi}{2}(-i)^{m+1} H_m^{(2)}(-ix), \quad J_m(ix) = i^m I_m(x) \tag{14}$$

Сшивка

Уровни энергии, как это обычно бывает, определяется сшивкой обеих функций при $x = a$: $\psi(a-0) = \psi(a+0)$ и $\psi'(a-0) = \psi'(a+0)$. Разрешимость этого уравнения относительно констант A и B обычно даёт условие на уровни энергии. Однако, поскольку явный вид этих констант нас пока совершенно не интересует, вместо этого запишем сшивку *логарифмической производной* $\frac{d}{dz} \ln \psi(a-0) = \frac{d}{dz} \ln \psi(a+0)$. Таким образом, уровни энергии определяются из условия:

$$\frac{kaJ_m'(ka)}{J_m(ka)} = \frac{\varkappa a K_m'(\varkappa a)}{K_m(\varkappa a)} \tag{15}$$

Это — точное уравнение, определяющее все связанные состояния в яме. Аналитически это уравнение можно решить лишь в разных предельных случаях. Ранее мы разбирали задачу о мелкой яме; поэтому, в целях сравнения, давайте решим это уравнение аналитически в этом пределе: $U_0 \ll \frac{\hbar^2}{Ma^2}$. Этот предел соответствует малым $ka \approx \sqrt{\frac{U_0}{\hbar^2/2Ma^2}} \ll 1$ и $\varkappa a = \sqrt{\frac{|E|}{\hbar^2/2Ma^2}} \ll 1$, благодаря чему мы можем воспользоваться выписанными выше асимптотиками. Основное состояние (а в мелкой яме оно единственно), из общих соображений минимальности энергии, должно соответствовать нулевому орбитальному квантовому числу $m = 0$. Единственное замечание заключается в том, что формула даёт $J_0(z \ll 1) \approx 1$, и производная зануляется; поэтому для дифференцирования нужен следующий член разложения — он выглядит как $J_0(z \ll 1) \approx 1 - \frac{z^2}{4}$. Окончательно, уравнение на сшивку в этом пределе записывается следующим образом:

$$ka \cdot \left(-\frac{ka}{2}\right) = \frac{\varkappa a \left(-\frac{1}{\varkappa a}\right)}{\ln \frac{2e^{-\gamma}}{\varkappa a}} \Rightarrow \varkappa a = 2e^{-\gamma} \exp\left(-\frac{2}{k^2a^2}\right) \Rightarrow \boxed{|E| = C\frac{\hbar^2}{Ma^2} \exp\left(-\frac{2\hbar^2/Ma^2}{U_0}\right), \quad C = 2e^{-2\gamma} \approx 0.630} \tag{16}$$

(поскольку энергия экспоненциальна мала, то мы также воспользовались приближением $k^2 \approx 2mU_0/\hbar^2$). Этот ответ можно сравнить с общим ответом для мелкой ямы; интеграл $\int U(\boldsymbol{r}) d^2\boldsymbol{r} = -U_0\pi a^2$, и тем самым общая формула для мелкой ямы даёт:

$$|E| = \#\frac{\hbar^2}{Ma^2} \exp\left(-\frac{2\pi\hbar^2}{M}\left|\int U(\boldsymbol{r})d^2\boldsymbol{r}\right|^{-1}\right) = \#\frac{\hbar^2}{Ma^2} \exp\left(-\frac{2\hbar^2/Ma^2}{U_0}\right) \tag{17}$$

Она абсолютно точно воспроизводит главный экспоненциальный множитель, а также параметрическую зависимость предэкспоненты, в соответствии с общей аргументацией для той задачи. Но её точности не хватает, чтобы определить константу C в предэкспоненте — для её определения этого нам потребовалось точное решение уравнения Шрёдингера.

[4] Понять это равенство очень просто. Если проинтегрировать обе части по кругу малого радиуса ρ и воспользоваться формулой Гаусса-Остроградского, то мы получим: $\int_{|\boldsymbol{r}|<\rho} d^2\boldsymbol{r} \nabla^2 \ln\frac{1}{r} = \int_{|\boldsymbol{r}|=\rho} dl \cdot \nabla_n \ln \frac{1}{r} = \int_{|\boldsymbol{r}|=\rho} \frac{dl}{r} = 2\pi$

Гипергеометрическая функция ${}_2F_1(a,b;c;z)$

Преамбула

Гипергеометрические функции образуют, в действительности, очень широкое семейство спецфункций, определяемым следующим образом:

$$
{}_pF_q(a_1,\ldots,a_p;b_1,\ldots,b_q;z) = 1 + \frac{a_1\ldots a_p}{b_1\ldots b_q}z + \frac{a_1(a_1+1)a_2(a_2+1)\ldots a_p(a_p+1)}{b_1(b_1+1)b_2(b_2+1)\ldots b_q(b_q+1)}\frac{z^2}{2} + \cdots = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{(a_1)^{(n)}\ldots(a_p)^{(n)}}{(b_1)^{(n)}\ldots(b_p)^{(n)}}\frac{z^n}{n!} \tag{18}
$$

(тут введено обозначение «восходящего факториала» $(a)_k = a(a+1)\ldots(a+k-1)$). Чаще всего в приложениях встречаются функции ${}_1F_1(a;b;z)$ и ${}_2F_1(a,b;c;z)$ — о последней и будет идти речь в этом разделе. Альтернативно её можно определить как решение следующего дифференциального уравнения, регулярное в нуле (убедиться в эквивалентности этих определений можно стандартным методом поиска решения дифференциального уравнения в виде ряда):

$$
\boxed{z(1-z)f''(z) + (c-(a+b+1)z)f'(z) - abf(z) = 0, \quad f(0)=1} \tag{19}
$$

Можно убедиться, что второе линейно-независимое решение этого уравнения тоже можно выразить через гипергеометрическую функцию. Общее решение имеет следующий вид (при $c \neq 1$):

$$
\boxed{f(z) = C_1\,{}_2F_1(a,b;c;z) + C_2 z^{1-c}{}_2F_1(b-c+1,a-c+1;2-c;z)} \tag{20}
$$

К уравнению такого вида можно свести очень большой класс дифференциальных уравнений. В действительности, имеется классификация линейных дифференциальных уравнений с дробно-рациональными коэффициентами по их особенностям в комплексной плоскости (особенностями уравнения, записанного в канонической форме $f^{(n)}(z)+p_1(z)f^{(n-1)}(z)+\cdots+p_n(z)f(z)=0$, называются особенности функций $p_k(z)$ — точки, где она обращается в бесконечность) — в частности, у гипергеометрической функции их ровно три: $z=\{0,1,\infty\}$; и более или менее любое уравнение с тремя особенностями можно свести к гипергеометрическому виду.

Продолжая обсуждение свойств этой функции, отметим, что она не определена при целых отрицательных c (знаменатель зануляется). Радиус сходимости ряда равен единице, и в действительности у гипергеометрической функции в точке $z=1$ имеется особенность. Единственное исключение из этого правила — это когда либо a, либо b — отрицательное целое число: в таком случае, ряд обраывается и превращается в полином конечной степени, имеющий, естественно, бесконечный радиус сходимости. Последнее замечание будет важно при поиске связанных состояний.

Задача

Опять-таки, разбираться с гипергеометрической функцией мы будем на примере конкретной задачи. Полностью исследуем движение частицы в потенциале $U(x) = -U_0/\cosh^2(x/a)$ — а именно, мы найдём все связанные состояния на отрицательной энергии $E<0$, а также решим задачу рассеяния при положительной энергии $E>0$.

$$
-\frac{\hbar^2}{2m}\psi''(x) - \frac{U_0}{\cosh^2(x/a)}\psi(x) = E\psi(x) \tag{21}
$$

Если мы хотим привести это уравнение к гипергеометрической функции, то первым делом нам стоит избавиться от гиперболических функций. Естественным кандидатом для этого выглядит подстановка $y=\tanh\frac{x}{a}\in(-1,1)$:

$$
\frac{d\psi}{dx} = \frac{1}{a}\frac{1}{\cosh^2\frac{x}{a}}\frac{d\psi}{dy} = \frac{1}{a}(1-y^2)\frac{d\psi}{dy}, \quad \frac{d^2\psi}{dx^2} = \frac{1}{a^2}(1-y^2)\frac{d}{dy}\left[(1-y^2)\frac{d\psi}{dy}\right] \tag{22}
$$

$$
-\frac{\hbar^2}{2ma^2}\frac{d}{dy}\left[(1-y^2)\frac{d\psi}{dy}\right] - \left(U_0+\frac{E}{1-y^2}\right)\psi(y) = 0 \tag{23}
$$

Это уравнение нам нравится куда больше: если раскрыть скобки, то можно увидеть, что у него имеются три особенности — в точках $y=\{\pm1,\infty\}$, в связи с чем есть надежда привести его к гипергеометрическому виду.

Связанные состояния

Для начала, рассмотрим случай связанных состояний $E=-|E|$. Обезразмерим уравнение, введя следующие параметры:

$$
u = \frac{U_0}{\hbar^2/2ma^2}, \quad \kappa = \frac{\sqrt{2m|E|}}{\hbar} \tag{24}
$$

Первый шаг при приведении уравнения к гипергеометрическому виду — совмещение особенностей. Несложно видеть, что точки $\{\pm 1, \infty\}$ переходят в $\{0, 1, \infty\}$ при простом линейном преобразовании $z = \frac{1-y}{2} \in (0,1)$; кроме того, раскроем сразу скобки:

$$z(1-z)\psi'' + (1-2z)\psi' + \left(u - \frac{\kappa^2 a^2}{4z(1-z)}\right)\psi = 0 \tag{25}$$

Дальше универсальный рецепт заключается в выделении наиболее сингулярного поведения решения вблизи особенностей. Вблизи $z = 0$, уравнение приблизительно записывается следующим образом:

$$\psi'' + \frac{1}{z}\psi' - \frac{\kappa^2 a^2}{4z^2}\psi = 0 \Rightarrow \psi(z) \approx z^{\pm \kappa a/2}, \quad z \ll 1 \tag{26}$$

(это — однородное уравнение Эйлера, поэтому решается степенной подстановкой). То же самое можно проделать и в окрестности $|z-1| \ll 1$. Это мотивирует подстановку $\psi(z) = (z(1-z))^{\kappa a/2}\chi(z)$ — которая приводит, наконец, уравнение к гипергеометрическому виду

$$z(1-z)\chi''(z) + (\kappa a + 1)(1-2z)\chi'(z) - \left(\left(\frac{1}{2} + \kappa a\right)^2 - u - \frac{1}{4}\right)\chi(z) = 0 \tag{27}$$

Обратим сразу внимание, что $(z(1-z))^{\kappa a/2} = (\frac{1}{4}(1-y^2))^{\kappa a/2} = \left(2\cosh\frac{x}{a}\right)^{-\kappa a} \approx e^{-\kappa|x|}$ при $x \to \pm\infty$; то есть этот префактор уже сам по себе соответствует затухающей волновой функции. Поэтому на функцию $\chi(z)$ накладывается требование — отсутствие сингулярностей при $z = 0, 1$.

Удобно использовать параметризацию параметра u через вспомогательный параметр s согласно:

$$u = s(s+1) \Rightarrow s = \frac{1}{2}(\sqrt{1+4u} - 1) \tag{28}$$

В таком случае, параметры гипергеометрической функции имеют вид $a = \kappa a - s$, $b = \kappa a + s + 1$ и $c = \kappa a + 1$. Таким образом, общее решение уравнения записывается следующим образом:

$$\psi(z) = (z(1-z))^{\kappa a/2} \cdot {}_2F_1(\kappa a - s, \kappa a + s + 1; \kappa a + 1; z), \quad z = \frac{1}{2}(1 - \tanh(x/a)) \tag{29}$$

(можно убедиться, что второе линейно независимое решение всегда растёт на бесконечности).

По построению, оно регулярно при $z = 0$ ($x \to +\infty$); поэтому условие на связанные состояние соответствует условию регулярности гипергеометрической функции при $z = 1$. Как мы выяснили выше, происходить это может только когда гипергеометрическая функция превращается в полином, то есть когда $a = \kappa a - s = -n$ и $n = 0, 1, \ldots$ (очевидно, что $b > 0$). Возвращаясь к исходным параметрам, мы получаем:

$$\boxed{E_n = -\frac{\hbar^2}{8ma^2}\left(\sqrt{1 + \frac{8U_0 ma^2}{\hbar^2}} - (2n+1)\right)^2} \tag{30}$$

Параметр $s \geq n \geq 0$, поэтому величина s определяет число связанных уровней в яме. Когда s достигает целого числа, в яме появляется новый уровень на нулевой энергии. Для справки, приведём волновую функцию основного состояния (с точностью до нормировки)

$$\boxed{\psi_0(x) = \frac{1}{\cosh^s(x/a)}, \quad E_0 = \frac{\hbar^2}{8ma^2}\left(\sqrt{1 + \frac{8U_0 ma^2}{\hbar^2}} - 1\right)^2} \tag{31}$$

Этот ответ поучительно сравнить в общем пределе мелкой ямы, который мы рассматривали во втором семинаре. Полагая $\frac{U_0 ma^2}{\hbar^2} \ll 1$, мы можем разложить и получить $E_0 \approx \frac{2U_0^2 ma^2}{\hbar^2}$. С другой стороны, поскольку $\int_{-\infty}^{\infty} U(x)dx = -2U_0 a$, и поэтому формула из семинара даёт $|E| \approx \frac{m}{2\hbar^2}\left|\int dx U(x)\right|^2 = \frac{2U_0^2 ma^2}{\hbar^2}$ — то есть воспроизводит точный ответ.

Непрерывный спектр и задача рассеяния

Теперь мы будем рассматривать непрерывный спектр $E > 0$. Для этого удобно воспользоваться параметризацией $E = k^2/2m$, и решение можно получить из выписанного выше простой заменой $\kappa a = -ika$:

$$\boxed{\psi(z) = (z(1-z))^{-ika/2} \cdot {}_2F_1(-ika - s, -ika + s + 1; -ika + 1; z), \quad z = \frac{1}{2}(1 - \tanh(x/a))} \tag{32}$$

Мы получили какое-то решение непрерывного спектра; однако, ещё не факт что оно соответствует задаче рассеяния. Тем не менее, даже если и не соответствует — задачу рассеяния мы всё равно сможем построить, выбрав линейную комбинацию с комплексно сопряжённым решением (которое является вторым линейно-независимым). Чтобы это понять, нам необходимо найти асимптотическое поведение этого решения на бесконечности.

При $x \to +\infty \Rightarrow y = \tanh\frac{x}{a} \approx 1 - 2e^{-2x/a} \Rightarrow z \approx e^{-2x/a} \to 0$, гипергеометрическая функция ${}_2F_1(\ldots, z) \approx 1$. Поэтому:

$$\psi(x \gg a) \approx e^{ikx} \tag{33}$$

Нам повезло — эта асимптотика содержит только прошедшую волну, то есть соответствует задаче рассеяния слева-направо! Осталось определить асимптотики при $x \to -\infty \Rightarrow y = \tanh\frac{x}{a} \approx -1 + 2e^{2x/a} \Rightarrow z \approx 1 - e^{2x/a}$, и мы получим коэффициенты прохождения и отражения от такого потенциала. Для этого нам необходимо научиться получать асимптотику гипергеометрической функции вблизи единицы, где у неё особенность. Делается это регулярным способом — для гипергеометрической функции есть целая серия тождеств, которые выражают гипергеометрическую функцию вблизи одной особенности через её же (с другими индексами) вблизи другой особой точки (то есть связывают $z \leftrightarrow \{1-z, \frac{1}{z}\}$). Одно из таких тождеств, связывающее $z \to 1-z$, взятое из справочников, мы и используем. Оно выглядит достаточно замысловато:

$$ {}_2F_1(a,b;c;z) = \frac{\Gamma(c)\Gamma(c-a-b)}{\Gamma(c-a)\Gamma(c-b)}\,{}_2F_1(a,b,a+b+1-c,1-z) + \frac{\Gamma(c)\Gamma(a+b-c)}{\Gamma(a)\Gamma(b)}(1-z)^{c-a-b}\,{}_2F_1(c-a,c-b;c+1-a-b;1-z) \tag{34}$$

Поскольку $z \approx 1$, то в правой части тождества непосредственно гипергеометрические функции раскладываются как ${}_2F_1(\ldots;1-z) \approx 1$, и основная асимпотика определяется выражениями с Гамма-функциями и $(1-z)^{c-a-b} = (1-z)^{ika} \approx e^{2ikx}$. Вспоминая также о префакторе $(z(1-z))^{-ika/2} \approx e^{-ikx}$, мы немедленно получаем асимптотику волновой функции при $x \to -\infty$, которая, следуя общей логике задачи рассеяния, содержит падающую и отражённую волну:

$$\psi(x \to -\infty) = \frac{\Gamma(-ika+1)\Gamma(-ika)}{\Gamma(-ika-s)\Gamma(-ika+s+1)}e^{ikx} + \frac{\Gamma(-ika+1)\Gamma(-ika)}{\Gamma(s+1)\Gamma(-s)}e^{-ikx}, \tag{35}$$

Обычно в задаче рассеяния коэффициент при падающей волне e^{ikx} берётся равным единице; тогда остальные коэффициенты отвечают амплитуде отражения и прохождения. У нас нормировка чуть другая, и амплитуды даются отношением коэффициентов:

$$\boxed{t = \frac{\Gamma(-ika-s)\Gamma(-ika+s+1)}{\Gamma(-ika+1)\Gamma(-ika)}, \quad r = \frac{\Gamma(-ika-s)\Gamma(-ika+s+1)}{\Gamma(s+1)\Gamma(-s)}} \tag{36}$$

Это — окончательный ответ. Однако осознать его достаточно тяжело, поскольку он представляет собой нетривиальную комбинацию спец.функций. К счастью, выражение для коэффициентов прохождения и отражения достаточно хорошо упрощаются, используя соотношения на Гамма-функции $\Gamma(z)^* = \Gamma(z^*)$, $\quad \Gamma(z)\Gamma(1-z) = \frac{\pi}{\sin \pi z}$, $\quad \Gamma(z+1) = z\Gamma(z)$, благодаря чему от них можно просто избавиться:

$$\boxed{T = |t|^2 = \frac{\sinh^2(\pi ka)}{\sinh^2(\pi ka) + \sin^2(\pi s)}, \quad R = |r|^2 = \frac{\sin^2(\pi s)}{\sinh^2(\pi ka) + \sin^2(\pi s)}} \tag{37}$$

Такой ответ уже нам симпатичен. Можно проверить, насколько полученный ответ физичен. Во-первых, разумеется, для него выполняется общее соотношение, накладываемое унитарностью квантовой механики $R+T=1$; при большой энергии $ka \gg 1$, коэффициент отражения уменьшается, что разумно — ведь движение с большой энергией квазиклассично, а в классической механике частица, пролетающая над ямой (или горбом!) совершенно не рассеивается. Любопытно также, про при целом $s \in \mathbb{Z}$, коэффициент отражения обращается в ноль (на уровне амплитуды отражения это соответствует тому, что у аналитической функции $\Gamma(z)$ имеются полюса первого порядка при $z = -s$) — имеется резонансное безотражательное рассеяние *на всех энергиях*! Выше мы получили, что целое s также соответствует ситуации, когда в яме зарождается очередное связанное состояние.

Обратим внимание, что при целом s происходит резонанс, и отражение полностью отсутствует. Кроме того, при целом s в яме появляется новое связанное состояние на нулевой энергии. Наличие резонансов в коэффициенте прохождения при появлении в яме связанных уровней — общее свойство квантовой механики.