Семинар 4. Некоторые точно решаемые потенциалы.

Побойко Игорь

1 октября 2016 г.

Свободное движение в двумерье (семейство функций Бесселя $J_m(x)$, $Y_m(x)$, $K_m(x)$, $I_m(x)$, $H_m^{(1,2)}(x)$)

В качестве модельной задачи рассмотрим основное состояние частицы массы M в двумерной прямоугольной яме:

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

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

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

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

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

Для постоянной $U(r) = \mathrm{const}$ это уравнение — это уравнение Бесселя. В зависимости от знака энергии и характера решений, выделяют следующие решения: функции Бесселя и Неймана $J_m(x)$, $Y_m(x)$; функции Ганкеля первого и второго рода $H_m^{(1,2)}(x)$; функция Макдональда и модифицированная функция Бесселя $K_m(x)$, $I_m(x)$.

Функция Макдональда (отрицательная энергия) Вне ямы мы имеем $U(r) = 0$; вводя координату $x = \varkappa r$, мы приходим к уравнению:

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

Решение выражается через модифицированные функции Бесселя:

$$\psi(x) = A_1 I_m(x) + A_2 K_m(x)$$

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

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

В свою очередь, при малых значениях аргумента одна из функций регулярна, а другая — расходится[1]:

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

В данном конкретном случае нас интересует затухающее на бесконечности решение, поэтому $\psi(r > a) = AK_m(\varkappa r)$

[1] $\gamma \approx 0.577$ — постоянная Эйлера-Маскерони — часто встречается рядом с логарифмическими особенностями

Функции Бесселя (положительная энергия) Внутри ямы мы имеем $U(r) = -U_0$; удобно ввести $k^2 = \frac{2M(U_0-|E|)}{\hbar^2} = \frac{2MU_0}{\hbar^2} - \varkappa^2$ и сделать подстановку $x = kr$. Получаем:

$$\psi''(x) + \frac{1}{r}\psi'(x) + \left(1 - \frac{m^2}{x^2}\right)\psi(x) = 0$$

Уравнение очень похоже на предыдущее; его решения можно записать следующими двумя способами. Либо в качестве линейной комбинации функции Бесселя и Неймана, либо в виде линейной комбинации функций Ганкеля[2]:

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

Функции Бесселя и Неймана при больших значениях аргумента ведут себя подобно косинусу и синусу:

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

В нуле регулярна только функция Бесселя, а функция Неймана сингулярна:

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

Функции Ганкеля представляют собой сходящиеся и расходящиеся и расходящиеся цилиндрические волны; они определяются как $H_m^{(1,2)}(x) = J_m(x) \pm iY_m(x)$. Их асимпотитки:

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

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

В основном состоянии волновая функция регулярна в нуле, и поэтому $\psi(x < a) = BJ_m(kr)$.

Примечание 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 соотношениями между этими функциями:

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

Сшивка Основное состояния соответствует $m = 0$. Уровни энергии, как это обычно бывает, определяется сшивкой обеих функций при $x = a$: $\psi(a-0) = \psi(a+0)$ и $\psi'(a-0) = \psi'(a+0)$. Обычно вместо этого записывается условия сшивки *логарифмической производной* $\frac{d}{dz}\ln\psi(a-0) = \frac{d}{dz}\ln\psi(a+0)$, поскольку при этом сокращаются неизвестные константы A и B, которые нас сейчас интересовать не будут. Таким образом, уровни энергии определяются из условия:

$$\frac{kaJ_0'(ka)}{J_0(ka)} = \frac{\varkappa a K_0'(\varkappa a)}{K_0(\varkappa a)}$$

Аналитически это уравнение можно решить в разных предельных случаях. На втором семинаре мы разбирали *мелкую яму*; поучительно сравнить результат решения с точным ответом. Уровень энергии в мелкой яме, как мы помним, мелкий; поэтому $\varkappa a = \sqrt{\frac{|E|}{\hbar^2/2Ma^2}} \ll 1$; и $ka \approx \sqrt{\frac{U_0}{\hbar^2/2Ma^2}} \ll 1$. Значит, для функций мы можем пользоваться их асимптотиками, выписанными выше. Единственное замечание заключается в том, что $J_0(x \ll 1) \approx 1$; поэтому для дифференцирования

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

нужен следующий член разложения, и он выглядит как $J_0(x \ll 1) \approx 1 - \frac{x^2}{4}$. Таким образом, уравнение на сшивку записывается следующим образом:

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

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 даёт $|E| = \#\frac{\hbar^2}{Ma^2}\exp\left(-\frac{2\pi\hbar^2}{M}\left|\int U(\boldsymbol{r})d^2\boldsymbol{r}\right|^{-1}\right) = \#\frac{\hbar^2}{Ma^2}\exp\left(-\frac{2\hbar^2/Ma^2}{U_0}\right)$. 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; обычно, эта задача гораздо сложнее; в данном случае для его определения потребовалось точное решение задачи.

Потенциал $U(x) = -\frac{U_0}{\cosh^2(x/a)}$ (гипергеометрическая функция ${}_2F_1(a,b;c;x)$)

Рассмотрим связанные состояния, а также непрерывный спектр, для одномерного движения в потенциале $U(x) = -\frac{U_0}{\cosh^2(x/a)}$. Сначала для удобства рассмотрим отрицательные энергии, так что $E = -|E|$. Уравнение Шрёдингера имеет вид:

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

Введём безразмерные параметры $u = \frac{U_0}{\hbar^2/2ma^2}$, $\epsilon = \frac{|E|}{\hbar^2/2ma^2}$; перейдём к безразмерной переменной $y = \tanh(x/a) \in (-1,1)$. Тогда:

$$\frac{d\psi}{dx} = \frac{1}{a}\frac{1}{\cosh^2\frac{x}{a}}\frac{d\psi}{dy} = \frac{1}{a}(1-y^2)\frac{d\psi}{dy}, \quad \frac{d^2\psi}{dx^2} = \frac{1}{a^2}(1-y^2)\frac{d}{dy}\left[(1-y^2)\frac{d\psi}{dy}\right]$$
$$\frac{d}{dy}\left[(1-y^2)\frac{d\psi}{dy}\right] + \left(u - \frac{\epsilon}{1-y^2}\right)\psi(y) = 0$$

Сделаем сдвижку $z = \frac{1-y}{2} \in (0,1)$ и подстановку $\psi(z) = (z(1-z))^{\epsilon/2}\chi(z)$:

$$(1-z)z\chi''(z) + (\sqrt{\epsilon}+1)(1-2z)\chi'(z) - ((\frac{1}{2}+\sqrt{\epsilon})^2 - u - \frac{1}{4})\chi(z) = 0$$

Обратим сразу внимание, что $(z(1-z))^{\epsilon/2} = (\frac{1}{4}(1-y^2))^{\epsilon/2} = \left(\frac{1}{2\cosh\frac{x}{a}}\right)^{\epsilon}$; то есть этот префактор уже обеспечивает зануление волновой функции при $x \to \pm\infty$, если $\chi(z)$ ведёт себя вблизи $z = 0, 1$ достаточно хорошо.

Гипергеометрическая функция ${}_2F_1(a,b;c;z)$ Гипергеометрическая функция задаётся как решение следующего уравнения, регулярное в нуле:

$$\boxed{z(1-z)F''(z) + (c-(a+b+1)z)F'(z) - abF(z) = 0, \quad F(0) = 1}$$

Это уравнение прекрасно тем, что к нему можно привести любое уравнение второго порядка, которое имеет три особенности[3]; это покрывает очень широкий класс дифференциальных уравнений. Можно легко найти решение в виде гипергеометрического ряда[4]:

$$\boxed{{}_2F_1(a,b;c;z) = 1 + \frac{ab}{c}z + \frac{a(a+1)\cdot b(b+1)}{c(c+1)}\frac{z^2}{2} + \dots = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{a^{(n)}b^{(n)}}{c^{(n)}}\frac{z^n}{n!}}$$

где введено обозначение «возрастающего» факториала $a^{(n)} = a(a+1)\dots(a+n-1) = \frac{\Gamma(a+n)}{\Gamma(a)}$. Ряд очевидным образом симметричен по переменным $a \leftrightarrow b$; при целом отрицательном a или b он обрывается и функция превращается в полином конечной степени. Этот ряд сходится при $|z| < 1$; при $z = 1$ у него имеется особенность. Существуют формулы аналитического продолжения этого ряда на $|z| > 1$.

[3]Для уравнения, записанного в канонической форме $F''(z) + p(z)F'(z) + q(z)F(z) = 0$ особенностями называют особенности функций $p(z)$ и $q(z)$. В нашем случае, это точки $z = 0, 1, \infty$.

[4]Общий гипергеометрический ряд определяется согласно ${}_pF_q(a_1,\dots,a_p;b_1,\dots,b_q;z) = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{a_1^{(n)}a_2^{(n)}\dots a_p^{(n)}}{b_1^{(n)}b_2^{(n)}\dots b_q^{(n)}}\frac{z^n}{n!}$

Написанное нами уравнение — как раз такого вида. Заметим, что если параметризовать $u = s(s+1)$ (откуда $s = \frac{1}{2}(\sqrt{1+4u}-1)$), то коэффициент при $\chi(z)$ имеет вид $(\sqrt{\epsilon}+\frac{1}{2})^2 - (s+\frac{1}{2})^2 = (s+\sqrt{\epsilon}+1)(\sqrt{\epsilon}-s)$. Поэтому коэффициенты имеют вид $a = \sqrt{\epsilon}-s$, $b = \sqrt{\epsilon}+s+1$, $c = \sqrt{\epsilon}+1$, мы получаем решение:

$$\boxed{\psi(z) = (z(1-z))^{\sqrt{\epsilon}/2} \times_2 F_1(\sqrt{\epsilon}-s, \sqrt{\epsilon}+s+1; \sqrt{\epsilon}+1; z), \quad z = \frac{1}{2}(1-\tanh(x/a))}$$

Обратим внимание, что регулярность при $z = 0$ соответствует $y = 1 \Rightarrow x \to +\infty$, то есть отсутствие сингулярности волновой функции на бесконечности. Второе линейно-независимое решение этого уравнение в нуле будет сингулярно, и нас не интересует

Дискретный спектр Волновые функции дискретного спектра зануляются на $x \to \pm\infty \Rightarrow y \to \pm 1 \Rightarrow z \to (0,1)$. Таким образом, нам необходимо добавить условие конечности при $z \to 1$. Это происходит только тогда, когда ряд обрывается на конечной степени, то есть при $a = \sqrt{\epsilon}-s = -n$, $n = 0, 1, \ldots$ (очевидно, при таком выборе знаков $b > 0$). Значит, уровни энергии определяются условием $\epsilon = (s-n)^2$; возвращаясь к исходным обозначениям:

$$\boxed{E_n = -\frac{\hbar^2}{8ma^2}\left(\sqrt{1+\frac{8U_0ma^2}{\hbar^2}} - (2n+1)\right)^2}$$

(очевидным образом, дискретным уровням соответствует $\sqrt{1+\frac{8U_0ma^2}{\hbar^2}} > 2n+1 = 1, 3, \ldots$ — в яме имеется конечное число связанных состояний). Волновая функция основного состояния ($n = 0 \Rightarrow \sqrt{\epsilon} = s$) имеет следующий вид (с точностью до константы)

$$\boxed{\psi_0(x) = \frac{1}{\cosh^s(x/a)}, \quad E_0 = \frac{\hbar^2}{8ma^2}\left(\sqrt{1+\frac{8U_0ma^2}{\hbar^2}} - 1\right)^2}$$

Этот ответ поучительно сравнить в общем пределе мелкой ямы, который мы рассматривали во втором семинаре. Полагая $\frac{U_0ma^2}{\hbar^2} \ll 1$, мы можем разложить и получить $E_0 \approx \frac{2U_0^2ma^2}{\hbar^2}$. С другой стороны, поскольку $\int_{-\infty}^{\infty} U(x)dx = -2U_0a$, и поэтому формула из семинара даёт $|E| \approx \frac{m}{2\hbar^2}\left|\int dxU(x)\right|^2 = \frac{2U_0^2ma^2}{\hbar^2}$, то есть воспроизводит точный ответ вплоть до коэффициента.

Непрерывный спектр и задача рассеяния Теперь мы будем рассматривать непрерывный спектр $E > 0$. В таком случае корень — мнимый, и мы его параметризуем как $\sqrt{\epsilon} = -ika$[5] (где стандартно $k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$). Решение записывается следующим образом:

$$\boxed{\psi(z) = (z(1-z))^{-i\sqrt{\epsilon}/2} \times_2 F_1(-i\sqrt{\epsilon}-s, -i\sqrt{\epsilon}+s+1; -i\sqrt{\epsilon}+1; z), \quad z = \frac{1}{2}(1-\tanh(x/a))}$$

Исследуем сперва асимптотики найденного решения при $x \to +\infty$. При этом $y = \tanh\frac{x}{a} \approx 1 - 2e^{-2x/a}$ и $z \approx e^{-x/a} \to 0$, $\;{}_2F_1(\ldots, z) \to 1$. Подставляя всё, мы получаем, что волновая функция имеет асимптотику $\psi(x \to +\infty) = e^{ikx}$, то есть содержит только прошедшую волну, ровно как и в задаче рассеяния! 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. Как мы выяснили, гипергеометрическая функция вблизи $z = 1$ имеет особенность; для построения асимптотического разложения вблизи $z = 1$ необходимо обратиться к математическим справочникам. Для гипергеометрической функции имеется следующее тождество, которое связывает окрестность нуля и единицы:

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

Таким образом, при $z \approx 1 - e^{2x/a}$, обе гипергеометрические функции в правой части равенства ${}_2F_1(\ldots, 1-z) \to 1$, и остаётся:

$${}_2F_1(-ika-s, -ika+s+1; -ika+1; z) \approx \frac{\Gamma(1-ika)\Gamma(-ika)}{\Gamma(s+1)\Gamma(-s)} + \frac{\Gamma(-ika+1)\Gamma(-ika)}{\Gamma(-ika-s)\Gamma(-ika+s+1)}e^{2ikx}$$

[5] Выбор $\sqrt{\epsilon} = ika$ даст нам второе линейно независимое решение уравнения Шрёдингера, которое отличается от этого просто комплексным сопряжением

Префактор же раскладывается тривиально как $(z(1-z))^{-ika/2} = e^{-ikx}$. Таким образом, мы получаем следующий асимптотический вид волновой функции:

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

а значит коэффициенты отражения и прохождения равны:

$$T = \left| \frac{\Gamma(-ika-s)\Gamma(-ika+s+1)}{\Gamma(-ika+1)\Gamma(-ika)} \right|^2, \quad R = \left| \frac{\Gamma(-ika-s)\Gamma(-ika+s+1)}{\Gamma(s+1)\Gamma(-s)} \right|^2$$

Это выражение можно упростить, чуть поработав и избавившись от гамма-функций, используя известное соотношение $\Gamma(z)\Gamma(1-z) = \frac{\pi}{\sin \pi z}$:

$$|\Gamma(-ika-s)\Gamma(-ika+s+1)|^2 = \Gamma(ika+s+1)\Gamma(-ika-s)\Gamma(ika-s)\Gamma(-ika+s+1) = \frac{\pi^2}{\sinh(\pi ka - i\pi s)\sinh(\pi ka + i\pi s)}$$

$$|\Gamma(-ika+1)\Gamma(-ika)|^2 = \Gamma(ika)\Gamma(-ika+1)\Gamma(-ika)\Gamma(ika+1) = \frac{\pi^2}{\sinh^2(\pi ka)}$$

Таким образом, ещё чуть упрощая:

$$\boxed{T = \frac{\sinh^2(\pi ka)}{\sinh^2(\pi ka) + \sin^2(\pi s)}, \quad R = 1 - T = \frac{\sin^2(\pi s)}{\sinh^2(\pi ka) + \sin^2(\pi s)}}$$

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.

Гармонический осциллятор (гипергеометрическая функция ${}_1F_1(a;b;z)$)

Поучительно будет рассмотреть вырожденную гипергеометрическую функцию на примере простого гармонического осциллятора — частицы в потенциале $U(x) = \frac{m\omega^2 x^2}{2}$ — решение для которого мы и так уже знаем. Переходя к безразмерной координате $y = x\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}$ и вводя безразмерную энергию согласно $E = \hbar\omega(\epsilon + \frac{1}{2})$, мы получаем уравнение Шрёдингера в виде:

$$\psi''(y) + (2\epsilon + 1 - y^2)\psi(y) = 0$$

Сделаем замену координат $z = y^2 \Rightarrow y = \sqrt{z}$:

$$\frac{d\psi}{dy} = 2\sqrt{z}\frac{d\psi}{dz}, \quad \frac{d^2\psi}{dy^2} = 2\sqrt{z}\frac{d}{dz}\left(2\sqrt{z}\frac{d\psi}{dz}\right) = 4z\psi''(z) + 2\psi'(z)$$

$$4z\psi''(z) + 2\psi'(z) + (2\epsilon + 1 - z)\psi(z) = 0$$

Всякое уравнение второго порядка с линейными коэффициентами сводится к гипергеометрической функции. Стандартный способ такой процедуры — это выделение асимптотик. В частности, при $z \to \infty$, асимптотический вид уравнения выглядит как $4z\psi''(z) - z\psi(z) = 0 \Rightarrow \psi(z) \approx e^{-z/2}$. Поэтому мы сделаем подстановку $\psi(z) = \chi(z)e^{-z/2}$; получаем:

$$z\chi''(z) + \left(\frac{1}{2} - z\right)\chi'(z) + \frac{\epsilon}{2}\chi(z) = 0$$

Вырожденная гипергеометрическая функция ${}_1F_1$ Вырожденная гипергеометрическая функция определяется как решение следующего дифференциального уравнения, регулярное в нуле:

$$\boxed{zF''(z) + (b-z)F'(z) - aF(z) = 0, \quad F(0) = 1}$$

Ища решение в виде ряда, мы можем убедиться, что решение имеет следующий вид[6]:

[6]Обратим внимание, она выражается через ${}_2F_1$ согласно ${}_1F_1(a;c;z) = \lim_{b\to\infty} {}_2F_1(a,b;c;z/b)$

$$\boxed{{}_1F_1(a;b;z) = 1 + \frac{a}{b}z + \frac{a(a+1)}{b(b+1)}\frac{z^2}{2} + \cdots = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{a^{(n)}}{b^{(n)}}\frac{z^n}{n!}}$$

Аналогично общей гипергеометрической функции ${}_2F_1$, при целом отрицательном $a = -n$ ряд обрывается и функция превращается в полином. Кроме того, этот ряд имеет бесконечный радиус сходимости, и единственной особенностью этой функции является бесконечность. При больших n, отношение соседних членов ряда ведёт себя как $\frac{z}{n}$, что соответствует экспоненциальному ряду $\sim e^z$; более точно, асимптотика выглядит как

$${}_1F_1(a;b;z) \approx \frac{\Gamma(b)}{\Gamma(a)}z^{a-b}e^z, \quad z \gg 1$$

У этого гипергеометрического уравнения, как у любого уравнения второго порядка, имеется два линейно независимых решения. Второе решение сингулярно в нуле; оно тоже выражается через ${}_1F_1$ как $z^{1-b} \cdot {}_1F_1(a-b+1; 2-b; z)$[7].

В нашем конкретном случае $b = \frac{1}{2}$, $a = -\frac{\epsilon}{2}$, и поэтому общее решение уравнения записывается следующим образом:

$$\boxed{\chi(z) = C_1 \cdot {}_1F_1(-\frac{\epsilon}{2}; \frac{1}{2}; z) + C_2\sqrt{z} \cdot {}_1F_1(-\frac{\epsilon - 1}{2}; \frac{3}{2}; z)}$$

В общем случае ${}_1F_1 \sim e^z$, что соответствует экспоненциально растущей волновой функции и нас не устраивает; поэтому ряд должен обрываться. Имеются два варианта:

$$C_1 \neq 0, \quad C_2 = 0, \quad \epsilon = 2n \Rightarrow \psi_{2n}(y) = {}_1F_1(-n; \frac{1}{2}; y^2) \cdot e^{-y^2/2}, \quad E_{2n} = \hbar\omega(2n + \frac{1}{2}),$$

$$C_1 = 0, \quad C_2 \neq 0, \quad \epsilon = 2n+1 \Rightarrow \psi_{2n+1}(y) = {}_1F_1(-n; \frac{3}{2}; y^2) \cdot e^{-y^2/2}, \quad E_{2n+1} = \hbar\omega(2n + 1 + \frac{1}{2}),$$

что, конечно, исчёрпывает все решения задачи о простом гармоническом осцилляторе. Для справки приведём связь написанных тут гипергеометрических функций с полиномами Эрмита:

$$H_{2n}(y) = (-1)^n\frac{(2n)!}{n!} \cdot {}_1F_1(-n; \frac{1}{2}; y^2), \quad H_{2n+1}(y) = (-1)^n\frac{(2n+1)!}{n!}2y \cdot {}_1F_1(-n; \frac{3}{2}; y^2)$$

и при этом спектр записывается как:

$$\psi_n = H_n(y)e^{-y^2/2}, \quad E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right)$$

[7]Этот трюк, конечно, работает только при $b \neq 1$