Proceeding Series of the Brazilian Society of Computational and Applied Mathematics

Técnicas de estimativa de valores de funções de onda Coulomb estendidas

Luana de Lima Silva Ribeiro[1]
Programa de Pós-Graduação em Matemática, UNESP, São José do Rio Preto, SP
A. Sri Ranga[2]
Departamento de Matemática Aplicada, UNESP, São José do Rio Preto, SP

1 Introdução

A função de onda Coulomb $F_L(\eta, \rho)$ é a solução regular da equação de onda Coulomb, e é dada explicitamente por [3]

$$F_L(\eta, \rho) = C_L(\eta)\rho^{L+1}e^{-i\rho}\,{}_1F_1(L+1-i\eta, 2L+2; 2i\rho), \tag{1}$$

onde $\eta \in \mathbb{R}$, $L \in \mathbb{N}$, ${}_1F_1(a, b; \rho)$ denota a função hipergeométrica confluente de Kummer [4] e

$$C_L(\eta) = \frac{2^L}{(2L+1)!}\left\{(L^2+\eta^2)\cdots(2^2+\eta^2)(1+\eta^2)\frac{2\eta\pi}{e^{2\pi\eta}-1}\right\}^{1/2}. \tag{2}$$

A função de onda Coulomb é uma importante ferramenta em problemas de espalhamento nuclear e compõe as soluções da equação de Schrödinger para uma partícula carregada sujeita ao potencial coulombiano. Isto justifica o extenso interesse científico em estimativas dos valores desta função [1, 3].

O presente trabalho tem como objetivo estimar o valor da função $\mathcal{M}(b; \rho)$ dada por

$$\mathcal{M}(b; \rho) = \mathfrak{C}(b)\,\rho^{\lambda}\,\mathcal{N}(b; \rho), \tag{3}$$

com $b = \lambda + i\eta$, $\lambda > 0$, $\eta \in \mathbb{R}$, $\mathcal{N}(b; \rho) = e^{-i\rho}\,{}_1F_1(b; b+\bar{b}; 2i\rho)$ e a constante $\mathfrak{C}(b) = 2^{\lambda-1}e^{\pi\eta/2}|\Gamma(b)|/\Gamma(2\lambda)$ é dada em termos da função gama Γ, [4].

A função $\mathcal{M}(b; \rho)$ pode ser vista como uma *função de onda Coulomb estendida*, visto que, para os casos de $\lambda = L \in \mathbb{N}$,

$$F_L(\eta, \rho) = \mathcal{M}(\bar{b}+1; \rho). \tag{4}$$

[1]luana.math@hotmail.com
[2]ranga@ibilce.unesp.br

2 Descrição das técnicas

Existem várias estratégias para fazer estimativas de valores de funções especiais. Isto decorre do fato de que geralmente, para uma dada função especial, existem várias formas de representá-la. Por exemplo, podemos citar expansões em séries de potências, representações integrais, expansões assintóticas [4]. Neste trabalho iremos comparar dois tipos algoritmos para estimar os valores de funções como $\mathcal{N}(b;\rho)$. Observe que por (3) isso implica na estimativa das funções de onda Coulomb estendidas.

O primeiro algoritmo será obtido usando o fato de que a sequência de funções $\{\mathcal{N}_n(b;\rho)\}_n$, dadas por $\mathcal{N}_n(b;\rho) = \mathcal{N}(b+n;\rho)$ satisfaz uma relação de recorrência de três termos (RR3T), isto é, uma relação do tipo

$$\mathcal{N}_{n+1}(b;\rho) + a_n\,\mathcal{N}_n(b;\rho) + b_n\,\mathcal{N}_{n-1}(b;\rho) = 0, \quad \text{com } a_n, b_n \in \mathbb{R} \text{ se } \rho \in \mathbb{R}. \tag{5}$$

O segundo algoritmo será obtido através de uma família de série de expansão para $\mathcal{N}_n(b;\rho)$ do tipo

$$\mathcal{N}(b;\rho) = \exp(f(x,\rho)) \sum_{n=0}^{\infty} c_n(x)\rho^n, \text{ onde } x \in \mathbb{R} \text{ é fixado e } f(x,\rho) \text{ é linear em } \rho \tag{6}$$

e $c_n(x)$ está relacionada com os polinômios complementares de Romanovski-Routh [2].

Veremos que as estimativas via (5) podem não ser confiáveis. Isto se deve ao fato de que $\mathcal{N}_n(b;\rho)$ é a solução minimal da RR3T. Na prática, ser solução minimal de uma RR3T implica que o algoritmo obtido, no sentido de crescimento do índice n, apresenta instabilidade numérica [1, 4]. Entretanto, é possível contornar este problema estimando $\mathcal{N}_n(b;\rho)$ através dos algoritmos de Miller ou Gautschi. A estratégia neste caso é gerar as funções via RR3T no sentido de decrescimento no índice n [1]. O segundo algoritmo é mais promissor, pois, fixando $x = 0$ em (6), testes numéricos têm mostrado que $n!c_n(x)$ vai pra zero rapidamente, o que garante rápida convergência.

Agradecimentos

Os autores agradecem CAPES, CNPq e FAPESP pelo apoio financeiro.

Referências

[1] W. Gautschi, Computational aspects of three-term recurrence relations, *SIAM Rev.* 9:24–82, 1967.

[2] A. P. Raposo, H. J. Weber, D. E. Alvarez-Castillo, and M. Kirchbach, Romanovski polynomials in selected physics problems, *Cent. Eur. J. Phys.* 5:253–284, 2007.

[3] J. R. Shepanski and S. T. Butler, An expansion for Coulomb wave functions, *Nuclear Phys.* 1:313–321, 1956.

[4] N. M. Temme, *Special Functions: an Introduction to the Classical Functions of Mathematical Physics*, John Wiley & Sons, New York, 1996.