



ივ.ჯავახიშვილის სახელობის თბილისის
სახელმწიფო უნივერსიტეტი

ზუსტ და საბუნებისმეტყველო მეცნიერებათა ფაკულტეტი

წყალბადის ატომის ამოცანა სფეროიდალურ კოორდინატებში: უწყვეტი სპექტრი

საბაკალავრო პროგრამა "ფიზიკა"
ატომისა და ატომბირთვის კათედრა

ავტორი:
ცოტნე გამსახურდაშვილი

ხელმძღვანელი:
თსუ ზსმფ-ის ფიზიკის დეპარტამენტის
სრული პროფ.:
თამაზ კერესელიძე

სარჩევი

ანოტაცია	2
Abstract	2
1 შესავალი	3
2 ძირითადი განტოლებები	5
3 კვაზი-კუთხური ფუნქციები	8
4 კვაზი-რადიალური ფუნქციები	11
5 გამოთვლის შედეგები	14
5.1 კვაზი-კუთხური	15
5.2 კვაზი-რადიალური	16
6 დასკვნა	19
გამოყენებული ლიტერატურა	20

ანოტაცია

ნაშრომში ამოხსნილია წყალბადის ატომის ამოცანა სფეროიდულ კოორდინატებში უწყვეტი სპექტრისათვის. პირველ ჯერზე მიღებულია კულონის სფეროიდული ფუნქციების ზუსტი ამოხსნები შესაბამისი ერთგანზომილებიანი განტოლებებიდან, რომლებიც ჩანს რომ არის ჰეუნის (HEUN) გადაგვარებული განტოლებები. ეს მიღებული ფუნქციები არის კარგად ცნობილი კულონის უწყვეტი სპექტრის სფერული ტალღური ფუნქციების ბუნებრივი განზოგადება. ასევე განხილულია ორ-ცენტრიანი კულონის ამოცანა უწყვეტი სპექტრისათვის.

ABSTRACT

THE PROBLEM OF THE HYDROGEN ATOM IN PROLATE SPHEROIDAL COORDINATES IS SOLVED FOR THE CONTINUOUS SPECTRUM. FOR THE FIRST TIME, COULOMB SPHEROIDAL FUNCTIONS ARE OBTAINED ON EXACT SOLUTION OF THE APPROPRIATE ONE-DIMENSIONAL EQUATIONS, WHICH ARE SHOWN TO BE HEUN'S CONFLUENT EQUATIONS. THE DERIVED FUNCTIONS ARE A NATURAL GENERALIZATION OF THE WELL-KNOWN COULOMB WAVE FUNCTIONS OF THE CONTINUOUS SPECTRUM OBTAINED IN SPHERICAL POLAR COORDINATES. AN APPLICATION OF THE ELABORATED APPROACH FOR THE ALGEBRAIC SOLUTION OF THE TWO-COULOMB CENTER PROBLEM FOR THE CONTINUOUS SPECTRUM IS DISCUSSED.

1 შესავალი

შრედინგერის განტოლების ამონახსნი კულონური პოტენციალისთვის არის მნიშვნელოვანი და საჭიროა იყოს ამოხსნილი ყველა შესაძლო შემთხვევისთვის. კვანტური მექანიკის წიგნებში ეს ამოცანა ამოხსნილია სფერულ კოორდინატთა სისტემაში დისკრეტული და უწყვეტი სპექტრისათვის და პარაბოლოიდურ კოორდინატთა სისტემაში დისკრეტული სპექტრისათვის [1]. ამონახსნს ვეძებ ცვლადთა განცალების მეთოდით შესაბამისად სფერული და პარაბოლოიდური ცვლადებისათვის, საიდანაც ვიღებთ ერთი ცვლადის ტალღურ ფუნქციებს.

სფერული და პარაბოლოიდური კოორდინატების გარდა შრედინგერის განტოლება კულონური პოტენციალისთვის ასევე განცალებადია სფეროდალურ კოორდინატებში. კულონური ცენტრი მოთავსებულია ერთ-ერთ სფეროდალური კოორდინატების ფოკუსში, ხოლო მეორე ცენტრი მოთავსებულია კულონური ცენტრიდან R მანძილზე. განცალების შემდეგ ვიღებთ სამ თითო სივრცულ ცვლადზე დამოკიდებულ განტოლებას, რომლებიც ზღვარში როცა R მიისწრაფვის ნული-საკენ გადადის კარგად ცნობილ სფერულ კოორდინატების რადიალურ და კუთხურ შრედინგერის განტოლებებში. არანულიოვანი R -ების შემთხვევაში განტოლების ამონახსნებს შეიძლება ვუწოდოთ კვანტი-რადიალური და კვანტი-კუთხური ფუნქციები. ამოცანა საინტერესოა იმ მხრივ, რომ წყალბადის ატომის ამოცანის ამონახსნი სფეროდალურ კოორდინატებში დაკავშირებულია ეგრეთ წოდებულ ორი კულონური ცენტრის ამოცანასთან, რაც გულისხმობს ელექტრონის მოძრაობას ორ ფიქსირებულ კულონურ ცენტრების ველში, რომლისთვისაც შრედინგერის განტოლება სფეროდალურ კოორდინატებში განცალებადია [2].

კულსონმა (Coulson) და რობინსონმა (Robinson) [3] პირველად სცადეს ამოეხსნათ წყალბადის ატომის ამოცანა სფეროდალურ კოორდინატებში დისკრეტული სპექტრისათვის. მათ მწკრივის ჩამოჭრის გზით წარმოადგინეს ერთ ცვლადიანი ფუნქციები და კულონური სფეროდალური ფუნქციები პოლინომების სახით. ქუქმა (Cook) და ფოულერმა (Fowler) [4] განავრცეს მათ მიერ მიღებული შედეგები და გამოიყენეს ქიმიური ბმების შესასწავლად. წყალბადის ატომის დამალული სიმეტრიის გამოყენებით სანგმა (Sung) და ჰერშბახმა (Herschbach) [5] გამოიყვანეს კულონური სფეროდალური ფუნქციები $n \leq 4$ და $m \leq 4$ კვანტური მდგომარეობისთვის, სადაც n არის მთავარი კვანტური რიცხვი, ხოლო m მაგნიტური კვანტური რიცხვის მოდული. როცა $m=0$ მიღებულია კულონის ელიფსური ფუნქციები და გამოყენებულია მოლეკულური რიდბერგის (Rydberg) დონეების შესასწავლად [6]. [7]-ში კერესელიძის ხელმძღვანელობით ნახვენებია მარტივი და პირდაპირი გამოთვლების სქემა, რომელიც საშუალებას იძლევა გამოითვალოს სფეროდალური ფუნქციები პოლინომიალური სახით ყველა კვანტური მდგომარეობისთვის. ამის გარდა, მიიღეს კულონური შტურმიანის ტალღური ფუნქციები სფეროდალურ კოორდინატებში ჩაკეტილი ალგებრული ფორმით და გამოიკვლიეს მათი თვისებები და გამოყენებები [8,9].

უწყვეტი სპექტრის შემთხვევისთვის, სფეროდალური ფუნქციები მიიღება ორი ფიქსირებული კულონური ცენტრის ველში მოძრავი ელექტრონისათვის. ასეთი ტიპის ფუნქციები საჭიროა იონიზაციის და რეკომბინაციის პროცესების შესწავლისთვის ბუნებრივ და ხელოვნურ პლაზმებში, ვარსკვლავთშორის გარემოში და დედამიწის ატმოსფეროში. ძირითადად სფეროდალური ფუნქციები უწყვეტი სპექტრისათვის მიღებული აქვთ რიცხვითად ერთ-განზომილებიანი განტოლებებისთვის. ზოგიერთ ნაშრომში ანალიტიკურადაც იყო განხილული. უახლოესი შედეგები შეგროვებულია მონოგრაფიაში [2] და განხილულია ნაშრომებში [10-12]. განხილულია სხვა მოდულებიც ამ თემასთან დაკავშირებით [13-15].

ორი კულონური ცენტრის (Z_1eZ_2) ამოცანის ალგებრული ამონახსნის მისაღებად საჭიროა ერთი კულონური ცენტრის (Ze) ამოცანის ამონახსნის მიღება, რადგანაც ეს ორი ამოცანა მათემატიკურად მსგავსია სფეროდალურ კოორდინატებში [16-18]. მაგალითისთვის, სისტემის Z_1eZ_2 კვანტი-კუთხური განტოლების საკუთარი მნიშვნელობები და საკუთარი ფუნქციები მსგავსია $Z = Z_1 - Z_2$ ბირთვის მუხტის მქონე წყალბადისებრი იონისა სფეროდალურ კოორდინატებში [2]. წყალბადისებრი იონთან ასეთი მიდგომა შემდგომში დაგვეხმარება ორი კულონური ცენტრის ამოცანის ალგებრული ამონახსნების მიღებაში უწყვეტი სპექტრისათვის.

ერთი კულონური ცენტრის ამოცანა სფეროდალურ კოორდინატებში უწყვეტი სპექტრისათვის არ არის ამოხსნილი და შესაბამისად არ არის მიღებული კულონური სფეროდალური ფუნქციები ჩაკეტილი ალგებრული ფორმით. ამ ნაშრომში ვიხილავ ელექტრონს კულონურ ველში, სადაც ბირ-

თვის მუხტია Z და ვხსნი შესაბამის შრედინგერის განტოლებას სფეროიდალურ კოორდინატებში უწყვეტი სპექტრისათვის. მიღებულია ერთ განზომილებიანი ტალღური ფუნქციები მწკრივის სახით, რომლითაც ვიღებ წყვილ სამ-წევრიანი რეკურენტულ განტოლებებს კვაზი-რადიალური და კვაზი-კუთხური ფუნქციებისთვის. განცალების პარამეტრი განსაზღვრულია უსასრულოდ გაგრძელებადი წილადებით, რომლის ფესვები არის საკუთარი მნიშვნელობები.

2 ძირითადი განტოლებები

შრედინგერის განტოლება კარტეზიანულ სისტემაში:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta + V(x, y, z) \right] \Psi(x, y, z) = E \Psi(x, y, z) \quad (1)$$

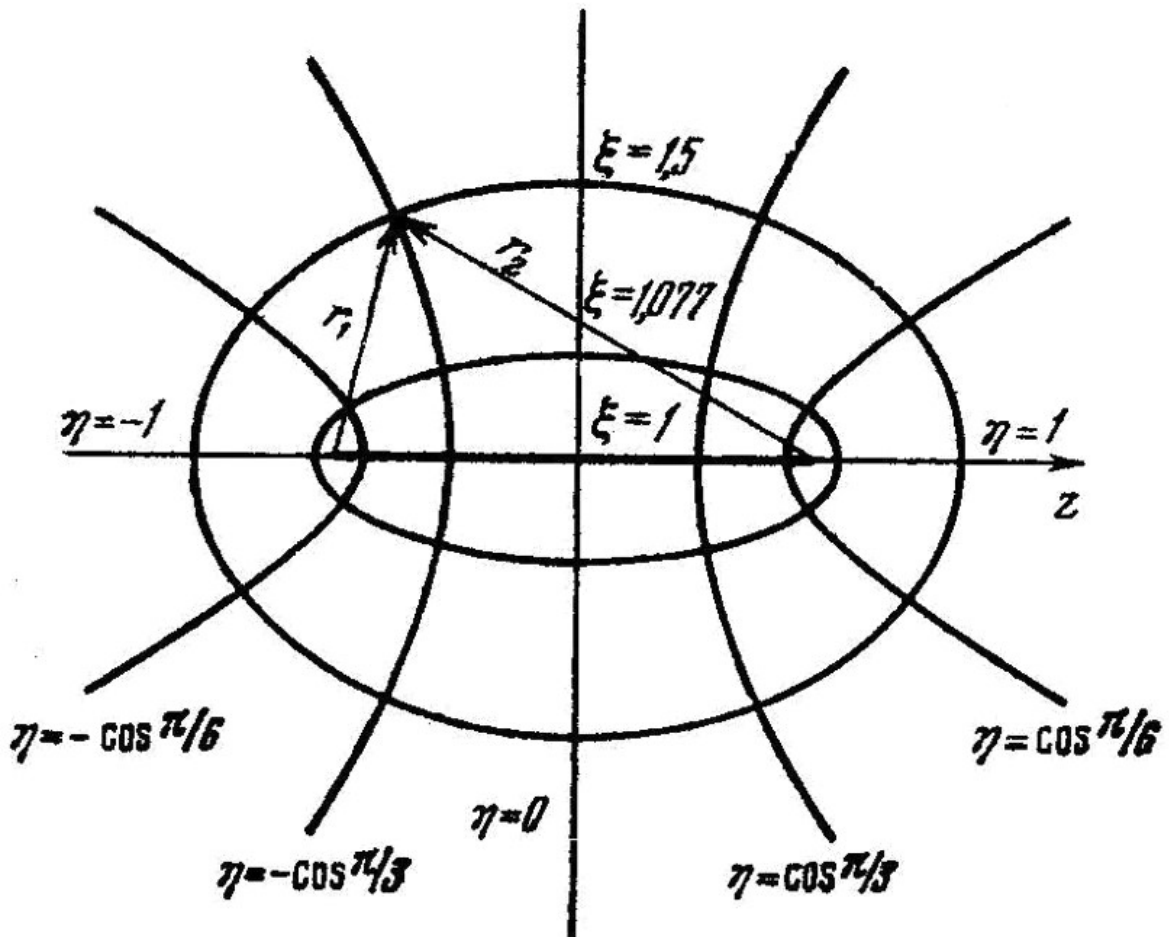
ჩავწეროთ შრედინგერი განტოლება სფეროიდალურ კოორდინატებში კულონურ ველში მოძრავი ელექტრონისათვის: $(x, y, z) \rightarrow (\xi, \eta, \phi)$ სფეროიდალური ცვლადები მოიცემა:

$$\xi = \frac{r_1 + r_2}{R}, \quad \eta = \frac{r_1 - r_2}{R}, \quad \phi = \text{arctg}\left(\frac{y}{x}\right) \quad (2)$$

სადაც r_1 და r_2 მანძილებია ელექტრონიდან სფეროიდალურ სისტემის ფოკუსებამდე. ξ, η და ϕ ცვლადებიან ინტერვალებში:

$$1 \leq \xi < \infty, \quad -1 \leq \eta \leq 1, \quad 0 \leq \phi \leq 2\pi \quad (3)$$

$\xi = \text{const}$ წარმოადგენს ბრუნვის ელიფსოიდს, ხოლო $|\eta| = \text{const}$ არის ბრუნვის სიბერბოლოიდი, რომელიც გვაქვს როგორც მარცხენა ისე მარჯვენა ფოკუსთან.



სურ 1: ორგანზომილებიანი სფეროიდალური სისტემა

ლაპლასის ოპერატორი სფეროიდალურ კოორდინატებში [1]:

$$\Delta = \frac{4}{R^2(\xi^2 - \eta^2)} \left[\frac{\partial}{\partial \xi} (\xi^2 - 1) \frac{\partial}{\partial \xi} + \frac{\partial}{\partial \eta} (1 - \eta^2) \frac{\partial}{\partial \eta} \right] + \frac{4}{R^2(\xi^2 - 1)(1 - \eta^2)} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \quad (4)$$

კულონური პოტენციალი სფეროიდალურში:

$$V(\xi, \eta, \phi) = -\frac{2Ze^2}{R(\xi + \eta)} \quad (5)$$

მივიღებთ შრედინგერის განტოლებას სფეროიდალურ კოორდინატებში:

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2\mu} \left[\frac{4}{R^2(\xi^2 - \eta^2)} \left(\frac{\partial}{\partial \xi} (\xi^2 - 1) \frac{\partial}{\partial \xi} + \frac{\partial}{\partial \eta} (1 - \eta^2) \frac{\partial}{\partial \eta} \right) + \frac{4}{R^2(\xi^2 - 1)(1 - \eta^2)} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right] - \frac{2Ze^2}{R(\xi + \eta)} \right\} \Psi(\xi, \eta, \phi) = E\Psi(\xi, \eta, \phi) \quad (6)$$

ეს განტოლება განცალკევდება და შეგვიძლია წარმოვადგინოთ ტალღური ფუნქცია როგორც:

$$\Psi(\xi, \eta, \phi, R) = X(\xi, R)Y(\eta, R)\Phi(\phi) \quad (7)$$

$$\Phi(\phi) = e^{im\phi} \quad (8)$$

სადაც კვაზი-რადიალური $X(\xi, R)$ და კვაზი-კუთხური $Y(\eta, R)$ ფუნქციები დამოკიდებულია სფეროიდალური კოორდინატების ცენტრებს შორის მანძილ R -ზე. კულონური ცენტრი მოთავსებულია ფოკუსში კოორდინატებით $\xi=1, \eta=-1$; მეორე ცენტრი კი $\xi=1, \eta=1$, რომელიც მუხტის გარეშეა, $Z=0$. მესამე ფუნქცია $\Phi(\phi) = e^{\pm im\phi}/\sqrt{2\pi}$, სადაც $m=0,1,2,\dots$ არის კუთხური მომენტის ოპერატორის z -ზე პროექციის საკუთარი მნიშვნელობები.

(6) ფორმით წარმოდგენილი ტალღური ფუნქციის შეტანით (5) შრედინგერის განტოლებაში და ცვლადების განცალკევებით მივიღებთ ამ განტოლებებს:

$$\frac{d}{d\xi} (\xi^2 - 1) \frac{dX(\xi)}{d\xi} + \left[\lambda + \frac{ER^2}{2} (\xi^2 - 1) + ZR\xi - \frac{m^2}{\xi^2 - 1} \right] X(\xi) = 0 \quad (9)$$

$$\frac{d}{d\eta} (1 - \eta^2) \frac{dY(\eta)}{d\eta} + \left[-\lambda + \frac{ER^2}{2} (1 - \eta^2) - ZR\eta - \frac{m^2}{1 - \eta^2} \right] Y(\eta) = 0 \quad (10)$$

სადაც λ არის განცალკების პარამეტრი და $E>0$ არის ელექტრონის ენერგია.

იმის გამო რომ ეს განტოლებები შეიცავს სინგულარულ წერტილებს საჭიროა მათი გარდაქმნა. ამისათვის საჭიროა მათი ასიმპტოტური ყოფაქცევის შესწავლა. განვიხილოთ კუთხური ნაწილი.

$$\frac{d}{d\eta} (1 - \eta^2) \frac{dY(\eta)}{d\eta} + \left[-\lambda - \frac{ER^2}{2} (1 - \eta^2) - RZ\eta - \frac{m^2}{1 - \eta^2} \right] Y(\eta) = 0 \quad (11)$$

$$(1 - \eta^2) \frac{d^2 Y(\eta)}{d\eta^2} - 2\eta \frac{dY(\eta)}{d\eta} + \left[-\lambda - \frac{ER^2}{2} (1 - \eta^2) - RZ\eta - \frac{m^2}{1 - \eta^2} \right] Y(\eta) = 0 \quad (12)$$

$$\frac{d^2 Y(\eta)}{d\eta^2} - \frac{2\eta}{(1 - \eta^2)} \frac{dY(\eta)}{d\eta} + \left[-\frac{\lambda}{(1 - \eta^2)} - \frac{ER^2}{2} - \frac{RZ\eta}{(1 - \eta^2)} - \frac{m^2}{(1 - \eta^2)^2} \right] Y(\eta) = 0 \quad (13)$$

როცა $\eta \rightarrow 0$ მივიღებთ:

$$\frac{d^2 Y(\eta)}{d\eta^2} + \frac{ER^2}{2} = 0 \quad (14)$$

ამონახსნი ვეძებთ ექსპონენტას სახით:

$$Y(\eta) = e^{k(\eta+1)} \quad (15)$$

შევიტანოთ განტოლებაში:

$$k^2 + \frac{ER^2}{2} = 0 \rightarrow k = i\sqrt{\frac{ER^2}{2}} \rightarrow k = i\frac{R\sqrt{2E}}{2} \quad (16)$$

შემოვიტანოთ აღნიშვნა:

$$p = \sqrt{2E} \quad (17)$$

საიდანაც ამონახსნი შეგვიძლია წარმოვადგინოთ:

$$Y(\eta) = e^{\frac{i}{2}pR(\eta+1)} \quad (18)$$

ერთის მიდამოში:

$$(1 - \eta^2) \frac{d^2 Y(\eta)}{d\eta^2} - 2\eta \frac{dY(\eta)}{d\eta} + \left[-\lambda - \frac{ER^2}{2}(1 - \eta^2) - RZ\eta - \frac{m^2}{1 - \eta^2} \right] Y(\eta) = 0 \quad (19)$$

$$(1 - \eta^2)^2 \frac{d^2 Y(\eta)}{d\eta^2} - 2\eta(1 - \eta^2) \frac{dY(\eta)}{d\eta} + \left[-\lambda(1 - \eta^2) - \frac{ER^2}{2}(1 - \eta^2)^2 - RZ\eta(1 - \eta^2) - m^2 \right] Y(\eta) = 0 \quad (20)$$

როცა $\eta \rightarrow 1$:

$$(1 - \eta^2)^2 \frac{d^2 Y(\eta)}{d\eta^2} - 2(1 - \eta^2) \frac{dY(\eta)}{d\eta} + -m^2 Y(\eta) = 0 \quad (21)$$

ამონახსნი ვეძებოთ შემდეგი სახით(ელიფერის განტოლება):

$$Y(\eta) = (1 - \eta^2)^s \quad (22)$$

ჩასმით მივიღებთ:

$$4s^2 - m^2 = 0 \quad (23)$$

საიდანაც s არის:

$$s = \frac{m}{2} \quad (24)$$

მივიღეთ:

$$Y(\eta) = (1 - \eta^2)^{m/2} \quad (25)$$

ამ ასიმპტოტური ყოფაქცევით შეგვიძლია ჩავწეროთ გარდაქმნისთვის საჭირო ფუნქციები:

$$X(\xi) = e^{i\frac{pR}{2}\xi} (\xi^2 - 1)^{\frac{m}{2}} f_1(\xi) \quad (26)$$

$$Y(\eta) = e^{i\frac{pR}{2}\eta} (1 - \eta^2)^{\frac{m}{2}} f_2(\eta) \quad (27)$$

აქედან მივიღებთ განტოლებები უცნობი $f_1(\xi)$ და $f_2(\eta)$ ფუნქციებისთვის. $f_1(\xi)$ -სთვის გვექნება:

$$\begin{aligned} (\xi^2 - 1) \frac{d^2 f_1}{d\xi^2} + \left[2(m+1)\xi - ipR(\xi^2 - 1) \right] \frac{df_1}{d\xi} \\ + \left[\lambda + m^2 + m + R \left(Z + ip(m+1) \right) \xi \right] f_1 = 0 \end{aligned} \quad (28)$$

განტოლება $f_2(\eta)$ -სთვის იგივე არის რაც $f_1(\xi)$ -სთვის, როცა $\xi \rightarrow \eta$ და $f_1 \rightarrow f_2$. ჩათვლილია რომ $f_1(\xi)$ და $f_2(\eta)$ არის სასრული ფუნქციები მთლიან არეზე და მათი მნიშვნელობა ასევე განსაზღვრულია საზღვრის წერტილებშიც $\xi = 1$, $\xi \rightarrow \infty$ და $\eta = \pm 1$. არანულოვანი სასრული R -სთვის, როცა $\xi = 1$ და $\eta = -1$ კოორდინატებში მყოფი ფოკუსსა და ელექტრონს შორის მანძილი r იზრდება უსასრულოდ, სფეროიდალური ცვლალები $\xi = 2r/R \rightarrow \infty$ [2]. ამ ზღვრის დროს კვაზი-რადიალური (8) განტოლება გარდაიქმნება სფერული კოორდინატების რადიალურ განტოლებაში. აქედან გამომდინარე, როცა $\xi \rightarrow \infty$ კვაზი რადიალური განტოლების ამონახსნი უნდა დაემთხვეს რადიალური განტოლების ამონახსნს.

3 კვაზი-კუთხური ფუნქციები

პირველ რიგში საჭიროა კვაზი-კუთხური განტოლების საკუთარი მნიშვნელობებისა და საკუთარი ფუნქციების პოვნა:

$$(1 - \eta^2) \frac{d^2 f_2}{d\eta^2} - \left[2(m+1)\eta - ipR(1 - \eta^2) \right] \frac{df_2}{d\eta} - \left[\lambda + m^2 + m + R(Z + ip(m+1))\eta \right] f_2 = 0 \quad (29)$$

ნაპოვნი λ პარამეტრის მნიშვნელობებით, შეგვიძლება ამოვხსნათ კვაზი-რადიალური განტოლება. ცვლადის გარდაქმნით $\eta \rightarrow x$, სადაც $x = (1 + \eta)/2$ და მუდმივების აღნიშვნით:

$$a = m + 1 - i \frac{Z}{p}, \quad (30)$$

$$c = d = m + 1, \quad (31)$$

$$\mu = -2ipR, \quad (32)$$

$$\alpha = \lambda + m^2 + m - \left(Z + ip(m+1) \right) R \quad (33)$$

კვაზი-კუთხური განტოლება შეგვიძლია წარმოდგება ასე:

$$\left\{ x(x-1) \frac{d^2}{dx^2} + \left[c(x-1) + dx - \mu x(x-1) \right] \frac{d}{dx} - (a\mu x - \alpha) \right\} f_2(x) = 0 \quad (34)$$

ეს განტოლება არის ჰეუნის (Heun) ერთჯერ გადაგვარებული განტოლება [19], რომელიც მიიღება ჰეუნის ზოგადი განტოლებიდან ორი სინგულარული წერტილის $x=0$ და $x = \infty$ შერწყმით. ჰეუნის (Heun) სპეციალური ფუნქცია (ზოგადი განტოლება) [20]:

$$\frac{d^2 \omega}{dz^2} + \left[\frac{c}{z} + \frac{d}{z-1} + \frac{\epsilon}{z-t} \right] \frac{d\omega}{dz} + \frac{abz - q}{z(z-1)(z-t)} \omega = 0 \quad (35)$$

სადაც:

$$\epsilon = a + b - c - d + 1 \quad (36)$$

ჰეუნის განტოლების ამოხსნა ცნობილია. თუ ჰეუნის განტოლებას დავიყვანთ სფეროიდალური განტოლების სახეზე გვეცოდინება სფეროიდალური განტოლების ამოხსნაც.

შემოვიტანოთ აღნიშვნები:

$$\begin{aligned} t &:= \epsilon^{-1} \\ b &:= t\epsilon^{-1} \\ \epsilon &\rightarrow 0 \end{aligned} \quad (37)$$

ჰეუნის განტოლება გავამრავლოთ $-\epsilon$ -ზე:

$$\begin{aligned} -\epsilon \left\{ \frac{1}{\epsilon} z(z-1)(\epsilon z - 1) \frac{d^2 w}{dz^2} + \left[\frac{1}{\epsilon} (z-1)(\epsilon z - 1)c + \frac{1}{\epsilon} z(\epsilon z - 1)d + \right. \right. \\ \left. \left. + \left(a + \frac{1}{\epsilon^2} + 1 - c - d \right) z(z-1) \right] \frac{dw}{dz} + -\epsilon \left(a \frac{1}{\epsilon^2} z - q \right) \right\} w = 0 \end{aligned} \quad (38)$$

როცა $\epsilon \rightarrow 0$ მივიღებთ:

$$z(z-1) \frac{d^2 w}{dz^2} + \left[-tz(z-1) + c(z-1) + dz \right] \frac{dw}{dz} + (-ta z + \lambda) w = 0 \quad (39)$$

სინგულარულ წერტილის მიდამოში $x=0$ (ან $\eta = -1$), ჰოინის კონფლუენტური განტოლების ამონახსნების წარმოდგება მწკრივის სახით:

$$f_2(x) = \sum_{k=0}^{\infty} g_k x^k, \quad (40)$$

სადაც g_k არის გაშლის კოეფიციენტები სადაც $g_{-1} = 0$ და $g_0 = 1$; x იცვლება $[0,1]$ ინტერვალში. ამ ამონახსნთა კლასის საშუალებით მივიღებთ შემდეგ განტოლებებს:

$$g_{k+1}[ck + c + k^2 + k] = g_{k+1}[(k+1)(k+c)] \quad (41)$$

$$g_k[-\lambda - k(k-1) - \mu - ck - dk] = g_k[-k((k-1) + \mu + c + d) - \lambda] \quad (42)$$

$$g_{k-1}[\mu a + \mu(k-1)] = g_{k-1}[\mu(k+a-1)] \quad (43)$$

შემოვიტანოთ აღნიშვნები:

$$A_k = (k+1)(k+c), \quad B_k = -k(k-1 + \mu + c + d), \quad C_k = \mu(k-1+a); \quad (44)$$

ანუ გვექნება რეკურენტული განტოლება:

$$A_k g_{k+1} + (B_k - \lambda)g_k + C_k g_{k-1} = 0 \quad (45)$$

სადაც λ განცალების პარამეტრი უცნობია და საჭიროა მისი პოვნა როგორც R -ის ფუნქცია. მწკრივი კრებადია:

$$g_{k+1}/g_k \rightarrow 0 \quad (46)$$

რეკურენტულ განტოლებაში შედის განცალების პარამეტრი λ რომელიც უცნობია

$$A_k g_{k+1} + (B_k - \lambda)g_k + C_k g_{k-1} = 0 \quad (47)$$

განტოლება შევაფარდოთ g_k -ზე:

$$A_k \frac{g_{k+1}}{g_k} + (B_k - \lambda) + C_k \frac{g_{k-1}}{g_k} = 0 \quad (48)$$

გამოვსახოთ $\frac{g_{k+1}}{g_k}$:

$$\frac{g_{k+1}}{g_k} = -\frac{(B_k - \lambda)}{A_k} - \frac{C_k}{A_k} \frac{g_{k-1}}{g_k} \quad (49)$$

აქედან:

$$\frac{g_{k+1}}{g_k} = -\frac{(B_k - \lambda) + C_k \frac{g_{k-1}}{g_k}}{A_k} \quad (50)$$

რაც წარმოადგენს გაგრძელებად წილადს:

$$\frac{g_{k+1}}{g_k} = \frac{\lambda - B_k}{A_k} - \frac{C_k A_{k-1}}{A_k(\lambda - B_{k-1}) - \frac{C_{k-1} A_{k-2}}{\lambda - B_{k-2} - \dots - \frac{C_1 A_0}{\lambda - B_0}}} \quad (51)$$

გამოვსახოთ $\frac{g_{k-1}}{g_k}$:

$$\frac{g_{k-1}}{g_k} = -\frac{A_k}{C_k} \frac{g_{k+1}}{g_k} - \frac{B_k - \lambda}{C_k} \quad (52)$$

აქედან:

$$\frac{g_{k-1}}{g_k} = - \frac{A_k \frac{g_{k+1}}{g_k} + (B_k - \lambda)}{C_k} \quad (53)$$

საიდანაც $\frac{g_k}{g_{k-1}}$ გვექნება:

$$\frac{g_k}{g_{k-1}} = \frac{-C_k}{B_k - \lambda + A_k \frac{g_{k+1}}{g_k}} \quad (54)$$

რაც არის უსასრულოდ გაგრძელებადი წილადი:

$$\frac{g_k}{g_{k-1}} = \frac{-C_k}{B_k - \lambda - \frac{A_k C_{k+1}}{B_{k+1} - \lambda - \dots}} \quad (55)$$

თუ ინდექსს წავანაცვლებთ ერთით $k \rightarrow k+1$

$$\frac{g_k}{g_{k-1}} \rightarrow \frac{g_{k+1}}{g_k}$$

მივიღებთ:

$$\frac{\lambda - B_k}{A_k} - \frac{C_k A_{k-1}}{A_k \left(\lambda - B_{k-1} - \frac{C_{k-1} A_{k-2}}{\lambda - B_{k-2} - \frac{C_{k-2} A_{k-3}}{\lambda - B_{k-3} - \dots}} \right)} = \frac{-C_{k+1}}{B_{k+1} - \lambda - \frac{A_{k+1} C_{k+2}}{B_{k+2} - \lambda - \frac{A_{k+2} C_{k+3}}{B_{k+3} - \lambda - \dots}}} \quad (56)$$

რეკურენტული თანაფარდობიდან შესაძლებელია მივიღოთ გაგრძელებადი წილადების განტოლება α -სთვის, რისი პოვნაც ტოლფასია λ -ის პოვნისა. როდესაც $k = k_0$ განტოლებას ექნება სახე:

$$\alpha - B_{k_0} - \frac{A_{k_0-1} C_{k_0}}{\alpha - B_{k_0-1} - \frac{A_{k_0-2} C_{k_0-1}}{\alpha - B_{k_0-2} - \dots - A_0 C_1 / (\alpha - B_0)}} = \frac{A_{k_0} C_{k_0+1}}{\alpha - B_{k_0+1} - \frac{A_{k_0+1} C_{k_0+2}}{\alpha - B_{k_0+2} - \dots}} \quad (57)$$

ამ განტოლების ამოხსნა შესაძლებელია რიცხვითი მეთოდით. $R \ll 1a_0$ ($a_0 = \hbar^2/m_e e^2$) შემთხვევისთვის განტოლება ალგებრულადაც იხსნება:

$$\alpha(R) = -k_0(k_0 + 2m + 1) - [Z + ip(m + 1)]R + O(R^2) \quad (58)$$

როცა R არის ნული, კუთხური განტოლების საკუთარი მნიშვნელობები და საკუთარი ფუნქციები ცნობილია და არის $\lambda = -l(l + 1)$ სადაც $l=0,1,2,\dots$ არის ორბიტალური კუთხური მომენტის კვანტური რიცხვები; საკუთარი ფუნქციები არის ლეჟანდრის მიკავშირებული პოლინომები $P_l^m(\eta)$. იმისათვის რომ ეს დაკმაყოფილდეს როცა $R \rightarrow 0$ საჭიროა ჩავთვალოთ, რომ $k_0 = l - m$. აქედან გამომდინარე, $k+0$ -ის და m -ის დაფიქსირებით განვსაზღვრეთ l და ამის საშუალებით განისაზღვრა ლეჟანდრის პოლინომები, რომლებიც მიიღება კვაზი-კუთხური განტოლებიდან როცა $r \rightarrow 0$. ზოგადი შემთხვევისთვის, როცა $R > 0$, საჭიროა $\alpha_{k_0 m}(R)$ -ის მნიშვნელობების პოვნა რეკურენტული თანაფარდობიდან და გაშლის კოეფიციენტების დათვლა, საიდანაც განვსაზღვრავთ $Y_{k_0 m}(\eta)$ მოცემული R და p -სთვის.

კვაზი-კუთხური განტოლების ამონახსნში $p = \sqrt{2E}$; ამ განტოლებას აქვს მეორე ამონახსნიც $p = -\sqrt{2E}$ -სთვის. ანუ გვექნება ორი ამონახსნი: $Y_{k_0 m}^{(+)}(\eta)$ $p > 0$ და $Y_{k_0 m}^{(-)}(\eta)$ $p < 0$. ზოგადი ამონახსნი იქნება:

$$Y_{k_0 m}(\eta) = \frac{1}{2} \left(Y_{k_0 m}^{(+)}(\eta) + Y_{k_0 m}^{(-)}(\eta) \right) \quad (59)$$

ამ კავშირიდან ჩანს, როდესაც $p \rightarrow -p$ $\alpha_{k_0 m}(R)$ -ის რეალური ნაწილი არ იცვლება, ხოლო წარმოსახვითი ნაწილი იცვლის ნიშანს. ასეთივე ცვლილებაა გაშლის კოეფიციენტების შემთხვევაშიც, როცა $p \rightarrow -p$: $Reg_k^{(+)} = Reg_k^{(-)}$ და $Img_k^{(+)} = -Img_k^{(-)}$.

განტოლება შეგვიძლია წარმოვადგინოთ ასე:

$$Y_{k_0 m}(\eta) = (1 - \eta^2)^{m/2} \operatorname{Re} \left\{ e^{\pm i \frac{|p|R}{2} \eta} \sum_{k=0}^{\infty} g_k^{(\pm)} \left(\frac{1 + \eta}{2} \right)^k \right\} \quad (60)$$

4 კვანძი-რადიალური ფუნქციები

კვანძი-რადიალური განტოლების შემთხვევაში $f_1(x)$ ფუნქციებს ვეძებთ იაფეზე (Jaffe) [21] შემდეგ ფუნქციათა კლასში:

$$f_1(x) = (x + 1)^\sigma \sum_{s=0}^{\infty} q_s t^s \quad (61)$$

სადაც $q_{-1} = 0$, $q_0 = 1$; $t = \frac{x-1}{x+1}$, რომლის ცვლილების არეა $[0,1]$; σ არის მუდმივი და უნდა განისაზღვროს. მწკრივი შევიტანოთ განტოლებაში:

$$\left\{ (x^2 - 1) \frac{d^2}{dx^2} + [2cx + ipR(x^2 - 1)] \frac{d}{dx} + [\lambda + mc + R(Z + ipc)x] \right\} y(x) = 0, \quad (62)$$

სადაც შემოტანილია აღნიშვნა:

$$c = m + 1; \rightarrow m^2 + m = mc; \quad (63)$$

განტოლების პირველი ნაწილიდან მივიღებთ:

$$\begin{aligned} & (x^2 - 1) \frac{d^2}{dx^2} y(x) = \\ & \sigma(\sigma - 1)(x + 1)^\sigma \sum q_{s-1} t^s - 2(\sigma - 1)(x + 1)^\sigma \sum q_{s-1}(s - 1)t^s + \\ & 2(\sigma - 1)(x + 1)^\sigma \sum q_s s t^s + (x + 1)^\sigma \sum q_{s-1}(s - 1)(s - 2)t^s + \\ & (x + 1)^\sigma \sum q_{s+1}(s + 1)st^s - 2(x + 1)^\sigma \sum q_s s(s - 1)t^s, \end{aligned} \quad (64)$$

მეორე ნაწილისთვის:

$$\begin{aligned} & [2cx + ipR(x^2 - 1)] \frac{d}{dx} y(x) = \\ & c\sigma(x + 1)^\sigma \sum q_s t^s + c\sigma(x + 1)^\sigma \sum q_{s-1} t^s + \\ & c(x + 1)^\sigma \sum q_{s+1}(s + 1)t^s - c(x + 1)^\sigma \sum q_{s-1}(s - 1)t^s + \\ & 2ipR(x + 1)^\sigma \sum q_s s t^s + 2ipRt\sigma(x + 1)^\sigma \frac{1}{1 - t} \sum q_s t^s, \end{aligned} \quad (65)$$

თუ გავითვალისწინებთ შემდეგ ტოლობას განტოლების მე-3 ნაწილიდან მივიღებთ:

$$x - 1 = \frac{2}{t^{-1} - 1} \rightarrow x = \frac{2}{t^{-1} - 1} + 1 = \frac{2 + t^{-1} - 1}{t^{-1} - 1} = \frac{t^{-1} + 1}{t^{-1} - 1} = \frac{1 + t}{1 - t} \quad (66)$$

$$\begin{aligned} & [\lambda + mc + R(Z + ipc)x] y(x) = [\lambda + mc + R(Z + ipc)x] (x + 1)^\sigma \sum q_s t^s = \\ & (\lambda + mc)(x + 1)^\sigma \sum q_s t^s + R(Z + ipc) \frac{1 + t}{1 - t} (x + 1)^\sigma \sum q_s t^s, \end{aligned} \quad (67)$$

განტოლების მე-2 და მე-3 წევრში შედის წევრები, რომელთაც გააჩნიათ სინგულარობა $t=1$ წერტილში, ამის გამოსასწორებლად შევკრიბოთ ეს წევრები:

$$\begin{aligned} & 2ipRt\sigma(x + 1)^\sigma \frac{1}{1 - t} \sum q_s t^s + R(Z + ipc) \frac{1 + t}{1 - t} (x + 1)^\sigma \sum q_s t^s = \\ & \left[\frac{2ipRt\sigma + R(Z + ipc)(1 + t)}{1 - t} \right] \left[(x + 1)^\sigma \sum q_s t^s \right] \end{aligned} \quad (68)$$

განვსაზღვროთ σ ისე რომ მოვიშოროთ სინგულარობა, ამისათვის:

$$ipR\sigma = -R(Z + ipc) \rightarrow \sigma = \frac{-R(Z + ipc)}{ipR} = \frac{iZ}{p} - c \quad (69)$$

სიგმას ჩასმით მივიღებთ:

$$\frac{2ipRt\sigma + R(Z + ipc)(1 + t)}{1 - t} = \frac{R(Z + ipc)(1 - t)}{1 - t} = R(Z + ipc) \quad (70)$$

მივიღებთ განტოლებას:

$$\begin{aligned} & \sigma(\sigma - 1)q_{s-1} - 2(\sigma - 1)q_{s-1}(s - 1) + \\ & 2(\sigma - 1)q_s s + q_{s-1}(s - 1)(s - 2) + q_{s+1}(s + 1)s - 2q_s s(s - 1) + \\ & c\sigma q_s + c\sigma q_{s-1} + cq_{s+1}(s + 1) - cq_{s-1}(s - 1) + 2ipRq_s s + \\ & (\lambda + mc)q_s + R(Z + ipc)q_s; \end{aligned} \quad (71)$$

რაც იგივეა q ინდექსების მიხედვით:

$$\begin{aligned} & [(s + 1)s + c(s + 1)]q_{s+1} + \\ & [2(\sigma - 1)s - 2s(s - 1) + c\sigma + 2ipRs + (\lambda + mc) + R(Z + ipc)]q_s + \\ & [\sigma(\sigma - 1) - 2(\sigma - 1)(s - 1) + (s - 1)(s - 2) + c\sigma - c(s - 1)]q_{s-1} \end{aligned} \quad (72)$$

გავამარტივოთ კოეფიციენტები:

$$(s + 1)s + c(s + 1) = (s + 1)(c + 1), \quad (73)$$

$$\begin{aligned} \sigma(\sigma - 1) - 2(\sigma - 1)(s - 1) + (s - 1)(s - 2) + c\sigma - c(s - 1) = \\ (s - 1 - \sigma)(s - c - \sigma), \end{aligned} \quad (74)$$

$$\begin{aligned} 2(\sigma - 1)s - 2s(s - 1) + c\sigma + 2ipRs + (\lambda + mc) + R(Z + ipc) = \\ \sigma - s + ipR] + c\sigma + \alpha - 2ipR\sigma \end{aligned} \quad (75)$$

სადაც

$$\alpha = \lambda + mc - R(Z + ipc); \quad (76)$$

და

$$ipR\sigma = -R(Z + ipc) \quad (77)$$

კოეფიციენტები ავღნიშნოთ:

$$\begin{aligned} A_s &= (s + 1)(c + 1), \\ -B_s &= 2s[\sigma - s + ipR] + c\sigma + \alpha - 2ipR\sigma, \\ C_s &= (s - 1 - \sigma)(s - c - \sigma). \end{aligned} \quad (78)$$

$$c = m + 1$$

რაც იგივეა:

$$A_s = (s + 1)s + m + 1, \quad (79)$$

$$B_s = 2s(s - \sigma - ipR) - \sigma(m + 1) + 2i\sigma pR - \alpha_{k_0 m}(R), \quad (80)$$

$$C_s = (s - 1 - \sigma)(s - m - 1 - \sigma) \quad (81)$$

ამ კოეფიციენტებით რეკურენტული განტოლება მიიღებს სახეს:

$$A_s q_{s+1} - B_s q_s + C_s q_{s-1} = 0; \quad (82)$$

$\alpha_{k_0 m}$ არის ამონახსნელი განტოლების ფესვები. მიღებული რეკურენტული ფორმულა მოგვცემს კვაზი-რადიალური განტოლების ორ ამონახსნს: $X_{Ek_0 m}^{(+)}(\xi)$ როცა $p = \sqrt{2E}$ და $X_{Ek_0 m}^{(-)}(\xi)$ როცა $p = -\sqrt{2E}$. ეს ამონახსნები არის კომპლექსურად შეუღლებული ფუნქციები, რადგან $Reqs^{(+)} = Reqs^{(-)}$ და $Imqs^{(+)} = -Imqs^{(-)}$.

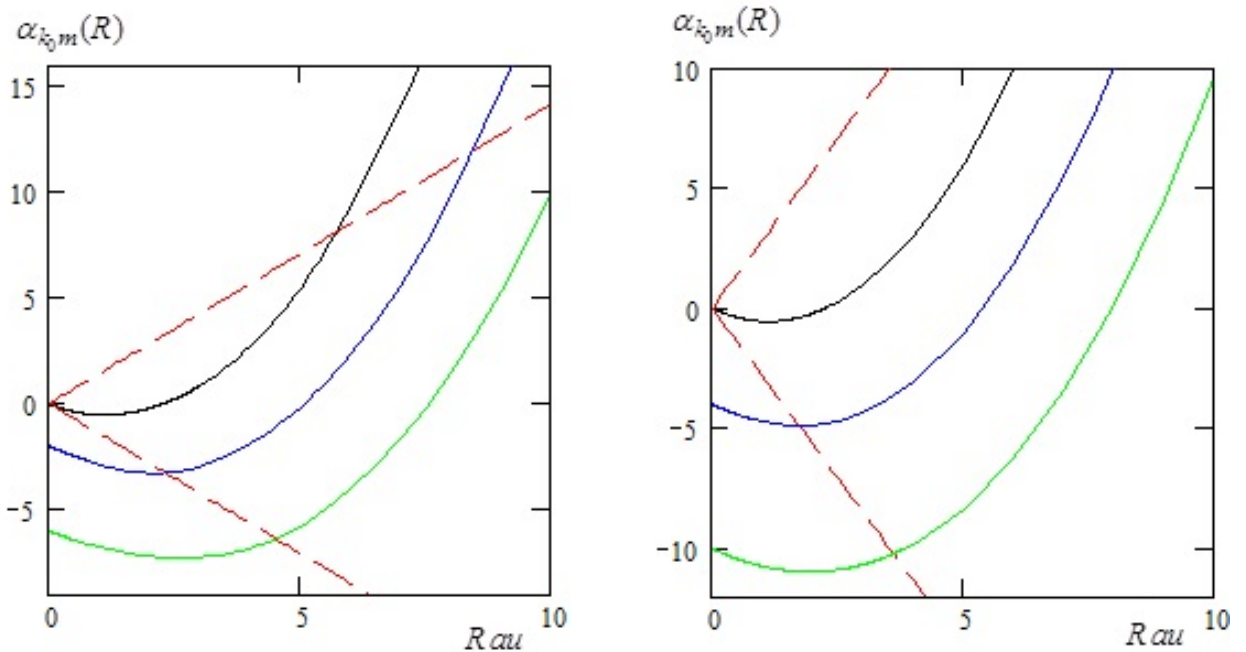
საბოლოოდ მივიღებთ კვაზი-რადიალური განტოლების ამონახსნს:

$$X_{Ek_0 m}(\xi) = \frac{(\xi^2 - 1)^{\frac{m}{2}}}{(\xi + 1)^{m+1}} Re \left\{ e^{i \frac{|p|R}{2} \xi} (\xi + 1)^{i \frac{Z}{p}} \sum_{s=0}^{\infty} q_s^+ t^s \right\} \quad (83)$$

5 გამოთვლის შედეგები

წინა სექციებში მიღებული გამოსახულებების რიცხვითი დათვლის შედეგად მიღებულია კვაზი-კუთხური და კვაზი-რადიალური განტოლებების საკუთარი მნიშვნელობები და საკუთარი ფუნქციები არჩეული მდგომარეობებისთვის, როცა ენერგია $E=1.0$ ატომურ ერთეულებში და $Z=1$.

სურ 2-ზე ნახვენებია რიცხვითად ამოხსნილი $\alpha_{k_0 m}(R)$ $k_0 = 0, 1, 2$ და $m=0, 1$ -სთვის. $k_0 > 2$ და $m > 1$ აქვს ანალოგიური დამოკიდებულება. ეს ყველაფერი დათვლილია პროგრამა Maple-ზე; R -ის ზრდასთან ერთად შედეგის შესაბამისი სიზუსტისათვის საჭირო იყო განტოლების მარჯვენა მხარეს წილადის შეფარდებების საკმაოდ გაზრდა. მაგალითისთვის, როცა $R = 10a_0$ $a_{00}(R)$ -სთვის საჭირო სიზუსტისათვის 90-ზე მეტი შეფარდების გათვალისწინება. უფრო დიდი R -ების შემთხვევაში $\alpha_{k_0 m}$ ოსცილირებს, რაც აფერხებდა $R \gg 1a_0$ -სთვის გამოთვლებს.



სურ 2: პარამეტრი $\alpha_{k_0 m}(R)$ $k_0 = 0, 1, 2$ და (a) $m = 0$, (b) $m = 1$ შავი - $Re\alpha_{0m}$, ლურჯი - $Re\alpha_{1m}$, მწვანე - $Re\alpha_{2m}$. ზედა წითელი - $Im\alpha_{k_0 m}$ როცა $p < 0$, ქვედა წითელი - $Im\alpha_{k_0 m}$ როცა $p > 0$

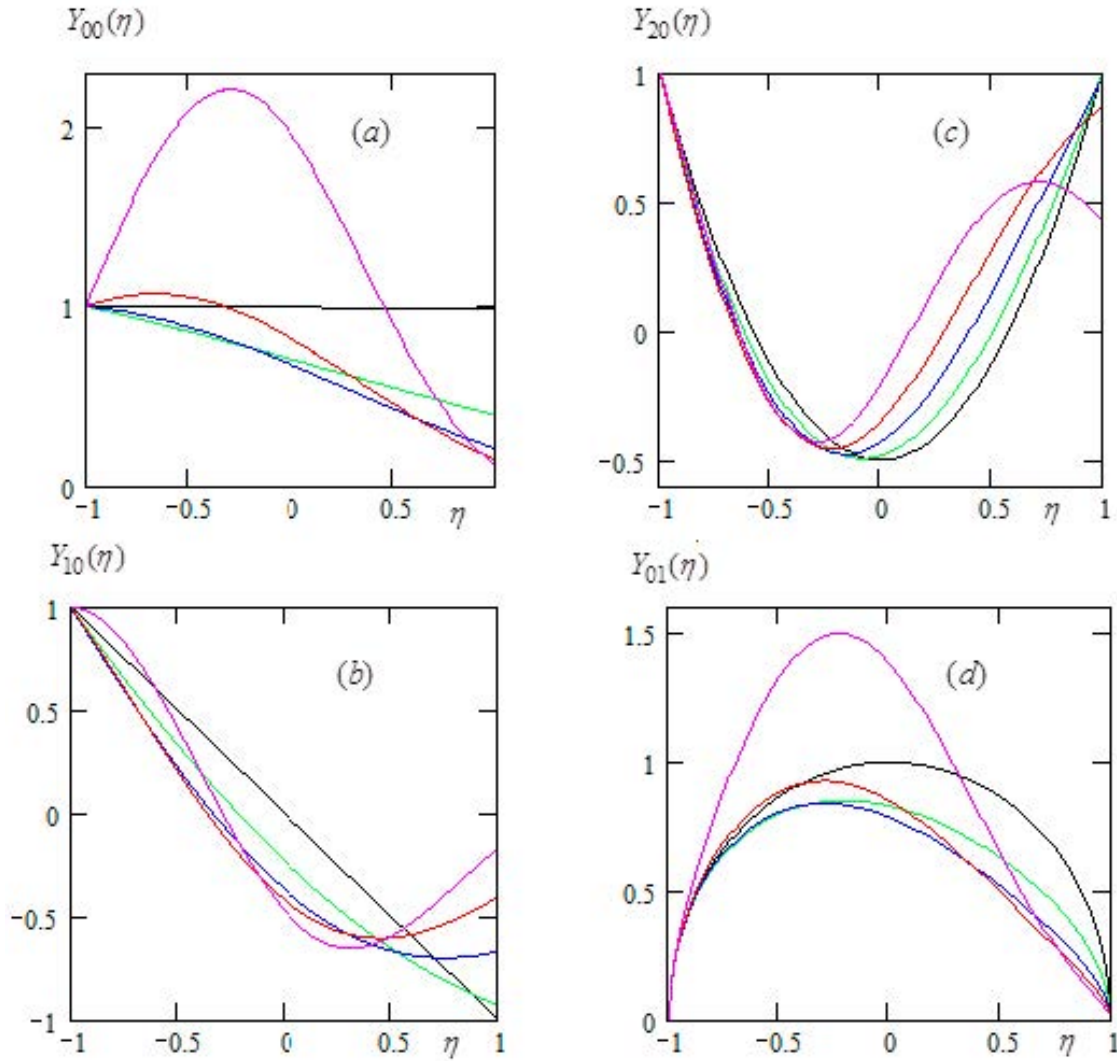
მოცემული კვანტური რიცხვებისთვის k_0, m და პარამეტრებისთვის p და R , ამ განტოლებას აქვს არაერთი კომპლექსური ფესვი. ამ ფესვებიდან ამოვარჩიეთ მხოლოდ ის ფესვები, რომლებიც უწყვეტად იცვლებოდნენ R -ის ზრდასთან ერთად. ასევე, ერთ-ერთი კრიტერიუმი იყო ის რომ ზღვარში როცა $R=0$, მოცემულ k_0 და m -ზე $\alpha_{k_0 m}(0) = -k_0(k_0 + 2m + 1)$. რიცხვითმა გამოთვლებმა აჩვენა რომ $\alpha_{k_0 m}$ -ის რეალური ნაწილი არ იცვლება, როცა წარმოსახვითი ნაწილი იცვლის ნიშანს როცა $p \rightarrow -p$. სურ 2-ზე ჩანს რომ $Im\alpha_{k_0 m}$ დამოკიდებულია წრფივად R -ზე, რომელიც შეგვიძლია ფორმულით წარმოვადგინოთ:

$$Im\alpha_{k_0 m} = -p(m + 1)R \quad (84)$$

ყველა R -ზე. $\alpha_{k_0 m}$ -ის რეალური ნაწილი დამოკიდებულია კვანტურ რიცხვებზე k_0 -ზე და m -ზე, ხოლო წარმოსახვითი ნაწილი მხოლოდ m -ზე. ეს წრფივი დამოკიდებულება საგრძნობლად ამარტივებს გამოთვლებს.

5.1 კვაზი-კუთხური

ასევე დათვლილია კვაზი-კუთხური ფუნქციები $Y_{k_0m}(\eta)$ $k_0 = 0, 1, 2$, $m=0,1$ და რამდენიმე R -სთვის. გამოთვლის შედეგები ნახვენებია სურ 3-ზე. $Y_{00}(\eta)$ არის კვანძების გარეშე, ხოლო $Y_{10}(\eta)$ და $Y_{20}(\eta)$ -ს აქვთ ერთი და ორი კვანძები შესაბამისად ყველა R -ზე. $Y_{00}(\eta)$, $Y_{10}(\eta)$ და $Y_{20}(\eta)$ ემთხვევიან ლეჟანდრის პოლინომებს $P_0(\eta) = 1$, $P_1(\eta) = \eta$ და $P_2(\eta) = \frac{3\eta^2-1}{2}$ მცირე R -ებზე. როცა R იზრდება ამ პოლინომებიდან გადახრა საკმაოდ დიდია. არც $Y_{01}(\eta)$ ფუნქციას არ აქვს კვანძები. ეს ფუნქცია ემსგავსება ლეჟანდრის პოლინომს $P_1^1(\eta) = (1 - \eta^2)^{1/2}$ როცა $R=0.01$ ატომურ ერთეულებში. R -ის ზრდასთან ერთად ხდება პოლინომიდან გადახრაც. ყველა R -სთვის კვაზი-კუთხური ფუნქცია $Y_{k_0m}(\eta)$ სწრაფად კრებადია.



სურ 3: კვაზი-კუთხური ფუნქციები $Y_{00}(\eta)$ (a), $Y_{10}(\eta)$ (b), $Y_{20}(\eta)$ (c) და $Y_{01}(\eta)$ (d) როცა $R = 0.01a_0$ - შავი, $R = 1a_0$ - მწვანე, $R = 2a_0$ - ლურჯი, $R = 3a_0$ - წითელი, $R = 5a_0$ - იისფერი

5.2 კვაზი-რადიალური

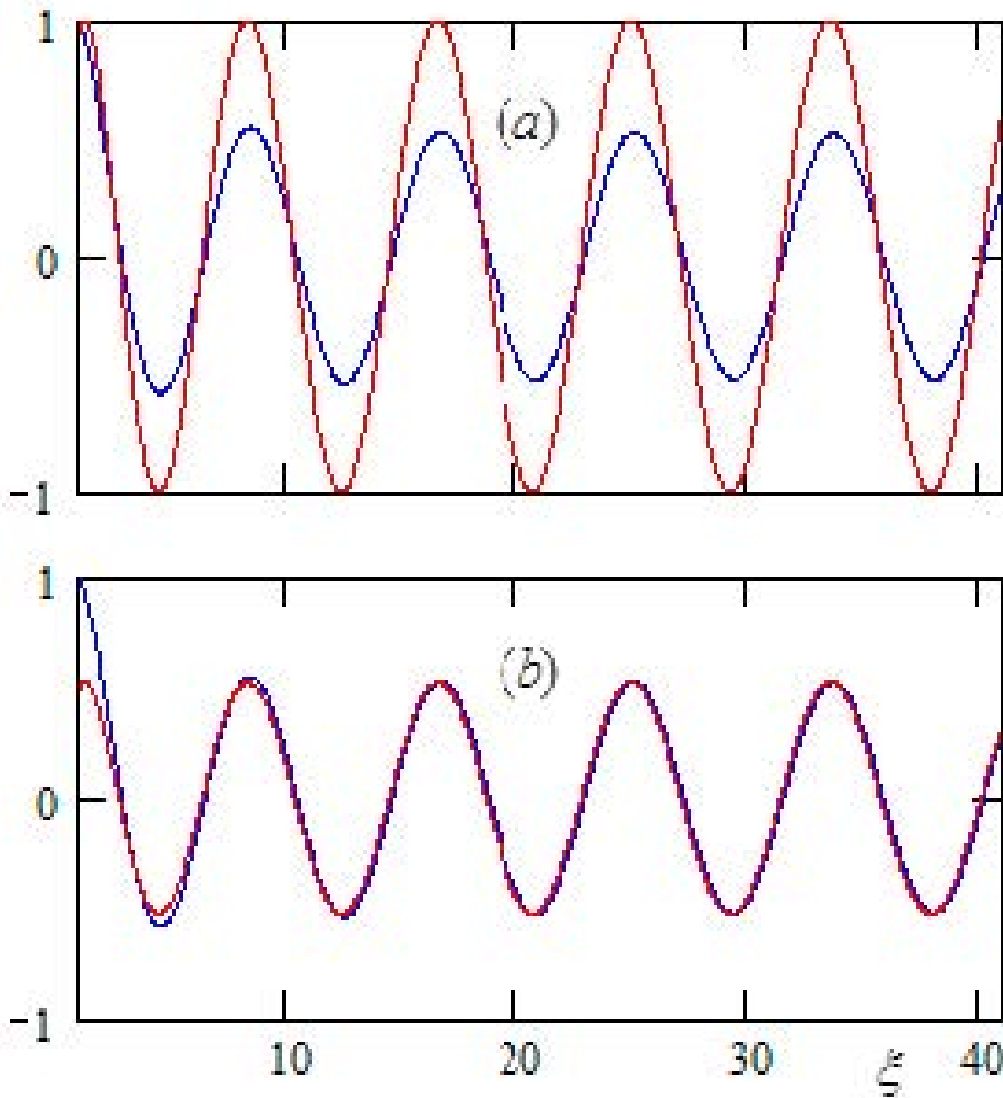
ასევე დათვლილია კვაზი-რადიალური ფუნქციები $X_{Ek_0m}(\xi)$ $E=1.0$ ატომური ერთეულისთვის და რამდენიმე R -სთვის. კრებადობა ამ შემთხვევაში ნელია კვაზი-კუთხურთან შედარებით, განსაკუთრებით როცა ξ იზრდება. მაგალითისთვის, როცა $R = 5a_0$ კვაზი-რადიალური ფუნქციის $X_{E00}(\xi)$ სიზუსტე $\xi = 5$ -სთვის არის 10^{-12} საჭიროა $s > 260$, როცა იგივე სიზუსტე $x = 7$ -სთვის მიიღწევა $s > 460$ -ის შემთხვევაში. როგორც ავლნიშნეთ კვაზი-რადიალური ფუნქცია $X_{Ek_0m}(\xi)$ არეში $\xi \gg 1$ უნდა დაემთხვეს რადიალურ ფუნქციას $R_{pl}(r)$ ($p = \sqrt{2E}$) სფერულ პოლარულ კოორდინატებში. ამ პირობის გამოყენებით ნაპოვნია კვაზი-რადიალური ფუნქციის ასიმპტოტური არე. სურ 4-ზე ნახვენება $(\xi + 1)X_{E00}(\xi)$;

$$rR_{pl}(r) = \sin\left(pr + \frac{Z}{p}\ln 2pr - \frac{\pi}{2}l + \delta_l\right) \quad (85)$$

$$\delta_l = \arg\Gamma\left(l + 1 - i\frac{Z}{p}\right) \quad (86)$$

სადაც r ჩანაცვლებულია $\frac{r\xi}{2}$ -ით და l არის ორბიტალური კუთხური მომენტის კვანტური რიცხვი $k_0 + m$. სურათ 4(a)-ზე გამოსახულია ასიმპტოტური არე, სადაც ჩანს რომ ამ ფუნქციებს აქვთ ერთნაირი ფაზა თუმცა განსხვავებული ამპლიტუდა. სურათზე 4(b) გამოსახულია $(\xi + 1)X_{E00}(\xi)$ და $rR_{p0}(r)$ ფუნქციები, მაგრამ ამ შემთხვევაში ამპლიტუდები ემთხვევა დიდ ξ -ების შემთხვევაში. აქ ჩანს, რომ $(\xi + 1)X_{E00}(\xi)$ გადადის $rR_{p0}(r)$ -ში, როცა ξ იზრდება. ეს ხდება $k_0 = 0, m = 0$ კვანტური რიცხვების შემთხვევაში.

$$(\xi + 1)X_{E00}(\xi), rR_{p0}(r)$$

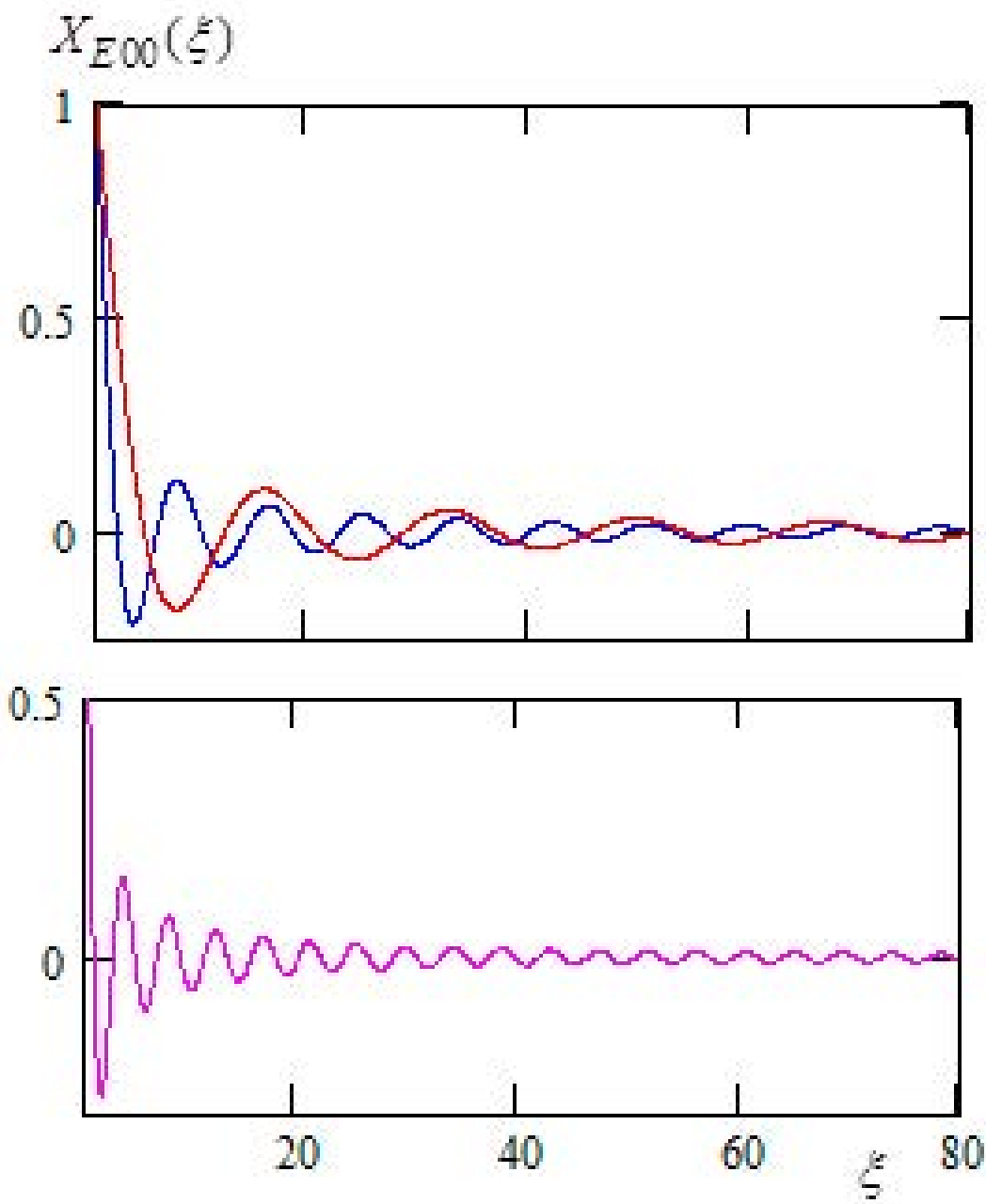


სურ 4: $(\xi + 1)X_{E00}(\xi)$ ფუნქციები (ლურჯი) და $rR_{p0}(r)$ როცა $r = \frac{R\xi}{2}$ (წითელი). (a) $\xi=1$ და (b) $\xi=38$ $E=1.0a_0$ და $R=1a_0$

აქედან გამომდინარე სასრული ξ -ების შემთხვევაში კვაზი-რადიალური განტოლება განსაზღვრულია წინა განტოლებით, ხოლო როცა $\xi \rightarrow \infty$ მაშინ $X_{Ek_0m}(\xi)$ წარმოდგება შემდეგნაირად:

$$X_{Ek_0m}(\xi) \rightarrow \frac{C_{k_0m}}{\xi} \sin\left(\frac{pR}{2}\xi + \frac{Z}{p} \ln pR\xi - \frac{\pi}{2}(k_0 + m) + \delta_{k_0m}\right) \quad (87)$$

სადაც C_{k_0m} არის ნორმირების ვექტორი, $\delta_{k_0m} = \arg\Gamma(k_0 + m + 1 - i\frac{Z}{p})$ არის კულონის ფაზის წანაცვლება და $\Gamma(x)$ არის გამა ფუნქცია. სურათ 5-ზე წარმოდგენილია კვაზი-რადიალური ტალღური ფუნქციები $X_{Ek_0m}(\xi)$ როცა $k_0 = m = 0$ რამდენიმე R-ზე. ამ გრაფიკზე ჩანს რომ კვაზი რადიალური ფუნქციები ოსცილირებენ ყველა R-ის შემთხვევაში კლებადი ამპლიტუდით. რხვის სიხშირე იმატებს R-ის ზრდასთან ერთად.



სურ 5: კვაზი-რადიალური ფუნქციები $X_{E00}(\xi)$ როცა $R=0.5a_0$ (წითელი), $R=1.0a_0$ (ლურჯი) და $R=2.0a_0$ (იისფერი), $E=1.0a.u.$

6 დასკვნა

ამგვარად, წყალბადის ატომის ამოცანა სფეროდალურ კოორდინატებში დადებითი სპექტრისათვის ამოიხსნა. შრედინგერის განტოლების ცვლადთა განცალკევების შემდეგ მიღებული ერთგანზომილებიანი განტოლებები დავიდა ჰოინის გადაგვარებულ განტოლებაზე; ამ განტოლებების საკუთარი მნიშვნელობები და საკუთარი ფუნქციები წარმოდგა ჩაკეტილი ალგებრული ფორმით. სფეროდალური კოორდინატების ფოკუსებს შორის მანძილის R -ის სიმცირის შემთხვევაში, საკუთარი მნიშვნელობების რეალური ნაწილი არის კლებადი R -ის ფუნქცია, თუმცა R -ის გაზრდით ის მკვეთრად იზრდება. საკუთარი მნიშვნელობების წარმოსახვითი ნაწილი არის ზრდადი ან კლებადი წრფივი R -ის ფუნქცია. ეს საკუთარი მნიშვნელობები არის ბუნებრივი განზოგადება კარგად ცნობილი კულონის ტალღური ფუნქციებისა სფერულ კოორდინატებში დადებითი სპექტრისათვის.

როგორც შესავალში იყო აღნიშნული, ერთი და ორი კულონური ცენტრის ამოცანა სფეროდალურ კოორდინატებში მათემატიკურად მსგავსია. ამ ფაქტზე დაყრდნობით ეს წყალბადისებური იონზე მიღებული შედეგები ეფექტურად შეგვიძლია გამოვიყენოთ ორი კულონური ცენტრის ამოცანის ამოსახსნელად დადებითი სპექტრისათვის. თუმცა ეს მეთოდი რაც აქ არის სამართლიანია მხოლოდ მაშინ როდესაც სფეროდალურ კოორდინატების ფოკუსებს შორის მანძილი არ არის დიდი; როდესაც $R \gg 1a_0$ კულონის სფეროდალური ფუნქციების პოვნა საჭიროებს სხვა ამოხსნის გზას.

იმ ფუნქციების ცოდნა, რომლებიც სწორად აღწერს ელექტრონის მოძრაობას ფიქსირებულ კულონური ცენტრების ველში არის საჭირო იმისთვის, რომ გამოვიკვლიოთ სხვადასხვა იონიზაციის პროცესები და ორატომიანი მოლეკულების რეკომბინაცია. მაგალითისათვის, წყალბადის ატომისა და პროტონის დაჯახებისას მიღებული დროებითი კვაზი-მოლეკულიდან ფოტონის გამოსხივების პროცესი. ადიაბატური წარმოდგენისას მკვეთის ზუსტი გამოთვლა და ბალანსირების პრინციპის გამოყენებით [22] საშუალება გვქვია გამოვიკვლიოთ ელექტრონისა და პროტონის რეკომბინაცია სხვა პროტონის თანხლებით. ორ ნაწილაკოვან რეკომბინაციასთან ერთად [23], ეს პროცესი პასუხისმგებელია წყალბადის ატომის ფორმირებაზე სამყაროს წინაპერიოდში. კოსმოლოგიური სამი ნაწილაკის რეკომბინაციის თეორიულ შესწავლას შეიძლება მნიშვნელოვანი შედეგები ჰქონდეს კოსმოსურ მიკროტალღურ ფონის (cosmic microwave background (CMB)) ანალიზისთვის [24].

გამოყენებული ლიტერატურა

- [1] L. D. Landau and E. M. Lifshitz, Quantum mechanics: Non-Relativistic Theory (Oxford UK, Pergamon, third edition, 1977)
- [2] I. V. Komarov, L. I. Ponomarev and S. Yu. Slavyanov, Spheroidal and Coulomb Spheroidal Functions (Moscow USSR, Nauka, 1976)
- [3] C. A. Coulson and P D Robinson, Proc. Phys. Soc. 71, 815 (1958)
- [4] D. B. Cook and P. W. Fowler, Am. J. Phys. 49, 857 (1981)
- [5] S. M. Sung and D. R. Herschbach, J. Chem. Phys. 95, 7437 (1991)
- [6] B. E. Granger, E. L. Hamilton and C. H. Greene, Phys. Rev. A 64, 042508 (2001)
- [7] T. Kereselidze, Z. S. Machavariani and G. Chkadua, Eur. Phys. J. D 63, 81 (2011)
- [8] T. Kereselidze, G. Chkadua and P. Defrance, Mol. Phys. 113, 3471 (2015)
- [9] T. Kereselidze, G. Chkadua and J. F. Ogilvie, Mol. Phys. 114, 148 (2016)
- [10] Y. S. Tergiman, Phys. Rev. A 48, 88 (1993)
- [11] B. Joulakian, J. Hanssen, R. Rivarola and A. Motassim, Phys. Rev. A 54, 1473 (1996)
- [12] J. Hanssen, B. Joulakian, R. D. Rivarola and J. Allan, Phys. Scripta 53, 41 (1996)
- [13] O. Chuluunbaatar, B. B. Joulakian, K. Tsookhuu and S. I. Vinitzky, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 37, 2607 (2004)
- [14] V. V. Serov, B. B. Joulakian, D. V. Pavlov, I. V. Puzynin and S. I. Vinitzky. Phys. Rev. A 65, 062708 (2002)
- [15] V. V. Serov, V. L. Derbov, B. B. Joulakian and S. I. Vinitzky, Phys. Rev. A 63, 062711 (2001)
- [16] T. M. Kereselidze, Z. S. Machavariani and I. L. Noselidze, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 29, 257 (1996)
- [17] T. M. Kereselidze, Z. S. Machavariani and I. L. Noselidze, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 31, 15 (1998)
- [18] T. M. Kereselidze, I. L. Noselidze and M. I. Chibisov, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 36, 853 (2003)
- [19] K. Heun, Math. Ann. 33, S. 161 (1889)
- [20] S. Yu. Slavyanov and W. Lay, Special Functions // A United Theory Based on Singularities (Oxford UK, Oxford University Press, 2000)
- [21] G. Jaffe, Z. Phys. 87, 535 (1934)
- [22] T. Y. Wu, T. Ohmura, Quantum Theory of Scattering (New York USA, Prentice-Hall, 1962)
- [23] A. Dalgarno, Role of electron-ion and proton-ion collisions in astrophysics in Physics of Ion-ion and Electron-ion Collisions, edited by F. Brouillard and J. W. McGowan (New York USA, Plenum Press, 1983)
- [24] J. Chluba and R. M. Thomas, MNRAS, 412, 748 (2011) (arXiv:1010.3631)