ივანე ჯავახიშვილის სახელობის თბილისის სახელმწიფო უნივერსიტეტი
ზუსტ და საბუნებისმეტყველო მეცნიერებათა ფაკულტეტი

წყალბადის ატომის ამოცანა სფეროიდალურ კოორდინატებში: უწყვეტი სპექტრი

ცოტნე გამსახურდაშვილი

საბაკალავრო პროგრამა: ფიზიკა

ატომისა და ატომბირთვის კათედრა

ხელმძღვანელი: თამაზ კერესელიძე

(საბაკალავრო ნაშრომის დაცვა , 11 . 07. 2017)

პრეზენტაციის გეგმა

- შრედინგერის განტოლება სფეროიდალურ კოორდინატებში
- განტოლების განცალება და განცალების პარამეტრის პოვნა: კუთხური ნაწილი
- რადიალური ნაწილის ამოხსნა და ტალღური ფუნქციები
- დასკვნა

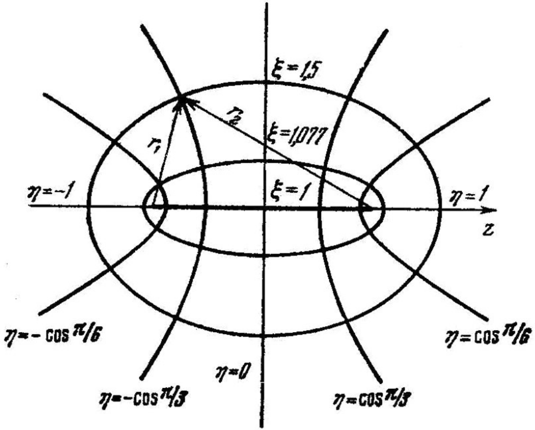
შრედინგერის სტაციონალური განტოლება კარტეზიანულ სისტემაში:

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

$(x,y,z) \to (\xi,\eta,\phi)$

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

$$1 \leq \xi < \infty, \quad -1 \leq \eta \leq 1, \quad 0 \leq \phi \leq 2\pi \tag{3}$$



შრედინგერის განტოლება სფეროიდალურ კოორდინატებში:

$$
\begin{aligned}
&\left\{-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left[\frac{4}{R^2(\xi^2-\eta^2)}\left(\frac{\partial}{\partial\xi}(\xi^2-1)\frac{\partial}{\partial\xi}+\frac{\partial}{\partial\eta}(1-\eta^2)\frac{\partial}{\partial\eta}\right)+\right.\right.\\
&\left.\left.+\frac{4}{R^2(\xi^2-1)(1-\eta^2)}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right]-\frac{2Ze^2}{R(\xi+\eta)}\right\}\Psi(\xi,\eta,\phi)=E\Psi(\xi,\eta,\phi)
\end{aligned}
\tag{4}
$$

$$\Psi(\xi,\eta,\phi,R) = X(\xi,R)Y(\eta,R)\Phi(\phi,R) \tag{5}$$

$$\Phi(\phi,R) = e^{im\phi} \tag{6}$$

რადიალური ნაწილი:

$$\frac{d}{d\xi}(\xi^2-1)\frac{dX(\xi)}{d\xi} + \left[\lambda + \frac{ER^2}{2}(\xi^2-1) + RZ\xi - \frac{m^2}{\xi^2-1}\right]X(\xi) = 0 \tag{7}$$

კუთხური ნაწილი:

$$\frac{d}{d\eta}(1-\eta^2)\frac{dY(\eta)}{d\eta} + \left[-\lambda + \frac{ER^2}{2}(1-\eta^2) - RZ\eta - \frac{m^2}{1-\eta^2})\right]Y(\eta) = 0 \tag{8}$$

$$\eta \to x = \frac{1+\eta}{2} \tag{9}$$

$$\left\{x(1-x)\frac{d^2}{dx^2}+\left[-tx(1-x)+c(1-x)-dx\right]\frac{d}{dx}+(-\lambda+tax)\right\}y(x)=0 \tag{10}$$

ამონახსნი ვეძებოთ მწკრივის სახით:

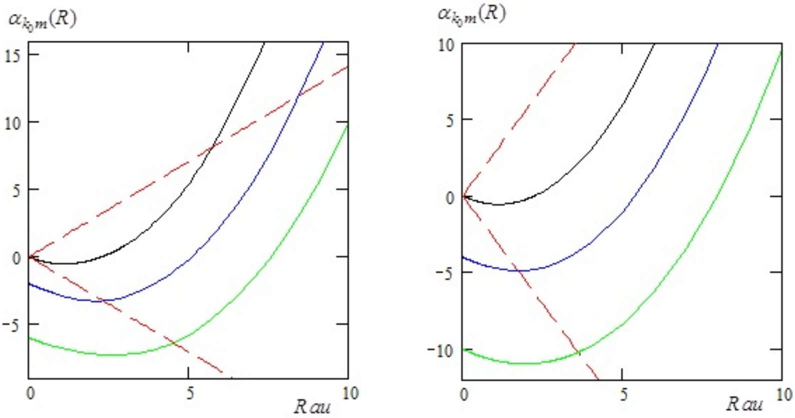
$$y(x)=\sum_{k=0}^{\infty} g_k x^k \tag{11}$$

რეკურენტული განტოლება:

$$A_k g_{k+1}+(B_k-\lambda)g_k+C_k g_{k-1}=0 \tag{12}$$

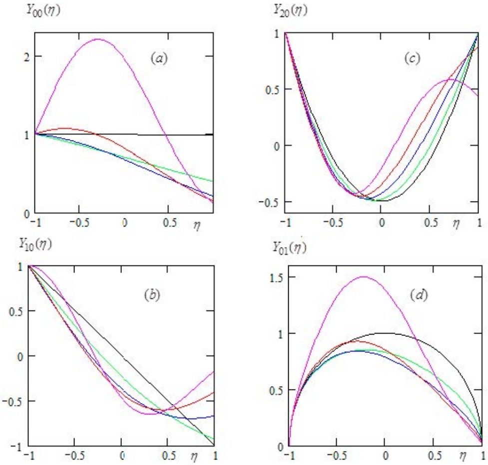
$$\alpha-B_{k_0}-\frac{A_{k_0-1}C_{k_0}}{\alpha-B_{k_0-1}-\frac{A_{k_0-2}C_{k_0-1}}{\alpha-B_{k_0-2}-\cdots-A_0C_1/(\alpha-B_0)}}=\frac{A_{k_0}C_{k_0+1}}{\alpha-B_{k_0+1}-\frac{A_{k_0+1}C_{k_0+2}}{\alpha-B_{k_0+2}-\dots}} \tag{13}$$

$$\alpha=\lambda+m^2+m-\Big(Z+ip(m+1)\Big)R \tag{14}$$



სურ: 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 $p>0$

$$Y_{k_0 m}(\eta) = (1-\eta^2)^{m/2} Re\left\{ e^{\pm i \frac{|p|R}{2}\eta} \sum_{k=0}^{\infty} g_k^{(\pm)} \left(\frac{1+\eta}{2}\right)^k \right\} \qquad (15)$$



სურ: 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

$$\left\{(x^2-1)\frac{d^2}{dx^2}+\left[2cx+ipR(x^2-1)\right]\frac{d}{dx}+ \left[\lambda+mc+R(Z+ipc)x\right]\right\}y(x)=0, \tag{16}$$

იაფეს (Jaffe) მწკრივი:

$$f_1(x)=(x+1)^{\sigma}\sum_{s=0}^{\infty}q_s t^s \tag{17}$$

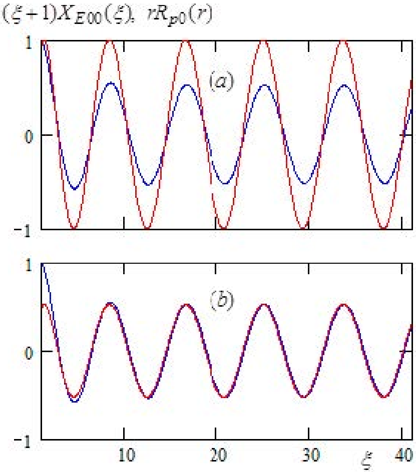
სადაც $q_{-1}=0$, $q_0=1$; $t=\frac{x-1}{x+1}$, რომლის ცვლილების არეა [0,1]; σ არის მუდმივი და უნდა განისაზღვროს.

$$\sigma=\frac{-R(Z+ipc)}{ipR}=\frac{iZ}{p}-c \tag{18}$$

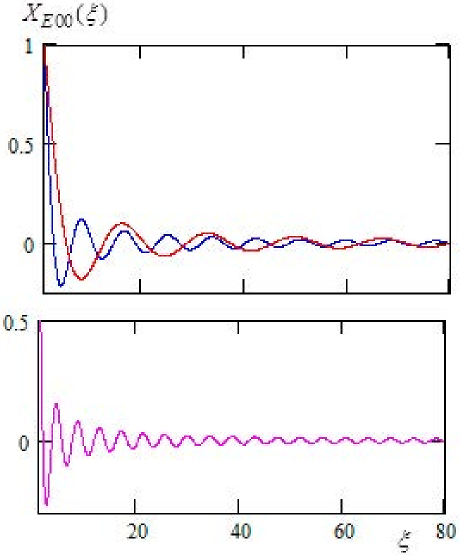
საიდანაც მივიღებთ რეკურენტულ განტოლებას:

$$A_s q_{s+1}-B_s q_s+C_s q_{s-1}=0; \tag{19}$$

$$X_{Ek_0 m}(\xi) = \frac{(\xi^2-1)^{\frac{m}{2}}}{(\xi+1)^{m+1}} Re\left\{ e^{i\frac{|p|R}{2}\xi}(\xi+1)^{i\frac{Z}{p}} \sum_{s=0}^{\infty} q_s^+ t^s \right\} \qquad (20)$$



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



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

ႣႠႱႩႥႬႠ

- მიღებულია კვაზი-კუთხური და კვაზი-რადიალური ტალღური ფუნქციები
- შედეგი გამოსადეგია ორი კულონური ცენტრის ამოცანის ამოსახსნელად
- ეს კი საჭიროა სხვადასხვა იონიზაციის და რეკომბინაციის პროცესების შესასწავლად
- Kereselidze, Ogilvie, Gamsakhurdashvili, "The hydrogen atom in spheroidal coordinates: the continuous spectrum"EPJD

გმადლობთ ყურადღებისთვის