კვანტური მექანიკის საფუძვლები

ლექტორი: თამაზ კერესელიძე

ივანე ჯავახიშვილის სახელობის თბილისის სახელმწიფო უნივერსიტეტის,
ზუსტ და საბუნებისმეტყველო მეცნიერებათა ფაკულტეტის პროფესორი

მაქს პლანკი (1858 - 1947)

ერნესტ რეზერფორდი (1871 - 1937)

ნილს ბორი (1885 - 1962)

ლუი დე ბროილი (1892 - 1987)

ერვინ შრედინგერი (1887 - 1961)

შრედინგერის სტაციონარული მდგომარეობის განტოლება

$$E = \hbar \mu$$

$$\vec{P} = \hbar \vec{k}$$

$$\Psi\left(\vec{r}, t\right) = A e^{i(\vec{k}\vec{r} - \mu t)}$$

$$\Delta \Psi (r, t) - \frac{k^2}{\mu^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \Psi (r, t) = 0$$

$$\Psi (\vec{r}, t) = \cdot \ (\vec{r}) e^{-i \mu t}$$

$$\Delta \cdot \ (\vec{r}) + k^2 \cdot \ (\vec{r}) = 0$$

$$\Delta \cdot \ (\vec{r}) + \frac{p^2}{\hbar^2} \cdot \ (\vec{r}) = 0$$

$$E = \frac{p^2}{2m} - V(\vec{r})$$

$$\Delta \cdot \ (\vec{r}) + \frac{2m}{\hbar^2} \left(E - V(\vec{r}) \right) \cdot \ (\vec{r}) = 0$$

ტალღური ფუნქციის ფიზიკური შინაარსი

$$\Psi(\vec{r}, t) = A e^{-\frac{i}{\hbar}(\vec{p}\vec{r} - Et)}$$

$$\int \left| \cdot (\vec{r}, t) \right|^2 d\vec{r} = 1$$

$$\Psi(\vec{r}, t) = \frac{1}{(2® \hbar)^{3/2}} e^{-\frac{i}{\hbar}(\vec{p}\vec{r} - Et)}$$

$$\left|\Psi(\vec{r}, t)\right| = \left| \cdot (\vec{r})\right| = \frac{1}{(2® \hbar)^3}$$

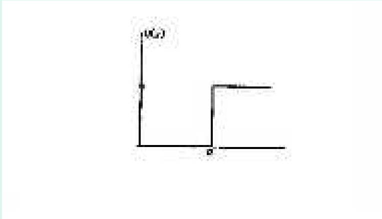
ჰაიზენბერგის განუზღვრელობის თანაფარდობა

$$\Delta p \Delta x \geq \hbar$$

სფერული სიმეტრიის უსასრულო სიღრმის პოტენციალური ორმო

$$V(r)=\begin{cases}0, & r<r_0\\ \infty, & r\geq r_0\end{cases}$$

$$x=r\sin\theta\cos\varphi$$
$$y=r\sin\theta\sin\varphi$$
$$z=r\cos\theta$$



$$\Delta\psi(\vec r)+\frac{2m}{\hbar^2}\left(E-V(\vec r)\right)\psi(\vec r)=0$$

$$\Delta=\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right)+\frac{\Delta_{\theta,\varphi}}{r^2}$$

$$\Delta_{\theta,\varphi}=\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{\sin\theta^2}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}$$

$$\psi(r,\theta,\varphi)=R_l(r)Y_{lm}(\theta,\varphi)$$

შრედინგერის რადიალური განტოლება

$$\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial R_l}{\partial r}\right)+\frac{2m}{\hbar^2}\left[E-V(r)-\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2}\right]R_l(r)=0$$

$$\frac{\partial^2 R_l}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial R_l}{\partial r} + \left[k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2}\right] R_l(r) = 0$$

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$$

$$R_l(r_0) = 0$$

ბესელის განზოგადოებული განტოლება

$$r^2 \frac{\partial^2 R_l}{\partial r^2} + 2r\frac{\partial R_l}{\partial r} + \left[k^2 r^2 - l(l+1)\right] R_l(r) = 0$$

$$R_l(r) = C_l \, j_l(kr)$$

$$j_l(kr) = 0$$

$$kr_0 = \text{²}_{nl}$$

ელექტრონის ენერგია უსასრულო სიღრმის პოტენციალურ ორმოში

$$E_{nl} = \frac{\hbar^2 k_{nl}^2}{2m} = \frac{\hbar^2 \text{²}_{nl}^2}{2mr_0^2}$$

დონეების თანმიმდევრობა უსასრულო სიღრმის სფერულ ორმოში

$3s - 9.4278$

$1g - 8.1830$

$2p - 7.7252$

$1f - 6.9879$

$2s - 6.2832$

$1d - 5.7634$

$1p - 4.4934$

$1s - 3.1426$

$l = 0 \quad l = 1 \quad l = 2 \quad l = 3 \quad l = 4$

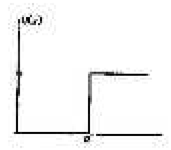
$$j_0(kr) = \frac{\sin kr}{kr}$$

$$j_1(kr) = \frac{\sin kr - kr\cos kr}{(kr)^2}$$

$$j_2(kr) = \frac{(3 - k^2r^2)\sin kr - 3kr\cos kr}{(kr)^3}$$

სფერული სიმეტრიის სასრული სიღრმის პოტენციალური ორმო

$$V(r)=\begin{cases}0, & r<r_0\\ V_0, & r\ge r_0\end{cases}$$



$$\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial R_l}{\partial r}\right)+\frac{2m}{\hbar^2}\left[E-V(r)-\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2}\right]R_l(r)=0$$

$$l=0$$

$$\text{¡}(r)=rR(r)$$

$$\frac{d^2\,\text{¡}(r)}{dr^2}+\frac{2m}{\hbar^2}E\,\text{¡}(r)=0 \qquad r<r_0$$

$$\frac{d^2\,\text{¡}(r)}{dr^2}+\frac{2m}{\hbar^2}\left[E-V_0\right]\text{¡}(r)=0 \qquad r\ge r_0$$

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \geq 0 \qquad \sim^2 = \frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2} \geq 0 \qquad k^2 + \sim^2 = \frac{2mV_0}{\hbar^2}$$

$$\frac{d^2\,\text{¡}(r)}{dr^2} + k^2\,\text{¡}(r) = 0 \qquad r < r_0$$

$$\frac{d^2\,\text{¡}(r)}{dr^2} - \sim^2\,\text{¡}(r) = 0 \qquad r \geq r_0$$

$$\text{¡}_{ins}(r) = A\sin(kr) \qquad r < r_0$$

$$\text{¡}_{out}(r) = Be^{-\sim r} \qquad r \geq r_0$$

$$\text{¡}_{ins}(r_0) = \text{¡}_{out}(r_0)$$

$$\left(\frac{d\,\text{¡}_{ins}}{dr}\right)_{r=r_0} = \left(\frac{d\,\text{¡}_{out}}{dr}\right)_{r=r_0}$$

$$\left(\frac{d}{dr}\ln\,\text{¡}_{ins}\right)_{r=r_0} = \left(\frac{d}{dr}\ln\,\text{¡}_{out}\right)_{r=r_0}$$

ტრანსცენდენტური განტოლება რომლის ფესვები გვაძლევენ ენერგეტიკულ დონეებს

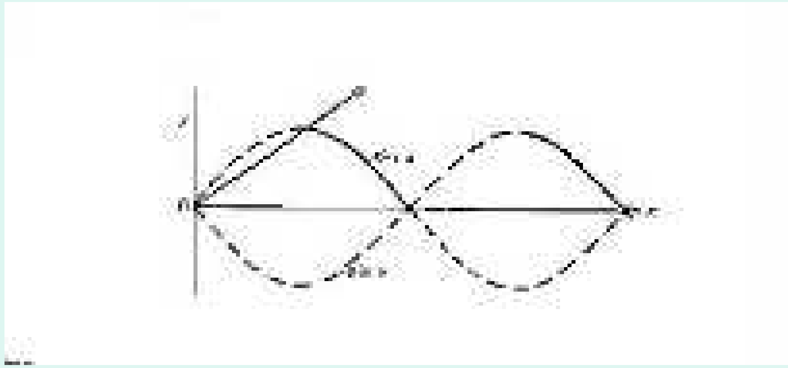
$$ctg(kr_0) = -\frac{\sim}{k}$$

$$ctg(kr_0) = -\frac{\sim}{k}$$

$$sin(kr_0) = \pm\frac{1}{\sqrt{1 + ctg^2(kr_0)}}$$

$$sin(kr_0) = \pm\frac{1}{\sqrt{1 + \sim^2 / k^2}}$$

$$sin(kr_0) = \pm\sqrt{\frac{\hbar^2}{2mV_0 r_0^2}}kr_0$$



დ ა ვ ა ლ ე ბ ა:

ჩაატარეთ რიცხვითი გამოთვლები და აჩვენეთ, რომ უსასრულო

სფერულ ორმოში დონეები მართლაც განლაგებულია

შემდეგი თანმიმდევრობით:

1s, 1p, 1d, 2s, 1f, 2p, 1g, 2d, 1h, 3s, 2f, …

ლიტერატურა:

1. ი. ვაშაკიძე, ვ. მამასახლისოვი, გ. ჭილაშვილი, კვანტური მექანიკა, თბილისის სახელმწიფო უნივერსიტეტის გამომცემლობა, თბილისი, 1978

2. გ. ჭილაშვილი, ორი და სამი ნაწილაკის კვანტური მექანიკა, თბილისის სახელმწიფო უნივერსიტეტის გამომცემლობა, თბილისი, 1973

3. L. D. Landau and E. M. Lifshitz, Quantum Mechanics , (Non-relativistic Theory), Elsevier, Singapore

4. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, Квантовая Механика, Наука, Москва, 1989

5. А. С. Давыдов, Квантовая Механика, Москва, 1973

გისურვებთ წარმატებას!

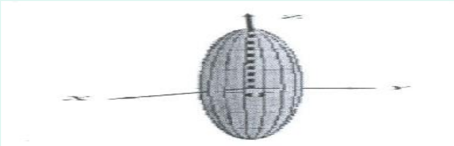
ელიფსოიდური ფორმის პოტენციალურ ორმოში ჩაჭერილი ნაწილაკის ენერგეტიკული დონეები და ტალღური ფუნქციები

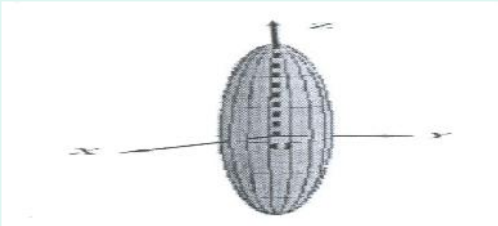
ლექტორი: თამაზ კერესელიძე

ივანე ჯავახიშვილის სახელობის თბილისის სახელმწიფო უნივერსიტეტის,
ზუსტ და საბუნებისმეტყველო მეცნიერებათა ფაკულტეტის პროფესორი

ნაწილაკი ელიფსოიდური ფორმის პოტენციალურ ველში

ბრუნვის ელიფსოიდი
(დიდი ნახევარღერძებით $a = b$ და მცირე ნახევარღერძით c)





$$\frac{x^2 + y^2}{a^2} + \frac{z^2}{c^2} = 1$$

ელიფსოიდური ფორმის პოტენციალურ ველში ჩაჭერილი
ნაწილაკის შრედინგერის განტოლება

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m^*}\Delta_{xyz}+V(x,y,z)\right]\Psi(x,y,z)=E\Psi(x,y,z)$$

$$V(x,y,z)=\begin{cases}0, & \dfrac{x^2+y^2}{a^2}+\dfrac{z^2}{c^2}<1\\[2ex] \infty, & \dfrac{x^2+y^2}{a^2}+\dfrac{z^2}{c^2}\geq 1.\end{cases}$$

$$\frac{x^2+y^2}{a^2}+\frac{z^2}{c^2}=1$$

A. B. Migdal 1959, in book of L. D. Landau and E. M. Lifshitz, Quantum Mechanics, Non-relativistic Theory,
B. Elsevier, Singapore, 2007

Tamaz Kereselidze, Tamar Tchelidze, Roman Ya. Kezerashvili, Physica E , v. 68, p. 65-71 (2015)

ნაწილაკი ელიფსოიდური ფორმის პოტენციალურ ველში

$$\P = \frac{r_0}{a}x, \quad \text{¦} = \frac{r_0}{a}y, \quad \mathsf{s} = \frac{r_0}{c}z$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m^*}\Delta_{\P\text{¦}\mathsf{s}} + U\left(\P,\text{¦},\mathsf{s}\right)\right]\Psi(\P,\text{¦},\mathsf{s}) = E\Psi(\P,\text{¦},\mathsf{s})$$

$$U\left(\P,\text{¦},\mathsf{s}\right) = \begin{cases} \sim\dfrac{\hbar^2}{2m^*}\left[\dfrac{c^2(a^2-r_0^2)}{r_0^2(c^2-a^2)}\Delta_{\P\text{¦}\mathsf{s}} + \dfrac{\partial^2}{\partial\mathsf{s}^2}\right], & \P^2+\text{¦}^2+\mathsf{s}^2<1, \\ \infty, & \P^2+\text{¦}^2+\mathsf{s}^2\geq 1. \end{cases}$$

$$\sim = \frac{r_0^2(c^2-a^2)}{a^2c^2}$$

$$\P^2+\text{¦}^2+\mathsf{s}^2 = r_0^2$$

ნაწილაკი სფერული ფორმის პოტენციალურ ველში

$$c = a = r_0 , \qquad \varepsilon = \frac{r_0^2 (c^2 - a^2)}{a^2 c^2} = 0$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \Delta_{r\theta\varphi} \Psi(r,\theta,\varphi) = E \Psi(r,\theta,\varphi)$$

$$\Psi^{(0)}_{nlm}(r,\theta,\varphi) = C_{nl}\, j_l(k_{nl} r) Y_{lm}(\theta,\varphi)$$

$$j_l(k_{nl} r_0) \equiv j_l(\xi_{nl}) = 0$$ ბესელის სფერული ფუნქციები

$$E^{(0)}_{nl} = \frac{\hbar^2 k_{nl}^2}{2m^*} = \frac{\hbar^2 \xi_{nl}^2}{2m^* r_0^2}$$ ენერგეტიკული სპექტრი

$$1s, 1p, 1d, 2s, 1f, 2p, 1g, 2d, 1h, \ldots$$

შეშფოთების თეორიის მიახლოება

$$E_{nlm} = E_{nl}^{(0)} + E_{nlm}^{(1)} + E_{nlm}^{2} + \cdots$$

$$\Psi_{nlm} = \Psi_{nl}^{(0)} + \Psi_{nlm}^{(1)} + \Psi_{nlm}^{2} + \cdots$$

$$E_{nlm}^{(1)} = -\frac{a^2 - r_0^2}{a^2} E_{nl}^{(0)} + \frac{\sim\hbar}{2m^*}\left\langle nlm \left| \frac{\partial^2}{\partial s^2} \right| nlm \right\rangle$$

$$E_{nlm}^{(2)} = \left(\frac{\sim\hbar^2}{2m^*}\right)^2 \sum_{n'l'm'} \frac{1}{E_{nl}^{(0)} - E_{n'l'}^{(0)}} \left|\left\langle n'l'm' \left| \frac{\partial^2}{\partial s^2} \right| nlm \right\rangle\right|^2$$

$$\Psi_{nlm}^{(1)} = \frac{\sim\hbar^2}{2m^*} \sum_{n'l'm'} \frac{1}{E_{nl}^{(0)} - E_{n'l'}^{(0)}} \left\langle n'l'm' \left| \frac{\partial^2}{\partial s^2} \right| nlm \right\rangle \Psi_{n'l'm'}^{(0)}$$

მატრიცული ელემენტები :

$$\left\langle n'l'm'\left|\frac{\partial^2}{\partial\sigma^2}\right|nlm\right\rangle \equiv \left\langle n'l'm'\left|\left(\cos\gamma\frac{\partial}{\partial r}-\frac{\sin\gamma}{r}\frac{\partial}{\partial\gamma}\right)\right|nlm\right\rangle$$

$$\left\langle n'lm'\left|\frac{\partial^2}{\partial\sigma^2}\right|nlm\right\rangle = A_l k_{nl}^2 \delta_{n'n}\delta_{m'm},$$

$$\left\langle n'l\pm 2m'\left|\frac{\partial^2}{\partial\sigma^2}\right|nlm\right\rangle = A_{l\pm 2}\frac{k_{nl}k_{n'l\pm 2}}{r_0^2\left(k_{nl}^2-k_{nl\pm 2}^2\right)}\delta_{m'm}$$

$$A_l = -\frac{l^2-m^2}{4l^2-1}-\frac{(l+1)^2-m^2}{4(l+1)^2-1},$$

$$A_{l-2} = -2(2l-1)\sqrt{\frac{(l-1)^2-m^2}{4(l-1)^2-1}}\sqrt{\frac{l^2-m^2}{4l^2-1}},$$

$$A_{l+2} = 2(2l+3)\sqrt{\frac{(l+1)^2-m^2}{4(l+1)^2-1}}\sqrt{\frac{(l+2)^2-m^2}{4(l+2)^2-1}}.$$

შეშფოთების თეორიით მიღებული ენერგიები და ტალღური ფუნქციები

$$
\begin{aligned}
E_{nlm} = \Bigg\{ & \frac{r_0^2}{a^2} + \sim \frac{1 - 2l(l+1) + 2m^2}{(2l-1)(2l+3)} + \sim^2 \left[A_{l+2}^2 B_{n,l+2}^{(3)} + A_{l-2}^2 B_{n,l-2}^{(3)} \right] \\
& + \sim^3 \left(\frac{c^2 (a^2 - r^2)}{r_0^2 (c^2 - a^2)} - A_l \right) \left[A_{l+2}^2 B_{n,l+2}^{(4)} + A_{l-2}^2 B_{n,l-2}^{(4)} \right] 2 \, {}^{2}_{nl} \Bigg\} E_{nl}^{(0)}
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
\Psi_{nlm} = \Psi_{nlm}^{(0)} + \sim \Bigg[& A_{l+2} \sum_{n'} \frac{2 \, {}_{n'l+2}}{\left(2 \, {}^{2}_{nl} - 2 \, {}^{2}_{n'l+2} \right)^2} \Psi_{n'l+2\,m}^{(0)} \\
& + A_{l-2} \sum_{n'} \frac{2 \, {}_{n'l-2}}{\left(2 \, {}^{2}_{nl} - 2 \, {}^{2}_{n'l-2} \right)^2} \Psi_{n'l-2\,m}^{(0)} \Bigg] 2 \, {}_{nl} + \sim^2 \Psi_{nlm}^{(2)}
\end{aligned}
$$

ჰამილტონიანის დიაგონალიზაციის მთოდი

ლუწი მდგომარეობები

$|1sm\rangle = |1m_g\rangle$ $|1dm\rangle = |2m_g\rangle$ $|2sm\rangle = |3m_g\rangle$ $|1gm\rangle = |4m_g\rangle$

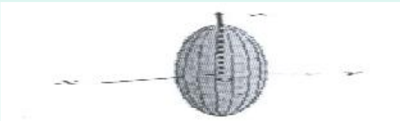
კენტი მდგომარეობები

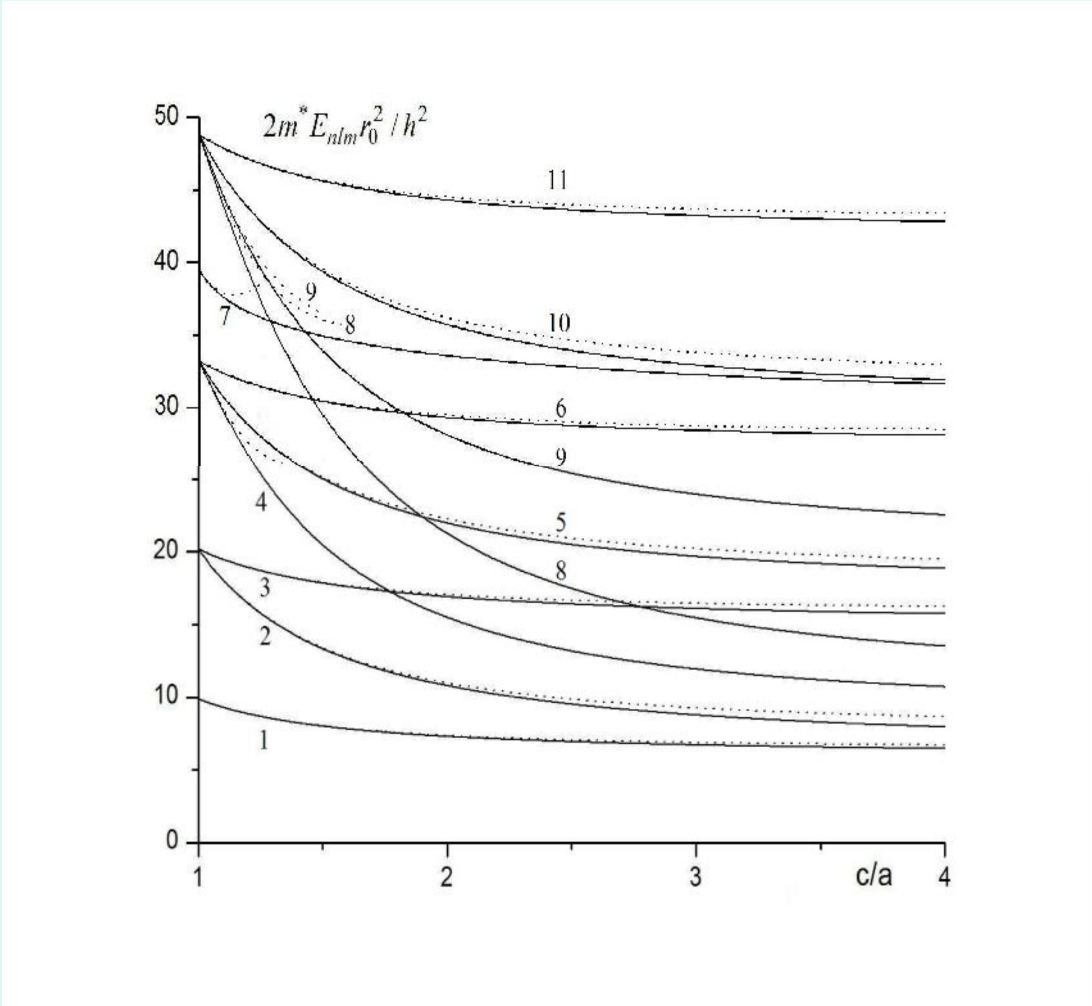
$|1pm\rangle = |1m_u\rangle$ $|1fm\rangle = |2m_u\rangle$ $|2pm\rangle = |3m_u\rangle$ $|1hm\rangle = |4m_u\rangle$

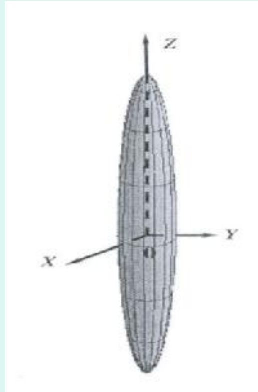
სეკულარული განტოლება

$$\begin{vmatrix} E-U_{11}, & -U_{12}, & -U_{13}, & 0, & \ldots\ldots \\ -U_{21}, & E-U_{22}, & -U_{23}, & -U_{24}, & \ldots\ldots \\ -U_{31}, & -U_{32}, & E-U_{33}, & 0, & \ldots\ldots \\ 0, & -U_{42}, & 0, & E-U_{44}, & \ldots\ldots \\ \ldots\ldots & \ldots\ldots & \ldots\ldots & \ldots\ldots & \ldots\ldots \end{vmatrix} = 0$$

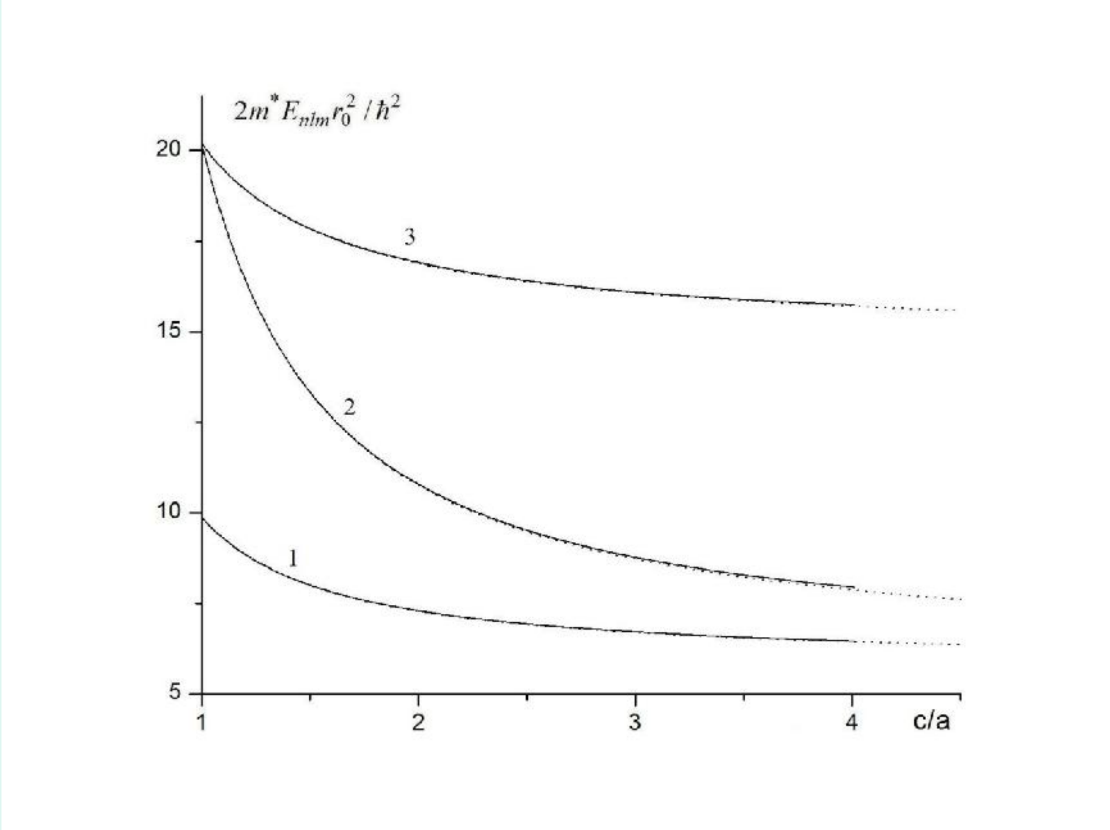
გამოთვლების შედეგები







შედარება რიცხვითი გამოთვლებით მიღებულ შედეგებთან



1. G. Cantele, D. Ninno and G. Iadonisi 2001 *Nano Letter* **1** 121
2. G. Cantele, D. Ninno and G. Iadonisi 2001 *Phys. Rev.* B **64** 125325
3. G. Cantele, G. Piacente, D. Ninno and G. Iadonisi 2002 *Phys. Rev*. B **66** 113308

განივად და გრძივად პოლარიზებული სინათლის გამოსხივების
ალბათობა

$$dW_{nm} = \frac{e}{\hbar c}\frac{\mu_{nm}^{3}}{2\circledR c^{2}}\left|\int \Psi_{m}^{*}(\vec{r})\left(\vec{\neg}\,\vec{d}\right)\Psi_{n}(\vec{r})d\vec{r}\right|^{2} d\Omega_{\vec{k}}$$

$$dW_{nm} = \frac{e}{\hbar c}\frac{\mu_{nm}^{3}}{2\circledR c^{2}}\left|\int \Psi_{m}^{*}(\vec{r})z\Psi_{n}(\vec{r})d\vec{r}\right|^{2} d\Omega_{\vec{k}}$$

$$\mu_{nm} = \frac{E_{n} - E_{m}}{\hbar}$$

საწყისი და საბოლოო მდგომარეობების ტალღური ფუნქციები

$$\Psi_{n_i l_i m_i} = j_{l_i}\left(k_{n_i l_i} r\right) Y_{l_i,m_i}(\text{g},\ddot{}\ ) + \sim\Big[\ \text{¡}_{\,l_i+2}(r) Y_{l_i+2,m_i}(\text{g},\ddot{}\ ) + \text{¡}_{\,l_i-2}(r) Y_{l_i-2,m_i}(\text{g},\ddot{}\ )\Big] + O(\sim^{2})$$

$$\Psi_{n_f l_f m_f} = j_{l_f}\left(k_{n_f l_f} r\right) Y_{l_f,m_f}(\text{g},\ddot{}\ ) + \sim\Big[\ \text{¡}_{\,l_f+2}(r) Y_{l_f+2,m_f}(\text{g},\ddot{}\ ) + \text{¡}_{\,l_f-2}(r) Y_{l_f-2,m_f}(\text{g},\ddot{}\ )\Big] + O(\sim^{2})$$

$$\text{¡}_{\,l\pm 2}(r) = A_{l\pm 2}\,{}^{2}{}_{nl} \sum_{n'} \frac{{}^{2}{}_{n'l\pm 2}}{\left({}^{2}\,{}^{2}_{nl} - {}^{2}\,{}^{2}_{n'l\pm 2}\right)^{2}} j_{l\pm 2}\left(k_{n'l\pm 2}\, r\right)$$

დიპოლური მომენტის ოპერატორის მატრიცული ელემენტები

$$d_z = -er\cos \mathrm{g}; \qquad d_{xy}^{\pm} = -e\left(x \pm iy\right) = -er\sin \mathrm{g}\, e^{\pm i \text{¨}}$$

$$\left\langle \Psi_{n_f l_f m_f} \left| d_z \right| \Psi_{n_i l_i m_i} \right\rangle = -e\Big\{ \left\langle j_{l_f} \left| r \right| j_{l_i} \right\rangle \left\langle Y_{l_i \pm 1, m_i} \left| \cos \mathrm{g} \right| Y_{l_i, m_i} \right\rangle$$

$$+ \sim \Big[\left\langle j_{l_f} \left| r \right| \mathrm{i}_{\,l_i+2} \right\rangle \left\langle Y_{l_f, m_i} \left| \cos \mathrm{g} \right| Y_{l_i+2, m_i} \right\rangle + \left\langle j_{l_f} \left| r \right| \mathrm{i}_{\,l_i-2} \right\rangle \left\langle Y_{l_f, m_i} \left| \cos \mathrm{g} \right| Y_{l_i-2, m_i} \right\rangle$$

$$+ \left\langle j_{l_i} \left| r \right| \mathrm{i}_{\,l_j+2} \right\rangle \left\langle Y_{l_f+2, m_i} \left| \cos \mathrm{g} \right| Y_{l_i, m_i} \right\rangle + \left\langle j_{l_i} \left| r \right| \mathrm{i}_{\,l_j-2} \right\rangle \left\langle Y_{l_f-2, m_i} \left| \cos \mathrm{g} \right| Y_{l_i, m_i} \right\rangle \Big]$$

$$+ O(\sim^2) \Big\}$$

$$\left\langle \Psi_{n_f l_f m_f} \left| d_{xy} \right| \Psi_{n_i l_i m_i} \right\rangle = -e\Big\{ \left\langle j_{l_f} \left| r \right| j_{l_i} \right\rangle \left\langle Y_{l_i \pm 1, m_i \pm 1} \left| \sin \mathrm{g}\, e^{\pm i \text{¨}} \right| Y_{l_i, m_i} \right\rangle$$

$$+ \sim \Big[\left\langle j_{l_f} \left| r \right| \mathrm{i}_{\,l_i+2} \right\rangle \left\langle Y_{l_f, m_i} \left| \sin \mathrm{g}\, e^{\pm i \text{¨}} \right| Y_{l_i+2, m_i} \right\rangle$$

$$+ \left\langle j_{l_f} \left| r \right| \mathrm{i}_{\,l_i-2} \right\rangle \left\langle Y_{l_f, m_i} \left| \sin \mathrm{g}\, e^{\pm i \text{¨}} \right| Y_{l_i-2, m_i} \right\rangle$$

$$+ \left\langle j_{l_i} \left| r \right| \mathrm{i}_{\,l_j+2} \right\rangle \left\langle Y_{l_f+2, m_i} \left| \sin \mathrm{g}\, e^{\pm i \text{¨}} \right| Y_{l_i, m_i} \right\rangle \Big]$$

$$+ \left\langle j_{l_i} \left| r \right| \mathrm{i}_{\,l_j-2} \right\rangle \left\langle Y_{l_f-2, m_i} \left| \sin \mathrm{g}\, e^{\pm i \text{¨}} \right| Y_{l_i, m_i} \right\rangle \Big] + O(\sim^2) \Big\}$$

დავალება:

უსასრულო სფეროიდალური ფორმის პოტენციალურ ორმოში ჩაჭერილი ელექტრონისთვის

დაწერეთ შრედინგერის განტოლება ; გადადით ახალ კოორდინატებზე $x = \frac{r_0}{a}x', \quad y = \frac{r_0}{a}y', \quad z = \frac{r_0}{c}z'$,

რომ ამოცანა დავიდეს სფერული ფორმის ორმოში ჩაჭერილი ელექტრონის პრობლემაზე და

შესაძლებელი გახდეს შეშფოთების თეორიის გამოყენება

გმადლობთ ყურადღებისთვის!

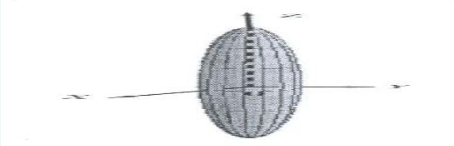
ელიფსოიდური ფორმის პოტენციალურ ორმოში ჩაჭერილი ნაწილაკის ენერგეტიკული დონეები და ტალღური ფუნქციები

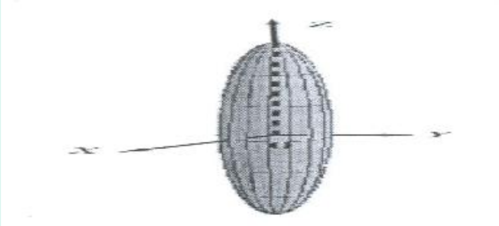
ლექტორი: თამაზ კერესელიძე

ივანე ჯავახიშვილის სახელობის თბილისის სახელმწიფო უნივერსიტეტის,
ზუსტ და საბუნებისმეტყველო მეცნიერებათა ფაკულტეტის პროფესორი

ნაწილაკი ელიფსოიდური ფორმის პოტენციალურ ველში

ბრუნვის ელიფსოიდი
(დიდი ნახევარღერძებით $a = b$ და მცირე ნახევარღერძით c)



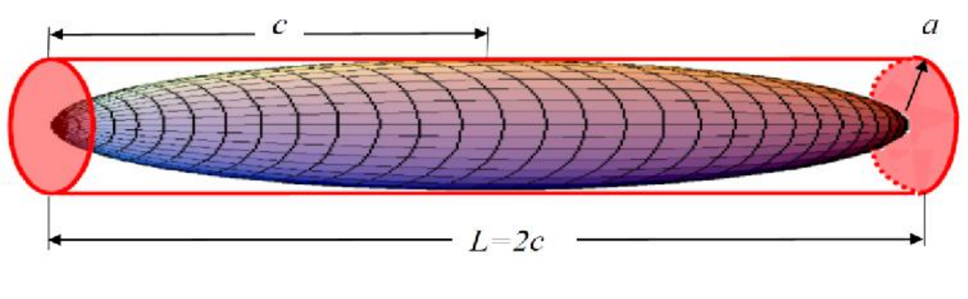


$$\frac{x^2 + y^2}{a^2} + \frac{z^2}{c^2} = 1$$

$$V(x,y,z) = \begin{cases} 0, & if \quad x,y,z \quad satisfy \quad \dfrac{x^2+y^2}{a^2} + \dfrac{z^2}{c^2} < 1 \\ \infty, & if \quad x,y,z \quad satisfy \quad \dfrac{x^2+y^2}{a^2} + \dfrac{z^2}{c^2} \geq 1. \end{cases}$$

Tamaz Kereselidze, Tamar Tchelidze, Roman Ya. Kezerashvili, Physica E , v. 68, p. 65-71 (2015))

,

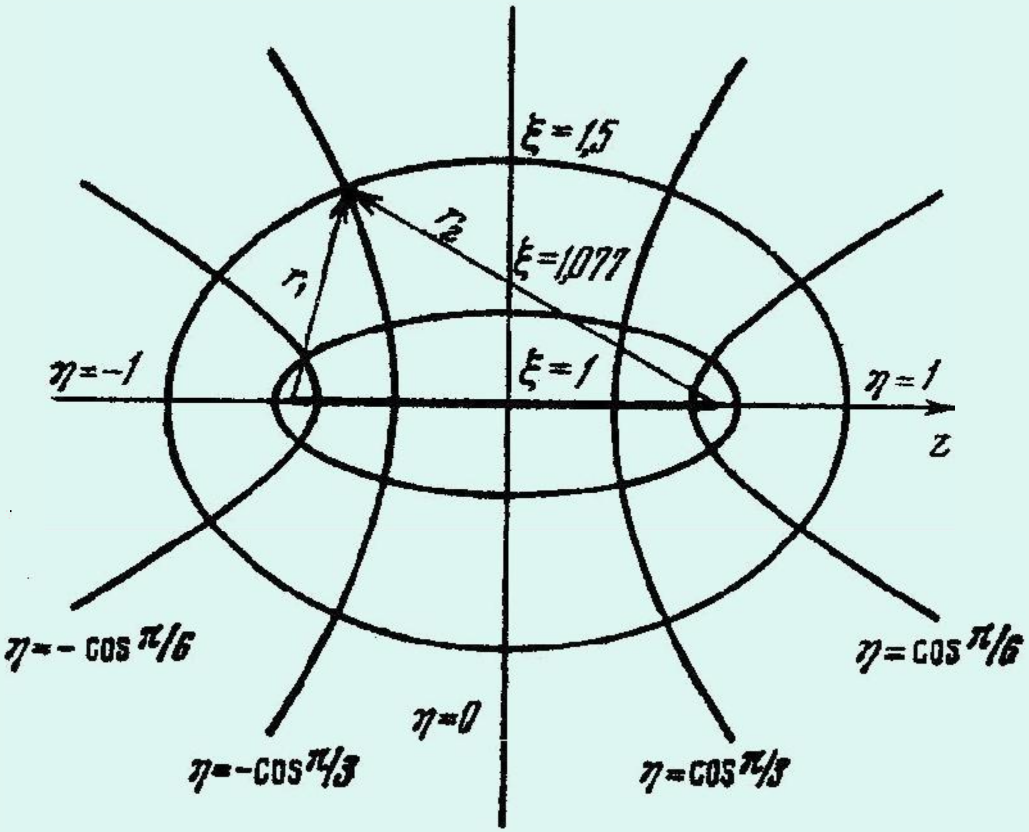


$$V(x,y,z)=\begin{cases} 0, & \text{if} \quad x,y,z \quad \text{satisfy} \quad \dfrac{x^2+y^2}{a^2}+\dfrac{z^2}{c^2}<1 \\ V_0, & \text{if} \quad x,y,z \quad \text{satisfy} \quad \dfrac{x^2+y^2}{a^2}+\dfrac{z^2}{c^2}\geq 1. \end{cases}$$

$$\frac{x^2+y^2}{a^2}+\frac{z^2}{c^2}=1$$

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m^*}\Delta_{xyz}+V(x,y,z)\right)\Psi(x,y,z)=E\Psi(x,y,z)$$

სფეროიდალურ კოორდინატთა სისტემა



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

$$1 \le \xi < \infty, \quad -1 \le \eta \le 1 \quad 0 \le \varphi < 2\pi$$

სფეროიდალურ კოორდინატთა სისტემა

$$x=\frac{R}{2}\sqrt{(¶^2-1)(1-¦^2)}\cos ¨$$

$$y=\frac{R}{2}\sqrt{(¶^2-1)(1-¦^2)}\sin ¨$$

$$z=\frac{R}{2}¶¦$$

ელიფსოიდის ზედაპირი სფეროიდალურ კოორდინატთა სისტემაში

$$\frac{(¶^2-1)(1-¦^2)}{a^2}+\frac{¶^2¦^2}{c^2}=\frac{4}{R^2}$$

$$4(c^2-a^2)=R^2$$

$$¶^*=\frac{1}{\sqrt{1-a^2/c}}$$

$$\Psi = X(\P)Y(\text{¦})e^{\pm im\ddot{}}$$

$$\frac{d^2V_{ins}(\text{¦})}{d\text{¦}^2}+\left[\frac{k^2R^2}{4}-\frac{\mathrm{a}_{ins}}{1-\text{¦}^2}+\frac{1-m^2}{(1-\text{¦}^2)^2}\right]V_{ins}(\text{¦})=0 \qquad k=\sqrt{2m^*E/\hbar^2}$$

$$\frac{d^2U_{out}(\P)}{d\P^2}+\left[-\frac{\sim^2R^2}{4}+\frac{\mathrm{a}_{out}}{\P^2-1}+\frac{1-m^2}{(\P^2-1)^2}\right]U_{out}(\P)=0 \qquad \sim\ =\sqrt{\ ^2-k^2} \qquad =\sqrt{2m^*V_0/\hbar^2}$$

$$\frac{d^2U_{ins}(\P)}{d\P^2}+\left[\frac{k^2R^2}{4}+\frac{\mathrm{a}_{ins}}{\P^2-1}+\frac{1-m^2}{(\P^2-1)^2}\right]U_{ins}(\P)=0$$

$$\frac{d^2V_{ins}(\text{¦})}{d\text{¦}^2}+\left[\frac{k^2R^2}{4}-\frac{\mathrm{a}_{ins}}{1-\text{¦}^2}+\frac{1-m^2}{(1-\text{¦}^2)^2}\right]V_{ins}(\text{¦})=0$$

inside

$$\frac{d^2V_{out}(\text{¦})}{d\text{¦}^2}+\left[-\frac{\sim^2R^2}{4}-\frac{\mathrm{a}_{out}}{1-\text{¦}^2}+\frac{1-m^2}{(1-\text{¦}^2)^2}\right]V_{out}(\text{¦})=0$$

$$\frac{d^2U_{out}(\P)}{d\P^2}+\left[-\frac{\sim^2R^2}{4}+\frac{\mathrm{a}_{out}}{\P^2-1}+\frac{1-m^2}{(\P^2-1)^2}\right]U_{out}(\P)=0$$

outside

$$\Psi = X(\P)Y(\text{¦})e^{\pm im\text{¨}}$$

$$X_{ins}(\P^*)Y_{ins}(\text{¦}) = X_{out}(\P^*)Y_{ins}(\text{¦})$$

$$\P^* = \frac{1}{\sqrt{1 - a^2 / c}}$$

$$Y_{ins}(\text{¦}) = \frac{X_{out}(\P^*)}{X_{ins}(\P^*)} Y_{ins}(\text{¦})$$

$$Y_{ins}(\text{¦}) = const Y_{ins}(\text{¦})$$

$$const = \frac{X_{ins}(\P^*)}{X_{out}(\P^*)}$$

$$\text{a}_{ins}^{ev,od} = \frac{R^2}{4}\left[k^2 - \left(\frac{t_{n_{ev,od}}}{c}\right)^2\right] + O\left(R^{-1}\right)$$

$$V_{ins}(¦, \text{a}_{ins}) = V_{out}(¦, \text{a}_{out}) + O(R^{-1})$$

$$\text{a}_{out} = \text{a}_{ins} - \;^2R^2$$

ტალღური ფუნქციები

$$U_{ins}(¶) = J\left(\sqrt{2\text{a}_{ins}(¶^* - 1)}\right) + O(R^{-1})$$

$$U_{out} = W_{«,m/2}\left(\sim R(¶ - 1)\right) + O(R^{-1})$$

$$J_m\left(\sqrt{2\text{a}_{ins}(¶^* - 1)}\right) = 0$$

ნაწილაკი ელიფსოიდური ფორმის პოტენციალურ ველში

$$\left(\frac{1}{J_m}\frac{dJ_m}{d\P}+\frac{1}{2(\P-1)}\right)_{\P=\P^*} = \left(\frac{1}{W_{\text{«},m/2}}\frac{dW_{\text{«},m/2}}{d\P}\right)_{\P=\P^*}$$

$$\left[\frac{x^2J_m(x)}{xJ_{m+1}(x)-mJ_m(x)}\right]_{x=\sqrt{2\text{ª}_{ins}(\P^*-1)}} = \frac{2\text{ª}_{ins}}{\sim R}\left[1-\frac{m}{y}+\text{i}_{\text{«},m/2}(y)\right]^{-1}_{y=\sim R(\P^*-1)}$$

$$\text{i}_{\text{«},m/2}(y)=\frac{(m+1-2\text{«})}{y^{1/2}}\frac{W_{\text{«}-1/2,(m+1)/2}(y)}{W_{\text{«},m/2}(y)}$$

$$\sim\ = \sqrt{\frac{2m^*V_0}{\hbar^2}-k^2}$$

$$E_{smn_{ev,od}} = E^0_{smn_{ev,od}}\left(1-\frac{\Omega_{smn_{ev,od}}}{\sqrt{V_0}}\right)$$

$$\Omega=\sqrt{\frac{2}{m^*}}\frac{\hbar}{k_0^2}\left[\frac{2\text{²}^{\,2}_{s,m}}{R^3(\P^*-1)^2}\left(1+\text{i}_{\text{«}_0,m/2}(y_0)\right)^{-1}+\frac{\text{®}^2n^2_{ev,od}}{2^{3/2}c^3}\right]$$

ელიფსოიდური ფორმის უსასრულო სიღრმის პოტენციალურ ორმოში ჩაჭერილი ნაწილაკის ენერგეტიკული სპექტრი

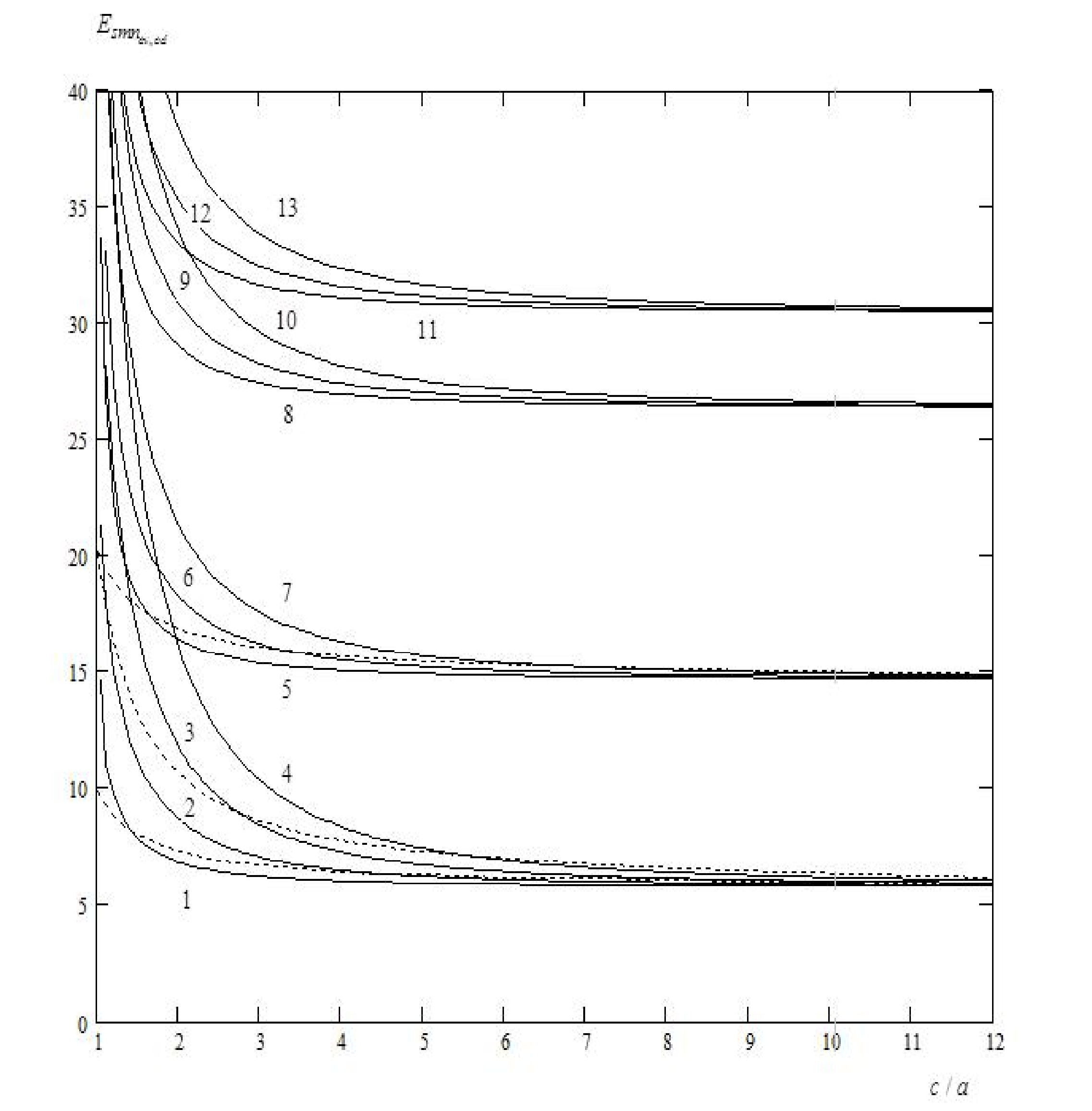
$$E^0_{smn_{ev,od}} = \frac{\hbar^2}{2m^*}\left[\frac{2^{\,2}_{\,s,m}}{2\left(c\sqrt{c^2-a^2}-(c^2-a^2)\right)} + \left(\frac{\text{®}\, n_{ev,od}}{2c}\right)^2\right]$$

$$n_{ev} = 1, 3, 5, \ldots \qquad n_{od} = 2, 4, 6, \ldots$$

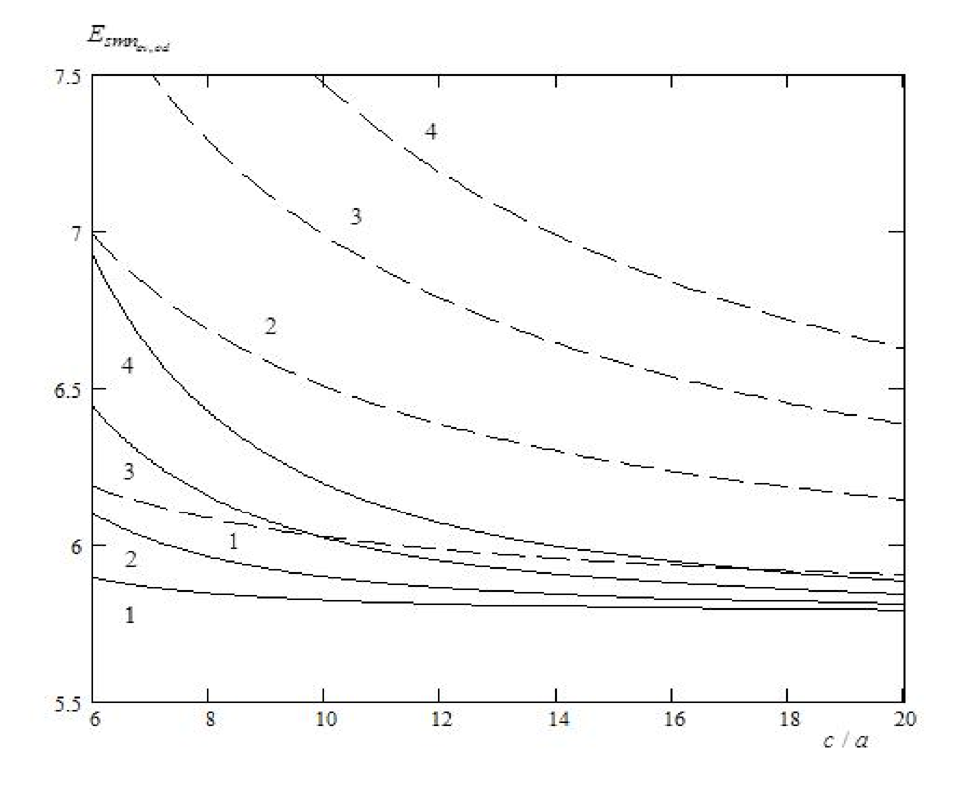
ექვიდისტანტური დონეები

$$E_{smn} = \frac{\hbar^2}{2m^*}\left[\frac{2^{\,2}_{\,s,m}}{a^2} + \frac{2^2{}_{s,m}}{ac}\left(n+\frac{1}{2}\right)\right]$$

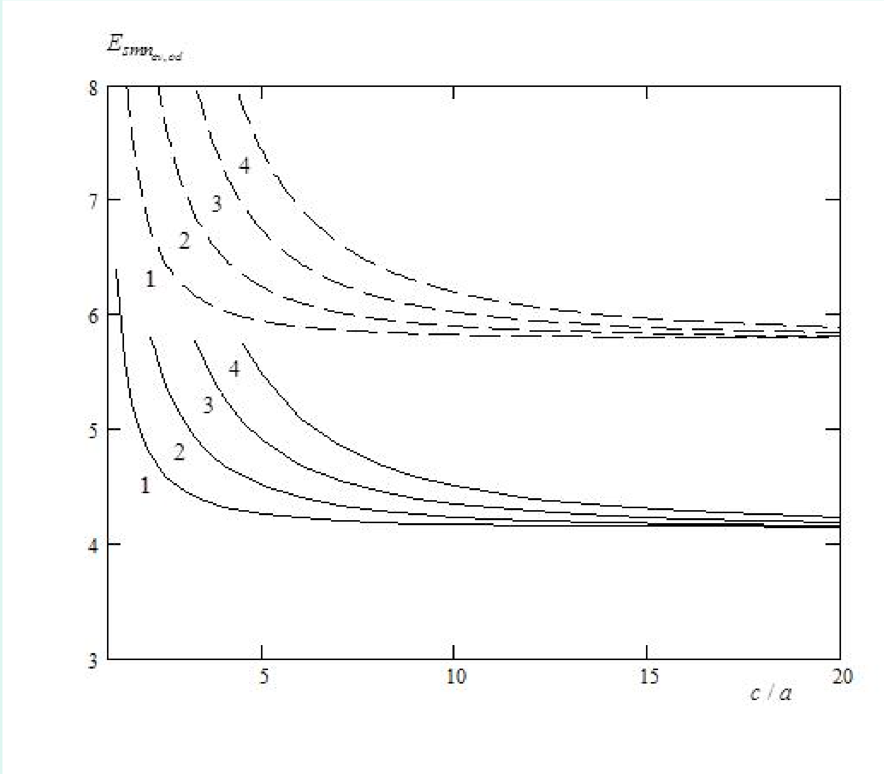
$$n = 0, 2, 3, 4, \ldots$$



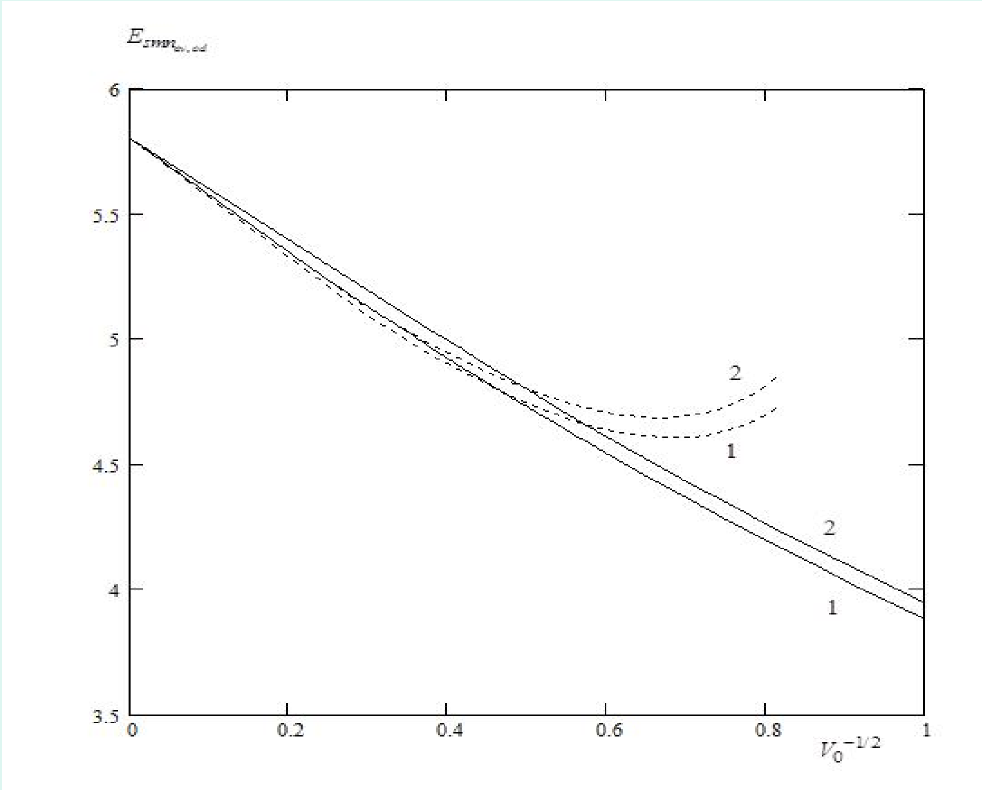
ელიფსოიდური ფორმის პოტენციალურ ველში ჩაჭერილი ნაწილაკის ენერგეტიკული სპექტრი



ელიფსოიდური ფორმის პოტენციალურ ველში ჩაჭერილი ნაწილაკის ენერგეტიკული სპექტრი;
არაექვიდისტანტური დონეები - უწყვეტი მრუდები;
ექვიდისტანური დონეები - წყვეტილი მრუდები



ელიფსოიდური ფორმის პოტენციალურ ველში ჩაჭერილი ნაწილაკის ენერგეტიკული სპექტრი;
სასრული სიღრმის პოტენციალური ორმო - უწყვეტი მრუდები;
უსასრულო სიღრმის პოტენციალური ორმო - წყვეტილი მრუდები



ელიფსოიდური ფორმის პოტენციალურ ველში ჩაჭერილი ნაწილაკის ენერგეტიკული სპექტრი;
ტრანსცენდენტული განტოლების ამოხსნით მიღებული შედეგი - უწყვეტი მრუდები;
ანალიზური ფორმულა - წყვეტილი მრუდები

ლიტერატურა:

1. Tamaz Kereselidze, Tamar Tchelidze, Roman Ya. Kezerashvili, Physica E , v. 68, p. 65-71 (2015))

2. Tamaz Kereselidze, Tamar Tchelidze, Teimuraz Nadareishvili and Roman Ya. Kezerashvili, Physica E (2015) (submitted for consideration)

3. Tamar Tchelidze, Tamaz Kereselidze, Teimuraz Nadareishvili, Thin Solid Films, 594, 328-332 (2015)

დავალება:

სასრული სიღრმის და ელიფსოიდური ფორმის პოტენციალური ორმოში ჩაჭერილი ელექტრონისთვის დაწერეთ შრედინგერის განტოლება, გადადით სფეროიდალურ კოორდინატთა სისტემაზე და განაცალეთ ცვლადები. მიიღეთ ორი ბმული განტოლებისგან შედგენილი სისტემა.

$$\Delta = \frac{4}{R^2(\P^2-1)(1-\text{¦}^2)}\left[\frac{\partial}{\partial \P}\left(\P^2-1\right)\frac{\partial}{\partial \P} + \frac{\partial}{\partial \text{¦}}\left(\text{¦}^2-1\right)\frac{\partial}{\partial \text{¦}} + \frac{\P^2-\text{¦}^2}{(\P^2-1)(1-\text{¦}^2)}\frac{\partial^2}{\partial \text{¨}^2}\right]$$

გისურვებთ წარმატებას!