თავი IX

მოძრაობა ცენტრალურ ველში

ცენტრალური სიმეტრიის ველში მოძრაობის ამოცანა ერთ-ერთი მნიშვნელოვანი ამოცანაა. ცენტრალური ველის პოტენციალური ენერგია ნაწილაკებს შორის გავლებული რადიუსვექტორის მხოლოდ სიდიდეზეა დამოკიდებული. ეს იმას ნიშნავს, რომ ცენტრიდან ერთსა და იმავე მანძილზე ყველა მიმართულებით ველს ერთი და იგივე მნიშვნელობა აქვს. ამიტომაც ცენტრალური სიმეტრიის ველს ხშირად სფერული სიმეტრიის ველსაც უწოდებენ. ცენტრალურ ველს ის დამახასიათებელი თავისებურება აქვს, რომ ამ ველში სისტემა კიდევაც რომ იზოლირებული არ იყოს, ადგილი აქვს იმპულსის მომენტის შენახვის კანონს. ამიტომ მდგომარეობის დასახასიათებლად ერთ-ერთ სიდიდედ შეგვიძლია ავიღოთ მომენტის კვადრატი და მისი z-პროექცია.

აღსანიშნავია, რომ როგორც ატომის ისე ატომბირთვის ფიზიკაში ურთიერთქმედების პოტენციალები მთლიანად თუ არა, ძირითადად მაინც ცენტრალურ ხასიათს ატარებენ. ამიტომაც ამ ველში მოძრაობას დეტალურად შევისწავლით.

§ 63. შრედინგერის რადიალური ფუნქციების განტოლება

განვიხილოთ ორი ნაწილაკის მოძრაობა მასებით m_1 და m_2. ვთქვათ, ამ ნაწილაკების ურთიერთქმედების ენერგია დამოკიდებულია ამ ნაწილაკებს შორის გავლებული რადიუსვექტორის აბსოლუტურ სიდიდეზე $r=|\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2|$, სადაც $\mathbf{r}_1$ და $\mathbf{r}_2$ პირველი და მეორე ნაწილაკის რადიუსვექტორებია, ათვლილი რაიმე უძრავი წერტილიდან. როგორც ვიცით, ასეთი ამოცანის შესაბამისი შრედინგერის განტოლება შეგვიძლია დავიყვანოთ ორ განტოლებაზე, რომელთაგან ერთი აღწერს სიმძიმის ცენტრის თავისუფალ მოძრაობას, ხოლო მეორე—ამ ორი ნაწილაკის ურთიერთფარდობით მოძრაობას $\mu=m_1m_2/(m_1+m_2)$ დაყვანილი მასით. ჩვენი მიზანია ნაწილაკთა ფარდობითი მოძრაობის შესწავლა, ამიტომ გამოვალთ შრედინგერის შემდეგი განტოლებიდან [1]:

$$\Delta\psi(\mathbf{r})+\frac{2\mu}{\hbar^2}[E-V(r)]\psi(\mathbf{r})=0, \tag{63,1}$$

სადაც Δ ლაპლასის ოპერატორია ფარდობით კოორდინატებში, E კი—ფარდობითი მოძრაობის სრული ენერგია. შესაბამის ჰამილტონიანს ექნება შემდეგი სახე:

$$\hat{H}=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta+V(r). \tag{63,2}$$

[1] თუ გვაინტერესებს სისტემის როგორც მთლიანის მოძრაობა, (63,1) განტოლების ამონახსნი უნდა გავამრავლოთ სიმძიმის ცენტრის თავისუფალი მოძრაობის შესაბამის ბრტყელ ტალღაზე.

რადგან ველი ცენტრალური სიმეტრიისაა, ამიტომ ხელსაყრელია სფერულ კოორდინატებზე გადასვლა. ამისათვის კი საკმარისია ლაპლასიანის გამოხატვა ამ კოორდინატებში. გვექნება

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) - \frac{\hbar^2}{2\mu r^2}\Delta_{\Theta,\varphi} + V(r), \tag{63,3}$$

სადაც

$$\Delta_{\Theta,\varphi} = \frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}. \tag{63,4}$$

ჩვენთვის უკვე კარგად ცნობილი ლეჟანდრის ოპერატორია. გავიხსენოთ რომ ამ ოპერატორთან დაკავშირებულია მომენტის კვადრატის ოპერატორი $\hat{\mathbf{l}}^2 = -\hbar^2\Delta_{\Theta\varphi}$. ამის მიხედვით ცენტრალური სიმეტრიის ველში მოძრაობის ჰამილტონიანისათვის გვექნება შემდეგი გამოსახულება:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2\mu r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{\hat{\mathbf{l}}^2}{2\mu r^2} + V(r). \tag{63,5}$$

ცენტრალურ ველში ადგილი აქვს მომენტის კვადრატისა და მისი z-პროექციის შენახვას, ინახება აგრეთვე ლუწობაც. გარდა ამისა, თუ განვიხილავთ სტაციონარულ შემთხვევას, შეინახება ენერგიაც. ცენტრალურ ველში ლუწობა განისაზღვრება მომენტის საშუალებით $I=(-1)^l$, ამიტომ დამოუკიდებელი მოძრაობის ინტეგრალთა რიცხვი სამის ტოლი იქნება. ეს სიდიდეებია: ენერგია E, მომენტის კვადრატი $\mathbf{l}^2$ და მომენტის z-პროექცია l_z. რადგან ამ სიდიდეების შესაბამისი ოპერატორები ურთიერთკომუტატურებია

$$[\hat{H}, \hat{\mathbf{l}}^2] = [\hat{H}, \hat{l}_z] = [\hat{\mathbf{l}}^2, \hat{l}_z] = 0, \tag{63,6}$$

ამიტომ ამ სამ ოპერატორს ექნება საერთო საკუთარი ფუნქცია და იმ მდგომარეობაში, რომელიც ამ საკუთარი $\psi(r,\theta,\varphi)$ ფუნქციით ხასიათდება, ერთდროულად და ზუსტად გაიზომება სამი სიდიდე: ენერგია, მომენტის კვადრატი და მომენტის z-პროექცია.

მაშასადამე, ჩვენი მიზანია ვიპოვოთ ისეთი $\psi(r,\theta,\varphi)$ ტალღური ფუნქცია, რომელიც საერთო საკუთარი ფუნქცია იქნება $\hat{H}$, $\hat{\mathbf{l}}^2$ და $\hat{l}_z$ სამი ოპერატორისა, ე. ი.

$$\begin{aligned} \hat{H}\psi &= E\psi, \\ \hat{\mathbf{l}}^2\psi &= \mathbf{l}^2\psi, \\ \hat{l}_z\psi &= l_z\psi. \end{aligned} \tag{63,7}$$

ეს იმას ნიშნავს, რომ ცენტრალურ ველში ჩვენ გვაინტერესებს ისეთი ამონახსნები, როცა ენერგიის გარდა განსაზღვრულია მომენტიც.

იმპულსის მომენტის საკუთარი ფუნქციებისა და საკუთარი მნიშვნელობების განხილვის დროს ჩვენ დავამტკიცეთ, რომ (63,7) ორ ბოლო განტოლებას აქვს საერთო საკუთარი ფუნქცია.

$$\psi(r,\theta,\varphi) = R(r)Y_{lm}(\theta,\varphi), \tag{63,8}$$

სადაც $Y_{lm}(\theta,\varphi)$ სფერული ფუნქციაა, $R(r)$ კი—რადიუსვექტორის სიდიდის ნებისმიერი ფუნქცია. აღნიშნული ორი ოპერატორის საკუთარი მნიშვნელობები განისაზღვრებიან ფორმულებით:

$$\mathbf{l}^2=\hbar^2 l(l+1),$$
$$l_z=m\hbar. \tag{63,9}$$

როგორც ვხედავთ, მომენტი განსაზღვრულია, როცა ვიცით l. მომენტის პროექციის ცოდნა კი ეკვივალენტურია m-ის განსაზღვრის. ამგვარად, შეგვიძლია დავასკვნათ, რომ ცენტრალურ ველში გასაზომ სიდიდეთა სრულ კრებულს წარმოადგენს: E, l და m.

ახლა ნებისმიერი $R(r)$ ფუნქცია ისე შევარჩიოთ, რომ დაკმაყოფილდეს (63,7)-ის პირველი განტოლებაც. ეს განტოლება (63,5) გამოხატულების გათვალისწინებით ასეც შეგვიძლია გადავწეროთ:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial\psi}{\partial r}\right)+\frac{\hat{\mathbf{l}}^2}{2\mu r^2}\psi+V(r)\psi=E\psi \tag{63,10}$$

ამ განტოლებაში შევიტანოთ (63,8) ფუნქცია და გავითვალისწინოთ, რომ $\hat{\mathbf{l}}^2 Y_{lm}(\theta,\varphi)=\hbar^2 l(l+1)Y_{lm}(\theta,\varphi)$; სფერულ ფუნქციაზე შეკვეცის შემდეგ მივიღებთ

$$\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial R_l}{\partial r}\right)+\frac{2\mu}{\hbar^2}\left[E-V(r)-\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2}\right]R_l(r)=0. \tag{63,11}$$

ამ განტოლებას უწოდებენ შრედინგერის რადიალური ფუნქციების განტოლებას. რადგან განტოლებაში შედის l კვანტური რიცხვი, ცხადია ამონახსნიც დამოკიდებული იქნება ამ რიცხვზე, ამიტომ $R(r)$ ფუნქციას l ინდექსი მივუწერეთ. თუ (63,11), განტოლების ამონახსნს გავამრავლებთ სფერულ $Y_{lm}(\theta,\varphi)$ ფუნქციაზე, მაშინ მივიღებთ შრედინგერის (63,1) განტოლების ამონახსნს განსაზღვრული მომენტით. ეს ამონახსნი საერთო საკუთარი ფუნქცია იქნება (63,7) სამივე განტოლებისა. რადგან $Y_{lm}(\theta,\varphi)$ სფერული ფუნქციის სახე ჩვენთვის ცნობილია, ამიტომ ცენტრალური სიმეტრიის ველში საკმარისია მხოლოდ შრედინგერის (63,11) რადიალური ფუნქციების განტოლების ამოხსნა. შევნიშნოთ, რომ ამ განტოლების ამონახსნი დამოკიდებული იქნება l-ზე და დამოკიდებული არ იქნება m კვანტურ რიცხვზე, რამდენადაც (63,11) განტოლება m რიცხვს არ შეიცავს. ამიტომ ნებისმიერ ცენტრალური სიმეტრიის ველში გვექნება $2l+1$ ჯერადი გადაგვარება, ე. ი. ენერგიის ერთ მნიშვნელობას შეესაბამება $2l+1$ ფუნქცია. ამ გადაგვარებას მოკლედ „m"-გადაგვარებას ვუწოდებთ.

გარკვეული აღნიშვნის შემოღებით შრედინგერის (63,11) რადიალური ფუნქციების განტოლებიდან შეგვიძლია ამოვაგდოთ პირველი რიგის წარმოებული. მართლაც, ვთქვათ

$$R_l(r)=\frac{\chi_l(r)}{r}, \tag{63,12}$$

მაშინ მივიღებთ შემდეგ განტოლებას:

$$\frac{d^2\chi_l(r)}{dr^2}+\frac{2\mu}{\hbar^2}\left[E-V(r)-\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2}\right]\chi_l(r)=0. \tag{63,13}$$

ეს განტოლება ისეთივეა, როგორიც შრედინგერის ერთგანზომილებიანი განტოლება, ოღონდ პოტენციალურ ენერგიას ემატება წევრი

$$V_l(r)=\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2}=\frac{\mathbf{l}^2}{2\mu r^2}, \tag{63,14}$$

რომელსაც, კლასიკური მექანიკის ანალოგიით, ცენტრგამშორ პოტენციალურ ენერგიას უწოდებენ. კერძო შემთხვევაში, როცა $l=0$, $V_0(r)=0$ და გვექნება ერთგანზომილებიანი შრედინგერის განტოლება $V(r)$ პოტენციალური ენერგიისათვის. ოღონდ უნდა გვახსოვდეს, რომ ცენტრალურ ველში მოძრაობა შემოსაზღვრულია ცალი მხრით $0\leqslant r\leqslant\infty$, წინააღმდეგ ნამდვილი ერთგანზომილებიანი მოძრაობისა, როცა x ცვლადი გავრცელებულია მთელს x-ღერძზე $-\infty\leqslant x\leqslant+\infty$. გარდა ამისა, თუ ერთგანზომილებიანი მოძრაობის დროს $\psi(x)$ ფუნქციას ვთხოვდით, რომ სათავეში სასრული ყოფილიყო, $\chi_l(r)$ ფუნქცია სათავეში ნულის ტოლი უნდა იყოს, რათა $R_l(r)=\chi_l(r)/r$ ფუნქცია $r=0$ წერტილში სასრული გამოვიდეს.

რადგან ცენტრალურ ველში მომენტს აქვს გარკვეული მნიშვნელობა და იგი განისაზღვრება აზიმუტალური l კვანტური რიცხვით, ამიტომ მდგომარეობის დახასიათებაში მონაწილეობას იღებს l-სიდიდე. შემოღებულია შემდეგი აღნიშვნები: $l=0$-ს უწოდებენ s-მდგომარეობას, $l=1$-ს კი p-მდგომარეობას და ა. შ.

$$\begin{array}{l} l=0,\ 1,\ 2,\ 3,\ 4,\ 5,\ 6,\ldots \\ \quad s,\ p,\ d,\ f,\ g,\ h,\ i,\ldots \end{array} \tag{63,15}$$

რადიალური ტალღური ფუნქციების ნორმირება. ჯერ განვიხილოთ დისკრეტული სპექტრის შემთხვევა. როგორც ვიცით ამ შემთხვევაში ტალღური ფუნქცია შეგვიძლია ვანორმიროთ ერთზე

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(r,\theta,\varphi)\,\psi(r,\theta,\varphi)\,r^2dr\,d\Omega=1. \tag{63,16}$$

შევიტანოთ ამ გამოსახულებაში (63,8) ფუნქცია და გავითვალისწინოთ, რომ სფერული ფუნქციები ნორმირებულია; მაშინ ჩვენ მივიღებთ ნორმირების პირობას რადიალური ტალღური ფუნქციისათვის

$$\int_0^\infty [R_l(r)]^2r^2dr=1. \tag{63,17}$$

თუ ამ ინტეგრალში შევიტანთ (63,12) აღნიშვნას, მაშინ $\chi_l(r)$ ფუნქციისათვის გვექნება ნორმირების შემდეგი პირობა:

$$\int_0^\infty |\chi_l(r)|^2dr=1. \tag{63,18}$$

ახლა განვიხილოთ ნორმირების პირობა უწყვეტი სპექტრის შემთხვევაში. უწყვეტი სპექტრის ფუნქცია გარდა l და m კვანტური რიცხვებისა დამოკიდებული იქნება ენერგიის საკუთარ მნიშვნელობაზე, ამიტომ უწყვეტი სპექტრის რადიალური ტალღური ფუნქციები შეგვიძლია ვანორმიროთ დირაკის დელტა ფუნქციაზე

$$\int_0^\infty R^*_{lE'}(r)R_{lE}(r)r^2dr=\delta(E-E'). \tag{63,19}$$

სხვა სკალაზე ნორმირებულ ფუნქციებზე ადვილად გადავალთ § 52-ში განხილული მეთოდით.

როცა ვიცით ტალღური ფუნქცია, ადვილად გამოვთვლით მდებარეობის ალბათობასაც. აშკარაა, რომ გამოსახულება

$$|\psi(r,\theta,\varphi)|^2 d\tau = |R_l(r)|^2 r^2 dr |Y_{lm}(\theta,\varphi)|^2 d\Omega \tag{63,20}$$

გამოხატავს იმის ალბათობას, რომ ნაწილაკი მოხვდება $d\tau$ მოცულობაში. თუ ამ გამოსახულებიდან ავიღებთ ინტეგრალს კუთხეების მიხედვით და გავითვალისწინებთ სფერული ფუნქციების ნორმირების პირობას, მივიღებთ

$$w(r)dr = |R_l(r)|^2 r^2 dr, \tag{63,21}$$

რომელიც გამოხატავს ალბათობას იმისა, რომ ნაწილაკის რადიუსვექტორი მიმართულებაზე დამოუკიდებლად მოხვდება $(r, r+dr)$ შუალედში, ე. ი. იმ სფერულ შრეში, რომლის რადიუსი ძევს r და $r+dr$ შორის. როცა გვაინტერესებს ნაწილაკის მოხვედრის ალბათობა $d\Omega$ სხეულოვან კუთხეში დამოუკიდებლად r-ისა, საჭიროა (63,20) გავაინტეგრალოთ r-ის მიხედვით. (63,17) ნორმირების პირობის გათვალისწინებით მივიღებთ

$$w(\theta,\varphi)d\Omega = |Y_{lm}(\theta,\varphi)|^2 d\Omega. \tag{63,22}$$

§ 64. რადიალური ტალღური ფუნქციების ასიმპტოტური ყოფაქცევა

შევისწავლოთ რადიალური ტალღური ფუნქციების ყოფაქცევა დიდ და მცირე მანძილებზე. ტალღური ფუნქციების სახე და, მაშასადამე, მისი ასიმპტოტური ყოფაქცევაც, დამოკიდებული იქნება პოტენციალურ ენერგიაზე. როგორც წესი, კვანტურ მექანიკაში იხილავენ ისეთ პოტენციალებს, რომლებიც აკმაყოფილებენ შემდეგ ორ პირობას:

$$\lim_{r\to\infty} V(r) = 0, \tag{64,1}$$

$$\lim_{r\to 0} r^2 V(r) = 0. \tag{64,2}$$

პირველი პირობა გვიჩვენებს, რომ პოტენციალი უსასრულობაში ნულისაკენ მიისწრაფვის, მეორე პირობის ძალით კი სათავეში იგი ნული ხდება უფრო ნელა, ვიდრე r^{-2}.

დავწეროთ შრედინგერის რადიალური ფუნქციების განტოლება $\chi_l(r)$ ფუნქციისათვის

$$\frac{d^2\chi_l(r)}{dr^2} + \frac{2\mu}{\hbar^2}\left[E - V(r) - \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2}\right]\chi_l(r) = 0 \tag{64,3}$$

და შევისწავლოთ ამ განტოლების ამონახსნის ყოფაქცევა დიდი r-ებისათვის. განვიხილოთ პოტენციალურ ენერგიათა კლასი, რომლებიც უსასრულობაში ნულისაკენ მიისწრაფიან $r^{-\gamma}$-სახით, სადაც $\gamma \leqslant 2$-ზე. მაშინ (64,3) განტოლებაში შეგვიძლია უგულებელვყოთ, როგორც $V(r)$, ისე ცენტრგანშორი პოტენციალური ენერგია. ამიტომ ზღვარში, როცა $r\to\infty$, (64,3) განტოლება მიიღებს სახეს

$$\frac{d^2\chi(r)}{dr^2} + \frac{2\mu E}{\hbar^2}\chi(r) = 0, \quad r\to\infty \tag{64,4}$$

რომლის ამოხსნა დამოკიდებულია იმაზე, თუ როგორია სრული ენერგიის ნიშანი.

ვთქვათ, სრული ენერგია დადებითია, მაშინ თუ გავიხსენებთ, რომ $k^2 = 2\mu E/\hbar^2$, (64,4) განტოლების ზოგად ამონახსნს ექნება შემდეგი სახე:

$$\chi(r) = c_1 e^{ikr} + c_2 e^{-ikr}, \quad (r\to\infty) \tag{64,5}$$

სადაც c_1 და c_2 ნებისმიერი მუდმივებია. ამ ამონახსნს შეგვიძლია მივცეთ ასეთი ფორმაც:

$$\chi(r)=A\sin(kr+\delta). \quad (r\to\infty) \tag{64,6}$$

A და δ მუდმივებია. რადიალურ ფუნქციას კი ასეთი გამოხატულება ექნება:

$$R(r)=A\frac{\sin(kr+\delta)}{r}. \qquad (r\to\infty) \tag{64,7}$$

ამ ფუნქციით განსაზღვრული ალბათობა იმისა, რომ ნაწილაკი უსასრულობაში მოხვდება r და $r+dr$ მნიშვნელობებს შორის, პროპორციულია $\sin^2(kr+\delta)$ სიდიდის და, მაშასადამე, ნული არ არის. დადებითი ენერგიის დროს ნაწილაკი შეიძლება უსასრულოდ დაცილდეს მიზიდვის ცენტრს. ამგვარად, $E>0$ დროს მოძრაობა ინფინიტურია.

ვთქვათ ახლა სრული ენერგია უარყოფითია, მაშინ (64,4) განტოლებას ექნება სახე

$$\frac{d^2\chi}{dr^2}-\alpha^2\chi=0, \tag{64,8}$$

სადაც

$$\alpha^2=-\frac{2\mu E}{\hbar^2}=\frac{2\mu\varepsilon}{\hbar^2}; \tag{64,9}$$

$\varepsilon=-E$ ბმის ენერგიას უწოდებენ.

(64,8) განტოლების ზოგადი ამონახსნი ასეთი იქნება

$$\chi(r)=ce^{-\alpha r}+De^{\alpha r}; \tag{64,10}$$

მეორე წევრი, როცა $r\to\infty$, უსასრულობის ტოლია. ამიტომ უნდა დავუშვათ, რომ $D=0$. ამგვარად, ასიმპტოტურ ამონახსნს დიდ მანძილებზე ექნება სახე

$$R(r)=C\frac{e^{-ar}}{r}. \tag{64,11}$$

$r\to\infty$-თვის ალბათობა პროპორციულია $e^{-2\alpha r}$-ის, რომელიც სწრაფად ისპობა უსასრულობაში. ამგვარად, როცა $E<0$, მოძრაობა ხდება სივრცის სათავის მახლობელ, სასრულ არეში—მოძრაობა ფინიტურია. ასეთი შემთხვევა ხორციელდება ბმული მდგომარეობის დროს. ბმული მდგომარეობის ტალღურ ფუნქციას ამიტომ უნდა მოვთხოვოთ, რომ უსასრულობაში სწრაფად ისპობოდეს. ეს სასაზღვრო პირობა უზრუნველყოფს შრედინგერის განტოლების დისკრეტულ სპექტრს.

ახლა განვიხილოთ რადიალური ფუნქციის ყოფაქცევა მცირე მანძილზე. როცა $r\to 0$, მაშინ (64,2) პირობის გამო (64,3) შრედინგერის განტოლებაში E და $V(r)$ წევრები შეგვიძლია უგულებელვყოთ ცენტრგამშორ პოტენციალურ ენერგიასთან შედარებით, ამიტომ მივიღებთ განტოლებას

$$\frac{d^2\chi_l(r)}{dr^2}-\frac{l(l+1)}{r^2}\chi_l(r)=0. \tag{64,12}$$

ამონახსნი ვეძებოთ $\chi_l(r)=r^n$ სახით. განტოლებაში შეტანით გვექნება

$$n(n-1)=l(l+1), \tag{64,13}$$

რომლის ამოხსნებია $n=l+1$ და $n=-l$. ამრიგად, მცირე r-ებისათვის ზოგად ამონახსნს ექნება სახე:

$$\chi_l(r) = Ar^{l+1} + \frac{B}{r^l}. \tag{64,14}$$

მეორე წევრი არ აკმაყოფილებს სასაზღვრო პირობას $r=0$-ში, ამიტომ უნდა ავიღოთ $B=0$; მაშასადამე,

$$\chi_l(r) = Ar^{l+1}, \ (r \to 0), \tag{64,15}$$

სადაც A მუდმივია. $R_l(r)$ ფუნქციას კი სათავეში ექნება შემდეგი ფორმა:

$$R_l(r) = Ar^l, \ (r \to 0) \tag{64,16}$$

რადიალური ფუნქცია, მაშასადამე, სათავეში პროპორციულია r^l-ისა, ხოლო $\chi_l(r) \sim r^{l+1}$-სა. შევნიშნოთ, რომ $l=0$ უნდა შეესაბამებოდეს ნორმალურ მდგომარეობას, რადგან $l \neq 0$ დროს ენერგიას ემატება არსებითად დადებითი ცენტრგამშორი პოტენციალური ენერგია.

შევნიშნოთ აგრეთვე, რომ $r=0$ წერტილში ნულისაგან განსხვავებული იქნება მხოლოდ $l=0$ შესაბამისი ფუნქცია (ე. ი. s-მდგომარეობის ფუნქცია), რაც ჩანს რადიალური ფუნქციის (64,16) ასიმპტოტური სახიდან.

ატომბირთვის ფიზიკაში ჩვენ საქმე გვაქვს ახლოს მოქმედების ძალებთან, რომლებიც სწრაფად ისპობიან გარკვეულ r_0 მანძილზე, რომელსაც ქმედების რადიუსს უწოდებენ. ამიტომ (64,1) პირობის ნაცვლად ხშირად იხილავენ ისეთ პოტენციალებს, რომლებიც აკმაყოფილებენ პირობას

$$\lim_{r \to \infty} r^2 V(r) = 0, \tag{64,17}$$

ე. ი. პოტენციალური ენერგია უსასრულობაში ნული ხდება უფრო ჩქარა, ვიდრე $1/r^2$, ამიტომ $r > r_0 < \infty$ მანძილებზე შრედინგერის განტოლებაში შეგვიძლია გადავაგდოთ $V(r)$, ხოლო ცენტრგამშორი პოტენციალური ენერგია შევინარჩუნოთ; გვექნება

$$\frac{d^2\chi_l(r)}{dr^2} + \frac{2\mu}{\hbar^2}\left[E - \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2}\right]\chi_l(r) = 0. \ (r > r_0). \tag{64,18}$$

როცა $E<0$, მაშინ ეს განტოლება შეგვიძლია გადავწეროთ შემდეგი სახით:

$$r^2\frac{d^2\chi_l}{dr^2} + [-\alpha^2 r^2 - l(l+1)]\chi_l(r) = 0, \quad (r > r_0) \tag{64,19}$$

სადაც α განისაზღვრება (64,9) ფორმულით. (64,19) ბესელის განზოგადოებული განტოლებაა პარამეტრებით: $a=0$, $b=-l(l+1)$, $c=-\alpha^2$, $m=2$ (იხ. (54,11) განტოლება). ამონახსნი, რომელიც უსასრულობაში სწრაფად ისპობა, იქნება მაკდონალდის სფერული ფუნქცია[1]

$$R_l(r) = A_l k_l(\alpha r) \tag{64,20}$$

როცა $E>0$, მაშინ რადიალური ფუნქციების განტოლებას დიდი r-ებისათვის ექნება გამოსახულება

$$r^2\frac{d^2\chi_l}{dr^2} + [k^2r^2 - l(l+1)]\chi_l = 0, \quad (r > r_0) \tag{64,21}$$

სადაც $k^2 = 2\mu E/\hbar^2$.

[1] გ. ჭილაშვილი, „ორი და სამი ნაწილაკის კვანტური მექანიკა", თსუ გამომცემლობა, 1973 წ. გვ. 476.

რადგან ამ შემთხვევაში ბესელის განტოლების პარამეტრებია $c=k^2$, $m=2$, $b=-l(l+1)$, ამიტომ ზოგადი ამონახსნი მიიღებს გამოხატულებას

$$R_l(r)=a_l j_l(kr)+b_l n_l(kr); \quad (r>r_0) \tag{64,22}$$

სადაც $j_l(kr)$ და $n_l(kr)$ ბესელისა და ნეიმანის სფერული ფუნქციებია, ხოლო a_l და b_l ნებისმიერი მუდმივები. რადგან დიდი არგუმენტებისათვის

$$j_l(kr)=\frac{\sin\left(kr-\frac{l\pi}{2}\right)}{kr}, \quad n_l(kr)=-\frac{\cos\left(kr-\frac{l\pi}{2}\right)}{kr}. \tag{64,23}$$

ამიტომ, თუ ავიღებთ $a_l=\cos\delta_l$ და $b_l=\sin\delta_l$, (64,22) ზოგადი ამონახსნი უსასრულობაში მიიღებს ფორმას

$$R_l(r)=\frac{\sin(kr-\frac{l\pi}{2}+\delta_l)}{kr}, \quad (r\to\infty) \tag{64,24}$$

რომელსაც დიდი გამოყენება აქვს გაფანტვის კვანტურ თეორიაში. (64,24) ასიმპტოტური ამონახსნი ბრტყელი ტალღის (54,25) ასიმპტოტური მნიშვნელობისაგან განსხვავდება δ_l მუდმივი ფაზით. ფაზა გვიჩვენებს, თუ რამდენად განსხვავდება უსასრულობაში, ურთიერთქმედების შემთხვევაში ნაპოვნი ამონახსნი თავისუფალი ნაწილაკის ტალღური ფუნქციის ასიმპტოტური მნიშვნელობისაგან.

§ 65. წყალბადისებური ატომის პრობლემა[1]

განვიხილოთ მოძრაობა კულონის ველში. კულონის ველი ცენტრალური ველის ერთ-ერთი მნიშვნელოვანი მაგალითია. ამ ველით ურთიერთქმედებენ წერტილოვანი მუხტები. რადგან ატომი შედგება ელექტრონებისა და ატომგულისაგან, ამიტომ მათ შორის ურთიერთქმედება ხორციელდება კულონური ველით. ამის გამო მოძრაობა კულონურ ველში ატომის ფიზიკის ფუნდამენტური ამოცანაა. ამ პარაგრაფში განვიხილავთ მხოლოდ ორი საწინააღმდეგო ნიშნის მქონე ნაწილაკის კვანტურმექანიკურ ამოცანას უარყოფითი სრული ენერგიის შემთხვევაში. ე. ი. შევისწავლით ასეთი სისტემის მხოლოდ ბმულ მდგომარეობას. ასეთი ამოცანის ტიპიური მაგალითია წყალბადის ატომი, რომელიც როგორც ვიცით შედგება ერთი უარყოფითად დამუხტული ელექტრონისა და დადებითად დამუხტული პროტონისაგან. წყალბადის ამოცანის ტიპისა იქნება აგრეთვე ერთხელ იონიზებული ჰელიუმის ატომი, ორჯერ იონიზებული ლითიუმის ატომი და ა. შ. წყალბადის ატომისაგან განსხვავებით ამ უკანასკნელ შემთხვევაში ატომგულის მუხტი ტოლი იქნება $+Ze$-სი, სადაც Z არის პროტონთა რიცხვი ატომგულში (ე. წ. რიგითი ნომერი). ასეთ ატომებს წყალბადისებურს უწოდებენ. ცხადია, $+Ze$ მუხტის გულის ველში მოძრავი ელექტრონის კულონური ურთიერთქმედების ენერგიას, თუ ჩავთვლით, რომ ატომგული წერტილოვანია, ექნება შემდეგი სახე:

$$V(r)=-\frac{Ze^2}{r}. \tag{65,1}$$

რადგან ეს ველი ცენტრალური სიმეტრიისაა, ამიტომ ტალღური ფუნქციისათვის გვექნება

[1] E. Schrödinger, Ann. der Phys. 79, 361, (1926).

$$\psi(r, \theta, \varphi) = R_l(r) Y_{lm}(\theta, \varphi), \tag{65,2}$$

სადაც $R_l(r)$ არის ელექტრონისა და გულის ფარდობითი მოძრაობის რადიალური ტალღური ფუნქცია. როგორც ვიცით, მის მოსაძებნად საჭიროა ამოვხსნათ განტოლება

$$\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial R_l}{\partial r}\right)+\frac{2\mu}{\hbar^2}\left\{E+\frac{Ze^2}{r}-\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2}\right\}R_l=0, \tag{65,3}$$

სადაც $\mu = m_A m/(m_A + m)$ ატომის დაყვანილი მასაა; ამასთან m_A ატომგულის მასას წარმოადგენს m, კი ელექტრონისას. წყალბადის ატომისათვის $m_A = m_p$ პროტონის მასაა. როცა ატომის გული საკმარისად მძიმეა $m_A \gg m$, მაშინ $\mu \approx m$; ასე რომ, ამ შემთხვევაში, საკმარისად დიდი სიზუსტით დაყვანილი მასა ელექტრონის მასის ტოლია, რაც იმის ეკვივალენტურია, რომ ატომგული უძრავად შეგვიძლია ჩავთვალოთ.

ჩვენ გვაინტერესებს ელექტრონის ბმული მდგომარეობა, ამიტომ შევისწავლოთ ის შემთხვევა, როცა $E<0$. ამ დროს, როგორც ვნახეთ, ტალღურ ფუნქციას უნდა დავადოთ სასაზღვრო პირობა, რომ იგი უსასრულობაში საკმარისად სწრაფად მიისწრაფოდეს ნულისაკენ, ე. ი. ჰქონდეს $e^{-\alpha r}$ სახე, სადაც

$$\alpha^2 = -\frac{2\mu E}{\hbar^2}. \tag{65,4}$$

გარდა ამისა, ჩვენ წინა პარაგრაფში ვაჩვენეთ, რომ რადიალური ფუნქცია სათავეში პროპორციული უნდა იყოს r^l-ისა. ასე რომ, განხილულ შემთხვევაში ბუნებრივია (65,3) განტოლების ამონახსნი. ვეძებოთ შემდეგი სახით:

$$R_l(r) = r^l f_l(r) e^{-\alpha r}, \tag{65,5}$$

სადაც $f_l(r)$ ფუნქცია $r=0$ წერტილში უნდა იყოს მუდმივი, ხოლო უსასრულობაში ისეთი, რომ $f_l(r)e^{-\alpha r}$ ექსპონენციალურად მიისწრაფოდეს ნულისაკენ. ეს კი მაშინ შეიძლება, როცა $f_l(r)$ იქნება პოლინომი.

შევიტანოთ (65,5) შრედინგერის (65,3) განტოლებაში; $f_l(r)$ ფუნქციისათვის მივიღებთ

$$r\frac{d^2 f_l(r)}{dr^2}+(2l+2-2\alpha r)\frac{df_l(r)}{dr}+(B-2\alpha l-2\alpha)f_l(r)=0, \tag{65,6}$$

სადაც

$$B=\frac{2\mu Z e^2}{\hbar^2}. \tag{65,6'}$$

შემოვიღოთ ახალი უგანზომილებო ცვლადი

$$x = 2\alpha r, \tag{65,7}$$

მაშინ გვექნება

$$x\frac{d^2 f_l(x)}{dx^2}+(2l+2-x)\frac{df_l(x)}{dx}+\left(\frac{B}{2\alpha}-l-1\right)f_l(x)=0. \tag{65,8}$$

ამ განტოლებას გადაგვარებული ჰიპერგეომეტრიული ფუნქციების განტოლებას უწოდებენ. მისი ამონახსნი ვეძებოთ შემდეგი მწკრივის სახით:

$$f_l(x)=\sum_{\nu=0}^{\infty} a_\nu x^\nu \tag{65,9}$$

აჯამვას ვიწყებთ ნულიდან, რადგან $f_l(0)$, როგორც აღვნიშნეთ, მუდმივი უნდა იყოს. (65,9) მწკრივის შეტანით (65,8) განტოლებაში მივიღებთ

$$\sum_{\nu=0}^{\infty}\nu[\nu-1+2l+2]a_\nu x^\nu-\sum_{\nu=0}^{\infty}\left[\nu+l+1-\frac{B}{2\alpha}\right]a_\nu x^\nu=0. \tag{65,10}$$

პირველ წევრში აჯამვა ფაქტიურად $\nu=1$-დან იწყება, ამიტომ ამ მწკრივში შეგვიძლია მოვახდინოთ შეცვლა $\nu\to\nu+1$; შედეგად გვექნება

$$\sum_{\nu=0}^{\infty}[(\nu+1)(2l+\nu+2)a_{\nu+1}-(\nu+l+1-B/2\alpha)a_\nu]x^\nu=0. \tag{65,11}$$

ეს მწკრივი კი ნულის ტოლია მაშინ, როცა x^ν-ის კოეფიციენტი ნულია. ეს პირობა მოგვცემს რეკურენტულ ფორმულას a_ν კოეფიციენტების განსასაზღვრავად

$$a_{\nu+1}=\frac{\nu+l+1-B/2\alpha}{(\nu+1)(2l+\nu+2)}a_\nu. \tag{65,12}$$

ამ ფორმულის დახმარებით შეგვიძლია განვსაზღვროთ (65,9) მწკრივის ყველა კოეფიციენტი a_0-ის დახმარებით. მართლაც, გვექნება

$$a_1=\frac{(l+1-B/2\alpha)}{1\cdot(2l+2)}a_0, \tag{65,13}$$

$$a_2=\frac{l+2-B/2\alpha}{2(2l+3)}a_1=\frac{(l+2-B/2\alpha)(l+1-B/2\alpha)}{2!(2l+2)(2l+3)}a_0 \tag{65,14}$$

და ა. შ. ასე რომ, (65,9) მწკრივს ექნება სახე

$$f_l(x)=a_0\left\{1+\frac{l+1-\mathrm{B}/2\alpha}{(2l+2)}\frac{x}{1!}+\right.$$

$$\left.+\frac{(l+1-B/2\alpha)(l+1-B/2\alpha)}{(2l+2)(2l+3)}\frac{x^2}{2!}+\dots+\right\} \tag{65,14'}$$

მწკრივს, რომელიც განიმარტება ფორმულით

$$F(a,c;x)=1+\frac{a}{c}\frac{x}{1!}+\frac{a(a+1)}{c(c+1)}\frac{x^2}{2!}+\dots+ \tag{65,15}$$

უწოდებენ გადაგვარებულ ჰიპერგეომეტრიულ ფუნქციას; იგი აკმაყოფილებს (65,8) განტოლებას, როცა $2l+2=c$ და $B/2\alpha-l-1=-a$.

მაშასადამე, ჩვენს მიერ აგებული (65,14) მწკრივი ყოფილა $f_l(x)=$ $=F(-B/2a+l+1,\ 2l+2,\ x)$ გადაგვარებული ჰიპერგეომეტრიული ფუნქცია. თუ გავიხსენებთ (65,7) აღნიშვნას, მაშინ საბოლოოდ გვექნება შემდეგი ამონახსნი:

$$f_l(r)=F(-B/2\alpha+l+1,\ 2l+2,\ 2\alpha r) \tag{65,16}$$

მაგრამ, როგორც ახლა ვაჩვენებთ, ასეთი მწკრივი არ აკმაყოფილებს სასაზღვრო პირობას $r=\infty$-ში. მართლაც, დიდი ν-ებისათვის (65,12) ფორმულიდან გვექნება $\lim\limits_{\nu\to\infty}\frac{a_\nu+1}{a_\nu}=\frac{1}{\nu}$; ასეთივე ყოფაქცევა აქვს უსასრულობაში $e^{2\alpha r}$ ფუნქციას; ასე რომ,

(65,16) ფუნქცია უსასრულობაში უსასრულობისაკენ მიისწრაფვის როგორც $e^{2\alpha r}$; მაშასადამე, (65,5) ფუნქცია $r \to \infty$ დროს განშლადი იქნება როგორც $e^{\alpha r}$. რაც იმას ნიშნავს, რომ (65,16) მწკრივი პოლინომად გადასაქცევად უნდა ჩამოვჭრათ ზემოდან.

თუ დავაკვირდებით (65,15) გადაგვარებულ ჰიპერგეომეტრიულ მწკრივს, იგი პოლინომად მაშინ გადაიქცევა, როცა a არის მთელი უარყოფითი რიცხვი. მართლაც, მაგალითად, როცა $a=-1$, (65,15) მწკრივში დაგვრჩება მხოლოდ x-ის პროპორციული წევრი, როცა $a=-2$, (65,15) მწკრივი კვადრატულ პოლინომზე დაიყვანება და ა. შ.

მაშასადამე, ჩვენს შემთხვევაში (65,16) მწკრივი პოლინომზე დაიყვანება მაშინ, როცა

$$-\frac{B}{2\alpha}+l+1=-n_r, \tag{65,17}$$

სადაც n_r მთელი რიცხვია, რომელიც იღებს მნიშვნელობებს $n_r=0,\ 1,\ 2,\ldots\infty$. n_r განსაზღვრავს პოლინომის რიგს. (65,17) ასე გადავწეროთ:

$$\frac{B}{2\alpha}=n, \tag{65,18}$$

სადაც

$$n=n_r+l+1. \tag{65,19}$$

n-ს მთავარი კვანტური რიცხვი ეწოდება, ხოლო n_r-ს რადიალური. (65,6′) და (65,4) აღნიშვნების ძალით (65,18)-დან წყალბადისებური ატომის ენერგიისათვის გვექნება გამოხატულება

$$E_n=-\frac{Z^2e^4\mu}{2n^2\hbar^2}. \tag{65,20}$$

მივიღეთ წყალბადისებური ატომის ბორის ცნობილი ფორმულა. როგორც ვხედავთ, ენერგიის სპექტრი დისკრეტულია. ატომში გვაქვს ერთმანეთისაგან გარკვეული წესით დაცილებული ენერგეტული დონეები. ენერგია განისაზღვრება მხოლოდ და მხოლოდ მთავარი კვანტური რიცხვით, რომელიც ღებულობს მნიშვნელობებს $n=$ $=1,2,\ldots\infty$.

(65,20) ფორმულა ასე შეგვიძლია გადავწეროთ:

$$E_n=-Z^2\frac{D}{n^2}, \tag{65,21}$$

სადაც

$$D=\frac{\mu e^4}{2\hbar^2} \tag{65,22}$$

განსაზღვრული მუდმივია, იგი რიცხობრივად დაახლოებით 13,5 eV-ის ტოლია და წყალბადის ატომის ძირითადი მდგომარეობის ენერგიას ემთხვევა.

ცხადია, (65,17) პირობის ძალით, (65,16) მწკრივი გადაიქცევა n_r რიგის პოლინომად, ამიტომ n_r განსაზღვრავს ტალღური ფუნქციის კვანძებს. ძირითად მდგომარეობაში $n=1$, $n_r=0$ ტალღურ ფუნქციას კვანძი არ გააჩნია. რადგან $l\geqslant 0$, ამიტომ $n>n_r$. რადგან $n_r\geqslant 0$ მივიღებთ, რომ $n\geqslant 1$. აშკარაა, რომ $l_{max}=$ $=n-1$ ამიტომ l იღებს მნიშვნელობებს $l=0,1,\ 2,\ldots n-1$.

ამგვარად, (65,16) და (65,5) ფორმულების თანახმად, (65,17) პირობის გათვალისწინებით, რადიალური ფუნქციისათვის მივიღებთ

$$R_{nl}(r)=C_{nl}\left(\frac{Br}{n}\right)^{l}e^{-\frac{Br}{2n}}F(-n+l+1,2l+2,\ 2\alpha r),\qquad(65{,}23)$$

სადაც C_{nl} კოეფიციენტი განისაზღვრება ნორმირების შემდეგი პირობიდან:

$$\int_0^\infty R_{nl}^2(r)r^2dr=1,\qquad(65{,}24)$$

რომელიც (65,23) ფუნქციის შეტანით მოგვცემს

$$C_{nl}^2\int_0^\infty\left(\frac{Br}{n}\right)^{2l}e^{-\frac{Br}{n}}F^2(-n+l+1,2l+2,2\alpha r)r^2dr=1.\qquad(65{,}25)$$

შემოვიღოთ ახალი ცვლადი $x=Br/n$, მაშინ მივიღებთ

$$C_{nl}^2\left(\frac{n}{B}\right)^3\int_0^\infty x^{2l+2}e^{-x}F^2(-n+l+1,\ 2l+2,\ x)dx=1.\qquad(65{,}26)$$

ცნობილია, რომ ამ ინტეგრალს აქვს ამოხსნა:[1]

$$\int_0^\infty x^{2l+2}e^{-x}F^2(-n+l+1,2l+2,\ x)dx=\frac{2n[(2l+1)!]^2(n-l-1)!}{(n+l)!}\qquad(65{,}27)$$

მაშასადამე, ნორმირების კოეფიციენტს ექნება შემდეგი სახე:

$$C_{nl}=\frac{B}{n^2(2l+1)!}\left(\frac{B}{2}\right)^{1/2}\sqrt{\frac{(n+l)!}{(n-l-1)!}},\qquad(65{,}28)$$

ხოლო ნორმირებულ რადიალურ ტალღურ ფუნქციას ექნება გამოხატულება

$$R_{nl}(r)=\frac{B(B/2)^{1/2}}{n^2(2l+1)!}\sqrt{\frac{(n+l)!}{(n-l-1)!}}\left(\frac{Br}{n}\right)^{l}e^{-\frac{Br}{2n}}F\left(-n+l+1,2l+2,\frac{Br}{n}\right)\qquad(65{,}29)$$

ამასთან, აშკარაა, რომ $B/2n$ სიდიდე დაკავშირებულია ბორის პირველი ორბიტის $a_0=\hbar^2/\mu e^2$ რადიუსთან· მართლაც,

$$\alpha=\frac{B}{2n}=\frac{Z}{na_0}.\qquad(65{,}30)$$

სრული ტალღური ფუნქციის მისაღებად საჭიროა რადიალური $R_{nl}(r)$ ფუნქციის სფერულ $Y_{lm}(\theta,\varphi)$ ფუნქციაზე გადამრავლება. მაშასადამე, წყალბადისებური ატომის სრულ ტალღურ ფუნქციას ექნება სახე

$$\psi_{nlm}(r,\theta,\varphi)=R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta,\varphi).\qquad(65{,}31)$$

ნორმალურ მდგომარეობაში ($n=1$) გვექნება $\alpha=Z/a_0$. ამგვარად, (65,29) მიიღებს სახეს

$$R_{10}(r)=2\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2}e^{-\frac{Z}{a_0}r}.\qquad(65{,}32)$$

---

[1] გ. ა. ჭილაშვილი. „ორი და სამი ნაწილაკის კვანტური მექანიკა“, თსუ გამომცემლობა. 1973 წ. გვ. 474.

დაბოლოს, რადგან $Y_{00}(\theta,\varphi)=(4\pi)^{-1/2}$, ამიტომ წყალბადისებური ატომის ნორმალური მდგომარეობის ტალღური ფუნქცია შემდეგი სახისა იქნება:

$$\psi_{100}(r)=\left(\frac{Z^3}{\pi a_0^3}\right)^{1/2} e^{-\frac{Z}{a_0}r}. \tag{65,33}$$

წყალბადის ატომის ნორმალური მდგომარეობის ფუნქციას მივიღებთ, თუ (65,33)-ში ავიღებთ $Z=1$.

ძირითად მდგომარეობაში მყოფი ელექტრონის ატომგულში მოხვედრის ალბათობის სიმკვრივე ტოლი იქნება

$$|\psi_{100}(0)|^2=\left(\frac{Z^3}{\pi a_0^3}\right). \tag{65,34}$$

სრულიად ანალოგიურად შეგვიძლია ვიპოვოთ $n=2$ (პირველი აგზნებული მდგომარეობის ტალღური ფუნქციებიც. ამ მიზნით (65,29)-ში ავიღოთ $n=2$, $l=0$ და $n=2$, $l=1$, გვექნება:

$$R_{20}(r)=\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2}\left[1-\frac{Z}{2a_0}r\right]e^{-\frac{Z}{2a_0}r}, \tag{65,35}$$

$$R_{21}(r)=\frac{1}{2\sqrt{6}}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{5/2} re^{-\frac{Z}{2a_0}r}. \tag{65,36}$$

თუ სფერული ფუნქციებისათვის გავითვალისწინებთ (33,22) და (33,23) ფორმულებს, შეგვიძლია დავწეროთ:

$$\psi_{200}(r)=\frac{1}{2\sqrt{2\pi}}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2}\left[1-\frac{Zr}{2a_0}\right] e^{-\frac{Z}{2a_0}r}, \tag{65,37}$$

$$\psi_{210}(r,\theta)=\frac{1}{4\sqrt{2\pi}}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{5/2} re^{-\frac{Z}{2a_0}r}\cos\theta, \tag{65,38}$$

$$\psi_{21\pm1}(r,\theta,\varphi)=\pm\frac{1}{8\sqrt{\pi}}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{5/2} r\,e^{-\frac{Z}{2a_0}r}\sin\theta\, e^{\pm i\varphi}. \tag{65,39}$$

შევნიშნოთ, რომ პოლინომი, რომელიც შედის რადიალური ფუნქციების გამოხატულებაში, ცნობილია ლაგერის განზოგადოებული (ან მიკავშირებული) პოლინომის სახელწოდებით; კერძოდ, ლაგერის განზოგადოებული პოლინომი ასეა განმარტებული:

$$L_n^m(x)=(-1)^m\frac{(n!)^2}{m!(n-m)!}F(m-n,\ m+1,\ x). \tag{65,40}$$

ეს უკანასკნელი შეგვიძლია წარმოვიდგინოთ შემდეგნაირად:

$$L_n^m(x)=\frac{n!}{(n-m)!}e^x\frac{d^n}{dx^n}(e^{-x}x^{n-m}). \tag{65,41}$$

ცხადია, რომ

$$L_{n+l}^{2l+1}\left(\frac{Br}{n}\right)=-\frac{[(n+l)!]^2}{(2l+1)!(n-l-1)!}F\left(-n+l+1,\ 2l+2,\ \frac{Br}{n}\right), \tag{65,42}$$

საიდანაც შეგვიძლია განვსაზღვროთ F ფუნქცია და შევიტანოთ (65,29)-ში; გვექნება

$$R_{nl}(r)=-\sqrt{\left(\frac{B}{n}\right)^{3}\frac{(n-l-1)!}{2n[(n+l)!]^{3}}}\left(\frac{Br}{n}\right)^{l}e^{-\frac{Br}{2n}}L_{n+l}^{2l+1}\left(\frac{Br}{n}\right); \tag{65,43}$$

აღვნიშნოთ, რომ ეს ფუნქციაც ნორმირებულია (65,24) პირობით.

ჩვენ ვხედავთ, რომ წყალბადისებურ ატომში ტალღური ფუნქცია დამოკიდებულია სამ კვანტურ რიცხვზე n, l, m. მთავარი კვანტური რიცხვი $n=1,2,3\ldots\infty$ განსაზღვრავს ენერგიას, აზიმუტალური კვანტური რიცხვი $l=0,1,2,\ldots n-1$, განსაზღვრავს მომენტს $|\mathbf{l}|=\hbar\sqrt{l(l+1)}$, მაგნიტური კვანტური რიცხვი $m=-l,-(l-1),\ldots-1,0,1\ldots l-1$, l განსაზღვრავს მომენტის პროექციას z-ღერძზე. ამგვარად, წყალბადისებური ატომის გასაზომ სიდიდეთა სრული კრებული მოიცემა შემდეგი ფორმულებით:

$$E_n=-\frac{Z^2D}{n^2},\ \mathbf{l}^2=\hbar^2l(l+1).\ l_z=m\hbar. \tag{65,44}$$

ტალღური ფუნქცია დამოკიდებულია სამ კვანტურ რიცხვზე, ენერგია კი— მხოლოდ ერთ კვანტურ n რიცხვზე, აქედან გამომდინარეობს, რომ ადგილი აქვს გადაგვარებას. გადაგვარების ჯერადობა იქნება

$$\sum_{l=0}^{n-1}\sum_{m=-l}^{+l}(1)=\sum_{l=0}^{n-1}(2l+1)=n^2. \tag{65,45}$$

ამგვარად, გადაგვარების ჯერადობა n^2-ის ტოლია (თუ გავითვალისწინებთ სპინის ორ ორიენტაციასაც, სულ გადაგვარების ჯერადობა $2n^2$-ის ტოლი იქნება).

მომენტის ოპერატორის საკუთარი მნიშვნელობების განხილვის დროს დავინახეთ, რომ მაგნიტური ველის გასწვრივ მომენტს აქვს $(2l+1)$ პროექცია, ამიტომ თუ წყალბადისებურ ატომს მაგნიტურ ველში შევიტანთ, ადგილი ექნება მომენტის ორიენტაციის გადაგვარების მოხსნას, რადგან, როგორც ამას შემდგომში ვნახავთ, ენერგია გარდა n-ისა დამოკიდებული იქნება აგრეთვე m-ზედაც. რაც შეეხება „l-გადაგვარებას“ (ის, რომ ენერგია l-ზე არაა დამოკიდებული), მას ადგილი აქვს მხოლოდ წყალბადისებურ ატომებში. დაწყებული ჰელიუმიდან, ყველა ატომში ენერგია l-ზედაც არის დამოკიდებული, ამიტომ „l—გადაგვარებას“ ხშირად „შემთხვევით“ გადაგვარებასაც უწოდებენ. იგი გამოწვეულია წმინდა კულონური $V(r)=\alpha/r$ ველის თავისებურებით[1].

შევნიშნოთ, რომ, თუ გავითვალისწინებთ ფარდობითობის თეორიის მოთხოვნებს, მაშინ, როგორც შემდეგში დავინახავთ, წყალბადისებურ ატომშიაც კი ენერგია l-ზედაც იქნება დამოკიდებული.

სიდიდე

$$w_{nlm}(r,\theta,\varphi)d\tau=|R_{nl}(r)|^2r^2dr|Y_{lm}(\theta,\varphi)|d\Omega \tag{65,46}$$

გამოხატავს ალბათობას იმისა, რომ წყალბადისებურ ატომში ელექტრონი გულიდან r მანძილზე მოხვდება $r^2dr\ d\Omega$ მოცულობაში. თუ გვაინტერესებს ალბათობა იმისა, რომ ელექტრონი მოხვდება r რადიუსიან სფეროზე მიმართულებისაგან და-

---

[1] ეს საკითხი შესწავლილი იყო ფოკის მიერ, В. А. Фок, Доклады АН СССР, 1935, № 2, გვ. 169.

მოუკიდებლად, საჭიროა (65,45)-ის ინტეგრაცია კუთხეებით (იხ. წინა პარაგრაფი) აღვნიშნოთ ეს ალბათობა $w_{nl}(r)$-ით; გვექნება

$$w_{nl}(r) = |R_{nl}|^2 r^2, \tag{65,47}$$

ხოლო თუ გვაინტერესებს ალბათობა იმისა, რომ ელექტრონი მოხვდება სხეულოვან კუთხეში მანძილისაგან დამოუკიდებლად, საჭიროა (65,45)-ის ინტეგრაცია r-ით $(0, \infty)$ შუალედში. თუ ამ ალბათობას აღვნიშნავთ $w_{lm}(\theta,\varphi)d\Omega$-თი და გავითვალისწინებთ (65,24) მივიღებთ

$$w_{lm}(\theta,\varphi)d\Omega = |Y_{lm}(\theta,\varphi)|^2 d\Omega. \tag{65,48}$$

რადგან სრულ კრებულს ქმნის E, l და m (ე. ი. n, l და m), ამიტომ მდგომარეობის დასახასიათებლად შემოაქვთ შემდეგი აღნიშვნა: წინ იწერება მთავარი კვანტური რიცხვი n, მარჯვნივ კი უწერენ l-ის შესაბამის (63,15) ასოით აღნიშვნას. ასე, მაგალითად (65,37) ტალღური ფუნქცია შეესაბამება ელექტრონის $2s$ მდგომარეობას, ე. ი. $n=2$, $l=0$. მეორე და მესამე ფუნქციები კი $2p$ მდგომარეობას, ე. ი. $n=2$, $l=1$. ძირითად მდგომარეობას შეესაბამება $1s$ აღნიშვნა და ა. შ.

ადვილად დავინახავთ, რომ კოორდინატთა სათავეში ნულისაგან მხოლოდ $s(l=0)$ მდგომარეობის შესაბამისი ფუნქცია განსხვავდება; ყველა დანარჩენი ფუნქცია სათავეში ნულის ტოლია.

ამგვარად, შრედინგერის თეორიაში ელექტრონის ორბიტებს ატომში აზრი არა აქვს. ელექტრონს გარკვეული ალბათობით ყველგან შეუძლია მოხვდეს გულის ირგვლივ. მაგრამ, მეორე მხრივ, ბორის თეორიით გამოთვლილი ენერგია, რომელსაც საფუძვლად უდევს ის ფაქტი, რომ ელექტრონები ორბიტებზე მოძრაობენ, იგივე ფორმულით მოიცემა, რაც მივიღეთ შრედინგერის თეორიაში. ამის მიზეზი, როგორც ჩვენ ამას ქვემოთ დავინახავთ, არის ის, რომ შრედინგერის თეორიით გამოთვლილ ალბათობათა მაქსიმუმი ზუსტად ემთხვევა სივრცის იმ ადგილს, სადაც ბორის თეორიის თანახმად წრიული ორბიტები უნდა იმყოფებოდეს. მართლაც, ბორის თეორიაში წრიულ ორბიტებს შეესაბამებოდა $n_r=0$ და $n=l$. ჩვენ შემთხვევაში $l=n-1$ და (65,29) ფორმულა მოგვცემს

$$R_{nl}(r) \sim r^{n-1}e^{-\alpha r}. \tag{65,49}$$

$(r, r+dr)$ შუალედში მოხვედრის ალბათობა პროპორციული იქნება შემდეგი გამოსახულებისა:

$$r^{2n}\, e^{-2\alpha r}. \tag{65,50}$$

ამ ალბათობის მაქსიმუმის შესაბამისი რადიუსი მოინახება პირობიდან

$$\frac{d}{dr}[r^{2n}\, e^{-2\alpha r}] = 0, \tag{65,51}$$

საიდანაც მივიღებთ, რომ

$$r_{ext} = \frac{n}{\alpha} = \frac{n^2\hbar^2}{Ze^2\mu}, \tag{65,52}$$

რაც, მართლაც ემთხვევა ბორის წრიული ორბიტების რადიუსს.

დაბოლოს შევნიშნოთ, რომ, რადგან ენერგიის (65,20) ფორმულა ზუსტად ისეთია, როგორიც გვქონდა ბორის თეორიაში, ამიტომ გამოსხივების სიხშირისათვის ისეთივე ფორმულა გვექნება, როგორც ბორის თეორიაში. ეს ასეც უნდა

ყოფილიყო, რადგან ბალმერის განზოგადებული ფორმულა კარგად აღწერს ექსპერიმენტალურ მონაცემებს[1].

მეზოატომები. დამტკიცებულ იქნა, რომ გარდა ჩვეულებრივი ატომებისა, არსებობს ე. წ. მეზოატომები. უარყოფითი მეზონი, შეიჭრება რა გულის ველში, პირდაპირ კი არ შთაინთქმება გულის მიერ, არამედ წინასწარ ჯდება გარკვეულ ორბიტზე. გარკვეული დროის შემდეგ კი ან იშლება, ანდა შთაინთქმება გულის მიერ. აშკარაა, მეზოატომი მეზონების არასტაბილურობის გამო ძალიან მცირე ხანს „ცოცხლობს", მიუხედავად ამისა, მისი თვისებების შესწავლამ მთელი რიგი ახალი მონაცემები შესძინა როგორც ატომის, ისე ატომგულის ფიზიკას.

გასაგებია, რომ მეზონის ენერგია და ტალღური ფუნქცია მეზოატომებში სავსებით ისეთივე ფორმულებით გამოიხატება, როგორითაც წყალბადისებური ატომების ენერგია და ტალღური ფუნქციები. განსხვავება იქნება იმაში, რომ ყველგან ელექტრონის მასის ნაცვლად ფორმულებში შევა მეზონის მასა. რადგან მეზონის მასა გაცილებით მეტია ელექტრონის მასაზე (მაგალითად, მასა ე. წ. μ მეზონისა ტოლია 213 m_e), ამიტომ მეზოატომი გაცილებით მცირე სიდიდისაა, ვიდრე ჩვეულებრივი ატომები.

სავარჯიშო მაგალითები

1. აჩვენეთ, რომ წყალბადის ატომისათვის ნორმალურ მდგომარეობაში

$$\overline{r}=\frac{3}{2}a_0, \quad \overline{r^2}=3a_0^2.$$

2. აჩვენეთ, რომ წყალბადის ატომისათვის ნორმალურ მდგომარეობაში

$$\overline{p_r}=0, \quad \overline{p_r^2}=\frac{\hbar^2}{a_0{}^2}.$$

მითითება: გავიხსენოთ, რომ

$$\hat{p}_r=-i\hbar\left(\frac{\partial}{\partial r}+\frac{1}{r}\right), \qquad \hat{p}_r^2=-\frac{\hbar^2}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{d}{dr}\right).$$

3. გამოიყენეთ წინა ორი მაგალითის შედეგი და აჩვენეთ, რომ

$$\overline{(\Delta r)^2}\,\overline{(\Delta p_r)^2}=\frac{3\hbar^2}{4}\geqslant\frac{\hbar^2}{4}, \qquad (n=1)$$

4. წყალბადისებური ატომი, რომელიც ნორმალურ მდგომარეობაში იმყოფება, მოძრაობს სივრცეში. როგორ დაიწერება მისი როგორც მთლიანის მოძრაობის ტალღური ფუნქცია?

5. მეზონ-წყალბადის ატომი $n=2$ მდგომარეობიდან გადადის ძირითად მდგომარეობაში. როგორი იქნება გამოსხივებული კვანტის სიხშირე, თუ მეზონის მასა არის 213 m_e. მიღებული სიხშირე შეადარეთ სათანადო ატომურ სიხშირეს.

---

[1] კერძოდ, ერთი ენერგეტული დონიდან მეორეზე გადასვლის დროს გამოსხივებული სინათლის სიხშირე განისაზღვრება ფორმულით $\omega_{mn}=(E_m-E_n)/\hbar$. თუ ამ ფორმულაში შევიტანთ ენერგიის მნიშვნელობას (65,20) ფორმულიდან, მარტივად მივიღებთ ბალმერის განზოგადოებულ ფორმულას

$$\nu_{mn}=Z^2R\left(\frac{1}{n^2}-\frac{1}{m^2}\right),$$

სადაც $\nu_{mn}=\frac{\omega_{mn}}{2\pi c}$ ტალღათა რიცხვია 1 სმ მანძილზე, $R=\frac{\mu e^4}{4\pi c\hbar^3}$—რიდბერგის მუდმივი.

6. ვიპოვოთ წყალბადის ატომის ნორმალური მდგომარეობის ტალღური ფუნქცია იმპულსურ წარმოდგენაში.

ა მ ო ხ ს ნ ა: თანახმად (30,2) ფორმულისა, ტალღური ფუნქცია იმპულსურ წარმოდგენაში მოიცემა ფორმულით

$$a(p)=(2\pi\hbar)^{-3/2}(\pi a_0^3)^{-1/2}\int_0^\infty\int_0^\pi\int_0^{2\pi} e^{-r/a_0}\, e^{-\frac{i}{\hbar}pr\cos\Theta} r^2dr\,\sin\Theta d\Theta d\varphi.$$

ინტეგრალების ამოხსნის შემდეგ მივიღებთ

$$a(p)=\frac{(2a_0)^{3/2}}{\pi\left\{1+\left(\frac{a_0p}{\hbar}\right)^2\right\}^2\hbar^{3/2}}.$$

7. ვიპოვოთ წყალბადის ატომის ძირითადი მდგომარეობის ენერგია განუზღვრელობის თანაფარდობის გამოყენებით.

§ 66. წყალბადისებური ატომების მაგნიტური მომენტი

წყალბადისებურ ატომში ადგილი აქვს ელექტრონის მოძრაობას, ამიტომ ატომში გვექნება ელექტრული დენი. ელექტრულ დენთან კი ყოველთვის დაკავშირებულია მაგნიტური ველი. ამიტომ ატომს უნდა გააჩნდეს ორბიტალურ მოძრაობასთან დაკავშირებული მაგნიტური მომენტი. ვიპოვოთ, როგორია წყალბადისებური ატომის მაგნიტური მომენტის ოპერატორი და მისი საკუთარი მნიშვნელობანი.

ვთქვათ, წყალბადისებური ატომი მოთავსებულია გარეშე ერთგვაროვან მაგნიტურ ველში. თუ ატომს გააჩნია მაგნიტური მომენტი, მაშინ ველში შეტანისას წყალბადისებური ატომის ენერგიას უნდა დაემატოს ენერგია, რომელიც დაკავშირებული იქნება ატომის მაგნიტურ მომენტთან. თანახმად (36,19) ფორმულისა, ერთგვაროვან მაგნიტურ ველში მოთავსებული წყალბადისებური ატომის ჰამილტონიანს ექნება შემდეგი სახე:

$$\hat{H}=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta+V(r)+\frac{e}{\mu c}(\mathbf{A}\hat{\mathbf{p}}), \tag{66,1}$$

სადაც ვიგულისხმებთ, რომ ელექტრონის მუხტი უარყოფითია. როგორც ცნობილია, როცა $\mathbf{B}$ რაიმე მუდმივი ვექტორია, მაშინ $\mathrm{rot}[\mathbf{B},\mathbf{r}]=2\mathbf{B}$, ამიტომ ერთგვაროვანი მაგნიტური ველისათვის $\vec{\mathscr{H}}=\mathrm{rot}\mathbf{A}$ გამოსახულებას ექნება შემდეგი ამონახსნი:

$$\mathbf{A}=\frac{1}{2}[\vec{\mathscr{H}}\times\mathbf{r}]. \tag{66,2}$$

ამის მიხედვით (66,1) ჰამილტონიანის ბოლო წევრისათვის გვექნება

$$\frac{e}{\mu c}(\mathbf{A}\hat{\mathbf{p}})=\frac{e}{2\mu c}([\vec{\mathscr{H}}\times\mathbf{r}]\hat{\mathbf{p}}). \tag{66,3}$$

შერეული ნამრავლის თვისებით შეგვიძლია დავწეროთ

$$\frac{e}{\mu c}(\mathbf{A}\hat{\mathbf{p}})=-\frac{e}{2\mu c}(\vec{\mathscr{H}}\hat{\mathbf{l}}), \tag{66,4}$$

სადაც $\hat{\mathbf{l}}$ ორბიტალური მომენტის ოპერატორია.

ჩვენ ვიცით, რომ თუ ნაწილაკს გააჩნია მაგნიტური მომენტი, მაშინ მისი მაგნიტურ ველში შეტანისას ენერგია ღებულობს ნაზარდს—$(\mathbf{M}\,\vec{\mathscr{H}})$, სადაც $\vec{\mathscr{H}}$ მაგნიტური ველის დაძაბულობაა. ამიტომ (66,4) ტოლობიდან შეგვიძლია დავასკვნათ, რომ წყალბადისებური ატომის მაგნიტური მომენტის ოპერატორს აქვს სახე

$$\hat{\mathbf{M}} = -\frac{e}{2\mu c}\,\hat{\mathbf{l}}. \tag{66,5}$$

აქედან ჩანს, რომ ატომის მაგნიტური მომენტის საკუთარი მნიშვნელობის მოსაძებნად საკმარისია ვიცოდეთ მექანიკური მომენტის საკუთარი მნიშვნელობები. ამასთან ცენტრალური სიმეტრიის ველში, ისევე როგორც l_z-თვის, მაგნიტური მომენტის z პროექციასაც გარკვეული მნიშვნელობა ექნება. სახელდობრ, რადგან $l_z = m\hbar$, ამიტომ

$$M_z = -\frac{e\hbar}{2\mu c}\,m;\ m = 0, \pm 1,\ \pm 2, \ldots \tag{66,6}$$

სიდიდეს

$$M_B = \frac{e\hbar}{2\mu c} = 9{,}010^{-21}CGSM \tag{66,6'}$$

ბორის (ანდა ატომურ) მაგნეტონს უწოდებენ. ამგვარად, გვექნება

$$M_z = -mM_B. \tag{66,7}$$

მიღებული ფორმულა გვიჩვენებს, რომ ატომში ადგილი აქვს მაგნიტური მომენტის z-მდგენელის დაკვანტვას. როცა აზიმუტალური კვანტური რიცხვი $l=0$ (ე. ი. მომენტი ტოლია ნულის), მაშინ m-იც აგრეთვე ნულის ტოლია და, მაშასადამე, $M=0$, ე. ი. s მდგომარეობაში ატომებს ორბიტალურ მოძრაობასთან დაკავშირებული მაგნიტური მომენტი არ გააჩნია.

შევნიშნოთ, რომ იგივე დამოკიდებულებანი უფრო მარტივადაც შეგვეძლო მიგვეღო კვანტური მექანიკის ძირითად ჰიპოთეზაზე დაყრდნობით. მართლაც, კლასიკურ მექანიკაში ელექტრონის მოძრაობის რაოდენობის მომენტი მაგნიტურ მომენტთან დაკავშირებულია შემდეგი ფორმულით

$$\mathbf{M}^l = -\frac{e}{2\mu c}\,l,\ (e>0). \tag{66,8}$$

კვანტურ მექანიკაში, ძირითადი ჰიპოთეზის თანახმად, იგივე ტოლობას ექნება ადგილი, მხოლოდ $\mathbf{M}^l$ და $\mathbf{l}$-ის ქვეშ უნდა ვიგულისხმოთ სათანადო ოპერატორები. სახელდობრ, z-მდგენელისათვის მივიღებთ (66,5) ფორმულას.

ამგვარად, როგორც კლასიკურში, ისე კვანტურ მექანიკაში მაგნიტური და მექანიკური მომენტების ფარდობა ტოლია შემდეგი სიდიდის:

$$\mathbf{g}_l = +\frac{e}{2\mu c}, \tag{66,9}$$

რომელსაც გირომაგნიტურ ფარდობას უწოდებენ. აშკარაა, რომ

$$M_B = \mathbf{g}\hbar, \tag{66,10}$$

ხოლო მომენტის სიდიდე, რადგან $|\mathbf{l}| = \hbar\sqrt{l(l+1)}$, განისაზღვრება შემდეგი ფორმულით:

$$M = g\hbar\sqrt{l(l+1)} = M_B\sqrt{l(l+1)}. \qquad (66{,}11)$$

ამ ფორმულებიდან ჩანს, რომ მაგნიტური მომენტიც კვანტურ ვექტორს წარმოადგენს.

ბოლოს შევნიშნოთ, რომ იგივე ფორმულებს მივიღებდით, თუ ალბათობის დენის ვექტორის დახმარებით გამოვთვლიდით ორბიტალურ მოძრაობასთან დაკავშირებულ ელექტრულ დენს და შემდეგ გამოვთვლიდით ამ დენის შესაბამის მაგნიტურ მომენტს[1].

§ 67. სავალენტო ელექტრონის მოდელი

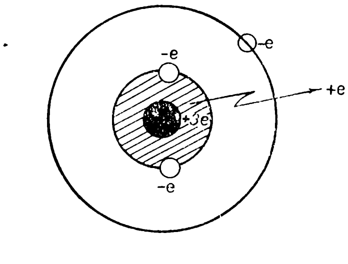
როგორც დავინახეთ, ენერგია წყალბადისებურ ატომში დამოკიდებული აღმოჩნდა მხოლოდ მთავარ კვანტურ რიცხვზე. ეს დამოკიდებულება დამახასიათებელი არ არის ცენტრალური სიმეტრიის ველისათვის. შემთხვევითი გადაგვარება (ე. ი. „l გადაგვარება") დამახასიათებელია მხოლოდ სუფთა კულონური ველისათვის — $\frac{Ze^2}{r}$. ჩვენ ქვემოთ ვაჩვენებთ, რომ უფრო რთულ ატომებში, ვიდრე წყალბადისებური ატომია, შემთხვევითი გადაგვარება არ არსებობს და ენერგია დამოკიდებულია აზიმუტალურ კვანტურ რიცხვზედაც, ე. ი. ატომის ენერგია, მოცემული მთავარი კვანტური რიცხვის დროს, მოძრაობის რაოდენობის მომენტის სიდიდეზედაც არის დამოკიდებული. რთული ატომების ამოცანის განხილვა საზოგადოდ ძალიან ძნელია, რადგან ჩვენ აქ საქმე გვაქვს მრავალი სხეულის პრობლემასთან, რომელიც მოითხოვს მთელი რიგი ახალი მიახლოებითი მეთოდების შემოღებას. ამ მეთოდებს ჩვენ შემდგომში განვიხილავთ, როცა შევეხებით ნაწილაკთა სისტემის კვანტურ მექანიკას. ახლა კი შევისწავლით რთული ატომების ერთ ჯგუფს, რომელთა განხილვაც შეგვიძლია დავუკავშიროთ წყალბადისებური ატომების პრობლემას. ეს ატომებია ტუტე მეტალთა ატომები: Li, Na, K და ა. შ. ამ ატომების სპექტრი გარკვეული დამახასიათებელი შესწორებით წყალბადისებური ატომების სპექტრის მსგავსია. ეს ატომები იმით ხასიათდება, რომ ინერტული გაზების ჩაკეტილი გარსის შემდეგ აქვთ ერთი ელექტრონი. ბმის ენერგია ინერტული გაზების ატომების ელექტრონებისა გაცილებით მეტია, ვიდრე ტუტე მეტალების ატომების უკანასკნელი ელექტრონებისა. ასე, მაგალითად, ჰელიუმის ატომის ბმის ენერგია $+24{,}45eV$-ის ტოლია, მაშინ როცა Li-ისათვის ბმის ენერგია $+5{,}37\ eV$. ასევე ნეონის ბმის ენერგია $+21{,}5\,eV$-ის ტოლია, მისი მომდევნო ნატრიუმისათვის კი $+5{,}12eV$. ასეთივე მდგომარეობა გვაქვს სხვა ატომებისათვისაც. ამიტომ ოპტიკურ პროცესებში ძირითად როლს ასრულებს მხოლოდ ერთი ზედმეტი ელექტრონი, რომელიც ტუტე მიწათა მეტალებს აქვს ინერტული გაზის ატომების ჩაკეტილი გარსის შემდეგ. თვით ჩაკეტილი გარსის ელექტრონები ქიმიურ რეაქციაში მონაწილეობას არ იღებენ. Li, Na, K ატომების ქიმიურ თვისებებს—მათ ვალენტოვნებას განსაზღვრავს სწორედ ეს ერთი ზედმეტი ელექტრონი. სპექტრალური გადასვლებიც გამოწვეულია ამ უკანასკნელი ელექტრონით, და, რადგან ჩაკეტილი გარსი გადასვლებში მონაწილეობას არ იღებს, ამიტომ სპექტრი ჰგავს წყალბადისებური ატომების სპექტრს.

---

[1] იხ. Блохинцев Д. И. Основы квантовой механики, Москва, 1963, стр. 207. ასევე Fermi E. Nature, декабрь, 1926, стр. 876.

ამგვარად, ტუტე მეტალების ატომების როგორც ოპტიკურ, ისე ქიმიურ თვისებებს განსაზღვრავს ერთი სუსტად ბმული ელექტრონი; ამ ელექტრონს სავალენტო, ანდა ოპტიკურ ელექტრონს უწოდებენ.

ყველა ზემოაღნიშვნის ძალით თეორიულ გამოთვლებში ტუტე მეტალთა ატომებისათვის შეგვიძლია შემოვიღოთ შემდეგი მოდელი, რომელსაც სავალენტო ანდა ოპტიკური ელექტრონის მოდელს უწოდებენ. რადგან ინერტული გაზების ატომების ჩაკეტილი გარსები საკმარისად მდგრადებია, ამიტომ ჩვენ შეგვიძლია სავალენტო ელექტრონი განვიხილოთ როგორც გულისა და ამ ჩაკეტილი გარსის ელექტრონების გასაშუალებულ ველში მოძრავი ნაწილაკი. ამ მოდელში „ახალი ატომის გულს“ წარმოადგენს ტუტე მეტალთა ატომის გულს მიმატებული ინერტული გაზის ელექტრონული გარსი. ნახაზზე მოცემულია სქემატური სურათი Li ატომისა. „ახალი ატომგული“ დაშტრიხულია. რის ტოლი იქნება „ახალი გულის“ მუხტი?. თუ „ძველი ატომგულის“ მუხტი იყო Ze, მაშინ „ახალ გულს“ ექნება $Ze-(Z-1)e=e$ მუხტი და, მაშასადამე, ამ მოდელის თანახმად, ტუტე მეტალთა ატომების პრობლემა დაიყვანება წყალბადისებური ატომის პრობლემაზე. ოღონდ ამ შემთხვევაში ჩვენ საქმე გვაქვს ერთ მნიშვნელოვან განსხვავებასთან. წყალბადის ატომის გული შეგვეძლო გაგვეხილა როგორც წერტილოვანი, აქ კი „ახალი ატომის გული“. ზომით ატომის რიგისაა $\sim 10^{-8}$ სმ და ამიტომ მისი განხილვა, როგორც წერტილოვანისა, აღარ შეიძლება. გარდა ამისა, ნამდვილი ატომის გულისაგან განსხვავებით, „ახალი ატომის გული“ ნაკლებად მკვრივია. სავალენტო ელექტრონი საკმარისად დიდ გავლენას ახდენს ამ „ახალ გულზე“ და იწვევს მის დეფორმაციას. როცა მანძილი ატომის ცენტრიდან სავალენტო ელექტრონამდის ძალიან დიდია „ახალი ატომგულის“ ზომაზე, მაშინ სავალენტო ელექტრონისა და „ახალი გულის“ ურთიერთქმედების პოტენციალური ენერგია შეგვიძლია წარმოვიდგინოთ, როგორც მულტიპოლური ურთიერთქმედებების მწკრივი



ნახ. 13.
აქ „ახალ გულს“ წარმოიდგენს ჰელიუმის ჩაკეტილ გარსს პლუს ლითიუმის ატომგული

$$V(r)=-\frac{e^2}{r}-\frac{A}{r^2}-\frac{B}{r^3}-\ldots- . \qquad (67,1)$$

ამ ფორმულაში პირველი წევრი შეესაბამება წერტილოვანი გულისა და ელექტრონის ურთიერთქმედებას (ე. ი. წმინდა კულონურ ურთიერთქმედებას); მეორე და მესამე წევრები წარმოადგენს შესაბამისად დიპოლურ და კვადრუპოლურ ურთიერთქმედებას; A და B გარკვეული მუდმივებია. საჭიროა (67,1) ცენტრალური სიმეტრიის მქონე პოტენციალური ენერგიისათვის ამოიხსნას შრედინგერის განტოლება. ამასთან, ჩვენ შემოვისაზღვრებით ორი პირველი წევრით, რადგან $\frac{B}{r^3}$ ტიპის პოტენციალური ენერგიისათვის შრედინგერის განტოლება იძლევა მხოლოდ ლიმიტაციურ მოძრაობას (ე. ი. ნაწილაკები ყოველთვის ერთმანეთს ეცემა)[1]. შრედინგერის განტოლებას ფარდობითი მოძრაობისათვის ექნება შემდეგი სახე:

---

[1] იხილეთ, მაგალითად, Л. Ландау и Е. Лифшиц, „Квантовая механика“, 1963 г; § 35, გვ. 143.

$$\Delta\psi(r)+\frac{2\mu}{\hbar^2}\left(E+\frac{e^2}{r}+\frac{A}{r^2}\right)\psi(r)=0. \qquad (67,2)$$

μ არის „ახალი გულისა“ და სავალენტო ელექტრონის დაყვანილი მასა[1]. მოვახდინოთ ცვლადთა განცალება. როგორც ვნახეთ, ცენტრალური სიმეტრიის ველში ტალღური ფუნქცია შეგვიძლია ასე წარმოვიდგინოთ:

$$\psi(r,\theta,\varphi)=R_l(r)Y_{lm}(\theta,\varphi)=\frac{\chi_l(r)}{r}Y_{lm}(\theta,\varphi), \qquad (67,3)$$

სადაც რადიალური ტალღური ფუნქცია $\chi=rR$ აკმაყოფილებს შემდეგ განტოლებას:

$$\frac{d^2\chi_l}{dr^2}+\frac{2\mu}{\hbar^2}\left(E+\frac{e^2}{r}-\frac{\hbar^2}{2\mu^2}\left[l(l+1)-\frac{2\mu}{\hbar^2}A\right]\right)\chi_l=0. \qquad (67,4)$$

თუ შემოვიღებთ აღნიშვნას

$$\nu(\nu+1)=l(l+1)-\frac{2\mu A}{\hbar^2}, \qquad (67,4')$$

მაშინ შრედინგერის რადიალური ფუნქციების განტოლება მიიღებს სახეს

$$\frac{d^2\chi}{dr^2}+\frac{2\mu}{\hbar^2}\left(E+\frac{e^2}{r}-\frac{\hbar^2\nu(\nu+1)}{2\mu r^2}\right)\chi=0. \qquad (67,4'')$$

ჩვენ მივიღეთ ზუსტად ისეთი განტოლება, როგორიც გვქონდა წყალბადისებური ატომების პრობლემის ამოხსნის დროს, ოღონდ l-ის ნაცვლად გვაქვს ახალი სიდიდე ν.

თუ ჩავატარებთ ყველა იმ პროცედურას, რაც გვქონდა წყალბადისებური ატომის პრობლემის ამოხსნისას, ტუტე მეტალთა ატომის ენერგიისათვის მივიღებთ

$$E_{n'}=-\frac{e^4\mu}{2n'^2\hbar^2}, \qquad (67,5)$$

სადაც მთავარი კვანტური n' რიცხვი განსაზღვრულია ფორმულით

$$n'=n_r+\nu+1. \qquad (67,6)$$

ახლა გამოვარკვიოთ, როგორაა დაკავშირებული ν „ძველ აზიმუტალურ“ l კვანტურ რიცხვთან. ამისათვის ამოვხსნათ (67,4') კვადრატული განტოლება. გვექნება

$$\nu=-\frac{1}{2}\pm\frac{1}{2}\sqrt{(2l+1)^2-\frac{8\mu A}{\hbar^2}}. \qquad (67,7)$$

გამოვიტანოთ $(2l+1)$ ფესვის ნიშნიდან და ფესვში მქონე მეორე წევრი განვიხილოთ როგორც მცირე შესწორება; გავშალოთ ფესვი მწკრივად და დავკმაყოფილდეთ მხოლოდ ორი პირველი წევრით; მივიღებთ

$$\nu=-\frac{1}{2}\pm\frac{2l+1}{2}\left(1-\frac{8\mu A}{2\hbar^2(2l+1)^2}+\dots\right); \qquad (67,8)$$

ფესვის წინ პლუს ნიშნის აღებით გვექნება

$$\nu=l-\frac{2\mu A}{(2l+1)\hbar^2}, \qquad (67,9)$$

---

[1] რადგან ელექტრონის მასა ძალიან მცირეა ატომგულის მასასთან შედარებით, ამიტომ ფაქტიურად $\mu=\dfrac{m_A\,m}{m_A+m}$, სადაც m_A „ძველი გულის“ მასაა m კი—ელექტრონისა.

და ამგვარად, (67,6) ფორმულის თანახმად,

$$n' = n_r + l + \Delta(l), \qquad (67,9')$$

სადაც[1]

$$\Delta(l) = -\frac{2\mu A}{(2l+1)\hbar^2}. \qquad (67,10)$$

თუ გავიხსენებთ მთავარი კვანტური რიცხვის გამოხატულებას $n = n + l + 1$, მივიღებთ, რომ

$$n' = n + \Delta(l). \qquad (67,11)$$

მაშასადამე, ტუტე მეტალთა ატომების ენერგია თანახმად (67,5)-ისა მოიცემა შემდეგი ფორმულით:

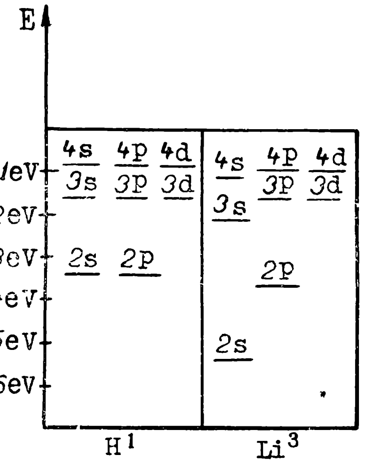
$$E_{nl} = -\frac{e^4\mu}{2[n+\Delta(l)]^2\hbar^2}. \qquad (67,12)$$

როგორც ვხედავთ, ენერგია დამოკიდებული ყოფილა აზიმუტალურ კვანტურ რიცხვზედაც, რაც შეეხება ტალღურ ფუნქციას, აშკარაა, რომ მისი სახე არ შეიცვლება და ისეთივე დარჩება, როგორიც გვქონდა წყალბადისებური ატომებისათვის.

ამრიგად, ტუტე მეტალთა ატომებისათვის თერმი განისაზღვრება ფორმულით

$$T = \frac{R}{[n+\Delta(l)]^2}, \qquad (67,13)$$

რაც ზუსტად ემთხვევა იმ სიდიდეს, რომელიც ექსპერიმენტალურად კვანტური მექანიკის ჩამოყალიბებამდე განსაზღვრული იყო რიდბერგის მიერ. ნახ. 14-ზე მოცემულია ლითიუმის ატომის დონეების გახლეჩის სქემა. რადგან წყალბადის ატომში გვაქვს „l გადაგვარება“, ამიტომ, მაგალითად, $2s$ და $2p$ დონეები ერთმანეთს ემთხვევა (ენერგიას განსაზღვრავს მხოლოდ n კვანტური რიცხვი, იგი კი ორივე დონისათვის ერთიდაიგივეა $n=2$). ლითიუმის ატომში კი დონეები გახლეჩილია, რადგან ამ შემთხვევაში ენერგია l-ის ფუნქციაა. ამგვარად, რთულ ატომებში ენერგია ფუნქციაა ორი n და l კვანტური რიცხვისა. რაც შეეხება m გადაგვარებას, როგორც ეს ადრეც აღვნიშნეთ, იგი ყოველთვის არსებობს და მისი მოხსნა შეიძლება მხოლოდ მაშინ, როცა ატომს მოვათავსებთ მაგნიტურ ველში. ამ შემთხვევაში ატომის ენერგია დამოკიდებულია არა მხოლოდ n-ზე და მომენტის სიდიდეზე, არამედ მომენტის ორიენტაციაზეც, ე. ი. $E = E_{nlm}$. ბოლოს აღვნიშნოთ, რომ ჩვენს მიერ ზემოთ განხილული მოდე-



ნახ. 14.

[1] (67,10) გვიჩვენებს, რომ რაც მეტია l, მით ნაკლებია $\Delta(l)$ და მით ტუტე მეტალების სპექტრი მსგავსი ხდება წყალბადისებური ატომების სპექტრისა.

$\Delta(l)$—შესწორება ითვალისწინებს ველის გადახრას წმინდა კულონური ურთიერთქმედებიდან გულთან ახლო მანძილებზე.

ლი საკმარისად უხეშია. სინამდვილეში „ახალ გულს“ გააჩნია არა e მუხტი, არამედ ეფექტური მუხტი, რომელიც საზოგადოდ მანძილის ფუნქციაა. მაგრამ იმის საილუსტრაციოდ, თუ რატომაა რთულ ატომებში ენერგია l-ის ფუნქცია, განხილული უხეში მოდელიც საკმარისია.

§ 68. უსასრულო სიღრმის პოტენციალური ორმო

შევისწავლოთ უსასრულო სიღრმის ცენტრალური სიმეტრიის პოტენციალური ორმოს ამოცანა; ვთქვათ,

$$V(r)=\infty, \text{ როცა } r\leqslant r_0$$
$$V(r)=0, \text{ როცა } r>r_0. \tag{68,1}$$

r_0-ს პოტენციალური ორმოს სიგანე ეწოდება.

საჭიროა განისაზღვროს ასეთ ორმოში მოძრავი ნაწილაკის ტალღური ფუნქცია და ენერგიის საკუთარი მნიშვნელობები. რადგან ორმო ცენტრალური სიმეტრიისა, ამიტომ ტალღურ ფუნქციას, რომელიც საერთო საკუთარი ფუნქცია იქნება: ენერგიის, მომენტის კვადრატისა და მომენტის პროექციის ოპერატორებისა, ექნება სახე

$$\psi(r, \theta, \varphi)=R_l(r)Y_{lm}(\theta, \varphi), \tag{68,2}$$

სადაც $R_l(r)$ რადიალური ფუნქცია განისაზღვრება განტოლებიდან

$$\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial R_l}{\partial r}\right)+\frac{2\mu}{\hbar^2}\left\{E-V(r)-\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2}\right\}R_l(r)=0. \tag{68,3}$$

ამოცანის შინაარსიდან ნათელია, რომ ამ განტოლების ამონახსნი უნდა აკმაყოფილებდეს სასაზღვრო პირობას

$$R_l(r_0)=0. \tag{68,4}$$

ამგვარად, საჭიროა ამოიხსნას განტოლება

$$\frac{d^2R_l}{dr^2}+\frac{2}{r}\frac{dR_l}{dr}+\left\{k^2-\frac{l(l+1)}{r^2}\right\}R_l(r)=0, \tag{68,5}$$

სადაც

$$k^2=\frac{2\mu E}{\hbar^2}. \tag{68,6}$$

(65,5) განტოლება r^2-ზე გამრავლების შემდეგ დაიყვანება ბესელის განზოგადებულ განტოლებაზე

$$r^2\frac{d^2R_l}{dr^2}+2r\frac{dR_l}{dr}+[k^2r^2-l(l+1)]R_l=0. \tag{68,7}$$

ამ განტოლების პარამეტრებია: $a=2$, $b=-l(l+1)$, $c=k^2$, $m=2$; ამიტომ სათავეში სასრული ამონახსნი იქნება ბესელის სფერული ფუნქცია

$$R_l(r)=C_l j_l(kr), \tag{68,8}$$

სადაც C_l ნებისმიერი მუდმივია, რომელიც განისაზღვრება ნორმირების პირობით. გამოვიყენოთ (68,4) სასაზღვრო პირობა. მივიღებთ საკუთარი მნიშვნელობების შემდეგ განტოლებას:

$$j_l(kr_0)=0. \tag{68,9}$$

ამ განტოლების ფესვები განსაზღვრავენ ენერგიის მნიშვნელობას ორმოში. (68,9) განტოლებას აქვს ფესვების დისკრეტული მიმდევრობა, ამიტომ უსასრულო კედლებიან სფერული სიმეტრიის ორმოში გვექნება ენერგეტული დონეების დისკრეტული თანმიმდევრობა. ფესვების მნიშვნელობა დამოკიდებულია ნაწილაკის l მომენტზე. l-ის შესაბამისი ფესვი აღვნიშნოთ t_{ln}-ით, სადაც n არის l-ის შესაბამისი ფესვის ნომერი. მაშინ $kr_0=t_{ln}$ და (68,6) აღნიშვნის გათვალისწინებით ენერგიისათვის ვპოულობთ ფორმულას

$$E_{ln}=\frac{\hbar^2}{2\mu r_0^2}t_{ln}^2. \tag{68,10}$$

(68,9) განტოლების ფესვების საკითხი კარგად არის შესწავლილი; არსებობს სპეციალური ცხრილები მათ მოსაძებნად. მაგალითად, ცნობილია, რომ $t_{01}=\pi$, ამიტომ $E_{01}=\pi^2\hbar^2/2\mu r_0^2$ და ა. შ. უსასრულო ორმოში ენერგეტული დონეების კლასიფიკაციას ახდენენ n და l კვანტური რიცხვებით. კერძოდ, ატომბირთვის ფიზიკაში შემოღებულია შემდეგი აღნიშვნა $l=0, 1, 2,\ldots$ მნიშვნელობებს (63,15) ფორმულის თანახმად აღნიშნავენ s, p, d, f, g, h და ა. შ. ასოებით, წინ კი უწერენ n კვანტურ რიცხვს, რომელიც ერთი და იგივე l-ის მქონე დონეებს გადანომრავს ზრდადი მიმდევრობით. კერძოდ, უსასრულო სიღრმის პოტენციალურ ორმოში გვექნება შემდეგი თანმიმდევრობა

$$1s,\ 1p,\ 1d,\ 2s,\ 1f,\ 2p,\ 1g,\ 2d,\ 1h,\ 3s,\ 2f,\ldots \tag{68,11}$$

№ 1 ცხრილში მოტანილია ზოგიერთი ამ მდგომარეობის ფესვების მნიშვნელობანი.

ცხრილი № 1

$j_l(ar_0)=0$ განტოლების ფესვები

მდგომარეობა	t_{ln}
1 s	3,1426
1 p	4,4934
1 d	5,7634
2 s	6,2832
1 f	6,9879
2 p	7,7252
1 g	8,1830
2 d	9,0950
1 h	9,3560
3 s	9,4248
2 f	10,4171

ახლა მოვახდინოთ (68,8) ფუნქციის ნორმირება. გამოვიყენოთ ნორმირების (63,10) პირობა

$$C_l^2\int_0^{r_0} j_l^2(kr)r^2dr=1 \tag{68,12}$$

ცნობილია, რომ

$$\int_0^x j_l^2(ax)x^2dx=\frac{x^3}{2}\,[j_l^2(ax)-$$
$$-j_{l-1}(ax)j_{l+1}(ax)], \tag{68,13}$$

ამიტომ, თუ გავითვალისწინებთ (68,9) ფორმულას, მივიღებთ

$$-C_l^2\frac{r_0^3}{2}j_{l-1}(kr_0)j_{l+1}(kr_0)=1, \tag{68,14}$$

საიდანაც ვღებულობთ

$$C_l^2=-\frac{2}{r_0^3 j_{l-1}(kr_0)j_{l+1}(kr_0)}. \tag{68,15}$$

ამგვარად, უსასრულო სიღრმის პოტენციალური ორმოსათვის ჩვენ ვიპოვეთ შემდეგი ტალღური ფუნქცია:

$$\psi_{nlm}(r,\theta,\varphi)=\left[\frac{-2}{r_0^3 j_{l-1}(kr_0)j_{l+1}(kr_0)}\right]^{1/2} j_l(kr)Y_{lm}(\theta,\varphi). \tag{68,16}$$

გან ვიხილოთ კერძო შემთხვევა, როცა ორმოში მოძრავი ნაწილაკის მომენტი $l=0$. რადგან

$$j_0(kr_0)=\frac{\sin kr_0}{kr_0},\ j_{-1}(kr_0)=\frac{\cos kr_0}{kr_0},$$

$$j_1(kr_0)=\frac{1}{(kr_0)^2}(\sin kr_0-kr_0\cos kr_0),\ \sin kr_0=0 \tag{68,17}$$

და $Y_{00}(\theta, \varphi)=(4\pi)^{-1/2}$, ამიტომ (68,16)-დან გვექნება

$$\psi_{100}(r)=\frac{1}{\sqrt{2\pi r_0}}\ \frac{\sin kr}{r}. \tag{68,18}$$

საკუთარი მნიშვნელობები კი განისაზღვრება

$$\sin kr_0=0 \tag{68,19}$$

განტოლებიდან, რომლის ამონახსნი იქნება $kr_0=n\pi$, სადაც $n=0, 1, 2,\ldots\infty$.

§ 69. სასრულ კედლებიანი პოტენციალური ორმო. დეიტრონი

ახლა განვიხილოთ სასრულო სიმაღლის კედლების მქონე ცენტრალური სიმეტრიის პოტენციალური ორმო

$$\begin{aligned} V(r)&=-V_0, \text{ როცა } r<r_0\\ V(r)&=0, \quad \text{ როცა } r\geqslant r_0. \end{aligned} \tag{69,1}$$

V_0 მუდმივს პოტენციალური ორმოს სიღრმე ეწოდება, r_0-ს—სიგანე. სიმარტივის მიზნით ჩვენ შევისწავლით ამ ორმოში ნაწილაკის მოძრაობას $l=0$ მომენტით. განსხვავებით ერთგანზომილებიანი პოტენციალური ორმოსაგან, (69,1) სფერული სიმეტრიის პოტენციალურ ორმოში ენერგეტული დონე ყოველთვის არა გვაქვს. იმისათვის, რომ (69,1) ორმოში ნაწილაკს ჰქონდეს ენერგეტული დონეები ორმოს გეომეტრია (ე. ი. მისი სიღრმე V_0 და სიგანე r_0) გარკვეულ პირობებს უნდა აკმაყოფილებდეს. ქვემოთ ჩვენ დავადგენთ ამ პირობებს და ვიპოვით ორმოს ტალღურ ფუნქციას და ენერგეტულ დონეებს. ამ ამოცანის გადასაწყვეტად დავწეროთ შრედინგერის რადიალური ფუნქციების განტოლება $l=0$ შემთხვევაში; გვექნება

$$\frac{d^2\chi(r)}{dr^2}+\frac{2\mu}{\hbar^2}(E-V(r))\chi(r)=0, \tag{69,2}$$

სადაც

$$\chi(r)=rR(r). \tag{69,3}$$

დავუშვათ, რომ ნაწილაკი ბმულ მდგომარეობაში იმყოფება, მაშინ მისი სრული ენერგია უარყოფითია. შემოვიღოთ აღნიშვნა $E=-\varepsilon$, ε-ს ეწოდება ბმის ენერგია ($\varepsilon>0$). ეს არის ის მინიმალური ენერგია, რომელიც უნდა დავხარჯოთ, რათა ნაწილაკი ბმული მდგომარეობიდან თავისუფალში გადავიყვანოთ. გარდა ამისა აშკარაა, რომ ორმოს სიღრმე $V_0>\varepsilon$. (69,2) განტოლება (69,1) პოტენციალისათვის მიიღებს შემდეგ სახეს:

$$\begin{aligned} &\frac{d^2\chi}{dr^2}+\beta^2\chi=0, \quad r<r_0\\ &\frac{d^2\chi}{dr^2}-\alpha^2\chi=0, \quad r>r_0 \end{aligned} \tag{69,4}$$

სადაც

$$\alpha^2=\frac{2\mu\varepsilon}{\hbar^2}, \quad \beta^2=\frac{2\mu}{\hbar^2}(V_0-\varepsilon); \quad \alpha^2+\beta^2=\frac{2\mu V_0}{\hbar^2}. \tag{69,5}$$

(69,4)-ის ზოგადი ამოხსნები იქნება შემდეგი ფუნქციები:

$$\begin{aligned} \chi_i(r)&=A\sin(\beta r+\delta), \quad r<r_0 \\ \chi_a(r)&=Be^{-\alpha r}+ce^{\alpha r}. \quad r>r_0 \end{aligned} \tag{69,6}$$

ინდექსი i მიუთითებს შიგა არის ფუნქციას, a კი—გარე არისას. ამ ფუნქციებს მოვთხოვოთ სტანდარტული პირობები, იმისათვის, რომ $R_i(r)=\frac{\chi_i(r)}{r}$ ფუნქცია სასრული იყოს $r=0$ წერტილში, საჭიროა, $\delta=0$. წინააღმდეგ შემთხვევაში, როცა $\delta\neq 0$, მივიღებდით $R_i(0)=\frac{\sin\delta}{0}=\infty$, გარდა ამისა, რადგან ნაწილაკი ბმულია, გარე არის შესაბამისი ფუნქცია $R_a(r)=\frac{\chi_a(r)}{r}$ ნულად უნდა იქცეს, როცა $r\to\infty$. ამისათვის კი საჭიროა ავიღოთ $c=0$. ამგვარად, გვექნება შემდეგი ამოხსნები:

$$\begin{aligned} \chi_i(r)&=A\sin\beta r, \\ \chi_a(r)&=Be^{-\alpha r} \end{aligned} \tag{69,7}$$

გარდა სასრულობისა, ეს ფუნქციები უწყვეტიც უნდა იყოს მთელს სივრცეში. ამისათვის კი საჭიროა გარე და შიგა არის ფუნქციების შეკერვა $r=r_0$ წერტილზე. მოვითხოვოთ ლოგარითმული წარმოებულების ტოლობა [1]

$$\frac{\chi_i'(r_0)}{\chi_i(r_0)}=\frac{\chi_a'(r_0)}{\chi_a(r_0)}.$$

თუ შევიტანთ (69,7) ფუნქციებს, მარტივად მივიღებთ

$$\operatorname{ctg}\beta r_0=-\frac{\alpha}{\beta}, \tag{69,8}$$

საიდანაც გამომდინარეობს, რომ

$$\sin\beta r_0=\pm\frac{\beta}{\sqrt{\alpha^2+\beta^2}}.$$

(69,5) ფორმულის გათვალისწინებით ეს უკანასკნელი მიიღებს სახეს

$$\pm\sin\beta r_0=\frac{\beta\hbar}{\sqrt{2\mu V_0}}. \tag{69,9}$$

---

[1] ფაქტიურად შეკერვა უნდა მოგვეხდინა $R(r)$ ფუნქციებისა, მაგრამ რადგან $R=\frac{1}{r}\chi$, ამიტომ იგივე შედეგს მივიღებთ. მართლაც, მოვახდინოთ ორი ფუნქციის $\psi_1=f(x)\varphi_1(x)$ და $\psi_2=f(x)\varphi_2(x)$ ფუნქციების შეკერვა. ფუნქციათა ტოლობა $\psi_1(x_1)=\psi_2(x_1)$ მოგვცემს $\varphi_1(x_1)=\varphi_2(x_1)$. წარმოებულების ტოლობა მოგვცემს: $f'(x_1)\varphi_1(x_1)+f(x_1)\varphi'_1(x_1)=f'(x_1)\varphi_2(x_1)+f(x_1)\varphi'_2(x_1)$, რადგან $\varphi_1(x_1)=\varphi_2(x_1)$ დაგვრჩება: $\varphi_1'(x_1)=\varphi'_2(x_1)$, ე. ი. შეკერვის პირობა შეგვიძლია გამოვიყენოთ $\varphi_1(x)$ და $\varphi_2(x)$ ფუნქციებისათვის.

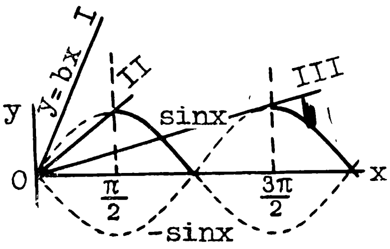
მივიღეთ β მიმართ ტრანსცენდენტული განტოლება. ამ განტოლების ფესვები მოგვცემს სწორედ ε-ის მნიშვნელობებს ორმოს მოცემული V_0 სიმაღლისა და r_0 სიგანისათვის. თუ შემოვიღებთ აღნიშვნებს:

$$\beta r_0 = x \text{ და } b = \frac{\hbar}{\sqrt{2\mu V_0 r_0^2}}. \tag{69,10}$$

გვექნება

$$\pm \sin x = bx. \tag{69,11}$$

ამ განტოლების ამოსახსნელად საჭიროა xOy კოორდინატთა სისტემაში ვიპოვოთ $y = bx$ და $y = \pm \sin x$ მრუდების გადაკვეთის წერტილები. ამ გადაკვეთის წერტილების შესაბამისი აბსცისები იქნება განტოლების ფესვები, საიდანაც (69,10) ფორმულების დახმარებით განვსაზღვრავთ ε-ის მნიშვნელობებს. საჭიროა გავიხსენოთ, რომ $y = bx$-ის გადაკვეთა უნდა განვიხილოთ მხოლოდ $\pm \sin x$ მრუდის იმ წერტილებთან, სადაც $\mathrm{ctg}\, x < 0$ (რადგან, თანახმად (69,8)-ისა, მხოლოდ ისეთი მნიშვნელობებია β-სათვის დასაშვები, რომლისთვისაც $\mathrm{ctg}\, \beta r_0 < 0$). გადაკვეთს თუ არა $y = bx$ წრფე $y = \pm \sin x$ მრუდს, დამოკიდებულია იმაზე, თუ როგორია b სიდიდე. მაგალითად, I მდგომარეობაში (იხ. მე-15 ნახაზი) გადაკვეთის წერტილი არა გვაქვს, მაშასადამე, b-ს ასეთი მნიშვნელობებისათვის განტოლებას ფესვი არა აქვს. როგორც ნახაზიდან ჩანს, პირველი ფესვი გვექნება მაშინ, როცა $x = \pi/2$ (II მდებარეობა). აშკარაა, რომ პირველი დონე სწორედ პირველი ფესვით განისაზღვრება



ნახ. 15.

$$x^2 = \beta^2 r_0^2 = \frac{\pi^2}{4},$$

საიდანაც

$$\varepsilon = V_0 - \frac{\pi^2 \hbar^2}{8\mu r_0^2}; \tag{69,12}$$

ხოლო (69,11) მოგვცემს, რომ

$$1 = b^2 \frac{\pi^2}{4}.$$

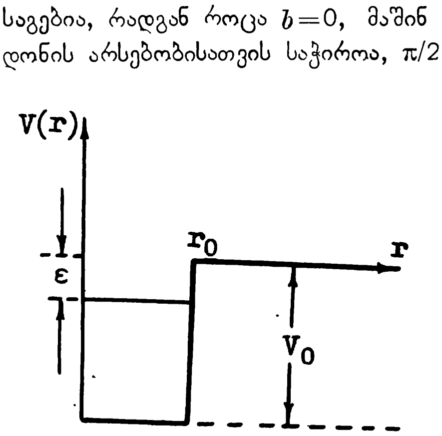
მაშასადამე, V_0-ისათვის მივიღებთ მნიშვნელობას

$$V_0 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{8\mu r_0^2}. \tag{69,13}$$

(69,13) განტოლება გვეუბნება, რომ $V_0 r_0^2 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{8\mu}$ წარმოადგენს მუდმივს და განისაზღვრება მხოლოდ ორმოს არსებობის ფაქტიდან. (69,13)-ის (69,12)-ში შეტანით მივიღებთ, რომ პირველი დონის ენერგია $\varepsilon = 0$, ე. ი. პირველი ენერგეტული დონე პოტენციალურ ორმოს თავზე ძევს.

ორი დონე გვექნება მაშინ, როცა $y = bx$ წრფეს ექნება III მდებარეობა და ა. შ. როცა $b = 0$, გვექნება დონეთა უსასრულო რიცხვი; ეს კი ფიზიკურად გა-

საგებია, რადგან როცა $b=0$, მაშინ $V_0 r_0^2=\infty$. როგორც ნახაზიდან ჩანს, ერთი დონის არსებობისათვის საჭიროა, $\pi/2 \leqslant x < 3/2$. როცა $x > \pi/2$, ოღონდ ნაკლებია $3/2\ \pi$-ზე, მაშინ ენერგეტული დონე ორმოს თავს აღარ ემთხვევა, იგი გარკვეული მანძილით იქნება დაშორებული ორმოს თავიდან. ამ შემთხვევაში მისი ბმის ენერგია $\varepsilon > 0$. იმისათვის, რათა ორმოში გვქონდეს ორი დონე, საჭიროა $3\pi/2 \leqslant x < 5\pi/2$ და ა. შ. აშკარაა, ფესვების რაოდენობის საკითხი (ე. ი. ენერგეტული დონეების საკითხი ორმოში) დამოკიდებულია ორმოს გეომეტრიაზე—მის სიგანესა და სიმაღლეზე.



ნახ. 16.

დეიტრონი. შევნიშნოთ, რომ ორმოს აქ განხილული მაგალითი გვხვდება დეიტრონის ამოცანაში. რადგან დეიტრონში მოძრავი ნეიტრონისა და პროტონის ფარდობითი მომენტი ნულის ტოლია $l=0$, ამიტომ (69,7) ფუნქციები წარმოადგენს დეიტრონის ტალღურ ფუნქციებს, როცა ურთიერთქმედების პოტენციალურ ენერგიად აღებულია r_0 სიგანისა და V_0 სიღრმის პოტენციალური ორმო; აღვნიშნოთ, რომ დეიტრონის ამოცანაში შებრუნებით იქცევიან. ცდაზე ხელსაყრელია ε-ის გაზომვა, $r_0^2 V_0$-ს კი ზომავენ ε-ის დახმარებით. ვანორმიროთ (69,7) ფუნქციები. დეიტრონის შემთხვევაში მტკიცდება, რომ დეიტრონის რადიუსი r_d გაცილებით მეტია გულური ძალების ქმედების რადიუსზე ($r_d \gg r_0$). ამიტომ შიგა ტალღურ ფუნქციას უგულებელყოფენ და გარე არის ტალღურ ფუნქციას ანორმირებენ მთელს სივრცეზე; ასე რომ, თანახმად (63,20) პირობისა, იღებენ

$$B^2 \int_0^\infty e^{-2\alpha r} dr = 1,$$

საიდანაც $B=\sqrt{2\alpha}$. რადგან $Y_{00}(\theta,\varphi)=(4\pi)^{-1/2}$, ამიტომ დეიტრონის ტალღურ ფუნქციას ექნება შემდეგი სახე

$$\psi(r)=\sqrt{\frac{\alpha}{2\pi}}\ \frac{e^{-\alpha r}}{r}, \tag{69,14}$$

აქ r არის ნეიტრონსა და პროტონს შორის მანძილი $r=|\mathbf{r}_p-\mathbf{r}_n|$, $\alpha=\sqrt{2\mu\varepsilon}\ /\ \hbar$. რადგან ნეიტრონისა და პროტონის მასები დაახლოებით ტოლია, $M_p \approx M_n$, ამიტომ $\mu=\dfrac{M_p M_n}{M_p+M_n} \approx \dfrac{M_p}{2}$ და $\alpha=\sqrt{M_p \varepsilon}/\hbar$. ცდები იძლევა, რომ დეიტრონს აქვს მხოლოდ ერთი დონე. რომლის შესაბამისი ენერგია $\varepsilon=2{,}23\,MeV$.

სავარჯიშო მაგალითები

1. დავწეროთ დეიტრონის, როგორც მთლიანის ტალღური ფუნქცია. აშკარაა, რომ § 35-ის თანახმად ამ ფუნქციას ექნება შემდეგი სახე:

$$\psi(r_p,\mathbf{r}_n)=\frac{e^{\frac{i}{\hbar}\mathbf{PR}}}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\left(\frac{a}{2\pi}\right)^{1/2}\frac{e^{-a|\mathbf{r}_p-\mathbf{r}_n|}}{|\mathbf{r}_p-\mathbf{r}_n|}, \tag{69,15}$$

სადაც $\mathbf{R}$ და $\mathbf{P}$ არის დეიტრონის სიმძიმის ცენტრის რადიუსვექტორი და იმპულსი. $\mathbf{r}=\mathbf{r}_p-\mathbf{r}_n$ რადიუსვექტორია ნუკლონების ცენტრებს შორის. რადგან $M_p \simeq M_n$, ამიტომ

$$R=\frac{M_p\mathbf{r}_p+M_n\mathbf{r}_n}{M_p+M_n}=\frac{\mathbf{r}_p+\mathbf{r}_n}{2}, \tag{69,16}$$

საბოლოოდ გვექნება

$$\psi(\mathbf{r}_p,\mathbf{r}_n)=\frac{(\alpha/2\pi)^{1/2}}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\, e^{\frac{i}{\hbar}\left(\mathbf{P}\,\frac{\mathbf{r}_n+\mathbf{r}_p}{2}\right)}\frac{e^{-\alpha|\mathbf{r}_n-\mathbf{r}_p|}}{|\mathbf{r}_n-\mathbf{r}_p|} \tag{69,17}$$

2. ვიპოვოთ დეიტრონის ტალღური ფუნქცია იმპულსურ წარმოდგენაში. გვექნება

$$a(p)=\frac{(\alpha/2\pi)^{1/2}}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\int_0^{\infty}\frac{e^{-\alpha r}}{r}\, e^{-\frac{i}{\hbar}pr\cos\Theta}\, r^2 dr\sin\Theta\, d\Theta\, d\varphi.$$

კუთხეებით ინტეგრაციის შემდეგ მივიღებთ

$$a(p)=\left(\frac{a}{\pi^2\hbar}\right)^{1/2}\frac{1}{p}\int_0^{\infty}e^{-\alpha r}\sin\left(\frac{pr}{\hbar}\right)dr$$

ცნობილია, რომ ეს ინტეგრალი ტოლია $\frac{p\hbar}{\alpha^2+(p/\hbar)^2}$, ამიტომ $a(p)$-სათვის საბოლოოდ შეგვიძლია დავწეროთ

$$a(p)=\frac{(a\hbar)^{1/2}}{\pi(\alpha^2\hbar^2+p^2)}, \tag{69,18}$$

სადაც, როგორც ვიცით, $\alpha=\sqrt{M_p\varepsilon}/\hbar$.

§ 70. მყარი როტატორი

განვიხილოთ m_1 და m_2 მასების მქონე მატერიალურ წერტილთა სისტემა, რომლებიც ერთმანეთთან უცვლელი r_0 მანძილით არიან დაშორებული. ამ სისტემას შეუძლია ბრუნვა საერთო ცენტრის მიმართ. ასეთ სისტემას მყარ სივრცით როტატორს უწოდებენ. ამ სისტემის შესწავლას დიდი მნიშვნელობა აქვს, რამდენადაც ორატომიანი მოლეკულა, პირველ მიახლოებაში, შეგვიძლია განვიხილოთ, როგორც მყარი როტატორი. ამ ამოცანას აგრეთვე დიდი გამოყენება აქვს ატომბირთვის ფიზიკაში.

როტატორის ბრუნვის ცენტრად შეგვიძლია ავიღოთ სისტემის ინერციის ცენტრი. მაშინ, როგორც § 35-ში ვაჩვენეთ, როტატორის შინაგანი მოძრაობა შეგვიძლია განვიხილოთ, როგორც ერთი μ დაყვანილი მასის მქონე ნაწილაკის ბრუნვა r_0 რადიუსის სფეროს ზედაპირზე. მოძრაობა ცენტრალური სიმეტრიის ხასიათისაა, ამიტომ ერთდროულად და ზუსტად გაიზომება: ენერგია, მომენტის კვადრატი და მისი z-პროექცია. რადგან როტატორის მანძილი დაფიქსირებულია, ამიტომ ამ მდგომარეობაში უნდა განისაზღვროს r_0-იც. როტატორის ჰამილტონიანს რადიალური ნაწილი არ ექნება, რამდენადაც უცვლელი r_0 მანძილისათვის ტალღური ფუნქციის წარმოებული r-ით ნულის ტოლი იქნება. გარდა ამისა, ნულია ურთიერთქმედების პოტენციალური ენერგიაც, რადგან უცვლელი მანძილის შესაბამისი პოტენციალური ენერგია მუდმივი სიდიდის ტოლია $V(r_0)=\mathrm{const}$. ამგვარად, მყარი როტატორის ჰამილტონიანს ექნება სახე

$$\hat{H}=-\frac{\hbar^2}{2\mu r_0^2}\Delta_{\Theta,\varphi}, \tag{70,1}$$

სადაც $\Delta_{\Theta,\varphi}$ ლეჟანდრის ოპერატორია. ჰამილტონის ამ ოპერატორთან კომუტატურია $\hat{\mathbf{l}}^2$ და $\hat{l}_z$ ოპერატორები და, ცხადია, $\mathbf{r}$ ოპერატორიც. მყარი როტატორის ამონახსნს ექნება სახე

$$\psi(r, \theta, \varphi) = R(r) Y_{\nu\mu}(\theta, \varphi). \tag{70,2}$$

ეს ფუნქცია საერთო საკუთარი ფუნქცია უნდა იყოს ზემოთ აღნიშნული კომუტატური ოპერატორებისა. დავწეროთ ჰამილტონის ოპერატორის საკუთარი ფუნქციებისა და საკუთარი მნიშვნელობების განტოლება

$$\hat{H}\psi = E\psi. \tag{70,3}$$

(70,2) ფუნქციის შეტანის შემდეგ მივიღებთ ლაპლასის განტოლებას

$$\Delta_{\Theta,\varphi} Y_{\nu\mu}(\theta,\varphi) + \frac{2\mu E r_0^2}{\hbar^2} Y_{\nu\mu}(\theta,\varphi) = 0, \tag{70,4}$$

რომელსაც ამონახსნი, რომელიც სტანდარტულ პირობებს აკმაყოფილებს, აქვს, მაშინ, როცა

$$\frac{2\mu E r_0^2}{\hbar^2} = \nu(\nu+1), \tag{70,5}$$

სადაც $\nu = 0, 1, 2, \ldots \infty$. თუ შემოვიღებთ კლასიკური ინერციის მომენტს

$$J_0 = \mu r_0^2 \tag{70,6}$$

ენერგიისათვის მივიღებთ:

$$E_\nu = \frac{\hbar^2 \nu(\nu+1)}{2J_0}. \quad (\nu = 0, 1, 2, \ldots) \tag{70,6}$$

ამგვარად, როტატორის ენერგია იკვანტება. იგი წარმოადგენს როტატორის კლასიკური ენერგიის $E = -\mathbf{l}^2/2J_0$ დაკვანტვის შედეგს, რამდენადაც მომენტის კვადრატი შეცვლილია მისი კვანტური მნიშვნელობით $\hbar^2\nu(\nu+1)$.

რაც შეეხება (70,4) განტოლების საკუთარ ფუნქციას, იგი წარმოადგენს ლაპლასის სფერულ $Y_{\nu\mu}(\theta,\varphi)$ ფუნქციას, რომლის სახე ჩვენთვის კარგად არის ცნობილი; ამასთან $-\nu \leqslant \mu \leqslant \nu$. აღსანიშნავია, რომ (70,2) ფუნქცია ავტომატურად აკმაყოფილებს მომენტის კვადრატისა და z-პროექციის განტოლებებსაც. ასე რომ, ჩვენ მყარი როტატორისათვის გვექნება ერთდროულად და ზუსტად გასაზომი სიდიდეები:

$$E_\nu = \frac{\hbar^2 \nu(r+1)}{2J_0}, \quad \mathbf{l}^2 = \hbar^2\nu(\nu+1), \quad l_z = \mu\hbar. \tag{70,7}$$

ν-ს უწოდებენ როტაციულ კვანტურ რიცხვს, μ-ს კი მაგნიტურ კვანტურ რიცხვს. როგორც ვხედავთ, ენერგია და მომენტი დამოუკიდებელი სიდიდეები არ არის.

ახლა მოვითხოვოთ, რომ (70,2) ფუნქცია აკმაყოფილებდეს შემდეგ განტოლებასაც

$$\hat{r}\psi = r_0\psi. \tag{70,8}$$

რადგან კოორდინატულ წარმოდგენაში $\hat{r} = r$, ამიტომ ეს განტოლება მიიღებს სახეს

$$rR(r) = r_0 R(r), \tag{70,9}$$

რომლის ამონახსნია დირაკის დელტა ფუნქცია $R(r)=C\delta(r-r_0)$. რამდენადაც სფერული ფუნქციები ორთო-ნორმირებული ფუნქციებია, ამიტომ რადიალური ფუნქცია დამოუკიდებლად შეგვიძლია ვანორმიროთ პირობით

$$\int_0^\infty R^*_{r'_0}(r)\,R_{r_0}(r)\,r^2\,dr=\delta(r_0-r'_0), \tag{70,10}$$

რომელიც ნორმირების C-კოეფიციენტისათვის მოგვცემს მნიშვნელობას $C=1/r_0$. ამგვარად, ნორმირებულ რადიალურ ფუნქციას ექნება სახე

$$R_{r_0}(r)=\frac{\delta(r-r_0)}{r}. \tag{70,11}$$

მაშასადამე, მყარი როტატორის საძიებელ ნორმირებულ ფუნქციას ექნება გამოხატულება

$$\psi_{r_0\nu\mu}(r,\theta,\varphi)=\frac{\delta(r-r_0)}{r_0}Y_{\nu\mu}(\theta,\varphi). \tag{70,12}$$

განვიხილოთ კერძო შემთხვევა, როცა როტატორი ერთ სიბრტყეში ბრუნავს. ასეთ როტატორს ბრტყელ როტატორს უწოდებენ. ვთქვათ, ბრუნვა ხდება xoy სიბრტყეში, ამ შემთხვევაში $\theta=\pi/2$ და მოძრაობა დამოკიდებული იქნება მხოლოდ φ ცვლადზე, რომელიც მოთავსებულია $(0,2\pi)$ შუალედში. ამ შემთხვევაში, $\Delta_{\theta,\varphi}=$ $=\dfrac{d^2}{d\varphi^2}$ და (70,4) განტოლება მოგვცემს

$$\frac{d^2\Phi(\varphi)}{d\varphi^2}+\frac{2J_0E}{\hbar^2}\Phi(\varphi)=0. \tag{70,13}$$

ამ განტოლების ამონახსნი ისეთივე იქნება, რაც მომენტის z-პროექციისა სახელდობრ.

$$\Phi(\varphi)=Ce^{i\frac{\sqrt{2J_0E}}{\hbar}\varphi} \tag{70,14}$$

ამ ფუნქციის ცალსახობისათვის საჭიროა $\Phi(\varphi+2\pi)=\Phi(\varphi)$, რაც ბრტყელი როტატორის ენერგიისათვის მოგვცემს

$$E_\mu=\frac{\hbar^2\mu^2}{2J_0};\ \ \mu=0,\ \pm1,\ldots\pm\nu. \tag{70,15}$$

ხოლო ნორმირებულ საკუთარ ფუნქციას ექნება სახე

$$\Phi_\mu(\varphi)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{i\mu\varphi}. \tag{70,16}$$

რადგან $\mu=0,\ \pm1,\ \ldots$, ამიტომ ენერგიის ერთ მნიშვნელობას შეესაბამება ორი საკუთარი ფუნქცია, ე. ი. ადგილი აქვს ორჯერად გადაგვარებას. (70,16) ფუნქცია ზუსტად ემთხვევა მომენტის z-პროექციის საკუთარ ფუნქციას, ამიტომ ცხადია, ბრტყელი როტატორის ენერგია და მომენტის z-პროექცია ერთდროულად იზომება.