

შრედინგერის განტოლების მიახლოებითი ამოხსნის მეთოდები

როგორც აღნიშნეთ, შრედინგერის განტოლება წარმოადგენს კვანტური მექანიკის საფუძველს და ყოველი ამოცანის გადაწყვეტა მოითხოვს ამ განტოლების ამოხსნას სათანადო სასაზღვრო პირობების გამოყენებით. მაგრამ შრედინგერის განტოლების ამოხსნა ნებისმიერი ფიზიკური ამოცანისათვის ყოველთვის როდია შესაძლებელი. უფრო მეტიც, იმ ფიზიკურ ამოცანათა რიცხვი, რომელთა შესაბამისი შრედინგერის განტოლების ამოხსნა ბოლომდეა შესაძლებელი, ძალზე მცირეა. ამოცანების უმეტესი ნაწილისათვის შრედინგერის განტოლება ზუსტად არ ამოიხსნება. აღნიშნული ამოცანების ზუსტი ამოხსნაც რომ შეიძლებოდეს, მიღებული პასუხი იმდენად გართულებოდა, რომ მას პრაქტიკულად მცირე ღირებულება ექნებოდა. ამიტომაც შრედინგერის განტოლების ამოხსნელად კვანტურ მექანიკაში შემოღებულია სხვადასხვა მიახლოებითი მეთოდები. ამ მეთოდების დიდი ნაწილი გამოიყენებოდა ჯერ კიდევ კლასიკურ მექანიკაში სხვადასხვა ამოცანების ამოხსნის დროს და მათემატიკაში დამუშავებული იყო კვანტური მექანიკის ჩამოყალიბებამდე დიდი ხნით ადრე.

ამ თავში ჩვენ განვიხილავთ შრედინგერის განტოლების მიახლოებითი ამოხსნის შემდეგ მეთოდებს: შეშფოთების თეორიის სტაციონარული მდგომარეობებისათვის, ვარიაციულ მეთოდს, კვაზიკლასიკურ მეთოდსა და შეშფოთების თეორიას არასტაციონარული მდგომარეობებისათვის (ე. წ. დირაკის შეშფოთების თეორიას).¹ ამავე თავში განვიხილავთ ამ მეთოდების გამოყენების მაგალითებს.

§ 72. შეშფოთების თეორია მარტივი სპექტრისათვის

კვანტური მექანიკის მრავალ საუკეთესო მიახლოებით მეთოდებს შორის შრედინგერის შეშფოთების თეორიას, თავისი სიმარტივეთა და მიღებული შედეგების ნათელი ფიზიკური შინაარსით, განსაკუთრებული ადგილი უჭირავს. იგი წარმოადგენს სტაციონარული ამოცანების შესაბამისი შრედინგერის განტოლების მიახლოებითი ამოხსნის მეთოდს¹.

დავუშვათ, რომ ჩვენთვის ცნობილია შრედინგერის სტაციონარული მდგომარეობების განტოლების

$$H^0 \psi_n^0 = E_n^0 \psi_n^0 \quad (72,1)$$

ამოხსნები.

განსაზღვრულობისათვის დავუშვათ, რომ $\hat{H}^0$ ოპერატორის სპექტრი დისკრეტულია და გადაგვარებას ადგილი არა აქვს. ვთქვათ, საჭიროა ვიპოვოთ სის-

¹ E. Schrödinger, Ann. der Phys. 80, 437 (1926).

ტემის ისეთი სტაციონარული მდგომარეობის ψ_n საკუთარი ფუნქციები და E_n საკუთარი მნიშვნელობები, რომლის ჰამილტონიანი ძალიან მცირედ განსხვავდება $\hat{H}^0$ ოპერატორისაგან. თუ ε მცირე პარამეტრია, მაშინ $\hat{H}$ ოპერატორის მცირედ განსხვავება $\hat{H}^0$ -ისაგან ნიშნავს იმას, რომ $\hat{H}$ შეგვიძლია წარმოვიდგინოთ შემდეგი სახით:

$$\hat{H} = \hat{H}^0 + \varepsilon \hat{H}'. \quad (72,2)$$

$\hat{H}'$ -ს უწოდებენ შეშფოთების ენერგიის ოპერატორს. როდესაც $\varepsilon \rightarrow 0$, მაშინ $\hat{H} \rightarrow \hat{H}^0$, ასე რომ $\hat{H}^0$ ყოფილა შეუშფოთებელი მდგომარეობის ჰამილტონიანი. როგორც ზევით აღვნიშნეთ, შეუშფოთებელი ენერგიის ოპერატორის საკუთარი ფუნქციები და საკუთარი მნიშვნელობები ცნობილია. საჭიროა ვიპოვოთ $\hat{H}$ ოპერატორის საკუთარი ფუნქციები და საკუთარი მნიშვნელობები. ამგვარად, საჭიროა

$$(\hat{H}^0 + \varepsilon \hat{H}') \psi_n(x) = E_n \psi_n(x). \quad (72,3)$$

განტოლების ამოხსნა იმ პირობით, რომ ცნობილია (72,1) განტოლების ამოხსნები¹. ვგულისხმობთ, რომ შეშფოთების ენერგიის დამატებით $\hat{H}^0$ ოპერატორის სპექტრის დისკრეტულობა არ ირღვევა, რაც, საზოგადოდ, არ არის სავალდებულო.

სანამ (72,3) განტოლების ამოხსნას შევუდგებოდეთ, განვიხილოთ ერთი დამხმარე ამოცანის ამოხსნის საკითხი. ვთქვათ, მოცემულია შემდეგი ტიპის არაერთგვაროვანი დიფერენციალური განტოლება:

$$(\hat{H}^0 - E_n^0) \psi_n(x) = f(x), \quad (72,4)$$

სადაც მარჯვენა მხარე ცნობილი ფუნქციაა. $\psi_n(x)$ და $f(x)$ ფუნქციები გავშალოთ $\hat{H}^0$ ერმიტული ოპერატორის ორთონორმირებული $\psi_k^0(x)$ ფუნქციების მწყრივად:

$$\psi_n(x) = \sum_k C_k \psi_k^0(x), \quad (72,5)$$

$$f(x) = \sum_m a_m \psi_m^0(x), \quad (72,6)$$

სადაც C_k და a_m კოეფიციენტები ცნობილი წესით განისაზღვრება; მაგალითად,

$$a_m = \int f(x) \psi_m^{0*}(x) dx. \quad (72,6')$$

შევიტანოთ (72,5) და (72,6) მნიშვნელობები (72,4) განტოლებაში, მიღებული შედეგი მარცხნიდან გავამრავლოთ $\psi_j^{0*}(x)$ და ავიღოთ ინტეგრალი მთელს სივრცეზე. მივიღებთ

$$\sum_k C_k (E_k^0 - E_n^0) \int \psi_j^{0*}(x) \psi_k^0(x) dx = \sum_m a_m \int \psi_j^{0*}(x) \psi_m^0(x) dx.$$

ორთონორმირების ძალით მარჯვნივ დავგრიგება ის წევრი, რომლისათვისაც $m=j$, მარცხნივ კი, $k=j$, ამიტომ

$$C_j (E_j^0 - E_n^0) = a_j; \quad (72,7')$$

¹ ქვემოთ x -ის ქვეშ ვიგულისხმებთ ყველა ცვლადს.

აქედან განისაზღვრება ყველა C_j კოეფიციენტი, გარდა C_n . როცა $j=n$, მაშინ $a_n=0$, ხოლო C_n ნებისმიერია. $a_n=0$ ტოლობა, (72,6') ფორმულის თანახმად, მოგვცემს

$$\langle \psi_n^0 | f \rangle = \int f(x) \psi_n^{0*}(x) dx = 0. \quad (72,7)$$

ამგვარად, შეგვიძლია დავასკვნათ: იმისათვის, რომ (72,4) არაერთგვაროვან განტოლებას ამოხსნა ჰქონდეს, საჭიროა განტოლების მარჯვენა მხარე ორთოგონალური იყოს შესაბამისი ერთგვაროვანი განტოლების ამოხსნისა. თანახმად (72,5) და (72,7') ფორმულებისა, საძიებელი $\psi_n(x)$ ფუნქციისათვის გვექნება

$$\psi_n(x) = \sum_k' \frac{a_k}{E_k^0 - E_n^0} \psi_k^0. \quad (72,8')$$

შტრიხი ჯამის ნიშანზე ნიშნავს იმას, რომ ჯამიდან გამორიცხულია $n=k$ წევრი. ცხადია, რომ ამ გამოკლასტვლას უნდა დაემატოს $C_n \psi_n^0$ წევრი, სადაც C_n ნებისმიერი მუდმივია და განისაზღვრება ნორმირების პირობიდან. ამგვარად, საძიებელი ფუნქციის საპოვნელად საკმარისია განტოლების თავისუფალი $f(x)$ წევრის გაშლის a_k კოეფიციენტის მოძებნა.

ახლა დავუბრუნდეთ (72,3) განტოლების ამოხსნის საკითხს. როცა $\varepsilon \rightarrow 0$, მაშინ $\hat{H} \rightarrow \hat{H}^0$ და, მაშასადამე, $\psi_n \rightarrow \psi_n^0$ და $E_n \rightarrow E_n^0$. ამიტომ, ბუნებრივია, ამ განტოლების ამოხსნა ვეძებოთ შემდეგი მწკრივის სახით:

$$\begin{aligned} \psi_n(x) &= \psi_n^0(x) + \varepsilon \psi_n^{(1)}(x) + \varepsilon^2 \psi_n^{(2)}(x) + \dots, \\ E_n &= E_n^0 + \varepsilon E_n^{(1)} + \varepsilon^2 E_n^{(2)} + \dots \end{aligned} \quad (72,8)$$

მართლაც, ასეთი წარმოდგენა აკმაყოფილებს იმ მოთხოვნას, რომ ε -ის ნულისაკენ მისწრაფებისას $\psi_n \rightarrow \psi_n^0$ და $E_n \rightarrow E_n^0$. სიდიდეებს $E_n^{(1)}, E_n^{(2)}, \dots, \psi_n^{(1)}, \psi_n^{(2)}, \dots$ და ა. შ. უწოდებენ, სათანადოდ, ენერგიისა და ტალღური ფუნქციის პირველ, მეორე და ა. შ. შესწორებებს.

შევიტანოთ (72,8) მწკრივები (72,3) განტოლებაში

$$\begin{aligned} (\hat{H}^0 + \varepsilon \hat{H}')(\psi_n^0 + \varepsilon \psi_n^{(1)} + \varepsilon^2 \psi_n^{(2)} + \dots) &= (E_n^0 + \varepsilon E_n^{(1)} + \\ &+ \varepsilon^2 E_n^{(2)} + \dots)(\psi_n^0 + \varepsilon \psi_n^{(1)} + \varepsilon^2 \psi_n^{(2)} + \dots); \end{aligned}$$

გავხსნათ ფრჩხილები და გავიხსენოთ, რომ ტოლობა მხოლოდ და მხოლოდ მაშინ გვექნება, როცა ε -ის სათანადო ხარისხების წინ მდგომი კოეფიციენტები მარცხნივ და მარჯვნივ ერთმანეთის ტოლია; მივიღებთ:

$$(\hat{H}^0 - E_n^0) \psi_n^0 = 0, \quad (72,9)$$

$$(\hat{H}^0 - E_n^0) \psi_n^{(1)} = E_n^{(1)} \psi_n^0 - \hat{H}' \psi_n^0, \quad (72,10)$$

$$\begin{aligned} (\hat{H}^0 - E_n^0) \psi_n^{(2)} &= E_n^{(1)} \psi_n^{(1)} - \hat{H}' \psi_n^{(1)} + E_n^{(2)} \psi_n^0, \\ &\dots \end{aligned} \quad (72,11)$$

პირველი განტოლება ახალს არაფერს არ იძლევა; მისი ამოხსნები ამოცანის პირობის ძალით ცნობილია. განვიხილოთ (72,10) არაერთგვაროვანი განტოლება და მისთვის გამოვიყენოთ ამოხსნადობის (72,7) პირობა. თუ გავიხსენებთ, რომ ამ შემთხვევაში $f(x)$ ფუნქციის როლს თამაშობს $E_n^{(1)} \psi_n^0 - \hat{H}' \psi_n^0$ ფუნქცია, ეს პირობა ასე ჩაიწერება:

$$\int \psi_n^{0*} \{E_n^{(1)} \psi_n^0 - \hat{H}' \psi_n^0\} dx = 0,$$

საიდანაც ენერგიის პირველი შესწორებისათვის გვექნება

$$E_n^{(1)} = \int \psi_n^{0*} \hat{H}' \psi_n^0 dx = H'_{nn}. \quad (72,12)$$

ამგვარად, ენერგიის პირველი შესწორება ტოლი ყოფილა შემფოტების ენერგიის ოპერატორის დიაგონალური მატრიცული ელემენტისა ან, რაც იგივეა, შემფოტების ენერგიის საშუალო მნიშვნელობისა ψ_n^0 მდგომარეობაში.

ვიპოვოთ ახლა ტალღური ფუნქციის პირველი შესწორება $\psi_n^{(1)}$; ამისათვის გამოვიყენოთ (72,8) ფორმულა. ამ ფორმულის თანახმად (72,10) განტოლების ამოხსნას ექნება სახე

$$\psi_n^{(1)} = \sum_k' \frac{a_k}{E_k^0 - E_n^0} \psi_k^0. \quad (72,13)$$

ვიპოვოთ a_k კოეფიციენტი. იგი წარმოადგენს (72,10) განტოლების მარჯვენა მხარის მწყრივად გაშლის კოეფიციენტს, ე. ი.

$$f(x) \equiv E_n^{(1)} \psi_n^0 - \hat{H}' \psi_n^0 = \sum_k a_k \psi_k^0.$$

გავამრავლოთ ეს გამოსახულება მარცხნიდან $\psi_k^{0*}(x)$ ფუნქციაზე და ავიღოთ ინტეგრალი მთელს სივრცეზე. ψ_k^0 ფუნქციების ორთონორმირების ძალით მივიღებთ

$$E_n^{(1)} \delta_{kn} - H'_{kn} = a_k. \quad (72,14)$$

მაგრამ (72,13) ფორმულაში $k \neq n$, ამიტომ $a_k = -H'_{kn}$ და, ამგვარად,

$$\psi_n^{(1)} = \sum_k' \frac{H'_{kn}}{E_n^0 - E_k^0} \psi_k^0(x). \quad (72,15)$$

ამ ჯამში k იღებს ყველა მნიშვნელობას, გარდა $k=n$. როგორც (72,8) ფორმულის გამოყენის დროს აღენიშნეთ, ამ გამოსახულებას უნდა დაემატოთ $C_n \psi_n^0$ წევრი; მაგრამ ადვილად ვაჩვენებთ, რომ თუ $\psi_n(x) = \psi_n^0 + \varepsilon C_n \psi_n^0 + \varepsilon \psi_n^{(1)} + \dots +$ ფუნქციას ვანორმირებთ ერთზე, მაშინ ε წევრების სიზუსტით მივიღებთ $C_n = 0$. მართლაც, მოვიტხოვოთ, რომ

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_n^*(x) \psi_n(x) dx = 1, \quad (72,16)$$

მაშინ გვექნება

$$\int_{-\infty}^{+\infty} (\psi_n^{0*} + \varepsilon C_n \psi_n^{0*} + \varepsilon \psi_n^{(1)*}) (\psi_n^0 + \varepsilon C_n \psi_n^0 + \varepsilon \psi_n^{(1)}) dx = 1. \quad (72,17)$$

ინტეგრალქვეშ მოვახდინოთ გადამრავლება, გავითვალისწინოთ (72,15) გამოსახულება და გამოვიყენოთ ψ_n^0 ფუნქციების ორთონორმირების პირობა; გვექნება

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_n^{0*}(x) \psi_n(x) dx = 1 + 2\varepsilon C_n + O(\varepsilon^2) \quad (72,18)$$

სადაც $O(\varepsilon^2)$ ოპერატორი მიუთითებს, რომ შემდეგი წევრები ε^2 -ის რიგისაა. (72,18)-დან მართლაც ჩანს, რომ თუ $\psi_n(x)$ ფუნქციებს ვანორმირებთ ε წევრების სიზუსტით, მაშინ $C_n = 0$.

ახლა ვიპოვოთ ენერგიის მეორე შესწორება. ამ მიზნით (72,11) არაერთგვაროვანი განტოლებისათვის გამოვიყენოთ (72,7) ამოხსნადობის პირობა. ეს პირობა ასე ჩაიწერება:

$$\int \psi_n^{(0)*} (E_n^{(1)} \psi_n^{(1)} - \hat{H}' \psi_n^{(1)} + E_n^{(2)} \psi_n^{(0)}) dx = 0. \quad (72,19)$$

თუ შევიტანთ $\psi_n^{(1)}$ და $E_n^{(1)}$ -ის მნიშვნელობებს (72,12) და (72,15) ფორმულებიდან, გვექნება

$$E_n^{(2)} = \int \psi_n^{(0)*} \hat{H} \sum_k' \frac{H'_{kn}}{E_n^0 - E_k^0} \psi_k^0 dx - E_n^{(1)} \int \psi_n^{(0)*} \sum_k' \frac{H'_{kn}}{E_n^0 - E_k^0} \psi_k^0 dx.$$

რადგან ჯამში გამორიცხულია $k=n$ შემთხვევა, ამიტომ უკანასკნელი წევრი ψ_k^0 ფუნქციების ორთოგონალურობის ძალით ნულის ტოლია. მართლაც,

$$\int \psi_n^{(0)*} \sum_{k \neq n} \frac{H'_{kn}}{E_n^0 - E_k^0} \psi_k^0 dx = \sum_{k \neq n} \frac{H'_{kn}}{E_n^0 - E_k^0} \delta_{kn} = 0.$$

ამგვარად, ენერგიის მეორე შესწორებისათვის გვექნება

$$E_n^{(2)} = \sum_k' \frac{H'_{kn} H'_{nk}}{E_n^0 - E_k^0}. \quad (72,20)$$

ჩვენ შეგვიძლია ვიპოვოთ ენერგიისა და ტალღური ფუნქციის უფრო მაღალი რიგის შესწორებებიც. ჩვეულებრივ ენერგიისათვის ისაზღვრებიან მეორე შესწორებით, ტალღური ფუნქციისათვის კი კმაყოფილებიან მხოლოდ პირველით. ეს გარემოება იმითაა გამოწვეული, რომ ფიზიკური აზრი აქვს ტალღური ფუნქციის მოდულის კვადრატს. პირველი მიახლოების ტალღური ფუნქციის აბსოლუტური მნიშვნელობის კვადრატში ჩვენ საქმე გვექნება ε^2 რიგის სიდიდეებთან, ამიტომ ენერგიაშიც იგივე რიგის სიდიდეები უნდა შევინარჩუნოთ, ე. ი. შეიძლება შემოვისაზღვროთ ტალღური ფუნქციის პირველი შესწორებით, ენერგიისა კი — მეორეთი. ამგვარად, (72,3) განტოლების ამოხსნას აქვს შემდეგი სახე:

$$\psi_n(x) = \psi_n^0(x) + \varepsilon \sum_m' \frac{H'_{mn}}{E_n^0 - E_m^0} \psi_m^0(x) + O(\varepsilon^2), \quad (72,21)$$

$$E_n = E_n^0 + \varepsilon H'_{nn} + \varepsilon^2 \sum_m' \frac{H'_{mn} H'_{nm}}{E_n^0 - E_m^0} + O(\varepsilon^3),$$

სადაც O ოპერატორი აღნიშნავს მაღალი რიგის უსასრულოდ მცირე წევრებს.

ახლა დავაზუსტოთ, რას ნიშნავს გამოთქმა „ $\varepsilon \hat{H}'$ მცირეა $\hat{H}^0$ -თან შედარებით“. (72,21) ფორმულებიდან ჩანს, რომ $\varepsilon \hat{H}'$ ოპერატორის სიმცირე, $\hat{H}_0$ ოპერატორთან შედარებით, ნიშნავს უტოლობას

$$\left| \frac{\varepsilon H'_{mn}}{E_n^0 - E_m^0} \right| \ll 1; \quad (n \neq m). \quad (72,22)$$

ამიტომ შემფოთების თეორიის გამოყენებისას საჭიროა გარკვეული სიფრთხილის დაცვა. შეიძლება (72,22) პირობა ორი რომელიმე (n_1, m_1) დონისათვის დაცული

იყოს, სხვა რომელიმე (n', m') დონეებისათვის კი — არა. მაგალითად, შესაძლებელია ორი მეზობელი დონე იმდენად ახლოს იყოს ერთმანეთთან, რომ (72,22) პირობა დაირღვეს. განვიხილოთ, მაგალითად, წყალბადისებური ატომი და გამოვი-თვალოთ ორ მეზობელ ენერგეტიკულ დონეს შორის სხვაობა. აშკარაა,

$$E_n^0 - E_{n\pm 1}^0 = -\frac{Ze^4\mu}{2\hbar^2} \left\{ \frac{1}{n^2} - \frac{1}{(n\pm 1)^2} \right\} = \frac{\pm 2n-1}{n^2(n\pm 1)^2} \left(\frac{Ze^4\mu}{2\hbar^2} \right); \quad (72,23)$$

მცირე კვანტური რიცხვებისათვის შესაძლებელია (72,22) პირობა დაცული იყოს, დიდი კვანტური რიცხვების დროს კი (72,23) სხვაობა ნულისაკენ მისწრაფვის როგორც $\frac{1}{n^3}$, ამიტომ შეიძლება იმ სხვაობამ გადააჭარბოს $\epsilon \hat{H}_{mn}'$ -ს და, მაშას-

ღამე, (72,22) პირობა დაირღვეს. ამიტომ, შემოთვლების თეორია უფრო კარგ შედეგს მოგვცემს დაბალი ენერგეტიკული დონეებისათვის.

განსაკუთრებულ ყურადღებას მოითხოვს კიდევ ერთი გარემოება. არსებობს შემთხვევები, როდესაც ძალიან მცირე შემოთვლებაც კი არღვევს სისტემის სპექტრის დისკრეტულობას (მაგალითად, ანჰარმონიული ოსცილატორი). ამ შემთხვევაში (72,21) ფორმულებით გამოთვლილ სიდიდეებს აღარა აქვს ჩვეულებრივი აზრი და საკითხი მოითხოვს დამატებით შესწავლას.

ჩვენს მიერ ზემოთ მიღებული შედეგები ადვილად შეიძლება განზოგადდეს იმ შემთხვევისათვის, როდესაც $\hat{H}^0$ ოპერატორს დისკრეტული სპექტრის გვერდით უწყვეტი სპექტრიც აქვს (ასეთი შემთხვევა გვაქვს მაგალითად კულონურ ველში). ამ დროს (72,21) ფორმულებში აჯამვა დისკრეტული სპექტრის მიხედვით უნდა შევინარჩუნოთ და მას დაეუმატოთ უწყვეტი სპექტრის შესაბამისი წევრი, რომელიც წყვეტილი სპექტრის შესაბამისი წევრიდან იმით განსხვავდება, რომ ჯამი შეცვლილია ინტეგრალით. ასე მაგალითად, ტალღური ფუნქციისათვის შეგვიძლია დავწეროთ

$$\psi_n(x) = \psi_n^0(x) + \epsilon \left\{ \sum_m' \frac{H_{mn}'}{E_n^0 - E_m^0} \psi_m^0 + \int \frac{\psi_{E'}^*(x) \hat{H}_{E'n}'}{E_n^0 - E'} dx \right\}, \quad (72,24)$$

სადაც $\psi_{E'}(x)$ უწყვეტი სპექტრის შესაბამისი ფუნქციაა, ხოლო

$$H_{E'n}' = \int \psi_{E'}^*(x) \hat{H}' \psi_n^0(x) dx. \quad (72,25)$$

შევნიშნოთ, რომ ძალიან ხშირად ϵ პარამეტრს იღებენ ერთის ტოლად და შემოთვლების ენერგიის სიმცირეს თვით $\hat{H}'$ -ს სიმცირით ითვალისწინებენ. ასეთ შემთხვევაში (72,21) ფორმულები მიიღებს სახეს:

$$\psi_n(x) = \psi_n^0(x) + \sum_m' \frac{H_{mn}'}{E_n^0 - E_m^0} \psi_m^0(x) + \dots + \quad (72,26)$$

$$E_n = E_n^0 + H_{nn}' + \sum_m' \frac{H_{mn}' H_{nm}'}{E_n^0 - E_m^0} + \dots +,$$

ხოლო (72,22)-ის პირობა ასე დაიწერება:

$$|H_{mn}'| \ll |E_n^0 - E_m^0|. \quad (72,27)$$

დაბოლოს აღვნიშნოთ, რომ შემოთვლების თეორია განსაკუთრებით ეფექტურად გამოიყენება იმ შემთხვევაში, როცა გვანტერესებს ვიპოვოთ ატომის საკუ-

თარი ფუნქციებისა და მნიშვნელობების ცვლილება ატომის გარეშე ველში მოთავსებისას. რადგან ატომში ველები გაცილებით ძლიერია პრაქტიკულად არსებულ გარეშე ველებთან შედარებით, ამიტომ გარეშე ველი შეგვიძლია განვიხილოთ როგორც მცირე შეშფოთება და გამოვიყენოთ შეშფოთების თეორია. გარდა ამისა, შეშფოთების თეორიის გამოყენება შეგვიძლია მაშინაც, როცა პამილტონიანი რამდენიმე წვერისაგან შედგება და ამასთან ერთი რომელიმე წვერი სხვებთან შედარებით ძალიან მცირეა.

სავარჯიშო ამოცანები

1. იპოვეთ e -მუხტის მქონე წრფივი პარამონიული ოსცილატორის ენერგიის ცვლილება ოსცილატორის გარეშე ერთგვაროვან ელექტრულ ველში შეტანის შედეგად, შეშფოთების თეორიის გამოყენებით. ჩათვალოთ, რომ გარეშე ელექტრული ველი სუსტია.

ამოხსნა: შეშფოთების ენერგია ტოლი იქნება $\hat{H}' = -e\mathcal{E}x$, სადაც $\mathcal{E}$ ელექტრული ველის დაძაბულობაა, ხოლო x ოსცილატორის კოორდინატია. ენერგიის პირველი შესწორებისათვის გვექნება

$$E_n^{(1)} = H'_{nn} = -e\mathcal{E} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_n^{0*}(x) x \psi_n^0(x) dx = 0,$$

სადაც $\psi_n^0(x)$ ოსცილატორის ტალღური ფუნქციაა.

საჭიროა განვიხილოთ მეორე შესწორება. რადგან ოსცილატორის ენერგია ტოლია $E_n^0 = \hbar\omega(n+1/2)$, ამიტომ (72,20) ფორმულის თანახმად შეგვიძლია დავწეროთ

$$E_n^{(2)} = \frac{(e\mathcal{E})^2}{\hbar\omega} \sum_m \frac{x_{mn}^2}{n-m}.$$

ოსცილატორისათვის $x_{mn} = 0$, თუ $m \neq n \pm 1$, ამიტომ (62,15) ფორმულის გათვალისწინებით საბოლოოდ მივიღებთ

$$E_n^{(2)} = -\frac{1}{2\mu} \left(\frac{e\mathcal{E}}{\omega} \right)^2.$$

მაშასადამე, ოსცილატორის ენერგია ტოლი იქნება

$$E_n = \hbar\omega(n+1/2) - \frac{1}{2\mu} \left(\frac{e\mathcal{E}}{\omega} \right)^2.$$

2. ვიპოვეთ ენერგიის პირველი შესწორება ნაწილაკისათვის, რომელიც მოძრაობს x_0 სივარის და უსასრულო სიმაღლის ერთგვანოშილებიან პოტენციალურ ორმოში, თუ შეშფოთების ენერგიას აქვს სახე

$$\hat{H}' = -C, \quad \text{როცა} \quad 0 \leq x \leq x_0/2$$

$$\hat{H}' = +C, \quad \text{როცა} \quad x_0/2 \leq x \leq x_0.$$

სადაც C არის მუდმივი

პასუხი: $E^{(1)} = 0$.

§ 73. შეშფოთების თეორია გადაგვარებული სპექტრის შემთხვევაში

წინა პარაგრაფში განვიხილეთ შეშფოთების თეორიის ის სპეციალური შემთხვევა, როცა

$$\hat{H}^0 \psi_n^0 = E_n^0 \psi_n^0 \quad (73,1)$$

განტოლებას ჰქონდა მარტივი სპექტრი, ე. ი. როცა ენერგიის უოველ საკუთარ მნიშვნელობას შეესაბამებოდა ერთი საკუთარი ფუნქცია. პრაქტიკული მიზნებისა-

თვის მნიშვნელოვანია იმ შემთხვევის განხილვაც, როცა (73,1) განტოლების სპექტრი გადაგვარებულია, ე. ი. როცა ენერგიის ერთ საკუთარ მნიშვნელობას შეესაბამება რამდენიმე ტალღური ფუნქცია.

დავუშვათ, რომ ჩვენ გვინტერესებს

$$(\hat{H}^0 + \varepsilon \hat{H}') \psi = E \psi \quad (73,2)$$

განტოლების ამოხსნა, როცა ცნობილია, რომ (73,1) განტოლების სპექტრი გადაგვარებულია. გარკვეულობის მიზნით ვიგულისხმობთ, რომ ენერგიის ერთ E_n^0 საკუთარ მნიშვნელობას შეესაბამება m საკუთარი ფუნქცია $\psi_{n1}^0, \psi_{n2}^0, \dots, \psi_{nm}^0$, ე. ი. სპექტრი m -ჯერადად გადაგვარებულია. როცა $\varepsilon \rightarrow 0$, მაშინ ცხადია (73,2) განტოლების საკუთარი მნიშვნელობები უნდა დაემთხვეს შეუშფოთებელი მდგომარეობის შესაბამისი (73,1) განტოლების m -ჯერად გადაგვარებულ ენერგიის მნიშვნელობას. რაც შეეხება ტალღურ ფუნქციას, რამდენადაც (73,1) განტოლებას აქვს m -ჯერადად გადაგვარებული სპექტრი გაურკვეველია ε -ის ნულისაკენ მისწრაფებისას ამ m ფუნქციიდან რომელს უნდა დაემთხვეს (73,2) განტოლების საკუთარი ψ -ფუნქცია. განსხვავებით მარტივი სპექტრის შემთხვევისაგან გადაგვარების დროს, (73,1) განტოლებას აკმაყოფილებს არა მხოლოდ ერთი ფუნქცია, არამედ m ფუნქცია: $\psi_{n1}^0, \psi_{n2}^0, \dots, \psi_{nm}^0$ და ამ ფუნქციების ნებისმიერი წრფივი კომბინაცია. $\psi_{n1}^0, \psi_{n2}^0, \dots, \psi_{nm}^0$ ფუნქციები ორთოგონალური არ არიან, მაგრამ ყოველთვის შეგვიძლია მათგან ორთოგონალური წრფივი კომბინაციების შედგენა¹. ზოგადობის დაურღვევლად შესაძლებელია დავუშვათ, რომ თვით $\psi_{n1}^0, \psi_{n2}^0, \dots, \psi_{nm}^0$ ფუნქციები წარმოადგენენ ისეთ m წრფივად დამოუკიდებელ ფუნქციებს გადაგვარებული $E_{n1}^0 = E_{n2}^0 = \dots = E_{nm}^0$ ენერგიის საკუთარი მნიშვნელობებით. შემდგომში წერის გამარტივების მიზნით n ინდექსს ყველგან ჩამოუშვებთ და ვიგულისხმებთ, რომ ყველა სიდიდე და საკუთარი ფუნქცია ეკუთვნის მდგომარეობას, რომელიც ხასიათდება n კვანტური რიცხვით.

ამგვარად, ვგულისხმობთ, რომ (73,1) განტოლებას აქვს ორთოგონალური საკუთარი ფუნქციები:

$$\psi_1^0, \psi_2^0, \dots, \psi_m^0, \quad (73,3)$$

რომლებიც წრფივად დამოუკიდებელნი არიან და შეესაბამებიან ენერგიის ერთ მნიშვნელობას $E_1^0 = E_2^0 = \dots = E_m^0$. მაშასადამე, როცა $\varepsilon \rightarrow 0$, (73,2) განტოლების ამონახსნი უნდა მისწრაფოდეს $E_1^0 (= E_2^0 = \dots = E_m^0)$ საკუთარი მნიშვნელობის შესაბამის რომელიმე ψ_i^0 ამონახსნისაკენ, ან მათი წრფივი კომბინაციისაკენ

$$\Phi(x) = \sum_{i=1}^m b_i \psi_i^0(x), \quad (73,4)$$

სადაც b_i მუდმივი რიცხვია. ამ ფუნქციას ნულოვანი მიახლოების ფუნქციას უწოდებენ. საჭიროა შეშფოთების თეორიის საშუალებით განვსაზღვროთ b_i კოეფიციენტები. ამგვარად, განსხვავებით მარტივი სპექტრის შემთხვევისაგან, გადაგვარების შემთხვევაში ნულოვანი მიახლოების ფუნქციაც კი განსაზღვრას მოითხოვს. ზემოთ აღნიშნულის თანახმად, (73,2) განტოლების ამოხსნა შემდეგი მწკრივის სახით უნდა ვეძებთ:

$$E = E_1^0 + \varepsilon E^{(1)} + \dots +, \quad (73,5)$$

$$\psi = \sum_{i=1}^m b_i \psi_i^0(x) + \varepsilon \psi^{(1)} + \dots +.$$

¹ იხ. § 12.

მოვიქცეთ საესებით ისევე, როგორც მარტივი სპექტრის შემთხვევაში. შევიტანოთ ეს მწკრივები (73,2) შრედინგერის განტოლებაში და გავუტოლოთ ε -ის ხარისხების წინ მდგომი კოეფიციენტები; გვექნება:

$$\hat{H}^0 \sum_{i=1}^m b_i \psi_i^0(x) = E_1^0 \sum_{i=1}^m b_i \psi_i^0(x), \quad (73,6)$$

$$(\hat{H}^0 - E_1^0) \psi^{(1)}(x) = \sum_{i=1}^m b_i (E^{(1)} - \hat{H}') \psi_i(x);$$

.

რადგან პირობის თანახმად $E_1^0 = E_2^0 = \dots = E_m^0$, ამიტომ (73,6) სისტემის პირველი განტოლება დაკმაყოფილებულია და იგი ახალს არაფერს იძლევა. ვიპოვოთ (73,6) სისტემის მეორე განტოლების ამონახსნები. ამ მიზნით გამოვარკვეოთ, თუ როგორ შეიცვლება (72,7) ამოხსნადობის პირობა გადაგვარებული სპექტრის შემთხვევაში. მაშასადამე, დავუშვათ, რომ (72,4) დამხმარე განტოლების შესაბამის ერთგვაროვან განტოლებას აქვს m -ჯერადად გადაგვარებული სპექტრი. მაშინ (72,5) და (72,6) ფორმულების ნაცვლად გვექნება შემდეგი გამოსახულებები:

$$\psi(x) = \sum_k \sum_{i=1}^m c_{ki} \psi_{ki}^0; \quad f(x) = \sum_k \sum_{i=1}^m a_{ki} \psi_{ki}^0 \quad (73,6')$$

ეს ფუნქციები შევიტანოთ (72,4) განტოლებაში და გავითვალისწინოთ, რომ

$$\hat{H}^0 \sum_{i=1}^m c_{ki} \psi_{ki}^0 = E_k^0 \sum_{i=1}^m c_{ki} \psi_{ki}^0,$$

მივიღებთ

$$\sum_k (E_k^0 - E_n^0) \sum_{i=1}^m c_{ki} \psi_{ki}^0 = \sum_k \sum_{i=1}^m a_{ki} \psi_{ki}^0. \quad (73,6'')$$

აქედან კი აშკარაა, რომ $a_{k1} = a_{k2} = \dots = a_{km} = 0$, ე. ი. (73,6')-ის თანახმად, ამოხსნადობისათვის საჭიროა შესრულებული იყოს ორთოგონალობის პირობა თითოეულ ψ_{ki}^0 ფუნქციასთან

$$\langle \psi_{ki}^0 | f \rangle = 0; \quad (i=1, 2, \dots, m). \quad (73,6''')$$

ამგვარად, (73,6) სისტემის მეორე განტოლების ამოხსნადობის პირობა ასე დაიწერება:

$$\int \psi_k^*(x) \left\{ \sum_{i=1}^m b_i (E^{(1)} - \hat{H}') \psi_i^0(x) \right\} dx = 0; \quad (k=1, 2, \dots, m). \quad (73,7)$$

თუ გავიხსენებთ, რომ ჩვენი შერჩევის თანახმად ψ_i^0 ფუნქციები ორთოგონალურნი არიან, მივიღებთ განტოლებას

$$\sum_{i=1}^m b_i \{ H'_{ki} - \delta_{ik} E^{(1)} \} = 0, \quad (73,8)$$

სადაც

$$H'_{ki} = \int \psi_k^*(x) \hat{H}' \psi_i^0(x) dx \quad (73,9)$$

წარმოადგენს შეშფოთების ენერგიის მატრიცულ ელემენტს. b_i უცნობი კოეფიციენტების მიმართ მივიღეთ წრფივი ერთგვაროვანი განტოლებათა სისტემა. ამ სისტემას არატრივიალური ამონახსნი მხოლოდ და მხოლოდ მაშინ აქვს, როცა სისტემის დეტერმინანტი ნულის ტოლია, ე. ი, როცა

$$\begin{vmatrix} H'_{11}-E^{(1)} & H'_{12} & \dots & H'_{1m} \\ H'_{21} & H'_{22}-E^{(1)} & \dots & H'_{2m} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ H'_{m1} & H'_{m2} & \dots & H'_{mm}-E^{(1)} \end{vmatrix} = 0. \quad (73,10)$$

ეს გამოსახულება $E^{(1)}$ -ის მიმართ წარმოადგენს m რიგის განტოლებას. ამ განტოლებას საუკუნეობრივ ან სეკულარულ განტოლებას უწოდებენ. მას ექნება m ფესვი:

$$E_1^{(1)}, E_2^{(1)}, \dots, E_m^{(1)}. \quad (73,11)$$

თუ ყველა ეს ფესვი ერთმანეთისაგან განსხვავებულია, მაშინ გვექნება m სხვადასხვა დონე, რომლებიც, როცა $\epsilon \rightarrow 0$, უახლოვდებიან E_i^0 -ს. (73,10) საუკუნეობრივი განტოლების ფესვების შეტანით (73,8) ალგებრულ განტოლებათა სისტემაში, თითოეული ფესვისათვის, ერთი რომელიმე კოეფიციენტის საშუალებით განვსაზღვრავთ ყველა b_i კოეფიციენტს. ამ ერთ კოეფიციენტს k_i განვსაზღვრავთ ნორმირების შემდეგი პირობიდან:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \Phi^* \Phi dx = \sum_{i,k} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_k^*(x) \psi_i(x) dx = \sum_{i=1}^m b_i^* b_i = 1. \quad (73,12)$$

თუ ვიპოვით ყველა b_i კოეფიციენტს, (73,4) ფორმულის თანახმად განვსაზღვრავთ ნულოვანი მიახლოების ტალღურ ფუნქციასაც

$$\Phi_\alpha = \sum_{i=1}^m b_i(E_\alpha^{(1)}) \psi_i(x); \quad (\alpha = 1, 2, \dots, m). \quad (73,13)$$

ჩვენ შეგვიძლია ვიპოვოთ უფრო მაღალი რიგის მიახლოებანიც. მაგრამ ამას არ გავაკეთებთ, რადგან ჩვენი მიზნებისათვის საკმარისია ტალღური ფუნქციის ნულოვანი და ენერგიის პირველი მიახლოებით შემოსაზღვრა. ამგვარად, (73,2) განტოლების მიახლოებითი ამოხსნებისათვის გვექნება:

$$\psi_\alpha(x) = \sum_{i=1}^m b_i(E_\alpha^{(1)}) \psi_i(x) + O(\epsilon) \quad (73,14)$$

$$E_\alpha = E_1^0 + \epsilon E_\alpha^{(1)} + O(\epsilon^2),$$

სადაც $E_\alpha^{(1)}$ წარმოადგენს (73,10) საუკუნეობრივი განტოლების ფესვებს, ხოლო b_i განისაზღვრება (73,8) სისტემიდან.

შევნიშნოთ, რომ შეშფოთების გამო ის დონეები, რომლებიც შეშფოთების „ჩართვამდე“ გადაგვარებული იყო, საზოგადოდ, მარტივი (გადაუგვარებელი) ხდება — ადგილი აქვს დონეების გახლეჩას. ამ მოვლენას უწოდებენ გადაგვარების მოხსნას. როცა (73,10) განტოლების ფესვებიდან ზოგიერთი ერთმანეთს ემთხვევა, მაშინ ადგილი აქვს გადაგვარების ნაწილობრივად მოხსნას — ზოგიერთი დონე შეშფოთების ჩართვის შემდეგაც კვლავ გადაგვარებული რჩება. გადაგვარების მოხსნას ადგილი აქვს, მაგალითად, იმ შემთხვევაში, როცა ატომი შეტანილია გარეშე მაგნიტურ ან ელექტრულ ველში. ამასთან ელექტრულ ველში დონეების გახლეჩას

ბოლო ორი წვერი ნულის ტოლია, რადგან ოსცილატორისათვის ნულისაგან განსხვავებულია მხოლოდ დიაგონალის მეზობელი ელემენტები. ამიტომ, თანახმად (74,12) და (74,8) ფორმულებისა, გვექნება

$$(x^4)_{nn} = x_0^4 \{3n^2 + 3(n+1)^2\} = \left(\frac{\hbar}{\mu\omega}\right)^2 \frac{3}{2} \left(n^2 + n + \frac{1}{2}\right). \quad (74,16)$$

ამგვარად, ენერგიისათვის (74,6), (74,13) და (74,16) ფორმულების გათვალისწინებით შეიძლება დავწეროთ

$$E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2}\right) - \frac{\varepsilon^2}{\hbar\omega} \left(\frac{\hbar}{\mu\omega}\right)^3 \frac{15}{4} \left(n^2 + n + \frac{11}{30}\right) + \frac{3}{2} \lambda \left(\frac{\hbar}{\mu\omega}\right)^2 \left(n^2 + n + \frac{1}{2}\right). \quad (74,17)$$

ამ ფორმულას დიდი გამოყენება აქვს ორატომიანი მოლეკულების თეორიაში, როცა მხედველობაში იღებენ ატომების რხევის ანჰარმონიულობას.

ახლა გამოვარკვიოთ, როგორი სახე აქვს შეშფოთების მიხედვების გამოყენების პირობას დიდი კვანტური რიცხვებისათვის ანჰარმონიული ოსცილატორის შემთხვევაში. თანახმად (74,12) ფორმულისა, მატრიცული ელემენტის რიგი ტოლია

$$\varepsilon(x^3)_{kn} \sim \varepsilon x_0^3 \cdot n^{3/2} = \varepsilon \left(\frac{\hbar}{2\mu\omega}\right)^{3/2} n^{3/2},$$

ხოლო დონეებს შორის სხვაობა რიგით $\hbar\omega$ -ს ტოლია (ე. ი. $E_n^0 - E_k^0 \sim \hbar\omega$), ამიტომ, შეშფოთების თეორიის გამოყენების (72,22) პირობა იძლევა

$$n \ll \left(\frac{\hbar\omega}{\varepsilon}\right)^{2/3} \left(\frac{\mu\omega}{\hbar}\right), \quad (74,18)$$

ე. ი. შეშფოთების თეორიის გამოყენების პირობა დაცული იქნება ძალიან მცირე ε -ის შემთხვევაში. მაგრამ მიუხედავად ამისა, ირკვევა, რომ ანიზოტროპულ ოსცილატორს დისკრეტული სპექტრის ნაცვლად ექნება უწყვეტი სპექტრი. ოსცილატორს წყვეტილი სპექტრი აქვს მხოლოდ და მხოლოდ მაშინ, როცა $\varepsilon = 0$ ¹.

§ 75. შტარკის ეფექტი

ახლა განვიხილოთ გადაგვარებული სპექტრის შესაბამისი შეშფოთების თეორიის გამოყენების მაგალითი.

როგორც თავის დროზე აღვნიშნეთ, წყალბადისებური ატომი წარმოადგენს კვანტურ სისტემას, რომელსაც ახასიათებს გადაგვარება. მართლაც, როგორც ვიცით, წყალბადისებური ატომის ტალღური ფუნქცია მოცემულია გამოსახულებით:

$$\psi_{nlm}(r, \theta, \varphi) = R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi), \quad (75,1)$$

სადაც

$$n = 1, 2, 3, \dots; \quad l = 0, 1, 2, \dots, n-1; \quad -l \leq m_l \leq +l;$$

ხოლო ენერგია ტოლია

$$E_n = -\frac{Z^2 e^4 \mu}{2n^2 \hbar^2}. \quad (75,2)$$

¹ ამის შესახებ დაწერილებით იხილეთ Д. И. Б л о х и н ц е в. Основы квантовой механики, 1963, гл. 272.

ენერგია მხოლოდ n კვანტური რიცხვის ფუნქციაა, ტალღური ფუნქცია კი დამოკიდებულია სამივე კვანტურ რიცხვზე. ეს იმას ნიშნავს, რომ ყოველი ენერგიის დონე გადაგვარებულია (ნორმალური დონის გარდა) და შეიცავს რამდენიმე დონეს. მაგრამ სანამ გარეშე შეშფოთება არ არსებობს, ამ დონეების გარჩევა შეუძლებელია. ისინი, ასე ვთქვათ, ერთმანეთს ემთხვევა.

შტარკის მიერ აღმოჩენილი იყო, რომ თუ ატომს შევიტანთ ელექტრულ ველში, მაშინ ადგილი აქვს სპექტრალური ხაზების გამრავლებას ან, როგორც ამბობენ, გახლეჩას. თითოეული დონე იხლიჩება რამდენიმე დონედ. განვიხილოთ ეს მოვლენა და ავხსნათ იგი თეორიულად. სიმარტივის მიზნით ყურადღებას არ მივაქცევთ რაოდენობრივ მხარეს და დავკმაყოფილებით მოვლენის თვისობრივი აღწერით; ამასთან, შემოვისაზღვრებით მხოლოდ წყალბადისებური ატომებით.

დავუშვათ, რომ წყალბადისებური ატომი მოთავსებულია $\vec{E}$ დაძაბულობის მქონე მუდმივ ელექტრულ ველში. $\vec{E}$ ვექტორი მიემართოთ სისტემის z ღერძის გასწვრივ, მაშინ $\vec{E} = (0, 0, E)$. ის დამატებითი ენერგია, რომელსაც ატომი შეიძენს ელექტრულ ველში, ტოლი იქნება

$$H' = -e(\vec{E}\mathbf{r}) = -eEz, \quad (75,3)$$

სადაც $e\mathbf{r}$ არის ატომის დიპოლმომენტი. მაშასადამე, $\hat{H}^0$ ჰამილტონიანს, რომელიც გვექონდა ატომის ველში შეტანამდე, დამატება ოპერატორი $\hat{H}' = -eEz$, ე. ი. ველში მოთავსებული ატომის ჰამილტონიანს ექნება სახე

$$\hat{H} = \hat{H}^0 + \hat{H}'. \quad (75,4)$$

ვაჩვენოთ, რომ შტარკის ეფექტის გამომწვევი საჭირო ელექტრული ველის შემთხვევაში $\hat{H}'$ შეგვიძლია განვიხილოთ როგორც მცირე შეშფოთება. მართლაც, ატომშიგა ელექტრული ველის დაძაბულობა სიდიდის რიგით ტოლია

$$E_0 = \frac{e}{a_0^2},$$

სადაც $a_0 = 0,5 \cdot 10^{-8}$ სმ ბორის პირველი ორბიტის რადიუსია. სიდიდის რიგით ატომშიგა ველი $E_0 = 5,13 \cdot 10^9$ ვოლტი/სმ, გარეშე ველი კი რომლის დროსაც ხდება შტარკის ეფექტი, სიდიდის რიგით 10^5 ვოლტი/სმ-ზე ნაკლებია. ამიტომ $\hat{H}'$ მართლაც შეგვიძლია განვიხილოთ როგორც შეშფოთების ენერგია.

გამოვიყენოთ შეშფოთების თეორია გადაგვარების შემთხვევაში. ამისათვის დაგვჭირდება $\hat{H}'$ -ის მატრიცული ელემენტის გამოთვლა შეუშფოთებელი მდგომარეობის (75,1) ტალღური ფუნქციებით. გვექნება

$$\langle n'l'm' | \hat{H}' | nlm \rangle = \int \psi_{n'l'm'}^*(r, \theta, \varphi) \hat{H}' \psi_{nlm}(r, \theta, \varphi) r^2 dr d\Omega.$$

გავითვალისწინოთ, რომ $\hat{H}' = -eEz$ და გამოვიყენოთ ტალღური ფუნქციების (75,1) გამოხატულება, მაშინ მივიღებთ

$$\langle n'l'm' | \hat{H}' | nlm \rangle = -eE \int_0^\infty R_{n'l'}(r) r R_{nl}(r) r^2 dr \int Y_{l'm'}^*(\theta, \varphi) \cos \theta Y_{lm}(\theta, \varphi) d\Omega \quad (75,5)$$

რადგან (33,29) ფორმულის თანახმად

$$\begin{aligned} \cos \theta Y_{lm}(\theta, \varphi) = & \left[\frac{(l-m+1)(l+m+1)}{(2l+1)(2l+3)} \right]^{1/2} Y_{l+1,m}(\theta, \varphi) + \\ & + \left[\frac{(l-m)(l+m)}{(2l-1)(2l+1)} \right]^{1/2} Y_{l-1,m}(\theta, \varphi), \end{aligned}$$

ამიტომ (75,5) მატრიცული ელემენტი მიიღებს სახეს

$$\begin{aligned} \langle n'l'm' | \hat{H}' | nlm \rangle = \\ = -e\mathcal{E} \langle n'l' | r | nl \rangle \cdot \left\{ \left[\frac{(l-m+1)(l+m+1)}{(2l+1)(2l+3)} \right]^{1/2} \delta_{l',l+1} \delta_{m'm} + \right. \\ \left. + \left[\frac{(l-m)(l+m)}{(2l-1)(2l+1)} \right]^{1/2} \delta_{l',l-1} \delta_{m'm} \right\}, \end{aligned} \quad (75,6)$$

სადაც

$$\langle n'l' | r | nl \rangle = \int_0^\infty R_{n'l'}(r) r R_{nl}(r) r^2 dr. \quad (75,7)$$

ამგვარად, (75,7) ფორმულიდან საბოლოოდ გვექნება:

$$\langle n'l+1m | \hat{H}' | nlm \rangle = -e\mathcal{E} \langle n'l+1 | r | nl \rangle \left[\frac{(l-m+1)(l+m+1)}{(2l+1)(2l+3)} \right]^{1/2}, \quad (75,8)$$

$$\langle n'l-1m | \hat{H}' | nlm \rangle = -e\mathcal{E} \langle n'l-1 | r | nl \rangle \left[\frac{(l-m)(l+m)}{(2l-1)(2l+1)} \right]^{1/2}. \quad (75,9)$$

როგორც ვხედავთ, მატრიცული ელემენტი ნულის ტოლი რომ არ იყოს, გარკვეული პირობა უნდა დაედოს l და m კვანტურ რიცხვებს; მთავარი კვანტური რიცხვი კი არ იზღუდება, ამიტომ მატრიცული ელემენტები შეგვიძლია დავნომროთ მხოლოდ (l, m) და (l', m') წყვილებით. ე. ი. (75,6) მატრიცულ ელემენტში n' და n მთავარ კვანტურ რიცხვებს აღარ დავწერთ.

რადგან წყალბადისებური ატომის პირველი დონე ($n=1$) მარტივია, ამიტომ განვიხილოთ $n=2$ დონე. ამ შემთხვევაში გადაგვარების ჯერადობა $n^2=4$. $n=2$ დროს $l=0, 1$ და სათანადოდ $m=0$ და $m=1, 0, -1$. ელექტრულ ველში ენერგიის შესწორების მოსაძებნად საჭიროა ამოვხსნათ (73,10) საუკუნეობრივი განტოლება, რომელიც $n=2$ შემთხვევაში მიიღებს სახეს:

$$\begin{vmatrix} H'_{00,00} - E^{(1)} & H'_{00,10} & H'_{00,11} & H'_{00,1-1} \\ H'_{10,00} & H'_{10,10} - E^{(1)} & H'_{10,11} & H'_{10,1-1} \\ H'_{11,00} & H'_{11,10} & H'_{11,11} - E^{(1)} & H'_{11,1-1} \\ H'_{1-1,00} & H'_{1-1,10} & H'_{1-1,11} & H'_{1-1,1-1} - E^{(1)} \end{vmatrix} = 0, \quad (75,10)$$

სადაც $E^{(1)}$ არის ენერგიის პირველი შესწორება. მაგრამ თანახმად (75,6)-ისა, ყველა დიაგონალური მატრიცული ელემენტი ნულის ტოლია. ნულისაგან განსხვავებული იქნება მხოლოდ $H'_{00,10}$ და $H'_{10,00}$. რადგან $\hat{H}'$ ერმიტული ოპერატორია, ამიტომ $H'_{00,10} = H'_{10,00}$. ეს სიდიდე აღვნიშნოთ A -თი; მაშინ საუკუნეობრივი განტოლება მიიღებს სახეს

$$\begin{vmatrix} -E^{(1)} & A & 0 & 0 \\ A & -E^{(1)} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -E^{(1)} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -E^{(1)} \end{vmatrix} = 0. \quad (75,11)$$

თუ გავშლით მინორებად, გვექნება

$$\Delta = (-E^{(1)}) (-E^{(1)}) \begin{vmatrix} -E^{(1)} & A \\ A & -E^{(1)} \end{vmatrix} = (E^{(1)})^2 (E^{(1)} - A)(E^{(1)} + A), \quad (75,12)$$

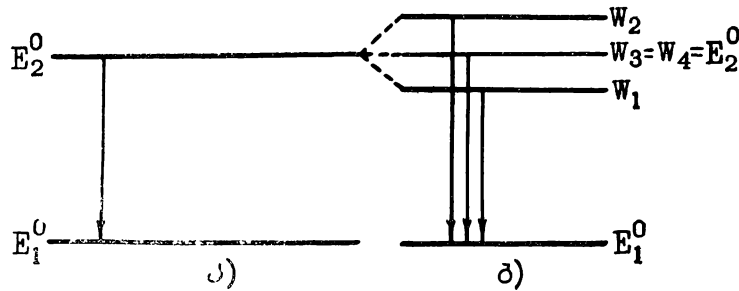
საიდანაც

$$\begin{aligned} E_1^{(1)} &= +A, \quad E_2^{(1)} = -A, \\ E_3^{(1)} &= 0, \quad E_4^{(1)} = 0. \end{aligned} \quad (75,13)$$

ამგვარად, 4-ჯერადი გადაგვარებული ერთი ღონის მაგიერ მივიღეთ ახალი ღონეები:

$$\begin{aligned} W_1 &= E_2^0 + A; \quad W_2 = E_2^0 - A; \\ W_3 &= E_2^0; \quad W_4 = E_2^0. \end{aligned} \quad (75,14)$$

ჩვენ ვხედავთ, რომ ველში შეტანისას ატომს ერთი ღონის ნაცვლად ექნება სამი ღონე ($n=2$ დროს).



ნახ. 17.

ნათელია, რომ ამ შემთხვევაში გადაგვარების მოხსნა სრული არაა (ერთი ღონე კვლავ გადაგვარებულია $W_3 = W_4 = E_2^0$). ამ შემთხვევაში ამბობენ, რომ გადაგვარება მხოლოდ ნაწილობრივ მოიხსნა. მე-17 ნახაზიდან ჩანს, რომ თუ ველის გარეშე შესაძლებელი იყო ერთი სპექტრალური ხაზის არსებობა (შემთხვევა ა) ატომის ელექტრულ ველში შეტანისას გვექნება სამი სპექტრალური ხაზი (შემთხვევა ბ). სწორედ ამაში მდგომარეობს შტარკის ეფექტი. ბოლოს შევნიშნოთ, რომ $E_2 \rightarrow E_1$ გადასვლის შედეგად მიღებული სიხშირე შეესაბამება ლაიმანის ულტრა-იისფერ სერიას. როცა გვანტერესებს შტარკის ეფექტი ხილული სპექტრისათვის, მაშინ საჭიროა განვიხილოთ გადასვლები ზედა ღონეებიდან $n=2$ ღონეზე. თუ გვინდა ვიპოვოთ გახლეჩილი ღონის სიგანე A , მაშინ საჭიროა $n=2$ -ის შესაბამისი ტალღური ფუნქციებით გამოვთვალოთ მატრიცული ელემენტი $\langle 200 | H' | 210 \rangle = A$. (75,7) განმარტების თანახმად (65,35) და (65,36) რადიალური ფუნქციების გა-თვალისწინებით, შეგვიძლია დავწეროთ

$$\langle 200 | \hat{H}' | 210 \rangle = -\frac{2e\mathcal{E}}{\sqrt{15}} \langle 20 | r | 21 \rangle, \quad (75,15)$$

$$\langle 20 | r | 21 \rangle = \frac{1}{4\sqrt{3}} \left(\frac{1}{a_0} \right)^4 \int_0^\infty r^4 \left[1 - \frac{r}{2a_0} \right] e^{-r/a_0} dr, \quad (75,16)$$

საიდანაც საბოლოოდ გვექნება

$$\langle 200 | H' | 210 \rangle = \frac{6}{\sqrt{5}} e\mathcal{E}u_0. \quad (75,17)$$

როცა გარეშე ველი $\mathcal{E}=10^4$ ვოლტი/სმ, მაშინ ეს სიდიდე $10^{-4} eV$ რიგისაა. ე. ი. გახლეჩილ დონეებს შორის მანძილი გაცილებით ნაკლებია $\Delta E = (E_2^0 - E_1^0)$ -თან შედარებით.

§ 76. დროზე დამოკიდებული შემფოტების თეორია. გადასვლის ალგათიზმის ფორმულა

ჩვენ განვიხილეთ შემფოტების თეორია სტაციონარული მდგომარეობებისათვის, ე. ი. როცა როგორც შემფოტებული მდგომარეობის ჰამილტონიანი $\hat{H}_0$, ისე შემფოტების ენერგია $\hat{H}'$ დროზე ცხადად არ იყო დამოკიდებული. ახლა განვიხილოთ შემფოტების თეორია არასტაციონარული მდგომარეობებისათვის. როგორც ვიცით, შრედინგერის განტოლებას არასტაციონარული მდგომარეობებისათვის აქვს შემდეგი სახე:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \hat{H}(\mathbf{r}, t) \Psi(\mathbf{r}, t). \quad (76,1)$$

ამ განტოლების ზუსტად ამოხსნა, მარტივ შემთხვევაშიაც კი, ძალიან რთულ ამოცანას წარმოადგენს. ასევე ძნელია ამ განტოლების მიახლოებითი ამოხსნისათვის შემფოტების თეორიის გამოყენება. არასტაციონარულ მდგომარეობაში ენერგია არ ინახება და ამიტომ ენერგიის შესწორების მონახვას, ისე როგორც ამას ვაკეთებდით დროზე დამოუკიდებელი შემფოტების დროს, არავითარი აზრი არ შეიძლება ჰქონდეს. ამიტომ ამ შემთხვევაში შემფოტების თეორიის ჩამოყალიბებას სხვანაირად უნდა მივუდგეთ. სახელდობრ, შემფოტების თეორიის ჩამოყალიბება შესაძლებელია მაშინ, როცა არასტაციონარული მდგომარეობის ჰამილტონიანი შეგვიძლია წარმოვიდგინოთ შემდეგი სახით:

$$\hat{H}(\mathbf{r}, t) = \hat{H}^0(\mathbf{r}) + \hat{H}'(\mathbf{r}, t), \quad (76,2)$$

სადაც $\hat{H}'(\mathbf{r}, t)$ შეგვიძლია განვიხილოთ როგორც დროზე დამოკიდებული მცირე შემფოტების ოპერატორი, ხოლო $\hat{H}^0(\mathbf{r})$ არის სტაციონარული მდგომარეობების შესაბამისი ჰამილტონიანი.

ამგვარად, საჭიროა ამოიხსნას განტოლება

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = [\hat{H}^0(\mathbf{r}) + \hat{H}'(\mathbf{r}, t)] \Psi \quad (76,3)$$

როცა ცნობილია

$$\hat{H}^0 \phi_n^0(\mathbf{r}) = E_n^0 \phi_n^0(\mathbf{r}) \quad (76,4)$$

სტაციონარული მდგომარეობის განტოლების ამონახსნები. ვიგულისხმობთ, რომ $\hat{H}'(\mathbf{r}, t)$ გაცილებით ნაკლებია, ვიდრე $\hat{H}^0(\mathbf{r})$, ისე რომ იგი შეგვიძლია განვიხილოთ როგორც მცირე შემფოტება. თუ $t \leq 0$ მომენტისათვის სისტემაზე არ მოქმედებდა შემფოტება (ე. ი. $\hat{H}' = 0$ როცა $t \leq 0$), მაშინ (76,3) განტოლებას ექნება სახე

$$i\hbar \frac{\partial \Psi_n^0}{\partial t} = \hat{H}^0 \Psi_n^0, \quad (76,5)$$

და მოძრაობს იმპულსით, რომელიც შენახვის კანონის ძალით იქნება $mv = \frac{\hbar\omega}{c}$ -ს

ტოლი. ენერგია კი ამ შემთხვევაში არ ინახება $\frac{mv^2}{2} \neq \hbar\omega$. პროცესის მეორე სა-

ფეხურზე მოძრავი ელექტრონი გამოასხივებს ახალ კვანტს, რომლის დროსაც შენახულია იმპულსი, ენერგია კი ისე იცვლება, რომ აღდგენილი იქნეს მისი საწყისი მნიშვნელობა. 2. ელექტრონი ჯერ ასხივებს საბოლოო კვანტს, შემდეგ კი შთანთქმავს საწყისს. ორივე ამ საშუალებად გადასვლას ერთი და იგივე საბოლოო მდგომარეობამდე მივყავართ. შეიძლება გამოითვალოს თითოეული ამ გადასვლის მატრიცული ელემენტი და (78,10) ფორმულის გამოყენებით ვიპოვოთ გაფანტვის დიფერენციალური განიკვეთი. კომპტონის ეფექტის შესაბამისი განიკვეთი რელატივისტური ეფექტების გათვალისწინებით ნაპოვნი იყო კლაინისა და ნიშინას მიერ¹.

აღვნიშნოთ, რომ მეორე რიგის ეფექტს განეკუთვნება აგრეთვე სინათლის კომბინაციური გაფანტვა, სინათლის კოჰერენტული გაფანტვა და სხვა.

მესამე რიგის ეფექტებიდან ყველაზე მნიშვნელოვანია ატომგულის ველში დამუხრუჭებული ელექტრონის გამოსხივება და იგივე ველში ელექტრონ-პოზიტრონის წყვილის წარმოქმნა.

§ 79. ვარიაციული მეთოდი

მიახლოებითი გამოთვლების სრულიად განსხვავებულ მეთოდს წარმოადგენს ვარიაციული მეთოდი. ძალიან ხშირად შემოფოტების თეორია ან სულაც არ გამოიყენება, ანდა გამოთვლები იმდენად რთულდება, რომ ამოცანის გადაწყვეტა პრაქტიკულად შეუძლებელი ხდება. ამ შემთხვევაში მიმართავენ შედარებით უფრო მარტივ-ვარიაციულ მეთოდს. მიახლოებითი გამოთვლებისათვის ვარიაციული მეთოდი, ისევე როგორც შემოფოტების თეორია, დიდი ხნით ადრე დამუშავებული იყო მათემატიკაში. არსებობს ვარიაციული მეთოდის სხვადასხვა სახე. მიმარტივის მიზნით ჩვენ განვიხილავთ შრედინგერისა და რიტცის ვარიაციულ მეთოდებს. დავიწყოთ შრედინგერის ვარიაციული მეთოდის განხილვით; მისი არსი შემდეგში მდგომარეობს: თუ მოცემული გვაქვს კვადრატულად ინტეგრებადი ნებისმიერი ფუნქცია $\Phi(x, y, z; \alpha, \beta, \gamma, \dots)$ x, y, z ცვლადებისა და $\alpha, \beta, \gamma, \dots$ პარამეტრებისა და, თუ E_0 არის $\hat{H}$ ენერგიის ოპერატორის ყველაზე უმცირესი საკუთარი მნიშვნელობა, მაშინ ადგილი აქვს უტოლობას

$$E_0 \leq \int_{-\infty}^{+\infty} \Phi^* \hat{H} \Phi d\tau, \quad (79,1)$$

იმ პირობით, რომ

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \Phi^* \Phi d\tau = 1, \quad (79,2)$$

სანამ (79,1) უტოლობის მკაცრ მტკიცებას მოვიყვანდეთ, აღვნიშნოთ, რომ იგი მარტივად გამომდინარეობს ფიზიკური მოსაზრებებიდან. მართლაც, იმ მდგომარეობაში, რომელიც ხასიათდება ნებისმიერი Φ ფუნქციით, ენერგიის საშუალო მნიშვნელობა $\bar{E} = \langle \Phi | \hat{H} | \Phi \rangle$, ამიტომ აშკარაა, რომ ენერგიის მინიმალური მნი-

¹ O. Klein, Y. Nishina, Zeits. f. Phys. 52, 853, 869, (1929) იხ. აგრეთვე წიგნი В. Гайтлер, Квантовая теория излучения, ИЛ, 1956.

შენელობა უნდა უდრიდეს ენერგიის საშუალო მნიშვნელობას ან იყოს მასზე ნაკლები, რაც ამტკიცებს (79,1) ფორმულას.

ზუსტი დამტკიცება, რომელსაც ქვემოთ მოვიტანთ, ეკუთვნის ეკარტს და ისიც საკმარისად მარტივია. განვიხილოთ გამოსახულება

$$\int \Phi^* (\hat{H} - E_0) \Phi d\tau = \int \Phi^* \hat{H} \Phi d\tau - E_0. \quad (79,3)$$

ვთქვათ, ψ_n არის $\hat{H}$ ოპერატორის საკუთარი ფუნქცია, ე. ი.

$$\hat{H} \psi_n = E_n \psi_n \quad (79,4)$$

და ნებისმიერი ფუნქცია გავშალოთ ამ $\psi_1, \psi_2 \dots \psi_n$ ორთონორმირებული ფუნქციების მწყრივად

$$\Phi = \sum_m a_m \psi_m.$$

შევიტანოთ ეს გამოსახულება (79,3)-ში; მივიღებთ

$$\begin{aligned} \int \Phi^* \hat{H} \Phi d\tau - E_0 &= \sum_m \sum_n a_m^* a_n (E_n - E_0) \int \psi_m^* \psi_n d\tau = \\ &= \sum_{m,n} a_m^* a_n (E_n - E_0) \delta_{mn} = \sum_n |a_n|^2 (E_n - E_0). \end{aligned}$$

ეს უკანასკნელი ტოლია ან მეტია ნულზე, რადგან $|a_n|^2 \geq 0$ და $E_n \geq E_0$ (E_0 უმცირესი საკუთარი მნიშვნელობაა). ამით (79,1) ფორმულის სამართლიანობა დამტკიცებულია. თუ (79,1) ფორმულაში შევიტანთ ჰამილტონიანის გამოსახულებას, შეგვიძლია დავწეროთ

$$E_0 \leq -\frac{\hbar^2}{2\mu} \int_{-\infty}^{+\infty} \Phi^* \Delta \Phi d\tau + \int_{-\infty}^{+\infty} \Phi^* V \Phi d\tau. \quad (79,5)$$

ამ ფორმულის სხვა სახით გამოსახვისათვის უნდა გარდავქმნათ $\langle \Phi | \Delta \Phi \rangle$ სკალარული ნამრავლი, რადგან ∇^2 ერმიტული ოპერატორია, ამიტომ გვაქვს

$$\langle \Phi | \Delta \Phi \rangle = \langle \Phi | \frac{1}{i} \nabla_i \nabla_i \Phi \rangle = \langle \frac{1}{i} \nabla_i \Phi | i \nabla_i \Phi \rangle = - \langle \nabla \Phi | \nabla \Phi \rangle \quad (79,6)$$

(79,5) ფორმულა მიიღებს სახეს

$$E_0 \leq \frac{\hbar^2}{2\mu} \int_{-\infty}^{+\infty} \nabla \Phi^* \cdot \nabla \Phi d\tau + \int_{-\infty}^{+\infty} \Phi^* V \Phi d\tau. \quad (79,7)$$

როცა Φ ფუნქცია არაა ნორმირებული, მაშინ (79,5) მოგვცემს

$$E_0 \leq -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{\langle \Phi | \Delta \Phi \rangle}{\langle \Phi | \Phi \rangle} + \frac{\langle \Phi | V | \Phi \rangle}{\langle \Phi | \Phi \rangle}; \quad (79,8)$$

(79,1) ფორმულაში (ასევე (79,5) და (79,7) ფორმულებში), ტოლობა მაშინ გვექნება, როცა Φ ფუნქცია ძირითადი მდგომარეობის შესაბამისი ნამდვილი ტალღური ფუნქციაა, ე. ი. როცა $\hat{H} \Phi_0 = E \Phi_0$. (79,1) ფორმულა საშუალებას გვაძლევს ვიპოვოთ მიახლოებითი ტალღური ფუნქცია და ენერგია ძირითადი მდგომარეობისათვის. რადგან ნებისმიერი (კვადრატულად ინტეგრებადი) ფუნქციისათვის

$I \equiv \langle \Phi | \hat{H} | \Phi \rangle$ ინტეგრალი ყოველთვის მეტია E_0 -ზე, ამიტომ ნამდვილთან ყველაზე უფრო ახლოს მყოფი მნიშვნელობის მისაღებად საჭიროა ვიპოვოთ $I = \langle \Phi | \hat{H} | \Phi \rangle$ ინტეგრალის აბსოლუტური მინიმუმი (უპირობო ექსტრემუმი). პრაქტიკული გამოთვლებისათვის ეს მეთოდი ჩამოვაყალიბოთ შემდეგი თანამიმდევრობით: 1. ვწერთ ამოსახსნელი ამოცანის ჰამილტონიანს. 2. ვიღებთ ისეთ ნებისმიერ Φ ფუნქციას, რომელიც ფიზიკური მოსაზრებებით ყველაზე უფრო კარგად შეესაბამება ამოცანას; ფუნქციაში უნდა შედიოდეს განუზღვრელი პარამეტრები $\alpha, \beta, \gamma, \dots$; ვახდენთ ამ ფუნქციის ნორმირებას. 3. ვპოულობთ ინტეგრალის მნიშვნელობას

$$I(\alpha, \beta, \gamma, \dots) = \int_{-\infty}^{+\infty} \Phi^* \hat{H} \Phi d\tau. \quad (79,9)$$

4. ვეძებთ $I(\alpha, \beta, \dots)$ -ს ექსტრემუმს $\alpha, \beta, \dots$ პარამეტრების მიმართ. მაშინ

$$I(\alpha_{ext}, \beta_{ext}, \dots) \geq E_0 \quad (79,10)$$

იქნება ენერგიის საძებნი მნიშვნელობა. ხოლო, თუ პარამეტრების ექსტრემალურ მნიშვნელობას შევიტანთ Φ -ში, მივიღებთ სათანადო ამოცანის მიახლოებით ტალღურ ფუნქციას. Φ ფუნქციას საცდელ ფუნქციას უწოდებენ. აშკარაა, რომ შედეგი დამოკიდებულია საცდელი Φ ფუნქციის კარგად შერჩევაზე. საზოგადოდ, რაც მეტ პარამეტრზე იქნება დამოკიდებული საცდელი ფუნქცია, მით უკეთეს შედეგს მივიღებთ.

ადვილად შეიძლება ვიპოვოთ აგზნებული მდგომარეობის მიახლოებითი ტალღური ფუნქცია. რადგან ძირითადი და აგზნებული მდგომარეობის ტალღური ფუნქციები ორთოგონალური უნდა იყოს, ამისათვის აგზნებული მდგომარეობის საცდელი ფუნქცია (რომელიც აგრეთვე დამოკიდებული იქნება პარამეტრებზე) ისე უნდა შევარჩიოთ, რომ იგი ძირითადი მდგომარეობის ფუნქციასთან ორთოგონალური აღმოჩნდეს; შემდეგ კი, აგზნებული მდგომარეობის ენერგიასა და ტალღურ ფუნქციას ვიპოვოთ ისეთივე პროცედურით, რაც საჭიროა ძირითადი მდგომარეობის ენერგიისა და ფუნქციის მოსაძებნად.

რომ გასაგები იყოს, როგორ ხდება ვარიაციული მეთოდის დახმარებით ენერგიისა და ტალღური ფუნქციის მოძებნა, განვიხილოთ მაგალითი: ვიპოვოთ ენერგიის მინიმალური მნიშვნელობა და ტალღური ფუნქცია წყალბადის ატომის ძირითადი მდგომარეობისათვის. ზემოთ მოტანილი ეტაპები ჩავატაროთ თანამიმდევრობით.

1. ჰამილტონიანს აქვს შემდეგი სახე: (იხ. (65,3) ფორმულა, $n=1$ და $l=0$ -თვის)

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) - \frac{e^2}{r} = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \left\{ \frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} \right\} - \frac{e^2}{r}. \quad (79,11)$$

2. საცდელი ფუნქცია შეიძლება იყოს ნებისმიერი, მაგრამ ფიზიკური მოსაზრებებით უმჯობესია ავიღოთ $\Phi(\alpha, r) = c \exp(-\alpha r)$, რადგან დიდ მანძილებზე ტალღური ფუნქცია სწრაფად უნდა ისაბოოდეს. ნორმირება $(0, \infty)$ შუალედში მოგვცემს

$$\Phi(r, \alpha) = \sqrt{\frac{\alpha^3}{\pi}} e^{-\alpha r}. \quad (79,12)$$

3. ინტეგრალის გამოთვლით მივიღებთ

$$I(\alpha) = \frac{\alpha^3}{\pi} 4\pi \int_0^\infty e^{-\alpha r} \left\{ -\frac{\hbar^2}{2\mu} \left[\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} \right] - \frac{e^2}{r} \right\} e^{-\alpha r} r^2 dr = \frac{\hbar^2 \alpha^2}{2\mu} - e^2 \alpha. \quad (79,13)$$

4. $I(\alpha)$ -ს ექსტრემუმის პირობა $\frac{dI(\alpha)}{d\alpha} = 0$ გვაძლევს

$$\alpha_{ext} = \frac{\mu e^2}{\hbar^2}, \quad (79,14)$$

ე. ი.

$$I(\alpha_{ext}) = E_0 = -\frac{\mu e^4}{2\hbar^2}. \quad (79,15)$$

ხოლო ფუნქციას ექნება სახე

$$\Phi(\alpha r) = \frac{1}{\sqrt{\pi \alpha_0^3}} e^{-r/a_0}, \quad (79,16)$$

სადაც a_0 ბორის პირველი ორბიტის რადიუსია. როგორც ვხედავთ, ენერგიისა და ფუნქციისათვის მივიღეთ ზუსტი მნიშვნელობანი. ეს იმიტომ მოხდა, რომ საცდელ ფუნქციად ჩვენ „შემთხვევით“ სწორი ტალღური ფუნქცია შევარჩიეთ.

რომ აგვედო სხვა საცდელი ფუნქცია, მივიღებდით შედარებით უფრო უარეს შედეგს. მაგრამ ვარიაციული მეთოდის არსი სწორედ იმაში მდგომარეობს, რომ რა სახის საცდელი ფუნქციაც არ უნდა ავიღოთ, ენერგიის გამოთვლილი მნიშვნელობა ყოველთვის ტოლი ან მეტი იქნება ენერგიის ნამდვილ მნიშვნელობაზე. შევნიშნოთ, რომ ეს მეთოდი ამოცანის თავისებურებათა სწორი გათვალისწინების შემდეგ ხშირად საუკეთესო შედეგებს იძლევა. მაგალითად, დავუშვათ, რომ გვინდა ვიპოვოთ წრფივი ჰარმონიული ოსცილატორის ენერგია და ტალღური ფუნქცია. რადგან ოსცილატორი წონასწორობის ირგვლივ ირხევა ძალიან მცირე მანძილებზე, ამიტომ უსასრულობაში ტალღური ფუნქცია ექსპონენციალურად უნდა ხდებოდეს ნულის ტოლი, სათავეში კი იგი სასრული უნდა იყოს. გარდა ამისა, ამოცანის სიმეტრიის გამო, ფუნქცია უნდა იყოს ლუწი. ასეთ ფუნქციებს წარმოადგენს $\exp(-\alpha x^2)$, $\exp(-\beta x^4)$ და ა. შ. სიმარტივის მიზნით საცდელ ფუნქციად უნდა ავიღოთ $\exp(-\alpha x^2)$, რაც ოსცილატორის ამოცანისათვის მოგვცემს ზუსტ შედეგს.

ამგვარად, ჩვენ დავინახეთ, რომ ენერგიის მინიმალური მნიშვნელობა და შესაბამისი საკუთარი ფუნქცია შეიძლება ვიპოვოთ $I = \langle \Phi | \hat{H} | \Phi \rangle$ გამოსახულების აბსოლუტური მინიმუმის პირობიდან

$$\delta \int \Phi^* \hat{H} \Phi d\tau = 0. \quad (79,17)$$

ახლა კი ვაჩვენოთ, რომ E_n ენერგიის საკუთარი მნიშვნელობაც და მისი შესაბამისი საკუთარი ფუნქციებიც შეიძლება მიღებულ იქნეს იგივე ვარიაციული ამოცანიდან, თუ აბსოლუტური მინიმუმის პირობას შევცვლით პირობითი ექსტრემუმით. ამისათვის მოვიქცეთ ისე, როგორც მათემატიკაში იქცევიან პირობითი მინიმუმის მოძებნის დროს შემოვიღოთ ლაგრანჟის ნამდვილი λ პარამეტრი და (79,17) ფორმულა ასე შევცვალოთ

$$\delta \int \Phi^* (\hat{H} - \lambda) \Phi d\tau = 0, \quad (79,18)$$

სადაც ვგულისხმობთ, რომ $\int \Phi^* \Phi d\tau = 1$; რადგან $\overline{E} = \langle \Phi | \hat{H} | \Phi \rangle$ ნამდვილი სი-
ლიდია, ამიტომ

$$\int \Phi^* \hat{H} \Phi d\tau = \int \Phi \hat{H}^* \Phi^* d\tau. \quad (79,19)$$

ვინაიდან Φ კომპლექსური ფუნქციაა, ვარირება Φ და Φ^* -ით შეგვიძლია დამოუ-
კიდებლად ჩავატაროთ. (79,18) მოგვცემს:

$$\int \delta \Phi^* (\hat{H} - \lambda) \Phi d\tau = 0, \quad (79,20)$$

$$\int \Phi^* (\hat{H} - \lambda) \delta \Phi d\tau = \int \delta \Phi (\hat{H}^* - \lambda) \Phi^* d\tau = 0. \quad (79,21)$$

მეორე განტოლება პირველის კომპლექსურად შეუღლებულია და ამიტომ
ახალს არაფერს იძლევა. (79,20) ფორმულიდან ჩანს, რომ, როცა λ არის $\hat{H}$ ოპე-
რატორის საკუთარი მნიშვნელობა $\lambda = E$ და Φ კი არის საკუთარი ფუნქცია, ე. ი.
როცა დაცულია განტოლება $\hat{H} \Phi = E \Phi$ (ან $H^* \Phi^* = E \Phi^*$), ექსტრემუმის პირობა
დაკმაყოფილებულია. პირიქითაც, $\hat{H}$ ოპერატორის საკუთარ ფუნქციებსა და სა-
კუთარ მნიშვნელობებს ვიპოვიოთ, თუ ამოვხსნით (79,18) ექსტრემუმის ამოცანას.
რადგან $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta + V$, ამიტომ (79,6) ტოლობის გათვალისწინებით, (79,18)
განტოლება ასეც შეიძლება გადავწეროთ:

$$\delta \int \left\{ \frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla \Phi^* \nabla \Phi + V \Phi \Phi^* - \lambda \Phi^* \Phi \right\} d\tau = 0; \quad (79,22)$$

ამ განტოლების ექსტრემუმი მოგვცემს $\lambda = E_n$ საკუთარ მნიშვნელობასა და $\Phi = \psi_n$
საკუთარ ფუნქციებს. მიახლოებითი ამოხსნა იმაში მდგომარეობს, რომ (79,22)-ში
შეგვაქვს საცდელი Φ ფუნქციები და ექსტრემუმის პირობით ვსაზღვრავთ λ -ს.
აღნიშნული მეთოდი მათემატიკაში დამუშავებული იყო ჯერ კიდევ 1909 წელს
რიტცის მიერ.

§ 80. რიტცის მეთოდი

ავირჩიოთ ნებისმიერი ფუნქციები $\varphi_1, \varphi_2 \dots \varphi_m$, რომლებიც აკმაყოფილებენ
იმავე სასაზღვრო პირობებს, რასაც სასურველი ტალღური ფუნქცია. დავუშვათ,
საცდელი Φ ფუნქცია წარმოადგენს ამ ფუნქციების წრფივ კომბინაციას

$$\Phi = \sum_{i=1}^m a_i \varphi_i, \quad (80,1)$$

სადაც a_i მუდმივებია, რომლებიც მოითხოვს განსაზღვრას. შევიტანოთ ეს გამო-
სახულება ფორმულაში

$$\delta \int \Phi^* (\hat{H} - \lambda) \Phi d\tau = 0; \quad (80,2)$$

გვექნება

$$\delta \sum_i \sum_k a_i^* a_k \left\{ \int \varphi_i^* \hat{H} \varphi_k d\tau - \lambda \int \varphi_i^* \varphi_k d\tau \right\} = 0. \quad (80,2')$$

შემოვიღოთ აღნიშვნები

$$H_{ik} = \int \varphi_i^* \hat{H} \varphi_k d\tau = H_{ki}^* = \int \left(\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla \varphi_i^* \nabla \varphi_k + V \varphi_i^* \varphi_k \right) d\tau$$

სავარჯიშო მაგალითები

1. ვარიაციული მეთოდის გამოყენებით იპოვეთ წრფივი პარამონიული ოსცილატორის ენერგია და ტალღური ფუნქცია აგზნებული მდგომარეობისათვის.

მითითება: საჭიროა დაიწეროს ისეთი საცდელი ფუნქცია, რომელიც ორთოგონალურია ძირითადი მდგომარეობის $\psi_0(x) = \sqrt{\frac{4}{\pi}} \exp(-ax^2/2)$ ფუნქციასთან. (ასეთი ფუნქცია იქნება, მაგალითად, $\psi_1(x) = c \frac{d}{dx} \psi_0(x)$).

2. ვარიაციული მეთოდის გამოყენებით იპოვეთ დეიტრონის (იხ. § 69) ძირითადი მდგომარეობის ენერგია და ფუნქცია, თუ პოტენციალური ენერგია განისაზღვრება $V(r) = -V_0 \exp(-r/r_0)$ ფუნქციით, სადაც $V_0 \approx 32 \text{ MeV}$ პოტენციალური ორმოს სიღრმეა, ხოლო $r_0 = 2,2 \cdot 10^{-13} \text{ სმ}$. საცდელ ფუნქციად ავიღოთ

$$\Phi = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} R = \sqrt{\frac{a^3}{8\pi r_0^3}} e^{-ar/r_0},$$

სადაც a პარამეტრა.

მითითება. გამოიყენეთ (29,7) ფორმულა. ინტეგრალების ამოხსნის შემდეგ მიღებული გამოსახულების ექსტრემალური მნიშვნელობა a პარამეტრის მიმართ იქნება სწორედ ენერგიის მნიშვნელობა.

პასუხი: $a_{\text{ext}} = 1,34$, $E_0 \approx 2,14 \text{ MeV}$.

§ 81. კვანძოვანი მიახლოების მეთოდი

როგორც ოპტიკური ანალოგიის განხილვის დროს დავინახეთ, როცა ნაწილაკის შესაბამისი დე ბროილის ტალღის სიგრძე $\lambda \ll R$, (სადაც R იმ არის ზომა, რომელშიც ხდება მოძრაობა), სამართლიანია გეომეტრიული ოპტიკა და, მაშასადამე, საკმარისი მიახლოებით სამართლიანი უნდა იყოს კლასიკური მექანიკის კანონებიც. ამ შემთხვევაში ნაწილაკის მოძრაობა შეგვიძლია განვიხილოთ როგორც კვანძოვანი (თითქმის კლასიკური). არსებობს ასეთი მოძრაობის შესწავლის მიახლოებითი მეთოდი, რომელსაც კვანძოვანი მიახლოების მეთოდს უწოდებენ. ეს მეთოდი დამუშავებული იყო ვენცელის, კრამერსისა და ბრილუენის მიერ, ამიტომაც ამ მეთოდს ხშირად შემოკლებით WKB მეთოდს უწოდებენ¹.

განვიხილოთ შრედინგერის სტაციონარული მდგომარეობების განტოლება

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta \psi + V\psi = E\psi. \quad (81,1)$$

როგორც ვიცით, კვანტური მექანიკისა და კლასიკური მექანიკის მოძრაობის განტოლებებს შორის კავშირს ამყარებს შემდეგი ფუნქცია:

$$\psi = e^{\frac{i}{\hbar} S}, \quad (81,2)$$

სადაც S არის ქმედება. (81,2) შევიტანოთ (81,1) განტოლებაში, მივიღებთ

$$\frac{1}{2\mu} (\nabla S)^2 - \frac{i\hbar}{2\mu} \Delta S = E - V \quad (81,3)$$

თუ დავეშვებით, რომ პლანკის მუდმივი $\hbar = 0$, მაშინ (81,3) განტოლება გადაიქცევა კლასიკური მექანიკის ჰამილტონ-იაკობის განტოლებად. ამიტომ შეგვიძლია

¹ G. Wentzel, Zeits. f. Phys. 38, 51S, (1926); H. A. Kramers, Zeits. f. Phys. 39, 828, (1926); L. Brillouin, Comptes rendus, 183, 24, (1926). იხ. აგრეთვე H. Teffreys, Proc. Lond. Math. Soc. (2), 23, 428, (1924).

დავსკვნათ, რომ $\hbar \rightarrow 0$ დროს კვანტური მექანიკის კანონები კლასიკური მექანიკის კანონებში გადადის. ეს გარემოება გვიჩვენებს, რომ $\hbar$ უნდა განვიხილოთ როგორც მცირე პარამეტრი და (81,2) გამოსახულებაში შემავალი ქმედება ამ პარამეტრის მიხედვით გავშალოთ მწკრივად. ამასთან, კლასიკური მექანიკის შედეგებს მოგვცემს ამ მწკრივის პირველი წევრი ($\hbar = 0$). თუ ჩვენ გვინდა გვქონდეს უკეთესი მიახლოება, ვიდრე კლასიკური მექანიკაა, არ უნდა შემოვიღოთ მწკრივის მხოლოდ პირველი წევრით.

სიმარტივის მიზნით განვიხილოთ ერთგანზომილებიანი მოძრაობა; მაშინ (81,3) განტოლება მიიღებს სახეს

$$\frac{1}{2\mu} (\nabla S)^2 - \frac{i\hbar}{2\mu} \Delta S = E - V. \quad (81,4)$$

ზემოთ აღნიშნულის მიხედვით $S(x)$ ფუნქცია გავშალოთ $\hbar/i$ ხარისხების მწკრივად

$$S(x) = S_0(x) + \frac{\hbar}{i} S_1(x) + \left(\frac{\hbar}{i}\right)^2 S_2(x) + \dots + \quad (81,5)$$

ამ მწკრივის ნამდვილი ნაწილი მოგვცემს (81,2) გამოსახულების ფაზის შესწორებას, წარმოსახვითი კი — ამპლიტუდისას.

თუ (81,5) მწკრივს შევიტანთ (81,4) განტოლებაში და შევინარჩუნებთ $\hbar$ -ის მხოლოდ ნულოვან ხარისხებს, მივიღებთ პირველ მიახლოებას. ამ შემთხვევაში განტოლებას ექნება შემდეგი სახე:

$$\frac{1}{2\mu} S_0'^2(x) = E - V(x); \quad (81,6)$$

რომელიც წარმოადგენს ერთგანზომილებიან ჰამილტონ-იაკობის განტოლებას. მისი ამოხსნა ასე დაიწერება:

$$S_0(x) = \pm \int_{x_0}^x \sqrt{2\mu [E - V(x)]} dx, \quad (81,7)$$

სადაც x_0 დაფიქსირებული წერტილია.

თუ (81,7)-ს შევიტანთ (81,2)-ში, მივიღებთ ორ კერძო ამონახსნს:

$$\phi_1(x) = C_1 \exp \left(\frac{i}{\hbar} \int_{x_0}^x \sqrt{2\mu [E - V(x)]} dx \right), \quad (81,8)$$

$$\phi_2(x) = C_2 \exp \left(- \frac{i}{\hbar} \int_{x_0}^x \sqrt{2\mu [E - V(x)]} dx \right), \quad (81,9)$$

სადაც C_1 და C_2 ნებისმიერი მუდმივებია. აღებული მიახლოება სამართლიანია მაშინ, როცა (81,4) ფორმულაში მარცხენა მხარის მეორე წევრი აბსოლუტური მნიშვნელობით პირველზე გაცილებით მცირეა, ე. ი.

$$\hbar \left| \frac{S_0''(x)}{S_0'^2(x)} \right| \ll 1, \quad (81,10)$$

ან, რაც იგივეა

$$\left| \frac{d}{dx} \frac{\hbar}{S_0'(x)} \right| \ll 1; \quad (81,11)$$

რადგან $E = p^2/2\mu + V(x)$, ამიტომ

$$p(x) = \sqrt{2\mu [E - V(x)]}. \quad (81,12)$$

და (81,7) ფორმულის ძალით გვექნება $S'_0(x) = p(x)$; ასე რომ, (81,11) პირობა მიიღებს სახეს

$$\left| \frac{d\lambda}{dx} \right| \ll 1. \quad (81,13)$$

მეორე მხრივ, რადგან

$$\frac{dp}{dx} = - \frac{\mu \frac{\partial V}{\partial x}}{\sqrt{2\mu (E - V(x))}} = - \frac{\mu F}{p}, \quad (81,14)$$

სადაც F ძალაა, ამიტომ (81,11) პირობა ასეც შეგვიძლია გამოვსახოთ:

$$\frac{\mu \hbar F}{p^3} \ll 1. \quad (81,15)$$

აქედან ჩანს, რომ კვაზიკლასიკური მიახლოება სამართლიანია დიდი სიჩქარეებისათვის. კერძოდ, კვაზიკლასიკურობის პირობა დარღვეულია $p=0$ წერტილებში. ამ წერტილებს მობრუნების წერტილები ეწოდება (x_1 და x_2 წერტილები, ნახ. 18-ზე). მობრუნების წერტილები განისაზღვრება $p(x)=0$ პირობიდან, ე. ი. განტოლებიდან

$$V(x) = E. \quad (81,16)$$

ახლა განვიხილოთ მეორე მიახლოება. ამ მიზნით (81,4)-ში შევიტანოთ $S = S_0 + (\hbar/i) S_1$ და შევინარჩუნოთ $\hbar$ -ის მხოლოდ პირველი ხარისხები. თუ გავითვალისწინებთ (81,6) განტოლებას, შეგვიძლია დავწეროთ

$$S'_0 S_1 + \frac{1}{2} S''_0 = 0, \quad (81,17)$$

საიდანაც

$$S'_1 = - \frac{1}{2} \frac{S''_0}{S'_0} = - \frac{1}{2} \frac{p'(x)}{p(x)}, \quad (81,18)$$

რომლის ამოხსნა მოგვცემს

$$S_1(x) = - \frac{1}{2} \ln p(x) + \text{const}, \quad (81,19)$$

ხოლო

$$S(x) = S_0 + \frac{\hbar}{i} S_1 = \pm \int_{x_0}^x \sqrt{2\mu [E - V(x)]} dx - \frac{\hbar}{i} \ln \sqrt[4]{2\mu [E - V(x)]} + \text{const}. \quad (81,20)$$

ამგვარად, იმ არეში, სადაც $E > V(x)$ კვაზიკლასიკურ ტალღურ ფუნქციას მეორე მიახლოებაში ექნება შემდეგი სახე:

$$\begin{aligned} \phi(x) = & \frac{C_1}{\sqrt[4]{E-V(x)}} \exp\left(i \frac{\sqrt{2\mu}}{\hbar} \int_{x_0}^x \sqrt{E-V(x)} dx\right) + \\ & + \frac{C_2}{\sqrt[4]{E-V(x)}} \exp\left(-i \frac{\sqrt{2\mu}}{\hbar} \int_{x_0}^x \sqrt{E-V(x)} dx\right). \end{aligned} \quad (81,21)$$

იმ არეში, სადაც კლასიკური მექანიკით მოძრაობა დაუშვებელია, ე. ი. (x_1, x_2) არეში, $E < V(x)$ და ტალღური ფუნქციისათვის WKB მიახლოებაში მივიღებთ

$$\begin{aligned} \phi(x) = & \frac{D_1}{\sqrt[4]{V(x)-E}} \exp\left(\frac{\sqrt{2\mu}}{\hbar} \int_{x_0}^x \sqrt{V(x)-E} dx\right) + \\ & + \frac{D_2}{\sqrt[4]{V(x)-E}} \exp\left(-\frac{\sqrt{2\mu}}{\hbar} \int_{x_0}^x \sqrt{V(x)-E} dx\right). \end{aligned} \quad (81,22)$$

როგორც ვხედავთ, იმ არეში, სადაც $E > V(x)$, გვაქვს ოსცილირებადი ამონახსნები, ხოლო არეში, სადაც $E < V(x)$, ტალღური ფუნქცია შეიცავს ექსპონენციალურად კლებად და ზრად წევრებს. ეს ფუნქციები დამოკიდებულია სამ ნებისმიერ მუდმივზე.

აღვიღად დასაანახია, რომ როგორც (81,21), ისე (81,22) ფუნქცია ექსპონენტურაა მამრავლის წყალობით მობრუნების წერტილებში, ე. ი. იქ, სადაც კვაზიკლასიკურობის პირობა დარღვეულია, უსარულობა ხდება. ამიტომ აუცილებელია ამ ფუნქციების სახის დაზუსტება მობრუნების წერტილების უშუალო მახლობლობაში. ამის მიღწევა შეიძლება აღნიშნულ ფუნქციებში შემავალი ნებისმიერი მუდმივების სათანადო შერჩევით. ამისათვის პოულობენ შრედინგერის განტოლების ზუსტ ამონახსნს მობრუნების წერტილის (ვთქვათ $x=x_1$) უშუალო მახლობლობაში, რისთვისაც პოტენციალურ ენერგიას შლიან მწკრივად და ისაზღვრებიან x -ის პირველი ხარისხით $V(x) = V(x_1) + \left(\frac{\partial V}{\partial x}\right)_{x=x_1} (x - x_1)$. ამ პოტენცია-

ლური ენერგიისათვის კი შრედინგერის განტოლება ზუსტად ამოიხსნება. ამის შემდეგ ითხოვენ, რომ ზუსტი ფუნქციის მნიშვნელობები მობრუნების წერტილის უშუალო მახლობლობაში მარცხნივ და მარჯვნივ ემთხვეოდეს შესაბამისი არეების კვაზიკლასიკურ ფუნქციებს. ეს პროცედურა საშუალებას გვაძლევს ნებისმიერი მუდმივების სწორად შერჩევას. ჩვენ არ შევუდგებით ამ ამოცანის გადაწყვეტას და დავკმაყოფილებით მხოლოდ საბოლოო პასუხების ამოწერით.

როცა პოტენციალურ ენერგიას აქვს ნახ. 18-ზე მოცემული სახე, ე. ი., როცა $x > x_1$ -სათვის $E < V(x)$, ხოლო $x < x_1$ -სათვის $E > V(x)$, მაშინ სწორ მიახლოებით ტალღურ ფუნქციას ექნება სახე:

$$\phi(x) = \frac{C}{\sqrt[4]{E-V(x)}} \cos\left(\frac{\sqrt{2\mu}}{\hbar} \int_{x_1}^x \sqrt{E-V(x)} dx + \frac{\pi}{4}\right), \quad x < x_1 \quad (81,23)$$

რომელსაც $x > x_1$ არეში შეესაბამება ფუნქცია

$$\psi(x) = \frac{C}{2\sqrt[4]{V(x)-E}} \exp\left(-\frac{\sqrt{2\mu}}{\hbar} \int_{x_1}^x \sqrt{V(x)-E} dx\right); \quad x > x_1 \quad (81,24)$$

როცა მობრუნების წერტილის მარჯვნივ $E > V(x)$ (ასეთი შემთხვევა გვაქვს ნახ. 18-ზე მეორე $x = x_2$ მობრუნების წერტილისათვის), მაშინ (81,24) ფუნქციას $x > x_2$ არეში შეესაბამება ტალღური ფუნქცია:

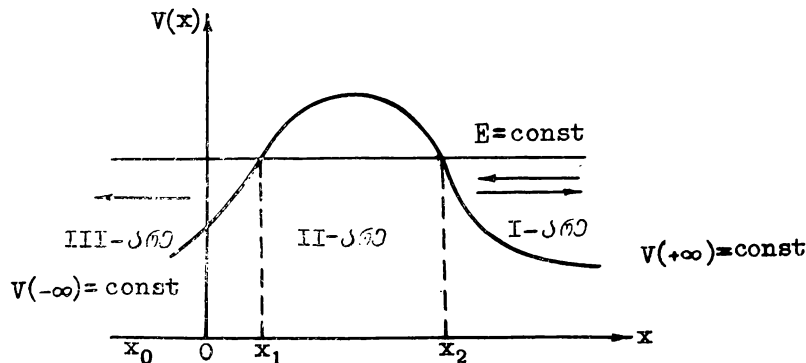
$$\psi(x) = \frac{C}{\sqrt[4]{E-V(x)}} \sin\left(\frac{\sqrt{2\mu}}{\hbar} \int_{x_2}^x \sqrt{E-V(x)} dx + \frac{\pi}{4}\right). \quad x > x_2 \quad (81,25)$$

ეს ფუნქციები უკვე წარმოადგენენ WKB მიახლოების „წორ“ ტალღურ ფუნქციებს. კერძოდ, (81,23) და (81,24) არიან შრედიנגერის განტოლების ერთი და იგივე ზუსტი ამონახსნის მიახლოებითი ფუნქციები მობრუნების $x = x_1$ წერტილის მარცხნივ და მარჯვნივ.

კვაზიკლასიკური მიახლოების ტალღურ ფუნქციებს დიდი გამოყენება აქვთ სხვადასხვა ამოცანების გადაწყვეტის დროს.

§ 82. გაუონვის კოეფიციენტი ნახისმიერი სახის პარტახლომილბიანი ჯაბირის შემთხვევაში

ნებისმიერი ფორმის ერთგანზომილებიანი პოტენციალური ჯების შემთხვევაში გაუონვის კოეფიციენტის ზოგადი ფორმულის მისაღებად გამოვიყენოთ WKB მეთოდით ნაპოვნი ტალღური ფუნქციები. დავუშვათ, რომ პოტენციალურ ჯების აქვს ნახ. 19-ზე მოცემული სახე და ვთქვათ, ამ ჯების ნაწილაკები ეცემა მარჯვ-



ნახ. 19

ნიდან მარცხნივ x -ღერძის საწინააღმდეგო მიმართულებით. აშკარაა, x_1 წერტილის მარცხნივ გვექნება მხოლოდ გასული ტალღა, x_2 -წერტილის მარჯვნივ კი — როგორც დაცემული, ისე არეკლილი ტალღები. ტალღური ფუნქციები, არეების შესაბამისად აღვნიშნოთ ψ_1 , ψ_2 და ψ_3 -ით. მაშინ, თანახმად (81,21) და (81,22) ფორმულებისა, შეგვიძლია დავწეროთ:

$$\begin{aligned} \psi_1(x) = \frac{1}{\sqrt[4]{E-V(x)}} \left\{ a_+ \exp\left[\frac{i\sqrt{2\mu}}{\hbar} \int_{x_2}^x \sqrt{E-V(x)} dx\right] + \right. \\ \left. + a_- \exp\left[-\frac{i\sqrt{2\mu}}{\hbar} \int_{x_2}^x \sqrt{E-V(x)} dx\right] \right\}, \quad x > x_2 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \psi_2(x) = & \frac{1}{\sqrt{4(E-V(x))}} \left\{ b_+ \exp \left[\frac{V_{2\mu}}{\hbar} \int_{x_1}^x \sqrt{V(x)-E} dx \right] + \right. \\ & \left. + b_- \exp \left[-\frac{V_{2\mu}}{\hbar} \int_{x_1}^x \sqrt{V(x)-E} dx \right] \right\} \quad x_1 < x < x_2 \end{aligned} \quad (82,1)$$

$$\psi_3(x) = \frac{C_-}{\sqrt{4(E-V(x))}} \exp \left[-i \frac{V_{2\mu}}{\hbar} \int_{x_0}^x \sqrt{E-V(x)} dx \right] \quad x > x_1$$

ამ გამოსახულებებში a_+ , a_- , b_+ , b_- და c_- ნებისმიერი მუდმივებია. რადგან $x_1 < x < x_2$ შუალედში $V(x) > E$, ამიტომ $\psi_2(x)$ -ისათვის ავიღეთ (81,22) ამონახსნი. ადვილი მისახვედრია, რომ აქ დაწერილ ფუნქციებს აქვთ სწორი ასიმპტოტური ფორმა. სახელდობრ, $\psi_1(x)$ უსასრულო მანძილზე წარმოადგენს დაცემული და არეკლილი ტალღების ჯამს, ხოლო $\psi_3(x)$ — გასულ ტალღას. ამის დასამტკიცებლად ვიგულისხმობთ, რომ პოტენციალური ენერგია ჯებირიდან უსასრულოდ შორს მუდმივი სიდიდეა, ე. ი. როცა $x \ll x_1$ და $x \gg x_2$, მაშინ $V(\pm \infty) = \text{const}$ განვიხილოთ ჯერ $\psi_1(x)$ ფუნქციის ყოფაქცევა დიდ მანძილებზე. გვექნება

$$\psi_1(x) = \frac{1}{\sqrt{4(E-V(\infty))}} \left\{ a_+ e^{\frac{i p}{\hbar}(x-x_2)} + a_- e^{-\frac{i p}{\hbar}(x-x_2)} \right\} \quad x \gg x_2 \quad (82,2)$$

ამ გამოსახულებას კი აქვს შემდეგი სახე:

$$\psi_1(x) = A e^{\frac{i p}{\hbar} p x} + B e^{-\frac{i p}{\hbar} p x}, \quad (82,3)$$

რომელიც მართლაც წარმოადგენს დაცემული და არეკლილი ბრტყელი ტალღების სუპერპოზიციას. სრულიად ანალოგიურად, როცა $x \ll x_1$, $\psi_3(x)$ ფუნქციას ექნება გამოსახულება

$$\psi_3(x) = \frac{c_-}{\sqrt{4(E-V(-\infty))}} e^{-\frac{i p}{\hbar} p(x-x_0)}, \quad (82,4)$$

ბადა შეესაბამება x -ღერძის საწინააღმდეგო მიმართულებით გავრცელებად ტალღას, ე. ი. გასულ ტალღას.

გაუონვის კოეფიციენტი შეიძლება განესაზღვროთ როგორც შემდეგი ფარდობა:

$$D = \frac{|\psi_{\text{გას}}(-\infty)|^2}{|\psi_{\text{გას}}(+\infty)|^2}, \quad (82,5)$$

სადაც $\psi_{\text{გას}}(-\infty)$ არის ჯებირში გასული ნაწილაკების ტალღური ფუნქციის მნიშვნელობა $-\infty$ -ში, ხოლო $\psi_{\text{გას}}(+\infty)$ არის დაცემულ ნაწილაკთა ნაკადის შესაბამისი ტალღური ფუნქციის მნიშვნელობა $+\infty$ -ში.

გაუონვის კოეფიციენტისათვის გვექნება

$$D = \frac{v_{+\infty}}{v_{-\infty}} \left| \frac{c_-}{a} \right|^2; \quad (82,6)$$

$v_{+\infty}$ და $v_{-\infty}$ ნაწილაკის სიჩქარეებია ჯებირზე დაჯახებამდე და ჯებირში გასვლის შემდეგ ჯებირიდან ძალიან შორ მანძილებზე. c_- და a_- კოეფიციენტების გან-

სასაზღვრად გამოვიყენოთ შეკვერვის პირობები მობრუნების წერტილებზე. ჯერ შევკეროთ ψ_2 და ψ_3 ფუნქციები $x=x_1$ წერტილზე¹. ფუნქციების ტოლობა $x=x_1$ წერტილზე მოგვცემს

$$b_+ + b_- = c_- \exp \left\{ -i \frac{\sqrt{2\mu}}{\hbar} \int_{x_0}^{x_1} \sqrt{E - V(x)} dx \right\}. \quad (82,7)$$

წარმოებულების გატოლებით $x=x_1$ წერტილზე მივიღებთ²

$$b_+ - b_- = -ic_- \exp \left\{ -i \frac{\sqrt{2\mu}}{\hbar} \int_{x_0}^x \sqrt{E - V(x)} dx \right\}. \quad (82,8)$$

ამ ორი ტოლობიდან კი ადვილად განვსაზღვრავთ b_+ და b_- მუდმივებს. გვექნება

$$b_{\pm} = \frac{1 \mp i}{2} c_- \exp \left\{ -i \frac{\sqrt{2\mu}}{\hbar} \int_{x_0}^{x_1} \sqrt{E - V(x)} dx \right\}. \quad (82,9)$$

ახლა შევკეროთ ψ_1 და ψ_2 ფუნქციები $x=x_2$ წერტილზე. ამასთან, განვიხილოთ ისეთი ჯგუფი, რომელსაც აქვს საკმარისად დიდი სიგანე. მაშინ ψ_2 -ში მეორე წევრი პირველთან შედარებით გაცილებით მცირეა $x=x_2$ წერტილში, ექსპონენტში მინუს ნიშნის გამო. ამიტომ განიერი ჯგუფისათვის შეგვიძლია დავუშვათ, რომ $b_- = 0$. ამის გამო, წარმოებულების ტოლობა მოგვცემს

$$a_+ - a_- = -ib_+ \exp \left\{ \frac{\sqrt{2\mu}}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{V(x) - E} dx \right\}. \quad (82,10)$$

ამავე წერტილზე ფუნქციათა ტოლობა კი იძლევა ტოლობას

$$a_+ + a_- = b_+ \exp \left\{ \frac{\sqrt{2\mu}}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{V(x) - E} dx \right\}. \quad (82,11)$$

ამ ორი უკანასკნელი ტოლობიდან შეგვიძლია განვსაზღვროთ a_+ და a_- მუდმივები. გვექნება

$$a_+ = \frac{1-i}{2} b_+ \exp \left\{ \frac{\sqrt{2\mu}}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{V(x) - E} dx \right\}, \quad (82,12)$$

$$a_- = \frac{1+i}{2} b_+ \exp \left\{ \frac{\sqrt{2\mu}}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{V(x) - E} dx \right\}. \quad (82,13)$$

უკანასკნელ გამოსახულებაში შევიტანოთ b_+ -ის მნიშვნელობა (82,9) ფორმულიდან; მივიღებთ

¹ მკაცრად რომ ვიმსჯელოთ, მობრუნების წერტილებში ჩვენ მიერ შერჩეული ფუნქციები არ ვარგა, რადგან კვაზიკლასიკური მიახლოების პირობა ამ წერტილებში არ სრულდება. გაუონვის კოეფიციენტი ამ მიახლოებაში გამოყვანილი იყო გამოცემის მიერ. აღსანიშნავია, რომ აღნიშნული უზუსტობა საბოლოო შედეგს არ ცვლის.

² წარმოებულების გატოლების დროს ექსპონენტში $\sqrt{E - V(x)}$ გამოსახულებას შეიძლება ყურადღება არ მივაქციოთ, რადგან იგი საერთოა ორივე ფუნქციისათვის.

$$a_- = -\frac{1}{2}c_- \exp \left\{ -i \frac{\sqrt{2\mu}}{\hbar} \int_{x_0}^{x_1} \sqrt{E - V(x)} dx \right\} \cdot \exp \left\{ \frac{\sqrt{2\mu}}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{V(x) - E} dx \right\}. \quad (82,14)$$

საიდანაც შეგვიძლია განვსაზღვროთ a_-/c_- სიდიდე, რომელიც მონაწილეობს გაჟონვის კოეფიციენტის განმარტებაში. მაშასადამე, (82,6) გაჟონვის კოეფიციენტი მიიღებს შემდეგ სახეს:

$$D = 4 \frac{v_+}{v_-} e^{-\frac{2}{\hbar} S}, \quad (82,15)$$

სადაც

$$S = \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{2\mu [V(x) - E]} dx. \quad (82,16)$$

ამგვარად, გაჟონვის კოეფიციენტის განსაზღვრა დაიყვანება S ინტეგრალის გამოთვლაზე. ინტეგრალი აიღება კლასიკური მექანიკის თვალსაზრისით მოძრაობისათვის დაუშვებელ არეზე. ამ არის ბოლო წერტილები, ე. ი. ინტეგრალის საზღვრები განიმარტება განტოლებიდან

$$V(x) = E, \quad (82,17)$$

ე. ი. ფესვქვეშა გამოსახულების ნულებით.

მიღებული ფორმულების განზოგადება ადვილია ცენტრალური სიმეტრიის მქონე პოტენციალური ჯებირისათვის. როგორც ვიცით, ცენტრალურ ველში ამოცანა ფაქტიურად დაიყვანება ერთგანზომილებიან შემთხვევაზე, ოღონდ პოტენციალურ ენერგიას უნდა დაემატოს ცენტრგამშორი პოტენციალური ენერგია

$$V_l(r) = \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2}. \quad (82,18)$$

ასე რომ, ცენტრალური სიმეტრიის ჯებირში გაჟონვის კოეფიციენტისათვის შეგვიძლია დავწეროთ შემდეგი ფორმულა:

$$D_l = 4 \frac{v_+}{v_-} e^{-\frac{2}{\hbar} S_l}, \quad (82,19)$$

სადაც

$$S_l = \int_{r_1}^{r_2} \sqrt{2\mu \left\{ V(r) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2} - E \right\}} dr. \quad (82,20)$$

ინტეგრალის საზღვრები იმავე წესით განისაზღვრება. კერძოდ, r_1 და r_2 მობრუნების წერტილები აკმაყოფილებენ განტოლებას

$$V(r) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2} - E = 0. \quad (82,21)$$

როცა ჯებირს ეცემა ნულოვანი მომენტის მქონე ნაწილაკი ($l=0$), მაშინ (82,15) და (82,19) ფორმულებს გარეგნულად ერთი და იგივე სახე აქვთ.

ბოლოს ერთხელ კიდევ მივუთითოთ, რომ მიღებული ფორმულები სამართლიანია მხოლოდ საკმარისად განიერი ჯებირისათვის.

§ 83. α -დაშლის თეორია

α -დაშლის მოვლენა განვიხილოთ როგორც მნიშვნელოვანი მაგალითი ცენტრალური სიმეტრიის ჯგუფში გავლისა. კვანტური მექანიკის ჩამოყალიბებადღე დიდი ხნით ადრე აღმოჩენილ იქნა, რომ ზოგიერთი მძიმე ატომგული გამოსხივებდა დადებითად დამუხტულ ნაწილაკებს, რომლებსაც α -ნაწილაკები უწოდეს, თვით მოვლენას კი — α -დაშლა. გაზომვებმა გეჩვენეს, რომ α -ნაწილაკის მუხტი $+2e$ -ს ტოლია ($e = 4,8 \cdot 10^{-10} CGSe$ ელემენტარული მუხტია). შემდგომში აღმოჩნდა, რომ α -ნაწილაკები წარმოადგენს ჰელიუმის ატომგულებს და, მაშასადამე, შედგება ორი ნეიტრონისა და ორი პროტონისაგან. თუ საწყის გულს აღვნიშნავთ ${}_Z X^A$ -ით, სადაც A არის ატომის დამრგვალებული უახლოეს მთელ რიცხვად — ე. წ. მასური რიცხვი, Z კი ატომგულის მუხტია, მაშინ α -დაშლის შედეგად ადგილი ექნება ასეთ გარდაქმნას

$${}_Z X^A \rightarrow {}_{Z-2} X^{A-4} + \alpha, \quad (83,1)$$

სადაც ${}_{Z-2} X^{A-4}$ წარმოადგენს α -დაშლისას მიღებულ გულს, რომლის მასა საწყის გულთან შედარებით შემცირებულია ოთხი ერთეულით, მუხტი კი — ორი ერთეულით. აღსანიშნავია, რომ α -დაშლა ხდება თავისთავად, გარეშე პირობების ჩაურევლად. ამასთან, ალბათობა იმისა, რომ dt დროში მოხდება გულების დაშლა, პროპორციულია dt -სი და t მომენტში არსებული დაუშლელი ატომგულების რიცხვისა, ე. ი. თუ N არის იმ გულების რიცხვი, რომლებიც არ დაშლილან t მომენტისათვის, მაშინ ნაწილაკთა ის რიცხვი, რომელიც dt დროში დაიშლება, იქნება

$$dN = -N\lambda dt,$$

სადაც λ არის პროპორციულობის კოეფიციენტი. ამ განტოლების ინტეგრაცია მოგვცემს

$$N(t) = N(0) e^{-\lambda t}, \quad (83,2)$$

სადაც $N(0)$ არის გულების ის რიცხვი, რომელიც გვაქვს $t=0$ მომენტში. დროს, რომლის განმავლობაშიც დაიშლება t მომენტში არსებული დაუშლელი გულების ნახევარი, უწოდებენ დაშლის ნახევარ პერიოდს და აღნიშნავენ T -თი. (83,2) ფორმულიდან გვექნება

$$\frac{N(T)}{N(0)} = \frac{1}{2} = e^{-\lambda T},$$

საიდანაც

$$T = \frac{\ln 2}{\lambda}. \quad (83,3)$$

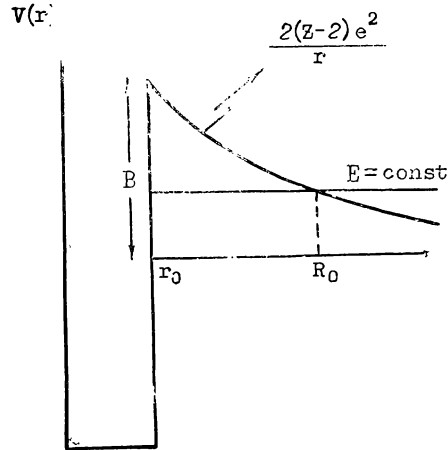
λ -ს უწოდებენ რადიაქტიური დაშლის მუდმივას. იგი დამოკიდებულია გულებიდან გამოტყორცნილი α -ნაწილაკების ენერგიაზე. მოენახოთ რადიაქტიური ატომგულის სიცოცხლის საშუალო ხანგრძლიობა; იგი უდრის

$$\tau = \frac{1}{N(0)} \int_0^\infty t \lambda N(t) dt = \lambda \int_0^\infty t e^{-\lambda t} dt = \frac{1}{\lambda}. \quad (83,4)$$

გამოვარკვევით, როგორ შეიძლება მივუდგეთ α -დაშლის პრობლემის გადაწყვეტას.

როგორც ცნობილია, ატომის გული შედგება ნეიტრონებისა და პროტონებისაგან, რომელთა შორისაც მოქმედებს ატომგულური ძალები. ამ ძალებს ის თავისებურება ახასიათებს, რომ ახლო მანძილებზე ($\sim 10^{-13}$ სმ) გაცილებით ძლიერი არიან, ვიდრე კულონური ან სხვა რაიმე ჩვეთვის ცნობილი ძალები, გარდა ამისა,

ისინი ახლოს მოქმედების ხასიათისა არიან, ე. ი. მათ აქვთ მაქსიმალური მნიშვნელობა ატომგულურ მანძილებზე ($r_0 = 1,4 A^{1/3} 10^{-13}$ სმ; A მასური რიცხვია) და სწრაფად იქცევიან ნულად ამ მანძილის გარეთ. საკითხი იმის შესახებ, თუ როდის ჩნდება α -ნაწილაკი გულში, დაშლის მომენტში, თუ მანამდეც არსებობდა მასში როგორც დამოუკიდებელი ერთეული, დღესაც არ არის სავსებით გარკვეული. სიმარტივის მიზნით ჩვენ დავუშვებთ, რომ α -ნაწილაკები ატომგულში დაშლის მომენტისათვის მზა სახით არსებობს. ატომგულის რადიუსის მანძილზე (ატომგულის შიგნით) მოქმედებს ორი ტიპის ძალები: მძლავრი მიზიდვის ატომგულური ძალები და ძალზე სუსტი განზიდვის კულონური ძალები. ამგვარად, საჯამო ურთიერთქმედება r_0 მანძილზე იქნება კვლავ მძლავრი მიზიდვის ხასიათისა, რომელიც იმის გამო, რომ ჯერ კიდევ უცნობია ატომგულური ძალების პოტენციალური ენერგიის სახე, შეიძლება შეცვლილ იქნეს ცენტრალური სიმეტრიის პოტენციალური ორმოთი. $r > r_0$ მანძილებისათვის კი სურათი საწინააღმდეგოს გვიჩვენებს, რადგან აქ ატომგულური ძალები სრულებით არა გვაქვს, კულონური განზიდვა დარჩენილ ატომგულსა და α -ნაწილაკს შორის არსებით როლს თამაშობს. ამგვარად, პოტენციალურ ენერგიას ექნება შემდეგი სახე:



ნახ. 20

$$V(r) = \begin{cases} -V_0, & \text{როცა } r \leq r_0 \\ \frac{2(Z-2)e^2}{r}, & \text{როცა } r \geq r_0. \end{cases} \quad (83,5)$$

სადაც V_0 არის პოტენციალური ორმოს სიმაღლე, $\frac{2(Z-2)e^2}{r}$ კი კულონური განზიდვის ენერგიაა α -ნაწილაკის $2e$ და დარჩენილი ატომგულის $(Z-2)e$ მუხტს შორის. α -ნაწილაკის გულიდან გამოსასვლელად მისი ენერგია ან ჯებირის სიმაღლეზე მეტი უნდა იყოს, ანდა ადგილი უნდა ჰქონდეს ჯებირის ეფექტს. როგორც ვიცით, ჯებირის სიმაღლე ეწოდება ჯებირის მაქსიმალურ სიმაღლეს; ამიტომ მისთვის გვექნება

$$B = \frac{2(Z-2)e^2}{r_0}, \quad (83,6)$$

სადაც r_0 არის გულის რადიუსი. თუ შევიტანთ გულის რადიუსისათვის $r_0 = 1,4 \cdot 10^{-13} A^{1/3}$ სმ, მივიღებთ

$$B = 2(Z-2) 0,9 \cdot A^{-1/3} \text{ MeV}; \quad (83,7)$$

მაგალითად, ${}_{88}\text{Ra}^{224}$ გულის ჯებირის სიმაღლისათვის გვაქვს $\sim 25 \text{ MeV}$. ცდები კი გვიჩვენებს, რომ რადიუმის გულიდან ამოტყორცნილი α -ნაწილაკების ენერგია $5,8 \text{ MeV}$ -ის ტოლია, ე. ი. გაცილებით ნაკლებია, ვიდრე ჯებირის სიმაღლე. ეს იმას ნიშნავს, რომ α -ნაწილაკს გულიდან გამოსვლა შეუძლია მხოლოდ ჯებირში გაქონვის გზით. ამიტომ α -დაშლის მოვლენა უნდა აიხსნას კვანტური მექანიკის

ძეოდებით. ფაქტიურად, α -დაშლის თეორიით იწყება ატომგულის მოვლენების შესწავლა კვანტური მექანიკის საფუძველზე. იმის გამო, რომ უცნობია ატომგულური ძალების დეტალური სურათი, დიდი ხნის განმავლობაში ნაადრევად მიიჩნდათ კვანტური მექანიკის მეთოდების გამოყენება ატომგულის მოვლენების შესასწავლად. საბედნიეროდ აღმოჩნდა, რომ არსებობს მთელი რიგი მოვლენებისა, რომელთა ახსნა შეიძლება ატომგულური ძალების დეტალური სურათის ცოდნის გარეშე. ამ მოვლენათა რიცხვში მოხვდა α -დაშლაც.

განვიხილოთ გამარტივებული შემთხვევა და ვთქვათ, ვიკვლევთ გულიდან ისეთი α -ნაწილაკების ამოტყორცნას, რომელთა ორბიტალური მომენტი ნულის ტოლია, ე. ი. $l=0$. ამ შემთხვევაში, როგორც ვიცით, ცენტრალური სიმეტრიის ველში ტალღური ფუნქცია კუთხეების ფუნქცია არ არის და გვექნება მხოლოდ რადიალური $\chi(r)=rR(r)$ ტალღური ფუნქცია, რომელშიც, როგორც ზემოთ შევთანხმდით, ვიგულისხმებთ V_0 სიმაღლის ცენტრალური სიმეტრიის პოტენციალური ორმოს ამოხსნებს ($l=0$ -თვის).

α -ნაწილაკები რომ ატომგულში ზუსტად სტაციონარულ მდგომარეობაში იმყოფებოდეს, ე. ი. აიწერებოდეს $\chi(r)=\chi_0(r) \exp(-iEt/\hbar)$ ტიპის ფუნქციებით, მაშინ (5,8) ფორმულის თანახმად α -ნაწილაკების ნაკადი გულის შემომსაზღვრელ სფეროში ნულის ტოლი იქნებოდა და α -დაშლაც აღარ გვექნებოდა. მეორე მხრივ, რადგან α -დაშლის დროზე დამოკიდებულება კარგად აიწერება (83,2) ფორმულით, ამიტომ უნდა ვიფიქროთ, რომ α -ნაწილაკის ტალღურ ფუნქციას ატომის გულში ექნება სახე

$$\chi(r)=\chi_0(r) \exp(-iEt/\hbar) \exp(-\lambda/2 t). \quad (83,8)$$

სადაც λ არის რაღაც ნამდვილი პარამეტრი. მართლაც, ამ შემთხვევაში მივიღებდით, რომ ნაწილაკთა საშუალო რიცხვი, რომელიც მოთავსებულია გულის მოცულობაში, იქნებოდა

$$N(t)=\int_0^R |\chi|^2 dr = e^{-\lambda t} \int_0^R |\chi_0|^2 dr.$$

რაც, თუ გავითვალისწინებთ, რომ $N(0)=\int_0^R |\chi_0|^2 dr$, ემთხვევა (83,2) ფორმულას.

დამატებითი $\exp(-\lambda/2 t)$ მამრავლის შემოყვანა ნიშნავს იმას, რომ ნაცვლად $\exp(-iEt/\hbar)$ პარმონიული წვერისა შემოგვაქვს წვერი

$$\exp\left[-\frac{i}{\hbar}\left(E - i\frac{\lambda\hbar}{2}\right)t\right]; \quad (83,9)$$

ამ შემთხვევაში ენერგიის როლს ასრულებს $W=E - i\frac{\lambda\hbar}{2}$. ე. ი. ენერგია ფორ-

მალურად განიხილება, როგორც კომპლექსური სიდიდე. ამგვარად, α -ნაწილაკები ზუსტად სტაციონარულ მდგომარეობაში კი არ იმყოფება, არამედ, როგორც ამბობენ, კვაზისტაციონარულ მდგომარეობაში.

როგორც ვხედავთ, ამოცანა დაიყვანება λ დაშლის მუდმივის განსაზღვრაზე. ამისათვის გამოვიყენოთ (5,9) უწყვეტობის განტოლება. რადგან ჩვენს შემთხვევაში ინტეგრალი ერთგანზომილებიანია, ამიტომ ფართითი ინტეგრალი უბრალოდ dr -ით ინტეგრალზე დაიყვანება, $\operatorname{div} J$ კი იქნება $\frac{dJ}{dr}$ და, რადგან $\chi(0)=0$, გვექნება

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_0^{R_1} e^{-\lambda t} |\chi_0|^2 dr = -\frac{i\hbar}{2\mu} e^{-\lambda t} \left[\chi_0 \frac{d\chi_0^*}{dr} - \chi_0^* \frac{d\chi_0}{dr} \right]_{r=R_1}.$$

სადაც R_1 საკმარისად დიდი სფეროს რადიუსია ცენტრით სათავეში. ამ ტოლობიდან შეგვიძლია განვსაზღვროთ λ . მივიღებთ

$$\lambda = \frac{i\hbar}{2\mu} \frac{\left(\chi_0 \frac{d\chi_0^*}{dr} - \chi_0^* \frac{d\chi_0}{dr} \right)_{r=R_1}}{\int_0^{R_1} |\chi_0|^2 dr}; \quad (83,10)$$

ამოტყორცნილი α -ნაწილაკი გულიდან უსასრულოდ შორს იქნება თავისუფალი, ამიტომ იგი აიწერება შემდეგი ბრტყელი ტალღით:

$$\chi_0(r) = C_- \exp\left(i \frac{\sqrt{2\mu E}}{\hbar} r\right), \quad r \gg R_1$$

მაშასადამე,

$$\frac{i\hbar}{2\mu} \left[\chi_0 \frac{d\chi_0^*}{dr} - \chi_0^* \frac{d\chi_0}{dr} \right]_{r=R_1} = v_{-\infty} |C_-|^2$$

სადაც $v_{-\infty}$ არის α -ნაწილაკის სიჩქარე გულიდან საკმარისად შორ მანძილზე.

გამოვთვალოთ (83,10)-ის მნიშვნელი. ამისათვის მოვიხმაროთ § 69-ში მიღებული შედეგები. ინტეგრალის აღებისას დიდი სიზუსტით შეგვიძლია დავუშვათ, რომ ძირითადი მნიშვნელობა აქვს $(0, r_0)$ არეს, რადგან ორმოს გარეთ ტალღური ფუნქცია სწრაფად ისპობა. ორმოს შიგნით კი გვაქვს ამოხსნა $\chi_0 = a_- \sin \beta r$, ასე რომ გვექნება

$$\int_0^{r_0} |\chi_0|^2 dr = \frac{|a_-|^2 r_0}{2} \left\{ 1 - \frac{\sin \beta r_0}{\beta r_0} \cos \beta r_0 \right\}, \quad (83,10')$$

სადაც

$$\beta^2 = \frac{2\mu(V_0 - E)}{\hbar^2}, \quad (82,11)$$

როცა პოტენციალური ორმოს სიღრმე საკმარისად დიდია, მაშინ $\chi_0(r_0)$ ძალიან მცირეა და (69,9) ფორმულის თანახმად ორმოში საკუთარი მნიშვნელობები განსაზღვრული იქნება ფორმულით

$$\sin \beta r_0 = 0, \quad (82,12)$$

საიდანაც მოიძებნება ენერგიის საკუთარი მნიშვნელობები

$$\beta r_0 = n\pi. \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (83,13)$$

(83,12) ფორმულის გათვალისწინებით (83,10') გამოსახულება ასე გადაიწერება:

$$\int_0^{R_1} |\chi_0(r)|^2 dr = \frac{r_0}{2} |a_-|^2 \quad (83,14)$$

და, ამგვარად,

$$\lambda = \frac{2v_{-\infty}}{r_0} \left| \frac{C_-}{a_-} \right|^2. \quad (83,15)$$

ვიგულისხმობთ, რომ α -ნაწილაკის სიჩქარე გულიდან უსასრულოდ შორს ისეთივეა, რაც ჰებირზე დაჯახების მომენტში, ე. ი. $v_{-\infty} = v_{+\infty}$ მაშინ, თუ გავითვალისწინ-

ნებთ გაჟონვის კოეფიციენტის (82,19) გამოსახულებას, რადიქტიური ღაშლის მუდმივისათვის გვექნება შემდეგი ფორმულა:

$$\lambda = \frac{2v}{r_0} D_0 = \frac{8v}{r_0} e^{-\frac{2}{\hbar} S_0}, \quad (83,16)$$

სადაც

$$S_0 = \sqrt{2\mu} \int_{r_0}^{R_0} \sqrt{\frac{2(Z-2)e^2}{r} - E} dr, \quad (83,17)$$

ხოლო v არის α -ნაწილაკის სიჩქარე გულიდან გამოსვლის წინ.

v შეიძლება განესაზღვროთ (83,13) პირობიდან. კერძოდ, (83,11)-ის გათვალისწინებით მივიღებთ

$$v = \frac{n\pi\hbar}{r_0}; \quad (83,18)$$

ხოლო λ -სათვის გვექნება

$$\lambda = \frac{8\pi n\hbar}{\mu r_0^2} e^{-\frac{2}{\hbar} S_0}. \quad (83,19)$$

ახლა ვიპოვოთ S_0 ინტეგრალი. ამისათვის შემოვიღოთ ახალი ცვლადი

$$\sin^2 \varphi = \frac{rE}{2(Z-2)e^2} = \frac{r}{R_0}, \quad (83,20)$$

სადაც

$$R_0 = \frac{2(Z-2)e^2}{E} \quad (83,21)$$

წარმოადგენს ატომგულის ე. წ. კლასიკურ რადიუსს; იგი განსაზღვრავს იმ მინიმალურ მანძილს, რომელზედაც კლასიკური მექანიკის თანახმად α -ნაწილაკს შეუძლია მიუახლოვდეს ატომის გულს. გვექნება

$$S_0 = 2\sqrt{2\mu E} R_0 \int_a^{\pi/2} \cos^2 \varphi d\varphi, \quad (83,22)$$

სადაც

$$a = \arcsin \sqrt{\frac{r_0}{R_0}}, \quad (83,23)$$

ინტეგრალის ამოხსნის შემდეგ მივიღებთ

$$S_0 = \sqrt{2\mu E} R_0 \left\{ \frac{\pi}{2} - a - \frac{1}{2} \sin 2a \right\}. \quad (83,24)$$

რადგან

$$\frac{\pi}{2} - \arcsin \sqrt{\frac{r_0}{R_0}} = \arccos \sqrt{\frac{r_0}{R_0}}$$

და

$$\sin 2a = a \sqrt{\frac{r_0}{R_0}} \sqrt{1 - \frac{r_0}{R_0}},$$

ამიტომ გვექნება

$$S_0 = \sqrt{2\mu E} \cdot R_0 \left\{ \arccos \sqrt{\frac{r_0}{R_0}} - \sqrt{\frac{r_0}{R_0} \left(1 - \frac{r_0}{R_0} \right)} \right\}. \quad (83,25)$$

პრაქტიკულად $r_0 \ll R_0$, ამიტომ $\arccos \sqrt{\frac{r_0}{R_0}} \simeq \frac{\pi}{2}$, ხოლო მეორე წევრი მოგვეცემს $\sim \sqrt{\frac{r_0}{R_0}}$, ასე რომ

$$S_0 = \frac{\pi \sqrt{2\mu E} R_0}{2} - \sqrt{2\mu E} \sqrt{r_0 R_0}. \quad (83,26)$$

ამგვარად, მივიღებთ

$$\lambda = \frac{8\pi n \hbar}{\mu r_0^2} \exp \left(-\frac{4\pi (Z-2) e^2}{\hbar v} + \frac{4 \sqrt{\mu (Z-2) e^2 r_0}}{\hbar} \right) \quad (83,27)$$

ან, თუ გავალოგარიტმებთ

$$\ln \lambda = -\frac{4\pi (Z-2) e^2}{\hbar v} + \frac{4e \sqrt{\mu (Z-2) r_0}}{\hbar} + \ln \frac{8\pi n \hbar}{\mu r_0^2}. \quad (83,28)$$

შემოვიღოთ აღნიშვნები:

$$a(Z) = \frac{4\pi (Z-2) e^2}{\hbar}, \quad b(Z, r_0) = \frac{4e \sqrt{\mu (Z-2) r_0}}{\hbar} + \ln \frac{8\pi n \hbar}{\mu r_0^2}. \quad (83,29)$$

გვექნება

$$\ln \lambda = \frac{-a(Z)}{v} + b(Z, r_0). \quad (83,30)$$

მაშასადამე, რადიაქტიური დაშლის მუდმივის ლოგარითმი უკუპროპორციულია გამოტყორცნილი α -ნაწილაკის სიჩქარისა. დაშლის მუდმივის სიჩქარეზე ასეთი დამოკიდებულება, კვანტური მექანიკის ჩამოყალიბებამდე, გეიგერისა და ნეტროლის მიერ ცდებით იყო დადგენილი. ექსპერიმენტები გვიჩვენებს, რომ ზოგიერთი რადიაქტიური გულის დაშლის საშუალო დრო 10^{10} წელია, ზოგისა კი 10^{-5} სეკუნდი. ე. ი. განსხვავება დაახლოებით 23 რიგისაა, მაშინ, როცა გამოტყორცნილი α -ნაწილაკების ენერგიები ერთმანეთისაგან სულ რაღაც 2-ჯერ განსხვავდება. ეს ფაქტიც საუკეთესოდ აიწერება ზემოთ მიღებული ფორმულებიდან, საიდანაც აშკარად ჩანს λ მუდმივის ძალიან დიდი სისწრაფით ცვლილება გამოტყორცნილი α -ნაწილაკის ენერგიის ოდნავი ცვლილების დროს; რაც მეტია α -ნაწილაკის სიჩქარე, მით მეტია λ და, მაშასადამე, მით ნაკლებია ნახევარდაშლის პერიოდი, რაც ასევე ეთანხმება ცდას.

შევნიშნოთ, რომ (83,30) ფორმულაში როგორც უცნობი პარამეტრი შედის ატომგულის r_0 რადიუსი. λ მუდმივი ამ პარამეტრის ცვლილების მიმართ საკმარისად მგრძნობიარე ფუნქციაა. თუ (83,30) ფორმულას შევადარებთ ექსპერიმენტს, პირიქითაც, საშუალება გვექნება გულის რადიუსის განსაზღვრისა. ამ მეთოდით ნაპოვნი გულის რადიუსი დაემთხვა იმას, რასაც იძლევა სხვა მონაცემები (გულის სტატისტიკური მოდელი, ნეიტრონების გაფანტვა და სხვა). ამგვარად, α -დაშლის თეორია საკმარისად კარგად აიწერება აღნიშნული მოდელით.

აღსანიშნავია, რომ ზემოთ მიღებული ფორმულები შეგვიძლია გამოვიყენოთ არა მხოლოდ α -დაშლისათვის, არამედ ნებისმიერი დამუხტული ნაწილაკის ჯებირში გაუონვის შესასწავლადაც. (83,30) ფორმულაში მონაწილეობს α -ნაწილაკის მასა, ამასთან რაც მეტია ნაწილაკის მასა, მით გაძნელებული იქნება მისი გამოტყორცნა

გულიდან. მიუხედავად ამისა არსებობს გარკვეული ალბათობა გულიდან უფრო მძიმე ნაწილაკების გამოტყორცნისა და სპონტანური გაყოფისაც კი.

ჩვენ განვიხილეთ ის შემთხვევა, როცა α -ნაწილაკის მომენტი ნულის ტოლია $l=0$. ზოგად შემთხვევაში, ნაცვლად S_0 ინტეგრალისა, უნდა გამოვთვალოთ (82,20) ინტეგრალი. შეიძლება ჩვენება, რომ ცენტრგამშორი ენერგია $\hbar^2 l(l+1)/r^2$ მცირე როლს თამაშობს α -დაშლის მოვლენაში.

დასასრულ ალგნიშნოთ, რომ ჩვენს მიერ უხეშად გამოთვლილი ექსპონენტის წინ მდგომი მამრავლი ექსპონენტთან შედარებით უმნიშვნელოდ იცვლება და, ამიტომ, შედეგებზე შესამჩნევ გავლენას არ ახდენს.