

ელექტრონის სპინი და მასთან დაკავშირებული მოვლენები

ექსპერიმენტულად დადგენილი იქნა, რომ ელექტრონს გააჩნია საკუთარი მექანიკური მომენტი, რომელსაც სპინი უწოდეს. აღსანიშნავია, რომ სპინის აღმოჩენიდან გავიდა ოთხ ათეულზე მეტი წელი და მისი წარმოშობის ბუნება დღესაც უცნობია. ელექტრონის სპინთან დაკავშირებულია მთელი რიგი მოვლენებისა, რომელთა შესწავლასაც ეძღვნება ეს თავი. ამასთან, ზოგიერთი მოვლენის გამოკვლევას გადავდებთ შემდგომისათვის, როცა ელექტრონის რელატივისტურ მექანიკას განვიხილავთ. ამ თავში დაწერილია სპინის მქონე ელექტრონის მოძრაობის განტოლება, რომელიც შრედინგერის განტოლების განზოგადებას წარმოადგენს. ამავე თავში შესწავლილია ატომის ენერგეტიკული დონეების მულტიპლეტური სტრუქტურის საკითხი და ზეემანის ეფექტი. განხილულია აგრეთვე ერთელექტრონიანი ატომების პარამაგნიტიზმისა და დიამაგნიტიზმის მოვლენები.

§ 92. ელექტრონის სპინი

განვიხილოთ ერთელექტრონიანი ატომი ნორმალურ მდგომარეობაში; ამ შემთხვევაში მთავარი კვანტური რიცხვი $n=1$ და, ამიტომ, როგორც რადიალური n_r , ისე აზიმუტალური l კვანტური რიცხვები ნულის ტოლია ან, როგორც ამბობენ, ელექტრონი იმყოფება $1s$ მდგომარეობაში. ჩვენ ვაჩვენებთ, რომ წყალბადისებური ატომის მაგნიტური მომენტი მექანიკურ მომენტთან დაკავშირებულია ფორმულით

$$M_z^I = - \frac{e}{2\mu c} l_z. \quad (92,1)$$

რადგან $l_z = m\hbar$, სადაც m იცვლება $-l$ -დან $+l$ -მდე, ამიტომ $M_z^I = 0$, როცა $l=0$. ამრიგად, წყალბადისებურ ატომს ძირითად მდგომარეობაში მაგნიტური მომენტი არ გააჩნია. ცდები კი ამ ვარაუდს არ ადასტურებს. შტერნისა და ჰერლანის მიერ დამტკიცებულ იქნა, რომ ძირითად მდგომარეობაში მყოფი წყალბადისებური ატომების ნაკადი მაგნიტურ ველში გავლისას ორად იყოფა, რაც მაჩვენებელია იმისა, რომ წყალბადისებურ ატომს ძირითად მდგომარეობაშიც გააჩნია რაღაც გაურკვეველი ბუნებით გამოწვეული მაგნიტური მომენტი, რომელიც არაა დაკავშირებული ატომში ელექტრონის ორბიტალურ მოძრაობასთან. რადგან ნაკადი მაგნიტურ ველში ორად იყოფა, ეს იმას ნიშნავს, რომ აღნიშნულ მაგნიტურ მომენტს მაგნიტური ველის დაძაბულობის გასწვრივ გააჩნია ორი პროექცია. გაზომვებმა

გვიჩვენა, რომ ამ მაგნიტური მომენტის აბსოლუტურა სიდიდე ბორის მაგნეტონის

$$M_B = \frac{e\hbar}{2\mu c} \text{ ტოლია.}$$

ამგვარად, ძირითად მდგომარეობაში წყალბადისებურ ატომს გააჩნია მაგნიტური მომენტი, რომელიც ველის გასწვრივ იღებს ორ მნიშვნელობას — M_B და $-M_B$, ე. ი.

$$-\frac{e\hbar}{2\mu c} \text{ და } +\frac{e\hbar}{2\mu c}. \quad (92,2)$$

ჩვენ ვიცით, რომ ყოველ მექანიკურ მომენტთან დაკავშირებულია მაგნიტური მომენტი. ახლა კი შეგვიძლია პირიქითაც დავასკვნათ, რომ ატომის ზემოთ აღნიშნულ მაგნიტურ მომენტთანაც დაკავშირებულია მექანიკური მომენტი, რომლის პროექცია იღებს მხოლოდ ორ მნიშვნელობას. თუ ამ მექანიკური მომენტის კვანტურ რიცხვს აღვნიშნავთ s -ით, მაშინ მომენტის თავისებისა და ზემოთ თქმულის თანახმად მას ექნება სულ $2s+1$ პროექცია. აქედან კი გამომდინარეობს, რომ $s=1/2$. პაუდსმიტმა და ულენბეკმა აღნიშნული მექანიკური მომენტი ელექტრონის მიაწერეს და მას ელექტრონის საკუთარი მექანიკური მომენტი ან სპინი უწოდეს. სპინი ინგლისური სიტყვაა და ნიშნავს ბზრიალას — ბრუნვას. შემდგომში საკუთარი მექანიკური მომენტის ნაცვლად, შემოკლების მიზნით, ვიხმარებთ სპინს. თუ სპინური მომენტის ოპერატორს აღვნიშნავთ $\hat{s}$ -ით, მაშინ (92,2) ფორმულის თანახმად, შეგვიძლია დავწეროთ

$$\hat{M}^s = -\frac{e}{\mu c} \hat{s}, \quad (92,3)$$

სადაც $\hat{M}^s$ არის სპინთან დაკავშირებული მაგნიტური მომენტის ოპერატორი, ხოლო

$$\hat{s} = \frac{\hbar}{2} \sigma^0, \quad (92,4)$$

სადაც σ^0 არის ოპერატორი, რომლის z კომპონენტს აქვს ორი საკუთარი მნიშვნელობა $+1$ და -1 . ე. ი. $s_z = \hbar/2$ და $s_z = -\hbar/2$. (92,3) ფორმულიდან ჩვენ ვხედავთ, რომ სპინური გირომამაგნიტური ფარდობა

$$g_s = \left| \frac{M^s}{s} \right| = \frac{e}{\mu c} \quad (92,5)$$

ორბიტალურ გირომამაგნიტურ ფარდობაზე ორჯერ მეტია, ე. ი. $g_s = \frac{1}{2} g_s$. შევნიშნოთ, რომ (92,5) თანაფარდობა ცდაზე ჯერ კიდევ 1915 წელს იყო დადგენილი აინშტეინისა და დე-პასის მიერ ფერომამაგნიტური ლეროს დამამაგნიტების შესწავლისას.

ამგვარად, ელექტრონს გააჩნია ოთხი თავისუფლების ხარისხი. ამასთან, მეოთხე თავისუფლების ხარისხს წარმოადგენს სპინი. იგი კვანტური სიდიდეა და ლეზულობს მხოლოდ ორ მნიშვნელობას.

პირველყოფილი წარმოდგენა იმის შესახებ, რომ ელექტრონის სპინი წარმოადგენს ელექტრონის საკუთარი ლერძის ირგვლივ ბრუნვის მექანიკურ მომენტს, სინამდვილეს არ შეესაბამება, რადგან ასეთი წარმოდგენა ეწინააღმდეგება ფარდობითობის სპეციალურ თეორიას. მართლაც, იმისათვის, რომ აზრი ჰქონდეს საკუთარი ლერძის ირგვლივ ბრუნვას, ელექტრონს უნდა გააჩნდეს გარკვეული მოცულობა. დავუწვათ, ელექტრონი წარმოადგენს სფეროს, რომლის რადიუსი რიგით

ელექტრონის კლასიკური რადიუსის $R = e^2/\mu c^2$ ტოლია. მაშინ ელექტრონის ზედაპირის რომელიმე წერტილის ხაზოვანი სიჩქარე ტოლი იქნება $v = R\omega$, სადაც ω არის ბრუნვის კუთხური სიჩქარე. მეორე მხრივ, სფეროს იმპულსის მომენტსა და ბრუნვის კუთხურ სიჩქარეს შორის გვაქვს დამოკიდებულება $1 = J_0\omega$, სადაც J_0 არის სფეროს ინერციის მომენტი $J_0 = \frac{2}{5}\mu R^2$. რადგან როტატორისათვის მომენტის სიგრძე ტოლია $|1| = \hbar \sqrt{v(v+1)}$, ამიტომ ხაზოვანი სიჩქარისათვის გვექნება

$$v = R \cdot \frac{\hbar \sqrt{v(v+1)}}{J_0} = \frac{5\hbar \sqrt{v(v+1)}}{2\mu R}. \quad (92,6)$$

თუ შევიტანთ ელექტრონის კლასიკური რადიუსის მნიშვნელობას საძიებელი სიჩქარისათვის მივიღებთ

$$v = \frac{5c \sqrt{v(v+1)}}{2\alpha_0} \quad (92,7)$$

სადაც $\alpha_0 = 1/137$ არის ზომერფელდის ნაზი სტრუქტურის კოეფიციენტი. ცხადია, რომ ნებისმიერი $v \neq 0$ მნიშვნელობისათვის ელექტრონის ზედაპირის ნებისმიერი წერტილის სიჩქარე $v > c$, რაც ფარდობითობის თეორიით დაუშვებელია. უკვე ის ფაქტი, რომ ელექტრონს გარკვეული ზომა მივანიჭეთ, აშკარაა, არღვევს რელატივისტურ ინვარიანტობას.

§ 93. ელემენტარული სპინის ოპერატორი

გამოვარკვევით, რა სახე აქვს სპინის ოპერატორს; როგორც ყველა ფიზიკური სიდიდის ოპერატორი, ასევე სპინის ოპერატორიც ერმიტული უნდა იყოს, რადგან მისი საკუთარი მნიშვნელობები ნამდვილი სიდიდეებია. ამ ოპერატორის მდგენელები საკოორდინატო ღერძებზე აღნიშნოთ $\hat{s}_x, \hat{s}_y, \hat{s}_z$ -ით. რადგან სპინი მომენტია, ამიტომ მას უნდა ჰქონდეს მომენტისათვის დამახასიათებელი ყველა თვისება; კერძოდ, $\hat{s}_x, \hat{s}_y, \hat{s}_z$ ოპერატორები უნდა აკმაყოფილებდნენ კომუტაციის შემდეგ თვისებებს:

$$[\hat{s}_i, \hat{s}_k] = -i\hbar \epsilon_{ikn} \hat{s}_n \quad (93,1)$$

ხოლო

$$s_z = m_s \hbar, \quad (93,2)$$

სადაც $m_s = -1/2$ და $m_s = +1/2$. m_s -ს უწოდებენ სპინურ მაგნიტურ კვანტური რიცხვს. იგი იღებს მნიშვნელობებს $-s$ -დან $+s$ მდე. s -ს ეწოდება სპინური კვანტური რიცხვი და იგი ტოლია $s = 1/2$, ე. ი. m_s იღებს სულ $2s+1=2$ მნიშვნელობას. როდესაც ამბობენ, რომ ელექტრონის სპინი ნახევრის ტოლია იგულისხმება სწორედ ის, რომ სპინური კვანტური რიცხვი $s = 1/2$.

სპინის ოპერატორების მდგენელები მატრიცული სახით ნაპოვნი გვაქვს § 48-ში. წარმოდგენაში, რომელშიაც s_z დიაგონალური მატრიცაა გვაქვს

$$\hat{s}_x = \frac{\hbar}{2} \sigma_x^0, \quad \hat{s}_y = \frac{\hbar}{2} \sigma_y^0, \quad \hat{s}_z = \frac{\hbar}{2} \sigma_z^0, \quad (93,3)$$

სადაც

$$\sigma_x^0 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y^0 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z^0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad (93,4)$$

პაულის მატრიცებია, რომელთა თვისებები ჩვენ კარგად ვიცით. სახელდობრ, ამ მატრიცათა თვისებები გამოხატულია ფორმულით

$$\sigma_i^0 \sigma_k^0 + \sigma_k^0 \sigma_i^0 = 2\delta_{ik}, \quad (93,5)$$

რომელიც ეკვივალენტურია შემდეგი ექვსი პირობის:

$$\sigma_x^0 = 1, \quad \sigma_y^0 = 1, \quad \sigma_z^0 = 1 \quad (93,6)$$

$$\sigma_x^0 \sigma_y^0 + \sigma_y^0 \sigma_x^0 = 0,$$

$$\sigma_x^0 \sigma_z^0 + \sigma_z^0 \sigma_x^0 = 0, \quad (93,7)$$

$$\sigma_y^0 \sigma_z^0 + \sigma_z^0 \sigma_y^0 = 0.$$

(93,3) ფორმულები შეგვიძლია ჩავწეროთ ვექტორული ტოლობის სახითაც

$$\mathbf{s} = \frac{\hbar}{2} \boldsymbol{\sigma}^0, \quad (93,8)$$

სადაც $\boldsymbol{\sigma}^0(\sigma_x^0, \sigma_y^0, \sigma_z^0)$ წარმოადგენს ვექტორს¹.

$\sigma_x^0, \sigma_y^0, \sigma_z^0$ მატრიცათა საკუთარი მნიშვნელობები ± 1 -ის ტოლია, ამიტომ სპინის პროექციების საკუთარი მნიშვნელობები იქნება $\pm \hbar/2$. ამასთან, ცხადია, რომ ერთდროულად და ზუსტად შეიძლება გაიზომოს s_z და s^2 . სადაც s^2 არის $\hat{s}^2 = \hat{s}_x^2 + \hat{s}_y^2 + \hat{s}_z^2$ ოპერატორის საკუთარი მნიშვნელობა. ცხადია, რომ

$$s^2 = \hbar^2 s(s+1), \quad (93,9)$$

რად გან $s = 1/2$, ამიტომ s^2 -ისათვის გვექნება

$$s^2 = \frac{3}{4} \hbar^2. \quad (93,10)$$

ჩვენ ვხედავთ, რომ ელექტრონის სპინის სიდიდე $|\mathbf{s}| = \frac{\sqrt{3}}{2} \hbar$ არ ემთხვევა თავის მაქსიმალურ პროექციას.

ელექტრონის სპინურ ფუნქციას, როგორც § 48-ში შევთანხმდით, აღვნიშნავთ χ_{sm_s} -ით. ამასთან, $\chi_{1/2, 1/2} = \alpha$ გამოხატავს იმ ფაქტს, რომ ელექტრონის სპინის პროექცია z -ღერძის გასწვრივ არის მიმართული, $\chi_{1/2, -1/2} = \beta$ ფუნქცია კი მიუთითებს, რომ სპინის პროექციას z -ღერძის საწინააღმდეგო მიმართულება აქვს.

§ 94. პაულის განტოლება

როგორც დავინახეთ, ელექტრონს გააჩნია ოთხი თავისუფლების ხარისხი. სამი ახასიათებს ელექტრონის სიმძიმის ცენტრის მოძრაობას სივრცეში, მეოთხე კი — სპინს. ამიტომ ტალღური ფუნქცია, გარდა სივრცული კოორდინატებისა და დროისა, დამოკიდებული იქნება სპინურ კოორდინატებზეც. ამასთან, სპინური კოორდინატი დისკრეტულია და იღებს ორ მნიშვნელობას. იმის მიხედვით, თუ სპინის z -პროექციას რა მნიშვნელობა აქვს $+\hbar/2$, თუ $-\hbar/2$, გვექნება ორი სხვადასხვა ფუნქცია

$$\psi_1(\mathbf{r}, t; +\hbar/2), \quad \psi_2(\mathbf{r}, t; -\hbar/2) \quad (94,1)$$

სპინის ოპერატორები მოცემული გვაქვს მატრიცული სახით, ამიტომ ამ ტალღურ ფუნქციებზეც წერენ შემდეგი მატრიცის საშუალებით:

¹ იხ. § 138.

$$\begin{pmatrix} \psi_1(\mathbf{r}, t; \hbar/2) & 0 \\ \psi_2(\mathbf{r}, t; -\hbar/2) & 0 \end{pmatrix}. \quad (94,2)$$

ან, შემოკლებით, ერთი სვეტის მქონე მატრიცის სახით

$$\psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix}, \quad (94,3)$$

საიდანაც $\psi^\dagger$ ფუნქციისათვის გვექნება ერთსტრიქონიანი მატრიცა

$$\psi^\dagger = (\psi_1^*, \psi_2^*) \quad (94,4)$$

ასეთი ტიპის მატრიცებს უწოდებენ სპინორებს¹.

დავწეროთ შრედინგერის განტოლება ისეთნაირად, რომ მასში გათვალისწინებული იყოს ელექტრონის სპინი. ამ მიზნით განვიხილოთ ელექტრონის მოძრაობა ელექტრომაგნიტურ ველში. იმის გამო, რომ ელექტრონს გააჩნია სპინური მაგნიტური მომენტი

$$\hat{\mathbf{M}} = -\frac{e}{\mu c} \hat{\mathbf{s}} = -\frac{e\hbar}{2\mu c} \boldsymbol{\sigma}, \quad (94,5)$$

ამიტომ ელექტრონი მაგნიტურ ველში ისე იქცევა, როგორც მაგნიტური დიპოლი. ამის გამო იგი იძენს დამატებით პოტენციურ ენერგიას — $(\hat{\mathbf{M}} \cdot \vec{\mathcal{H}})$, სადაც $\vec{\mathcal{H}}$ მაგნიტური ველის დაძაბულობის ვექტორია. მაშასადამე, ამ ენერგიის შესაბამის ოპერატორს ექნება გამოსახულება

$$\hat{u}_s(\mathcal{H}) = \frac{e}{\mu c} (\hat{\mathbf{s}} \cdot \vec{\mathcal{H}}) = \frac{e\hbar}{2\mu c} (\boldsymbol{\sigma} \cdot \vec{\mathcal{H}}). \quad (94,6)$$

ამგვარად, სპინის გათვალისწინებით ელექტრომაგნიტურ ველში მოძრავი ელექტრონის ჰამილტონიანი ასე დაიწერება:

$$\hat{H} = \hat{H}_{\text{მ.}} + \frac{e\hbar}{2\mu c} (\boldsymbol{\sigma} \cdot \vec{\mathcal{H}}), \quad (94,7)$$

სადაც $\hat{H}_{\text{მ.}}$ ელექტრომაგნიტურ ველში მოძრავი ელექტრონის ჰამილტონიანია სპინის გარეშე, ე. ი.

$$\begin{aligned} \hat{H}_{\text{მ.}} &= \frac{1}{2\mu} \left(\hat{\mathbf{p}} + \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 + V(\mathbf{r}, t) - e\varphi \\ &= -\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta + \frac{e}{\mu c} (\mathbf{A} \hat{\mathbf{p}}) - \frac{ie\hbar}{2\mu c} \operatorname{div} \mathbf{A} + \frac{e^2}{2\mu c^2} \mathbf{A}^2 + V - e\varphi, \end{aligned} \quad (94,8)$$

(იქ ვიგულისხმებთ, რომ ელექტრონის მუხტი — e -ს ტოლია). შრედინგერის განტოლებას (94,7) ჰამილტონიანით უწოდებენ პაულის განტოლებას. ამრიგად, პაულის განტოლებას ექნება სახე²

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} = \left\{ \frac{1}{2\mu} \left(\hat{\mathbf{p}} + \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 - e\varphi + V(\mathbf{r}, t) + \frac{e\hbar}{2\mu c} (\boldsymbol{\sigma} \cdot \vec{\mathcal{H}}) \right\} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix}, \quad (94,9)$$

¹ იხ. § 136.

² ეს განტოლება პირველად მიღებული იყო დარვინისა და პაულის მიერ C. G. Darwin, Proc. Roy. Soc. A 116, 227, (1927); W. Pauli, Zeits. f. Phys. 43, 601, (1927) მათ მიერვე ცხო შესწავლილი სპექტრის დუბლეტური სტრუქტურა.

რომელიც, თუ შევიტანთ მატრიცების მნიშვნელობებს და მოვახდენთ მათ გადა-
მრავლებას, მოგვცემს შემდეგ სისტემას:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial \psi_1}{\partial t} &= \frac{1}{2\mu} \left(\hat{\mathbf{p}} + \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 \psi_1 - e\varphi \psi_1 + V \psi_1 + \\ &+ \frac{e\hbar}{2\mu c} (\mathcal{H}_x - i\mathcal{H}_y) \psi_2 + \frac{e\hbar}{2\mu c} \mathcal{H}_z \psi_1 \\ i\hbar \frac{\partial \psi_2}{\partial t} &= \frac{1}{2\mu} \left(\hat{\mathbf{p}} + \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 \psi_2 - e\varphi \psi_2 + V \psi_2 + \\ &+ \frac{e\hbar}{2\mu c} (\mathcal{H}_x + i\mathcal{H}_y) \psi_1 - \frac{e\hbar}{2\mu c} \mathcal{H}_z \psi_2 \end{aligned} \quad (94,10)$$

სტაციონარული მდგომარეობისათვის პაულის განტოლებას ექნება სახე

$$\left\{ \frac{1}{2\mu} \left(\hat{\mathbf{p}} + \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 - e\varphi + V(\mathbf{r}) + \frac{e\hbar}{2\mu c} (\boldsymbol{\sigma}^0 \vec{\mathcal{H}}) \right\} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} \quad (94,11)$$

როდესაც პოტენციალები ისეა შერჩეული, რომ $\text{div } \mathbf{A} = 0$, $\varphi = 0$ და, გარდა ამისა, $\mathbf{A}^2$ -ის შემცველ წევრს უგულებელვყოფთ, როგორც უფრო მაღალი რიგის მცირე სიდიდეს, მაშინ (36,19) ფორმულის თანახმად, ელექტრონისათვის გვექნება

$$\hat{H}_{\text{შ.}} = \hat{H}_0 + \frac{e}{\mu c} (\mathbf{A}\hat{\mathbf{p}}), \quad (94,12)$$

სადაც

$$\hat{H}_0 = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta + V(\mathbf{r}, t). \quad (94,13)$$

პაულის ჰამილტონიანისათვის კი მივიღებთ გამოსახულებას

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \frac{e}{\mu c} (\mathbf{A}\hat{\mathbf{p}}) + \frac{e\hbar}{2\mu c} (\boldsymbol{\sigma}^0 \vec{\mathcal{H}}). \quad (94,14)$$

ახლა გამოვარკვიოთ პაულის განტოლების ამონახსნის ფიზიკური შინაარსი. ამ მიზნით გამოვიყენოთ უწყვეტობის განტოლება. მოვიქცეთ სრულიად ისევე როგორც (5,9) განტოლების გამოყენების დროს. კერძოდ, დავწეროთ (94,9) განტოლების ერმიტულად შეუღლებული, რომელიც გავამრავლოთ ψ^- -ზე და შეგვკრიბოთ (94,9) განტოლებასთან, რომელიც წინასწარ გავამრავლოთ ψ^+ -ზე. მარტივი გარდაქმნების შემდეგ მივიღებთ უწყვეტობის განტოლებას

$$\frac{\partial w}{\partial t} + \text{div } \mathbf{J} = 0, \quad (94,15)$$

სადაც

$$w = \psi^+ \psi = (\psi_1^* \psi_2^*) \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} = \psi_1^* \psi_1 + \psi_2^* \psi_2 \quad (94,16)$$

და

$$\mathbf{J} = \frac{i\hbar}{2\mu} |\psi \nabla \psi^+ - \psi^+ \nabla \psi| - \frac{e}{\mu c} \mathbf{A} \psi^+ \psi \quad (94,17)$$

მაშასადამე. $w = \psi^+ \psi$ გამოხატავს ელექტრონის სივრცის ამა თუ იმ ადგილას მოხვედრის ალბათობის სიმკვრივეს სპინის ნებისმიერი პროექციით $+\hbar/2$ ან $-\hbar/2$.

როცა სპინს აქვს განსაზღვრული პროექცია, მაგალითად, იგი პარალელურია z -ღერძის, მაშინ $\psi_z = 0$ და სპინორს ექნება მხოლოდ ერთი კომპონენტი, ე. ი.

$$\psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ 0 \end{pmatrix} = \psi_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (94,18)$$

პირიქით, თუ სპინის პროექცია $s_z = -\hbar/2$, ე. ი. იგი ანტიპარალელურია z -ღერძისა, გვექნება

$$\psi = \begin{pmatrix} 0 \\ \psi_2 \end{pmatrix} = \psi_2 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (94,19)$$

ან, თუ ვისარგებლებთ (48,44) აღნიშვნებით

$$\alpha = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \beta = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad (94,20)$$

მაშინ ზოგად შემთხვევაში პაულის ორკომპონენტის ფუნქცია შემდეგი სახით შეგვიძლია ჩავწეროთ:

$$\psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} = \alpha\psi_1 + \beta\psi_2. \quad (94,21)$$

$|\psi_1|^2$ იქნება მდებარეობის ალბათობის სიმკვრივე ელექტრონისა, რომლის სპინის პროექცია $s_z = \hbar/2$, ხოლო $|\psi_2|^2$ გამოხატავს ალბათობის სიმკვრივეს $s_z = -\hbar/2$ პროექციის მქონე ელექტრონისა.

დავწეროთ ψ ფუნქციების ნორმირების პირობა. პაულის ფუნქციების ნორმირების ინტეგრალში ψ^* -ს ნაცვლად უნდა ჩავწეროთ ψ^+ . ასე მაგალითად, წყვეტილი სპექტრის შემთხვევაში შეგვიძლია დავწეროთ ნორმირების პირობა

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi^+ \psi d\mathbf{r} = \int_{-\infty}^{+\infty} \sum_{i=1}^2 |\psi_i|^2 d\mathbf{r} = 1 \quad (94,22)$$

წყალბადისებური ატომის შემთხვევაში პოტენციალური ენერგია ცენტრალური სიმეტრიისაა, ამიტომ პაულის ტალღური ფუნქცია იქნება ნამრავლი რადიალური და $\mathcal{Y}_{l, m}$ ფუნქციისა, რომელიც (50,25) ფორმულით განისაზღვრება და რომელსაც ჩვენ ვუწოდებთ სფერული ფუნქცია სპინით.

დაბოლოს შევნიშნოთ, რომ ნახევრის ტოლი სპინი აქვს აგრეთვე პროტონს, ნეიტრონს, პოზიტრონს, ნეიტრინოს, $\mu^\pm$ მეზონებს და სხვა. ამიტომ პაულის განტოლება სამართლიანი იქნება ამ ნაწილაკებისათვისაც.

§ 95. სრული მემანიკური მომენტი

ორბიტალური მოძრაობის შესაბამისი $\hat{\mathbf{L}}$ მომენტისა და სპინის ჯამს უწოდებენ სრულ მომენტს, რომელსაც $\hat{\mathbf{j}}$ -თი აღნიშნავენ

$$\hat{\mathbf{j}} = \hat{\mathbf{L}} + \hat{\mathbf{s}} \quad (95,1)$$

ან მდგენელებში

$$\hat{j}_x = \hat{L}_x + \hat{s}_x, \quad \hat{j}_y = \hat{L}_y + \hat{s}_y, \quad \hat{j}_z = \hat{L}_z + \hat{s}_z. \quad (95,2)$$

$\hat{\mathbf{L}}$ -მომენტი კოორდინატების ფუნქცია სპინის ოპერატორი კი სივრცულ კოორდინატებზე დამოკიდებული არ არის, ამიტომ $\hat{L}_\alpha$ და $\hat{s}_\alpha$ მდგენელები ერთმანეთთან

კომუტატორია. ცხადია, რომ სრული მომენტის მდგენელებსაც ზუსტად ისეთივე კომუტაციის თვისებები ექნება, როგორიც აქვს ორბიტალური მომენტის ან სპინის ოპერატორის მდგენელებს. მართლაც, განვიხილოთ $[\hat{j}_i, \hat{j}_k]$ პუასონის ფრჩხილები და გავითვალისწინოთ (95,2) ტოლობები; გვექნება

$$[\hat{j}_i, \hat{j}_k] = [\hat{l}_i + \hat{s}_i, \hat{l}_k + \hat{s}_k] = [\hat{l}_i, \hat{l}_k] + [\hat{s}_i, \hat{s}_k], \quad (95,3)$$

რადგან

$$[\hat{l}_i, \hat{l}_k] = -\epsilon_{ikn} \hat{l}_n, \quad [\hat{s}_i, \hat{s}_k] = -\epsilon_{ikn} \hat{s}_n, \quad (95,4)$$

ამიტომ

$$[\hat{j}_i, \hat{j}_k] = -\epsilon_{ikn} \hat{l}_n - \epsilon_{ikn} \hat{s}_n = -\epsilon_{ikn} (\hat{l}_n + \hat{s}_n). \quad (95,5)$$

საიდანაც საბოლოოდ გვექნება

$$[\hat{j}_i, \hat{j}_k] = -\epsilon_{ikn} \hat{j}_n. \quad (95,6)$$

ამ ტოლობის ძალით ადვილად დავამტკიცებთ, რომ $\hat{j}^2 = \hat{j}_x^2 + \hat{j}_y^2 + \hat{j}_z^2$ ოპერატორი კომუტატორია თავის ნებისმიერ მდგენელთან

$$[\hat{j}^2, \hat{j}_i] = 0, \quad (i = x, y, z) \quad (95,7)$$

რაც იმას ნიშნავს, რომ $\hat{j}^2$ და $\hat{j}_z$ შეიძლება გაიზომოს ერთდროულად. კერძოდ, ამ სიდიდეებისათვის გვექნება შემდეგი მნიშვნელობები:

$$\hat{j}^2 = \hbar^2 j(j+1), \quad (95,8)$$

$$\hat{j}_z = m_j \hbar, \quad (95,9)$$

სადაც სრული მომენტის მაგნიტური კვანტური m_j რიცხვი იცვლება — j -დან $-j$ -მდე, ე. ი. იღებს $2j+1$ მნიშვნელობას. რადგან j წარმოადგენს $1/2$ და s მომენტების ჯამს, ამიტომ მომენტთა შეკრების სამკუთხედის წესით გვექნება

$$|l - s| \leq j \leq l + s. \quad (95,10)$$

სპინური კვანტური რიცხვი $s = 1/2$, ამიტომ j -ს ექნება მხოლოდ ორი მნიშვნელობა:

$$j = l + 1/2, \quad j = |l - 1/2|; \quad (95,11)$$

ამასთან, როცა $l = 0$, მაშინ j -ს აქვს მხოლოდ ერთი მნიშვნელობა კერძოდ, $j = 1/2$.

აღსანიშნავია, რომ ერთი ელექტრონისათვის m_j არასოდეს ნული არ არის და

$$m_j = \pm 1/2, \pm 3/2, \pm 5/2, \dots, \pm j. \quad (95,12)$$

იმ წარმოდგენაში, სადაც j_z დიაგონალური მატრიცაა, (48,35) ფორმულების თანახმად, სრული მომენტის მდგენელების მატრიცული ელემენტებისათვის გვექნება:

$$\langle jm_j \pm 1 | j^\pm | jm_j \rangle = \hbar [(j \mp m_j)(j \pm m_j + 1)]^{1/2}, \quad (95,13)$$

$$\langle jm_j | j_z | jm_j \rangle = \hbar m_j,$$

სადაც $j^\pm = j_x \pm ij_y$.

ადვილი საჩვენებელია, რომ $\hat{j}^2$ ოპერატორი კომუტატორია როგორც $\hat{l}^2$ -თან, ისე $\hat{s}^2$ -თან, ე. ი.

$$[\hat{j}^2, \hat{l}^2] = [\hat{j}^2, \hat{s}^2] = 0, \quad (95,14)$$

რაც იმას ნიშნავს, რომ ელექტრონისათვის $\hat{j}^2$, $\hat{l}^2$ და $\hat{s}^2$ შეიძლება გაიზომოს ერთდროულად და ზუსტად. რადგან $\mathbf{j} = \mathbf{l} + \mathbf{s}$, ამიტომ

$$(\mathbf{l} \cdot \mathbf{s}) = \frac{1}{2} (\hat{j}^2 - \hat{l}^2 - \hat{s}^2) \quad (95,15)$$

და

$$(j\ s) = \frac{1}{2} (\hat{j}^2 - \hat{l}^2 + \hat{s}^2). \quad (95,16)$$

რადგან $\hat{j}^2$, $\hat{l}^2$ და $\hat{s}^2$ ერთდროულად და ზუსტად შეიძლება გაიზომოს, ამიტომ შეგვიძლია ვიპოვოთ $(\hat{l}\ \hat{s})$ და $(\hat{j}\ \hat{s})$ ოპერატორების საკუთარი მნიშვნელობებიც; კერძოდ, გვექნება:

$$(ls) = \frac{\hbar^2}{2} [j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)], \quad (95,17)$$

$$(js) = \frac{\hbar^2}{2} [j(j+1) - l(l+1) + s(s+1)]. \quad (95,18)$$

ამოვწეროთ ამ გამოსახულებათა კონკრეტული სახე j -ს ორი შესაძლო მნიშვნელობისათვის: $j = l + 1/2$ და $j = |l - 1/2|$ -სათვის. გვექნება:

$$(ls) = \frac{\hbar^2 l}{2}, \quad j = l + 1/2 \quad (95,19)$$

$$(ls) = -\frac{\hbar^2(l+1)}{2}, \quad j = |l - 1/2|$$

და

$$(js) = \frac{\hbar^2(l+3/2)}{2}, \quad j = l + 1/2 \quad (95,20)$$

$$(js) = -\frac{\hbar^2(l-1/2)}{2}, \quad j = |l - 1/2|$$

აღვნიშნოთ, რომ (95,15) ფორმულის თანახმად $\hat{j}^2$ და $\hat{j}_z$ ოპერატორები კომუტირებადია $(\hat{l}\ \hat{s})$ სკალარულ ნამრავლთან.

როგორც წინა პარაგრაფში აღვნიშნეთ წყალბადისებური ატომის ტალღურ ფუნქციას ეწეება სახე

$$\psi_{nlm_j}(r, \theta, \varphi) = R_{nl}(r) \mathcal{Y}_{l, 1/2}^{m_j}(\theta, \varphi), \quad (95,21)$$

$\mathcal{Y}_{l, 1/2}^{m_j}$ წარმოადგენს სფერულ ფუნქციას სპინით. ამასთან, j -ს ორი შესაძლო მნიშვნელობისათვის გვექნება ორი ტალღური ფუნქცია

$$\psi_{n, l+1/2, m_j}(r, \theta, \varphi) = R_{nl}(r) \mathcal{Y}_{l, 1/2}^{l+1/2, m_j}(\theta, \varphi), \quad (95,22)$$

$$\psi_{n, l-1/2, m_j}(r, \theta, \varphi) = R_{nl}(r) \mathcal{Y}_{l, 1/2}^{l-1/2, m_j}(\theta, \varphi). \quad (95,23)$$

$\mathcal{Y}_{l, 1/2}^{l+1/2, m_j}(\theta, \varphi)$ ფუნქციები განისაზღვრება (50,26) ფორმულებით. (95,21)

ფუნქცია საერთო საკუთარი ფუნქცია იქნება $\hat{j}^2$, $\hat{j}_z$ და $\hat{l}^2$, $\hat{s}^2$ ოპერატორებისა და პაულის განტოლების შესაბამისი ჰამილტონიანისა. ცხადია, რომ $\mathcal{Y}_{l, 1/2}^{j, m_j}(\theta, \varphi)$

ფუნქციები საკუთარი ფუნქციებია $(\hat{l}\ \hat{s})$ და $(\hat{j}\ \hat{s})$ ოპერატორებისა.

§ 96. სპინ-ორბიტალური ურთიერთქმედება და სპინ-ორბიტალური სტრუქტურა

განვიხილოთ ისევ ერთელექტრონიანი ატომები. სანამ მხედველობაში არ ვიღებდით ელექტრონის სპინს, ელექტრონის მდგომარეობას ატომში ვახასიათებდით სამი კვანტური რიცხვით n, l, m . ამასთან, ელექტრონის ენერგეტიკული დონეები დამოკიდებული იყო მხოლოდ n და l რიცხვებზე (წყალბადისებური ატომების შემთხვევაში კი მხოლოდ n -ზე). სინამდვილეში კი ელექტრონს გააჩნია სპინი და, ამიტომ, ენერგეტიკული დონეები დამოკიდებული უნდა იყვნენ სპინის ორიენტაციაზედაც.

ელექტრონი მოძრაობს რა ატომგულის ირგვლივ ორბიტზე, ქმნის მაგნიტურ ველს, რომელსაც ხშირად ატომშივა ველს უწოდებენ. ეს მაგნიტური ველი მოქმედებს სპინის მაგნიტურ მომენტზე. ამ ურთიერთქმედებას უწოდებენ სპინ-ორბიტალურ ან „ ls “-ურთიერთქმედებას. სპინ-ორბიტალური ურთიერთქმედების არსებობის გამო ჰამილტონიანს ემატება ახალი წევრი, რომელიც მთელ რიგ მოვლენებში გადამწყვეტ როლს ასრულებს. გამოვივს ვალთ სპინ-ორბიტალური ურთიერთქმედებით გამოწვეული ჰამილტონიანის შესწორება. შიგა ელექტრული ველი იქ, სადაც იმყოფება ელექტრონი, იქნება $\vec{E} = -\frac{Ze}{r^2} \vec{r}$ -ის ტოლი, სადაც Ze ატომგულის მუხტია, r კი — ატომის რადიუსი. ამ ელექტრულ ველთან დაკავშირებული იქნება მაგნიტური ველი, რომლის დაძაბულობა გამოისახება ფორმულით

$$\vec{H} = \frac{1}{c} |\vec{E} \times \mathbf{v}|; \quad (96,1)$$

აქ $\mathbf{v}$ ელექტრონის სიჩქარეა ატომში, c კი სინათლის სიჩქარეა. $\vec{E}$ -ს მნიშვნელობის შეტანით მაგნიტური ველის დაძაბულობისათვის მივიღებთ

$$\vec{H} = \frac{Ze}{cr^3} [\mathbf{r} \times \mathbf{v}] = \frac{Ze}{\mu cr^3} \mathbf{l}, \quad (96,2)$$

სადაც $\mathbf{l} = [\mathbf{r} \times \mathbf{p}]$ ელექტრონის ორბიტალური მოძრაობის მომენტი. რადგან მაგნიტურ ველში მაგნიტური დიპოლით გამოწვეული ენერგიის შესწორება $-(\hat{\mathbf{M}}^s \cdot \vec{H})$ -ის ტოლია, ამიტომ „ sl “ ურთიერთქმედებით გამოწვეული ენერგიის ოპერატორის შესწორებისათვის გვექნება

$$\hat{H}_{sl} = -\frac{Ze}{\mu cr^3} (\hat{\mathbf{l}} \cdot \hat{\mathbf{M}}^s), \quad (96,3)$$

სადაც $\hat{\mathbf{M}}^s$ არის სპინური მაგნიტური მომენტის ოპერატორი. რელატივისტური ეფექტების გათვალისწინება იძლევა, რომ ეს სიდიდე დამატებით უნდა გამრავლდეს ე. წ. „თომასის ნახევარზე“¹. ასე რომ, საბოლოოდ სპინ-ორბიტალური ურთიერთქმედების ენერგიის ოპერატორს ექნება სახე

$$\hat{H}_{sl} = \frac{1}{2\mu^2 c^2} \frac{Ze^2}{r^3} (\hat{\mathbf{l}} \cdot \hat{\mathbf{s}}). \quad (96,4)$$

რელატივისტურ კვანტურ მექანიკაში ვაჩვენებთ, რომ, როცა კულონური ველის ნაცვლად გვაქვს ნებისმიერი ცენტრალური სიმეტრიის ველი $V(r)$ პოტენციალით,

¹ სპინ-ორბიტალური ურთიერთქმედების ზუსტი გამოსახულება გამოყვანილია § 144-ში.

მაშინ სპინ-ორბიტალური ურთიერთქმედების ენერგიის ოპერატორი გამოიხატება ფორმულით

$$\hat{H}_{sl} = \frac{1}{2\mu^2 c^2} \left\{ \frac{1}{r} \frac{dV(r)}{dr} \right\} (\hat{\mathbf{l}} \hat{\mathbf{s}}). \quad (96,5)$$

ჩვენ ვიცით, რომ $\hat{j}^2$ და $\hat{j}_z$ კონუტატურია $(\hat{\mathbf{l}} \hat{\mathbf{s}})$ -თან, ე. ი. $\hat{H}_{sl}$ ოპერატორთან და, მაშასადამე, სრულ ჰამილტონიანთანაც

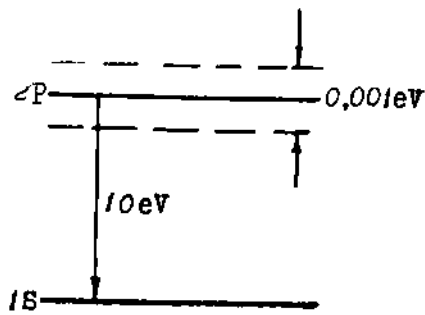
$$\hat{H} = \hat{H}_{\text{პულ}} + \hat{H}_{sl} \quad (96,6)$$

ცხადია, რომ $\hat{\mathbf{l}}^2$ და $\hat{\mathbf{s}}^2$ აგრეთვე კომუტირებენ $\hat{H}$ -თან, ხოლო რაც შეეხება $\hat{l}_z$ და $\hat{s}_z$, ისინი $\hat{H}_{sl}$ წევრის გამო კომუტატორი აღარ არიან სრულ ჰამილტონიანთან. ამიტომაც სრული ჰამილტონიანის საკუთარი ფუნქციები აღარ იქნება საერთო საკუთარი ფუნქციები $\hat{\mathbf{l}}^2$, $\hat{\mathbf{s}}^2$, $\hat{l}_z$ და $\hat{s}_z$ ოპერატორებისა. სპინ-ორბიტალური ურთიერთქმედების დროს l_z და s_z მოძრაობის ინტეგრალებს აღარ წარმოადგენენ. ამგვარად, როცა სპინ-ორბიტალური ურთიერთქმედება არსებობს, მაშინ ერთდროულად და ზუსტად იზომება სრული მომენტის კვადრატი და მისი z -პროექცია, რაც შეეხება სპინსა და ორბიტალურ მომენტს, ჩვენ შეგვიძლია მხოლოდ მათი სიდიდეების გაზომვა, პროექციებს კი გარკვეულ მნიშვნელობები არ გააჩნიათ.

თუ $\hat{H}_{sl}$ წევრს სრულ ჰამილტონიანში განვიხილავთ როგორც მცირე შეშფოთებას, მაშინ ამ წევრის გათვალისწინება გამოიწვევს ენერგეტული დონეების გახლეჩას. თითოეული ენერგეტული დონე $\hat{H}_{sl}$ ურთიერთქმედების შედეგად გაიყოფა რამდენიმე დონედ, რომლებიც ძალიან ახლოს იმყოფებიან შეუშფოთებელი ენერგიის დონეებთან.

გამოვარკვევით „სლ“ ურთიერთქმედებით გამოწვეულ გახლეჩილ ენერგეტულ დონეებს შორის მანძილის რიგი. (96,4) ფორმულის თანახმად ეს ენერგია სიდიდის რიგით ტოლია

$$\mathcal{E}_{sl} \sim -\frac{M_s M_l}{r^3} \quad (96,7)$$



ნახ. 23

M_s და M_l ბორის მაგნიტონების რიგისა ($M_B \approx 10^{-20}$ CGS სისტემაში), ხოლო $r \sim a_0 = 0,5 \cdot 10^{-8}$ სმ; ასე რომ, სპინ-ორბიტალური გახლეჩისათვის გვექნება შეფასება

$$\mathcal{E}_{sl} \approx 10^{-3} \text{ eV} \quad (96,8)$$

ძირითად და მომდევნო დონეებს შორის მანძილი კი წყალბადისებურ ატომში $\Delta E = E_1 - E_2 \approx 10 \text{ eV}$ -ის ტოლია. ამიტომ სპინ-ორბიტალური ურთიერთქმედებით გახლეჩილი დონეები გაცილებით უფრო ახლოსაა ერთმანეთთან, ვიდრე ორი მეზობელი შეუშფოთებელი დონე (ეს გარემოება სქემატურად ნაჩვენებია 23-ე ნახაზზე). დონეების გახლეჩას „სლ“ ურთიერთქმედებით უწოდებენ დონეების მულტიპლეტურ სტრუქტურას. თუ გვიპოვით შრედინგერის განტოლების ამონახსნს (96,6) ჰამილტონიანით, დავინახავთ, რომ ენერგია j კვანტური რიცხვის ფუნქცია იქნება და რადგან j იღებს ორ მნიშვნელობას $j = l \pm 1/2$ და $j = |l - 1/2|$, ამი-

ტომ თითოეული ღონე, რომელიც გვექონდა $\hat{H}_{sl}$ წვევრის გარეშე, გაიხლიჩება ორ ღონედ. (გამონაკლისს წარმოადგენს s ღონე $l=0$, რომლისთვისაც j -ს აქვს მხოლოდ ერთი მნიშვნელობა $j=1/2$ და რომელიც, მაშასადამე, არ იხლიჩება), ე. ი. ენერგეტული ღონეები იქნება ორმაგი ან, როგორც ამბობენ დუბლეტური.

ამგვარად, სპინის გათვალისწინებით ენერგია ატომში დამოკიდებული იქნება j კვანტურ რიცხვზეც. ვაჩვენოთ, რომ ენერგეტულად უფრო დაბალ მდგომარეობას შეესაბამება უმცირესი j კვანტური რიცხვი. (96,4) ფორმულიდან ნათელია, რომ ენერგიის j -ზე დამოკიდებულებას განსაზღვრავს $(\hat{l} \hat{s})$ სკალარული ნამრავლი, რომელსაც (95,19) ფორმულის მიხედვით, მინიმალური მნიშვნელობა ექნება მაშინ, როცა $j=|l-1/2|$.

ვიპოვოთ წყალბადისებური ატომისათვის სპინ-ორბიტალური გახლეჩებით გამოწვეული ენერგიის ზუსტი მნიშვნელობა. ამისათვის საკმარისია ვიპოვოთ (96,4) ოპერატორის საშუალო მნიშვნელობა (94,21) ფუნქციებით. გვექნება

$$\Delta E = \frac{Ze^2}{2\mu^2 c^2} \left(\frac{1}{r^3} \right) (\hat{l} \hat{s}) \quad (96,9)$$

სადაც

$$\left(\frac{1}{r^3} \right) = \int_0^\infty \frac{1}{r^3} |R_{nl}(r)|^2 r^2 dr, \quad (96,10)$$

ხოლო

$$(\hat{l} \hat{s}) = \langle \mathcal{Y}_{l1/2}^{jm_j} | (\hat{l} \hat{s}) | \mathcal{Y}_{l1/2}^{jm_j} \rangle. \quad (96,11)$$

თუ გავითვალისწინებთ (50,29) ფორმულებს, ადვილად ვაჩვენებთ, რომ $(\hat{l} \hat{s})$ დაემთხვევა (95,19) გამოსახულებას. მეორე მხრივ, ცნობილია რომ¹

$$\left(\frac{1}{r^3} \right) = \left(\frac{\mu c^2}{\hbar^2} \right)^3 \frac{2Z^3}{n^3 l(l+1)(2l+1)}, \quad (96,12)$$

სადაც n არის მთავარი კვანტური რიცხვი. ენერგიის შესწორებისათვის მივიღებთ

$$\Delta E = \frac{Z^4 e^2}{\mu^2 c^2} \left(\frac{\mu c^2}{\hbar^2} \right)^3 \frac{(\hat{l} \hat{s})}{n^3 l(l+1)(2l+1)} \quad (96,13)$$

იმის მიხედვით $j=l+1/2$, თუ $j=l-1/2$ ენერგიას ექნება სხვადასხვა მნიშვნელობა. თუ გამოვიყენებთ (95,19) ფორმულას ნებისმიერი l და j -სათვის, გვექნება

$$\Delta E_{nlj} = \frac{Z^2 e^4 \mu}{2n^2 \hbar^2} \left(\frac{e^2}{\hbar c} \right) \frac{Z^2}{n^2} \left(\frac{1}{l+1/2} - \frac{1}{j+1/2} \right). \quad (96,14)$$

როგორც ვიცით, $\alpha_0 = e^2/\hbar c$ სიდიდეს ეწოდება ზომერფელდის ნაზი სტრუქტურის მუდმივი. წყალბადისებური ატომის სრული ენერგიისათვის მივიღებთ

$$E_{nlj} = -\frac{Z^2 e^4 \mu}{2n^2 \hbar^2} \left\{ 1 + \left(\frac{Z\alpha_0}{n} \right)^2 \left[\frac{n}{j+1/2} - \frac{n}{l+1/2} \right] \right\}. \quad (96,15)$$

რადგან α_0 მცირე სიდიდეა, ამიტომ ამ ჯამში მეორე წევრი ძალიან მცირეა. მისი ფარდობა პირველზე რიგით α_0^2 -ის ტოლია; როცა სპინს მხედველობაში არ ვიღებთ, მაშინ $j=l$ და მეორე წევრი ამოვარდება. ამ შემთხვევაში ენერგიისათვის მივიღებთ შრედინგერის მნიშვნელობას. (96,15) ფორმულიდან ჩანს, რომ კვანტური

¹ იხ. მაგალითად გ. ჭილაშვილი, ორი და სამი ნაწილაკის კვანტური მექანიკა. 1973. გვ. 85.

დონეები მოცემული l -ით და განსხვავებული j -ით ძალიან ახლოს არიან ერთმანეთთან.

ამგვარად, გვაქვს ასეთი შედეგი: ენერგია წყალბადისებურ ატომებში დამოკიდებულია n , l და j კვანტურ რიცხვებზე, რომლებიც იღებენ შემდეგ მნიშვნელობებს:

$$\begin{aligned} n &= 1, 2, 3, \dots \infty \\ l &= 0, 1, 2, \dots n-1 \\ j &= l+1/2, \quad j=|l-1/2|, \end{aligned} \quad (96,16)$$

ხოლო

$$-j \leq m_j \leq +j.$$

რაც შეეხება ტალღურ ფუნქციას იგი დამოკიდებულია n , l , j და m_j რიცხვებზე

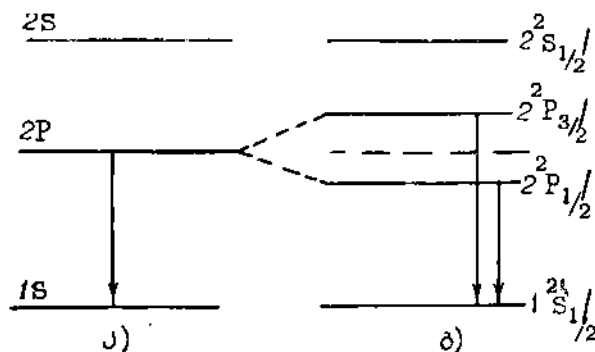
$$\psi_{nljm_j} = \psi_{nljm_j}(r, \theta, \varphi; s_z) \quad (96,17)$$

ეს იმას ნიშნავს, რომ ადგილი აქვს m_j გადაგვარებას. ყოველი ენერგეტიკული დონე ხასიათდება $(2j+1)$ ჯერადობის გადაგვარებით. გადაგვარება გამოწვეულია იმით, რომ ენერგია დამოკიდებულია მხოლოდ სრული მომენტის სიდიდეზე და არ არის დამოკიდებული ამ ვექტორის ორიენტაციაზე სივრცეში, ე. ი. ენერგია დამოკიდებული არ არის m_j კვანტურ რიცხვზე. ეს დონეები, სანამ ატომზე მოდებული არ არის მაგნიტური ველი, ერთმანეთს ემთხვევა. ველის მოდებისას კი $(2j+1)$ ჯერადი გადაგვარება იხსნება და თითოეული დონე, რომელიც ხასიათდება j -თი, $(2j+1)$ დონეთ იხლიჩება. ამ მოვლენას უწოდებენ ზეემანის რთულ ეფექტს.

სპექტრის მულტიპლეტური სტრუქტურის დასახასიათებლად შემოღებულია აღნიშვნა

$$n^{2s+1} l_j, \quad (96,18)$$

სადაც $l=0, 1, 2, 3, \dots (n-1)$ -ს, როგორც აღრე შევთანხმდით, შეესაბამება აღნიშვნები s, p, d, f, g ; n აღნიშნავს მთავარ კვანტურ რიცხვს, j კი სრული მომენტის კვანტური რიცხვია; $(2s+1)$ მიუთითებს მულტიპლეტობაზე. ნახევარი სპინის შემთხვევაში $2s+1=2$, ამიტომ ერთელექტრონიან ატომებში გვექნება დუბლეტური სტრუქტურა.



ნახ. 24

მაგალითად, $2^2p_{1/2}$ ნიშნავს $n=2$, $s=1/2$, $j=1/2$ და $l=1$. ასევე, $2^2p_{3/2}$ ნიშნავს, რომ იგივე სიდიდეებისათვის $j=3/2$. 24-ე ნახაზზე ნაჩვენებია $2p$ დონის ორად გახლეჩა „ s “ ურთიერთქმედების შედეგად. ა) შემთხვევა შეესაბამება იმას, როცა დონეების მულტიპლეტობა არაა გათვალისწინებული. ბ) კი შეესაბამება

შემთხვევას, როცა „ s_z “ ურთიერთქმედების გამო $2p$ დონე გახლეჩილია ორად ($2s$ და $1s$ დონეები არ იხლეჩება). თუ პირველ შემთხვევაში $2p \rightarrow 1s$ გადასვლის დროს შესაძლებელია ერთი სპექტრალური ხაზი, მეორე შემთხვევაში გვექნება ორი სპექტრალური ხაზი. რადგან ენერგიითა სხვაობა $2p_{3/2}$ და $2p_{1/2}$ დონეებს შორის, როგორც ზემოთ ვაჩვენეთ, ძალიან მცირეა, ამიტომ ეს ორი სპექტრალური ხაზი ძალიან ახლოს იქნება ერთმანეთთან. მათი ერთმანეთისაგან გასარჩევად უფრო ზუსტი სპექტრომეტრია საჭირო, ამიტომ სპექტრის ასეთ სტრუქტურას ნაზ სტრუქტურასაც უწოდებენ. ასეთი ნაზი სტრუქტურა (დუბლეტები) დამზერილია, მაგალითად, Na -ის ატომისათვის (ე. წ. ნატრიუმის დუბლეტის D_2 და D_1 ყვითელი ხაზები). მათი ტალღის სიგრძეები ერთმანეთისაგან მხოლოდ $6\text{\AA}$ -ით განსხვავდება.

დაბოლოს აღვნიშნოთ შემდეგი. როდესაც სპინ-ორბიტალური ურთიერთქმედება საკმარისად ძლიერია, მაშინ $\psi(r, \theta, \varphi; s_z)$ ფუნქციაში სივრცული და სპინური ცვლადების განცალკეება შეუძლებელია. მაგრამ ზშირად სხვა ურთიერთქმედებებთან შედარებით დასაშვებია „ s_z “ ურთიერთქმედების უგულებელყოფა. ამ შემთხვევაში შესაძლებელია კოორდინატული და სპინური ცვლადების განცალკეება. ასე რომ, სრული ფუნქცია შეგვიძლია წარმოვიდგინოთ როგორც ორი ფუნქციის ნამრავლი, რომელთაგან ერთი მხოლოდ კოორდინატების ფუნქციაა, მეორე კი — სპინისა, ე. ი.

$$\psi(r; s_z) = \psi(r) \chi(s_z) \quad (96,19)$$

ამ შემთხვევაში $\chi(s_z)$ „სპინური ფუნქცია“ უბრალო სიმბოლოა, რომელიც მიუთითებს სპინის მდგომარეობაზე.

შერჩევის წესები. ახლა განვიხილოთ შერჩევის წესები ატომების მიერ სინათლის გამოსხივების ან შთანქმის შემთხვევაში, როცა მდგომარეობა ხასიათდება არა l და s -ით ცალ-ცალკე, არამედ სრული j კვანტური რიცხვით. ასეთი მდგომარეობა, როგორც აღვნიშნეთ გვაქვს მაშინ, როცა ადგილი აქვს მძლავრ სპინ-ორბიტალურ ურთიერთქმედებას.

ისევე როგორც სხვა ნაწილაკები სინათლის კვანტებიც ხასიათდებიან გარკვეული სრული A მომენტი და გარკვეული w — ლუწობით. ამასთან, სრული მომენტის მინიმალური მნიშვნელობა არის ერთის ტოლი. ამიტომ ბუნებრივია, რომ ამ მინიმალურ მნიშვნელობას უწოდებენ ფოტონის სპინს; ჩვენ მას S -ით აღვნიშნავთ. თუ ფოტონის ორბიტალური მომენტისათვის ვისარგებლებთ L აღნიშვნით, მაშინ მისი სრული მომენტი ტოლი იქნება $A = L + S$; მაშასადამე, სინათლის ელექტრო-მაგნიტური კვანტებისათვის დასაშვები ყოფილა ორბიტალური მომენტის სამი მნიშვნელობა

$$L = A + 1, A, A - 1. \quad (96,20)$$

როგორც ვხედავთ ფოტონის ორბიტალურ მომენტს არ გააჩნია განსაზღვრული მნიშვნელობა. ცნობილია, რომ ფოტონის ლუწობა განისაზღვრება ფორმულით

$$w = (-1)^{L+1} \quad (96,21)$$

სინათლის ელექტრომაგნიტური ველის კვანტები განსაზღვრული მომენტით ორ კლასად იყოფა. ერთს ეწოდება ელექტრული მულტიპოლობის კვანტი და აღინიშნება EA -თი. ამ ტიპის კვანტების ლუწობა ტოლია $w(EA) = (-1)^A$, ხოლო მეორეს, მაგნიტური მულტიპოლობის კვანტი MA ; მათი ლუწობა განისაზღვრება $w(MA) = (-1)^{A+1}$ ფორმულით. მაგალითად, ელექტრული დიპოლური $E1$ კვანტის შემთხვევაში სრული მომენტი $A = 1$, ხოლო ლუწობა $w(E1) = -1$. დიპო-

ლური კვანტის ორბიტალურ მომენტს ექნება მნიშვნელობები $J_z=0$ და $L=2$. ელექტრული კვადრუპოლური კვანტის სრული მომენტი $\Lambda=2$, ხოლო ლუწობა $w(E2)=1$ და ა. შ. მაგნიტური მულტიპოლობის კვანტებს ექნებათ საწინააღმდეგო ლუწობანი. მართლაც, $M1$ კვანტისათვის $w(M1)=+1$, ხოლო $M2$ -ისათვის $w(M2)=-1$ და ა. შ.

რადგან ჩვენ უკვე ვიცით სინათლის კვანტის მომენტი და ლუწობა, ამის შემდეგ ადვილად დავადგენთ შერჩევის წესებს ელექტრული და მაგნიტური მულტიპოლობის კვანტების გამოსხივების ან შთანთქმის შემთხვევაში. შერჩევის წესები შედეგია სრული მომენტის, მისი z -პროექციისა და ლუწობის შენახვის კანონებისა. რადგან $E1$ კვანტის მომენტი ერთის ტოლია, ხოლო ლუწობა უარყოფითი, ამიტომ მისი გამოსხივების ან შთანთქმის დროს მომენტი იცვლება ერთით, ხოლო ლუწობა — საწინააღმდეგოთი. ცხადია, რომ $E1$ გადასვლის დროს $\Delta j=j'-j=0$ აკრძალული არ არის. აკრძალული იქნება მხოლოდ $j'=0$ -დან $j=0$ მდგომარეობაში გადასვლები. ამასთან, ასეთი გადასვლები აკრძალული იქნება ყველა მულტიპოლობის კვანტისათვის, რადგან იგი ეწინააღმდეგება მომენტის შენახვის კანონს. $\Delta j=0$ გადასვლა კი არ ეწინააღმდეგება არც მომენტის და არც ლუწობის შენახვას. ასე მაგალითად, შესაძლებელია განხორციელდეს $d_{3/2} \rightleftharpoons p_{3/2}$ გადასვლა $E1$ კვანტის მონაწილეობით. ამ გადასვლის დროს j არ იცვლება, ლუწობა კი იცვლება საწინააღმდეგოთი. ამავე დროს საწყისი და საბოლოო მდგომარეობის $j=j'=3/2$ მომენტების შეკრებით მივიღებთ მნიშვნელობებს 3, 2, 1, 0; მაშასადამე, $E1$ კვანტმა შეიძლება წაიღოს ერთის ტოლი მომენტი.

ამგვარად, $E1$ გადასვლების დროს გვექნება შემდეგი შერჩევის წესი:

$$|j-1| \leq j' \leq j+1; \text{ ლუწობა იცვლება} \quad (96,22)$$

$E2$ კვანტის მომენტი 2-ის ტოლია და აქვს დადებითი ლუწობა, ამიტომ ასეთი კვანტის შთანთქმის ან გამოსხივების დროს სისტემის სრული j მომენტი შეიცვლება ორი ერთეულით, ლუწობა კი არ შეიცვლება, ე. ი.

$$|j-2| \leq j' \leq j+2; \text{ ლუწობა არ იცვლება.} \quad (96,23)$$

$E2$ გადასვლა დასაშვებია, მაგალითად, $d_{3/2}$ დონიდან $s_{1/2}$ დონეზე.

მაგნიტური მულტიპოლობის კვანტის გამოსხივების ან შთანთქმის დროს საჭიროა გავითვალისწინოთ, რომ მაგნიტური მულტიპოლობის კვანტის ლუწობა საწინააღმდეგოა ელექტრული მულტიპოლური კვანტის ლუწობისა. ასე მაგალითად, $M1$ გადასვლის დროს შერჩევის წესი ასეთი იქნება:

$$|j-1| \leq j' \leq j+1; \text{ ლუწობა არ იცვლება} \quad (96,24)$$

რადგან ლუწობა არ იცვლება $M1$ გადასვლა დასაშვებია იქნება მაშინ, როცა ატომის ორბიტალური მომენტი არ იცვლება, ე. ი. ამ შემთხვევაში უნდა შეიცვალოს სპინის მიმართულება. როგორც ამბობენ ადგილი ექნება სპინის გადაბრუნებას. ასეთი იქნება, მაგალითად, $p_{3/2} \rightleftharpoons p_{1/2}$, $d_{3/2} \rightleftharpoons p_{1/2}$ გადასვლები და ა. შ.

სრულიად ანალოგიურად $M2$ გადასვლების შემთხვევაში გვექნება შერჩევის წესები

$$|j-2| \leq j' \leq j+2; \text{ ლუწობა იცვლება} \quad (96,25)$$

ასევე ვიპოვით შერჩევის წესებს ნებისმიერი მულტიპოლური გადასვლის შემთხვევაშიც.

§ 97. ელექტრონის სრული მაგნიტური მომენტი

როგორც აღვნიშნეთ, ელექტრონს გააჩნია ორი მაგნიტური მომენტი, რომელთაგან ერთი — ორბიტალური

$$\hat{\mathbf{M}}^l = -\frac{e}{2\mu c} \hat{\mathbf{l}} \quad (97,1)$$

გამოწვეულია ელექტრონის ორბიტალური მოძრაობით და მეორე — სპინური

$$\hat{\mathbf{M}}^s = -\frac{e}{\mu c} \hat{\mathbf{s}} \quad (97,2)$$

გამოწვეული ელექტრონის საკუთარი მექანიკური მომენტით — სპინით. ამ ორი მომენტის ვექტორულ ჯამს უწოდებენ ელექტრონის სრულ მაგნიტურ მომენტს

$$\hat{\mathbf{M}}^j = \hat{\mathbf{M}}^l + \hat{\mathbf{M}}^s = -\frac{e}{2\mu c} (\hat{\mathbf{l}} + 2\hat{\mathbf{s}}). \quad (97,3)$$

ან, თუ გავიხსენებთ, რომ ელექტრონის სრული მომენტი $\mathbf{j} = \mathbf{l} + \mathbf{s}$, მაშინ

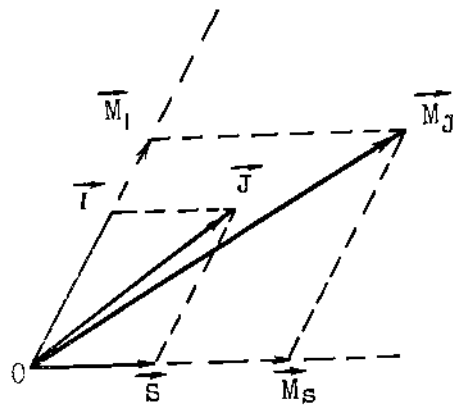
$$\hat{\mathbf{M}}^j = -\frac{e}{2\mu c} (\hat{\mathbf{j}} + \hat{\mathbf{s}}). \quad (97,4)$$

როგორც ვხედავთ, ელექტრონის სრული მაგნიტური მომენტი, აღარ არის პროპორციული ელექტრონის სრული მექანიკური მომენტისა, როგორც ეს გვექონდა ცალკე ორბიტალური და ცალკე სპინური მომენტებისათვის, რომელთაგან პირველი პროპორციული იყო ორბიტალური მომენტისა, მეორე კი — სპინისა. ეს მდგომარეობა გამოხატულია 25-ე ნახაზზე, საიდანაც ჩანს, რომ სრული მომენტი $\mathbf{j} = \mathbf{l} + \mathbf{s}$ არ ემთხვევა სრული მაგნიტური $\mathbf{M}^j$ მომენტის მიმართულებას. მიუხედავად ამისა პრაქტიკული გამოთვლების დროს ზელსაყრელია $\mathbf{M}^j$ სრული მომენტის ოპერატორი გამოვხატოთ ისეთნაირად, რომ იგი პროპორციული იყოს სრული $\hat{\mathbf{j}}$ მომენტის ოპერატორისა. ამ მიზნით შემოვიღოთ ისეთი $\hat{\Gamma}$ ოპერატორი, რომლის გამრავლებით $\hat{\mathbf{j}}$ ოპერატორზე მივიღებთ $\mathbf{M}^j$ -ს, ე. ი. შეგვიძლია დავწეროთ

$$\hat{\mathbf{M}}^j = \hat{\Gamma} \hat{\mathbf{j}}. \quad (97,5)$$

$\hat{\Gamma}$ ოპერატორის სახის დადგენა ადვილია. ამისათვის (97,5) ტოლობა სკალარულად გავამრავლოთ $\hat{\mathbf{j}}$ -ზე; მივიღებთ

$$\hat{\Gamma} = \frac{(\hat{\mathbf{M}}^j \hat{\mathbf{j}})}{\hat{\mathbf{j}}^2} \quad (97,6)$$



ნახ. 25

ნახაზი ეხება დაღებიითი მუხტის შემთხვევას

ან (97,4) ფორმულის გათვალისწინებით გვექნება

$$\hat{\Gamma} = -\frac{e}{2\mu c} \{ \hat{j}^2 + (\hat{j} \hat{s}) \} \frac{1}{\hat{j}^2}.$$

ახლა გავითვალისწინოთ, რომ $(\hat{j} \hat{s})$ სკალარული ნამრავლი შეგვიძლია გამოვხატოთ $\hat{j}^2$, $\hat{l}^2$ და $\hat{s}^2$ ოპერატორებით. მართლაც, (95,16) ფორმულის გათვალისწინებით შეგვიძლია დავწეროთ

$$\hat{\Gamma} = -\frac{e}{2\mu c} \left\{ 1 + \frac{\hat{j}^2 - \hat{l}^2 + \hat{s}^2}{2\hat{j}^2} \right\}. \quad (97,7)$$

ხოლო სრული მაგნიტური მომენტისათვის გვექნება

$$\hat{M}_j = -\frac{e}{2\mu c} \left\{ 1 + \frac{\hat{j}^2 - \hat{l}^2 + \hat{s}^2}{2\hat{j}^2} \right\} \hat{j}. \quad (97,8)$$

ჰამილტონიანის შესწორება მაგნიტურ ველში მოძრავი ელექტრონისათვის, რომელიც გამოწვეულია სრული მაგნიტური მომენტით, ტოლი იქნება

$$\hat{H}' = -(\hat{M}_j \vec{\mathcal{H}}) = \frac{e}{2\mu c} \{ (\hat{l} \vec{\mathcal{H}}) + 2(\hat{s} \vec{\mathcal{H}}) \}. \quad (97,9)$$

ათვლის სისტემის z -ღერძი მიემართოთ მაგნიტური ველის დაძაბულობის გასწვრივ, მაშინ $\vec{\mathcal{H}}(0, 0, \mathcal{H})$ და ენერგიის შესწორებისათვის მივიღებთ

$$\hat{H}' = \frac{e\mathcal{H}}{2\mu c} (\hat{l}_z + 2\hat{s}_z). \quad (97,10)$$

შემდეგოდით ე. წ. ლარმორის სიხშირე

$$\Omega = \frac{e\mathcal{H}}{2\mu c}, \quad (97,11)$$

მაშინ გვექნება

$$\hat{H}' = \Omega (\hat{l}_z + 2\hat{s}_z) \quad (97,12)$$

სრულ ჰამილტონიანს გარეშე მაგნიტურ ველში შეტანილი ატომისა ექნება შემდეგი სახე:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_{st} + \Omega(\hat{j}_z + \hat{s}_z), \quad (97,13)$$

სადაც $\hat{H}_0$ არის ატომის ჰამილტონიანი ველის გარეშე, ხოლო $\hat{H}_{st}$ სპინ-ორბიტალური ურთიერთქმედების ოპერატორია. როცა სპინ-ორბიტალური ურთიერთქმედება შეგვიძლია უგულებელვყოთ, მაშინ ატომის ჰამილტონიანი ასე შეიძლება გადავწეროთ:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \Omega(\hat{l}_z + 2\hat{s}_z) \quad (97,14)$$

აღვნიშნოთ, რომ (97,8) ფორმულის გათვალისწინებით, z -ღერძის გასწვრივ მიმართულ მაგნიტურ ველში მოძრავი ატომის ჰამილტონიანის შესწორებისათვის შეგვიძლია დავწეროთ

$$\hat{H}' = \Omega \left\{ 1 + \frac{(\hat{j} \hat{s})}{\hat{j}^2} \right\} \hat{j}_z. \quad (97,15)$$

პრეცესია. ვაჩვენოთ, რომ, როცა სპინ-ორბიტალური ურთიერთქმედება მცირეა, მაშინ ელექტრონის ორბიტალური მომენტი და სპინი მაგნიტური ველის დაძაბულობის მიმართ პრეცესიას განიცდის. ამისათვის დავეწეროთ მოძრაობის კვანტური განტოლებები $\hat{I}$ და $\hat{s}$ ვექტორებისათვის. რადგან ეს სიდიდეები დროზე ცხადად დამოკიდებულნი არ არიან, ამიტომ

$$\frac{d\hat{l}_i}{dt} = [\hat{H}, \hat{l}_i]; \quad \frac{d\hat{s}_i}{dt} = [\hat{H}, \hat{s}_i], \quad (97,16)$$

სადაც $\hat{H}$ განისაზღვრება (97,14) ფორმულით. შევიტანოთ (97,14) ჰამილტონიანი და გავითვალისწინოთ, რომ $[\hat{l}_i, \hat{s}_k] = 0$; მივიღებთ

$$\frac{d\hat{l}_i}{dt} = \Omega[\hat{l}_z, \hat{l}_i]; \quad \frac{d\hat{s}_i}{dt} = 2\Omega[\hat{s}_z, \hat{s}_i]. \quad (97,17)$$

აქედან მომენტთა მდგენელების კომუტაციის თვისებების გათვალისწინებით გვექნება

$$\frac{d\hat{l}_i}{dt} = -\Omega \mathcal{E}_{ik} \hat{l}_k. \quad (97,18)$$

ანალოგიური დამოკიდებულება სპინის პროექციებისთვისაც. გადავიღეთ საშუალო სიდიდეებზე. ამისათვის გავითვალისწინოთ, რომ Ω და $\mathcal{E}_{ik}$ ტენზორი მუდმივებია, მაშინ მივიღებთ:

$$\frac{d\bar{l}_x}{dt} = -\Omega \bar{l}_y, \quad \frac{d\bar{l}_y}{dt} = \Omega \bar{l}_x, \quad \frac{d\bar{l}_z}{dt} = 0. \quad (97,19)$$

თუ პირველ განტოლებას გავაწარმოებთ დროით და გავითვალისწინებთ მეორე განტოლებას, გვექნება

$$\frac{d^2 \bar{l}_x}{dt^2} + \Omega^2 \bar{l}_x = 0, \quad \bar{l}_y = -\frac{1}{\Omega} \frac{d\bar{l}_x}{dt}, \quad \bar{l}_z = \text{const} \quad (97,20)$$

ამ განტოლებათა ამოხსნა მოგვცემს:

$$\begin{aligned} \bar{l}_x &= A \cos(\Omega t + \alpha), \\ \bar{l}_y &= A \sin(\Omega t + \alpha), \\ \bar{l}_z &= \text{const}. \end{aligned} \quad (97,21)$$

სპინისათვის სრულიად ანალოგიურად მივიღებთ:

$$\begin{aligned} \bar{s}_x &= B \cos(2\Omega t + \delta), \\ \bar{s}_y &= B \sin(2\Omega t + \delta), \\ \bar{s}_z &= \text{const}. \end{aligned} \quad (97,22)$$

(97,22)-ფორმულებიდან აშკარად ჩანს, რომ გარეშე მაგნიტურ ველში შეტანის შედეგად ატომის ორბიტალური მომენტისა და სპინის მდგენელების საშუალო მნიშვნელობა ველის გასწვრივ ინახება, დანარჩენი მდგენელები კი (ე. ი. x და y -მდგენელები) xOy სიბრტყეში ირხევა Ω (და სათანადოდ 2Ω — სპინისათვის) კუთხური სიხშირით. ეს იმას ნიშნავს, რომ თვით I ვექტორის საშუალო მნიშვნელობა პრეცესიას განიცდის Ω -ლარმორის სიხშირით მაგნიტური ველის დაძაბულობის

ვექტორის ირგვლივ. სპინის ვექტორის საშუალო მნიშვნელობა კი იგივე მიმართულების მიმართ ბრუნავს ორჯერ უფრო სწრაფად.

როცა სპინ-ორბიტალური ურთიერთქმედება ძლიერია, მაშინ საჭიროა ჰამილტონიანში გავითვალისწინოთ $\hat{H}_{sl}$ წევრიც. ამ შემთხვევაში ცალკე სპინური და ცალკე ორბიტალური მომენტები აღარ ინახება, ეს ორი ვექტორი ერთმანეთთან ძლიერად არის დაკავშირებული; თითოეული მათგანის პრეცესიას გარეშე ველის მიმართ ადგილი არა აქვს. ამ დროს ინახება ელექტრონის სრული მომენტის კვადრატი და მისი პროექცია, ამიტომ პრეცესიას ეს ვექტორი განიცდის მაგნიტური ველის მიმართ. ცხადია, რომ მაგნიტური ველის ირგვლივ იბრუნებს სამკუთხედიც, რომელიც შედგენილია j , l და s ვექტორებისაგან. კვანტურ მექანიკაში ხშირად მიმართავენ ატომის ე. წ. ვექტორულ მოდელს, რომლის თანახმად სპინი, ორბიტალური მომენტი და სრული მომენტი განიხილება როგორც კვანტური ვექტორები. მომენტის შემცველი გამოსახულებების საკუთარი მნიშვნელობები კი მიიღება ზემოთ განხილული პრეცესიული მოძრაობების მიმართ კლასიკური გასაშუალოების მეთოდების გამოყენებით.

§ 98. ზეემანის ეფექტი

ზეემანის ეფექტს უწოდებენ მაგნიტურ ველში ატომის შეტანის შედეგად სპექტრალური ხაზების გამრავლებას. იმის მიხედვით, თუ როგორია გარეშე ველის სიძლიერე, არჩევენ ორი ტიპის ზეემანის ეფექტს: მარტივს (ანუ ნორმალურს), როცა გარეშე ველი ძლიერია და რთულს (ანუ ანორმალურს), როცა მაგნიტური ველი სუსტია. ზეემანის მარტივი ეფექტი ახსნილი იყო ლორენცის კლასიკურ ელექტრონულ თეორიაზე დაყრდნობით. რთული ეფექტის ახსნა კი მხოლოდ კვანტურმა მექანიკამ შესძლო.

როგორც ვიცით, თუ მაგნიტური ველი მიმართულია z -ღერძის გასწვრივ, მაშინ ამ ველში წყალბადისებური ატომის შეტანის შედეგად უკანასკნელის ენერგიას ემატება

$$\frac{e\hbar}{2\mu c} l_z$$

წევრი. ამიტომ ატომის სრული ენერგია მაგნიტურ ველში ტოლია

$$W_{nm} = E_n + \frac{e\hbar}{2\mu c} l_z \quad (98,1)$$

ან, თუ გავითვალისწინებთ, რომ $l_z = m\hbar$, გვქვია

$$W_{nm} = E_n + \frac{e\hbar}{2\mu c} m\hbar \quad (98,2)$$

როგორც ვხედავთ, ენერგია ფუნქცია იქნება მაგნიტური კვანტური რიცხვისა. მაგრამ გარდა წყალბადისებური ატომებისა ყველა ატომში ენერგია ფუნქციაა აზიმუტალური კვანტური რიცხვისაც; ამიტომ მაგნიტურ ველში ატომის ენერგია იქნება ფუნქცია n , l და m კვანტური რიცხვებისა, ე. ი.

$$W_{nlm} = E_n + \frac{e\hbar}{2\mu c} m\hbar. \quad (98,3)$$

ამგვარად, მაგნიტურ ველში შეტანისას ერთელექტრონიანი (გარდა წყალბადისებური ატომებისა) ატომების ენერგია დამოკიდებულია იმდენივე კვანტურ

რიცხვზე, რამდენზეც ტალღური ფუნქცია $\psi = \psi_{nlm}(r, \theta, \varphi)$, ამიტომ გადაგვარება ისპობა. მაგნიტურ ველში ენერგია დამოკიდებულია არა მხოლოდ მომენტის სიდიდეზე, არამედ მის ორიენტაციაზედაც მაგნიტური ველის მიმართ¹. ვნახოთ, როგორ იცვლება სპექტრალური ხაზები ატომის მაგნიტურ ველში შეტანისას. ამისათვის გამოვიყენოთ ბორის სინშირეთა პირობა. სპექტრალური ხაზის სიხშირე ატომის მაგნიტურ ველში შეტანისას ტოლია

$$\omega_{n'l'm'; nlm} = \frac{W_{n'l'm'} - W_{nlm}}{\hbar} = \omega_0 + \frac{e\hbar}{2\mu c} (m' - m), \quad (98,4)$$

სადაც $\omega_0 = \frac{1}{\hbar} (E_{n'l'} - E_{nl})$ არის სპექტრალური ხაზის სიხშირე მაგნიტური ველის გარეშე. თუ გავიხსენებთ, რომ $\frac{e\hbar}{2\mu c} = \Omega$ წარმოადგენს ლარმორის სიხშირეს, მაშინ ატომის მაგნიტურ ველში შეტანისას გამოსხივებული სინათლის სიხშირის ცვლილებისათვის მივიღებთ

$$\omega_{n'l'm'; nlm} = \omega_0 + \Omega \Delta m. \quad (98,5)$$

განვიხილოთ დიპოლური კვანტის გამოსხივება. დავუშვათ, გამოსხივებას ვაკვირდებით მაგნიტური ველის პერპენდიკულარული მიმართულებით. მაშინ $\Delta m = 0, \pm 1$ და, მაშასადამე, ველში ატომის შეტანით ერთი ω_0 სიხშირის ნაცვლად, ისევე როგორც კლასიკურ მექანიკაში, გვექნება სამი სიხშირე:

$$\omega_0 - \Omega, \omega_0, \omega_0 + \Omega. \quad (98,6)$$

ამ შემთხვევაში სინათლე ბრტყლად პოლარიზებულია ველის გასწვრივ ან მის მართობულად, ამიტომ (98,6) ხაზებიც ბრტყლად პოლარიზებული იქნება.

როცა გამოსხივებას ვაკვირდებით მაგნიტური ველის გასწვრივ, მაშინ $\Delta m = \pm 1$ და მივიღებთ ორ სიხშირეს

$$\omega_0 - \Omega \text{ და } \omega_0 + \Omega. \quad (98,7)$$

ამ შემთხვევაში ხაზები წრიულად პოლარიზებულია და ადგილი აქვს სპექტრალური ხაზების ორად გახლეჩას სპექტრალური ხაზების ზემოთ განხილულ გახლეჩას უწოდებს ზეემანის ნორმალური ეფექტი, რადგან მხოლოდ ეს ეფექტი შეესაბამება იმდროინდელ თეორიულ მოსაზრებებს, რომლებიც კლასიკურ მექანიკაში ჩამოყალიბებული იყო ლორენცის მიერ. შევნიშნოთ, რომ ენერგეტულ დონეებს შორის მანძილი ტოლია გამოსახულების

$$\epsilon = \hbar \Omega = \frac{e\hbar}{2\mu c} \mathcal{H}; \quad (98,8)$$

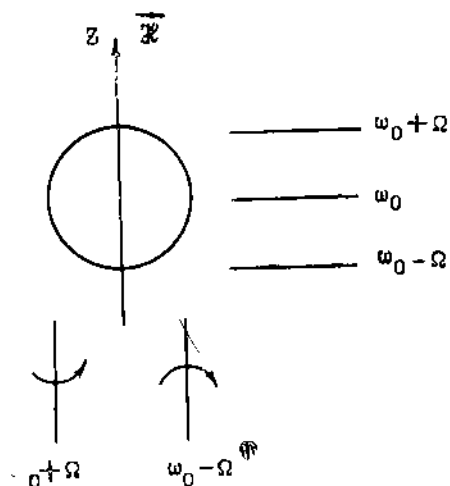
ზეემანის რთული ეფექტი. განვიხილოთ ზეემანის ანომალური ეფექტი. კვანტური მექანიკის თვალსაზრისით ამ ეფექტში არავითარი ანომალია არა გვაქვს. პირიქით, იგი ცდაზე უფრო ხშირად გვხვდება, ვიდრე ნორმალური ეფექტი. მას ზეემანის რთულ ეფექტსაც უწოდებენ. საკმაოდ იშვიათად, რომ სინამდვილეში სპექტრალური ხაზების რიცხვი გაცილებით მეტია იმაზე, რასაც იძლევა ზეემანის მარტივი ეფექტი.

¹ წყალბადისებურ ატომებში „L“ გადაგვარებას კვლავ ექნება ადგილი, ასე რომ, ამ ატომების ენერგია მაგნიტურ ველში მხოლოდ n -ზე და m -ზეა დამოკიდებული. მაშასადამე, წყალბადისებურ ატომში მოიხსნება მხოლოდ „m“ გადაგვარება.

ამ მოვლენას მარტივად ავხსნით, თუ გავითვალისწინებთ ელექტრონის სპინს და მასთან დაკავშირებულ დონეების მულტიპლეტურ სტრუქტურას. თანახმად (97,7) ფორმულისა, სრულ ჰამილტონიანს (სპინის გათვალისწინებით) ერთეულექტრონიანი ატომებისათვის, როცა ისინი მოთავსებულია z -ის მიმართულების მქონე მაგნიტურ ველში, აქვს სახე

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_{sl} + \Omega(\hat{i}_z + \hat{s}_z), \quad (98,9)$$

სადაც $\hat{H}_{sl}$ სპინ-ორბიტალური ურთიერთქმედებით გამოწვეული ენერგიის ოპერატორია. განვიხილოთ ორი შემთხვევა სუსტი და ძლიერი ველებისა. ველს ეწოდება



ნახ. 26

ძლიერი, როცა ამ ველით გამოწვეულ დონეთა გახლეჩა მეტია ატომშიგა ველით გამოწვეულ გახლეჩასთან (ე. ი. სპინ-ორბიტალურ გახლეჩასთან) შედარებით და სუსტი, როცა გარეშე ველით გამოწვეული გახლეჩა ნაკლებია ატომშიგა ველით გამოწვეულ დონეთა გახლეჩაზე. სიდიდის რიგით „sl“ გახლეჩა ტოლია დუბლეტებს შორის დონეთა სხვაობისა (ე. ი. ერთიდაიგივე l -ის, ოღონდ სხვადასხვა j -ის მქონე დონეებს შორის სხვაობის). აღვნიშნოთ ეს ენერგია ε_{sl} -ით. გახლეჩის ენერგია, რომელიც გამოწვეულია მაგნიტური ველით, სიდიდის რიგით ტოლია $\varepsilon = \Omega \hbar$. ამიტომ ძლიერი ველის პირობა ასე დაიწერება

$$\Omega \hbar = \frac{e \hbar H}{2 \mu c} \hbar \gg \varepsilon_{sl}, \quad (98,10)$$

ე. ი.

$$\hbar H \gg \frac{2 \mu c}{e \hbar} \varepsilon_{sl}. \quad (98,11)$$

სუსტი ველი კი გვექნება მაშინ, როცა

$$\hbar H \ll \frac{2 \mu c}{e \hbar} \varepsilon_{sl}. \quad (98,12)$$

მაგალითად, როცა საკმე ვეაქვს ნატრიუმის ($p_{1/2}$, $p_{3/2}$) დუბლეტთან, $\varepsilon_{sl} \sim 0,001 \text{ eV}$ და მივიღებთ, რომ გარეშე ველი სუსტია, როცა დაცულია პირობა $\hbar H \ll 50000$ გაუსი. ჯერ განვიხილოთ სუსტი ველის შემთხვევა.

1. რადგან ამ შემთხვევაში „sl“-ბმა გაცილებით ძლიერია, ვიდრე გარეშე ველი, ამიტომ s და l ცალ-ცალკე არ ინახება. ამ შემთხვევაში, როგორც წინა პარაგრაფში დავინახეთ, უნდა განვიხილოთ სრული მომენტი $j = l + s$ და გავითვალისწინოთ, რომ ადგილი აქვს j^2 და j_z -ის ერთდროულად შენახვას. ამის გამო (98,9) ჰამილტონიანში ($\hat{H}_0 + \hat{H}_{sl}$) ჯამი შეგვიძლია განვიხილოთ როგორც შეუშფოთებელი ატომის ჰამილტონიანი. უკანასკნელი წევრი კი თავისი სიმეტრიის გამო

შეგვიძლია ჩავთვალოთ მცირე შეშფოთებად. მაშასადამე, შეშფოთების ენერგიის ოპერატორის ექნება სახე

$$\hat{H}' = \Omega(\hat{j}_z + \hat{s}_z), \quad (98,13)$$

რომელიც (97,15) ფორმულის თანახმად ეკვივალენტურია გამოსახულების

$$\hat{H}' = \Omega \left\{ 1 + \frac{(\hat{j} \hat{s})}{\hat{j}^2} \right\} \hat{j}_z. \quad (98,14)$$

რადგან დავადგინეთ შეშფოთების ენერგიის ოპერატორის გამოსახულება, ატომის მაგნიტურ ველებში მოთავსების შედეგად ენერგეტიკული დონეების ცვლილების საპოვნელად, უნდა გამოვიყენოთ შეშფოთების თეორია, რისთვისაც პირველ მიახლოებაში საკმარისი იქნება ვიპოვოთ (98,14) ოპერატორის დიაგონალური მატრიცული ელემენტები, შეუშფოთებელი პამილტონიანის $\hat{H}^0 = \hat{H}_0 + \hat{H}_{st}$ საკუთარი ψ_{nljm_j} ფუნქციების მიხედვით. მაშასადამე, ენერგიის შესწორებისათვის გვექნება

$$E_{jm_j} = \langle nljm_j | \hat{H}' | nljm_j \rangle. \quad (98,15)$$

რადგან შეშფოთების ოპერატორი დამოკიდებული არ არის რადიალურ მოძრაობაზე და ტალღურ ფუნქციას აქვს (94,21) სახე, ამიტომ

$$E_{jm_j} = \langle \mathcal{Y}_{l\frac{1}{2}}^{jm_j} | \hat{H}' | \mathcal{Y}_{l\frac{1}{2}}^{jm_j} \rangle \quad (98,16)$$

$\mathcal{Y}_{l\frac{1}{2}}^{jm_j}$ წარმოადგენს საკუთარ ფუნქციას $\hat{j}^2$, $\hat{j}_z$ და აგრეთვე $(\hat{j} \hat{s})$ სკალარული ნამრავლისა, ამიტომ

$$E_{jm_j} = (\hbar\Omega) m_j \left\{ 1 + \frac{j(j+1) - l(l+1) + s(s+1)}{2j(j+1)} \right\}. \quad (98,17)$$

სიდიდეს

$$g = 1 + \frac{j(j+1) - l(l+1) + s(s+1)}{2j(j+1)} \quad (98,18)$$

უწოდებენ ლანდეს მამრავლს. ამგვარად, სუსტ მაგნიტურ ველში ატომის მიერ შეიქმნილი ენერგია ტოლი იქნება გამოსახულების

$$E_{jm_j} = (\hbar\Omega) g m_j, \quad (98,19)$$

სადაც $m_j = \pm 1/2, \pm 3/2, \pm \dots \pm j$ ატომის სრული ენერგია კი გამოისახება ფორმულით

$$W_{nljm_j} = E_{nl} + (\hbar\Omega) g m_j. \quad (98,20)$$

იმის გამო, რომ m_j იღებს $(2j+1)$ მნიშვნელობას, თითოეული ენერგეტიკული დონე იხლიჩება $(2j+1)$ დონედ და, მაშასადამე, სუსტ მაგნიტურ ველში j მომენტის ორიენტაციის გადაგვარება მოისპობა. შევნიშნოთ, რომ E_{jm_j} არასოდეს არ არის ნულის ტოლი, რადგან ერთი ელემენტის $m_j \neq 0$.

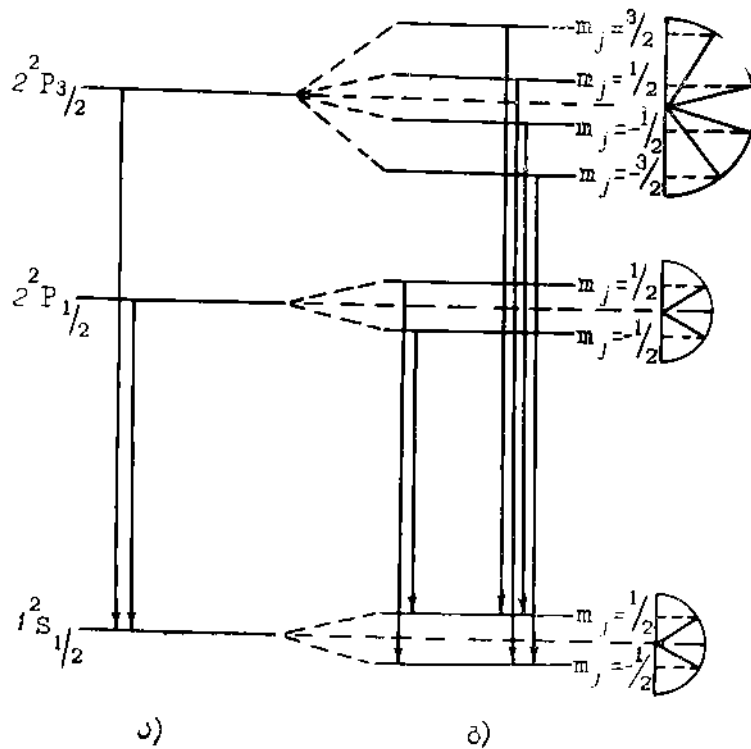
იმის მიხედვით, თუ სპინი როგორაა მიმართული ორბიტალური მომენტის მიმართ პარალელურად თუ ანტიპარალელურად, ლანდეს მამრავლისათვის გვექნება

$$g = \frac{2(l+1)}{2l+1}, \quad j = l + 1/2 \quad (98,20')$$

და

$$g_l = \frac{2l}{2l+1}, \quad j = |l - 1/2|$$

საილუსტრაციოდ განვიხილოთ $1s$ და $2p$ დონეების გახლეჩა სუსტი მაგნიტური ველით. ვთქვათ, გარეშე ველი არა გვაქვს, მაშინ იმის გამო, რომ ადგილი აქვს „ sl “ ურთიერთქმედებას, $2p$ დონე ($l=1$) გაიხლეჩება ორად: $j=1+1/2=3/2$ და $j=1-1/2=1/2$ სრული მომენტის კვანტური რიცხვის ორი შესაძლო მნიშვნელობის შესაბამისად. ამიტომ p დონისათვის მივიღებთ ღებლევს $2^2p_{3/2}$ და $2^2p_{1/2}$, ხოლო $2s$ დონე, რადგან j -სთვის გვაქვს მხოლოდ ერთი შესაძლო მნიშვნელობა $j=0+1/2=1/2$, არ გაიხლეჩება; ამგვარად, ველში შეტანამდის ატომს ექნება შემდეგი დონეები: $1^2s_{1/2}$, $2^2p_{1/2}$ და $2^2p_{3/2}$ (იხ. ნახ. 27). $2^2p_{1/2}$ და $2^2p_{3/2}$ დონეებიდან შესაძლებელია $1^2s_{1/2}$ დონეზე გადასვლა სინათლის გამოსხივებით; გვექნება



ნახ. 27. ა) შეესაბამება იმ შემთხვევას, როცა გარეშე მაგნიტური ველი არაა მოღებული, მაშინ ადგილი აქვს გალაგვარებას, მომენტის ორიენტაციები ერთმანეთს ემთხვევა. ბ) შემთხვევაში კი გარეშე ველი გვაქვს, იგი იწვევს მომენტის ორიენტაციის გალაგვარების მოხსნას.

ორი ერთმანეთთან ძალიან ახლოს მდებარე სპექტრალური ხაზი. მოვათავსოთ ატომი სუსტ მაგნიტურ ველში და გამოვარკვიოთ, რამდენი ახალი სპექტრალური ხაზი გაჩნდება. ამ მიზნით წინასწარ გამოვთვალოთ ლანდეს მამრავლი ყველა დონისათვის. თანახმად (98,20) ფორმულისა, გვექნება

$$\left. \begin{aligned} p_{3/2} \text{ დონე; } l=1, j=1+1/2=3/2, g_+ &= \frac{4}{3} \\ p_{1/2} \text{ დონე; } l=1, j=1-1/2=1/2, g_- &= \frac{2}{3} \\ s_{1/2} \text{ დონე; } l=0, j=0+1/2=1/2, g_+ &= 2 \end{aligned} \right\} \quad (98,21)$$

(98,19) ფორმულა გვიჩვენებს, რომ $p_{3/2}$ დონე გაიხლიჩება ოთხად ($m_j = -3/2, -1/2, 1/2, 3/2$). რადგან $j=3/2$. თითოეული ამ დონის ენერგია შეუზღოთებელი ატომის ენერგეტული დონისაგან შესაბამისად დაშორებული იქნება სიდიდებით

$$\begin{aligned} E_{3/2, -3/2} &= -2\hbar\Omega, \quad E_{3/2, -1/2} = -\frac{2}{3}\hbar\Omega, \\ E_{3/2, 1/2} &= \frac{2}{3}\hbar\Omega, \quad E_{3/2, 3/2} = 2\hbar\Omega \end{aligned} \quad (98,22)$$

$p_{1/2}$ დონე გაიხლიჩება ორ დონედ ($m_j = +1/2, -1/2$). ენერგიისათვის გვექნება

$$E_{1/2, -1/2} = -\frac{1}{3}\hbar\Omega, \quad E_{1/2, 1/2} = \frac{1}{3}\hbar\Omega. \quad (98,23)$$

დაბოლოს $s_{1/2}$ დონეც გაიხლიჩება ორად ($j=1/2, m_j = \pm 1/2$). ენერგიისათვის გვექნება

$$E_{1/2, -1/2} = -\hbar\Omega, \quad E_{1/2, 1/2} = \hbar\Omega. \quad (98,24)$$

ეს უკანასკნელი შეესაბამება, სწორედ, შტერნისა და პერლახის s -დონის იმ გახლეჩას, რამაც განაპირობა ელექტრონის სპინის აღმოჩენა. (გავიხსენოთ, რომ $E_{1/2, \pm 1/2} = \pm \hbar\Omega = \pm M_B \mathcal{H}$). თუ შევადგენთ სხვადასხვა დონეთა შესაბამის ენერგიათა სხვაობებს და გავყოფთ $\hbar$ მუდმივზე, ვიპოვით შესაბამისი გადასვლის სპექტრალური გაზების სიხშირეებს. დიპოლური გამოსხივების დროს შერჩევის წესების დაცვით ($\Delta l = \pm 1; \Delta m = 0, \pm 1$) ნაცვლად ორისა გვექნება ათი სპექტრალური ხაზი. ამასთან, დუბლეტის ერთი სპექტრალური კომპონენტი იხლიჩება ოთხ კომპონენტად, მეორე კი — ექვსად. შეიძლება მარტივად გავარკვიოთ თითოეული სპექტრალური ხაზის პოლარიზაციის საკითხიც.

2. განვიხილოთ მეორე უკიდურესი შემთხვევა, როცა გარეშე ველი ძლიერია „ s_l “ ურთიერთქმედებასთან შედარებით. ამ შემთხვევაში გარეშე ველი სპობს კავშირს s, l და j ვექტორებს შორის. როგორც l ისე s დამოუკიდებელია და რადგან ამ დროს სპინ-ორბიტალური ურთიერთქმედება შეგვიძლია უგულებელვყოთ, s^2, l^2 და მათი j -პროექციები მოძრაობის ინტეგრალები იქნება. s და l ვექტორებს შორის კავშირის გაწყვეტა შეგვიძლია ავხსნათ იმ გარემოებით, რომ s ვექტორი ორჯერ უფრო სწრაფად ბრუნავს $\vec{H}$ -ის ირგვლივ, ვიდრე l -ვექტორი. რადგან გარეშე ველი ძლიერია სპინ-ორბიტალურ ურთიერთქმედებასთან შედარებით, ამიტომ $\hat{H}_{sl}$ წევრი (98,9)-ში შეგვიძლია გადავადგოთ და შეშფოთებად განვიხილოთ (98,13) გამოსახულება, რომელიც იმის გამო, რომ ორბიტალური და სპინური მომენტები ცალ-ცალკე ინახება, ასე უნდა გადავწეროთ:

$$\hat{H}' = \Omega(\hat{l}_z + 2\hat{s}_z). \quad (98,25)$$

ენერგიის შესწორების მოსაძებნად საჭიროა ამ გამოსახულების დიაგნალური მატრიცული ელემენტების პოვნა შეუშფოთებელი $\hat{H}_0$ ჰამილტონიანის საკუთარი ფუნქციების მიხედვით. რამდენადაც ინახება როგორც l_z , ისე s_z გვექნება

$$E = \Omega(l_z + 2s_z), \quad (98,26)$$

ამგვარად, ენერგია განისაზღვრება ორბიტალური და სპინური მომენტების პროექციებით მაგნიტური ველის გასწვრივ. რადგან $l_z = m\hbar$ და $s_z = m_s\hbar$ ამიტომ

$$E = \hbar\Omega(m + 1), \quad m_s = 1/2. \quad (98,27)$$

$$E = \hbar\Omega(m - 1), \quad m_s = -1/2.$$

სრული ენერგია კი გამოიხატება ფორმულებით:

$$W_{nlm} = E_{nl} + \hbar\Omega(m + 1), \quad (98,28)$$

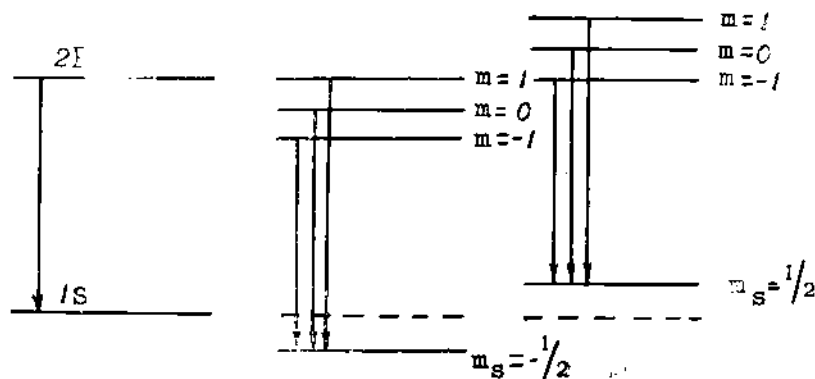
$$W_{nlm} = E_{nl} + \hbar\Omega(m - 1).$$

თუ გამოვიყენებთ ბორის სიხშირეთა პირობას, როგორც $m_s = 1/2$, ისე $m_s = -1/2$ შემთხვევისათვის, გვექნება

$$\omega_{n'l'm'; nlm} = \omega_0 \pm \Omega\Delta m. \quad (98,29)$$

$E1$ გადასვლისათვის $\Delta m = 0, \pm 1$, ამიტომ მივიღებთ

$$\omega_0 = \Omega, \quad \omega_0, \quad \omega_0 + \Omega. \quad (98,30)$$



ნახ. 28

სპექტრალურ სიხშირეებს. ე. ი. ჩვენ მივიღეთ ზუსტად ის შემთხვევა, რომელიც გვექონდა ამ პარაგრაფის დასაწყისში. აქედან უნდა დავასკვნათ, რომ ზეემანის ნორმალურ ეფექტს აღვიღო აქვს ძლიერი გარეშე მაგნიტური ველის შემთხვევაში. 28-ე ნახაზზე მოყვანილია $2p$ დონის ძლიერ ველში გახლეჩის სქემა.

აღვნიშნოთ, რომ ველი, რომელიც სუსტია ერთი რომელიმე დუბლეტისათვის, შეიძლება ძლიერი იყოს მეორისათვის. ასე რომ, შესაძლებელია ზეემანის ორივე ეფექტი — რთულიცა და მარტივიც, ერთდროულად ხდებოდეს. ზემოთქმულის თანახმად, თუ მოვახდენთ იმ ველის გაზრდას, რომელიც იწვევს ზეემანის რთულ ეფექტს, მაშინ რთული ეფექტი გადავა მარტივში. ამ მოვლენას პაშენ-ბაჟის ეფექტს უწოდებენ.

**§ 99. ერთელექტრონიანი ატომების პარამაგნიტიზმი
და დიამაგნიტიზმი**

მაგნიტური მოვლენებიდან, რომელთაც ადგილი აქვთ ატომების გარეშე ერთგვაროვან მაგნიტურ ველში შეტანისას, მეტად მნიშვნელოვანია პარამაგნიტიზმისა და დიამაგნიტიზმის მოვლენა. გამოვარკვეით როგორ ხსნის კვანტური მექანიკა ამ მოვლენებს. ამ მიზნით საკმარისია კვანტური მექანიკის მეთოდებით გამოვთვალოთ მაგნიტური ამთვისებლობა. დავუშვათ, გარეშე ველის დაძაბულობა, რომელშიაც შეტანილი გვაქვს ერთელექტრონიანი ატომების გაზი, მიმართულია z -ღერძის გასწვრივ და სიდიდით $\mathcal{H}$ -ის ტოლია.

გარეშე მაგნიტური ველი ურთიერთქმედებს ატომის მაგნიტურ მომენტებთან. ეს ურთიერთქმედება, როცა სპინ-ორბიტალური წვერი მცირეა, ხდება ცალკე ორბიტალურ და ცალკე სპინურ მომენტებთან, ხოლო როცა სპინ-ორბიტალური ურთიერთქმედება ძლიერია, გარეშე მაგნიტური ველი ურთიერთქმედებს სრულ მომენტთან. ჰამილტონიანი, როცა ერთელექტრონიანი ატომი შეტანილია გარეშე ერთგვაროვან სუსტ მაგნიტურ ველში ტოლი იქნება

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_{sl} + \Omega(\hat{l}_z + 2\hat{s}_z). \quad (99,1)$$

ამ გამოსახულებაში $\hat{H}_0$ ოპერატორი არ შეიცავს არც სპინსა და არც გარეშე მაგნიტურ ველთან დაკავშირებულ წევრებს. როგორც ვიცით, ერთგვაროვანი მაგნიტური ველის შემთხვევაში $\mathbf{A} = \frac{1}{2} [\mathcal{H} \times \mathbf{r}]$, ამიტომ¹

$$\frac{e}{\mu c} (\mathbf{A} \cdot \mathbf{p}) = \frac{e\mathcal{H}}{2\mu c} \hat{l}_z \quad (99,2)$$

და, მასასადამე, (99,1) ჰამილტონიანში $\Omega \hat{l}_z$ წვერი გამოწვეულია $\frac{e}{\mu c} (\mathbf{A} \cdot \mathbf{p})$ წევრით.

საგან, რაც შეეხება $\mathbf{A}^2$ -ის შემცველ წევრს იგი უგულებელყოფილია. ეს წვერი მართლაც მცირეა (99,2)-თან შედარებით, მაგრამ $\mathbf{A}^2$ -ის შემცველი წვერი, როგორც ქვემოთ დავინახავთ, აპირობებს დიამაგნიტიზმის მოვლენას, ამიტომ მისი განხილვა აუცილებელია. რადგან $\mathbf{A} = \frac{1}{2} [\mathcal{H} \times \mathbf{r}]$ და $\mathcal{H}$ მიმართულია z -ღერძის გასწვრივ, ამიტომ

$$A_x = -\frac{1}{2} y\mathcal{H}, \quad A_y = \frac{1}{2} x\mathcal{H}, \quad A_z = 0 \quad (99,3)$$

და $\frac{e^2}{2\mu c^2} \mathbf{A}^2$ წვერი მიიღებს სახეს

$$\frac{e^2 \mathcal{H}^2}{8\mu c^2} (x^2 + y^2). \quad (99,4)$$

ამგვარად, ჰამილტონის ოპერატორს $\mathbf{A}^2$ წევრის გათვალისწინებით ექნება გამოხატულება:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_{sl} + \Omega(\hat{j}_z + \hat{s}_z) + \frac{e^2 \mathcal{H}^2}{8\mu c^2} (x^2 + y^2). \quad (99,5)$$

¹ იხ. § 66.

ატომის მაგნიტური მომენტის z -პროექცია განისაზღვრება ფორმულით

$$M_z = - \frac{\partial \hat{H}}{\partial \mathcal{H}} \quad (99,6)$$

ხოლო მაგნიტური ამთვისებლობა ტოლია გამოსახულების

$$\chi = \frac{\partial \overline{M}_z}{\partial \mathcal{H}}, \quad (99,7)$$

სადაც $\overline{M}_z$ არის ატომის მაგნიტური მომენტის საშუალო მნიშვნელობა ველის მიმართულებით. ამგვარად, ჩვენთვის საკმარისია მაგნიტური მომენტის საშუალო მნიშვნელობის გამოთვლა.

ჯერ განვიხილოთ პარამაგნიტიზმის მოვლენა. ამისათვის (99,5) ჰამილტონიანში დავტოვოთ $\mathcal{H}$ -ის მხოლოდ პირველი ხარისხის შემცველი წევრი. მაშინ ჰამილტონიანი ისეთივე იქნება, რაც გვქონდა ზეემანის რთული ეფექტის განხილვის დროს. ჩვენ ვაჩვენებთ, რომ ზეემანის ეფექტის შედეგად, ატომის ენერგია იცვლება სიდიდით

$$E_{jm_j} = \hbar \Omega g m_j, \quad (99,8)$$

სადაც g არის ლანდეს მამრავლი. რადგან m_j იღებს $(2j+1)$ მნიშვნელობას, ამიტომ გარეშე ველში ატომს ექნება სხვადასხვა ენერგია. თუ გავიხსენებთ, რომ

$$M_B = \frac{e\hbar}{2\mu c} \quad \text{წარმოადგენს ბორის მაგნიტონს და შემოვიღებთ აღნიშვნას} \quad \beta = M_B g, \quad (99,9)$$

მაშინ ენერგიისათვის მივიღებთ

$$E_{jm_j} = \beta m_j \mathcal{H}. \quad (99,10)$$

ამგვარად, ატომის მაგნიტური მომენტის z -პროექციის როლს ასრულებს სიდიდე

$$M_z = - \beta m_j = - M_B g m_j. \quad (99,11)$$

ბოლცმანის კანონის თანახმად, ალბათობა იმისა, რომ ატომი T აბსოლუტურ ტემპერატურაზე შეგვხვდება მდგომარეობაში, რომლის მომენტის პროექცია მაგნიტური ველის გასწვრივ ტოლია $m_j \hbar$ -ისა, გამოისახება ფორმულით

$$w(m_j) = A e^{-\frac{\beta m_j \mathcal{H}}{kT}}, \quad (99,12)$$

სადაც $k = 1,36 \cdot 10^{-16}$ ერგი/გრ წარმოადგენს ბოლცმანის მუდმივს, A კი ნორმირების კოეფიციენტი. ამის შემდეგ ადვილია მომენტის საშუალო მნიშვნელობის მონახვა ველის გასწვრივ; გვექნება

$$\overline{M}_z = - \overline{\beta m_j} = - \frac{\sum_{m_j=-j}^{+j} \beta m_j e^{-\beta m_j \mathcal{H} / kT}}{\sum_{m_j=-j}^{+j} e^{-\beta m_j \mathcal{H} / kT}}, \quad (99,13)$$

რომელიც ასეც შეგვიძლია გადავწეროთ:

$$\overline{M_z} = kT \frac{\partial}{\partial \mathcal{H}} \ln \sum_{m_j=-j}^{+j} e^{-\frac{\beta m_j \mathcal{H}}{kT}}. \quad (99,14)$$

მოვახდინოთ აჯამვა. ამ მიზნით შემოვიღოთ აღნიშვნა $\varepsilon = e^{-\beta \mathcal{H}/kT}$, მაშინ გვექნება

$$\sum_{m_j=-j}^{+j} \varepsilon^{m_j} = \varepsilon^{-j} + \varepsilon^{-(j+1)} + \dots + \varepsilon^{j-1} + \varepsilon^j = \frac{\varepsilon^{j+1} - \varepsilon^{-j}}{\varepsilon - 1}, \quad (99,15)$$

რამდენადაც ეს ჯამი წარმოადგენს გეომეტრიულ პროგრესიას ε მნიშვნელით. ამგვარად, თუ დავუბრუნდებით ძველ სიდიდეებს, გვექნება

$$\sum_{m_j=-j}^{+j} \varepsilon^{m_j} = \frac{\text{sh} \left[(2j+1) \frac{\beta \mathcal{H}}{2kT} \right]}{\text{sh} \left(\frac{\beta \mathcal{H}}{2kT} \right)}. \quad (99,16)$$

მაშასადამე, მომენტის საშუალო მნიშვნელობისათვის მივიღებთ

$$\overline{M_z} = kT \frac{\partial}{\partial \mathcal{H}} \ln \frac{\text{sh} \left[(2j+1) \frac{\beta \mathcal{H}}{2kT} \right]}{\text{sh} \left(\frac{\beta \mathcal{H}}{2kT} \right)}, \quad (99,17)$$

გაწარმოების შემდეგ საბოლოოდ გვექნება

$$\overline{M_z} = \frac{j}{2} \left\{ (2j+1) \text{cth} \left[(2j+1) \frac{\beta \mathcal{H}}{2kT} \right] - \text{cth} \left(\frac{\beta \mathcal{H}}{2kT} \right) \right\} \quad (99,18)$$

ეს ფორმულა ასეც გადაიწერება:

$$\overline{M_z} = jg M_B B_j \left(\frac{\beta \mathcal{H}}{2kT} \right), \quad (99,19)$$

სადაც

$$B_j(x) = \frac{1}{2j} \left\{ (2j+1) \text{cth} \left[(2j+1) \frac{x}{2j} \right] - \text{cth} \left(\frac{x}{2j} \right) \right\}, \quad (99,20)$$

ხოლო

$$x = \frac{\beta \mathcal{H}}{kT} j; \quad (99,21)$$

$B_j(x)$ ს ლანჯევენის კვანთურ ფუნქციას ან ბრილუენის ფუნქციას უწოდებენ.

კლასიკური მექანიკის ანალოგიით მომენტის მიღებულ მნიშვნელობას უწოდებენ ინდუცირებულ მომენტს. იგი წარმოადგენს მაგნიტური ველის გასწვრივ მომენტის საშუალო მნიშვნელობას, რომლითაც იცვლება ატომის მაგნიტური მომენტი მისი მაგნიტურ ველში შეტანისას.

გამოვარკვევით რა სახე აქვს ბრილუენის ფუნქციას კონკრეტულ შემთხვევებში. ავიღოთ $j=1/2$, მაშინ

$$B_{1/2}(x) = 2 \text{cth } 2x - \text{cth } x = 2 \frac{\text{ch } 2x}{\text{sh } 2x} - \frac{\text{ch } x}{\text{sh } x} = \frac{\text{ch } 2x - \text{ch}^2 x}{\text{sh } x \text{ ch } x} = \text{th } x; \quad (99,22)$$

ამგვარად,

$$B_{1/2}(x) = \tanh x. \quad (99,23)$$

მაქსიმალური მნიშვნელობა j -სი შეიძლება იყოს უსასრულოა; ამ ზღვრულ შემთხვევაში მივიღებთ ლანჟევენის კლასიკურ ფუნქციას

$$B_\infty(x) = \coth x = \frac{1}{x}. \quad (99,24)$$

ხოლო, როცა $x \gg 1$, მაშინ $B_j(\infty) = 1$. როცა $x \ll 1$, მაშინ $\coth x$ შეგვიძლია გავშალოთ მწკრივად და შევინარჩუნოთ პირველი ორი წევრი

$$\coth x = \frac{1}{x} + \frac{x}{3} + \dots. \quad (99,25)$$

ამის მიხედვით (99,20) მიიღებს სახეს

$$B_j(x) = \frac{j+3}{3} x. \quad (99,26)$$

პრაქტიკულად ყოველთვის $x = \frac{\beta \mathcal{H}}{2kT} \ll 1$ (მცირე გარეშე ველები), ამიტომ (99,19) ფორმულის თანახმად, გვექნება

$$\bar{M}_z = \frac{j(j+1) \beta^2 \mathcal{H}}{3kT} = \frac{j(j+1) g^2 M_B^2 \mathcal{H}}{3kT}. \quad (99,27)$$

როგორც ვხედავთ, $\bar{M}_z$ მიმართულია მაგნიტური ველის გასწვრივ. მაშასადამე, გვაქვს პარამაგნიტიზმის მოვლენა (99,7) ფორმულის ძალით პარამაგნიტური ამთვისებლობისათვის მივიღებთ

$$\chi_{\text{პარა}} = \frac{j(j+1) M_B^2 g^2}{3kT}. \quad (99,28)$$

ატომის მაგნიტური მომენტის როლს ასრულებს სიდიდე

$$M_B g \sqrt{j(j+1)} = \frac{e\hbar}{2\mu c} \sqrt{j(j+1)} g, \quad (99,29)$$

რომელიც $M_B \sqrt{j(j+1)}$ მომენტის მნიშვნელობისაგან განსხვავდება ლანდეს g მამრავლით. რადგან ერთელექტრონიანი ატომისათვის j არასოდეს ნული არ არის, ამიტომ ყველა ერთელექტრონიანი ატომები პარამაგნიტურია. ზემოთ მოყვანილი (96,28) ფორმულა კიურის კანონის სახელწოდებითაა ცნობილი.

ახლა განვიხილოთ დიამაგნიტიზმის მოვლენა. დიამაგნიტიზმს აპირობებს (99,5) პამილტონიანის ბოლო წევრი. ამ წევრის შესაბამისი მაგნიტური მომენტი (99,6) განმარტების თანახმად ტოლი იქნება

$$\mathbf{M}_d = - \frac{e^2 \mathcal{H}}{4\mu c^2} (x^2 + y^2). \quad (99,30)$$

ინდუცირებული მომენტის საშუალო მნიშვნელობისათვის გვექნება

$$\bar{M}_d = - \frac{e^2 \mathcal{H}}{4\mu c^2} (\overline{x^2 + y^2}). \quad (99,31)$$

როგორც ვხედავთ, ეს მომენტი ყოველთვის ველის საწინააღმდეგოდ არის მიმართული და, მაშასადამე, აპირობებს დიამაგნიტიზმს. დიამაგნიტური ამთვისებლობა კი ტოლი იქნება

$$\chi_d = -\frac{e^2}{4\mu c^2} \overline{(x^2 + y^2)}. \quad (99,32)$$

$(x^2 + y^2)$ -ის საშუალოს გამოთვლა ძნელი არ არის კვანტური მექანიკის საშუალო მნიშვნელობის ფორმულის დახმარებით. ცხადია, რომ $\overline{(x^2 + y^2)} \neq 0$, ამიტომ დიამაგნიტიზმის მოვლენას ადვილი აქვს ყველა ატომში. ადვილი დასაბუთია, რომ სიდიდით დიამაგნიტიზმი გაცილებით მცირეა პარამაგნიტიზმზე. მართლაც, სიდიდის რიგით ინდუცირებული მაგნიტური მომენტი, რომელიც იწვევს პარამაგნიტიზმს,

$$\overline{M} \sim M_B = \frac{e\hbar}{2\mu c}, \text{ ხოლო } \overline{M}_d \sim \frac{e^2 \mathcal{H}}{2\mu c^2} a_0^2, \text{ სადაც } a_0 \text{ ატომის ზომაა.}$$

აშკარაა, რომ $\overline{M} \gg \overline{M}_d$ ყოველთვის, როცა გარეშე ველის დაძაბულობა აკმაყოფილებს პირობას

$$\mathcal{H} \ll \frac{hc}{e^2} \frac{e}{a_0^2} = 137 \frac{e}{a_0^2}. \quad (99,33)$$

რადგან $a_0 \sim 10^{-8}$ სმ, ამიტომ უკანასკნელი ტოლობა პრაქტიკულად ყოველთვის დაცულია. ამგვარად, ერთელექტრონიანი ატომების დიამაგნიტიზმი შეგვიძლია არ განვიხილოთ. სულ სხვა მდგომარეობა გვქმნება მრავალელექტრონიანი ატომების შემთხვევაში. შემდგომში დავინახავთ, რომ ელექტრონთა ლუწი რიცხვის მქონე ატომებისათვის პარამაგნიტიზმი შეიძლება არ გვექონდეს, მაშინ დიამაგნიტიზმის მოვლენა არსებით როლს შეასრულებს.

სავარჯიშო მაგალითები

1. ვიპოვოთ წყალბადისებური ატომის კვადრუპოლური მომენტი ელექტრონის სპინის გათვალისწინებით.

ამოხსნა. (84,12) და (84,21) ფორმულების თანახმად წყალბადისებური ატომის კვადრუპოლური მომენტი ტოლი იქნება

$$Q_0(n, j, m_j) = -e \langle nl | r^2 | nl \rangle \langle jm_j | 3 \cos^2 \Theta - 1 | jm_j \rangle,$$

სადაც

$$\langle jm_j | 3 \cos^2 \Theta - 1 | jm_j \rangle = \int \mathcal{Y}_{l, m_j}^* (\Theta, \varphi) [3 \cos^2 \Theta - 1] \mathcal{Y}_{l, m_j} (\Theta, \varphi) d\Omega,$$

ხოლო $\langle nl | r^2 | nl \rangle$ წარმოადგენს r^2 -ის საშუალო მნიშვნელობას რადიალური ფუნქციების მიხედვით. მისი ცხადი სახე განისაზღვრება (84,25) ფორმულით.

(50,26) ფორმულის მიხედვით შეგვიძლია დავწეროთ

$$\left| \mathcal{Y}_{l, 1/2}^{l+1/2, m_j} \right|^2 = \frac{1}{2l+1} \left\{ \left(l + \frac{1}{2} \pm m_j \right) \left| Y_{l, m_j - 1/2} \right|^2 + (l + 1/2 \mp m_j) \left| Y_{l, m_j + 1/2} \right|^2 \right\}.$$

რადგან (82,23)-ის თანახმად

$$\langle lm | 3 \cos^2 \Theta - 1 | lm \rangle = \frac{2l(l+1) - 6m^2}{(2l-1)(2l+3)},$$

ამიტომ

$$Q_0(n, l \pm 1/2, m_j) = -\frac{\langle nl | r^2 | nl \rangle}{2l+1} \left\{ \left(l + 1/2 \pm m_j \right) \frac{2l(l+1) - 6(m_j - 1/2)^2}{(2l-1)(2l+3)} + \right. \\ \left. + \left(l + \frac{1}{2} \mp m_j \right) \frac{2l(l+1) - 6(m_j + 1/2)^2}{(2l-1)(2l+3)} \right\}$$

ეს უკანასკნელი გამარტივების შემდეგ ასეც შეგვიძლია გადავწეროთ:

$$Q_0(n, l \pm 1/2, m_l) = \langle nl | r^2 | nl \rangle \frac{2l(l+1) - 6(m_l^2 + 1/4) \pm \frac{12}{2l+1} m_l^2}{(2l-1)(2l+3)}. \quad (95,1)$$

ამ გამოსახულებიდან გამოვრიცხოთ l კვანტური რიცხვი j კვანტური რიცხვის საშუალებით, მაშინ მივიღებთ საკმარისად მარტივ გამოსახულებას

$$Q_0(n, j, m_j) = \frac{1}{2} \langle nl | r^2 | nl \rangle \left[1 - \frac{3m_j^2}{j(j+1)} \right], \quad (95,2)$$

როცა $j=1/2$, მაშინ როგორც მოსალოდნელი იყო $Q_0(n, 1/2, \pm 1/2)=0$.

2. ვიპოვოთ ნახევარსპინიანი თავისუფალი ნაწილაკის ტალღური ფუნქცია განსაზღვრული j^2 და j_z -ით.

ამოხსნა. რადგან j^2 და j_z ოპერატორების საერთო საკუთარ ფუნქციას წარმოადგენს $\mathcal{Y}_{l, 1/2}^{jm_j}(\theta, \varphi)$ ფუნქცია, ამიტომ საძიებელ ტალღურ ფუნქციას ექნება სახე

$$\psi_{l, 1/2}^{jm_j}(r) = R_l(r) \mathcal{Y}_{l, 1/2}^{jm_j}(\theta, \varphi). \quad (95,3)$$

სადაც $R_l(k, r)$ წარმოადგენს შრედინგერის რადიალური ფუნქციების განტოლების ამონახსნს თავისუფალი ნაწილაკისათვის. ეს განტოლება ცხადია სპინს არ შეიცავს, ამიტომ რადიალური ფუნქცია დამოკიდებული იქნება მხოლოდ l -ზე; როგორც § 54-ში დავინახეთ ამ ფუნქციას აქვს $R_l(k, r) = A_l j_l(kr)$ სახე, აქ $j_l(kr)$ ბესელის სფერული ფუნქციაა, A_l კი — ნორმირების მუდმივი. რამდენადაც $R_l(k, r)$ ფუნქციები შეგვიძლია განოპირობოთ პირობით

$$\int_0^\infty R_l^*(k', r) R_l(k, r) r^2 dr = \frac{\delta(k - k')}{kk'}.$$

სრულიად ანალოგიურად იმისა, რაც გვერნდა § 54-ში, მივიღებთ $A_l = \left(\frac{2}{\pi}\right)^{1/2}$. ამგვარად, საძიებელ ფუნქციას ექნება სახე

$$\psi_{l, 1/2}^{jm_j}(r) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} j_l(kr) \mathcal{Y}_{l, 1/2}^{jm_j}(\theta, \varphi). \quad (95,4)$$

ან, თუ გამოვიყენებთ (50,26) გამოსახულებას, ეს ფუნქცია ასეც შეგვიძლია გადავწეროთ:

$$\psi_{l, 1/2}^{l \pm 1/2, m_j}(r) = \frac{\sqrt{\frac{2}{\pi}} j_l(kr)}{\sqrt{2l+1}} \begin{pmatrix} \sqrt{l+1/2 \pm m_j} Y_{l, m_j - 1/2} \\ \pm \sqrt{l+1/2 \mp m_j} Y_{l, m_j + 1/2} \end{pmatrix} \quad (95,5)$$

ზედა ნიშანი იღება $j=(l+1/2)$ -სათვის ქვედა $j=|l-1/2|$ -სათვის.

ნაწილაკთა სისტემის კვანძური მექანიკა

თ ა ვ ი X I I I

მრავალი ნაწილაკისაგან შედგენილი სისტემები

აქამდე ჩვენ ვიხილავდით ერთი ნაწილაკის მოძრაობას, მაგრამ უფრო ხშირად საქმე გვაქვს მრავალი ნაწილაკისაგან შედგენილ მიკროსისტემებთან, ამიტომ მეტად მნიშვნელოვანია ასეთი სისტემების კვანთურ-მექანიკური თვალსაზრისით განხილვა. არჩევენ ორი ტიპის მიკროსისტემებს. ერთია ისეთი სისტემა, რომელიც შედგება იგივეური ნაწილაკებისაგან და მეორე, რომელიც შედგება სხვადასხვა ნაწილაკისაგან. იგივეურ ნაწილაკთა სისტემას მთელი რიგი პრინციპულად განსხვავებული თვისებები გააჩნია და ამიტომ მას სპეციალურად განვიხილავთ § 102-ში. კვანთური მექანიკის ამ ნაწილში აგრეთვე შევისწავლით ელექტრონთა მეტად მნიშვნელოვან სისტემებს — რთულ ატომებსა და ორატომიან მოლეკულებს.

§ 100. შრედინგერის განტოლება ნაწილაკთა სისტემისათვის

დავუშვათ, სისტემა შედგება N (საზოგადოდ სხვადასხვა) ნაწილაკისაგან. $\mathbf{r}_k$ იყოს k -ური ნაწილაკის რადიუსვექტორი რაიმე კოორდინატთა სისტემაში, ხოლო $\mathbf{r}_k$ — ამ ნაწილაკის სპინური ცვლადი. როცა ნაწილაკის სპინს მხედველობაში არ გვღებთ, მაშინ სისტემის ტალღური ფუნქცია N რადიუსვექტორზე იქნება დამოკიდებული. ე. ი.

$$\psi = \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N; t). \quad (100,1)$$

ეს ფუნქცია წარმოადგენს შრედინგერის განტოლების ამონახსნს. ამასთან, შრედინგერის განტოლებას ექნება სახე

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N; t) = \hat{H} \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N; t), \quad (100,2)$$

სადაც $\hat{H}$ არის სისტემის ჰამილტონიანი, რომლის სახის დადგენა, თუ ვისარგებლებთ ნაწილაკთა სისტემის კლასიკური მექანიკის ჰამილტონიანით, არაა ძნელი კვანთური მექანიკის ძირითად პირობებზე დაყრდნობით. კლასიკურ ჰამილტონის ფუნქციას N ნაწილაკის სისტემისათვის აქვს გამოხატულება

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^N H_i + \sum_{i \neq k=1}^N U_{ik}(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_k), \quad (100,3)$$

სადაც

$$H_i = \frac{\mathbf{p}_i^2}{2m_i} + V_i(\mathbf{r}_i; t). \quad (100,4)$$

ამ გამოსახულებაში $\mathbf{p}_i$ არის i -ური ნაწილაკის იმპულსი, m_i -მასა, ხოლო $V_i(\mathbf{r}, t)$ i -ურ ნაწილაკზე მოქმედი გარეშე ველის პოტენციალური ენერგია. $U_{ik}(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_k)$ წარმოადგენს i და k -ური ნაწილაკების ურთიერთქმედების პოტენციალურ ენერგიას. კვანტური მექანიკის ძირითადი პიპოთეზის თანახმად, ნაწილაკთა სისტემის ჰამილტონიანს, კოორდინატულ წარმოდგენაში, თუ გავითვალისწინებთ, რომ i -ური ნაწილაკის იმპულსის ოპერატორი ტოლია $\mathbf{p}_i = -i\hbar \nabla_i$ გამოსახულების, ექნება შემდეგი სახე:

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^N \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m_i} \Delta_i + V_i(\mathbf{r}_i, t) \right\} + \sum_{i \neq k=1}^N U_{ik}(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_k), \quad (100,5)$$

სადაც

$$\Delta_i = \nabla_i^2 = \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_i^2} + \frac{\partial^2}{\partial z_i^2} \quad (100,6)$$

არის i -ური ნაწილაკის კოორდინატების შესაბამისი ლაპლასის ოპერატორი.

გამოვარკვევით ტალღური ფუნქციის ფიზიკური შინაარსი. ამისათვის გამოვიყენოთ უწყვეტობის განტოლება. ავიღოთ (100,2) განტოლების კომპლექსურად შეუღლებულ

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi^*(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N; t) = \hat{H} \psi^*(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N; t). \quad (100,7)$$

(100,2) განტოლება მარცხნიდან გავამრავლოთ ψ^* -ზე, (100,7) კი ψ -ზე და პირველს გამოვაკლოთ მეორე. (100,5) გამოსახულების გათვალისწინებით მივიღებთ:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi^*(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N; t) \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N; t) = \\ = \frac{\hbar^2}{2} \sum_{i=1}^N \frac{1}{m_i} \{ \psi^* \Delta_i \psi - \psi \Delta_i \psi^* \}; \end{aligned} \quad (100,8)$$

თუ შემოვიღებთ აღნიშვნებს:

$$w(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N; t) = \psi^*(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N; t) \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N; t) \quad (100,9)$$

$$\mathbf{J}_k = \frac{i\hbar}{2m_k} \{ \psi \nabla_k \psi^* - \psi^* \nabla_k \psi \}, \quad (100,10)$$

მაშინ მივიღებთ უწყვეტობის განტოლებას

$$\frac{\partial w(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N; t)}{\partial t} + \sum_{i=1}^N \operatorname{div}_i \mathbf{J}_i = 0, \quad (100,11)$$

სადაც (2) ინდექსი მიუთითებს, რომ დივერგენცია აიღება i -ური ნაწილაკის შესაბამისი ცვლადებით. როგორც ვხედავთ $w = \psi^* \psi$ შეგვიძლია განვიხილოთ, როგორც ნაწილაკთა სისტემის მდებარეობის ალბათობის სიმკვრივე. კერძოდ,

$$w(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N; t) d\mathbf{r}_1, \dots, d\mathbf{r}_N = |\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N; t)|^2 d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2, \dots, d\mathbf{r}_N \quad (100,12)$$

გამოხატავს იმის ალბათობას, რომ დროის t მომენტში პირველი ნაწილაკი იმყოფება სივრცის $d\mathbf{r}_1$ მოცულობაში, მეორე — $d\mathbf{r}_2$ -ში და ა. შ. N -ური $d\mathbf{r}_N$ -ში. $\mathbf{J}_i$ კი წარმოადგენს i -ური ნაწილაკის ალბათობის დენის სიმკვრივის ვექტორს. (100,11) გამოხატავს ნაწილაკთა სრული რიცხვის შენახვის კანონს.

თუ (100,12) გამოსახულებას გავაინტეგრალებთ ყველა ცვლადებით, გარდა k -ურისა, მაშინ მივიღებთ k -ური ნაწილაკის ალბათობის სიმკვრივეს, როცა დანარჩენი ნაწილაკების მდებარეობა ნებისმიერია:

$$w(\mathbf{r}_k, t) = \int w(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N; t) d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \dots d\mathbf{r}_{k-1} d\mathbf{r}_{k+1} \dots d\mathbf{r}_N \quad (100,13)$$

თუ (100,12) გამოსახულების ინტეგრაციას მოვახდენთ ყველა ცვლადით, გარდა $d\mathbf{r}_i$ და $d\mathbf{r}_k$ -სი, მივიღებთ

$$w(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_k; t) d\mathbf{r}_i d\mathbf{r}_k = \left\{ \int w(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N; t) d\mathbf{r}_1 \dots d\mathbf{r}_{i-1} d\mathbf{r}_{i+1} \dots d\mathbf{r}_{k-1} d\mathbf{r}_{k+1} \dots d\mathbf{r}_N \right\} d\mathbf{r}_i d\mathbf{r}_k, \quad (100,14)$$

რომელიც გამოხატავს ალბათობას იმისა, რომ i -ური ნაწილაკი დროის t მომენტში მოხვდება სივრცის $d\mathbf{r}_i$ მოცულობაში, ხოლო k -ური $d\mathbf{r}_k$ -ში, დამოუკიდებლად იმისა, თუ სად იმყოფება სისტემის დანარჩენი ნაწილაკები. ცხადია, რომ

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N; t) \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N; t) d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \dots d\mathbf{r}_N = 1. \quad (100,15)$$

შეგვიძლია განვიხილოთ როგორც ტალღური ფუნქციის ნორმირების პირობა. თუ ვიპოვით შრედინგერის (100,2) განტოლების ამოხსნას (100,5) ჰამილტონიანის შემთხვევაში, მაშინ განვსაზღვრავთ სისტემის კვანტურ მდგომარეობას, რომელიც $\psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N; t)$ ტალღური ფუნქციით ხასიათდება. ამ მდგომარეობაში ვიპოვიოთ ყველა იმ ოპერატორის საკუთარ მნიშვნელობებს, რომლებიც გადასმადი არიან $\hat{H}$ -თან და ერთმანეთთან. რაც შეეხება არაკომუტატორი ოპერატორების შესაბამის ფიზიკურ სიდიდეებს, ზათ ψ -თი დახასიათებულ მდგომარეობაში გარკვეული მნიშვნელობები არა აქვთ, მაგრამ ჩვენ შეგვიძლია ვიპოვოთ მათი საშუალო მნიშვნელობები, რომლებიც ასე განისაზღვრებიან:

$$\langle A \rangle = \int \psi^*(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N; t) \hat{A} \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N; t) d\mathbf{r}_1 \dots d\mathbf{r}_N \quad (100,16)$$

აღვნიშნოთ, რომ ნაწილაკთა სისტემის შრედინგერის განტოლების ამოხსნის საკითხი დიდ პრინციპულ და ტექნიკურ სიძნელეებს აწუცდება. ამასთან, განტოლების ამოხსნა მით ძნელია, რაც მეტია ნაწილაკთა რიცხვი. სამი ნაწილაკის შემთხვევაშიაც კი შრედინგერის განტოლება კვადრატურებში არ იხსნება. ამიტომ კვანტურ მექანიკაში ნაწილაკთა სისტემის შესწავლის მიზნით გამოიყენება მრავალრიცხოვანი მიახლოებითი მეთოდები.

განვიხილოთ არაურთიერთქმედ ნაწილაკთა სისტემა. რადგან სისტემის ნაწილაკები ერთმანეთზე არ მოქმედებენ, ამიტომ ურთიერთქმედების პოტენციალური $U_{ik}(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_k)$ ენერგია ნულის ტოლი იქნება. ვიგულისხმობთ, რომ მდგომარეობა სტაციონარულია, მაშინ შრედინგერის განტოლებას ექნება შემდეგი სახე:

$$\hat{H} \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) = E \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N), \quad (100,17)$$

სადაც E არაურთიერთქმედ ნაწილაკთა სისტემის სრული ენერგიაა, ხოლო ჰამილტონის ოპერატორს აქვს გამოხატულება

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^N \hat{H}_i(\mathbf{r}_i) = \sum_{i=1}^N \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m_i} \Delta_i + V_i(\mathbf{r}_i) \right\}. \quad (100,18)$$

რადგან ჰამილტონიანში ცვლადები განცალგებულა, ამიტომ (100,17) განტოლების ამოხსნა ადვილია ფურიეს მეთოდით. მართლაც, ამონახსნი ვეძებთ შემდეგი ნამრავლის სახით:

$$\psi(r_1, r_2, \dots, r_N) = \psi_1(r_1) \psi_2(r_2) \dots \psi_N(r_N). \quad (100,19)$$

შევიტანოთ ეს ნამრავლი (100,17) განტოლებაში და შედეგი გავყოთ ამავე ფუნქციას; მივიღებთ

$$\sum_{i=1}^N \frac{1}{\psi_i(r_i)} \left[-\frac{\hbar^2}{2m_i} \Delta_i + V_i(r_i) \right] \psi_i(r_i) = E \quad (100,20)$$

ამ ტოლობას ადვილი მაშინ ექნება, როცა

$$-\frac{\hbar^2}{2m_i} \Delta_i \psi_i(r_i) + V_i(r_i) \psi_i(r_i) = E_i \psi_i(r_i) \quad (100,21)$$

ამასთან, დაცული უნდა იყოს პირობა $E = E_1 + E_2 + \dots + E_N$. (100,21)-დან ჩანს, რომ $\psi_i(r_i)$ აკმაყოფილებს $V_i(r_i)$ გარეშე ველში მოძრავი i -ური ნაწილაკის შრე-დინგერის განტოლებას E_i სრული ენერგიით.

ამგვარად, მივიღეთ ასეთი შედეგი: არაუერთიერთმელ ნაწილაკთა სისტემის ტალღური ფუნქცია წარმოადგენს ცალკეულ ნაწილაკთა ტალღური ფუნქციების ნამრავლს, ენერგია კი — ცალკეულ ნაწილაკთა ენერგიების ჯამს, ე. ი.

$$\psi(r_1, r_2, \dots, r_N) = \prod_{i=1}^N \psi_i(r_i), \quad (100,22)$$

$$E = \sum_{i=1}^N E_i. \quad (100,23)$$

მართალია, როგორც წესი, არაუერთიერთმელ სისტემებთან ჩვენ საქმე არა გვაქვს, მაგრამ ასეთი სისტემის ჩვენს მიერ ზემოთ ნაპოვნი ამონახსნები ხშირად გამოიყენება, როგორც ურთიერთმელ ნაწილაკთა სისტემის ქვეშეობითი ტალღური ფუნქციების ნულოვანი მიახლოება.

§ 101. ნაწილაკთა სისტემის დამახასიათებელი ფიზიკური სიდიდეები

განვიხილოთ კვანტურმექანიკური სისტემის დამახასიათებელი ფიზიკური სიდიდეები როგორიცაა: იმპულსი, მომენტი, ლუწობა და სხვა.

იმპულსი. მთელი სისტემის იმპულსის ოპერატორი განისაზღვრება როგორც ცალკეული ნაწილაკების იმპულსის ოპერატორების ჯამი

$$\hat{\mathbf{P}} = \sum_{k=1}^N \hat{\mathbf{p}}_k = -i\hbar \sum_{k=1}^N \nabla_k, \quad (101,1)$$

სადაც ∇_k ოპერატორი აღებულია k -ური ნაწილაკის შესაბამისი კოორდინატების მიხედვით.

ვიპოვოთ იმპულსის ოპერატორის საკუთარი ფუნქციები. ამისათვის დავწეროთ განტოლება

$$\hat{\mathbf{P}}\psi(r_1, r_2, \dots, r_N) = \mathbf{P}\psi(r_1, r_2, \dots, r_N), \quad (101,2)$$

(101,1) ოპერატორის შეტანით დავინახავთ, რომ განტოლებას ისეთი სახე აქვს, როცა ცვლადების განცალკევება შეიძლება ფურიეს მეთოდით. მართლაც, ამონახსნი ვეძებთ შემდეგი ნამრავლის სახით:

$$\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) = \prod_{k=1}^N \psi_k(\mathbf{r}_k). \quad (101,3)$$

ამ ფუნქციის შეტანით (101,2) განტოლებაში და ამავე ფუნქციაზე გაყოფით მივიღებთ

$$\sum_{k=1}^N \frac{\hat{\mathbf{p}}_k \psi_k(\mathbf{r}_k)}{\psi_k(\mathbf{r}_k)} = \mathbf{P}, \quad (101,4)$$

საიდანაც დავასკვნით, რომ

$$\hat{\mathbf{p}}_k \psi_k(\mathbf{r}_k) = \mathbf{p}_k \psi_k(\mathbf{r}_k) \quad (101,5)$$

იმ პირობით, რომ

$$\mathbf{P} = \sum_{k=1}^N \mathbf{p}_k \quad (101,6)$$

(101,5) განტოლება ერთი ნაწილაკის (k -ური ნაწილაკის) იმპულსის ოპერატორის საკუთარი ფუნქციებისა და საკუთარი მნიშვნელობების განტოლებაა, მისი ნორმირებული ამონახსნისათვის გვექნება

$$\psi_k(\mathbf{r}_k) = (2\pi\hbar)^{-3/2} e^{i \mathbf{p}_k \mathbf{r}_k / \hbar}. \quad (101,7)$$

(101,3)-ის თანახმად, მთელი სისტემისათვის გვექნება შემდეგი ამონახსნი:

$$\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) = (2\pi\hbar)^{-3N/2} e^{i \sum_{k=1}^N \mathbf{p}_k \mathbf{r}_k / \hbar} \quad (101,8)$$

ცხადია, რომ ეს ფუნქცია შეგვიძლია განვიხილოთ როგორც არაერთიერთქმედ თავისუფალ ნაწილაკთა სისტემის ტალღური ფუნქცია.

ახლა ვაჩვენოთ, რომ იზოლირებული სისტემის იმპულსი ინახება. როცა სისტემა იზოლირებულია, მაშინ გარეშე ველის $V_i(\mathbf{r}_i)$ პოტენციალი ნულია და ჰამილტონიანს ექნება სახე

$$\hat{H} = \sum_{k=1}^N \frac{\hat{\mathbf{p}}_k^2}{2m_k} + \sum_{i \neq k=1}^N U_{ik}(\mathbf{r}_{ik}); \quad (101,9)$$

ამასთან, რადგან სისტემა იზოლირებულია, ურთიერთქმედების პოტენციალური ენერგია დამოკიდებული იქნება მხოლოდ ნაწილაკთა წორის არსებულ მანძილზე $\mathbf{r}_{ik} = \mathbf{r}_i - \mathbf{r}_k$, დავწეროთ მოძრაობის განტოლება

$$\frac{d\hat{\mathbf{P}}}{dt} = [\hat{H}, \hat{\mathbf{P}}] = -i\hbar \left[\hat{H}, \sum_{k=1}^N \nabla_k \right]. \quad (101,10)$$

შევიტანოთ ჰამილტონიანის მნიშვნელობა (101,9) ტოლობიდან და გავივალისწინოთ, რომ $\hat{\mathbf{P}}$ კომუტატურია კინეტიკური ენერგიის ოპერატორთან, მაშინ

$$\frac{d\mathbf{P}}{dt} = -i\hbar \left[\sum_{k,j}^N U_{kj}, \sum_{k=1}^N \nabla_k \right] \quad (101,11)$$

რადგან U_{kj} დამოკიდებულია $\mathbf{r}_{kj} = \mathbf{r}_k - \mathbf{r}_j$ სხვაობაზე, ამიტომ $\sum_{k=1}^N \nabla_k$ ჯამიდან U_{kj} -ზე იმოქმედებს მხოლოდ ორი ოპერატორის ჯამი; კერძოდ, $\nabla_k + \nabla_j$, ამიტომ (101,11)-ში შემავალი პუასონის ფრჩხილები დაიყვანება შემდეგი ტიპის გამოსახულებაზე:

$$\begin{aligned} [U_{kj}, \nabla_k + \nabla_j] \psi &= -\frac{i}{\hbar} \{ (\nabla_k U_{kj}) \psi + (\nabla_j U_{kj}) \psi \} = \\ &= -\frac{i}{\hbar} \left\{ \frac{dU_{kj}}{d\mathbf{r}_{kj}} \nabla_k \mathbf{r}_{kj} + \frac{dU_{kj}}{d\mathbf{r}_{kj}} \nabla_j \mathbf{r}_{kj} \right\} \psi \end{aligned} \quad (101,12)$$

ეს გამოსახულება კი ნულის ტოლია რადგანადაც $\nabla_k \mathbf{r}_{kj} = -\nabla_j \mathbf{r}_{kj}$. მაშასადამე,

$$\frac{d\mathbf{P}}{dt} = 0 \quad (101,13)$$

ე. ი. იზოლირებული სისტემის იმპულსი მართლაც ინახება.

სისტემის მომენტი. თუ k -ური ნაწილაკის დეკარტის კოორდინატებს აღვნიშნავთ x_k, y_k, z_k -თა, მაშინ ორბიტალური მომენტის ოპერატორებს, როგორც ვიცით, ექნება სახე:

$$\begin{aligned} \hat{l}_x^k &= \frac{\hbar}{i} \left(y_k \frac{\partial}{\partial z_k} - z_k \frac{\partial}{\partial y_k} \right), \\ \hat{l}_y^k &= \frac{\hbar}{i} \left(z_k \frac{\partial}{\partial x_k} - x_k \frac{\partial}{\partial z_k} \right), \\ \hat{l}_z^k &= \frac{\hbar}{i} \left(x_k \frac{\partial}{\partial y_k} - y_k \frac{\partial}{\partial x_k} \right). \end{aligned} \quad (101,14)$$

ამ მდგენელებით განსაზღვრული ვექტორი იქნება k -ური ნაწილაკის ორბიტალური მომენტის ვექტორ-ოპერატორი. შემოვიღოთ სამი ახალი ოპერატორი:

$$\hat{L}_x = \sum_{k=1}^N \hat{l}_x^k; \quad \hat{L}_y = \sum_{k=1}^N \hat{l}_y^k; \quad \hat{L}_z = \sum_{k=1}^N \hat{l}_z^k. \quad (101,15)$$

ამ ოპერატორებით განსაზღვრულ ვექტორ-ოპერატორს $\hat{\mathbf{L}}(\hat{L}_x, \hat{L}_y, \hat{L}_z)$ ვუწოდოთ სისტემის (ანდა სრული) ორბიტალური მომენტის ოპერატორი. თუ გამოვიყენებთ $\hat{l}_x^k, \hat{l}_y^k, \hat{l}_z^k$ ოპერატორების კომუტაციის თვისებებს, ადვილად ვაჩვენებთ, რომ

$$\begin{aligned} \hat{L}_x \hat{L}_y - \hat{L}_y \hat{L}_x &= i\hbar \hat{L}_z, \\ \hat{L}_y \hat{L}_z - \hat{L}_z \hat{L}_y &= i\hbar \hat{L}_x, \\ \hat{L}_z \hat{L}_x - \hat{L}_x \hat{L}_z &= i\hbar \hat{L}_y \end{aligned} \quad (101,16)$$

ან, მოკლედ,

$$[\hat{L}_\alpha, \hat{L}_\beta] = -i\hbar \epsilon_{\alpha\beta\gamma} \hat{L}_\gamma. \quad (101,17)$$

აღნიშნული სამი ოპერატორიდან ჩვენ შეგვიძლია შევადგინოთ ოპერატორი

$$\hat{L}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2, \quad (101,18)$$

რომელსაც სისტემის ორბიტალური მომენტის კვადრატის ოპერატორი ეწოდება. ეს ოპერატორი კომუტატორია ყოველ $\hat{L}_x$, $\hat{L}_y$, $\hat{L}_z$ მდგენელთან

$$[\hat{L}^2, \hat{L}_\alpha] = 0, \quad (\alpha=1, 2, 3) \quad (101,19)$$

რაც იმას ნიშნავს, რომ L^2 და მისი რომელიმე ერთი პროექცია შეიძლება ერთდროულად ზუსტად გაიზომოს. აშკარაა, $\hat{L}_z$ ოპერატორის L_z საკუთარი მნიშვნელობა განისაზღვრება ფორმულით

$$L_z = \hbar M_L, \quad (101,20)$$

სადაც

$$-L \leq M_L \leq +L \quad (101,21)$$

L არის სისტემების ორბიტალური მომენტის კვანტური რიცხვი და განისაზღვრება მომენტთა შეკრების წესით ცალკეული ნაწილაკის l აზიმუტალური რიცხვების საშუალებით. აშკარაა, $L \geq 0$. M_L არის სისტემის ორბიტალური მომენტის შესაბამისი მაგნიტური კვანტური რიცხვი. იგი იღებს $(2L+1)$ მნიშვნელობას.

სისტემის ორბიტალური მომენტის კვადრატის საკუთარი მნიშვნელობები გამოისახება ფორმულით

$$L^2 = \hbar^2 L(L+1). \quad (101,22)$$

ანალოგიურად შეიძლება შემოვიღოთ სისტემის სპინისა (ანდა სრული სპინის) და მისი მდგენელების ოპერატორები:

$$\hat{S}_x = \sum_{k=1}^N \hat{s}_x^k, \quad \hat{S}_y = \sum_{k=1}^N \hat{s}_y^k, \quad \hat{S}_z = \sum_{k=1}^N \hat{s}_z^k. \quad (101,23)$$

სისტემის სპინის მდგენელებიც ისეთივე კომუტაციის პირობებს დააკმაყოფილებს, რაც გვექონდა ერთი ნაწილაკის სპინის ოპერატორის მდგენელებისათვის; სახელდობრ,

$$[\hat{S}_i, \hat{S}_k] = -\epsilon_{ikl} \hat{S}_l. \quad (101,24)$$

სპინის კვადრატისა და მისი x მდგენელის საკუთარი მნიშვნელობებისათვის გვექნება

$$S^2 = \hbar^2 S(S+1); \quad S_z = M_s \hbar, \quad (101,25)$$

სადაც S არის სრული სპინის კვანტური რიცხვი, M_s კი — სპინის მაგნიტური კვანტური რიცხვი. იგი იღებს მნიშვნელობებს $-S$ -დან $+S$ -მდე, ე. ი. — სულ $(2S+1)$ მნიშვნელობას. ამასთან, იმის მიხედვით, თუ როგორია ნაწილაკის სპინი და ნაწილაკთა რიცხვი, S შეიძლება იყოს მთელიცა და ნახევრის კენტი ჯერადიც. აშკარაა, რომ $[\hat{S}^2, \hat{S}_z] = 0$. ასევე, $[\hat{L}^2, \hat{S}^2] = 0$, რადგან სპინის ოპერატორი კოორდინატების ფუნქცია არაა.

სისტემის ორბიტალური მომენტისა და სისტემის სპინის ვექტორების კვანტური შეკრებით მიიღება სისტემის სრული მომენტი, რომელსაც $\hat{J}$ -თი აღვნიშნავთ, ე. ი.

$$\hat{J} = \hat{L} + \hat{S}. \quad (101,26)$$

თანხმად (101,17) და (101,24) ფორმულებისა, ადვილად დავრწმუნდებით, რომ $\hat{J}$ -ს მდგენელებიც ისეთივე კომუტაციის თვისებებით ხასიათდება, როგორც L და S ; სახელდობრ,

$$[\hat{J}_\alpha, \hat{J}_\beta] = -i\epsilon_{\alpha\beta\gamma} \hat{J}_\gamma; \quad (101,27)$$

ამიტომ $\hat{J}^2$ -სა და $\hat{J}_z$ -ის საკუთარი მნიშვნელობისათვის შეიძლება დავწეროთ

$$J^2 = \hbar^2 J(J+1), \quad (101,28)$$

$$J_z = M_J \hbar. \quad (101,29)$$

J არის სრული მომენტის კვანტური რიცხვი, M_J კი წარმოადგენს შესაბამის მაგნიტურ კვანტურ რიცხვს, ამასთან $-J \leq M_J \leq +J$. ადვილად დავრწმუნდებით, რომ $\hat{J}^2$ იც კომუტატურია თავის ნებისმიერ მდგენელთან, ე. ი. $[\hat{J}^2, \hat{J}_\alpha] = 0$.

რადგან სისტემის სრულ ორბიტალურ L და სპინურ S მომენტებს საესებით ისეთივე თვისებები აქვთ, რაც შესაბამის სიდიდეებს ერთი ნაწილაკის შემთხვევაში, ამიტომ $(\hat{J}\hat{S})$ და $(\hat{L}\hat{S})$ სკალარული ნამრავლების საკუთარი მნიშვნელობებისათვის გვექნება:

$$(LS) = \frac{\hbar^2}{2} \{J(J+1) - L(L+1) - S(S+1)\}, \quad (101,30)$$

$$(JS) = \frac{\hbar^2}{2} \{J(J+1) - L(L+1) + S(S+1)\}, \quad (101,31)$$

სადაც J , L , S სისტემის დამახასიათებელი მომენტების კვანტური რიცხვებია, რომლებიც სხვადასხვა მნიშვნელობას იღებს იმის მიხედვით, თუ როგორია ნაწილაკთა რიცხვი, კენტი თუ ლუწი.

იზოლირებული სისტემის ჰამილტონიანი ყოველთვის კომუტატური იქნება სისტემის სრული მომენტის კვადრატთან და მის z -პროექციასთან. ამიტომ, ზოგად შემთხვევაში ადგილი აქვს J^2 და J_z სიდიდეების შენახვას, მაშინ, როცა L და S მომენტები შეიძლება ცალ-ცალკე არ ინახებოდეს სპინური და ორბიტალური მომენტების ურთიერთქმედების გამო.

ლუწობა. რადგან იზოლირებული სისტემის (101,9) ჰამილტონიანი ინვარიანტულია ინვერსიის ოპერატორის მიმართ, ამიტომ ადგილი ექნება სისტემის სრული ლუწობის შენახვის კანონს. ეს იმას ნიშნავს, რომ სისტემის ტალღური ფუნქციის ლუწობა არ იცვლება. ერთი ნაწილაკის მოძრაობის შემთხვევაში ცენტრალურ ველში ლუწობა განისაზღვრებოდა $(-1)^l$ სიდიდით. რაც იმას გვიჩვენებს, რომ ერთი ნაწილაკისათვის ლუწობა და ორბიტალური მომენტი ერთმანეთთან დაკავშირებულია და ლუწობისა და მომენტის შენახვის კანონები ერთმანეთზე დამოუკიდებელი არ არის. ნაწილაკთა სისტემის შემთხვევაში მდგომარეობა განსხვავებულია. სიმარტივის მიზნით განვიხილოთ არაურთიერთქმედ ნაწილაკთა სისტემა, რომელზედაც მოქმედებს გარეშე ცენტრალური ველი. ჰამილტონიანს, ამ შემთხვევაში, ექნება სახე

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^N H_i(\mathbf{r}_i) = \sum_{i=1}^N \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m_i} \Delta_i + V_i(\mathbf{r}_i) \right\}. \quad (101,32)$$

ასეთი ჰამილტონიანის შემთხვევაში ჩვენ შეგვიძლია შემოვიღოთ ცალკეული ნაწილაკის ორბიტალური მომენტი l_i . სისტემის სრული ორბიტალური მომენტი კი ტოლი იქნება $L = \sum l_i$ გამოსახულების.

შრედინგერის განტოლების ამონახსნი (100,22) ფორმულის თანახმად ტოლი იქნება

$$\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) = \prod_{i=1}^N \psi_i(\mathbf{r}_i). \quad (101,33)$$

ვიპოვოთ ამ ფუნქციის ლუწობა. ამისათვის (101,33)-ზე ვიმოწმდეთ ინვერსიის ოპერატორით და გავიხსენოთ, რომ თითოეული ნაწილაკის ლუწობა განისაზღვრება ორბიტალური მომენტიმ, მაშინ გვექნება:

$$\begin{aligned} \hat{J}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) &= \hat{J}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) \prod_{i=1}^N \psi_i(\mathbf{r}_i) = \\ &= (-1)^{l_1+l_2+\dots+l_N} \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N); \end{aligned} \quad (101,34)$$

მაშასადამე, სისტემის ლუწობა განისაზღვრება ფორმულით

$$I = (-1)^{l_1+l_2+\dots+l_N}, \quad (101,35)$$

სადაც l_i არის i -ური ნაწილაკის ორბიტალური მომენტის კვანტური რიცხვი. ჩვენ ვხედავთ, რომ სისტემისათვის ლუწობა და ორბიტალური მომენტი დამოუკიდებელი სიდიდეებია. მართლაც, ლუწობის განსაზღვრისათვის საკმარისია ცალკეული ორბიტალური კვანტური რიცხვების არითმეტიკული შეკრება, მაშინ, როცა სრული ორბიტალური L მომენტის მისაღებად საჭიროა ცალკეულ ნაწილაკთა მომენტების ვექტორების გეომეტრიული შეკრება $L = \sum l_i$.

მართალია (101,35) ფორმულა გამოვიყენეთ არაუერთიერთქმედ ნაწილაკთა სისტემის შემთხვევაში, მაგრამ ამ ფორმულით შეგვიძლია განვსაზღვროთ რათელი ატომების ლუწობაც, რადგან ატომებში განიხილება ე. წ. თვითშეთანხმებული ელექტონების მეთოდი, რომლის ძალით ელექტრონთა ურთიერთქმედება დაიყვანება გარეშე ცენტრალურ ველზე.

სისტემის კვადრუპოლური მომენტი. ერთელექტრონიანი ატომების განხილვის დროს დავინახეთ, რომ სტაციონარულ მდგომარეობაში ატომს დიპოლმომენტი არ გააჩნია, მას შეიძლება ჰქონდეს კვადრუპოლური მომენტი. იქვე ვიპოვეთ ერთელექტრონიანი ატომის კვადრუპოლური მომენტის ტენზორი და ვაჩვენეთ, რომ იგი არის მეორე რანგის სიმეტრიული და ლუწი ტენზორი, რომლის შპლური ნულის ტოლია. ახლა ვიპოვოთ სისტემის კვადრუპოლური მომენტის ტენზორი. რამდენადაც ატომს სტაციონარულ მდგომარეობაში აქვს ერთადერთი დამახასიათებელი ვექტორი — მომენტი, ამიტომ ეს ტენზორი დაკავშირებული იქნება ატომის სრულ J მომენტთან. J ვექტორის საშუალებით შევადგინოთ ისეთი მეორე რანგის ტენზორი, რომელსაც ექნება ზემოთ ჩამოთვლილი თვისებები. ამკარაა, რომ $\hat{J}_i \hat{J}_k + \hat{J}_k \hat{J}_i$ იქნება მეორე რანგის სიმეტრიული ტენზორი, ამ ტენზორის შპლური ნულის ტოლი რომ იყოს საჭიროა მას გამოვავლოთ $\frac{2}{3} \delta_{ik} \hat{J}^2$ ტენზორი. მივიღებთ

$$Q_{ik} = A \left(\hat{J}_i \hat{J}_k + \hat{J}_k \hat{J}_i - \frac{2}{3} \delta_{ik} \hat{J}^2 \right), \quad (101,36)$$

სადაც A არის პროპორციულობის კოეფიციენტი, იგი ისე შევარჩიოთ, რომ, როცა $J_z = \hbar J$ (ე. ი. როცა მომენტის პროექციას აქვს მაქსიმალური მნიშვნელობა) Q_{zz}

დაემთხვეს ატომის კვადრუპოლური მომენტის ექსპერიმენტულ მნიშვნელობას; გვექნება

$$Q_0 = Q_{zz}(J) = A \left\{ 2\hbar^2 J^2 - \frac{2}{3} \hbar^2 J(J+1) \right\}, \quad (101,37)$$

საიდანაც

$$A = \frac{3Q_0}{2J(2J-1)\hbar^2}. \quad (101,38)$$

მაშასადამე, კვადრუპოლური მომენტის ტენზორს ექნება შემდეგი სახე:

$$Q_{ik} = \frac{3Q_0}{2J(2J-1)\hbar^2} \left(\hat{J}_i \hat{J}_k + \hat{J}_k \hat{J}_i - \frac{2}{3} \delta_{ik} J^2 \right), \quad (101,39)$$

სადაც $Q_0 = Q_{zz}(J_z = \hbar J)$ წარმოადგენს სიდიდეს, რომელიც ცდაზე იზომება და რომელსაც უბრალოდ, ატომის კვადრუპოლურ მომენტს უწოდებენ. კვადრუპოლური ტენზორის (101,39) წარმოდგენა ერთადერთია, რადგან ატომს სხვა დამახასიათებელი ვექტორი გარდა $\mathbf{J}$ -სა არა აქვს. კერძო შემთხვევაში, როცა ატომის სრული მომენტი $J = 1/2$, მაშინ $\hat{J}_i = \frac{\hbar}{2} \sigma_i^x$, სადაც σ_i^x პაულის მატრიცებია. რადგან პაულის მატრიცები აკმაყოფილებენ პირობას

$$\sigma_i^x \sigma_k^x + \sigma_k^x \sigma_i^x = 2\delta_{ik} \quad (101,40)$$

და $J^2 = S^2 = \frac{3}{4} \hbar^2$, ამიტომ $Q_{ik} = 0$. ცხადია, რომ Q_{ik} აგრეთვე ნულია, როცა $J = 0$.

ამგვარად, ჩვენ გვაქვს მნიშვნელოვანი დასკვნა: ატომებს, რომელთა სრული მომენტი $J \leq 1/2$ კვადრუპოლური მომენტი არ გააჩნია.

§ 102. იზოპურ ნაწილაკთა სისტემა

ნაწილაკთა სისტემებიდან განსაკუთრებულ შესწავლას მოითხოვს ისეთი სისტემები, რომლებიც იგივერი ნაწილაკებისაგან შედგება. იგივერი ნაწილაკების კლასიკურ და კვანტურ აღწერას შორის არსებობს მკვეთრი განსხვავება, რაც იმაში მდგომარეობს, რომ კლასიკურ მექანიკაში არის შესაძლებლობა დროის რაიმე მომენტისათვის მოვახდინოთ იგივერი ნაწილაკთა გადანომვრა ისე, რომ იგი შენარჩუნებულ იქნეს ნებისმიერი დროის მომენტისათვის. ეს შესაძლებელია, რადგან კლასიკურ მექანიკაში ნაწილაკები მოძრაობს ტრაექტორიებზე; შეიძლება გავყვეთ ნაწილაკის ტრაექტორიას და დავრწმუნდეთ, რომ დამზერილი იგივერი ნაწილაკი სწორედ ის არის, რომელიც $t=0$ მომენტისათვის აღნიშნული გვექონდა რაიმე ნომრით. რადგან არსებობს ნაწილაკების ასეთი ცალსახა იდენტიფიკაციის საშუალება, ამიტომ კლასიკურ მექანიკაში გულისხმობენ, რომ ნაწილაკთა სისტემის მდგომარეობები ერთმანეთისაგან განსხვავებულია, თუ ეს განსხვავება იმაში მდგომარეობს, რომ გადასმულია ორი იგივერი ნაწილაკი.

სულ სხვა სურათია კვანტურ მექანიკაში. აქ ნაწილაკის ტრაექტორიაზე ლაპარაკს აზრი არა აქვს; გარკვეული მიახლოებით შეგვიძლია ვიმსჯელოთ მხოლოდ ტალღური პაკეტების მოძრაობაზე სივრცეში. ეთქვათ, $t=0$ დროის მომენტისათვის ჩავატარეთ იგივერი ნაწილაკთა გადანომვრა. გარკვეული დროის შემდეგ ტალღური პაკეტები გაიშლება და გადაფარავს ერთმანეთს. ამიტომ ორი ნაწილაკის ტალღური პაკეტების გადაფარვის არეში შეუძლებელი იქნება ნაწილაკების გარკვევა მათი პირველადი ნუმერაციის მიხედვით. ამგვარად, კვანტურ მექანიკაში არა

გვაქვს შესაძლებლობა მოვახდინოთ $t=0$ დროის მომენტისათვის ჩატარებული ნუმერაციის იდენტიფიკაცია. ამის გამო სისტემის ისეთი ორი მდგომარეობა, რომელიც ერთმანეთისაგან იგივეურ ნაწილაკთა გადასმით განსხვავდება, ერთი და იგივე უნდა ჩაითვალოს. ჩვენ ახლა ვნახავთ, კვანტური სისტემის ასეთი განსხვავებული აღწერა მათემატიკურად როგორ გამოიხატება.

შევადგინოთ N იგივეური ნაწილაკის სისტემის ჰამილტონიანი. ამ მიზნით x_k -თი აღვნიშნოთ k -ური ნაწილაკის ყველა კოორდინატის ერთობლიობა, ე. ი. სივრცული მდებარეობის განმსაზღვრელი r_k რადიუსვექტორისა და სპინური კოორდინატების ერთობლიობა $x_k = (r_k, s_k)$. რადგან იგივეური ნაწილაკების მასები, მუხტები, სპინები და სხვა ერთნაირებია, ამიტომ ასეთი სისტემის ჰამილტონიანი შემდეგნაირად ჩაიწერება:

$$\hat{H}(x_1, x_2, \dots, x_N; t) = \sum_{k=1}^N \left\{ -\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta_k + V(x_k, t) \right\} + \sum_{k \neq j=1}^N U(x_k, x_j), \quad (102,1)$$

სადაც Δ_k ლაპლასიანია k -ური ნაწილაკის შესაბამისი კოორდინატების მიხედვით.

$V(x_k, t)$ წარმოადგენს k -ურ ნაწილაკზე მოქმედ გარეშე ველის პოტენციალურ ენერგიას. იგი ერთნაირია ყველა იგივეური ნაწილაკისათვის და დამოკიდებულია იგივეური ნაწილაკის კოორდინატებზე და, საზოგადოდ, სპინზედაც. რაც შეეხება $U(x_k, x_j)$ -ს იგი გამოხატავს k და j -ური ნაწილაკების ურთიერთქმედების ენერგიას, რომელიც აგრეთვე არ არის დამოკიდებული არჩეულ იგივეურ ნაწილაკთა წყვილზე და დამოკიდებულია მხოლოდ ნაწილაკთა მდებარეობაზე და, ზოგად შემთხვევაში, შესაძლოა სპინებზეც.

აღსანიშნავია, რომ იგივეურ ნაწილაკთა ჰამილტონიანს ახასიათებს ერთი მეტად მნიშვნელოვანი ინვარიანტობის თვისება. კერძოდ, (102,1) ოპერატორი ინვარიანტულია ნებისმიერი ორი ნაწილაკის გადასმის მიმართ; აპასთან, ნაწილაკთა გადასმა ეკვივალენტურია x -კოორდინატების გადასმისა, ე. ი. სივრცული და სპინური კოორდინატების ერთდროული გადასმისა. ჰამილტონის ოპერატორის ამ ინვარიანტობასთან დაკავშირებულია ტალღურ ფუნქციითა სიმეტრიის მნიშვნელოვანი საკითხი, რომელსაც შემდეგ პარაგრაფში განვიხილავთ.

რადგან ელექტრონები იგივეური ნაწილაკებია, ამიტომ რთული ატომები უნდა აღვწეროთ შრედინგერის განტოლებით, რომელსაც სტაციონარულ მდგომარეობაში ექნება სახე

$$\hat{H}(x_1, x_2, \dots, x_N) \psi(x_1, x_2, \dots, x_N) = E \psi(x_1, x_2, \dots, x_N), \quad (102,2)$$

სადაც ჰამილტონის ოპერატორს აქვს (102,1) გამოხატულება. მაგრამ როცა სისტემის ნაწილაკთა რიცხვი ორზე მეტია (102,2) განტოლების ამოხსნა შეუძლებელია არა თუ ზუსტად, არამედ სწრაფადმთვლელი ელექტრონული მანქანებითაც კი, ამიტომ რთული ატომების შესასწავლად გამოიყენება მიახლოებითი მეთოდები. ერთ-ერთ ასეთ მეთოდს წარმოადგენს თვითშეთანხმებული ველის მეთოდი. თვითშეთანხმებული ველის მეთოდში იგულისხმება, რომ (102,1) ჰამილტონიანში ურთიერთქმედების წევრი

$$\sum_{k \neq j}^N \sum_{j=1}^N U(x_k, x_j) \quad (102,3)$$

დაიყვანება $\sum_{k=1}^N f(x_k)$ ტიპის გამოსახულებაზე. ფიზიკურად ეს იმას ნიშნავს, რომ

აღებულ ნაწილაკზე ყველა დანარჩენის ურთიერთქმედება დაიყვანება, რაღაც, გარკვეულად შერჩეულ, გარეშე ველის მოქმედებაზე. ამ გარეშე ველს თვითშეთანხმებული ველი ეწოდება. თვითშეთანხმებული ველის მიახლოებაში იგიურ ნაწილაკთა ჰამილტონიანს ექნება შემდეგი სახე:

$$\hat{H}(x_1, x_2, \dots, x_N; t) = \sum_{k=1}^N \left\{ -\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta_k + V(x_k, t) \right\}, \quad (102,4)$$

სადაც $V(x_k, t)$ პოტენციალური ენერგია წარმოადგენს ჯამურ ურთიერთქმედებას, რომელიც შეიცავს გარეშე და თვითშეთანხმებული ველის პოტენციალებს.

ამგვარად, თვითშეთანხმებული ველის მეოთხეში ყოველი ელექტრონი მოძრაობს დანარჩენი ელექტრონების გასაშუალოებულ ველში, რომელიც ეკვივალენტურია გარკვეულად შერჩეული გარეშე ველისა.

როგორც (102,4) გამოხატულებიდან ჩანს, თვითშეთანხმებული ველის ჰამილტონიანი დაიყვანება არაურთიერთქმედ იგივე ნაწილაკთა სისტემის ჰამილტონიანზე. შესაბამისი სტაციონარული მდგომარეობის განტოლება კი, როგორც 100-ე პარაგრაფში დავინახეთ, ადვილად ამოიხსნება. კერძოდ, ამოიხსნის ექნება (100,22) სახე. ასე რომ,

$$\psi(x_1, x_2, \dots, x_N) = \prod_{k=1}^N \psi_k(x_k) \quad (102,5)$$

ენერგია კი ტოლი იქნება

$$E = \sum_{k=1}^N E_k, \quad (102,6)$$

სადაც $\psi_k(x_k)$ აკმაყოფილებს განტოლებას

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta_k + V(x_k) \right\} \psi_k(x_k) = E_k \psi_k(x_k), \quad (102,7)$$

ე. ი. ψ_k წარმოადგენს $V(x_k)$ ველში მოძრაი k -ური ნაწილაკის E_k ენერგიის შესაბამის ტალღურ ფუნქციას.

მართალია (102,5) წარმოადგენს ნაწილაკთა სისტემის ტალღურ ფუნქციას თვითშეთანხმებული ველის მიახლოებაში, მაგრამ იგი ჯერ კიდევ არ შეესაბამება რეალურ ამოცანას, რამდენადაც მასში გათვალისწინებული არ არის ის მნიშვნელოვანი ფაქტი, რომ იგივე ნაწილაკთა ჰამილტონიანი ინვარიანტულია ნაწილაკთა გადასმის მიმართ. მათემატიკის ენაზე ეს იმას ნიშნავს, რომ (102,5) ტალღური ფუნქცია, რომელიც ჰამილტონის ოპერატორის საკუთარი ფუნქციაა, საკუთარი ფუნქცია უნდა იყოს ნაწილაკთა გადასმის ოპერატორისაც.

§ 103. სიმეტრიული და ანთისიმეტრიული ტალღური ფუნქციები

განვიხილოთ შრედინგერის განტოლება იგივე ნაწილაკთა სისტემისათვის

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H} \psi, \quad (103,1)$$

სადაც სისტემის $\hat{H}$ ჰამილტონიანი გამოისახება (102,1) ფორმულით, ხოლო $\psi(x_1, x_2, \dots, x_N, t)$ სისტემის მდგომარეობის აღმწერი ტალღური ფუნქციაა. უკვე ვიცით, რომ იგივე რ ნაწილაკთა ჰამილტონიანი არ იცვლება ნაწილაკთა ნებისმიერი გადასმის მიმართ. ამიტომ, თუ შემოვიღებთ ორი ნებისმიერი i და k ნაწილაკის გადასმის $\hat{p}_{ik}$ ოპერატორს, გვექნება

$$\hat{p}_{ik} \hat{H}(x_1, x_2, \dots, x_i, \dots, x_k, \dots, x_N, t) = \hat{H}(x_1, x_2, \dots, x_i, \dots, x_k, \dots, x_N, t) \hat{p}_{ik} \quad (103,2)$$

ვიმოქმედოთ (103,1) განტოლებაზე მარცხნიდან $\hat{p}_{ik}$ ოპერატორით და გავითვალისწინოთ, რომ $\hat{p}_{ik} \hat{H} = \hat{H} \hat{p}_{ik}$; გვექნება

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} (\hat{p}_{ik} \psi) = \hat{H} (\hat{p}_{ik} \psi), \quad (103,3)$$

ჩვენ ვხედავთ, რომ შრედინგერის განტოლებას აკმაყოფილებს არა მხოლოდ $\psi(x_1, x_2, \dots, x_i, \dots, x_N, t)$ ფუნქცია, არამედ ისიც, რომელიც მისგან მიიღება იგივე რ ნაწილაკთა ნებისმიერი გადანაცვლებით, ე. ი. $\hat{p}_{ik} \psi$ ფუნქციაც. რადგან შრედინგერის განტოლების ამოხსნა ერთადერთია, ამიტომ $\hat{p}_{ik} \psi$ და ψ ერთმანეთისაგან შეიძლება მხოლოდ მუდმივი λ მამრავლით განსხვავდებოდნენ, ე. ი.

$$\hat{p}_{ik} \psi(x_1, \dots, x_i, \dots, x_k, \dots, x_N, t) = \lambda \psi(x_1, \dots, x_i, \dots, x_k, \dots, x_N, t). \quad (103,4)$$

ეს უკანასკნელი კი წარმოადგენს $\hat{p}_{ik}$ ოპერატორის საკუთარი ფუნქციების განტოლებას. ამასთან, ψ ფუნქცია საერთო საკუთარი ფუნქციაა $\hat{H}$ და $\hat{p}_{ik}$ ოპერატორებისა. (103,4)-ზე მარცხნიდან ვიმოქმედოთ $\hat{p}_{ik}$ ოპერატორით

$$\hat{p}_{ik}^2 \psi(x_1, \dots, x_i, \dots, x_k, \dots, x_N, t) = \lambda \hat{p}_{ik} \psi(x_1, \dots, x_i, \dots, x_k, \dots, x_N, t). \quad (103,5)$$

თუ გამოვიყენებთ (103,4)-ს და გავითვალისწინებთ, რომ $\hat{p}_{ik}$ ოპერატორის ორჯერ ზედიზედ მოქმედებით მივიღებთ საწყის ფუნქციას, გვექნება

$$\begin{aligned} \hat{p}_{ik}^2 \psi(x_1, \dots, x_i, \dots, x_k, \dots, x_N, t) &= \psi(x_1, \dots, x_i, \dots, x_k, \dots, x_N, t) = \\ &= \lambda^2 \psi(x_1, x_2, \dots, x_i, \dots, x_k, \dots, x_N, t), \end{aligned} \quad (103,6)$$

საიდანაც

$$\lambda^2 = 1. \quad (103,7)$$

ამრიგად, მივიღეთ, რომ $\hat{p}_{ik}$ ოპერატორის საკუთარი მნიშვნელობა $\lambda = \pm 1$. იმ შემთხვევაში, როცა $\lambda = 1$, ამბობენ რომ ψ ფუნქცია სიმეტრიულია, ხოლო იმ შემთხვევაში, როცა $\lambda = -1$, ψ ფუნქცია ანტისიმეტრიულია. თანახმად შემოთქმულისა, სიმეტრიული ფუნქციის შემთხვევაში გვაქვს

$$\hat{p}_{ik} \psi(x_1, \dots, x_i, \dots, x_k, \dots, x_N, t) = + \psi(x_1, \dots, x_i, \dots, x_k, \dots, x_N, t), \quad (103,8)$$

ანტისიმეტრიული ფუნქციის შემთხვევაში კი —

$$\hat{p}_{ik} \psi(x_1, \dots, x_i, \dots, x_k, \dots, x_N, t) = - \psi(x_1, \dots, x_i, \dots, x_k, \dots, x_N, t). \quad (103,9)$$

რადგან $\hat{p}_{ik}$ ოპერატორი დროზე ცხადად არაა დამოკიდებული, ამიტომ

$$\frac{d\hat{p}_{ik}}{dt} = [\hat{H}, \hat{p}_{ik}]. \quad (103,10)$$

თანახმად (103,2) ფორმულისა, $[H, \hat{p}_i] = 0$ და, მაშასადამე, λ წარმოადგენს მოძრაობის ინტეგრალს (λ საკუთარი მნიშვნელობა დროში უცვლელია), მაგრამ λ განსაზღვრავს ფუნქციის სიმეტრიულობას და ამიტომ ვასკენით:

იგივეურ ნაწილაკთა სისტემის მდგომარეობის აღმწერი ტალღური ფუნქცია ნაწილაკების გადასმის მიმართ შეიძლება იყოს სიმეტრიული ან ანტისიმეტრიული. ამასთან სიმეტრიულობის ხასიათი დროის მიხედვით არ იცვლება. თუ ფუნქცია სიმეტრიულია (ანტისიმეტრიულია) $t=0$ მომენტისათვის, იგი სიმეტრიული (ანტისიმეტრიული) იქნება დროის შემდგომ მომენტებშიც.

აღვილად შეიძლება დავამტკიცოთ, რომ, თუ ფუნქცია სიმეტრიულია (ანტისიმეტრიულია) ორი ნაწილაკის გადასმის მიმართ, იგი სიმეტრიულია (ანტისიმეტრიულია) ყველა სხვა ნაწილაკის გადასმის მიმართაც. მართლაც, ავიღოთ სამი ნაწილაკისაგან შედგენილი სისტემა $\psi(x_1, x_2, x_3)$ ფუნქციით და ვთქვათ, რომ ფუნქცია ანტისიმეტრიულია x_1 და x_2 -ის გადასმის მიმართ და სიმეტრიულია სხვა წყვილების მიმართ. მაშინ ადვილად დავინახავთ, რომ

$$\psi(x_1, x_2, x_3) = -\psi(x_2, x_1, x_3),$$

საიდანაც გამომდინარეობს, რომ $\psi(x_1, x_2, x_3) = 0$.

§ 104. ფერმისა და ბოზეს ნაწილაკები

როგორც დავინახეთ, იგივეურ ნაწილაკთა სისტემის მდგომარეობის აღმწერი ტალღურა ფუნქცია ან სიმეტრიულია, ან ანტისიმეტრიული. საკითხი, თუ ნაწილაკთა აღებულ სისტემას რომელი სიმეტრიის მქონე ფუნქცია შეესაბამება, განისაზღვრება ცდის საშუალებით.

მართლაც, მრავალრიცხოვანმა ცდებმა გვიჩვენა, რომ ნაწილაკები, რომელთა სპინური კვანტური რიცხვი განისაზღვრება ფორმულით

$$s = n, \quad (104,1)$$

სადაც $n = 0, 1, 2, \dots$ აიწერება სიმეტრიული ფუნქციით. ასეთ ნაწილაკებს ბოზეს ნაწილაკებს ან ბოზონებს უწოდებენ. ხოლო ის ნაწილაკები, რომელთა სპინური კვანტური რიცხვი

$$s = \frac{2n+1}{2}, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (104,2)$$

აიწერება ანტისიმეტრიული ფუნქციით. ასეთ ნაწილაკებს ფერმის ნაწილაკებს ან ფერმიონებს უწოდებენ. ნაწილაკთა სისტემა კი აიწერება ე. წ. ფერმი-დირაკის სტატისტიკით.

ბოზეს ნაწილაკებს წარმოადგენს: α ნაწილაკები, γ კვანტები, π მეზონები, წყალბადის ატომები. ელექტრონები, ნეიტრონები, პოზიტრონები, პროტონები კი ფერმის ნაწილაკებს წარმოადგენენ.

დავუშვათ, გვაქვს ორი იგივეური ატომის გული. როგორც ვიცით, გული შედგება ფერმიონებისაგან — ნეიტრონებისა და პროტონებისაგან. როგორი ტალღური ფუნქციით აიწერება ეს გულები? რათა ეს გულები გადაესვათ, საჭიროა ამ გულების შესაბამის პროტონებსა და ნეიტრონებს ადგილები შევუცვალოთ (გადავსვათ). ნეიტრონთა ან პროტონთა თითოეული წყვილის გადასმისას, რადგან ეს ნაწილაკები ფერმიონებია, ტალღურ ფუნქციას მამრავლად გაუჩნდება მინუს ერთი. თუ ნეიტრონთა რიცხვი N_n -ია, პროტონთა კი — N_p , მაშინ ყველა ნეიტრონის მეორე გულის ნეიტრონებით შეცვლისას ტალღურ ფუნქციას გაუჩნდება მამრავლი

$(-1)^{N_n}$, ყველა პროტონების ადგილების შეცვლისას კი $(-1)^{N_p}$. ასე რომ, ატომგულების ადგილების შეცვლისას (გადასმისას) ორი გულისაგან შედგენილი სისტემის ტალღურ ფუნქციას გაუჩნდება მამრავლი $(-1)^{N_p + N_n}$. მაგრამ $N_p + N_n$ არის ატომგულის შემადგენელი ყველა ფერმიონის რიცხვი; მას უწოდებენ მასურ რიცხვს და აღინიშნება A -თი. ამრიგად, ატომგულის ტალღური ფუნქციის სიმეტრიულობას განსაზღვრავს მამრავლი

$$(-1)^A, \quad (104,3)$$

საიდანაც გამომდინარეობს, რომ ატომგული აიწერება სიმეტრიული ფუნქციით, თუ მისი შემადგენელი ფერმიონების რიცხვი ლუწია, და ანტისიმეტრიულით, თუ მისი შემადგენელი ფერმიონების რიცხვი კენტია. აქედან ის დასკვნაც უნდა გავაკეთოთ, რომ ატომგულის შემადგენელი ნეიტრონებისა და პროტონების რიცხვის ლუწობისას, მისი სპინი განისაზღვრება (104,1) ფორმულით, ხოლო თუ ნაწილაკთა რიცხვი კენტია, ატომგულის სპინი განისაზღვრება (104,2) ფორმულით. ასე მაგალითად: H^3 , Li^7 , Be^9 , B^{11} ფერმიონებს წარმოადგენს, He^4 , Li^6 , B^{10} , C^{12} კი — ბოზონებს.

§ 105. პაულის პრინციპი

ფერმის ტიპის იგივეურ ნაწილაკთა სისტემისათვის ადგილი აქვს ერთ მნიშვნელოვან პრინციპს, რომელიც პაულის პრინციპის სახელწოდებითაა ცნობილი. ეს პრინციპი პაულის მიერ ემპირიულად იქნა დადგენილი. კვანტურ მექანიკაში კი, იგი უშუალო შედეგია ფერმიონების სისტემის ანტისიმეტრიული ტალღური ფუნქციით აღწერისა. ეს პრინციპი ცდის მონაცემთა განზოგადებას წარმოადგენს. ის გარემოება, რომ ფერმიონების მდგომარეობის აღმწერი ტალღური ფუნქცია ანტისიმეტრიული უნდა იყოს, აღარ შეიძლება ეჭვს იწვევდეს.

განვმარტოთ პაულის პრინციპი ორი ფერმიონისაგან შედგენილი სისტემისათვის. მიღებული შედეგის განზომილება მრავალი ფერმიონისაგან შედგენილი სისტემისათვის არავითარ სიმწელებს არ წარმოადგენს.

დავუშვათ, სისტემის მდგომარეობის აღმწერი ფუნქცია არის $\psi(x_1, x_2, t)$, სადაც x_1 და x_2 პირველი და მეორე ფერმიონის ყველა კოორდინატის (სპინურის ჩათვლით) ერთობლიობას გამოხატავს. $\psi_{n_1}(x_1)$ იყოს პირველი ფერმიონის ინდივიდუალური მდგომარეობის ფუნქცია n_1 ყველა იმ სიდიდის ერთობლიობა, რომლებიც ფერმიონის მდგომარეობას ცალსახად განსაზღვრავენ (ატომებში ჩვეულებრივად n_1 წარმოადგენს n , l , m_l , m_s კვანტური რიცხვების ერთობლიობას). $\psi_{n_2}(x_2)$ იყოს იგივე ტიპის ფუნქცია მეორე ფერმიონისათვის. განხილული სისტემის $\psi(x_1, x_2, t)$ ფუნქცია გავშალოთ $\psi_{n_1}(x_1)$, $\psi_{n_2}(x_2)$ ფუნქციების მწკრივად

$$\psi(x_1, x_2, t) = \sum_{n_1} \sum_{n_2} C_{n_1, n_2}(t) \psi_{n_1}(x_1) \psi_{n_2}(x_2); \quad (105,1)$$

როგორც ვიცით

$$w_{n_1, n_2}(t) = |C_{n_1, n_2}(t)|^2 \quad (105,2)$$

სილიდგე გამოხატავს ალბათობას იმისა, რომ t მომენტში პირველი ფერმიონი არის n_1 მდგომარეობაში, ხოლო მეორე — n_2 -ში.

გამოვიყენოთ $\psi(x_1, x_2, t)$ ფუნქციის ანტისიმეტრიულობა ნაწილაკთა გადასმის მიმართ:

$$\sum_{n_1} \sum_{n_2} C_{n_1 n_2}(t) \psi_{n_1}(x_1) \psi_{n_2}(x_2) = - \sum_{n_1} \sum_{n_2} C_{n_1 n_2}(t) \psi_{n_1}(x_2) \psi_{n_2}(x_1); \quad (105,3)$$

n_1 და n_2 ერთი და იგივე მნიშვნელობებს იღებს, ამიტომ ჯამში n_1 შეიძლება შევცვალოთ n_2 -ით და პარიჩით; თუ ასეთ შეცვლას მოვახდენთ, ტოლობის მარჯვენა მხარეში გვექნება

$$\sum_{n_1} \sum_{n_2} C_{n_1 n_2}(t) \psi_{n_1}(x_1) \psi_{n_2}(x_2) = - \sum_{n_1} \sum_{n_2} C_{n_2 n_1}(t) \psi_{n_2}(x_2) \psi_{n_1}(x_1). \quad (105,4)$$

რადგან $\psi_{n_1}(x_1)$ და $\psi_{n_2}(x_2)$ ფუნქციები ორთონორმირებულია, ამიტომ ეს ტოლობა მხოლოდ მაშინ შეიძლება გვექონდეს, როდესაც

$$C_{n_1 n_2}(t) = - C_{n_2 n_1}(t). \quad (105,5)$$

იმ შემთხვევაში, როცა $n_1 = n_2 = n$, გვექნება $C_{n,n}(t) = - C_{n,n}(t)$, ე. ი. $C_{n,n}(t) = 0$. ამიტომ (105,2)-ით განსაზღვრული ალბათობისათვის მივიღებთ

$$w_{n,n}(t) = 0. \quad (105,6)$$

ამრიგად, ალბათობა იმისა, რომ ორი ფერმიონი იყოს ერთსა და იმავე კვანტურ მდგომარეობაში, ნულის ტოლია. ეს დასკვნა პაულის პრინციპის სახელწოდებით არის ცნობილი და იგი მეტად მნიშვნელოვან როლს ასრულებს ფერმიონთა სისტემის შესწავლაში. რადგან ატომის შემადგენელი ნაწილაკები ელექტრონები, პროტონები და ნეიტრონები ფერმიონებია, ამიტომ პაულის პრინციპს პირველხარისხოვანი მნიშვნელობა ენიჭება ატომის ელექტრონთა გარსებისა და ატომგულების შესწავლის საკითხში. ატომის თეორიაში პაულის პრინციპს ხშირად ასეც აყალიბებენ:

არ შეიძლება არსებობდეს ისეთი ორი ელექტრონი (პროტონი ან ნეიტრონი), რომელთაც ექნებოდა ერთი და იგივე ოთხი კვანტური რიცხვი: n , l , m_l და m_s . რადგან $m_s = \pm \frac{1}{2}$, ამიტომ იმ მდგომარეობაში, რომელიც ხასიათდება n , l ,

m_l კვანტური რიცხვებით, შეიძლება მოხდეს მხოლოდ ისეთი ორი ფერმიონი (ელექტრონი, პროტონი ნეიტრონი და სხვა), რომელთაც აქვთ საწინააღმდეგოდ მიმართული სპინები. პაულის პრინციპის ასეთი ფორმულირება გამოგვიადგება რთული ატომების შესწავლის დროს.

§ 106. სიმეტრიული და ანტისიმეტრიული ფუნქციების შედგენა

როგორც დავინახეთ, ფერმის ნაწილაკთა სისტემის შემთხვევაში ტალღური ფუნქციის ანტისიმეტრიულობამ მიგვიყვანა პაულის პრინციპამდე, რომელიც მრავალჯერ შემოწმდა ცდით და რომელშიაც დღეისათვის ეჭვის შეტანა შეუძლებელია. ჩატარებულია აგრეთვე მრავალი ექსპერიმენტი, რომლებიც ეჭვის გარეშე ამტკიცებენ, რომ ბოზეს ნაწილაკთა სისტემის ტალღური ფუნქცია სიმეტრიულია. ყველა ეს გარემოება მიგვითითებს იმაზე, რომ იგივე ნაწილაკთა სისტემის დამახასიათებელი ფუნქციები ნაწილაკებს გადასმის მიმართ შეიძლება იყოს მხოლოდ სიმეტრიული ან ანტისიმეტრიული. ამ პარაგრაფში ჩვენი მიზანია ამ ფუნქციების მოძებნა.

მეტი სიტყვადის მიზნით განვიხილოთ თვითშეთანხმებული ველის მეთოდი ან ჩაეთვალოთ, რომ სისტემის ნაწილაკები იმყოფებიან გარეშე ველში, მაგრამ ერთმანეთთან არ ურთიერთქმედებენ; ასეთი სისტემის ტალღური ფუნქციები ხშირად

განიხილება როგორც ნულოვანი მიახლოების ტალღური ფუნქციები. ჩვენ ვაჩვენებთ, რომ აღნიშნულ მიახლოებაში შრედიנגერის განტოლების ამონახსნი წარმოადგენს ცალკეული ნაწილაკების პოპრობის შესაბამისი ტალღური ფუნქციების ნამრავლს, ენერგია კი — ცალკეული ნაწილაკის ენერგიების ჯამს, ე. ი.

$$\Psi(x_1, x_2, \dots, x_N) = \psi_{n_1}(x_1) \psi_{n_2}(x_2) \dots \psi_{n_N}(x_N), \quad (106,1)$$

$$E = E_1 + E_2 + \dots + E_N, \quad (106,2)$$

სადაც ψ_{n_i} არის მდგომარეობის დამახასიათებელი ყველა კვანტური რიცხვების ერთობლიობა. ატომში, მაგალითად, n წარმოადგენს l , m_l და m_s კვანტური რიცხვების ერთობლიობას. x_i -ის ქვეშ, ჩვენი შეთანხმების თანახმად, ვიგულისხმებთ i -ური ნაწილაკის ყველა კოორდინატს სპინური კოორდინატის ჩათვლით.

მართალია (106,1) ფუნქცია წარმოადგენს შრედიנגერის განტოლების ამონახსნს, მაგრამ მასში არ არის გათვალისწინებული ის გარემოება, რომ იგივე ნაწილაკთა სისტემის ტალღური ფუნქცია უსათუოდ უნდა იყოს სიმეტრიული ან ანტისიმეტრიული. სხვანაირად რომ ვთქვათ, ეს ფუნქცია საკუთარი ფუნქცია უნდა იყოს ნაწილაკთა გადამხმარისად, ცხადია, რომ (106,1) ფუნქციას აღნიშნული სიმეტრია არ გააჩნია, მაგრამ ჩვენ შეგვიძლია მოვახდინოთ მისი სიმეტრიზაცია. ამის საშუალებას გვაძლევს ის გარემოება, რომ შრედიנגერის განტოლება წრფივია და მას აკმაყოფილებს არა მხოლოდ (106,1), არამედ ამ ფუნქციის ნებისმიერი წრფივი კომბინაცია. ამასთან, ამ წრფივი კომბინაციის წევრებად შეგვიძლია ავიღოთ ნებისმიერად გადასაცვლებელი ნაწილაკების შესაბამისი ფუნქციები.

ჯერ განვიხილოთ იგივე ნაწილაკთა ფერმის სისტემა. ასეთი სისტემის ტალღური ფუნქცია უნდა იყოს ანტისიმეტრიული ნებისმიერი ორი ნაწილაკის გადამხმარის მიმართ. პირველად შევისწავლოთ ორი ნაწილაკის სისტემა. თვითშეთანხმებული ველის მიახლოებაში სისტემის ტალღური ფუნქცია ტოლი იქნება

$$\psi_1(x_1, x_2) = \psi_{n_1}(x_1) \psi_{n_2}(x_2). \quad (106,3)$$

შრედიנגერის განტოლებას იგივე ენერგიით აკმაყოფილებს აგრეთვე ტალღური ფუნქცია, რომელიც (106,3)-საგან განსხვავდება ნაწილაკთა გადამხმარის, ე. ი.

$$\psi_2(x_1, x_2) = \psi_{n_1}(x_2) \psi_{n_2}(x_1). \quad (106,3')$$

ცხადია, რომ შრედიנגერის განტოლებას დააკმაყოფილებს შემდეგი ფუნქცია

$$\Psi(x_1, x_2) = A[\psi_{n_1}(x_1) \psi_{n_2}(x_2) - \psi_{n_1}(x_2) \psi_{n_2}(x_1)], \quad (106,4)$$

რომელიც ანტისიმეტრიულია ნაწილაკთა გადამხმარის მიმართ. A -ნორმირების კოეფიციენტი. მაშასადამე, აღნიშნულ მიახლოებაში ჩვენ ვიპოვეთ ორი ფერმის ნაწილაკის სისტემის ტალღური ფუნქცია.

უფრო დიდი რიცხვის ნაწილაკთა სისტემის ანტისიმეტრიული ტალღური ფუნქციების დასაწერად ხელსაყრელია შემოვიღოთ სრულიად ანტისიმეტრიული ერთეულოვანი აქსიალური ტენზორი. ასეთ N რანგის ტენზორს $\mathbb{D}_{i_1, i_2, \dots, i_N}$ აქვს შემდეგი თვისებები: ნებისმიერი ორი ინდექსის გადამხმარის ნიშანს იცვლის საწინააღმდეგოთი, თუ რომელიმე ორი ინდექსი ტოლია, მაშინ ტენზორი ნულს უდრის, იგი უდრის ერთს, როცა $i_1, i_2, \dots, i_N$ ინდექსების დასაბუთებლად ნორმალური თანმიმდევრობით (ე. ი. 1, 2, 3, ..., N) საჭიროა ტრანსპოზიციათა ლუწი რაოდენობა და უდრის მინუს ერთს, როცა ინდექსების ნორმალური თანმიმდევრობით დასაბუთებლად საჭიროა ტრანსპოზიციათა კენტი რიცხვი. განმარტებიდან ცხადია,

რომ ნულისაგან განსხვავებული იქნება $\mathbb{G}_{i_1 i_2 \dots i_N}$ ტენზორის მხოლოდ $N!$ ელემენტი და თითოეულ ამ ელემენტის მნიშვნელობა ტოლია ან $+1$ -ის ან -1 -ის. ამიტომ

$$\sum_{i_1 i_2 \dots i_N} \mathbb{G}_{i_1 i_2 \dots i_N}^2 = N! \quad (106,5)$$

ჩვენ დაგვიჩვენებთ შემდეგი ორი ფორმულაც, რომელთა გამოყენება საკმარისად ადვილია:¹

$$\sum_{i_2, \dots, i_N} \mathbb{G}_{i_1 i_2 \dots i_N} \mathbb{G}_{i_1' i_2 \dots i_N} = (N-1)! \delta_{i_1 i_1'}, \quad (106,5')$$

$$\sum_{i_3, \dots, i_N} \mathbb{G}_{i_1 i_2 i_3 \dots i_N} \mathbb{G}_{i_1' i_2' i_3 \dots i_N} = (N-2)! [\delta_{i_1 i_1'} \delta_{i_2 i_2'} - \delta_{i_1 i_2'} \delta_{i_2 i_1'}] \quad (106,5'')$$

(106,3) და (106,3')-დან აშკარაა, რომ კოორდინატების გადასმა ეკვივალენტურია კვანტური რიცხვების გადასმისა, ამიტომ თუ განვიხილავთ მეორე რანგის $\mathbb{G}_{i_1 i_2}$ ერთეულოვან ტენზორს, მაშინ ორი ფერმიონის (106,4) ანტისიმეტრიული ფუნქცია შეგვიძლია ჩაეწეროს შემდეგი სახით:

$$\Psi(x_1, x_2) = A \sum_{i_1, i_2=1}^2 \mathbb{G}_{i_1 i_2} \psi_{n_{i_1}}(x_1) \psi_{n_{i_2}}(x_2). \quad (106,6)$$

რადგან $\mathbb{G}_{12}=1$, $\mathbb{G}_{21}=-1$, ხოლო $\mathbb{G}_{11}=\mathbb{G}_{22}=0$, ამიტომ (106,6) ფუნქცია მართლაც ემთხვევა (106,4)-ს.

მოვახდინოთ (106,6) ფუნქციის ნორმირება, მოვითხოვოთ, რომ

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(x_1, x_2) \Psi(x_1, x_2) d\tau_1 d\tau_2 = 1 \quad (106,7)$$

ამასთან, რადგან x -ში შედის დისკრეტული სპინური ცვლადიც, ჩვენ ვიგულისხმებთ, რომ ინტეგრაციაში ჩართულია აჯამვაც სპინური ცვლადების მიხედვით. შევიტანოთ (106,6) ფუნქცია ნორმირების (106,7) ინტეგრალში, გვქვნება

$$A^2 \sum_{i_1 i_2} \sum_{i_1' i_2'} \mathbb{G}_{i_1 i_2} \mathbb{G}_{i_1' i_2'} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_{n_{i_1}}^*(x_1) \psi_{n_{i_1'}}(x_1) d\tau_1 \cdot \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_{n_{i_2}}^*(x_2) \psi_{n_{i_2'}}(x_2) d\tau_2 = 1 \quad (106,8)$$

ვიგულისხმებთ, რომ ცალკეული ნაწილაკის ტალღური ფუნქციები ორთო-ნორმირებულია, მაშინ (106,8)-ში შემავალი ინტეგრალები შესაბამისად ტოლი იქნება $\delta_{i_1 i_1'}$ და $\delta_{i_2 i_2'}$ -ის; ასე რომ,

$$A^2 \sum_{i_1 i_2} \sum_{i_1' i_2'} \mathbb{G}_{i_1 i_2} \mathbb{G}_{i_1' i_2'} \delta_{i_1 i_1'} \delta_{i_2 i_2'} = 1 \quad (106,9)$$

¹ იხილეთ სავარჯიშო ამ თავის ბოლოს.

ფილტრაციის თვისების გამოყენებით გვექნება

$$A^2 \sum_{i_1 i_2} \mathbb{E}_{i_1 i_2} = 1 \quad (106,10)$$

რაც (106,5) ფორმულის თანახმად მოგვცემს $A = 1/\sqrt{2!}$. მაშასადამე, ორი ფერმის ნაწილაკის ნორმირებულ ანტისიმეტრიულ ტალღურ ფუნქციას ექნება სახე

$$\Psi(x_1, x_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_{n_1}(x_1) \psi_{n_2}(x_2) - \psi_{n_1}(x_2) \psi_{n_2}(x_1)]. \quad (106,11)$$

შეენიშნოთ, რომ ეს ფუნქცია შეგვიძლია გამოვხატოთ მეორე რანგის დეტერმინანტის სახითაც; კერძოდ,

$$\Psi(x_1, x_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{vmatrix} \psi_{n_1}(x_1) & \psi_{n_1}(x_2) \\ \psi_{n_2}(x_1) & \psi_{n_2}(x_2) \end{vmatrix}; \quad (106,12)$$

ეს გასაგებია, რადგან ტალღური ფუნქციის ჩაწერა

$$\Psi(x_1, x_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_{i_1 i_2} \mathbb{E}_{i_1 i_2} \psi_{n_{i_1}}(x_1) \psi_{n_{i_2}}(x_2) \quad (106,13)$$

სახით წარმოადგენს მეორე რანგის დეტერმინანტის განმარტებას $\mathbb{E}_{i_1 i_2}$ ტენზორის საშუალებით.

ახლა განვიხილოთ სამი ფერმის ნაწილაკის სისტემა. ამ შემთხვევაში საჭიროა მოვახდინოთ სიმეტრიზაცია $\psi_{n_1}(x_1) \psi_{n_2}(x_2) \psi_{n_3}(x_3)$ ნამრავლისა. თუ გამოვიყენებთ მესამე რანგის $\mathbb{E}_{i_1 i_2 i_3}$ ტენზორს, მაშინ საძიებელი ფუნქციისათვის გვექნება გამოსახულება

$$\Psi(x_1, x_2, x_3) = A \sum_{i_1 i_2 i_3} \mathbb{E}_{i_1 i_2 i_3} \psi_{n_{i_1}}(x_1) \psi_{n_{i_2}}(x_2) \psi_{n_{i_3}}(x_3). \quad (106,14)$$

მოვახდინოთ ამ ფუნქციის ნორმირება. რადგან მესამე რანგის ტენზორის შემთხვევაში (106,5) ჯამი $3!$ -ის ტოლია, ამიტომ ნორმირებულ ტალღურ ფუნქციას სამი ფერმიონისათვის ექნება სახე

$$\Psi(x_1, x_2, x_3) = \frac{1}{\sqrt{3!}} \sum_{i_1 i_2 i_3} \mathbb{E}_{i_1 i_2 i_3} \psi_{n_{i_1}}(x_1) \psi_{n_{i_2}}(x_2) \psi_{n_{i_3}}(x_3) \quad (106,15)$$

გაშლილი სახით (106,15) ასე დაიწერება:

$$\begin{aligned} \Psi(x_1, x_2, x_3) = \frac{1}{\sqrt{6}} & [\psi_{n_1}(x_1) \psi_{n_2}(x_2) \psi_{n_3}(x_3) + \psi_{n_1}(x_2) \psi_{n_2}(x_3) \psi_{n_3}(x_1) + \\ & + \psi_{n_1}(x_3) \psi_{n_2}(x_1) \psi_{n_3}(x_2) - \psi_{n_1}(x_1) \psi_{n_2}(x_3) \psi_{n_3}(x_2) - \\ & - \psi_{n_1}(x_2) \psi_{n_2}(x_1) \psi_{n_3}(x_3) - \psi_{n_1}(x_3) \psi_{n_2}(x_2) \psi_{n_3}(x_1)], \end{aligned} \quad (106,16)$$

ცხადია, რომ ეს ფუნქცია ნიშნის იცვლის ნებისმიერი ნაწილაკთა წყვილის გადამსმის დროს. (106,16) ფუნქცია წარმოადგენს მესამე რანგის დეტერმინანტს

$$\Psi(x_1, x_2, x_3) = \frac{1}{\sqrt{3!}} \begin{vmatrix} \psi_{n_1}(x_1) & \psi_{n_1}(x_2) & \psi_{n_1}(x_3) \\ \psi_{n_2}(x_1) & \psi_{n_2}(x_2) & \psi_{n_2}(x_3) \\ \psi_{n_3}(x_1) & \psi_{n_3}(x_2) & \psi_{n_3}(x_3) \end{vmatrix}. \quad (106,17)$$

ახლა განვიხილოთ N ფერმის ნაწილაკის სისტემა. მაშინ საჭიროა სიმეტრიზაცია მოვახდინოთ (106,1) ტალღური ფუნქციისა. ამას ადვილად მოვახერხებთ N -ური რანგის $\mathbb{G}_{i_1 i_2 \dots i_N}$ ტენზორის დახმარებით. თუ გავიხსენებთ (106,5) ფორმულას ნორმირებული ანტისიმეტრიული ტალღური ფუნქციისათვის შეგვიძლია დავწეროთ

$$\Psi_a(x_1, x_2, \dots, x_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{i_1 i_2 \dots i_N} \mathbb{G}_{i_1 i_2 \dots i_N} \psi_{n_{i_1}}(x_1) \psi_{n_{i_2}}(x_2) \dots \psi_{n_{i_N}}(x_N), \quad (106,18)$$

რომელიც წარმოადგენს შემდეგ დეტერმინანტს

$$\Psi_a(x_1, x_2, \dots, x_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \psi_{n_1}(x_1) & \psi_{n_1}(x_2) & \dots & \psi_{n_1}(x_N) \\ \psi_{n_2}(x_1) & \psi_{n_2}(x_2) & \dots & \psi_{n_2}(x_N) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \psi_{n_N}(x_1) & \psi_{n_N}(x_2) & \dots & \psi_{n_N}(x_N) \end{vmatrix}. \quad (106,19)$$

ამ დეტერმინანტს სლეტერის დეტერმინანტს უწოდებენ. ცხადია, რომ ნებისმიერა ორი ფერმიონის გადასმისას (106,19) ფუნქცია ნიშანს იცვლის. მართლაც, ორი ნაწილაკის გადასმა (106,19) დეტერმინანტში იწვევს ორი სვეტის ადგილების შეცვლას, რაც დეტერმინანტის თვისებით გამოიწვევს მინუს ნიშანზე გამრავლებას. როცა ორი ფერმიონი ვთქვათ, i და k ერთსა და იმავე მდგომარეობაში იმყოფება, მაშინ ერთმანეთის ტოლია n_i და n_k კვანტური რიცხვები (ე. ი. n, l, m_l, m_s რიცხვები), დეტერმინანტში ტოლი აღმოჩნდება i -ური და k -ური სტრიქონები, ასეთი დეტერმინანტი კი ნულის ტოლია. როგორც ვიცით ეს უკანასკნელი გამოხატავს პაულის პრინციპის შინაარსს.

ახლა განვიხილოთ ბოზეს ნაწილაკთა სისტემა. ბოზეს ნაწილაკები არ ემორჩილებიან პაულის პრინციპს, ამიტომ მათი ერთ მდგომარეობაში მოხვედრა, აკრძალული არ არის. ვთქვათ, გვაქვს ორი ბოზეს ნაწილაკი. მაშინ დამოუკიდებელ ნაწილაკთა მიახლოებაში სისტემის ტალღურ ფუნქციას კვლავ ნამრავლის სახე აქვს, ამიტომ შეგვიძლია დავწეროთ

$$\Psi(x_1, x_2) = \psi_n(x_1) \psi_n(x_2) \quad (106,20)$$

სადაც იგულისხმება, რომ ორივე ნაწილაკი ერთსა და იმავე კვანტურ n -მდგომარეობაში იმყოფება. ამასთან ცხადია, რომ (106,20) ფუნქცია სიმეტრიულია ნაწილაკთა გადასმის მიმართ. მაგრამ ორი ბოზეს ნაწილაკი განსხვავებულ n_1 და n_2 მდგომარეობაშიაც შეიძლება იმყოფებოდეს, ამიტომ მათთვის შეგვიძლია დავწეროთ შემდეგი ნორმირებული ფუნქცია:

$$\Psi(x_1, x_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_{n_1}(x_1) \psi_{n_2}(x_2) + \psi_{n_1}(x_2) \psi_{n_2}(x_1)]. \quad (106,21)$$

ეს ფუნქცია სიმეტრიულია x_1 და x_2 -ის, ე. ი. ნაწილაკთა გადასმის მიმართ. ანალოგიურად დავწეროთ ბოზეს ნაწილაკთა სისტემის სიმეტრიულ ტალღურ ფუნქციას იმ შემთხვევაში, როცა თითოეული ბოზონი განსხვავებულ კვანტურ მდგომარეობაში იმყოფება. (106,18) ფუნქციის ანალოგიურად გვექნება

$$\Psi_a(x_1, x_2, \dots, x_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{i_1 i_2 \dots i_N} \mathbb{G}_{i_1 i_2 \dots i_N} \psi_{n_{i_1}}(x_1) \psi_{n_{i_2}}(x_2) \dots \psi_{n_{i_N}}(x_N) \quad (106,22)$$

სადაც $\delta_{i_1 i_2 \dots i_N}$ ტენზორის როლი დაიყვანება მხოლოდ იმაზე რომ ყველა ნაწილს განსხვავებული კოორდინატები ჰქონდეს. იგი ამ შემთხვევაში შეგვიძლია შევცვალოთ გადანაცვლების ოპერატორით

$$\Psi_s(x_1, x_2, \dots, x_N) = \frac{1}{V N!} \sum_p^N \hat{p} \psi_{n_1}(x_1) \psi_{n_2}(x_2) \dots \psi_{n_N}(x_N) \quad (106,23)$$

სადაც აჯამვა აიღება ყველა შესაძლო $N!$ გადანაცვლებით.

თუ ყველა N ნაწილაკი ერთ n მდგომარეობაში იმყოფება, მაშინ გვექნება მხოლოდ ერთი სიმეტრიული ფუნქცია

$$\Psi_s(x_1, x_2, \dots, x_N) = \psi_n(x_1) \psi_n(x_2) \dots \psi_n(x_N). \quad (106,24)$$

შეიძლება განხორციელდეს ისეთი მდგომარეობაც, როცა ერთსა და იმავე მდგომარეობაში რამდენიმე ნაწილაკი იმყოფება. ვთქვათ, მაგალითად, n_1 კვანტურ მდგომარეობაში იმყოფება m_1 ბოზონი; n_2 კვანტურ მდგომარეობაში — m_2 და ა. შ. n_s მდგომარეობაში კი m_s . აშკარაა, ამასთან რომ $m_1 + m_2 + \dots + m_s = N$. ამ შემთხვევაში გვექნება

$$\begin{aligned} \Psi(x_1, x_2, \dots, x_N) &= [\psi_{n_1}(x_1) \psi_{n_1}(x_2) \dots \psi_{n_1}(x_{m_1})] [\psi_{n_2}(x_{m_1+1}) \dots \\ &\quad \psi_{n_2}(x_{m_1+2}) \dots \psi_{n_2}(x_{m_1+m_2})] \dots \\ &\quad [\dots \psi_{n_s}(x_N)]. \end{aligned} \quad (106,25)$$

თითოეული კვანტური მდგომარეობის შიგნით მოხდენილი გადანაცვლება (106,25) ტალღურ ფუნქციას არ ცვლის. ასეთ გადანაცვლებას არაფექტური ვუწოდოთ. ყველა ის გადანაცვლება კი, რომლებიც ახდენენ განსხვავებულ კვანტურ მდგომარეობებში მყოფი ნაწილაკების გადანაცვლებას, (106,25) ფუნქციას ცვლის. ასეთ გადანაცვლებებს კი ეფექტური გადანაცვლებები ვუწოდოთ. აღვილი მისახვედრია, რომ ყველა შესაძლო $N!$ გადანაცვლებიდან

$$g = \frac{N!}{m_1! m_2! \dots m_s!} \quad (106,26)$$

გადანაცვლება იქნება ეფექტური. გასაგებია ამის გამო, რომ განხილულ შემთხვევაში ნაცვლად (106,23) ფუნქციისა გვექნება შემდეგი სიმეტრიული ფუნქცია

$$\begin{aligned} \Psi_s(x_1, x_2, \dots, x_N) &= \\ &= \frac{1}{V g} \sum_p^g \hat{p} \psi_{n_1}(x_1) \dots \psi_{n_1}(x_{m_1}) \psi_{n_2}(x_{m_1+1}) \dots \psi_{n_s}(x_N) \end{aligned} \quad (106,27)$$

როცა თითო კვანტურ მდგომარეობაში იმყოფება თითო ნაწილაკი, მაშინ $m_1! - \dots - m_s! = 1$ და $g = N!$; შედეგად (106,27) ფუნქცია გადავა (106,23)-ში.

ამგვარად, ჩვენ ვხედავთ, რომ ანტისიმეტრიული ფუნქციები მხოლოდ მაშინ მიიღება, როცა ყველა ნაწილაკი განსხვავებულ მდგომარეობაში იმყოფება, სიმეტრიული კი — ორივე შემთხვევაში.

**§ 107. არაურთიერთმოქმედ ნახევარსპინიან ნაწილაკთა
ტალღური ფუნქციები. ტალღური ფუნქციის სიმეტრიულობის
დამოკიდებულება მომენტზე**

ზემოთ x -ში ყველგან ვგულისხმობდით ოთხივე ცვლადს, როგორც ჩვეულებრივ კოორდინატებს, ისე სპინურ კოორდინატებსაც. მძლავრი სპინ-ორბიტალური ურთიერთქმედების გამო, ზოგად შემთხვევაში, ტალღური ფუნქცია არ შეიძლება გაიყოს კოორდინატულ და სპინურ ტალღურ ფუნქციებად, მაგრამ არსებობს შემთხვევები, როცა იგივეური ნაწილაკების სპინებსა და ორბიტალურ მომენტებს შორის ურთიერთქმედება იმდენად მცირეა, რომ იგი შეგვიძლია უგულებელვყოთ. ასეთ შემთხვევაში, მაგალითად, თვითშეთანხმებული ველის მიახლოების ჰამილტონიანში

$$\hat{H} = \sum_{k=1}^N \left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta_k + V(r_k) \right] \quad (107,1)$$

პოტენციალური ენერგია დამოკიდებულია მხოლოდ სივრცულ კოორდინატებზე. ამ დროს სპინური და ჩვეულებრივი კოორდინატები დამოუკიდებლად იქცევა და სისტემის ტალღური ფუნქცია შეგვიძლია წარმოვადგინოთ როგორც ორი ფუნქციის ნამრავლი, რომელთაგან ერთი მხოლოდ კოორდინატების ფუნქციაა, მეორე კი — სპინების, ე. ი.

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N; \mathbf{s}_1, \mathbf{s}_2, \dots, \mathbf{s}_N) = \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) \mathcal{Y}(\mathbf{s}_1, \mathbf{s}_2, \dots, \mathbf{s}_N). \quad (107,2)$$

$\mathcal{Y}(\mathbf{s}_1, \mathbf{s}_2, \dots, \mathbf{s}_N)$ -ს უწოდებენ სპინურ ფუნქციას. სიმეტრიულობის ან ანტისიმეტრიულობის პირობას უნდა აკმაყოფილებდეს ψ ნამრავლი. ამასთან, გადანაცვლების $\hat{p}_{ik}$ ოპერატორი შეგვიძლია განვიხილოთ როგორც ორი ოპერატორის ნამრავლი $\hat{p}_{ik}(\mathbf{r}, \mathbf{s}) = \hat{p}_{ik}(\mathbf{r}) \hat{p}_{ik}(\mathbf{s})$, რომელთაგან ერთი გადასვამს სივრცულ კოორდინატებს მეორე კი — სპინურს, ე. ი.

$$\hat{p}_{ik}(\mathbf{r}, \mathbf{s}) \Psi = (\hat{p}_{ik}(\mathbf{r}) \psi) (\hat{p}_{ik}(\mathbf{s}) \mathcal{Y}). \quad (107,3)$$

ფერმის ნაწილაკების შემთხვევაში Ψ უნდა იყოს ანტისიმეტრიული ფუნქცია, ამიტომ, როცა კოორდინატული ფუნქცია სიმეტრიულია სპინური ფუნქცია უნდა იყოს ანტისიმეტრიული და პირიქით. ბოზეს ნაწილაკების შემთხვევაში, როგორც კოორდინატულ, ისე სპინურ ფუნქციას ერთნაირი სიმეტრიულობა უნდა ახასიათებდეს. მაშასადამე, განხილულ შემთხვევაში ჩვენ დაგვჭირდება ცალკე კოორდინატული და ცალკე სპინური, გარკვეული სიმეტრიის მქონე, ტალღური ფუნქციების შედგენა.

განვიხილოთ ორი ფერმის ნაწილაკის სისტემა. მაშინ

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; \mathbf{s}_1, \mathbf{s}_2) = \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \mathcal{Y}(\mathbf{s}_1, \mathbf{s}_2). \quad (107,4)$$

როცა ნაწილაკებს შორის ურთიერთქმედება არა გვაქვს ან ეს ურთიერთქმედება შეგვიძლია თვითშეთანხმებული ველით შევცვალოთ, წინა პარაგრაფში განხილული მეთოდის გამოყენებით ადვილად დავწერთ კოორდინატულ ტალღურ ფუნქციას

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \{ \psi_{n_1}(\mathbf{r}_1) \psi_{n_2}(\mathbf{r}_2) \pm \psi_{n_1}(\mathbf{r}_2) \psi_{n_2}(\mathbf{r}_1) \}. \quad (107,5)$$

ამასთან, ზედა ნიშანი გვაძლევს სიმეტრიულ ფუნქციას, ქვედა კი — ანტისიმეტრიულს. მაშასადამე, დაგვრჩა მოსაძებნი სპინური ტალღური ფუნქცია. ასეთი

ფუნქცია კლებშ-ჟორდანის კოეფიციენტების გამოყენებით ჩვენ უკვე ვიპოვეთ 50-ში, მაგრამ საჭიროდ მიგვაჩნია მათი ხელახალი მიღება შედარებით უფრო ფორმალური გზითაც.

ნაწილაკის სპინური ფუნქცია გვიჩვენებს, თუ რა მნიშვნელობის მიღება შეუძლია სპინს მოცემული მიმართულებით (ან მიმართულებად ავიღოთ x -ღერძის მიმართულება). როგორც ვიცით, სპინური ფუნქციებისათვის შემოღებულია სპეციალური აღნიშვნები α და β . პირველი გვიჩვენებს სპინის პარალელურობას x -ღერძთან, მეორე კი იმას, რომ სპინს x -ღერძის საწინააღმდეგო მიმართულება აქვს. იმ გარემოებას, თუ რომელი ნაწილაკის სპინის პროექციაზეა ლაპარაკი, აღნიშნავენ ასე: $\alpha(1)$, $\beta(2)$ რაც ნიშნავს, რომ პირველი ნაწილაკის სპინი x -ღერძის პარალელურია, მეორესი კი — ანტიპარალელური. მიუხედავად იმისა, რომ სპინურ ოპერატორებს პირველი და მეორე ნაწილაკისათვის სავსებით ერთი და იგივე სახე აქვს, ისინი მხოლოდ იმ ნაწილაკის სპინურ ფუნქციაზე მოქმედებენ, რომლის შესაბამის სპინურ ოპერატორსაც წარმოადგენენ. ასე მაგალითად, σ_1^z მოქმედებს მხოლოდ პირველი ნაწილაკის სპინურ ფუნქციაზე, σ_2^z კი — მეორე ნაწილაკის სპინურ ფუნქციაზე. სპინური ფუნქციები შეიძლება ასეთი მატრიცების სახით ჩაიწეროს:

$$\chi_{1/2, 1/2} = \alpha, \quad \chi_{1/2, -1/2} = \beta, \quad (107,6)$$

სადაც

$$\alpha = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \beta = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \alpha^+ = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \beta^+ = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (107,7)$$

ამ ფუნქციების ორთო-ნორმირების პირობა მატრიცულად ასე გამოიხატება:

$$\langle \chi_{1/2, m}^+ | \chi_{1/2, m'} \rangle = \delta_{mm'}, \quad (m, m' = \pm 1/2) \quad (107,8)$$

ორი ნახევარსპინიანი ნაწილაკის შემთხვევაში სისტემის სპინი s გამოისახება ფორმულით

$$S = s_1 + s_2, \quad M_s = m_{s_1} + m_{s_2}, \quad S_z = M_s \hbar, \quad (107,9)$$

სადაც s_1 და s_2 სათანადოდ პირველი და მეორე ნაწილაკის სპინებია და

$$\hat{s}_k = \frac{\hbar}{2} \hat{\sigma}_k^i \quad (k=1, 2) \quad (107,10)$$

$\sigma_x^i, \sigma_y^i, \sigma_z^i$ პაულის მატრიცებია. ორი ნახევრის ტოლი სპინის შემთხვევაში შესაძლებელია შემდეგი მდგომარეობები:

$$\begin{array}{cccc} \uparrow\uparrow & \uparrow\downarrow & \downarrow\uparrow & \downarrow\downarrow \\ \alpha(1)\alpha(2) & \beta(1)\beta(2) & \alpha(1)\beta(2) & \beta(1)\alpha(2) \\ M_s=1 & M_s=-1 & M_s=0 & M_s=0 \end{array} \quad (107,11)$$

ამ მდგომარეობებიდან შეგვიძლია შევადგინოთ შემდეგი სპინური ფუნქციები:

$$\left. \begin{aligned} \mathcal{Y}_{1/2, 1/2}^{11}(1, 2) &= \alpha(1)\alpha(2) \\ \mathcal{Y}_{1/2, 1/2}^{1-1}(1, 2) &= \beta(1)\beta(2) \\ \mathcal{Y}_{1/2, 1/2}^{10}(1, 2) &= \frac{1}{\sqrt{2}}\{\alpha(1)\beta(2) + \alpha(2)\beta(1)\} \\ \mathcal{Y}_{1/2, 1/2}^{00}(1, 2) &= \frac{1}{\sqrt{2}}\{\alpha(1)\beta(2) - \alpha(2)\beta(1)\} \end{aligned} \right\} \begin{array}{l} S=1 \\ S=1 \\ S=1 \\ S=0 \end{array} \quad (107,12)$$

სპინური ტალღური ფუნქციისათვის შემოვიღეთ აღნიშვნა $\mathcal{Y}_{s_1 s_2}^{SM_s}(1, 2)$. ეს ფუნქციები ორთო-ნორმირებულია პირობით

$$\langle \mathcal{Y}_{s_1 s_2}^{S' M'_s} | \mathcal{Y}_{s_1 s_2}^{SM_s} \rangle = \delta_{SS'} \delta_{M_s M'_s}. \quad (107,13)$$

ჩვენ ვხედავთ, რომ ნაწილაკთა სპინების გადასმისას (ე. ი. 1-ის შეცვლით 2-ით) პირველი სამი ფუნქცია არ იცვლება, მეოთხე კი ნიშნის იცვლის, ე. ი. ორი ნახევარსპინიანი ნაწილაკისათვის სულ გვექნება ოთხი ფუნქცია, აქედან სამი სიმეტრიული, ერთი — ანტისიმეტრიული.

რადგან $[\hat{S}^2, \hat{S}_z] = 0$, ამიტომ მიღებული სპინური ფუნქციები საერთო საკუთარი ფუნქციები უნდა იყოს როგორც $\hat{S}^2$, ისე $\hat{S}_z$ ოპერატორებისა, ე. ი. უნდა დაცული იყოს განტოლებები;

$$\begin{aligned} \hat{S}_z \mathcal{Y}_{s_1 s_2}^{SM_s}(1, 2) &= \hbar M_s \mathcal{Y}_{s_1 s_2}^{SM_s}(1, 2), \\ \hat{S}^2 \mathcal{Y}_{s_1 s_2}^{SM_s}(1, 2) &= \hbar^2 S(S+1) \mathcal{Y}_{s_1 s_2}^{SM_s}(1, 2). \end{aligned} \quad (107,14)$$

პირველ განტოლებაში $\mathcal{Y}_{s_1 s_2}^{SM_s}$ ფუნქციის შეტანით მივიღებთ, რომ $\mathcal{Y}^{11}$ შეესაბამება $M_s = 1$ პროექციას, $\mathcal{Y}^{10}$ შეესაბამება $M_s = 0$ პროექციას, ხოლო $\mathcal{Y}^{00}$ საერთო სპინის ნულოვან პროექციას $M_s = 0$. (107,14)-ის მეორე განტოლება კი საშუალებას მოგვცემს სრული სპინის მნიშვნელობების განსაზღვრისა. თუ გავიხსენებთ, რომ $\mathbf{S}^2 = \mathbf{s}_1^2 + \mathbf{s}_2^2 + 2\mathbf{s}_1 \mathbf{s}_2$ და გავითვალისწინებთ (107,10) განმარტებას, მაშინ ამ განტოლებას ექნება სახე

$$4S(S+1) \mathcal{Y}^{SM_s} = \{\sigma_1^2 + \sigma_2^2 + 2(\sigma_1^x \sigma_2^x)\} \mathcal{Y}^{SM_s}, \quad (107,15)$$

რადგან $\sigma_1^2 = \sigma_2^2 = 3$. ამიტომ

$$2S(S+1) \mathcal{Y}^{SM_s} = \{3 + (\sigma_1^x \sigma_2^x)\} \mathcal{Y}^{SM_s} \quad (107,16)$$

როცა $\mathcal{Y}^{SM_s}$ -ის ნაცვლად შევიტანთ (107,12) ფუნქციებს, გამოსათვლელი გვექნება $(\sigma_1^x \sigma_2^x) \alpha(1) \beta(2)$ და $(\sigma_1^x \sigma_2^x) \alpha(2) \beta(1)$ კომბინაციები, ამიტომ გამოვთვალოთ ისინი წინასწარ. გვაქვს:

$$\begin{aligned} \sigma_x^1 \alpha &= \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \beta, & \sigma_x^1 \beta &= \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \alpha, \\ \sigma_y^1 \alpha &= \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ i \end{pmatrix} = i\beta, & \sigma_y^1 \beta &= \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = -i\alpha, \\ \sigma_z^1 \alpha &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \alpha, & \sigma_z^1 \beta &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = -\beta. \end{aligned} \quad (107,17)$$

ამ ფორმულების გამოყენებით ადვილად მივიღებთ, რომ

$$\begin{aligned} (\sigma_1^x \sigma_2^x) \alpha(1) \beta(2) &= 2\beta(1) \alpha(2) - \alpha(1) \beta(2), \\ (\sigma_1^x \sigma_2^x) \alpha(2) \beta(1) &= 2\beta(2) \alpha(1) - \alpha(2) \beta(1). \end{aligned} \quad (107,18)$$

და (107,14)-ის მეორე განტოლება მოგვცემს

$$S(S+1) \mathcal{Y}^{SM_s} = 2\mathcal{Y}^{SM_s}; \quad S(S+1) \mathcal{Y}^{SM_s} = 0, \quad (107,19)$$

საიდანაც $S=1$ სიმეტრიული ფუნქციისათვის და $S=0$ — ანტისიმეტრიულიათვის. რადგან $\mathscr{M}^{10}$ ფუნქციისათვის $S=1$ და $M_s=0$. ამიტომ იგი შეესაბამება სპინის x -ღერძის მართობულ ორიენტაციას.

ამგვარად, როცა გვაქვს ორი ნახევარსპინიანი ფერმის ნაწილაკი, მაშინ ამ სისტემის კოორდინატული ფუნქცია, როცა სისტემის სრული სპინი $S=1$, ანტისიმეტრიულია და სიმეტრიული, როცა $S=0$. მდგომარეობას $S=1$ სპინით უწოდებენ ტრიპლეტურს, $S=0$ სპინით კი — სინგლეტურს. ცხადია, რომ ტრიპლეტური და სინგლეტური მდგომარეობების წონები შესაბამისად იქნება $3/4$ და $1/4$.

ზემოთქმულის თანახმად აღვწერავთ დაიწერება ორი ნახევარსპინიანი ნაწილაკის სრული ტალღური ფუნქციები:

$$\begin{aligned} \Psi_{n_1 n_2}^{1M_s}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; \mathbf{s}_1, \mathbf{s}_2) = \\ = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_{n_1}(\mathbf{r}_1) \psi_{n_2}(\mathbf{r}_2) - \psi_{n_1}(\mathbf{r}_2) \psi_{n_2}(\mathbf{r}_1)] \mathscr{Y}_{1/2, 1/2}^{1M_s}(1, 2) \end{aligned} \quad (107,20)$$

$$\begin{aligned} \Psi_{n_1 n_2}^{00}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; \mathbf{s}_1, \mathbf{s}_2) = \\ = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_{n_1}(\mathbf{r}_1) \psi_{n_2}(\mathbf{r}_2) + \psi_{n_1}(\mathbf{r}_2) \psi_{n_2}(\mathbf{r}_1)] \mathscr{Y}_{1/2, 1/2}^{00}(1, 2) \end{aligned} \quad (107,21)$$

პირველი ფუნქცია შეესაბამება ტრიპლეტურ მდგომარეობას მეორე — სინგლეტურს.

ახლა შევადგინოთ სამი ფერმის ნაწილაკის სპინური ტალღური ფუნქციები. რა მნიშვნელობა ექნება სრულ სპინს? ორი რომელიმე სპინის შეკრებით მივიღებთ $S_{12}=0, 1$, რომელთა შეკრებით მესამე სპინთან მივიღებთ $S=3/2, 1/2$ და $S=1/2$, ამიტომ გვექნება $\left(2 \cdot \frac{3}{2} + 1\right) + 2 \left(2 \cdot \frac{1}{2} + 1\right) = 8$ სპინური ფუნქცია. სრული სპინის პროექციებისათვის გვექნება მნიშვნელობები $M_{S/2}=3/2, 1/2, -1/2, -3/2, M_{1/2}=\pm 1/2$. ამიტომ შეგვიძლია შევადგინოთ მდგომარეობები:

$$\begin{array}{cccccccccccc} \uparrow & \uparrow & \uparrow & \downarrow & \downarrow & \downarrow & \uparrow & \uparrow & \downarrow & \uparrow & \downarrow & \downarrow \\ \alpha(1) \alpha(2) \alpha(3), & \beta(1) \beta(2) \beta(3), & \alpha(1) \alpha(2) \beta(3), & \alpha(1) \beta(2) \beta(3) & & & & & & & & \\ \downarrow & \uparrow & \uparrow & \downarrow & \uparrow & \downarrow & \uparrow & \downarrow & \uparrow & \downarrow & \downarrow & \uparrow \\ \beta(1) \alpha(2) \alpha(3), & \beta(1) \alpha(2) \beta(3), & \alpha(1) \beta(2) \alpha(3), & \beta(1) \beta(2) \alpha(3) & & & & & & & & \end{array} \quad (107,22)$$

ამ მდგომარეობებს შეესაბამება ფუნქციები:

$$\begin{aligned} \mathscr{Y}^{3/2, 3/2} &= \alpha(1) \alpha(2) \alpha(3), \\ \mathscr{Y}^{3/2, -3/2} &= \beta(1) \beta(2) \beta(3), \\ \mathscr{Y}^{3/2, 1/2} &= \frac{1}{\sqrt{3}} [\alpha(1) \alpha(2) \beta(3) + \alpha(1) \beta(2) \alpha(3) + \beta(1) \alpha(2) \alpha(3)], \\ \mathscr{Y}^{3/2, -1/2} &= \frac{1}{\sqrt{3}} [\beta(1) \beta(2) \alpha(3) + \beta(1) \alpha(2) \beta(3) + \alpha(1) \beta(2) \beta(3)], \\ \mathscr{Y}^{1/2, 1/2} &= \frac{1}{\sqrt{6}} [\alpha(1) \alpha(2) \beta(3) + \alpha(1) \beta(2) \alpha(3) - 2\beta(1) \alpha(2) \alpha(3)] \\ \mathscr{Y}^{1/2, -1/2} &= \frac{1}{\sqrt{6}} [\beta(1) \beta(2) \alpha(3) + \beta(1) \alpha(2) \beta(3) - 2\alpha(1) \beta(2) \beta(3)] \end{aligned} \quad (107,23)$$

$$\mathcal{Y}^{1/2, 1/2} = \frac{\alpha(1)}{\sqrt{2}} [\alpha(2) \beta(3) - \beta(2) \alpha(3)],$$

$$\mathcal{Y}^{1/2, -1/2} = \frac{\beta(1)}{\sqrt{2}} [\beta(2) \alpha(3) - \alpha(2) \beta(3)].$$

პირველი ოთხი ფუნქცია სიმეტრიულია სამივე ნაწილაკის სპინის გადასმის მიმართ, მეხუთე და მეექვსე ფუნქცია სიმეტრიულია 2 და სამი ნაწილაკის მიმართ, ხოლო ბოლო ორი ანტისიმეტრიულია 1 და 3 ნაწილაკის სპინების გადასმის მიმართ.

ტალღური ფუნქციის სიმეტრიულობის დამოკიდებულება მომენტზე. განვიხილოთ ორი ნახევარსპინიანი ფერმიონი და დავუშვათ, რომ მათ შორის ურთიერთქმედებას აქვს ცენტრალური ხასიათი. ამ ორი ნაწილაკის შემადგენელ რადიუსეკტორს ექნება სახე $\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$. მაშინ ამ ორი ნაწილაკის სივრცული კოორდინატების გადასმა ნიშნავს $(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1) \rightarrow -(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1)$. ე. ი. $\mathbf{r}$ იცვლება $-\mathbf{r}$ -ით. ცენტრალურ ველში ფარდობითი მოძრაობის ტალღურ ფუნქციას აქვს $R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi)$ სახე, ამიტომ $\mathbf{r} \rightarrow -\mathbf{r}$ გარდაქმნის დროს $r \rightarrow r$, $\theta \rightarrow \pi - \theta$ და $\varphi \rightarrow \pi + \varphi$. ასეთი გარდაქმნისას სფერულ ფუნქციას წინ უჯდება $(-1)^l$ მაშრავლი. ე. ი. კოორდინატული ტალღური ფუნქცია სიმეტრიულია, როცა l ლუწია და ანტისიმეტრიული, როცა l კენტია. ამგვარად, ცენტრალური ურთიერთქმედების დროს კოორდინატული ფუნქციის ლუწობა და სიმეტრიის თვისებები ერთმანეთს ემთხვევა და ორივე ფარდობითი მომენტით განისაზღვრება.

ფერმის ნაწილაკების სრული ტალღური ფუნქცია ანტისიმეტრიული უნდა იყოს ნაწილაკთა გადასმის მიმართ (ე. ი. სივრცული და სპინური კოორდინატების ერთდროული გადასმის მიმართ). ამიტომ ტრიპლეტურ მდგომარეობაში $S=1$ (სიმეტრიული სპინური ფუნქცია!) დასაშვებია მოძრაობა მხოლოდ კენტი აზიმუტალური კვანტური რიცხვებით, მაშინ როდესაც სინგლეტურ მდგომარეობაში $S=0$ მხოლოდ და მხოლოდ ისეთი ფარდობითი მოძრაობაა დასაშვები, რომელიც ხასიათდება ლუწი აზიმუტალური კვანტური რიცხვებით. ასე მაგალითად, s -მდგომარეობაში ($l=0$) შესაძლებელია მხოლოდ $S=0$, ე. ი. მდგომარეობა იქნება სინგლეტური და ა. შ.

რადგან სპინების გადასმისას (107,12) ფუნქციის ნიშანს განსაზღვრავს $(-1)^{S+1}$ მაშრავლი, ამიტომ ორი ფერმის ნაწილაკის ფარდობითი მოძრაობის სრულ ტალღურ ფუნქციას ნაწილაკთა გადასმის დროს გაუჩნდება $(-1)^{l+S+1}$ ნიშანი. საიდანაც, როცა $S=1$, მაშინ $l=1, 3, 5, \dots$ და, როცა $S=0$, მაშინ $l=0, 2, 4, \dots$ და ა. შ.

ხავარჯიშო მაგალითები

1. ვიპოვოთ, რის ტოლია $(\sigma_1^z \sigma_2^z)$ გამოსახულების საკუთარი მნიშვნელობები.

ამოხსნა. (107,16) ფორმულიდან აშკარაა, რომ

$$(\sigma_1^z \sigma_2^z) = -2S(S+1) - 3. \quad (107,24)$$

საიდანაც მივიღებთ

$$(\sigma_1^z \sigma_2^z) = -3, \quad \text{როცა } S=0. \quad (107,25)$$

$$(\sigma_1^z \sigma_2^z) = 1, \quad \text{როცა } S=1.$$

ე. ი. ტრიპლეტურ მდგომარეობაში საკუთარი მნიშვნელობა 1-ის ტოლია, სინგლეტური კი -3-ის.

2. $(\sigma_1^x \sigma_2^x)$ გამოსახულების საშუალებით შევადგინოთ ისეთი ოპერატორი, რომელსაც ექნება საკუთარი მნიშვნელობები: $+1$, როცა $S=1$ და -1 , როცა $S=0$.

პ ა ს უ ხ ი;

$$\hat{R} = \frac{1 + (\sigma_1^0 \sigma_2^0)}{2}. \quad (107,26)$$

3. (107,23) სპინური ფუნქციები ისე ჩაეწეროს, რომ $\mathcal{Y}^{1/2, 1/2}$ და $\mathcal{Y}^{1/2, -1/2}$ ფუნქციები სიმეტრიული და ანტისიმეტრიული იყოს 1 და 2 ნაწილაკის გადასმის მიმართ. შეადარეთ § 50-ის ბოლოში განხილულ მაგალითს.

4. დავამტკიცოთ, რომ თუ $\mathbb{S}_{i_1 i_2 \dots i_N}$ N -რანგის ერთეულოვანი სრულიად ანტისიმეტრიული ტენზორია, ნაშინ

$$\sum_{i_2 \dots i_N} \mathbb{S}_{i_1 i_2 \dots i_N} \mathbb{S}_{i'_1 i_2 \dots i_N} = (N-1)! \delta_{i_1 i'_1}. \quad (107,27)$$

მარცხენა მხარე წარმოადგენს მეორე რანგის ტენზორს. რადგან იგი მიიღება ორი ანტიკურ ტენზორის დაკვეთებით, ამიტომ იგი იქნება პოლარული ტენზორი. გარდა ამისა $\mathbb{S}_{i_1 i_2 \dots i_N}$ ერთეულოვანი ტენზორია, ამიტომ იგი შეიძლება იყოს პროპორციული მხოლოდ $\delta_{i_1 i'_1}$ ტენზორისა, ამიტომ შეგვიძლია დავწეროთ

$$\sum_{i_2 \dots i_N} \mathbb{S}_{i_1 i_2 \dots i_N} \mathbb{S}_{i'_1 i_2 \dots i_N} = A \delta_{i_1 i'_1}.$$

ტოლობის ორივე მხარე ერთნაირ კიდევ დავაქვეითოთ. ამისათვის გავუტოლოთ i_1 ინდექსი i'_1 -ს და ავჯამოთ ერთიდან N -მდე. მარცხნივ მივიღებთ $N!$ მარჯვნივ კი AN ; მაშასადამე, $A = (N-1)!$ და მივიღებთ დასამტკიცებელ ტოლობას.

5. დავამტკიცოთ, რომ

$$\sum_{i_3 \dots i_N} \mathbb{S}_{i_1 i_2 i_3 \dots i_N} \mathbb{S}_{i'_1 i'_2 i_3 \dots i_N} = (N-2)! [\delta_{i_1 i'_1} \delta_{i_2 i'_2} - \delta_{i_1 i'_2} \delta_{i_2 i'_1}]. \quad (107,28)$$

ამ ტოლობის მარცხენა მხარე წარმოადგენს მეოთხე რანგის პოლარულ ტენზორს ამიტომ იგი პროპორციული იქნება $\delta_{i_1 i'_1} \delta_{i_2 i'_2}$ მეორე რანგის ორი ტენზორის ნამრავლის; ამასთან, ტენზორი ნიშნის უნდა იცვლიდეს $i_1 \rightleftharpoons i_2$ და $i'_1 \rightleftharpoons i'_2$ ინდექსების შეცვლისას, ამიტომ

$$\sum_{i_3 \dots i_N} \mathbb{S}_{i_1 i_2 i_3 \dots i_N} \mathbb{S}_{i'_1 i'_2 i_3 \dots i_N} = B [\delta_{i_1 i'_1} \delta_{i_2 i'_2} - \delta_{i_1 i'_2} \delta_{i_2 i'_1}]. \quad (107,29)$$

ეს გამოსახლება დავაქვეითოთ ერთნაირ, ამისათვის i_2 გავუტოლოთ i'_2 -ს და ავჯამოთ. (107,27) ტოლობის გამოყენებით მივიღებთ $B = (N-2)!$, რაც ამტკიცებს (107,28) ფორმულას.

მრავალელემენტრონიანი ატომები

ამ თავში განვიხილავთ მნიშვნელოვან კვანტურ სისტემებს. რთულ ატომებს, ე. ი. ატომებს, რომლებიც შეიცავს მრავალ ელექტრონს. ამგვარი სისტემების შესწავლას მეტად დიდი მნიშვნელობა აქვს. რადგან ამ შექთხევეაში საქმე გვაქვს მრავალი სხეულის ამოცანასთან, ამიტომ ენერგიისა და ტალღური ფუნქციების ზუსტად მოძებნა შეუძლებელია. ამასთან დაკავშირებით რთული ატომების შესასწავლად შემოღებულია მრავალი მიახლოებითი მეთოდი. ჩვენ განვიხილავთ ენერგიის გამოთვლის პარტრი-ფოკისა და თომას-ფერმის მეთოდს. შემდეგ შევუღებებით რთული ატომების თვისებების ზოგად დახასიათებას და გავარკვევთ საკითხს, თუ როგორ უღვება კვანტური მექანიკა მენდელეევის პერიოდული სისტემის ძირითადი თავისებურების შესწავლას. ამავე თავში განვიხილავთ წყალბადის მოლეკულის საკითხსაც.

§ 108. ჰელიუმის ატომი

თავისი სირთულის მიხედვით წყალბადის ატომის შემდეგ დგას ჰელიუმის ატომი. ეს უკანასკნელი წარმოადგენს სისტემას, სადაც $+2e$ მუხტის მქონე ატომგულის ველში მოძრაობს ორი ელექტრონი. ჩვენ შეგვიძლია განვიხილოთ ჰელიუმისებური ატომებიც, ე. ი. ისეთი ატომები, რომელთა გულს $+Ze$ მუხტი აქვს, ელექტრონთა რიცხვი კი ისევე ორის ტოლია. ასეთი ატომები იქნება Li^+ , Be^{++} და ა. შ. აღსანიშნავია, რომ ელემენტარულმა კვანტურმა მექანიკამ სრული მარცხი სწორედ ჰელიუმის ატომის საკითხში განიცადა. ჰელიუმის ატომის სხვადასხვა უცნაური მოდელები ხშირად მდგრად მდგომარეობასაც კი არ იძლეოდა. კვანტურმა მექანიკამ ჰელიუმის პრობლემა თავისუფლად გადაჭრა და ახსნა ყველა ის თავისებურებანი, რომლებიც ახასიათებს ამ ატომს. ჰელიუმის ატომის პრობლემის გადაწყვეტა პირველად 1926 წელს მოგვცა ჰაიზენბერგმა; სახელდობრ, ჰაიზენბერგის მიერ ახსნილი იყო, თუ რატომ გააჩნია ჰელიუმის ატომს ორი ერთმანეთისაგან განსხვავებული მდგომარეობა—ორთო და პარა მდგომარეობა.

დავუშვათ, ჰელიუმის ატომის ორ ელექტრონს შორის სპინ-სპინ (s, s) ურთიერთქმედება და სპინ-ორბიტალური (l, s) ურთიერთქმედება იმდენად მცირეა, რომ პირველ მიახლოებაში მათი უგულებელყოფა შეიძლება; მაშინ ჰელიუმის ატომის ფუნქცია შეგვიძლია წარმოვიდგინოთ როგორც კოორდინატული და სპინური ფუნქციების ნამრავლი ე. ი.

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; \mathbf{s}_1, \mathbf{s}_2) = \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \mathcal{S}(\mathbf{s}_1, \mathbf{s}_2). \quad (108,1)$$

რადგან ელექტრონები ფერმის ნაწილაკებია, ამიტომ $\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; \mathbf{s}_1, \mathbf{s}_2)$ უნდა იყოს ანტისიმეტრიული ფუნქცია. როგორც ზემოთ აღვნიშნეთ, როცა სრული სპინი

$K=1$, სპინური ფუნქცია სიმეტრიულია (გვაქვს სამი ფუნქცია), ამიტომ $\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ იქნება ანტისიმეტრიული. ზოლო, როცა სრული სპინი $K=0$, სპინური ფუნქცია ანტისიმეტრიულია (გვაქვს ერთი ფუნქცია), ამიტომ $\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ უნდა იყოს სიმეტრიული. ამგვარად, ჰელიუმის ატომის ენერგეტიკული დონეები იყოფა ორ კლასად, რომელთაგან ერთი კლასია ის, რომელიც შეესაბამება $K=1$ სპინს, მეორე კი — $K=0$ სპინს. რადგან $K=1$ სპინის შემთხვევაში გვაქვს სამი შესაძლო ორიენტაცია. ამიტომ სპინ-ორბიტალური ურთიერთქმედება გამოიწვევს $K=1$ სპინის შესაბამისი დონის სამად გახლეჩას. ე. ი. მივიღებთ ტრიპლეტს. $K=0$ სპინის შესაბამისი დონე კი ერთმაგი — სინგლეტური იქნება.

რადგან ჰელიუმის ატომის ეს ორი მდგომარეობა აიწერება სხვადასხვა ტიპის სიმეტრიულობის მქონე ტალღური ფუნქციებით, ზოლო სიმეტრიულობის ხასიათი დროის მიხედვით არ იცვლება, ამ ორი ტიპის ჰელიუმს შორის გადასვლა არ უნდა ხდებოდეს, ე. ი. ბუნებაში უნდა არსებობდეს ორი ტიპის ჰელიუმი; ერთი, რომელიც აიწერება სიმეტრიული სპინური ფუნქციით ($K=1$) და მეორე: რომელიც აიწერება ანტისიმეტრიული სპინური ფუნქციით ($K=0$), პირველი ტიპის ჰელიუმს ($K=1$) უწოდებენ ორთოჰელიუმს. მეორე ტიპისას კი — პარაჰელიუმს ($K=0$).

დავამტკიცოთ, რომ ენერგეტიკულად უფრო დაბალ მდგომარეობას შეესაბამება პარაჰელიუმის მართლაც, პარაჰელიუმის კოორდინატული ფუნქცია სიმეტრიულია, ორთოჰელიუმისა კი ანტისიმეტრიული. ამიტომ $\mathbf{r}_1 = \mathbf{r}_2 = \mathbf{r}$ მნიშვნელობათათვის $\psi_{\text{ორთო}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}) = -\psi_{\text{ორთო}}(\mathbf{r}, \mathbf{r})$, საიდანაც $\psi_{\text{ორთო}} = 0$, ე. ი. ორთოჰელიუმის ტალღურ ფუნქციას გააჩნია კვანძი. ჩვენ კი ვიცით, რომ ძირითად მდგომარეობაში ტალღურ ფუნქციას კვანძი არ უნდა ჰქონდეს. ამიტომ ეს მდგომარეობა უნდა ხასიათდებოდეს სიმეტრიული კოორდინატული ტალღური ფუნქციით. მაშასადამე, ჰელიუმის ატომის ძირითად მდგომარეობას შეესაბამება პარაჰელიუმის მდგომარეობა.

ჩვენ აღენიშნეთ, რომ ორთოჰელიუმის პარაჰელიუმში გადასვლა შეუძლებელია. მაგრამ ეს მტკიცება სამართლიანია მხოლოდ მაშინ, როცა „ K “ ურთიერთქმედებას არ ვითვალისწინებთ. სინამდვილეში კი „ K “ ურთიერთქმედება, მართალია, მცირეა, მაგრამ იგი მაინც არსებობს; ამიტომ ორთო-პარა გადასვლა (ან პირიქით) შესაძლებელია. ეს გარემოება არ ეწინააღმდეგება იმას, რომ სრული ტალღური ფუნქციის სიმეტრიულობის ხასიათი დროის მიხედვით არ უნდა შეიცვალოს, რადგან, თუ კოორდინატული და სპინური ფუნქციების სიმეტრიულობას შევცვლით საწინააღმდეგოთი, სრული ფუნქციის სიმეტრიულობის ხასიათი უცვლელი დარჩება. იმის გამო, რომ „ K “ ურთიერთქმედება მცირეა, აღნიშნული გადასვლაც ნაკლებად სააღბათო იქნება.

ორთო და პარაჰელიუმის არსებობის დამტკიცებით აიხსნა ყველა ის თავისებურებანი, რომლებიც გააჩნია ჰელიუმის სპექტრს; სახელობრ, ახსნილ იქნა, თუ რატომ არა აქვს პარაჰელიუმს მულტიპლეტური სტრუქტურა, იმ დროს როცა ორთოჰელიუმის სპექტრალურ ხაზებს ასეთი სტრუქტურა ახასიათებს.

ჰელიუმის ატომის ენერგეტიკული დონეები. ვიპოვოთ ჰელიუმის ატომის ენერგეტიკული დონეები და ტალღური ფუნქციები. ჰელიუმის ატომის ამოცანის ამოხსნელად არსებობს მრავალი მეთოდი. მათგან ჩვენ განვიხილავთ ყველაზე მარტივს — შეწეფოთების თეორიას, თუმცა უნდა აღვნიშნოთ, რომ რაოდენობრივად ეს მეთოდი გაცილებით უფრო ცუდ შედეგებს იძლევა, ვიდრე სხვა მიახლოებითი მეთოდები. ამოცანის მიახლოებითი მეთოდებით ამოხსნა გამოწვეულია იმიტომ, რომ ჰელიუმში საკმე გვაქვს სამი სხეულის ამოცანასთან, რომელიც ზუსტად

ტად არც კლასიკურში და არც კვანტურ მექანიკაში არ იხსნება. ჰელიუმის ატომის ამოცანას ამოვხსნით ორი დაშვებით, სახელდობრ, არ გავითვალისწინებთ: 1) „ფ“ და „f“ ურთიერთქმედებას და 2) რელატივისტურ ეფექტებს: ამ შემთხვევაში ჰელიუმის ატომის ჰამილტონიანს ეწნება სახე

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta_1 - \frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta_2 - \frac{2e^2}{r_1} - \frac{2e^2}{r_2} + \frac{e^2}{r_{12}}; \quad (108,2)$$

აქ $\frac{2e^2}{r_i}$ არის i -ური ელექტრონის ურთიერთქმედების პოტენციალური ენერგია ატომის გულთან, რომლის მუხტი არის $+2e$. $\frac{e^2}{r_{12}}$ ელექტრონების ურთიერთქმედების ენერგიაა, $-\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta_i$ კი არის i -ური ელექტრონის კინეტიკური ენერგიის ოპერატორი. (108,1) ასე დავწეროთ:

$$\hat{H}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \hat{H}_0(\mathbf{r}_1) + \hat{H}_0(\mathbf{r}_2) + \hat{H}'(\mathbf{r}_{12}), \quad (108,3)$$

სადაც

$$\hat{H}_0(\mathbf{r}_i) = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta_i - \frac{2e^2}{r_i} \quad (i=1, 2) \quad (108,4)$$

და

$$\hat{H}'(\mathbf{r}_{12}) = \frac{e^2}{r_{12}}. \quad (108,5)$$

გამოვიყენოთ შეშფოთების თეორია. $\hat{H}'(\mathbf{r}_{12})$ განვიხილოთ როგორც მცირე შეშფოთება (თუმცა უნდა აღვნიშნოთ, რომ იგი ძალიან მცირე არ არის დანარჩენ წევრებთან შედარებით). შევარჩიოთ ნულოვანი მიახლოების ტალღური ფუნქციები. როცა $\hat{H}'(\mathbf{r}_{12})=0$, მაშინ ელექტრონებს შორის ურთიერთქმედება არა გვაქვს და ორივე ელექტრონი დამოუკიდებლად მოძრაობს გულის ირგვლივ. ვთქვათ, პირველი ელექტრონის ენერგია E_n -ის ტოლია და ხასიათდება $\psi_n(\mathbf{r}_1)$ ტალღური ფუნქციით; მეორე ელექტრონის სათანადო სიდიდეები იყოს E_m და $\psi_m(\mathbf{r}_2)$ (E_n, E_m, ψ_n, ψ_m წყალბადისებური ატომის ენერგია და ტალღური ფუნქციები იქნება), მაშინ ნულოვანი მიახლოების ფუნქციად, რომელიც ხასიათდება $E_{nm} = E_n + E_m$ ენერგიით, შეგვიძლია ავიღოთ

$$\psi_1(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \psi_n(\mathbf{r}_1) \psi_m(\mathbf{r}_2) \quad (108,6)$$

ფუნქცია. ეს რომ მართლაც ასეა, ჩანს § 100-დან, სადაც ვაჩვენეთ, რომ, როცა ნაწილაკებს შორის ურთიერთქმედება არ გვქონდა, სისტემის ფუნქცია ცალკეული ნაწილაკის ტალღური ფუნქციების გამრავლებით მიიღებოდა ((100,22) ფორმულა), ენერგია კი—ცალკეული ნაწილაკების ენერგიების შეკრებით ((100,23) ფორმულა).

გარდა ამისა, რადგან ელექტრონები იგივერი ნაწილაკებია, ენერგიის $E_{nm} = E_n + E_m$ მნიშვნელობას შეესაბამება (108,6)-დან ელექტრონების გადასმით მიღებული ფუნქციაც, ე. ი.

$$\psi_2(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \psi_n(\mathbf{r}_2) \psi_m(\mathbf{r}_1), \quad (108,7)$$

რომელიც აგრეთვე აკმაყოფილებს შრედინგერის შეუშფოთებელ განტოლებას:

$$\begin{aligned} (H_0(\mathbf{r}_1) + H_0(\mathbf{r}_2)) \psi_n(\mathbf{r}_2) \psi_m(\mathbf{r}_1) &= \psi_n(\mathbf{r}_2) H_0(\mathbf{r}_1) \psi_m(\mathbf{r}_1) + \\ &+ \psi_m(\mathbf{r}_1) H_0(\mathbf{r}_2) \psi_n(\mathbf{r}_2) = (E_n + E_m) \psi_n(\mathbf{r}_2) \psi_m(\mathbf{r}_1) \end{aligned} \quad (108,8)$$

ამგვარად, ენერგიის ერთ $E_{nm}^0 = E_n + E_m$ საკუთარ მნიშვნელობას შეესაბამება ორი ტალღური ფუნქცია $\psi_1(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ და $\psi_2(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$, რომლებიც ერთმანეთისაგან განსხვავდებიან მხოლოდ იმით, რომ ერთში ელექტრონები გადასმულია. ამგვარად, საქმე გვაქვს გადაგვარებასთან. ამ გადაგვარებას გაცვლით გადაგვარებას უწოდებენ. ამასთან გვაქვს ორჯერადი გადაგვარება. მაშასადამე, საჭიროა გამოვიყენოთ შეშფოთების თეორია გადაგვარების შემთხვევაში. როგორც შეშფოთების თეორიის განხილვისას ვაჩვენეთ, სწორი ნულოვანი მიახლოების ფუნქციას ექნება სახე:

$$\varphi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = b_1 \psi_1(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) + b_2 \psi_2(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2), \quad (108,9)$$

ხოლო b_1, b_2 კოეფიციენტები და ენერგიის საკუთარი მნიშვნელობები უნდა ვიპოვოთ (73,8) განტოლებიდან

$$\sum_{k=1} b_k \{ H'_{ik} - E^{(1)} \delta_{ik} \} = 0, \quad (108,10)$$

გამოვიღოთ ეს განტოლება შემდეგი სახით გადაიწერება:

$$\begin{aligned} (H'_{11} - E^{(1)})b_1 + H'_{12}b_2 &= 0, \\ H'_{21}b_1 + (H'_{22} - E^{(1)})b_2 &= 0. \end{aligned} \quad (108,11)$$

ცხადია, რომ ჰელიუმის ატომის ენერგია პირველ მიახლოებაში ტოლი იქნება გამოსახულების $E = E_{nm}^0 + E^{(1)}$. (108,10)-ში შემავალი H'_{ik} არის შეშფოთების ენერგიის მატრიცული ელემენტები; სახელდობრ,

$$H'_{11} = \int \psi_1^*(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \hat{H}'(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \psi_1(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2, \quad (108,12)$$

$$H'_{12} = \int \psi_1^*(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \hat{H}'(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \psi_2(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2,$$

ხოლო $H'_{22} = H'_{11}$ და $H'_{12} = H'_{21}$. მართლაც, მაგალითად, H'_{22} განსხვავებული იქნება H'_{11} -ისაგან იმით, რომ განსაზღვრულ ინტეგრალში $\mathbf{r}_1$ შეცვლილია $\mathbf{r}_2$ -ით, რაც ინტეგრალის მნიშვნელობას არ ცვლის. შემოვიღოთ აღნიშვნები:

$$C = H'_{11} = H'_{22}, \quad A = H'_{12} = H'_{21}.$$

თუ გავიხსენებთ (108,5), (108,6) და (108,7) გამოსახულებებს C და A მატრიცული ელემენტებისათვის გვექნება:

$$C = e^2 \int |\psi_n(\mathbf{r}_1)|^2 |\psi_m(\mathbf{r}_2)|^2 \frac{d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2}{r_{12}}, \quad (108,13)$$

$$A = e^2 \int \psi_m^*(\mathbf{r}_1) \psi_n(\mathbf{r}_1) \psi_n^*(\mathbf{r}_2) \psi_m(\mathbf{r}_2) \frac{d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2}{r_{12}}. \quad (108,14)$$

როგორც ვხედავთ C და A ნამდვილი სიდიდეებია $C^* = C$ და $A^* = A$. (108,11) სისტემის საუკუნებრივ განტოლებას ექნება სახე

$$\begin{vmatrix} C - E^{(1)} & A \\ A & C - E^{(1)} \end{vmatrix} = 0, \quad (108,15)$$

რომლის ამონახსნი $E^{(1)}$ -სათვის იქნება

$$E^{(1)} = C \pm A. \quad (108,16)$$

ახლა საჭიროა ენერგიის ეს შესწორება შევიტანოთ (108,11) სისტემაში და ვიპოვოთ ψ_1 და ψ_2 . პირველი ფესვის $E^{(1)} = C + A$ შეტანა მოგვცემს $\psi_1 = \psi_2$ ხოლო მეორე $E^{(2)} = C - A$ ფესვისათვის განტოლების ამონახსნი იქნება $\psi_1 = -\psi_2$. განსასაზღვრავი დაგვრჩა ერთი მუდმივი, რომელსაც ვიპოვით ნორმირების პირობიდან. ამგვარად, ნულოვანი მიახლოების ფუნქციებისათვის, (108,9) ფორმულის თანახმად გვექნება:

$$\varphi_s = \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_1 + \psi_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \{ \psi_n(r_1) \psi_m(r_2) + \psi_n(r_2) \psi_m(r_1) \}, \quad (108,17)$$

$$\varphi_a = \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_1 - \psi_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \{ \psi_n(r_1) \psi_m(r_2) - \psi_n(r_2) \psi_m(r_1) \}. \quad (108,18)$$

$\frac{1}{\sqrt{2}}$ არის ნორმირების კოეფიციენტი. ელექტრონების გადასმის მიმართ პირველი ფუნქცია სიმეტრიულია, მეორე კი—ანტისიმეტრიული. (108,16) ფორმულის თანახმად, სიმეტრიულ კოორდინატულ ფუნქციას (პარაპელიუმი) შეესაბამება ენერგია

$$E_{\text{პარა}} = E_n + E_m + C + A, \quad (S=0) \quad (108,19)$$

ხოლო ანტისიმეტრიულ კოორდინატულ ფუნქციას (ორთოპელიუმი)

$$E_{\text{ორთო}} = E_n + E_m + C - A \quad (S=1) \quad (108,20)$$

ამგვარად, თეორია გვიჩვენებს, რომ უნდა არსებობდეს ჰელიუმის ატომის ორი მდგომარეობა. ერთი, რომელიც აიწერება სიმეტრიული კოორდინატული ფუნქციით (პარაპელიუმი), და მეორე, რომელიც აიწერება ანტისიმეტრიული კოორდინატული ფუნქციით (ორთოპელიუმი). ამასთან, (108,17) და (108,18) ფუნქციები ამ ორი მდგომარეობის ნულოვანი მიახლოების ტალღურ ფუნქციებს წარმოადგენს, $E_{\text{პარა}}$ და $E_{\text{ორთო}}$ კი—ენერგიებს. სხვაობა პარა და ორთო მდგომარეობის ენერგიებს შორის $E_{\text{პარა}} - E_{\text{ორთო}} = 2A$. ამიტომ ჰელიუმის ატომის დონეები იხლიჩება ენერგეტულად განსხვავებულ ორ-ორთო და პარაპელიუმის—დონედ.

ვაჩვენოთ, რომ ჰელიუმის ნორმალურ მდგომარეობას პარაპელიუმის მდგომარეობა შეესაბამება. მართლაც, ძირითად მდგომარეობაში $n=1$ და E_1 ენერგიას შეესაბამება მხოლოდ ერთი ტალღური ფუნქცია—წყალბადისებური ატომის ძირითადი მდგომარეობის ფუნქცია $\psi_{100}(r_1)$. ძირითად მდგომარეობაში $n=m=1$ ე. ი. $\varphi_a = 0$, ამიტომ დაგვრჩება φ_s , ე. ი. პარაპელიუმის მდგომარეობა. მის ტალღურ ფუნქციას ნულოვან მიახლოებაში ექნება სახე

$$\psi(r_1, r_2) = \frac{2^3}{\pi a_0^3} e^{-\frac{2}{a_0}(r_1 + r_2)} \quad (108,21)$$

აღვნიშნოთ, რომ C -ს უწოდებენ კულონურ ენერგიას, ხოლო A -ს—გაცვლით ენერგიას. შეიძლება ჩვენება, რომ ჰელიუმის ატომისათვის $A > 0$. რიცხვითი გამოთვლები დაახლოებით $10-20\%$ -ით განსხვავდება ცდის მონაცემებისაგან. აღნიშნული მიახლოების უზემობის გამო უკეთესი თანხედენა არც იყო მოსალოდნელი. ოღონდ შევნიშნოთ, რომ არსებობს სხვა მიახლოებითი მეთოდები, რომელთა თანახმად გამოთვლილი მნიშვნელობები კარგ თანხმობაშია ექსპერიმენტალურ მონაცემებთან.

ბოლოს შევნიშნოთ, რომ სინამდვილეში ენერგეტული დონეების რიცხვი იმაზე მეტია, რასაც იძლევა გაცვლითი გადაგვარება. ეს განოწვეულია იმიტომ,

რომ ჰელიუმის ატომში გაცვლითი გადაგვარების გარდა იხსნება „ $1s$ “ გადაგვარებაც. მართლაც, დავეშვათ, რომ გვაქვს წყალბადისებური ატომი. მაშინ, როგორც ვიცით, მისთვის ადგილი აქვს „ $1s$ “ გადაგვარებას, თუ ასეთ ატომს დავუმატებთ ერთ ელექტრონს, მაშინ ატომში შეიქმნება დამატებითი ელექტრული ველი, რომელიც მოახდენს წყალბადისებური ატომის დონეების გახლეჩას, ე. ი. ადგილი ექნება, ასე ვთქვათ, „შინაგან შტარკ ეფექტს“. ამიტომ ჰელიუმის ატომის ენერგია აგრეთვე $1s$ -ის ფუნქციაც იქნება, რაც მოგვცემს დამატებით ენერგეტულ დონეებს.

§ 109. გაცვლითი ურთიერთქმედება

ამ პარაგრაფში გამოვარკვიოთ C და A სიდიდეების ფიზიკური არსი. ამ მიზნით შემოვიღოთ აღნიშვნები:

$$\rho_{nn}(\mathbf{r}) = -e |\psi_n(\mathbf{r})|^2, \quad (109,1)$$

$$\rho_{mn}(\mathbf{r}) = -e\psi_m^*(\mathbf{r})\psi_n(\mathbf{r}). \quad (109,2)$$

$\rho_{nn}(\mathbf{r})$ წარმოადგენს ელექტრული ღრუბლის საშუალო სიმკვრივეს $\mathbf{r}$ წერტილში; $\rho_{mn}(\mathbf{r})$ -ს კი უწოდებენ გაცვლით სიმკვრივეს. ეს სიმკვრივე დაკავშირებულია ψ_m და ψ_n ტალღური ფუნქციების გადაფარვასთან, ე. ი. გამოწვეულია იმით, რომ ელექტრონს ნაწილობრივ შეუძლია მოხვდეს $\psi_n(\mathbf{r})$ და ნაწილობრივ $\psi_m(\mathbf{r})$ მდგომარეობაში. C და A ინტეგრალები აღნიშნული სიმკვრივეებით ასე გადაიწერება:

$$C = \int \frac{\rho_{nn}(\mathbf{r}_1)\rho_{mm}(\mathbf{r}_2)}{r_{12}} d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \quad (109,3)$$

$$A = \int \frac{\rho_{nn}(\mathbf{r}_1)\rho_{mm}^*(\mathbf{r}_2)}{r_{12}} d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2; \quad (109,4)$$

C -ს ფიზიკური შინაარსი ადვილად გასაგებია. იგი წარმოადგენს ორი, $\rho_{nn}(\mathbf{r}_1)$ და $\rho_{mm}(\mathbf{r}_2)$, სიმკვრივის ელექტრული ღრუბლების კულონური ურთიერთქმედების ენერგიას. ამიტომაც C -ს უწოდებენ კულონურ ენერგიას. A -ს, როგორც აღვნიშნეთ, უწოდებენ გაცვლით ენერგიას. გაცვლითი ენერგიაც გამოწვეულია კულონური ურთიერთქმედებით. მართლაც, რომ ავიღოთ $e=0$, მივიღებთ $A=0$. ვაჩვენოთ, რომ გაცვლითი ენერგია გამოწვეულია ψ_1 და ψ_2 ფუნქციების ინტერფერენციით. ამისათვის ვიპოვოთ ენერგიის $E^{(1)}$ შესწორება ჰელიუმის ატომისათვის. როგორც ცნობილია, იგი ტოლია შემფოთების ენერგიას საშუალო მნიშვნელობისა. ამიტომ

$$E^{(1)} = \frac{e^2}{r_{12}} = \int \frac{e^2}{r_{12}} |\varphi|^2 d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2. \quad (109,5)$$

სადაც

$$\varphi = \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_1 \pm \psi_2). \quad (109,6)$$

შევიტანოთ φ ფუნქცია (109,5) ფორმულაში. მივიღებთ

$$E^{(1)} = \frac{1}{2} \int \frac{e^2}{r_{12}} \{ |\psi_1|^2 + |\psi_2|^2 \pm (\psi_1\psi_2^* + \psi_1^*\psi_2) \} d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2; \quad (109,7)$$

რადგან, თანახმად (108,6) და (108,7) ფორმულებისა, ამ გამოსახულების პირ-

ველი ორი ინტეგრალი ერთმანეთის ტოლია და უდრის C -ს ისევე როგორც ბოლო ორი ინტეგრალი ერთმანეთის ტოლია და უდრის A -ს, გვექნება

$$E^{(1)} = C \pm A. \quad (109,8)$$

ეს გამოთვლა საშუალებას გვაძლევს გავიგოთ გაცვლითი ენერგიის არსი. $\psi_1 = \psi_n(r_1)\psi_m(r_2)$ და $\psi_2 = \psi_n(r_2)\psi_m(r_1)$ რომ დამოუკიდებელი მდგომარეობები იყოს, მაშინ ალბათობა იმისა, რომ პირველი ელექტრონი იმყოფებოდეს სივრცის $d\mathbf{r}_1$ მოცულობაში, მეორე კი — $d\mathbf{r}_2$ -ში, დამოუკიდებლად იმისა, თუ რომელ მდგომარეობაში იმყოფებიან ეს ელექტრონები, მოცემული იქნებოდა ფორმულით

$$w_1 d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 = \frac{1}{2} \{ |\psi_1|^2 + |\psi_2|^2 \} d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2. \quad (109,9)$$

$1/2$ შემოღებულია ალბათობის ერთზე ნორმირებისათვის. ამ შემთხვევაში გამოთვლილი ენერგიის შესწორება $E^{(1)} = \int \frac{e^2}{r_{12}} w_1 d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2$ მოგვეცემდა მხოლოდ კულონურ ენერგიას — C . სინამდვილეში კი ორი ელექტრონის ტალღურ ფუნქციას აქვს (109,6) სახე. ამიტომ ψ_1 და ψ_2 დამოუკიდებლები აღარაა. ერთი ელექტრონის მდგომარეობა დამოკიდებულია იმაზე, თუ რომელ მდგომარეობაში იმყოფება მეორე ელექტრონი. ამიტომ, თანახმად (109,6) ფორმულისა, ელექტრონების $d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2$ მოცულობაში ყოფნის ალბათობა ტოლი იქნება გამოსახულების

$$w_2 d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 = |\varphi|^2 d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 = \frac{1}{2} \{ (|\psi_1|^2 + |\psi_2|^2) \pm (\psi_1 \psi_2^* + \psi_1^* \psi_2) \} d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2. \quad (109,10)$$

ამ შემთხვევაში დამატებით მივიღეთ $(\psi_1 \psi_2^* + \psi_1^* \psi_2)$ წევრი, რომელსაც ეწოდება ინტერფერენციული წევრი და რომელიც აპირობებს გაცვლით ენერგიას — A . ინტერფერენციული წევრის გაჩენა შედეგია ნაწილაკთა იგივეურობისა — მათი ერთმანეთისაგან გარჩევის შეუძლებლობის. გაცვლითი ენერგია დამახასიათებელია არა მხოლოდ კულონური ურთიერთქმედებისათვის, აჭამედ იგი ჩნდება ყველგან, სადაც კი საქმე გვაქვს ორ იგივეურ ნაწილაკთან. გაცვლით ენერგიას კლასიკურ მექანიკაში ანალოგია არა აქვს; იგი წარმოადგენს წმინდა კვანტურ-მექანიკურ ეფექტს. გაცვლითი ურთიერთქმედების ხასიათი აქვს, მაგალითად, ატომგულურ ძალებს.

როდესაც ადგილი აქვს ისეთ მდგომარეობას, როცა ერთი ნაწილაკის კოორდინატი ყოველთვის ერთ რომელიმე არეში იმყოფება, მეორესი — კი მეორე არეში, თანაც ისე, რომ ეს არეები ერთმანეთს არ გადაფარავს, მაშინ, მიუხედავად ნაწილაკების იგივეურობისა, მათი გარჩევა მაინც შესაძლებელი იქნება ან სივრცული დამახასიათებლებით, ანდა სხვა რაიმე მონაცემებით, ამ შემთხვევაში გაცვლითი ენერგია ნულის ტოლია და ალბათობაში ინტერფერენციული წევრი არ გვექნება; ამიტომ, გაცვლითი ეფექტები განსაკუთრებით მნიშვნელოვანია მაშინ, როცა იგივეურ ნაწილაკებს შორის ადგილი აქვს მძლავრ ურთიერთქმედებას. ელექტრონები კი, რომლებიც სხვადასხვა ატომს ეკუთვნის და ძალიან დიდი მანძილებითაა დაშორებული ერთმანეთთან, შეგვიძლია, დიდი სიზუსტით, ერთმანეთისაგან განსხვავებულად ჩავთვალოთ.

§ 110. რთული ატომის ენერგიის გამოთვლა
ჰარტრისა და ფოკის მეთოდით

თუ პელიუმის ატომისათვის შესაძლებელია შემფოთების თეორიის გამოყენება, ამ მეთოდს მრავალელექტრონიანი ატომებისათვის, მათემატიკური სიძნელეების გამო, თითქმის არაფრის მოცემა არ შეუძლია. შრედინგერის განტოლების ზუსტ ამოხსნაზე ლაპარაკი რთული ატომებისათვის მითუმეტეს შეუძლებელია. რთული ატომებისათვის შრედინგერის განტოლების რიცხვითი მეთოდებით ამოხსნაც კი პრაქტიკულად განუხორციელებელია. ამიტომაც მრავალელექტრონიანი ატომების ენერგიების მოსაძებნად მიმართავენ ერთობ გამარტივებულ მეთოდებს. ამ მეთოდებში ხშირად გვხვდება ზოგიერთი ოპერატორიდან მატრიცული ელემენტების აღება რთული ატომის სიმეტრიზებული ტალღური ფუნქციებით, ამიტომ წინასწარ განვიხილოთ მეთოდი ამ მატრიცული ელემენტების გამოთვლისა.

ვთქვათ, მოცემული გვაქვს ოპერატორი

$$\hat{A} = \sum_{k=1}^N \hat{A}(x_k) = \sum_{k=1}^N \hat{A}(k). \quad (110,1)$$

ამ ოპერატორის ერთნაწილაკობრივი ოპერატორი ვუწოდოთ, რადგან თითოეული $\hat{A}(1), \hat{A}(2) \dots$ დამოკიდებულია მხოლოდ ერთი ნაწილაკის კოორდინატებზე. ვიპოვოთ ამ ოპერატორის საშუალო მნიშვნელობა Ψ მდგომარეობაში. რომელიც გამოიხატება სლეტერის დეტერმინანტის სახით

$$\Psi(x_1, x_2, \dots, x_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{i_1 i_2 \dots i_N} \mathbb{E}_{i_1 i_2 \dots i_N} \psi_{i_1}(x_1) \psi_{i_2}(x_2) \dots \psi_{i_N}(x_N). \quad (110,2)$$

x_i -ში კვლავ ვიგულისხმებთ სივრცული და სპინური კოორდინატების ერთობლიობას. (110,2)-ში განსხვავებით (106,18)-ისა, კვანტური რიცხვები ჩამოუშვით; ჩვენ ვიგულისხმებთ, რომ თვით i_k ინდექსები მიუთითებენ ყველა კვანტური რიცხვების ერთობლიობას.

საშუალო მნიშვნელობის განმარტების ძალით გვექნება

$$\langle \Psi | \hat{A} | \Psi \rangle = \frac{1}{N!} \sum_{i_1 i_2 \dots i_N} \sum_{i'_1 i'_2 \dots i'_N} \mathbb{E}_{i_1 i_2 \dots i_N} \mathbb{E}_{i'_1 i'_2 \dots i'_N} \quad (110,3)$$

$$\langle \psi_{i_1} \psi_{i_2} \dots \psi_{i_N} \left| \sum_{k=1}^N \hat{A}(x_k) \right| \psi_{i'_1} \psi_{i'_2} \dots \psi_{i'_N} \rangle$$

ცხადია, რომ $\psi_{i_k}(x_k)$ ფუნქციების ორთო-ნორმირების გამო

$$\begin{aligned} \langle \psi_{i_1} \psi_{i_2} \dots \psi_{i_N} \left| \sum_{k=1}^N \hat{A}(k) \right| \psi_{i'_1} \psi_{i'_2} \dots \psi_{i'_N} \rangle &= \\ &= \langle \psi_{i_1} | \hat{A}(1) | \psi_{i'_1} \rangle \delta_{i_2 i'_2} \delta_{i_3 i'_3} \dots \delta_{i_N i'_N} + \\ &+ \langle \psi_{i_2} | \hat{A}(2) | \psi_{i'_2} \rangle \delta_{i_1 i'_1} \delta_{i_3 i'_3} \dots \delta_{i_N i'_N} + \dots + \\ &+ \langle \psi_{i_N} | \hat{A}(N) | \psi_{i'_N} \rangle \delta_{i_1 i'_1} \dots \delta_{i_{N-1} i'_{N-1}} \end{aligned} \quad (110,4)$$

ეს გამოსახულება შევიტანოთ (110,3)-ში და დელტა ფუნქციებით ჩავატაროთ ფილტრაცია; გვექნება

$$\langle \Psi | \hat{A} | \Psi \rangle = \frac{1}{N!} \left\{ \sum_{i_1 i'_1} \langle \psi_{i_1} | \hat{A}(1) | \psi_{i'_1} \rangle \sum_{i_2 i_3 \dots i_N} \mathbb{E}_{i_1 i_2 \dots i_N} \mathbb{E}_{i'_1 i_2 \dots i_N} + \dots + \sum_{i_N i'_N} \langle \psi_{i_N} | \hat{A}(N) | \psi_{i'_N} \rangle \sum_{i_1 i_2 \dots i_{N-1}} \mathbb{E}_{i_1 i_2 \dots i_{N-1} i_N} \mathbb{E}_{i'_1 i_2 \dots i_{N-1} i'_N} \right\}. \quad (110,5)$$

ახლა გავიხსენოთ ფორმულა

$$\sum_{i_2 i_3 \dots i_N} \mathbb{E}_{i_1 i_2 \dots i_N} \mathbb{E}_{i'_1 i_2 \dots i_N} = (N-1)! \delta_{i_1 i'_1}. \quad (110,6)$$

მაშინ გვექნება, რომ

$$\langle \Psi | \hat{A} | \Psi \rangle = \frac{(N-1)!}{N!} \left\{ \sum_{i_1=1}^N \langle \psi_{i_1} | \hat{A}(1) | \psi_{i_1} \rangle + \dots + \sum_{i_N=1}^N \langle \psi_{i_N} | \hat{A}(N) | \psi_{i_N} \rangle \right\}. \quad (110,7)$$

რადგან გარე ძალები, რომლებიც (110,1)-ით გამოიხატება ყველა ნაწილაკზე ერთნაირად მოქმედებს, ამიტომ (110,7)-ში შემავალი ჯამები ერთმანეთის ტოლია და საბოლოოდ გვექნება

$$\langle \Psi | \hat{A} | \Psi \rangle = \sum_{i=1}^N \langle \psi_i(x) | \hat{A}(x) | \psi_i(x) \rangle = \sum_{i=1}^N A_{ii}, \quad (110,8)$$

სადაც A_{ii} არის $\hat{A}$ ოპერატორის დიაგონალური მატრიცული ელემენტი. ახლა განვიხილოთ შემდეგი ორნაწილაკობრივი ოპერატორი:

$$\hat{B} = \frac{1}{2} \sum_k \sum_{j=1}^N \hat{B}(x_k, x_j) = \frac{1}{2} \sum_{k,j=1}^N \hat{B}(k, j). \quad (110,9)$$

შტრიხი ჯამის ნიშანზე გამორიცხავს ინდექსების ტოლობას (ნაწილაკი თავის თავზე არ მოქმედებს), ხოლო ნახევარი მიუთითებს, რომ ყოველი წყვილი გათვალისწინებულია მხოლოდ ერთხელ. ვიპოვოთ (110,9) ოპერატორის საშუალო მნიშვნელობა ისევ (110,2) ტალღური ფუნქციით განსაზღვრულ მდგომარეობაში. გვექნება:

$$\langle \Psi | \hat{B} | \Psi \rangle = \frac{1}{2N!} \sum_{i_1 \dots i_N} \sum_{i'_1 \dots i'_N} \mathbb{E}_{i_1 i_2 \dots i_N} \mathbb{E}_{i'_1 i'_2 \dots i'_N} \langle \psi_{i_1} \dots \psi_{i_N} | \sum_{k,j} \hat{B}(k, j) | \psi_{i'_1} \dots \psi_{i'_N} \rangle. \quad (110,10)$$

განვიხილოთ წყვილური ურთიერთქმედების მხოლოდ ერთი წევრი; ვთქვათ $k=1$, $j=2$ წევრი. გვექნება

$$\frac{1}{2N!} \sum_{i_1 \dots i_N} \sum_{i'_1 \dots i'_N} \mathbb{E}_{i_1 i_2 \dots i_N} \mathbb{E}_{i'_1 i'_2 \dots i'_N} \langle \psi_{i_1} \psi_{i_2} | \hat{B}(1, 2) | \psi_{i'_1} \psi_{i'_2} \rangle$$

$$\delta_{i_3 i'_3} \dots \delta_{i_N i'_N} = \frac{1}{2N!} \sum'_{i_1 i_2} \sum'_{i'_1 i'_2} \langle \psi_{i_1} \psi_{i_2} | \hat{B}(1, 2) | \psi_{i'_1} \psi_{i'_2} \rangle$$

$$\sum_{i_3 \dots i_N} \mathbb{E}_{i_1 i_2 i_3 \dots i_N} \mathbb{E}_{i'_1 i'_2 i'_3 \dots i'_N} \quad (110,11)$$

ახლა გავიხსენოთ, რომ

$$\sum_{i_3 \dots i_N} \mathbb{E}_{i_1 i_2 i_3 \dots i_N} \mathbb{E}_{i'_1 i'_2 i'_3 \dots i'_N} = (N-2)! [\delta_{i_1 i'_1} \delta_{i_2 i'_2} - \delta_{i_1 i'_2} \delta_{i_2 i'_1}] \quad (110,12)$$

შედეგად (110,11) ჯამი მიიღებს შემდეგ სახეს:

$$\frac{(N-2)!}{2N!} \left[\sum'_{i_1 i_2} \langle \psi_{i_1} \psi_{i_2} | \hat{B}(1, 2) | \psi_{i_1} \psi_{i_2} \rangle - \right.$$

$$\left. - \sum'_{i_1 i_2} \langle \psi_{i_1} \psi_{i_2} | \hat{B}(1, 2) | \psi_{i_2} \psi_{i_1} \rangle \right] \quad (110,13)$$

რადგან ნაწილაკთა N რიცხვის დროს წყვილების რაოდენობა $N(N-1)$ -ის ტოლია და ყველა წყვილი ერთნაირად ურთიერთქმედებს, ამიტომ საბოლოოდ გვექნება

$$\langle \Psi | \hat{B} | \Psi \rangle = \frac{1}{2} \sum_{i_1, i_2=1}^N \{ \langle \psi_{i_1}(x_1) \psi_{i_2}(x_2) | \hat{B}(x_1, x_2) | \psi_{i_1}(x_1) \psi_{i_2}(x_2) \rangle -$$

$$- \langle \psi_{i_1}(x_1) \psi_{i_2}(x_2) | \hat{B}(x_1, x_2) | \psi_{i_2}(x_1) \psi_{i_1}(x_2) \rangle \} \quad (110,14)$$

ცხადია, x_1 და x_2 -ის ნაცვლად ჩვენ შეგვეძლო აგველო ნებისმიერი სხვა წყვილი. ამ გამოსახულების მეორე წევრი შედეგია გაცვლითი ურთიერთქმედებისა.

როცა (110,1) და (110,9) ოპერატორები სპინებზე დამოკიდებული არ არის, მაშინ ტალღური ფუნქციები გადაიქცევა კოორდინატული და სპინური ფუნქციების ნამრავლებად. სპინური ფუნქციების ნორმირების გამო ეს ფუნქციები ამოვარდება და (110,8) და (110,14) გამოსახულებებში დაგვრჩება მხოლოდ კოორდინატული ფუნქციები.

ახლა დავუბრუნდეთ ჩვენს ამოცანას და ვიპოვოთ რთული ატომის ენერგია თვითშეთანხმებული ველის მიახლოებაში, ე. ი. მიახლოებაში, როცა ატომის ტალღური ფუნქცია შეგვიძლია წარმოვიდგინოთ (110,2) სლუტერის დეტერმინანტის სახით. ამ ფუნქციებს ჩავთვლით ნულოვანი მიახლოების ფუნქციებად და ვიპოვიოთ სისტემის ენერგიის საშუალო მნიშვნელობას. რთული ატომის ჰამილტონიანი სპინური ურთიერთქმედების გარეშე ასე ჩაიწერება:

$$\hat{H} = \sum_{k=1}^N \hat{H}(\mathbf{r}_k) + \frac{1}{2} \sum'_{k,j=1}^N \frac{e^2}{r_{kj}}, \quad (110,15)$$

სადაც $r_{kj} = |\mathbf{r}_k - \mathbf{r}_j|$, ხოლო

$$\hat{H}(\mathbf{r}_k) = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta_k - \frac{Ze^2}{r_k}, \quad (110,16)$$

აქ Ze ატომგულის მუხტია. — Ze^2/r_k წარმოადგენს k -ური ელექტრონისა და გულის ურთიერთქმედების კულონურ ენერგიას, — $\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta_k$ არის k -ური ელექტრონის კინეტიკური ენერგიის ოპერატორი, e^2/r_{kj} აღწერს k -ური და j -ური ელექტრონის კულონურ ურთიერთქმედებას. ჯამის წინ ნახევარი გამოწვეულია იმით, რომ (k,j) წყვილის ურთიერთქმედება ერთხელ გაითვალისწინოთ ($r_{kj}=r_{jk}$), ხოლო შტრიხი ჯამის ნიშანზე გამორიცხავს ელექტრონის თავისთავზე მოქმედებას ($k \neq j$).

ვიპოვოთ რთული ატომის ენერგიის საშუალო მნიშვნელობა

$$\langle E \rangle = \langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle. \quad (110,17)$$

თუ შევიტანთ ჰამილტონიანის (110,15) გამოხატულებას დავინახავთ, რომ (110,17) ორი წევრისაგან შედგება. პირველი არის (110,1) ტიპის ერთნაწილაკობრივი ოპერატორი, მეორე კი (110,9) ტიპის ორ ნაწილაკობრივი ოპერატორი. ამიტომ ჩვენ შეგვიძლია გამოვიყენოთ (110,8) და (110,14) ფორმულები და პირდაპირ დავწეროთ ენერგიისათვის შემდეგი ფორმულა:

$$\begin{aligned} \langle E \rangle = & \sum_{i=1}^N \langle \psi_i(\mathbf{r}) | \hat{H}(\mathbf{r}) | \psi_i(\mathbf{r}) \rangle + \frac{1}{2} \sum'_{k,j=1}^N \left\{ \langle \psi_k(\mathbf{r}) \psi_j(\mathbf{r}') | \frac{e^2}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} | \right. \\ & \left. \psi_k(\mathbf{r}) \psi_j(\mathbf{r}') \rangle - \langle \psi_k(\mathbf{r}) \psi_j(\mathbf{r}') | \frac{e^2}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} | \psi_j(\mathbf{r}) \psi_k(\mathbf{r}') \rangle \right\} \end{aligned} \quad (110,18)$$

ცხადია, რომ

$$H_{ii} = \langle \psi_i | \hat{H} | \psi_i \rangle = \int \psi_i^* \left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta - \frac{Ze^2}{r} \right] \psi_i d\mathbf{r}. \quad (110,19)$$

H_{ii} ერთნაწილაკობრივი ჰამილტონიანის დიაგონალური მატრიცული ელემენტია. თუ $\psi_i(\mathbf{r})$ ტალღური ფუნქციის ქვეშ ვიგულისხმებთ წყალბადისებური ატომის ტალღურ ფუნქციას, მაშინ ცხადია, რომ $H_{ii} = E_i$, სადაც E_i წყალბადისებური ატომის სრული ენერგიაა. ამ შემთხვევაში, (110,18)-ის პირველი წევრი ტოლი იქნება $\sum_{i=1}^N E_i$, ე. ი. — ცალკეულ ელექტრონთა ენერგიების ჯამის.

გადავწეროთ (110,18) ცხადი სახით, გვექნება

$$\begin{aligned} \langle E \rangle = & \sum_{i=1}^N H_{ii} + \frac{e^2}{2} \sum'_{k,j=1}^N \left\{ \int \frac{|\psi_k(\mathbf{r})|^2 |\psi_j(\mathbf{r}')|^2}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} d\mathbf{r} d\mathbf{r}' - \right. \\ & \left. - \int \frac{[\psi_k^*(\mathbf{r}) \psi_k(\mathbf{r}')] [\psi_j(\mathbf{r}) \psi_j^*(\mathbf{r}')] }{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \right\}. \end{aligned} \quad (110,20)$$

თუ შემოვიღებთ აღნიშვნებს:

$$\rho(\mathbf{r}) = -e \sum_{k=1}^N |\psi_k(\mathbf{r})|^2, \quad (110,21)$$

$$\rho(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = -e \sum_{k=1}^N \psi_k^*(\mathbf{r}) \psi_k(\mathbf{r}'), \quad (110,22)$$

სადაც $\rho(\mathbf{r})$ არის ელექტრონული ღრუბლის სრული სიმკვრივე, ხოლო $\rho(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ - გაცვლითი სიმკვრივე, მაშინ (110,20) ფორმულა ასე გადაიწერება:

$$\langle E \rangle = \sum_{i=1}^N H_{ii} + \frac{1}{2} \iint \frac{\rho(\mathbf{r})\rho(\mathbf{r}') - |\rho(\mathbf{r}, \mathbf{r}')|^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d\mathbf{r} d\mathbf{r}', \quad (110,23)$$

ენერგიის ეს მნიშვნელობა ნაპოვნი იყო ფოკის მიერ. როცა გაცვლას არ ვითვალისწინებთ $\rho(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = 0$ და (110,23) გადადის გამოსახულებაში

$$\langle E \rangle = \sum_{i=1}^N H_{ii} + \frac{1}{2} \iint \frac{\rho(\mathbf{r})\rho(\mathbf{r}') d\mathbf{r} d\mathbf{r}'}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}. \quad (110,24)$$

ეს ფორმულა მიღებული იყო ჰარტრის მიერ ელექტრონთა იგივეურობის გათვალისწინების გარეშე. ჰარტრი ნაცვლად სლეთერის დეტერმინანტისა იყენებდა შემდეგ ნამრავლს:

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) = \psi_1(\mathbf{r}_1) \psi_2(\mathbf{r}_2), \dots, \psi_N(\mathbf{r}_N). \quad (110,25)$$

აღვილად შემოწმდება, რომ (110,15) ჰამილტონიანის გასაშუალოებით (110,25) ფუნქციით მართლაც მიიღება (110,24) გამოსახულება¹.

რთული ატომების ენერგიის გამოთვლის ეს მეთოდი გაუმჯობესებულ იქნა ფოკის მიერ. მან, ჰარტრისაგან განსხვავებით, ატომის ტალღური ფუნქციისათვის აიღო სლეთერის დეტერმინანტი. ეს კი იმას ნიშნავს, რომ ენერგიის გამოთვლის ფოკის მეთოდში ელექტრონები ასევე დამოუკიდებლად იქცევიან, ოღონდ გათვალისწინებულია ელექტრონთა იგივეურობის პრინციპი. კერძოდ, ანტისიმეტრიული ფუნქციის აღება ნიშნავს, რომ ელექტრონები ემორჩილებიან პაულის პრინციპს. მიუხედავად ასეთი უხეში მიახლოებისა, რომელიც საფუძვლად უდევს რთული ატომების ენერგიის გამოთვლის ჰარტრი-ფოკის მეთოდს, იგი, როგორც ნულოვანი მიახლოება, მნიშვნელოვან როლს ასრულებს ატომის თეორიაში. კონკრეტულად, ენერგიის საპოვნელად საჭიროა $\psi_i(\mathbf{r})$ ფუნქციების ნაცვლად (110,23)-ში შევიტანოთ წყალბადისებური ატომის ტალღური ფუნქცია და ამოვხსნათ კერძო სახის ინტეგრალები.

თვითშეთანხმებული ველის მეთოდი შემდგომში გაუმჯობესებულ იქნა ჰარტრისა და ფოკის მიერ. როგორც ვიცით, ამ მეთოდის თანახმად, ელექტრონი მოძრაობს ატომგულისა და დანარჩენი ელექტრონების გასაშუალოებულ ველში. განვიხილოთ k -ური ელექტრონი. მისი ურთიერთქმედების ენერგია გულთან ტოლი იქნება — Ze^2/r_k -სი. იგივე ელექტრონი იმოქმედებს დანარჩენი ელექტრონების ელექტრონულ ღრუბლებთანაც. მისი ურთიერთქმედება j -ურ ელექტრონთან, რომელიც გულიდან r_j მანძილზე იმყოფება, ტოლი იქნება გამოსახულების

¹ საინტერესოა აღინიშნოს, რომ ერთნაწილაკობრივი ოპერატორის საშუალო მნიშვნელობა (110,25) ფუნქციით ზუსტად ისეთივე წმდევს იძლევა რასაც გასაშუალოება სლეთერის დეტერმინანტით.

$$\int \frac{e^2}{r_{jh}} |\psi(\mathbf{r}_j)|^2 d\mathbf{r}_j, \quad (110.26)$$

თუ ელექტრონთა რიცხვი ატომში N -ს უდრის. მაშინ k -ური ნაწილაკის ურთი-
ერთქმედების პოტენციალს გულთან და ელექტრონებთან ექნება სახე

$$V(\mathbf{r}_k) = -\frac{Ze^2}{r_k} + \sum_{j=1}^N \int \frac{e^2}{|\mathbf{r}_k - \mathbf{r}_j|} |\psi(\mathbf{r}_j)|^2 d\mathbf{r}_j. \quad (110.27)$$

საჭიროა ამ პოტენციალის შეტანა შრედინგერის განტოლებაში და ამოხსნა. ელექ-
ტრონის ტალღური ფუნქცია შედის ინტეგრალში, ამიტომ გვექნება ინტეგრო-
დიფერენციალური განტოლება, რომლის ამოხსნა შესაძლებელია მამდვერობითი
მიახლოების მეთოდით, მაგალითად, ნჯლოვან მიახლოებაში შეგვიძლია ავიღოთ
წყალბადისებური ატომის ტალღური ფუნქციები. ამ ფუნქციის საშუალებით ვი-
პოვოთ (110.27) პოტენციალურ ენერგიას. შემდეგ მას შევუტანთ შრედინგერის
განტოლებაში და ამოვხსნით. ვიპოვოთ ენერგიას და ტალღურ ფუნქციას. ამ ახა-
ლი ტალღური ფუნქციით შევადგენთ შესწორებულ $V^{(1)}(\mathbf{r}_k)$ პოტენციალს, შემდეგ
კვლავ შევუტანთ შრედინგერის განტოლებაში, ვიპოვოთ ახალ ტალღურ ფუნქციას
და ენერგიას და ა. შ. ამ მეთოდის პრაქტიკული გამოყენება დიდ გამოთვლით
სიძნელეებთან არის დაკავშირებული, ამიტომ აქ მასზე არ შეგჩერდებით.

§ 111. თომას-ფერმის მეთოდი

მიახლოებითი გამოთვლის სრულიად განსხვავებულ მეთოდს წარმოადგენს
თომას-ფერმის მეთოდი¹. პარტრი-ფოკის მეთოდის გამოყენება დაკავშირებულია
დიდ ტექნიკურ სიძნელეებთან. ამ მეთოდის გამოყენება მძიმე ატომებისათვის
განსაკუთრებით რთულდება, მაგრამ, საბედნიეროდ, სწორედ მძიმე ატომებისათ-
ვის გამოიყენება თომას-ფერმის მეთოდი, რომელიც საშუალებას გვაძლევს გამოვ-
თვალოთ მუხტისა და ველის განაწილება ატომში. თომასისა და ფერმის მეთოდი
არ მოითხოვს შრედინგერის განტოლების ამოხსნას და ემყარება მხოლოდ კვან-
ტური სტატისტიკის ელემენტებსა და პაულის პრინციპს. ამიტომ ამ მეთოდს
ხშირად სტატისტიკურ მეთოდსაც უწოდებენ. მისი საზუსტე გაცილებით ნაკლებია,
ვიდრე თვითშეთანხმებული ველის მეთოდისა, სამაგიეროდ, იგი ხასიათდება საგრძ-
ნობი სიმარტივით.

თომას-ფერმის მეთოდში იგულისხმება, რომ ელექტრონები რთულ ატო-
მებში, რადგან მათ უმრავლესობას აქვს დიდი კვანტური რიცხვები, შეგვიძლია
განვიხილოთ როგორც ისეთი კვაზიკლასიკური ნაწილაკები, რომელთათვისაც
აზრი აქვს ფაზური უჯრედის შემოღებას. რადგან სტატისტიკური მეთოდის
გამოყენება მოითხოვს ნაწილაკთა ძალიან დიდ რიცხვს, ამიტომ ვიგულისხმებთ,
რომ ატომები შედგება ნაწილაკთა უსასრულო რიცხვისაგან, ოღონდ ისე, რომ
ატომის სრული მუხტი იყოს Ze -ს ტოლი, რაც ტოლფასია დაშვებისა, რომ ატო-
მის Z ელექტრონის მუხტის e სიმკვრივე უწყვეტი სიდიდეა.

დავუშვათ, ელექტრონის განაწილება ატომგულის ირგვლივ რადიალური
სიმეტრიისაა, ატომში ელექტრონის სრულ ენერგიას ექნება სახე

$$E = \frac{p^2}{2\mu} - e\varphi(r). \quad (111.1)$$

¹ L. H. Thomas, Proc. Camb. Phil. Soc. 23, 542, (1927); E. Fermi, Zeits. f. Phys. 48, 73; 49, 550 (1928).

სადაც $e\varphi$ პოტენციალური ენერგიაა, φ წარმოადგენს ურთიერთქმედების პოტენციალს. პოტენციალური ენერგია ისე შევარჩიოთ, რომ უსასრულობაში ნულის ტოლი იყოს; მაშინ ბმული ელექტრონები ისინი იქნებიან, რომელთათვისაც $E < 0$. $E = 0$ შეესაბამება ბმული და თავისუფალი ელექტრონების საზღვარს. ენერგიის ეს მნიშვნელობა განსაზღვრავს იმპულსის იმ p_0 მაქსიმალურ სიდიდეს, რომლისთვისაც, როცა $p \leq p_0$, ელექტრონები შეიძლება დაკავებულ იქნას ატომის შიგნით. ჩვენთვის საჭიროა სწორედ ისეთი ელექტრონების განხილვა, რომელთა იმპულსი $p \leq p_0$. იმპულსის ზღვრულ მნიშვნელობას მოგვცემს (111,1) ფორმულა. $E = 0$ შემთხვევაში მივიღებთ

$$p_0 = \sqrt{2\mu e\varphi(r)}, \quad (111,2)$$

როგორც ვხედავთ, იმპულსი სიდიდით შემოსაზღვრულია, მიმართულებით კი — ნებისმიერი. ნორმალურ მდგომარეობაში მყოფი ატომის ელექტრონები, რომლებიც მოთავსებულია τ მოცულობაში, უნდა ავსებდეს ფაზური სივრცის უჯრედებს, რომლებიც შეესაბამება იმპულსის მნიშვნელობას ნულიდან p_0 მაქსიმალურ მნიშვნელობამდე. §58-ში ვაჩვენეთ, რომ მდგომარეობათა რიცხვი L წიბოს მქონე კუბში, რომლის საზღვარზე ტალღური ფუნქცია აკმაყოფილებს პერიოდულობის პირობას, მოიცემა ფორმულით

$$\left(\frac{L}{2\pi\hbar}\right)^3 p^2 dp d\Omega, \quad (111,3)$$

სადაც $p^2 dp d\Omega = dp$ წარმოადგენს იმპულსური სივრცის მოცულობის ელემენტს. ჩვენ გვინტერესებს მდგომარეობათა რიცხვი, რომლისთვისაც $0 \leq p \leq p_0$. ამისათვის საჭიროა ამ გამოსახულების ინტეგრალი ავიღოთ $(0, p_0)$ საზღვრებში. ამგვარად, ფაზურ სივრცეში გვექნება

$$\frac{4\pi p_0^3 L^3}{3(2\pi\hbar)^3} \quad (111,4)$$

უჯრედი. რადგან, პაულის პრინციპის თანახმად, თითოეულ მდგომარეობაში შეიძლება მოთავსდეს ორი ელექტრონი საწინააღმდეგო სპინებით, ამიტომ τ მოცულობაში $0 \leq p \leq p_0$ იმპულსებით მოთავსებული იქნება ელექტრონთა შემდეგი რიცხვი

$$n = \frac{8\pi p_0^3}{3(2\pi\hbar)^3}, \quad (111,5)$$

(111,2) გამოსახულების თანახმად, ეს რიცხვი იქნება r -ის ფუნქცია

$$n = \frac{[2\mu e\varphi(r)]^{3/2}}{3\pi^2\hbar^3}. \quad (111,6)$$

სათანადო მუხტის სიმკვრივეს ρ ექნება სახე

$$\rho(r) = -e \frac{[2\mu e\varphi(r)]^{3/2}}{3\pi^2\hbar^3}. \quad (111,7)$$

მეორე მხრივ, პუასონის განტოლების თანახმად, სიმკვრივე პოტენციალურ ენერგიასთან დაკავშირებულია განტოლებით

$$\Delta\varphi = -4\pi\rho(r). \quad (111,8)$$

რადგან რადიალური სიმეტრიის დროს $\Delta\varphi = \left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} \right) \varphi = \frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} (r\varphi)$, ამიტომ ატომის პოტენციალისათვის გვექნება განტოლება

$$\frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} (r\varphi) = \frac{4e}{3\pi\hbar^3} (2\mu e)^{3/2} \varphi^{3/2}(r). \quad (111,9)$$

ატომის შიგნით ველის განაწილების მოსაძებნად საჭიროა (111,9) განტოლების ამოხსნა სათანადო სასაზღვრო პირობებში; როცა $r \rightarrow 0$, მაშინ პოტენციალური ენერგია, ძირითადად, ატომგულის მიერ არის გამოწვეული და ამიტომ $\varphi(r) \rightarrow \frac{Ze^2}{r}$; ხოლო როცა $r \rightarrow \infty$, მაშინ სრული მუხტი, რომელიც მოთავსებულია r რადიუსიან სფეროში, ნულის ტოლი უნდა იყოს; ამიტომ $\varphi(r)$ უფრო ჩქარა კლებულობს, ვიდრე $\frac{1}{r}$ და, ამგვარად, $r\varphi(r) \rightarrow 0$, როცა $r \rightarrow \infty$. მივიღეთ შემდეგი სასაზღვრო პირობები:

$$\begin{aligned} r\varphi &= Ze, \quad \text{როცა } r \rightarrow 0, \\ r\varphi &= 0, \quad \text{როცა } r \rightarrow \infty. \end{aligned} \quad (111,10)$$

(111,9) განტოლების გამარტივების მიზნით შემოვიღოთ ახალი აღნიშვნები:

$$\varphi(r) = \frac{Ze}{r} \chi(x), \quad r = xb. \quad (111,11)$$

b ისე შევარჩიოთ, რომ განტოლებაში არ შემოვიდეს მუდმივები. ახალ ცვლადებში (111,9) განტოლება მიიღებს სახეს

$$x^{1/2} \frac{d^2 \chi(x)}{dx^2} = b^{3/2} \frac{4e}{3\pi\hbar^3} (2\mu e)^{3/2} (Ze)^{1/2} \chi^{3/2}(x) \quad (111,12)$$

ამ განტოლებაში შემავალი b მუდმივი ასე შევარჩიოთ:

$$b = \frac{1}{2} \left(\frac{3\pi\hbar^3}{4e} \right)^{2/3} \frac{1}{\mu e (Ze)^{1/3}}, \quad (111,13)$$

მაშინ საბოლოოდ მივიღებთ შემდეგ განტოლებას:

$$x^{1/2} \frac{d^2 \chi(x)}{dx^2} = \chi^{3/2}(x), \quad (111,14)$$

რომელსაც თომას-ფერმის განტოლებას უწოდებენ. ახალ აღნიშვნებში (111,10) სასაზღვრო პირობები ასე დაიწერება:

$$\chi(0) = 1; \quad \chi(\infty) = 0. \quad (111,15)$$

თომას-ფერმის განტოლება და სასაზღვრო პირობები არაფითარ პარამეტრებს აღარ შეიცავს, ამიტომ $\chi(x)$ ფუნქცია იქნება უნივერსალური ფუნქცია. მაშასადამე, საკმარისია ერთხელ ვიპოვოთ (111,14) განტოლების ამონახსნი, რომ შემდეგ იგი გამოვიყენოთ ნებისმიერი ატომისათვის. ამ განტოლების ამოხსნა შეიძლება რიცხობრივი მეთოდით. არსებობს $\chi(x)$ ფუნქციის ცხრილები x -ის საკმარისად ფართო ინტერვალისათვის.

თუ ატომგულიდან დაშორება გამოხატულია x -ის საშუალებით, მაშინ ელექტრული სიმკვრივე ყველა ატომში ერთნაირი იქნება. რადგან ერთსა და იმავე x მანძილზე ყველა ატომისათვის $\chi(x)$ ერთი და იგივეა, ამიტომ r -ის შესაბამისი

მნიშვნელობები სხვადასხვა ატომისათვის პროპორციულია b -სი, რომელიც თავის მხრივ ტოლია

$$b = \frac{1}{2} \left(\frac{3\pi}{4} \right)^{2/3} \frac{a_0}{Z^{1/3}} = 0,885 \frac{a_0}{Z^{1/3}}, \quad (111,16)$$

სადაც a_0 ბორის პირველი ორბიტის რადიუსია.
მანძილს

$$R = 0,885 \frac{a_0}{Z^{1/3}}, \quad (111,17)$$

უწოდებენ ატომის საშუალო რადიუსს.

თუ დავუბრუნდებით ჩვეულებრივ ცვლადებს, $\chi(x)$ ფუნქცია ყოველი Z -ისათვის მოგვცემს პოტენციალის შემდეგი სახის განაწილებას:

$$\varphi(r) = \frac{Ze}{r} \chi \left(\frac{Z^{1/3}}{0,885 a_0} r \right), \quad (111,18)$$

ახლა გამოვთვალოთ ატომის დამახასიათებელი ზოგიერთი სიდიდე თომას-ფერმის მეთოდზე დაყრდნობით.

1. ელექტრონის საშუალო სიჩქარე ატომში. როგორც ვნახეთ ატომის საშუალო რადიუსი $R \sim a_0 / Z^{1/3}$, ამიტომ ატომის საშუალო პოტენციალური ენერგია

$$\bar{V} \sim ZZe^2/R = \frac{Z^{7/3} e^4 \mu}{0,885 \hbar^2}, \text{ ე. ი. ატომის საშუალო პოტენციალური ენერგია}$$

პროპორციულია $Z^{7/3}$ -ის. ელექტრონის სიჩქარის აბსოლუტური მნიშვნელობა იყოს v , მაშინ კინეტიკური ენერგიის საშუალო მნიშვნელობისათვის გვქვნება $\bar{T} \sim Z \mu v^2 / 2$. გამოვიყენოთ ვირიალის თეორემა $2\bar{T} = n\bar{V}$, სადაც კულონური ველის შემთხვევაში $n = -1$. მაშასადამე, $|\bar{V}| = 2\bar{T}$ და v -სათვის მივიღებთ

$$\bar{v} \sim Z^{2/3} \frac{e^2}{\hbar}. \quad (111,19)$$

ამგვარად, თომას-ფერმის მოდელის თანახმად, ატომში ელექტრონის საშუალო სიჩქარე $Z^{2/3}$ -ის პროპორციულია.

2. ელექტრონის სრული იონიზაციის ენერგია. თომას-ფერმის მოდელით შეგვიძლია გამოვთვალოთ აგრეთვე სრული იონიზაციის x ენერგია; ე. ი. ის მინიმალური ენერგია, რომელიც საჭიროა დაიხარჯოს ნეიტრალური ატომიდან ყველა ელექტრონის გასათავისუფლებლად. ვირიალის თეორემის თანახმად, ეს ენერგია ტოლია სიდიდის $\bar{\epsilon} = \bar{T} + \bar{V} = -\frac{1}{2}\bar{V} + \bar{V} = \frac{1}{2}\bar{V}$. როგორც ზემოთ დავინახეთ

$$\bar{V} = Z^{7/3} \frac{e^4 \mu}{0,885 \hbar^2},$$

ამიტომ

$$\bar{\epsilon} \sim \frac{Z^{7/3}}{1,770} \frac{e^4 \mu}{\hbar^2}. \quad (111,20)$$

თუ შევიტანთ რიცხვით სიდიდეებს მივიღებთ $\bar{\epsilon} \approx 15 Z^{7/4} eV$, რაც კარგად ეთანხმება ექსპერიმენტულ მნიშვნელობებს.

შ. ელექტრონის მომენტის საშუალო მნიშვნელობა. რადგან თომას-ფერმის მეთოდში ელექტრონები კვაზიკლასიკურად განიხილება, ამიტომ იმპულსის მომენტისათვის შეგვიძლია გამოვიყენოთ ფორმულა $\mathbf{l} = [\mathbf{r} \times \mathbf{p}]$, საიდანაც $\bar{l} \sim R p$, თუ ამ ფორმულაში შევიტანთ $R \sim a_0 / Z^{1/3}$ და $\bar{p} \sim Z^{2/3} e^2 / \hbar$ მივიღებთ

$$\bar{l} \sim Z^{1/3} \hbar. \quad (111,21)$$

რადგან დიდი მომენტებისათვის $\bar{l} \sim l \hbar$, ამიტომ აზიმუტალური კვანტური რიცხვი $l \sim Z^{1/3}$. პირიქითაც, ატომში l -ის მოცემული მნიშვნელობა შეგვხვდება ისეთი Z -ისათვის (ე. ი. ისეთი ატომისათვის) რომელიც აკმაყოფილებს პირობას

$$Z = \text{const } l^3. \quad (111,22)$$

უფრო ზუსტი გამოთვლები, რომლებიც ეყრდნობა მომენტის კვაზიკლასიკურ ფორმულას გვაძლევს

$$Z = 0,155(2l + 1)^3. \quad (111,23)$$

ამ ფორმულის თანახმად $l=2$ ელექტრონები (ე. ი. d -ელექტრონები) გვხვდება $Z=19$ -ის დროს ($Z=19,375$), ე. ი. კალიუმის ატომში, ხოლო $l=3$ (ე. ი. f -ელექტრონები) $Z=53$ -ისათვის.

თომას-ფერმის მეთოდი ფერმის მიერ გამოყენებული იყო ელემენტთა პერიოდული სისტემის თავისებურებათა დასადგენად. შემდგომში თომას ფერმის მეთოდი გაუმჯობესებული იქნა დირაკის მიერ, რომელმაც ამ მეთოდში გაითვალისწინა გაცვლითი ეფექტები.

§ 112. რთული ატომების ზოგადი დახასიათება

ატომებში, როცა ელექტრონთა რიცხვი ერთზე მეტია, საქმე გვაქვს რთულ ურთიერთქმედებასთან. ელექტრონები ურთიერთქმედებენ ერთმანეთთან და ატომის გულთან. ცხადია, ეს ურთიერთქმედება მიუხედავად იმისა, რომ ორნაწილაკობრივი კულონური ველი ცენტრალურია, აღარ ატარებს ცენტრალურ ხასიათს. ამიტომ, მკაცრად რომ ვიმსჯელოთ, რთული ატომის მდგომარეობა უნდა განვიხილოთ როგორც ერთი მთლიანი სისტემის კვანტური მდგომარეობა, რომელიც საჭიროა დახასიათდეს მთლიანი სისტემის კვანტური რიცხვებით. სამწუხაროდ, ამოცანის ასეთნაირად გადაწყვეტა შეუძლებელია. მაგრამ გამოირკვა, რომ ატომებში, ძალიან კარგი მიახლოებით, შეგვიძლია შემოვიღოთ გარკვეული გასაშუალოებული ცენტრალური ველი, ე. წ. თვითშეთანხმებული ველი, და განვიხილოთ ამ ველში ცალკეულ ელექტრონთა კვანტური მდგომარეობები, როგორც ვიცით, ცენტრალურ ველში თითოეული ელექტრონის კვანტური მდგომარეობის დასახასიათებლად შეიძლება გამოვიყენოთ n, l, m_l, m_s კვანტური რიცხვები, რთული ატომის სრული მდგომარეობა კი შეგვიძლია ვიპოვოთ ცალკეული ელექტრონების მდგომარეობათა საშუალებით.

როგორც დავინახეთ, მხოლოდ წყალბადის ატომის ენერგია არ არის დამოკიდებული l აზიმუტალურ კვანტურ რიცხვზე. ეს გარემოება არაა დამახასიათებელი ცენტრალური ველისათვის, იგი გამოწვეულია სუფთა კულონური ველის თავისებურებით. ყველა დანარჩენ ატომში, რომელთათვისაც ავიღებთ ცენტრა-

ლორი ველის მიახლოებას, ენერგია (გარდა მთავარი n კვანტური რიცხვისა) დამოუკიდებელი იქნება l -ზედაც. ამასთანავე, უნდა აღინიშნოს, რომ ენერგია l -ზე მეტად მნიშვნელოვნადაა დამოკიდებული. ეს გარემოება შეგვიძლია ნათლად წარმოვიდგინოთ შემდეგი მსჯელობით: ცენტრალური სიმეტრიის ველში ტალღური ფუნქციის რადიალური ნაწილი გულიდან მცირე მანძილებზე r -ის პროპორციულია, ე. ი. ალბათობა იმისა, რომ ელექტრონი გულთან ახლოს იყოს, მით ნაკლებია, რაც დიდია l . ამიტომაც კულონური ველი ელექტრონზე დიდი l -ებისათვის უფრო ნაკლებად მოქმედებს, ვიდრე მცირე l -ების შემთხვევაში. ამის გამო, მრავალელექტრონიან ატომებში არსებობს ერთგვარი „შეჯიბრი“ l და n კვანტური რიცხვებს შორის. ამიტომ, ხშირად, უფრო ნაკლები ენერგია მიიღება იმ შემთხვევაში, როცა n იზრდება l -ის სათანადო შემცირებით, ვიდრე მაშინ, როცა n -ს უცვლელს ვტოვებთ და ვადიდებთ l -ს.

ამგვარად, რთულ ატომებში ელექტრონები უნდა გავანაწილოთ მოცემული n და $l(m_l$ და $m_s)$ კვანტური რიცხვების მიხედვით. ამ ატომებში ელექტრონთა განაწილებას n და l სხვადასხვა მდგომარეობების მიხედვით უწოდებენ ელექტრონთა კონფიგურაციას.

რთულ ატომებში ცალკეული ელექტრონების მდგომარეობათა დასახასიათებლად შემოღებულია შემდეგი აღნიშვნა:

$$nl^N, \quad (112,1)$$

სადაც l -ის ნაცვლად უნდა შევიტანოთ მისი ასოითი გამოსახულება

$$l=0, 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7 \dots$$

$$s, p, d, f, g, h, i, k, \dots \quad (112,2)$$

n წარმოადგენს მთავარ კვანტურ რიცხვს. იგი მიუთითებს, თუ მთავარი კვანტური რიცხვის რომელ მნიშვნელობას შეესაბამება l , ბოლოს, N აღნიშნავს, თუ რამდენი ელექტრონი გვაქვს l -ის მოცემული მნიშვნელობით. ასე მაგალითად, $2p^5$ ნიშნავს, რომ 5 ელექტრონია ისეთი, რომელსაც აქვს $n=2$ და $l=1$.

გამოვარკვეით რამდენი ელექტრონი შეიძლება გვქონდეს n და l -ით დახასიათებულ მდგომარეობაში. რადგან მომენტს აქვს $2l+1$ ორიენტაცია ელექტრონის სპინს $\pm \frac{1}{2}$ —ორი, ამიტომ მოცემული მომენტისათვის გვაქვს $2(2l+1)$ მდგომარეობა; სახელდობრ, s -მდგომარეობაში გვაქვს 2 ელექტრონი, p -მდგომარეობაში — 6, d -მდგომარეობაში — 10, f -მდგომარეობაში — 14 და ა. შ. მოცემული n -ისათვის l -ს შეუძლია მიიღოს $n-1$ მნიშვნელობა. ამიტომაც, ელექტრონთა სრული რიცხვი მოცემული n -ის დროს ტოლი იქნება

$$\sum_{l=0}^{n-1} 2(2l+1) = 2 \{ 1+3+5+\dots+(2n-1) \} = 2n^2. \quad (112,3)$$

ელექტრონთა იმ რიცხვს, რომელიც ავსებს ყველა მდგომარეობას მოცემული n და l -ით, უწოდებენ „ჩაკეტილ გარსს“. მაშასადამე, ჩაკეტილ გარსში ელექტრონთა შესაძლო მაქსიმალური რიცხვი არის $2(2l+1)$.

გამოვარკვეით რა წესით უნდა შეიკრიბოს მოცემული გარსის ელექტრონთა მომენტები და გამოვძინარე აქედან რომელი კვანტური რიცხვებით უნდა დახასიათდეს ატომის მდგომარეობა. მომენტთა შეკრების მეთოდი არსებობდა და მოკიდებული ელექტრონთა რიცხვზე. კერძოდ, ატომებში, რომელთა ელექტრონთა რიცხვი არც თუ ისე დიდია გამოიყენება ე. წ. რასელ-საუნდერსის მეთოდი,

მძიმე ატომებში კი განიხილება „ქე“-ბმის მეთოდი. ჯერ განვიხილოთ პირველი მათგანი.

რასელ-საუნდერსის სქემა. როგორც დავინახავთ რელატივისტური კვანტური მექანიკის განხილვის დროს ცალკე სპინი და ცალკე ორბიტალური მომენტი არ ინახება, ინახება მხოლოდ ელექტრონის სრული მომენტი $j = l + s$. ამიტომ მდგომარეობის დახასიათებას აზრი აქვს მხოლოდ სრული მომენტის საშუალებით. ატომის სრული მომენტი კი უნდა განვიხილოთ როგორც $J = \sum j$. მაგრამ ატომებში, განსაკუთრებით კი მსუბუქ ატომებში, ძალიან კარგი მიახლოებით ცალკე ინახება როგორც სპინი, ისე ორბიტალური მომენტი. ამიტომ ატომის სრული მომენტი შეიძლება მივიღოთ სქემით, რომელსაც რასელ-საუნდერსის ან „LS“ სქემას უწოდებენ¹. ამ სქემის მიხედვით ატომის სრული სპინი მიიღება ცალკეულ ელექტრონთა სპინების შეკრებით, ე. ი. $S = \sum s_i$. ასევე, ატომის ორბიტალური მომენტი მიიღება თითოეულ ელექტრონის ორბიტალური მომენტების შეკრებით, ე. ი. $L = \sum l_i$. ატომის სრული მომენტი კი წარმოადგენს ამ ორი მომენტის ჯამს $J = L + S$. ცხადია, რომ ამ სქემით მიღებული სრული მომენტიც დაემთხვევა $\sum j_i$ მნიშვნელობას.

როცა რასელ-საუნდერსის სქემაში შესაძლებელია სპინ-ორბიტალური ურთიერთქმედების უგულვებელყოფა, მაშინ შეინახება არა მხოლოდ სრული მომენტი, არამედ სრული სპინიცა და სრული ორბიტალური მომენტიც; ამიტომ მდგომარეობა შეგვიძლია დავახასიათოთ J, L, S, M_J და M_S კვანტური რიცხვებით, რომლებიც შემდეგი ფორმულებით განისაზღვრებიან:

$$\begin{aligned} J^2 &= \hbar^2 J(J+1), & J_z &= M_J \hbar, \\ L^2 &= \hbar^2 L(L+1), & L_z &= M_L \hbar, \\ S^2 &= \hbar^2 S(S+1), & S_z &= M_S \hbar. \end{aligned} \quad (112,4)$$

ადვილი საჩვენებელია, რომ რთული ატომის ენერგია დამოკიდებული იქნება როგორც L -ზე, ისე S -ზე. სხედასხვა ორბიტალური L და სპინური S მომენტების შესაბამისი ენერგიები ძალიან განსხვავდება ერთმანეთისაგან. ეს განსხვავება გაპირობებულია ელექტრონთა შორის არსებული ელექტროსტატიკური ურთიერთქმედებით. ერთი და იგივე n -ით დახასიათებულ მდგომარეობაში ორი ელექტრონის ურთიერთქმედების ელექტროსტატიკური ენერგია მიახლოებით ტოლია

$$e^2 \int \frac{|\psi_{l_1 m_1}(\mathbf{r}_1)|^2 |\psi_{l_2 m_2}(\mathbf{r}_2)|^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2, \quad (112,5)$$

სადაც $|\psi_{l_1 m_1}(\mathbf{r}_1)|^2$ და $|\psi_{l_2 m_2}(\mathbf{r}_2)|^2$ ელექტრული ღრუბლების სიმკვრივეებია $\mathbf{r}_1$ და $\mathbf{r}_2$ წერტილებში. დავუშვათ, გვაქვს p^2 ელექტრონები, ე. ი. $l_1 = 1$ ($m_1 = 0, \pm 1$) და $l_2 = 1$ ($m_2 = 0, \pm 1$) მაშინ, მომენტთა შეკრების წესის თანახმად, სრული ორბიტალური მომენტი შეიძლება იღებდეს მნიშვნელობებს: $L = 2, 1, 0$; ამასთან $L = 2$ -ს ექნება პროექციები $M = \pm 2, \pm 1, 0$, ხოლო $L = 1$ -ს $\pm 1, 0$. განვიხილოთ მაქსიმალური პროექციის მნიშვნელობები. $L = 2$ -ის შემთხვევაში $M = 2$, და გვექნება $m_1 = m_2 = 1$, ხოლო როცა $L = 1$ და $M = 1$, შეგვიძლია ავიღოთ $m_1 = 1$ და $m_2 = 0$. ასე რომ, ენერგიისათვის შესაბამისად მივიღებთ

¹ ამ სქემას, ხშირად, ნორმალურ ბმასაც უწოდებენ.

$$e^2 \int \frac{|\psi_{1,1}(\mathbf{r}_1)|^2 |\psi_{1,1}(\mathbf{r}_2)|^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2; \quad e^2 \int \frac{|\psi_{1,1}(\mathbf{r}_1)|^2 |\psi_{1,0}(\mathbf{r}_2)|^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \quad (112,6)$$

ეს ორი ინტეგრალი ერთმანეთისაგან განსხვავდება. ამგვარად, აღებული კონფიგურაციის ენერგია, მართლაც, დამოკიდებულია სრულ ორბიტალურ L მომენტზე. იმის გამო, რომ ელექტრონები იგივეური ნაწილაკებია და მათთვის ადგილი აქვს პაულის პრინციპს, ელექტროსტატიკური ენერგია აგრეთვე დამოკიდებული იქნება სრულ S სპინზე. ეს გამომდინარეობს იქიდან, რომ სპინის მოცემული მნიშვნელობის დროს გარკვეულად იზღუდება კოორდინატული ტალღური ფუნქციების შერჩევა; რადგან კოორდინატული ტალღური ფუნქციის სიმეტრიულობა დამოკიდებულია ორბიტალურ მომენტზე, ამიტომ ერთი და იგივე n და l -ის მქონე ელექტრონების სპინების შეკრებისას საჭიროა სათანადოდ ავარჩიოთ მათი ორბიტალური მომენტების მაგნიტური კვანტური რიცხვებიც.

ამგვარად, ვასკენით: თუ არ გავითვალისწინებთ ელექტრონების სპინებსა და ორბიტალურ მომენტებს შორის ურთიერთქმედებას, რთული ატომების ენერგიას განსაზღვრავს L და S -ის აბსოლუტური მნიშვნელობები. ზემოთ ჩამოთვლილი კვანტური რიცხვები დამოუკიდებელნი არ არიან. ამიტომ მდგომარეობის დასახასიათებლად საკმარისია ან (L, S, M_L, M_S) ანდა $(LSJM_J)$ რიცხვები. ენერგია დამოკიდებული არ იქნება M_L და M_S კვანტურ რიცხვებზე, ე. ი. ადგილი ექნება $(2L+1)(2S+1)$ ჯერად გადაგვარებას¹.

ახლა ვნახოთ რას მოგვცემს სპინ-ორბიტალური ურთიერთქმედების გათვალისწინება. „ LS “ ბმის დროს სპინ-ორბიტალური ურთიერთქმედება გაითვალისწინება როგორც მცირე შემფოთება, როგორც ვიცით, ცალკეული ელექტრონის სპინ-ორბიტალური ურთიერთქმედების ენერგია პროპორციულია სპინური და ორბიტალური მომენტების სკალარული ნამრავლის $(\hat{S}_i \hat{L}_i)$. თვითშეთანხმებული ველის მიახლოებაში მთელი ატომისათვის გვექნება შემდეგი გამოსახულება:

$$\sum_{i=1}^N a_i (\hat{S}_i \hat{L}_i), \quad (112,7)$$

სადაც a_i პროპორციულობის კოეფიციენტი. ჩვენი მიზანია (112,7) ურთიერთქმედება გამოვხატოთ სრული ორბიტალური L და სრული S სპინის ოპერატორების საშუალებით. მოვახდინოთ (112,7) გამოსახულების გასაშუალოება ვთქვათ სრული S სპინი სივრცეში უძრავადაა დამაგრებული და გასაშუალოება მოვახდინოთ ჯამში შემავალი ცალკეულ ელექტრონთა სპინებით. ცხადია, რომ გასაშუალოების შედეგად დაგვრჩება ცალკეული ელექტრონის სპინის პროექცია სრულ S სპინზე, ე. ი. $\langle \hat{S}_i \rangle = \gamma \hat{S}$. რადგან გასაშუალოება მოვახდინეთ დაფიქსირებული სრული სპინისათვის, ამიტომ $\langle \hat{S}_i \rangle = \gamma \hat{S}$ უნდა ჩავთვალოთ ოპერატორად. (112,7) გამოსახულების გასაშუალოება სრული დაფიქსირებული L მომენტისათვის აგრეთვე მოგვცემს, რომ $\langle \hat{L}_i \rangle = L$. მაშასადამე, რთულ ატომში სპინ-ორბიტალური ურთიერთქმედების შესაბამის ოპერატორს ექნება შემდეგი გამოხატულება:

$$\hat{H}'_{SL} = A (\hat{S} \hat{L}) \quad (112,8)$$

¹ ცხადია, რომ ჯამი $(2L+1)$ -დან J -ს ყველა შესაძლო მნიშვნელობებით $(2L+1)(2S+1)$ -ს ემთხვევა.

სადაც A შეიძლება დამოკიდებული იყოს S და L -ზე. (112,8) ოპერატორი უნდა ღებამატოს თვითშეთანხმებული ველის ჰამილტონიანს. ისევე როგორც ერთი ელექტრონის განხილვის დროს ვაჩვენეთ, სპინ ორბიტალური ურთიერთქმედების გამო, სრული ჰამილტონიანი კომუტატორი იქნება $\hat{J}^2, \hat{J}_z, \hat{L}^2, \hat{S}^2$ ოპერატორებთან, ხოლო $\hat{L}_z$ და $\hat{S}_z$ -თან იგი კომუტატორი აღარ იქნება. ეს იმას ნიშნავს, რომ $\hat{J}^2, \hat{J}_z$ კვლავ მოძრაობის ინტეგრალებია, ხოლო $\hat{L}$ და $\hat{S}$ აღარ ინახება, თუმცა $\hat{L}^2$ და $\hat{S}^2$ -ის მუდმივობას ამ შემთხვევაშიაც ექნება ადგილი. რადგან $\hat{J} = \hat{L} + \hat{S}$, ამიტომ, (112,4) ფორმულების თანახმად, $(\hat{S} \hat{L})$ ოპერატორის საკუთარ მნიშვნელობებს ექნება სახე

$$(\hat{S} \hat{L}) = \frac{\hbar^2}{2} \{ J(J+1) - L(L+1) - S(S+1) \}, \quad (112,9)$$

ე. ი. სპინ-ორბიტალური ურთიერთქმედების შედეგად ენერგეტული დონეები მოცემული L და S -ისათვის გაიხლიჩება J -ს სხვადასხვა შესაძლო მნიშვნელობების მიხედვით. მოცემული L და S -ისათვის სულ გვექნება $2L+1$ ან $2S+1$ დონე სხვადასხვა J -თი. რადგან $|L-S| \leq J \leq L+S$, ამიტომ როცა $L > S$ გახლეჩილი დონეთა რაოდენობა $(2S+1)$ -ის ტოლი იქნება, ხოლო, როცა $L < S$ დონეთა რიცხვი იქნება $(2L+1)$. დონეების გახლეჩას „ LS “ ურთიერთქმედების გამო მულტიპლეტურ სტრუქტურას უწოდებენ. ზემოთქმულის ძალით მულტიპლეტობას განსაზღვრავს ხან $2S+1$ და ხან $2L+1$; მიუხედავად ამისა, მულტიპლეტობა ყოველთვის $(2S+1)$ -ით აღინიშნება. ატომის ენერგეტული დონეებისათვის ან, როგორც ხშირად ამბობენ, სპექტრალური თერმებისათვის შემოაქვთ აღნიშვნა

$$^{2S+1}L_J, \quad (112,10)$$

სადაც L -ისათვის უნდა ჩაისვას ასოითი გამოხატულება:

$$\begin{aligned} L &= 0, 1, 2, 3, 4, 5, 6, \dots \\ S, P, D, F, G, H, I, J, \dots \end{aligned} \quad (112,11)$$

(112,10) ფორმულაში S მიუთითებს ატომის სპინს J კი სრულ მომენტს. სპინ ორბიტალური ურთიერთქმედების დროს მდგომარეობას ახასიათებენ $(LSJM_J)$ კვანტური რიცხვებით.

როცა გვაინტერესებს ატომის მდგომარეობის სრული დახასიათება, მაშინ ცალკეული ელექტრონებით დახასიათებულ მდგომარეობას უნდა მივუწეროთ შესაბამისი მულტიპლეტური მდგომარეობაც. მაგალითად, $(1S^2)^1S_0$ გვიჩვენებს, რომ $n=1$ და $l=0$ მდგომარეობაში გვაქვს ორი ელექტრონი სრული მომენტებით $L=0$, $S=0$, და $J=0$.

ჰუნდის ემპირიული წესები. რასელ-საუნდერსის სქემაში რთული ატომების სტაციონარული მდგომარეობების დასახასიათებლად საჭიროა განისაზღვროს ელექტრონთა კონფიგურაცია, რომელსაც შეესაბამება ენერგიის მინიმალური მნიშვნელობა. ამ საკითხის გარკვევაში გვეხმარება ჰუნდის ემპირიული წესი.

ვთქვათ გვაქვს ერთი და იგივე n ობორტ სხვადასხვა S და L -ის მქონე თერმი. როგორც ზემოთ იყო აღნიშნული, ელექტრონთა ელექტროსტატიკური ურთიერთქმედების გამო, ელექტრონთა ერთსა და იმავე კონფიგურაციას შეიძლება სხვადასხვა L და S მნიშვნელობები შეესაბამებოდეს, ამიტომ სათანადო ენერგეტული დონეებიც განსხვავდება ერთმანეთისაგან. საკითხს, თუ რომელი მათგანია ყველაზე დაბალი, უპასუხებს ე. წ. ჰუნდის პირველი წესი: ნაკლები ენერგია აქვს იმ თერმს, რომელსაც შეესაბამება ელექტრონთა მოცემული კონფიგურაციისათვის შესაძლო

S -ის მაქსიმალური სიდიდე და ამ J -ისათვის შესაძლო L -ის მაქსიმალური მნიშვნელობა. ე. ი. საჭიროა ყველა თერმებიდან ამოვარჩიოთ ისეთი, რომელსაც შეესაბამება სრული სპინის მაქსიმალური მნიშვნელობა, შემდეგ კი მოვძებნოთ ამ სპინისათვის რომელ თერმს აქვს სრული ორბიტალური მომენტის მაქსიმალური სიდიდე.

არსებობს ჰუნდის მეორე ემპირიული წესი, რომელიც საშუალებას გვაძლევს ვიპოვოთ ელექტრონთა კონფიგურაციის სრული მომენტი. ჰუნდის მეორე წესი გვეუბნება: თუ ელექტრონთა კონფიგურაცია ისეთია, რომ არასრულად შევსებულ „ჩაკეტილ გარსში“ გვაქვს ამ გარსისათვის შესაძლო ელექტრონთა მაქსიმალური რიცხვის ნახევარზე, ე. ი. $(2l+1)$ -ზე ნაკლები, მაშინ $J = |L - S|$, ხოლო თუ მეტი $J = L + S$.

რთული ატომების თერმების მოძებნა. გამოვიყენოთ „ LS “ ბმის მეთოდი და ვიპოვოთ ელექტრონთა კონფიგურაციების თერმები. ქვემოთ შევხებით ატომის მხოლოდ ნორმალურ მდგომარეობებს და იმ ელექტრონებს, რომელთაც ერთი და იგივე მთავარი კვანტური და აზიმუტალური კვანტური რიცხვები აქვს, ასეთ ელექტრონებს ეკვივალენტური ელექტრონები ეწოდებათ.

ეკვივალენტური ელექტრონების შემთხვევაში სრული მომენტების მოსაძებნად, რადგან ამ ელექტრონებს ერთნაირი n და l კვანტური რიცხვები აქვთ, მომენტთა შეკრების წესს უბრალოდ ვერ გამოვიყენებთ; წარმოიქმნება დამატებითი შეზღუდვები, რამდენადაც პაულის პრინციპის ძალით, შეუძლებელია ისეთი მდგომარეობების განხორციელება, როცა ორ ელექტრონს ერთნაირი აქვს ოთხივე კვანტური რიცხვი.

თუ ელექტრონები ეკვივალენტურნი არ არიან, ე. ი. ეკუთვნიან განსხვავებული n -ის ან განსხვავებული l -ის მდგომარეობებს, მაშინ ასეთი ელექტრონები პაულის პრინციპით შეზღუდული არ არიან და საჭირო L და S მომენტების პოვნა სიძნელეს არ წარმოადგენს მომენტთა შეკრების სამკუთხედის წესის გამოყენებით. მართლაც, განვიხილოთ, მაგალითად, ns და $n's$ მდგომარეობები, როცა $n \neq n'$. პირველი ელექტრონის $l_1=0$ მეორესი კი $l_2=1$, ხოლო სპინები ნახევრის ტოლია. მაშასადამე, $L=1$, $S=0$ და $S=1$. სამკუთხედის წესის გამოყენებით მივიღებთ $J=2, 1, 0$, ე. ი. გვექნება თერმები: 3P_2 , 3P_1 , 3P_0 და 1P_1 . ამიტომ ქვემოთ განვიხილავთ მხოლოდ ეკვივალენტურ ელექტრონებს.

დავიწყოთ $n=1$ შემთხვევით. როცა $n=1$, მაშინ $l=0$ და $m_l=0$, ე. ი. ელექტრონებს ტოლი ექნებათ სამივე კვანტური რიცხვი. როცა გვაქვს ერთი ელექტრონი, მაშინ მისი სრული ორბიტალური მომენტიც ნულია $L=0$, ამიტომ გვექნება $^2S_{1/2}$ მდგომარეობა. ახლა ვთქვათ $1s$ მდგომარეობაში გვაქვს ორი ელექტრონი. მაშინ მეორე ელექტრონიც შეგვიძლია მოვათავსოთ იგივე მდგომარეობაში, ოდნოდ პაულის პრინციპი მოითხოვს, რომ ელექტრონებს უნდა ჰქონდეთ ურთიერთსაწინააღმდეგოდ მიმართული სპინები. ამიტომ ამ ორი ელექტრონის სრული სპინი $S=0$ და, რადგან L -იც ნულის ტოლი იქნება, s^2 ელექტრონისათვის მივიღებთ 1S_0 თერმს.

ახლა განვიხილოთ ორი ელექტრონი p მდგომარეობაში ან, მოკლედ, p^2 ელექტრონი (იგულისხმება, რომ ამ ორ ელექტრონს n ერთი და იგივე აქვს). ამ ელექტრონებს განსხვავებული უნდა ჰქონდეს ან მაგნიტური, ან სპინური, ანდა როგორც ერთი, ისე მეორე კვანტური რიცხვები. სპინისა და ორბიტალური მომენტის შესაძლო პროექციების $m_l=0, \pm 1$ $m_s=\pm 1/2$ მიხედვით, თითოეული ელექტრონისათვის გვექნება ექვსი მდგომარეობა:

$$\begin{aligned} a &\div (1, \frac{1}{2}), & a' &\div (1, -\frac{1}{2}), \\ b &\div (0, \frac{1}{2}), & b' &\div (0, -\frac{1}{2}), \\ c &\div (-1, \frac{1}{2}), & c' &\div (-1, -\frac{1}{2}), \end{aligned} \quad (112, 12)$$

სადაც პირველ ადგილზე წერია ორბიტალური მომენტის შესაბამისი მაგნიტური კვანტური რიცხვი. მეორეზე კი—სპინის პროექცია. ამ ექვსი მდგომარეობიდან ორ ელექტრონს შეუძლია დაიკავოს ნებისმიერი, ორი ერთმანეთისაგან განსხვავებული $n \cdot \frac{1}{2} = 15$ მდგომარეობა. ეს თხუთმეტი მდგომარეობა ერთმანეთისაგან განსხვავდება, როგორც სრული L და სრული S -სპინური მომენტებით, ისე მათი პროექციებით. რადგან მდგომარეობა დამოკიდებულია მხოლოდ მომენტის სიდიდეზე, ამიტომ პროექციები ჩვენთვის საინტერესოა არ არიან. ყოველ მომენტს აქვს როგორც დადებითი ისე უარყოფითი პროექციები. მომენტის სიდიდის განსაზღვრის თვალსაზრისით საკმარისია ვიცოდეთ მხოლოდ დადებითი პროექციები, ამიტომ 15 მდგომარეობიდან ავარჩევთ მხოლოდ იმ მდგომარეობებს, რომლებიც შეესაბამება სრული მომენტისა და სპინის დადებით პროექციებს. უარყოფით პროექციებს შეესაბამება 7 მდგომარეობა. ისინი, როგორც აღვნიშნეთ, მდგომარეობის განსაზღვრის თვალსაზრისით ახალს არაფერს იძლევიან, ამიტომ მათ არც განვიხილავთ: მაშასადამე, $M_L > 0$ და $M_S > 0$ -თვის დაგვრჩება 8 მდგომარეობა:

$$\begin{aligned} a+a' &\div (2, 0), & a+b &\div (1, 1), & a+c' &\div (0, 0), \\ b+a' &\div (1, 0), & a+c &\div (0, 1), & b+b' &\div (0, 0), \\ c+a' &\div (0, 0), & a+b' &\div (1, 0). \end{aligned} \quad (112, 13)$$

ამ 8 მდგომარეობიდან შევარჩიოთ ის, რომელსაც აქვს მაქსიმალური პროექციები, რადგან ისინი განსაზღვრავენ L და S -ის შესაძლო საკუთარ მნიშვნელობებს. $a+b'$ გვიჩვენებს, რომ არსებობს მდგომარეობა, რომლის ორბიტალური მომენტი $L=2$. მომენტის ამ მნიშვნელობას შეესაბამება პროექციები $M_L=2, 1, 0$, და, მაშასადამე, მდგომარეობები $a+a'$, $b+a'$, $c+a'$ (სპინის მოცემული პროექციით $M_S=0$). ამ შემთხვევაში მაქსიმალური L -ის მდგომარეობა იქნება $(2, 0)$ და ამიტომ შეგვიძლია არ განვიხილოთ $b+a'$ და $c+a'$ მდგომარეობები, რადგან ისინი არ შეესაბამებიან მომენტის მაქსიმალურ მნიშვნელობას. $a+b \div (1, 1)$ მდგომარეობა გვიჩვენებს, რომ მაქსიმალური სპინი არის $S=1$, ამგვარად, p^2 ელექტრონებისაგან შეგვიძლია შევადგინოთ მდგომარეობა, რომლისთვისაც სპინი და ორბიტალური მომენტი ერთი ტოლია. მათი შესაძლო პროექციები იქნება $(0, 1)$, $(1, 0)$ და $(0, 0)$. აქედან $a+b'$, $a+c$, $a+c'$, მდგომარეობებს არ განვიხილავთ, რადგან ისინი არ შეესაბამებიან მომენტის მაქსიმალურ მნიშვნელობას. ამგვარად, ჩვენ უნდა გვქონდეს $(1, 1)$ მდგომარეობაც. ბოლოს გვექნება $b+b' \div (0, 0)$ მდგომარეობა. მაშასადამე, სულ დაგვრჩა მაქსიმალური პროექციების

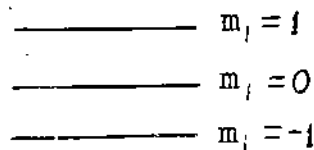
$$(2, 0), (1, 1) \text{ და } (0, 0)$$

მდგომარეობები, ე. ი. 1D , 3P , 1S თერმები. აქედან, ჰუნდის წესის თანახმად, 3P -თერმს ექნება მინიმალური ენერგია, ზუსტად ასეთივე მდგომარეობები ექნება 4p კონფიგურაციას. თუ გავითვალისწინებთ სპექტრის მულტიპლეტურ სტრუქტურას, მაშინ სრული J მომენტის შესაძლო მნიშვნელობების შესაბამისად ადგილი ექნება დონეების გახლეჩას. p^2 ელექტრონებისათვის 1D დონე არ გაიხლეჩება, რადგან J -სთვის გვექნება ერთადერთი მნიშვნელობა $J=2$, ე. ი. 1D_2 თერმი. რაც შეეხება 3p -ს მისთვის $J=2, 1, 0$ (რადგან $L=1$ და $S=1$), ამიტომ

განხორციელება თერმები: 3P_2 , 3P_1 და 3P_0 . ასევე არ გაიხლიჩება 1S დონე, რადგან J -ს ექნება ერთადერთი $J=1/2$ მნიშვნელობა, ე. ი. გვექნება ${}^1S_{1/2}$ თერმი. ჰუნდის მეორე წესის თანახმად, რადგან p^2 მდგომარეობაში ელექტრონთა რიცხვი ნაკლებია $(2l+1)=3$ -ზე, ამიტომ ამ კონფიგურაციის მინიმალური თერმის სრული მომენტი $J=|1-1|=0$. ამგვარად, p^2 -კონფიგურაციის მინიმალური თერმი იქნება 3P_0 .

ჩვენ შეგვიძლია ელექტრონთა კონფიგურაციების მდგომარეობები ვიპოვოთ უფრო თვალსაჩინო გზით. ამისათვის განვიხილოთ ისევე p^2 -ელექტრონები.

რადგან p -ელექტრონების $l=1$, ამიტომ გვექნება სამი პროექცია $m_l=1, 0, -1$. ეს პროექციები სქემატურად გამოვხატოთ პორიზონტალური ხაზების საშუალებით (ნახ. 29). საჭიროა ელექტრონები ამ დონეებზე განვალაგოთ პაულის პრინციპის დაცვით. ე. ი. თუ რომელიმე ეს დონე დაკავებულია ორი ელექტრონით, მაშინ მათ უნდა ჰქონდეთ ურთიერთსაწინააღმდეგო სპინის პროექციები. ამასთან, გავითვალისწინოთ, რომ საჯამო მომენტების შესადგენად საკმარისია შემოვიყოს სრული მომენტების $M_L \geq 0$

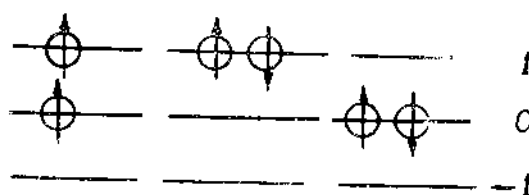


ნახ. 29.

და $M_S \geq 0$ პროექციებით. ცხადია, რომ p^1 ელექტრონი შეგვიძლია მოვათავსოთ $m_l=1$ დონეზე, მაშინ სრული მომენტი იქნება $L=1$, ხოლო სრული სპინი $S=1/2$; მაშასადამე, გვექნება 2P -თერმი. p^1 ელექტრონის მოთავსება შეიძლება $m_l=0$ დონეზეც, მაშინ S კვლავ ნახევრის ტოლი იქნება L კი—ნულის. ასე რომ, განხორციელება 2S -თერმიც. ამასთან, ჰუნდის წესის თანახმად მინიმალური ენერგია ექნება 2P -თერმს.

ახლა განვიხილოთ p^2 ელექტრონები. ცხადია, რომ ორი ელექტრონი შეგვიძლია დონეებზე განვალაგოთ სამი დამოუკიდებელი საშუალებით (ნახ. 30). პირველი სქემის მიხედვით სრული სპინის პროექცია $M_S=1/2+1/2=1$. ასეთი მაქსიმალური პროექცია აქვს $S=1$ სრულ სპინს.

საჯამო ორბიტალური მომენტის პროექცია $M_L=1+0=1$. ასეთი მაქსიმალური პროექცია ექნება $L=1$ მომენტს. მაშასადამე, ეს სქემა იძლევა 3P თერმს.



ნახ. 30

სპინ-ორბიტალური ურთიერთქმედების გათვალისწინებით 3P დონე სრული მომენტის $J=2, 1, 0$ მნიშვნელობების შესაბამისად სამად გაიხლიჩება და მივიღებთ: 3P_2 , 3P_1 და 3P_0 , თერმებს. მეორე სქემის მიხედვით სრული სპინის პროექცია ნულის ტოლია, ამიტომ $S=0$; საჯამო ორბიტალური მომენტის პროექცია $M=1+1=2$, ამიტომ თვით საჯამო ორბიტალური მომენტი $L=2$. მაშასადამე, მეორე სქემა გვაძლევს 1D თერმს, ან მულტიპლეტურ აღნიშვნებში— 1D_2 —თერმს. მესამე სქემის თანახმად $S=0$ და $L=0$. ე. ი. გვექნება 1S_0 თერმი. ჰუნდის წესის თანახმად უნდა მოვძებნოთ მაქსიმალური S -ის მდგომარეობა, S -ის მაქსი-

მაღური სიდიდეა $S=1$. ამის შემდეგ უნდა მოვძებნოთ ამ $S=1$ -ის შესაბამისი მაქსიმალური L . ასეთი მდგომარეობა ხორციელდება პირველი სქემით, ამიტომ მინიმალური ენერგია ექნება 3P თერმს.

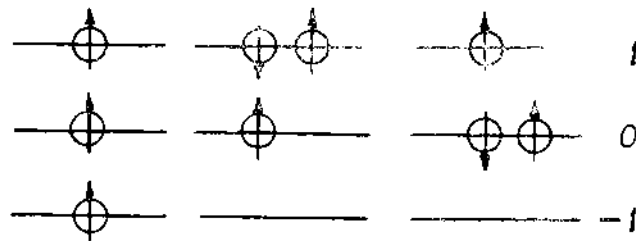
ჰუნდის მეორე ემპირული წესის თანახმად, რადგან p^2 მდგომარეობაში, ელექტრონთა რიცხვი ნაკლებია $(2l+1)=3$ -ზე, გვექნება $J=|L-S|=0$, ამიტომ მინიმალური ენერგიის შესაბამისი თერმი იქნება 3P_0 .

p^3 -ელექტრონების შემთხვევაშიაც შესაძლებელია სამი სქემა (ნახ. 31). ელექტრონების განაწილებისა M_L და M_S დადებითი პროექციებით.

პირველი სქემის მიხედვით

$$M_S = 1/2 + 1/2 + 1/2 = 3/2, \quad M_L = 1 - 0 + 0 = 0.$$

ასე რომ, $S=1$ და $L=0$. გვექნება ერთადერთი თერმი 4S ან, მულტიპლეტურ აღნიშვნებში, 4S_1 . ჰუნდის წესის მიხედვით სწორედ ამ თერმს შეესაბამება მინი-

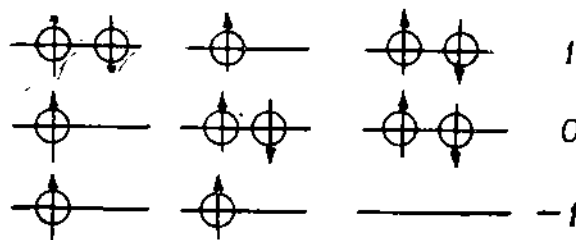


ნახ. 31

მაღური ენერგია. მეორე სქემის თანახმად $M_S = 1/2 - 1/2 + 1/2 = 1/2$, $M_L = 1 + 1 + 0 = 2$, ამიტომ $S=1/2$ და $L=2$; შესაბამისად $J=5/2$ და $3/2$. მაშასადამე, გვექნება 2D თერმი ან მულტიპლეტურ აღნიშვნებში— ${}^2D_{5/2}$ და ${}^2D_{3/2}$.

მესამე სქემის მიხედვით $S=1/2$, $L=1$, ამიტომ $J=3/2, 1/2$, მივიღებთ თერმებს ${}^2P_{3/2}$ და ${}^2P_{1/2}$.

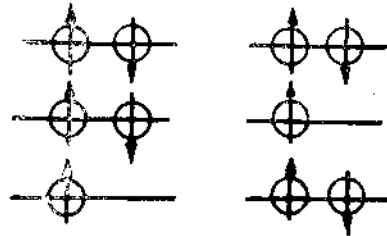
ახლა გამოვარკვიოთ p^4 -ელექტრონების მდგომარეობები. კვლავ გვექნება სამი სქემა (ნახ. 32). პირველი სქემის მიხედვით $S=1$ და $L=1$, ამიტომ



ნახ. 32,

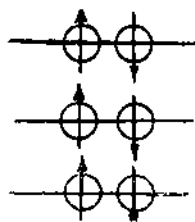
$J=2, 1, 0$; გვექნება 3P -თერმი. მულტიპლეტურ აღნიშვნებში კი— ${}^3P_2, {}^3P_1$ და 3P_0 თერმები. მეორე სქემის თანახმად $S=1$, $L=0$, ამიტომ $J=1$. გვექნება 3S_1 -თერმი. დაბოლოს, მესამე სქემის შემთხვევაში $L=2$, $S=0$ და $J=2$, ამიტომ მივიღებთ 1D_2 -თერმს. რომელი თერმი შეესაბამება მინიმალურ ენერგიას? მაქსიმალური $S=1$ სპინით ხასიათდება როგორც პირველი, ისე მეორე სქემა. მაგრამ ჩვენ უნდა ავიღოთ პირველი შემთხვევა, რადგან მაქსიმალური სპინის დროს მას შეესაბამება $L=1$ მაქსიმალური სრული ორბიტალური მომენტი. ამგვარად, მინი-

მალური ენერგია შეესაბამება 3P თერმს. რადგან p^4 კონფიგურაციაში ელექტრონების რიცხვი მეტია $(2l+1)=3$ -ზე ამიტომ ჰუნდის მეორე წესის თანახმად, ამ კონფიგურაციის სრული მომენტი $J=L+S=2$, ე. ი. მინიმალური ენერგიის თერმია 3P_2 . p^5 კონფიგურაციას შეესაბამება მხოლოდ ორი სქემა (ნახ. 33), ორივე შემთხვევაში $S=1/2$. რაც შეეხება ორბიტალურ მომენტს პირველი სქემისათვის $L=1$, მეორესათვის კი $L=0$. ასე რომ, გვექნება თერმები 2P და 2S . ხოლო მულტიპლეტურ აღნიშვნებში $^2P_{3/2}$, $^2P_{1/2}$ და $^2S_{1/2}$. ჰუნდის წესის მიხედვით მინიმალური ენერგია შეესაბამება $^2P_{3/2}$ თერმს.



ნახ. 33

განსახილველი დაგვრჩა p^6 -ელექტრონები. ცხადია, ამ შემთხვევაში სორციელდება ერთადერთი სქემა, რომელიც შეესაბამება ჩაკეტილ გარსს (ნახ. 34). ამ შემთხვევაში, $M_S=M_L=0$, ე. ი. $L=S=J=0$, ამიტომ გვექნება ერთადერთი თერმი 1S_0 .



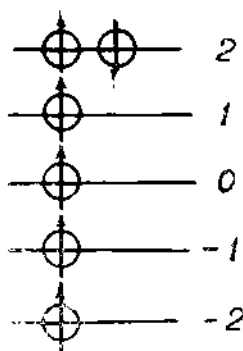
ნახ. 34

აღსანიშნავია ერთი მნიშვნელოვანი გარემოება. p^5 -კონფიგურაციას ზუსტად ისეთივე თერმები აქვს, რაც p^1 -ს. p^4 -ს, რაც $-p^2$. ეს გასაგებია, რადგან p^1 ელექტრონი იმყოფება ჩაკეტილი 1S_0 გარსის ზემოთ, მაშინ როცა p^5 -ს იგივე ტიპის ჩაკეტილ გარსამდე აკლია ერთი ელექტრონი. ამიტომ p^5 ელექტრონის ნაცვლად ჩვენ შეგვიძლია განვიხილოთ „ხვრელი“ p^6 მდგომარეობაში, ამასთან, ხვრელს უნდა მივაწეროთ ნახევრის ტოლი სპინი. ასევე, p^4 ელექტრონის ნაცვლად ჩვენ შეგვიძლია ვილაპარაკოთ ორ ხვრელზე ჩაკეტილ p^6 გარსში. ამ ხვრელების მდგომარეობები ისეთივე იქნება, რაც p^2 ელექტრონისა. ამ თვალსაზრისით ჰუნდის მეორე წესი ასეც შეიძლება გამოვთქვათ: არასრულად შეუვსებელ ჩაკეტილ გარსში ელექტრონებისათვის $J=|L-S|$, ხოლო ხვრელებისათვის $J=L+S$.

სრულიად ანალოგიურად გამოვიყენებთ ზემოთ განხილულ სქემატურ მეთოდს d , f , g , და ა. შ. ელექტრონთა კონფიგურაციების თერმების მოსაძებნად. სიმარტივის მიზნით ჩვენ დავკმაყოფილებთ d -ელექტრონების კონფიგურაციების მინიმალური თერმების მოძებნით. d -ელექტრონებისათვის $l=2$, ამიტომ სქემა ამ შემთხვევაში ხუთი ხაზისაგან შედგება. ეს ხაზები შეესაბამებიან $m_l=2, 1, 0, -1, -2$ პროექციებს. ავიღოთ d^1 ელექტრონი. იგი შეიძლება დაესვათ, როგორც $m_l=2$, ისე $m_l=1$ და 0 დონეებზე. მაგრამ ჰუნდის წესის თანახმად, ელექტრონი (მოცემული $S=1/2$ მნიშვნელობისათვის, რომ გვჭონდეს მაქსიმალური L), უნდა მოვათავსოთ $m_l=2$ დონეზე. მაშასადამე, ამ შემთხვევაში $S=1/2$ და $L=2$. გვექნება 2D თერმი. ასეთივე თერმი ექნება d^9 ელექტრონს. d^2 -ელექტრონის შემთხვევაში მაქსიმალური სპინის მისაღებად ელექტრონი სხვა დონეზე უნდა მოვათავსოთ. ამავე დროს, ორბიტალური მომენტიც მაქსიმალური უნდა იყოს ამ სპინისათვის. ეს კი მაშინ შეიძლება, თუ მეორე ელექტრონს მოვათავსებთ $m_l=1$ დონეზე. მაშინ გვექნება $S=1$, $L=3$. მინიმალურ ენერგიას შეესაბამება 3F თერმი. ჰუნდის მეორე წესის თანახმად $J=|3-1|=2$. ასეთივე თერმი ექნება d^8 -ელექტრონებს. ოღონდ, რადგან ამ შემთხვევაში ჩვენ საქმე გვაქვს ორ ხვრელთან d^{10} კონფიგურაციაში სრული მომენტი იქნება $J=3+1=4$. ასევე

ცხადია, რომ d^2 კონფიგურაციის მესამე ელექტრონი განსხვავებულ მდგომარეობაში უნდა მოვათავსოთ; კერძოდ, $m_l = 0$ -ზე. შედეგად მივიღებთ $S = 3/2$ და $L = 3$. ამ მდგომარეობის თერმი იქნება 4F , სრული მომენტი კი $J = 3/2$. ასეთივე თერმით ხასიათდება d^7 კონფიგურაცია, ხოლო სრული მომენტი $3/2$ -ის ტოლია.

სრულიად ანალოგიურად d^4 -ის მეოთხე ელექტრონი უნდა მოვათავსოთ $m_l = -1$ დონეზე, d^5 -ისა კი $m_l = -2$ -ზე. შესაბამისად გვექნება თერმები 5D და 6S . სრული მომენტები კი შესაბამისად იქნება $J = 2 - 2 = 0$ და $J = |0 - 5/2| = 5/2$. d^6 კონფიგურაციის მეექვსე ელექტრონი შეგვიძლია მოვათავსოთ ნებისმიერ ხუთ თითო ელექტრონით დაკავებულ დონეზე საწინააღმდეგო სპინით (ნახ. 35). საჯამო სპინისათვის მივიღებდით ერთსა და იმავე $S = 2$ მნიშვნელობას, მაგრამ ჰუნდის წესის თანახმად მაქსიმალურ L -ს მივიღებთ თუ მეექვსე ელექტრონს დავსვავთ $m_l = 2$ დონეზე მაშინ $M_L = 2 + 2 + 1 + 0 - 1 - 2 = 2$, ე. ი. $L = 2$.



ნახ. 35.

მაშასადამე, მინიმალურ ენერგიას შეესაბამება 5D თერმი. ამ მდგომარეობის სრული მომენტი იქნება $J = 2 + 2 = 4$. d^6 კონფიგურაციის თერმი დამოკიდებულია d^4 კონფიგურაციის თერმზე, რაც ასეც უნდა ყოფილიყო. დავგრა გასარკვევი d^{10} ელექტრონების თერმების საკითხი. d^{10} ელექტრონები წყვილ-წყვილად ავსებენ ნახ. 35-ზე მოცემულ დონეებს, ამიტომ მათთვის $L = 0$, $S = 0$ და $J = 0$; გვექნება ჩაკეტილი გარსისათვის დამახასიათებელი 1S_0 თერმი.

როგორც ვხედავთ, როცა ელექტრონთა კონფიგურაციების მხოლოდ მინიმალური ენერგიის შესაბამისი თერმები გვაინტერესებს m_l დონეების შევსება ასე უნდა მოვახდინოთ: ერთ ელექტრონს ვსვავთ

$m_l = l$ დონეზე, მეორეს $m_l = (l-1)$ -ზე, მესამეს $m_l = (l-2)$ -ზე და ა. შ. $(2l+1)$ -ეს $m_l = -l$ დონეზე ამის შემდეგ დანარჩენ ელექტრონს იგივე თანამიმდევრობით და საწინააღმდეგო სპინებით ვანაწილებთ დონეების მიხედვით.

შერჩევის წესები რთული ატომებისათვის. განვიხილოთ როგორი სახე ექნება შერჩევის წესებს რთულ ატომებში დიპოლური გადასვლების დროს. კელავ განვიხილოთ რასეულ-საუნდერსის ბმა. ამ შემთხვევაში შერჩევის წესები მარტივად დადგინდება ერთ ელექტრონიანი ატომებისათვის არსებული შერჩევის წესებიდან. რადგან გადასვლაში მონაწილეობს მხოლოდ ერთი ელექტრონი, ამიტომ $E1$ გადასვლის დროს ადგილი ექნება აზიმუტალური კვანტური რიცხვის ერთი ცვლილებას. დიპოლმომენტი სპინზე დამოკიდებული არ არის, ამიტომ $E1$ გადასვლის დროს სრული სპინი არ შეიცვლება, ე. ი. $\Delta S = 0$. რადგან გამოსხივებული (ან შთანთქმული) $E1$ კვანტის მომენტი ერთის ტოლია, ამიტომ ორბიტალური მომენტისათვის გვექნება მნიშვნელობები $L+1$, L და $L-1$, ამიტომ $\Delta L = 0, \pm 1$. ცხადია ასევე, რომ სრული მომენტისათვის გვექნება იგივე შერჩევის წესი $\Delta J = 0, \pm 1$; ამასთან, მკაცრად აკრძალულია $0 \rightarrow 0$ გადასვლები. რადგან ორი ნულოვანი მომენტის შეკრებით ვერ მივიღებთ კვანტის ერთეულოვან მომენტს. $E1$ გადასვლების დროს ცხადია დაცული უნდა იყოს ლუწობის შენახვის კანონიც. მაგრამ ექსპერიმენტზე ზოგჯერ შეიმჩნევა ისეთი გადასვლები, რომლისთვისაც $\Delta S \neq 0$. ეს იმას ნიშნავს, რომ „ LS “ ბმა ნაწილობრივ დარღვეულია. ასეთი მდგომარეობა გვაქვს მაგალითად, ვერცხლის წყლის შემთხვევაში, სადაც ადგილი აქვს $^3P_1 \rightarrow ^1S_0$ გადასვლას. ამ გადასვლის დროს $\Delta L = 1$, $\Delta J = 1$, ე. ი. გადასვლა J და L -ის მიხედვით დაშვებულია, S -ის მიხედვით კი—აკრძალული. მაგრამ თუ გავითვალის-

წინებით სპინ-ორბიტალურ ურთიერთქმედებას. მაშინ დიპოლური გადასვლა დაშვებული აღმოჩნდება.

„ქქ“ ტიპის ბმა. აღვნიშნოთ, რომ „LS“ ტიპის ბმის გამოყენება შემოსაზღვრულია იგი კარგ შედეგებს გვაძლევს მსუბუქი ატომისათვის. მძიმე ატომებზე გადასვლისას თანდათან უფრო მნიშვნელოვან როლს ასრულებს რელატივისტური ეფექტები და ამიტომ რასეულ-საუნდერსის სქემით ატომების დონეების აგება აღარ შეიძლება¹. ელექტრონის რელატივისტური მოძრაობის დროს ცალკე არც სპინი და არც ორბიტალური მომენტი აღარ ინახება, ამიტომ მდგომარეობის ამ სიდიდეებით დახასიათებას აზრი ეკარგება. ამ შემთხვევაში ადგილი აქვს მძლავრ სპინ-ორბიტალურ ურთიერთქმედებას და ინახება J სრული მომენტი. ამ უკანასკნელის მისაღებად კი საჭიროა ცალკეული ელექტრონის სრული j მომენტების შეკრება. ატომის დონეების ასეთი ტიპის სქემით აგებას უწოდებენ „ქქ“ ტიპის სქემას (ან „ქქ“-ბმას). „ქქ“-სქემაც მეორე უკიდურესობას წარმოადგენს და გამოიყენება მძიმე ატომებისათვის. საშუალო წონის ატომებისათვის გამოსადეგია ნაწილობრივ „LS“ ნაწილობრივ კი „ქქ“ სქემა.

რთული ატომების სპექტრის ნაზი და ზენაბი სტრუქტურა. როგორც აღვნიშნეთ, რთულ ატომებში ადგილი აქვს სპინ-ორბიტალურ ურთიერთქმედებას, რომელიც აპირობებს დონეების მულტიპლეტურ ან სპექტრის ნაზ სტრუქტურას. რთულ ატომებში ადგილი აქვს ელექტრონის სპინებს შორის ურთიერთქმედებასაც, რომელსაც „ss“ ურთიერთქმედებას უწოდებენ. „ss“ ურთიერთქმედება გამოწვეულია ელექტრონთა $M_s = -\frac{e}{4c} s$ მაგნიტური მომენტების ურთიერთქმედებით,

ამიტომ პროპორციული იქნება $1/r^2$ -სა. საიდანაც გამომდინარეობს, რომ აღნიშნული ეფექტი რელატივისტურია მსგავსად „sz“ ურთიერთქმედებისა.

რთული ატომისათვის სპინ-სპინ ურთიერთქმედება პროპორციული იქნება შემდეგი ჯამისა:

$$\sum_{i=1}^N x_i (\hat{s}_i \hat{s}_i). \quad (112,14)$$

სადაც x_i პროპორციულობის კოეფიციენტია, მოვახდინოთ (112,13) გამოსახულების გასაშუალოება იმავე მეთოდით რაც (112,7). შედეგად აღმოჩნდება, რომ სპინ-სპინ ურთიერთქმედება S-ს შეიცავს კვადრატულად. S-ის კვადრატული გამოსახულებები (SS) და (SL)². პირველის საკუთარი მნიშვნელობები არაა დამოკიდებული ატომის სრულ J მომენტზე, ამიტომ დონეების გახლეჩას არ იწვევს. აქედან შეგვიძლია დავასკვნათ, რომ რთულ ატომში „ss“ ურთიერთქმედებას აქვს სახე

$$\hat{H}'_{ss} = \text{const} (\hat{S} \hat{L})^2 \quad (112,15)$$

(LS) სკალარული ნამრავლის საკუთარი მნიშვნელობები ჩვენთვის ცნობილია. იგი განისაზღვრება (112,9) ფორმულით. მისი კვადრატი ერთი მხრივ შეიცავს J-ზე დამოუკიდებელ წევრებს, რომლებიც ჩვენთვის საინტერესო არ არიან; მეორე მხრივ $J^2(J+1)^2$ -ისა და $J(J+1)$ -ის პროპორციულ წევრებს. ამათგან, $J(J+1)$ შეიძლება გავაერთიანოთ სპინ-ორბიტალურ წევრთან. შედეგად დავგრჩება, რომ $\hat{H}'_{ss}$ ოპერატორის საკუთარი მნიშვნელობა დამოკიდებულია $J^2(J+1)^2$ წევრზე. $\hat{H}'_{SL}$ და $\hat{H}'_{ss}$ ურთიერთქმედებებით გამოწვეული ეფექტები გაცილებით მცირეა

¹ ცნობილია, რომ შიგა ელექტრონების სიჩქარე მძიმე ატომებში ძალიან ახლოსაა c-სთან.

ვიდრე ცენტრალური გასაშუალოებული ველით გამოწვეული ეფექტი, რომელიც განსაზღვრავს ატომის ენერგეტულ დონეებს. აღნიშნული სპინ-ორბიტალური და სპინ-სპინ ურთიერთქმედებანი იწვევენ მხოლოდ დონეების გახლეჩას. ამასთან, აღვილი საჩვენებელია, რომ დონეების გახლეჩა $\hat{H}'_{\text{სს}}$ ურთიერთქმედებით გაცილებით ნაკლებია, ვიდრე სპინ-ორბიტალური ურთიერთქმედებით გამოწვეული დონეების გახლეჩა. სპინის არსებობით გამოწვეული ურთიერთქმედება იწვევს იმას, რომ, ექსპერიმენტზე ძირითად ენერგეტულ დონეებს წორის გადასვლებით გამოწვეულა სპექტრალური ხაზების გარდა ვხედავთ მათთან ძალიან ახლოს მდებარე მრავალ სპექტრალურ ხაზს ან როგორც ამბობენ სპექტრის ნაზ სტრუქტურას.

მაგრამ ექსპერიმენტულად აღმოჩენილი იქნა ერთმანეთთან კიდევ უფრო ახლოს მყოფი სპექტრალური ხაზები, რაც არ შეიძლება ახსნილი ყოფილიყო „ LS “ და „ ss “ ურთიერთქმედებით. ამ მოვლენას სპექტრის ზენაზი (ზეწვრილი) სტრუქტურა უწოდეს. მისი არსი ახსნილი იყო პაულის მიერ. თურმე სპექტრის ზენაზი სტრუქტურა გამოწვეულია ატომგულის i მომენტისა და ელექტრონთა გარსის, ე. ი. ატომის J მომენტის ურთიერთქმედებით; რადგან გულის სპინური მაგნიტური მომენტი გაცილებით ნაკლებია ატომის სპინურ მაგნიტურ მომენტზე (ატომური მაგნიტონი გაცილებით მეტია $e\hbar/2M_p e$ ატომგულურ მაგნიტონზე, M_p არის პროტონის მასა), ამიტომ ეს ეფექტი იძლევა ძალიან მცირე გახლეჩას. ამ გახლეჩის შედეგად, დონე, მოცემული J -ით, ეხლიჩება სხვადასხვა დონედ, რომლებიც ხასიათდება ატომის სრული მომენტით (ატომგულის პლუს ელექტრონთა გარსი):

$$K = J + i, \quad J + i - 1, \dots, |J - i| \quad (112,16)$$

სადაც $K = J + i$ წარმოადგენს ატომის, როგორც მთლიანის, სრულ მომენტს.

§ 113. მენდელეევის ელემენტთა პერიოდული სისტემა

გამოვარკვიოთ, თუ როგორ ახსნა-განმარტებას აძლევს კვანტურა მექანიკა ელემენტთა სისტემის პერიოდულობას, რომელიც ამ მექანიკის ჩამოყალიბებამდე აღმოაჩინა მენდელეევმა. მან დაამტკიცა, რომ თუ ელემენტებს დავალაგებთ ატომური წონების ზრდის მიხედვით, მაშინ ქიმიურად მსგავსი ელემენტები ამ სისტემაში ერთსა და იმავე ჯგუფში მოხვდება. ამასთან პერიოდული სისტემა შეიცავს ცხრა სვეტსა და შვიდ პერიოდს. ქიმიურად მსგავსი ელემენტები მოთავსებულია სვეტებში, პირველ პერიოდში მოთავსებულია ორი ელემენტი, მეორე და მესამე პერიოდი შეიცავს რვა-რვა ელემენტს, მეოთხე და მეხუთე თერამეტ - თერამეტს, მეექვსე—ოცდათორმეტს, მეშვიდე პერიოდი კი დაუმთავრებელია. ყველა პერიოდი იწყება ტუტე-მეტალით და მთავრდება ინერტული გაზით. ელემენტთა პერიოდული სისტემა იმდენად ღრმად გამოხატავს ბუნებაში არსებულ ნივთიერებათა თვისებების კანონზომიერებას, რომ მან საშუალება მისცა მენდელეევს ეწინასწარმეტყველა მთელი რიგი იმ დროისათვის ჯერ კიდევ უცნობი ელემენტების არსებობა. ასეთი ელემენტებია, მაგალითად, სკანდიუმი, გალიუმი და გერმანიუმი; მენდელეევმა წინასწარ განსაზღვრა ამ ელემენტების ატომწონეები და ქიმიური თვისებები.

მას შემდეგ, რაც აღმოჩენილ იქნა ატომის აგებულება და ჩამოყალიბდა კვანტური მექანიკა, პერიოდულმა კანონმა ღრმა ფიზიკური შინაარსი მიიღო. პერიოდული სისტემის თეორია, კვანტური მექანიკის საფუძველზე, მოცემული იყო ნილს

ბორის მიერ, თუმცა, უნდა აღინიშნოს, რომ ეს თეორია დღესაც არ არის დასრულებული.

პერიოდული სისტემის ღრმა ფიზიკური აზრი გამოვლინდა ჯერ კიდევ მაშინ, როცა გამოირკვა რიგითი ნომრის შინაარსი. კერძოდ, რეზერფორდისა და მოზლის შრომების საფუძველზე დამტკიცდა, რომ რიგითი ნომერი, რომელსაც აღნიშნავენ Z ასოთი, გამრავლებული ელემენტარულ დადებით მუხტზე ($e=4,8 \cdot 10^{-10} CGSE$), ე. ი. $+Ze$ წარმოადგენს ატომგულის მუხტს. კარგადაა ცნობილი, რომ ატომის გული შედგება ნეიტრონებისა და პროტონებისაგან, ამასთან, ნეიტრონი ნეიტრალური ნაწილაკია, პროტონის მუხტი კი e -ს ტოლია. ამიტომ აშკარაა, რომ რიგითი ნომერი გამოხატავს პროტონების რიცხვს ატომის გულში. რადგან ნორმალურ მდგომარეობაში ატომი ელექტრულად ნეიტრალურია, ამიტომ Z აგრეთვე უნდა გამოხატავდეს ატომის გარსის ელექტრონთა რიცხვს. აღნიშნოთ რომ ელემენტის ქიმიურ თვისებებს მხოლოდ და მხოლოდ ელექტრონები განსაზღვრავს, ამიტომ Z დაკავშირებული იქნება ელემენტის ქიმიურ თვისებებთან.

ატომის წონებს, ჩვეულებრივ, ისეთ ერთეულებში გამოხატავენ, რომელშიაც ჟანგბადის ატომწონისათვის მიიღებოდა 16. ასეთ სკალას უწოდებენ ატომწონის ფიზიკურ სკალას. ამ ერთეულებში პროტონის წონა 1,00815 ტოლია, ნეიტრონისა კი—1,00898. ჰელიუმის ატომწონა იქნება 4,00387. გარდა ატომწონისა, აგრეთვე შემოაქვთ ე. წ. მასური რიცხვის ცნება, რომელსაც აღნიშნავენ A ასოთი და რომელიც წარმოადგენს ატომწონას, დამრგვალებულს უახლოეს მთელ რიცხვამდე. მაგალითად, ჰელიუმის მასური რიცხვი იქნება $A=4$, ლითიუმის $A=7$ და ა. შ. მასური რიცხვი გამოხატავს ატომგულის ნეიტრონებისა და პროტონების ჯამს $A=Z+N$. ატომგულის სიმბოლურად გამოსახვისათვის შემოღებულია აღნიშვნა

$${}_Z X^A, \quad (113,1)$$

სადაც X მიუთითებს ქიმიურ სიმბოლოს. მაგალითად, ${}_2He^4$ ნიშნავს, რომ ჰელიუმის ატომის გულს აქვს $Z=2$ პროტონი და $4-Z=2$ ნეიტრონი.

ბუნებაში არსებობს ისეთი ატომები, რომელთა წონები (მასური რიცხვები) სხვადასხვაა, რიგითი ნომრები (მუხტები) კი—ერთი და იგივე. ეს ატომები ერთმანეთისაგან უნდა განსხვავდებოდნენ მხოლოდ ატომგულის ნეიტრონების რიცხვით. ასეთ ატომებს იზოტოპებს უწოდებენ. რადგან ქიმიურ რეაქციებში მნიშვნელოვანია მხოლოდ Z . ამიტომ იზოტოპები ქიმიურად ერთმანეთისაგან არ განსხვავდებიან. როგორც ცნობილია, წყალბადის ატომს აქვს სამი იზოტოპი— ${}_1H^1$, ${}_1H^2$ და ${}_1H^3$. პირველს ეწოდება წყალბადი. მეორეს — დეიტერიუმი, მესამეს კი—ტრიტიუმი. ურანს აქვს იზოტოპები U^{234} , U^{235} , U^{238} . აღსანიშნავია ის გარემოება, რომ ყველა იზოტოპი მდგრადი არ არის. ზოგი იზოტოპი გარკვეული დროის განმავლობაში „ცოცხლობს“, რის შემდეგ სხვა ატომებად გარდაიქმნება. ამასთან, ზოგიერთი იზოტოპის „სიცოცხლის ხანგრძლივობა“ ათეული და ასეული წლებით განისაზღვრება. ზოგისა კი—სეკუნდის უმნიშვნელო ნაწილებით.

რადგან ნეიტრალურ ატომში (ქვემოთ საქმე გეექნება მხოლოდ ნეიტრალურ ატომებთან) პროტონთა რიცხვი ელექტრონთა რიცხვის ტოლია, ამიტომ ყველა ატომი შეგვიძლია ავაგოთ წყალბადის ატომიდან, მის გულზე პროტონებისა, ხოლო გარსზე—ელექტრონების შესაბამისი რიცხვის დამატებით. ამასთან, ატომის გულს სათანადოდ უნდა დაემატოს ნეიტრონების საჭირო რიცხვი.

ატომში ელექტრონთა განაწილების ან, როგორც მას წინა პარაგრაფში გუწოდეთ, კონფიგურაციის დასახასიათებლად გამოვიყენებთ (112,1) ფორმულას— nl^N , სადაც $l=0, 1, 2, 3, 4$ -ის ნაცვლად უნდა შევიტანოთ ასოები s, p, d, f, n

მთავარი კვანტური რიცხვია, N კი გამოხატავს ელექტრონთა რიცხვს l მდგომარეობაში. ამ მდგომარეობათა რიცხვი რომლებსაც შეესაბამება n -სა და l -ის თანატოლი მნიშვნელობა, უდრის $2(2l+1)$. s მდგომარეობაში გვექნება $N=2$ ელექტრონი, p -ში $N=6$, d -ში $N=10$, f -ში $N=14$ და ა. შ. ამ რიცხვებით დახასიათებულ ელექტრონთა მდგომარეობას „ჩაკეტილ გარსებს“ უწოდებენ. n კვანტური რიცხვებით დახასიათებულ მდგომარეობაში გვექნება სულ $2n^2$ ელექტრონი. ატომის ელექტრონთა ერთობლიობა n კვანტური რიცხვის მნიშვნელობების მიხედვით იყოფა შრეებად (გარსებად). ამ შრეებისათვის შემოღებულია აღნიშვნები.

$$n=1, 2, 3, 4, 5, 6... \quad (113,2)$$

$$K, L, M, N, P, Q...$$

თითოეულ ამ გარსში გვექნება ელექტრონთა შემდეგი რიცხვი:

$$N, L, M, N, P, Q, \quad (113,3)$$

$$2n^2=2, 8, 18, 32, 50, 72,$$

ამის შემდეგ, პაულის პრინციპის გამოყენებით შეგვიძლია ავხსნათ პერიოდული სისტემის მთელი რიგი მნიშვნელოვანი თავისებურებები.

პერიოდული სისტემის პირველ ელემენტს წარმოადგენს წყალბადის ატომი. მისი გული არის პროტონი (პროტონი ნიშნავს პირველს), გარსზე კი გვაქვს ერთი ელექტრონი, რომელიც შეიძლება მოვათავსოთ ძირითად მდგომარეობაში $n=1$, $l=0$, $m_l=0$, $m_s=\pm\frac{1}{2}$ ან, როგორც ამბობენ, $1s$ მდგომარეობაში. მეორე ელემენტი არის ჰელიუმი. მისი ატომგული შედგება ორი ნეიტრონისა და ორი პროტონისაგან (ე. წ. α -ნაწილაკი). გარსში სათანადოდ გვაქვს ორი ელექტრონი. პაულის პრინციპის თანახმად, მეორე ელექტრონი შეგვიძლია მოვათავსოთ ისევე $n=1$, $l=0$, $m_l=0$ მდგომარეობაში, ოღონდ ელექტრონებს უნდა ჰქონდეს საწინააღმდეგო სპინები. რადგან K გარსში ($n=1$) სულ ორი ადგილი გვაქვს, ამიტომ პირველი პერიოდი ჰელიუმით დამთავრდება. ჰელიუმის ელექტრონთა კონფიგურაცია შეგვიძლია გამოვხატოთ ფორმულით $1s^2$, ე. ი. $1s$ მდგომარეობაში გვაქვს ორი ელექტრონი, ამგვარად, ჰელიუმში მივიღეთ ჩაკეტილი კონფიგურაცია.

პერიოდულ სისტემაში შემდეგი ელემენტი არის ${}_3Li$, რომლის გარსი შედგება სამი ელექტრონისაგან. ორი ელექტრონი შეგვიძლია მოვათავსოთ $1s$ მდგომარეობაში, მესამეს კი, პაულის პრინციპის თანახმად, ამ მდგომარეობაში ვეღარ მოვათავსებთ. ამიტომ საჭიროა დავიწყოთ ახალი პერიოდი (L გარსი). ამ პერიოდში სულ გვექნება 8 ადგილი ($n=2$), ლითიუმის მესამე ელექტრონი შეგვიძლია მოვათავსოთ $2s$ მდგომარეობაში. ასე რომ, ლითიუმის ელექტრონთა კონფიგურაციისათვის გვექნება ფორმულა $1s^2 2s^1$. შემდეგი ელემენტის— ${}_4Be$ -ის მეოთხე ელექტრონი კელავ $2s$ მდგომარეობაში მოთავსდება. მისთვის გვექნება კონფიგურაცია $1s^2 2s^2$. პაულის პრინციპის ძალით, ბორის ${}_5B$ მეხუთე ელექტრონი უკვე $2p$ მდგომარეობაში უნდა მოთავსდეს. მისთვის გვექნება კონფიგურაცია $1s^2 2s^2 2p^1$. როგორც აღვნიშნეთ, p მდგომარეობაში ($l=1$) შეიძლება მოთავსდეს ექვსი ელექტრონი, ამგვარად, ამ მდგომარეობაში დარჩენილ ხუთ ადგილს შეავსებს ნახშირბადის, აზოტის, ფანგბადის, ფტორისა და ნეონის ატომების ელექტრონები. სახელობრ, ამ ატომების ელექტრონთა კონფიგურაციებისათვის გვექნება

$${}_6C \div 1s^2 2s^2 2p^2; \quad {}_7N \div 1s^2 2s^2 2p^3; \quad {}_8O \div 1s^2 2s^2 2p^4 \dots {}_{10}Ne \div 1s^2 2s^2 2p^6.$$

ნეონით მთავრდება მეორე პერიოდი. ნეონი, ისევე როგორც ჰელიუმი, ხასიათდება განსაკუთრებული სიმდგრადით. მაგალითად, ელექტრონის ბმის ენერგია ჰელიუმში— $24,45\text{eV}$ -ია, ნეონში— $21,5\text{eV}$, მაშინ, როცა ლითიუმის ბმის ენერგია— $5,37\text{eV}$ -ის ტოლია, ფტორისა კი— $18,6\text{eV}$. ამგვარად, ჰელიუმისა და ნეონის ჩაკეტილი გარსები ენერგეტიკულად უფრო ხელსაყრელია, ვიდრე სხვა კონფიგურაციები. შემდეგი ელემენტი არის ნატრიუმი— $_{11}\text{Na}$. მისი მეთერთმეტე ელექტრონისათვის L გარსში ადგილი აღარა გვაქვს, ამიტომ საჭიროა დავიწყოთ ახალი M გარსი ($n=3$), ამ გარსში გვაქვს 18 ადგილი, ე. ი. მესამე პერიოდში შეგვიძლია მოვათავსოთ ელემენტები, დაწყებული ნატრიუმიდან არგონის ჩათვლით, ნატრიუმის კონფიგურაცია დახასიათდება ფორმულით $1s^2 2s^2 2p^6 3s^1$ უკანასკნელი $3s$ ელექტრონის ბმის ენერგია ძალიან მცირეა და სადიდის რიგით ისეთივეა, როგორც Li -ის $2s$ ელექტრონისა. $_{12}\text{Mg}$ -ის შემდეგი ელექტრონი შეგვიძლია კვლავ $3s$ მდგომარეობაში მოვათავსოთ. $3p$ მდგომარეობის ექვსი ადგილი შეივსება ალუმინის სილიციუმის, ფოსფორის, გოგირდის ქლორისა და არგონის ელექტრონებით. არგონის კონფიგურაცია დახასიათდება ფორმულით $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6$. არგონიც შეესაბამება ჩაკეტილ კონფიგურაციას და ამგვარად, ამ ელემენტით ხდება მესამე პერიოდის ჩაკეტვა. არგონის ატომს ამ პერიოდში აქვს ნაქსიმალური ბმის ენერგია და იგი ისეთივე მდგრადობით ხასიათდება, როგორითაც ჰელიუმი და ნეონი.

შემდეგი ელემენტი ($Z=19$) არის კალიუმი— $_{19}\text{K}$. ისმის კითხვა, სად უნდა მოვათავსოთ კალიუმის მეცხრამეტე ელექტრონი? M გარსში სულ გვქონდა 18 ადგილი, აქედან არგონამდის შეივსო $l=0,1$ მდგომარეობები, ე. ი. $3s$ და $3p$ მდგომარეობები. ამგვარად, M გარსში შეუვსებელი დარჩა $3d$ (ე. ი. $l=2$) მდგომარეობის ათი ადგილი. ამიტომ ჩვენ შეგვეძლო კალიუმის უკანასკნელი ელექტრონი ისევ M გარსის $3d$ მდგომარეობაში მოგვეთავსებინა. მაგრამ კალიუმის ატომი როგორც ჭიმოური, ისე სპექტრალური მონაცემებით (იხ. სავალენტო ელექტრონის მოდელი) საკვებით ჰგავს პირველი სვეტის ელემენტებს $H, Li, Na, \dots$, აქ ვხვდებით პერიოდული სისტემის აგებულების თავისებურებას, რაც იმაში გამოიხატება, რომ $3d$ მდგომარეობა შეუვსებელი რჩება და იწყება ახალი N გარსის შევსება. ისეთი უხეში მოდელითაც კი, როგორიც არის თომას-ფერმის მოდელი, მიიღება, რომ $4s$ მდგომარეობის ენერგია ნაკლებია, ვიდრე $3d$ მდგომარეობისა. ეს გამოწვეულია იმით, რომ სწორედ ამ მომენტიდან არის მნიშვნელოვანი n და l კვანტური რიცხვების „შეჯიბრი“, რომლის შესახებაც წინა პარაგრაფში გვქონდა ლაპარაკი. ამიტომაც კალიუმის მეცხრამეტე ელექტრონი ვათავსებთ N გარსის $4s$ მდგომარეობაში. ასე რომ, შეუვსებელს ვტოვებთ M გარსის $3d$ ადგილებს, იგივე მიზეზით კალციუმის მეოცე ელექტრონიც უნდა მოვათავსოთ $4s$ მდგომარეობაში. $3d$ მდგომარეობაში დარჩენილ ადგილებს კი ავსებენ ატომები

Sc, Ti, V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni, Cu, Zn.

ზოგიერთ შემთხვევაში d გარსის შევსება ხდება არათანამიმდევრობით. მაგალითად, თუ $_{25}\text{V}$ -ისათვის გვაქვს კონფიგურაცია $(Ar)4s^2 3d^3$, სადაც (Ar) მიუთითებს არგონის ჩაკეტილ კონფიგურაციას, იმის ნაცვლად, რომ ქრომს ჰქონდეს $(Ar)4s^2 3d^4$ კონფიგურაცია, სინამდვილეში აქვს $(Ar)4s 3d^5$ კონფიგურაცია, ხოლო მომდევნო ელემენტი $_{26}\text{Mn}$ -ს აქვს წესიერი კონფიგურაცია $(Ar)4s^2 3d^5$ და ა. შ. N გარსის დარჩენილ ადგილებს ნაწილობრივ ავსებენ Ga, Ge, As, Se, Br და Kr -ის ელექტრონები და ამით მთავრდება შემდეგი პერიოდი. ეს პერიოდიც ინერტული გაზით Kr (კრიპტონი) მთავრდება. მიუხედავად იმისა, რომ N გარსში კიდევ გვაქვს ვაკანტური ადგილები, რუბიდიუმის ელექტრონი უნდა მოვათავსოთ

ახალ O გარსში ($n=-5$), რადგან რუბიდიუმი თავისი თვისებებით ჰგავს ნატრიუმსა და კალიუმს. შემდეგი ელემენტი სტრონციუმი (Sr) ანალოგიურია კალციუმისა. ელემენტები ცეზიუმამდე ავსებენ O და N გარსში დარჩენილ თავისუფალ ადგილებს. ცეზიუმიდან იწყება ახალი P გარსის შევსება.

იშვიათმიწათა ელემენტები. ელემენტებს $_{57}La$ (ლანთანი)-დან ჰაფნიუმამდე ($_{72}Hf$) უწოდებენ ლანთანიდებს ანდა იშვიათმიწათა ელემენტებს. ეს ელემენტები ხასიათდება იმით, რომ ყველას O და P გარსებში აქვს მსგავსი კონფიგურაციები. ამ ელემენტებით იწყება $4f$ მდგომარეობების შევსება. სათანადო ანალიზი გვიჩვენებს, რომ $4f$ მდგომარეობის შევსებისას ახლად დამატებული ელექტრონები

$_{57}La$	$5d$,	$6s$
$_{58}Ce$	$4f^2$,	$6s^2$
$_{59}Pr$	$4f^3$	$6s^2$
$_{60}Nd$	$4f^4$	$6s^2$
$_{61}Pm$	$4f^5$,	$6s^2$
$_{62}Sm$	$4f^6$,	$6s^2$
$_{63}Eu$	$4f^7$,	$6s^2$
$_{64}Gd$	$4f^7$,	$5d6s^2$
$_{65}Tb$	$4f^8$,	$5d6s^2$
$_{66}Dy$	$4f^{10}$,	$6s^2$
$_{67}Ho$	$4f^{11}$	$6s^2$
$_{68}Er$	$4f^{12}$	$6s^2$
$_{69}Tm$	$4f^{13}$	$6s^2$
$_{70}Yb$	$4f^{14}$	$6s^2$
$_{71}Lu$	$4f^{14}$	$5d6s^2$

ცხრილში მოცემულია იშვიათმიწათა ელემენტების კონფიგურაციები იმ ელექტრონებისათვის, რომლებიც მოსდევნება ჰალაიდების კონფიგურაციას.

ატომგულთან გაცილებით უფრო ახლოს თავსდება, ვიდრე ის ელექტრონები, რომლებიც გვექონდა ახალი ელექტრონების დამატებამდე. ამიტომ ახლად დამატებული ელექტრონები თითქმის არავითარ გავლენას არ ახდენს ატომის ქიმიურ თვისებებზე. ამიტომაცაა, რომ იშვიათმიწათა ელემენტებს ერთნაირი ქიმიური თვისებები აქვს. ცხრილში მოცემულია იშვიათმიწათა ელემენტების უკანასკნელი ელექტრონების შევსების თავისებურებები, როგორც ვხედავთ, $4f$ გარსის შევსება არ ხდება საესებით კანონზომიერად.

დიდი ხნის განმავლობაში Hf ეგონათ იშვიათმიწათა ელემენტი. 1922 წლამდე ეს ელემენტი აღმოჩენილი არ იყო და მის აღგის ტოვებდნენ იშვიათმიწათა ელემენტებში. მაგრამ ელექტრონთა შევსების თავისებურებებიდან გამომდინარე, ბორმა აჩვენა, რომ ჰაფნიუმი თავისი თვისებებით უნდა ჰგავდეს ცირკონიუმს; მართლაც, სულ მალე, ჰაფნიუმი აღმოჩენილი იქნა ცირკონიუმის მადანში. იშვიათმიწათა ელემენტების ელექტრონთა კონფიგურაციის ცხრილიდან ჩანს, რომ არც ლუტეციუმი (Lu) წარმოადგენს იშვიათმიწათა ელემენტს, რადგან $4f$ გარსი უკვე

იტვრბიუმშია შევსებული, ამ ელემენტში კი იწყება ახალი $5d$ მდგომარეობის შევსება.

ამგვარადვე შეგვიძლია ვიპოვოთ ყოველი ატომის ელექტრონული გარსის კონფიგურაციები და ავხსნათ ელემენტთა პერიოდული სისტემის ძირითადი თვისებებები.

მდგომარეობათა დახასიათება მულტიპლეტური აღნიშვნებით. ატომების მდგომარეობათა სრული დახასიათებისათვის მნიშვნელოვანია მდგომარეობათა აღწერა მულტიპლეტურ აღნიშვნებში. გამოვიყენოთ აღნიშვნა $^{2s+1}L_J$, სადაც S ატომის სპინია; $L=0, 1, 2, \dots$ მაგიერ უნდა შევიტანოთ სათანადო აღნიშვნები $S, P, D, F, G, \dots$ ხოლო $J=L+S$ წარმოადგენს ატომის სრულ მომენტს. ინერტული გაზების ატომებში, რადგან ყველა სპინები წყვილ-წყვილად ანტიპარალელურია, $S=0$. ჰელიუმის ატომში გვაქვს ორი $1s$ ელექტრონი ამიტომ $L=0$ და, მაშასადამე, $J=0$. ამრიგად, ჰელიუმის ატომი ხასიათდება 1S_0 მდგომარეობით. Ne -ის ატომისათვის დამახასიათებელია აგრეთვე ჩაკეტილი კონფიგურაცია, ამიტომ მისთვისაც $S=0$. ამ ატომის ელექტრონებისათვის $l=0$ და $l=1$ ($m=0, \pm 1$). აშკარაა, რომ $M = \sum m_i = 0$, და $L=0$, $J=0$. იგივე მდგომარეობა გვექნება

ყველა ინერტული გაზისათვის. გამოძლინარე აქედან, ისინი განისაზღვრებიან 1S_0 ფორმულით. ასევე, რადგან ტუტე მეტალების ატომებს ინერტული გაზის ჩაკეტილი გარსის შემდეგ აქვს ერთი ელექტრონი, გვექნება $S=1/2$, $L=0$ და $J=1/2$. ამ ატომების მდგომარეობები აღინიშნება $^2S_{1/2}$ სახით.

მეორე ჯგუფის ელემენტების ატომებისათვის დამახასიათებელია $1s^2 2s^2$ კონფიგურაცია, ამიტომ მულტიპლეტურ აღწერაში მათ შეესაბამება 1S_0 აღნიშვნა. მესამე ჯგუფის ელემენტებისათვის $S=1/2$, $L=1$ და $J=1/2$, რის გამოც გვექნება $^2P_{1/2}$ მდგომარეობა. როგორც წინა პარაგრაფში აღვნიშნეთ, p^2 კონფიგურაცია ხასიათდება 3P ფორმულით; მასასადავს, მეოთხე სვეტის ელემენტების დახასიათდება 3P_0 მდგომარეობით ($J=|1-1|=0$). რადგან p^3 კონფიგურაცია ხასიათდება 4S თერმით, ამიტომ მეხუთე სვეტის ელემენტების ატომები დახასიათდება $^4S_{3/2}$ კონფიგურაციით. ასევე ჰალოგენების ჯგუფის ატომები დახასიათდება $^2P_{1/2}$ მდგომარეობით და ა. შ.

ვალენტობა. როგორც დავინახეთ, კვანტური მექანიკის თანახმად, ელემენტთა პერიოდულობა, რომელიც ელვინდება ქიმიური თვისებების კანონზომიერ მსგავსებაში, შედეგი ყოფილა გარე ელექტრონული გარსების შევსების თავისებურებებისა; რადგან ინერტული გაზების ატომები ხასიათდება ძალზე მდგრადი კონფიგურაციით, ამიტომ ქიმიურ რეაქციებში ისინი მონაწილეობას არ იღებენ. ჰალოგენები ხასიათდება $^2P_{1/2}$ კონფიგურაციით, სადაც ინერტული გაზების ატომების ჩაკეტილი კონფიგურაციის შესაქმნელად მათ აკლიათ ერთი ელექტრონი, ჰალოგენებზე ერთი ელექტრონის მიერთებისას კი ბმის ენერგია ნახტომისებურად იზრდება. ამით აიხსნება ჰალოგენების ღიდი აქტივობა ქიმიურ რეაქციებში. ტუტე მეტალების ატომები, პირიქით, ხასიათდება იმით, რომ მათ ინერტული გაზის ჩაკეტილი კონფიგურაციის შემდეგ აქვთ სუსტად ბმული ერთი ზედმეტა ელექტრონი, რომელსაც ადვილად გასცემენ ქიმიური რეაქციების დროს. ამიტომ როგორც ჰალოგენები, ისე ტუტე მეტალები ერთვალენტია.

Be, Mg, Cu... ჩაკეტილი გარსის შემდეგ აქვთ ორ-ორი ელექტრონი. რადგან მათ აქვთ მისწრაფება იმ ორი ელექტრონის გაცემისა, ამიტომ ისინი ორვალენტია.

ვალენტობის ასეთი განმარტებით ნათელი არაა, თუ რატომ ახასიათებს ერთი და იმავე ჯგუფის ელემენტებს სხვადასხვა ვალენტობა.

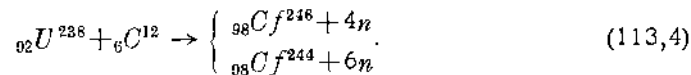
კვანტურ მექანიკაში ატომის ვალენტობა დაკავშირებულია ატომის სპინთან; სახელდობრ, ვალენტობა განისაზღვრება როგორც ატომის სპინის გაორკვეცბული მნიშვნელობა. ცვალებადი ვალენტობა ფიზიკურად გამოწვეულია იმით, რომ ატომს ქიმიურ რეაქციებში მონაწილეობის მიღება შეუძლია როგორც ნორმალურ, ისე ალგუნებულ მდგომარეობაში. ამასთან, სპინის მნიშვნელობა ალგუნებულ მდგომარეობაში საზოგადოდ განსხვავებულია ნორმალურ მდგომარეობაში მყოფი ატომის სპინის მნიშვნელობისაგან. რადგან პირველი ჯგუფის ელემენტების ატომების სპინი ნახევრის ტოლია, ამიტომ ეს ელემენტები ერთვალენტია. მეორე ჯგუფის ატომების სპინი არის ნულის ტოლი, რის გამო ნორმალურ მდგომარეობაში ეს ატომები ქიმიურ რეაქციებში მონაწილეობას არ იღებს. მიგრამ ამ ატომებს აქვს ალგუნებული მდგომარეობა $s^1 p$, ე. ი. s^2 მდგომარეობიდან ერთი ელექტრონი გადასულია p მდგომარეობაში. ამ მდგომარეობის სპინი $S=1$, ამიტომ ეს ატომები იჩენს ორ ვალენტობას. ამ ჯგუფის ატომების ძირითადი ვალენტობა სწორედ ორის ტოლია, მესამე სვეტის ატომებს $s^2 p^1$ ძირითად მდგომარეობაში აქვს სპინი $S=1/2$,

ამიტომ მათი ვალენტობა ერთის ტოლია. მაგრამ ამ ატომებს აქვთ აგზნებული მდგომარეობაც s^2p^2 სპინით $3/2$, რის გამოც ამ ჯგუფის ელემენტებს გარდა ერთ-ვალენტიანობისა, ახასიათებს სამვალენტიანობაც. მეოთხე ჯგუფის ელემენტებს ძირითადად s^2p^2 მდგომარეობაში აქვთ $S=1$ სპინი. აგზნებულ მდგომარეობას s^2p^3 აქვს $S=2$ სპინი, ამიტომ ამ ჯგუფის ელემენტების ვალენტობა უდრის 2 და 4-ს. ანალოგიურად, მეხუთე სვეტის ელემენტები ავლენენ 3 და 5 ვალენტობას, რადგან ძირითადი მდგომარეობის სპინი $3/2$ -ის ტოლია, აგზნებულის კი $-5/2$. ამასთან, ხდება აგზნება s^2p^2 მდგომარეობის s ელექტრონისა, რომელიც გადადის განსხვავებული n -ის მქონე ახალ მდგომარეობაში, სახელდობრ, $(ns^2p^2)(n's)$ -ში. მეექვსე ჯგუფის ელემენტებს ძირითად s^2d^4 მდგომარეობაში აქვს $S=1$ სპინი, ამიტომ ისინი ორვალენტიანები არიან. ერთი p ელექტრონის აგზნება იძლევა $(ns^2p^3)(n's)$ კონფიგურაციას $S=2$ სპინით, ერთი s ელექტრონის აგზნება კი — $(ns^2p^3)(n'sp)$ კონფიგურაციას $S=3$ სპინით. ამასთან დაკავშირებით ეს ელემენტები დამატებით ამჟღავნებენ 4 და 6 ვალენტობას. მეშვიდე ჯგუფის ელემენტებს ძირითად მდგომარეობაში აქვთ $S=1/2$ სპინი. ამიტომ ისინი ერთვალენტიანებია, მაგრამ მათ აქვთ $S=3/2, 5/2$ და $7/2$ სპინის შესაბამისი აგზნებული მდგომარეობებიც, რის გამოც ეს ელემენტები 3, 5 და 7 ვალენტობასაც ამჟღავნებენ და ბოლოს, რადგან ინერტული გაზის ატომების სპინი $S=0$ და დიდი ალგზნების ენერგიით ხასიათდებიან, ამიტომ ისინი ქიმიურ რეაქციებში მონაწილეობას არ იღებენ და მათ აქვთ ნულოვანი ვალენტობა.

იშვიათმიწათა ელემენტებში $4f$ ელექტრონები გულთან ახლოს თავსდება. ამიტომ ისინი ძირითად მდგომარეობაში ვალენტობის განსაზღვრაში მონაწილეობას არ იღებენ. ვალენტობას განსაზღვრავს გარეთა s და p ელექტრონები, ამიტომ ისინი ძირითადად ავლენენ 3 და 4 ვალენტობას. მაგრამ ამ ელემენტებს რეაქციებში შეუძლიათ შევიდნენ ისეთ ალგზნებულ მდგომარეობებში, როცა ერთი ელექტრონი $4f$ დონიდან გადასულია s და p მდგომარეობაში. ამით ამ ელემენტების ვალენტობა ერთით გაიზრდება.

ტრანსურანული ელემენტები. თანამედროვე ფიზიკისათვის არ არსებობს პრინციპული სიმწლე პერიოდული სისტემის ერთი ელემენტის მეორედ გარდასაქმნელად. ამ მიზნისათვის შეიძლება გამოვიყენოთ გარკვეული ტიპის ატომგულური რეაქციები. ამ რეაქციების მეშვეობით შესაძლებელია არათუ ერთი ელემენტის სხვად გარდაქმნა, არამედ სრულიად ახალი ელემენტების მიღებაც. ამ მეთოდით მოსპობილ იქნა ის „თეთრი ლაქები“, რომლებიც გეჰონდა პერიოდულ სისტემაში. ასეთი იყო ელემენტები, რომელთა რიგითი ნომერი უნდა ყოფილიყო $Z=43, 61, 85$ და 87 . ეს ელემენტები მიღებულ იქნა ხელოვნური გზით. ამასთან, $Z=43$ უწოდეს ტექნეციუმი (Tc), $Z=61$ — პრომეთეუმი (Pm), $Z=85$ — ასტატინი (At), ხოლო $Z=87$ — ფრანციუმი (Fr). ყველა ეს ელემენტი არამდგრადია და გარკვეული დროის შემდეგ იშლება, ამიტომაც ისინი ბუნებაში არ არსებობდნენ. პერიოდული სისტემა, დაწყებული ერთიდან $Z=92$ -მდე, მთლიანად შევსებულია. ამ ფარგლებში ახალი ელემენტის აღმოჩენა შეუძლებელია; იგი შეიძლება მხოლოდ $Z>92$ -თვის, ასეთი ელემენტები საკმარისად ბევრია მიღებული ხელოვნური გზით. მათ ურანის იქითა, ანდა ტრანსურანულ ელემენტებს უწოდებენ. პერიოდული სისტემა დღეს უკვე 104 ელემენტს შეიცავს. ეს ელემენტებია: ${}_{93}Np$ (ნეპტუნიუმი), ${}_{94}Pu$ (პლუტონიუმი), ${}_{95}Am$ (ამერიციუმი), ${}_{96}Cm$ (კიურიუმი), ${}_{97}Bk$ (ბერკლიუმი), ${}_{98}Cf$ (კალიფორნიუმი), $Z=99$ ელემენტს უწოდეს აინშტაინიუმი (Es), $Z=100$ — ფერმიუმი (Fm), $Z=101$ — მენდელეევიუმი (Mv), $Z=102$ — ნობელიუმი (No), $Z=103$ — ლავრეტსენიუმი (Lr), $Z=104$ — კურჩატოვიუმი

(*Ku*)¹. ყველა ეს ატომი მიიღება მძიმე ატომგულების დაბომბვით. მაგალითად, კალიფორნიუმის იზოტოპები მიიღება ${}_{92}\text{U}^{238}$ ატომგულების ციკლოტრონზე აჩქარებული C^{12} გულებით დაბომბვით, შემდეგი რეაქციის მიხედვით



ყველა ამ ელემენტის სიცოცხლის ხანგრძლივობა შეუდარებლად ნაკლებია დედამიწის სიცოცხლის ხანგრძლივობაზე, ამიტომაც ისინი ბუნებაში არ არსებობენ და თავის დროზე კიდევაც რომ არსებულაყვნენ, დაიშლებოდნენ და ჩვენამდე მაინც ვერ მოაღწევდნენ.

ტრანსურანული ელემენტები ხასიათდება თითქმის ერთნაირი ქიმიური თვისებებით. ისინი ქმნიან ჯგუფს, რომელიც ჰგავს ლანთანიდებისას, ამ ელემენტებში ლანთანის როლს ასრულებს აქტინიუმი და ამიტომ, იწვიათმიწათა ელემენტების ჯგუფის ანალოგიით, ამ ელემენტებს აქტინიდებს უწოდებენ.

იბადება კითხვა, სანამდე შეიძლება გაგრძელდეს ისეთი ახალი ელემენტების მიღება, რომლებსაც ექნება სიცოცხლის შესამჩნევი ხანგრძლივობა? ამ კითხვაზე ამომწურავი პასუხის გაცემა, დღეისათვის არსებული მონაცემებით, შეუძლებელია. ზედა ზღვრისათვის შეგვიძლია მოვიყვანოთ შემდეგი მსჯელობა: დავუშვათ, ხელოვნურად მიღებული ტრანსურანული ელემენტის ატომგულის ზომა შეგვიძლია წერტილოვნად ჩავთვალოთ, მაშინ ბორის თანახმად, პირველ ორბიტაზე მოძრავი ელექტრონისათვის გვექნება სიჩქარე

$$v = \frac{Ze^2}{\hbar}, \quad (113,5)$$

საიდანაც

$$Z = \frac{\hbar v}{e^2}. \quad (113,6)$$

Z -ს მაქსიმუმი ექნება მაშინ, როცა $v = c$, ე. ი. როცა $Z = \frac{\hbar c}{e^2} = \alpha_0^{-1} = 137$. ამ შე-

ფასებიდან ჩანს, რომ არ შეიძლება მივიღოთ ელემენტი, რომლისთვისაც $Z \geq 137$.

განმეორებით აღვნიშნოთ, რომ ეს შეფასება საკმარისად უხეშია, რადგან ატომგულის სინამდვილეში წერტილოვანს არ წარმოადგენს.

შეთანხმდნენ, რომ ამის შემდეგ ახლად აღმოჩენილი ელემენტის სიმბოლოდ აღებულ იქნეს ამ ელემენტის სახელწოდების პირველი ორი ასო; ანდა, თუ ასეთი სიმბოლო პერიოდულ სისტემაში უკვე არსებობს, მაშინ პირველი და მეორე მარცვლის პირველი ასო: მაგალითად, *Ni* (ნობელიუმი) *Es* (აინშტაინიუმი) და სხვა.

§ 114. მაგნიტური მოვლენები რთულ ატომებში

ერთელექტრონიანი ატომების მაგნიტურ მოვლენებსა და მრავალელექტრონიანი ატომების მაგნიტური მოვლენების აღწერათა შორის პრინციპული განსხვავება არ არსებობს; განსხვავება მხოლოდ იმაშია, რომ ყველგან, სადაც კი გვხვდება აზიმუტალური კვანტური რიცხვი l , უნდა შევცვალოთ სრული ორბიტალური მომენტის კვანტური L რიცხვით, ნაწილაკის სპინი s —სრული S სპინით, ხოლო

¹ აქამდე დუბნაში, ბირთვულ გამოკვლევათა გაერთიანებულ ინსტიტუტში უკვე მიღებულია 106-ელემენტი.

ერთი ნაწილაკის სრული მომენტი— j სისტემის სრული J მომენტი; ასე მაგალითად, რთული ატომების მაგნიტურ ველში მოთავსებისას, იმის ანალოგიურად, რაც გვექონდა ერთელექტრონიან ატომებში (იხ. ფორმულა (98,19)), ენერგია შეიცვლება სიდიდით (ზეემანის ეფექტი)

$$E_{JM_J} = \Omega \hbar g M_J, \quad (114,1)$$

სადაც

$$M_J = -J, (J-1) \dots J-1, J, \quad (114,2)$$

ლანდეს g მამრავლი რთული ატომებისათვის, (98,18) ფორმულის თანახმად, შემდეგნაირად განისაზღვრება:

$$g = 1 + \frac{J(J+1) - L(L+1) + S(S+1)}{2J(J+1)}, \quad (114,3)$$

$\Omega = \frac{e \hbar \mathcal{H}}{2 \mu_B}$ წარმოადგენს ლარმორის სიხშირეს. რადგან M_J იღებს სულ $(2J+1)$

მნიშვნელობას, რთულ ატომებში ზეემანის ეფექტი $(2J+1)$ ჯერადი გადაგვარების მოხსნაში მდგომარეობს. ერთელექტრონიანი ატომებისაგან განსხვავებით, რთული ატომების შემთხვევაში M_J შეიძლება ნულიც იყოს (რადგან J -ს შეუძლია მიიღოს მთელი მნიშვნელობებიც) და, მაშასადამე, ზეემანის ეფექტი არ გვექონდეს.

თუ სპინი ნულის ტოლია ($S=0$), მაშინ $J=L$ და ლანდეს მამრავლი ერთის ტოლია ($g=1$). ამ შემთხვევაში, (114,1) ფორმულის თანახმად, გვექნება ზეემანის მარტივი ეფექტი

$$E_{JM_J} = (\hbar \Omega) M_J. \quad (114,4)$$

როცა $L=0$, მაშინ $J=S$ და $g=2$. ხოლო როცა $J=0$, მაშინ ლანდეს მამრავლი განუზღვრელია; ამ შემთხვევაში $M_J=0$, და ზეემანის ეფექტი არა გვაქვს.

ანალოგიურადვე მივიღებთ, რომ გარეშე მაგნიტურ ველში შეტანისას რთული ატომების მომენტის საშუალო მნიშვნელობა მაგნიტური ველის დაძაბულობის გასწვრივ, აბსოლუტურ T ტემპერატურაზე, განისაზღვრება ფორმულით

$$\overline{M} = J g M_B f(x), \quad (114,5)$$

სადაც g არის (114,3) ფორმულით განსაზღვრული ლანდეს მამრავლი, M_B — ბორის მაგნეტონი, ხოლო $B_f(x)$ — ბრილუენის ფუნქცია და იგი ერთელექტრონიანი ატომისათვის შემოღებული (99,20) ფუნქციისაგან განსხვავდება იმით, რომ ელექტრონის სრული j მომენტი შეცვლილია ატომის სრული J მომენტით, ე. ი.

$$B_f(x) = \left(1 + \frac{1}{2J}\right) \operatorname{cth} \left\{ \left(1 + \frac{1}{2J}\right) x \right\} - \frac{1}{2J} \operatorname{cth} \left(\frac{x}{2J} \right). \quad (114,6)$$

ამასთან

$$x = \frac{\beta \mathcal{H} J}{kT}, \quad \beta = M_B g, \quad (114,7)$$

იმ კერძო შემთხვევაში, როცა $x \ll 1$ (სუსტი გარეშე ველის შემთხვევა), პარამაგნიტური ამთვისებლობისათვის გვექნება

$$\chi_J(T) = \frac{J(J+1)g^2 M_B^2}{3kT}, \quad (114,8)$$

ერთელექტრონიანი ატომებისაგან განსხვავებით, რთული ატომების სრული მომენტი შეიძლება ნულიც იყოს ($J=0$). ამ დროს პარამაგნიტიზმის ეფექტი არა

გვაქვს, ე. ი. $\chi_A(T)=0$. რადგან ინერტული გაზების ატომების He , Ne , Ar და ა. შ. სრული მომენტი $J=0$, ამიტომ მათ პარამაგნიტიზმი არ ახასიათებთ.

იმის გამო, რომ ყველა ერთელექტრონიანი ატომები პარამაგნიტურია და პარამაგნიტიზმის ეფექტი კი გაცილებით მეტია დიამაგნიტიზმზე, ამიტომ ერთელექტრონიანი გაზებისათვის დიამაგნიტიზმის განხილვას აზრი არა აქვს. რთულ ატომებში კი ზოგიერთ ატომს პარამაგნიტიზმი არ ახასიათებს, ამიტომ დიამაგნიტიზმის მოვლენა გადამწყვეტ როლს ასრულებს; მაგალითად, დიამაგნიტური იქნება ყველა ინერტული გაზი. N ელექტრონის მქონე რთული ატომის დიამაგნიტური ამოვისებლობა, (99,32)-ის თანახმად, გამოისახება ფორმულით

$$\chi_d = - \frac{e^2}{4\mu c^2} \sum_{i=1}^N \overline{(x_i^2 + y_i^2)}. \quad (114,9)$$

განვიხილოთ ჰელიუმის ატომის შემთხვევა, მისთვის $N=2$, ამიტომ

$$\chi_d = - \frac{e^2}{4\mu c^2} \{ \overline{x_1^2 + y_1^2} + \overline{x_2^2 + y_2^2} \}. \quad (114,10)$$

რადგან ძირითად მდგომარეობაში, ($1s^2$), ჰელიუმს გააჩნია სფერული სიმეტრია (როცა $l=0$, მაშინ, $m_l=0$, და ტალღურ ფუნქციაში კუთხეზე დამოკიდებული ნაწილი არა გვაქვს), ამიტომ $\overline{x_1^2} = \overline{y_1^2} = \overline{x_2^2} = \overline{y_2^2} = 1/3 \overline{r^2}$ და, მაშასადამე,

$$\chi_d = - \frac{e^2}{3\mu c^2} \overline{r^2}, \quad (114,11)$$

კლასიკურ მექანიკაში $\overline{r^2}$ განსაზღვრა პრინციპულად შეუძლებელი იყო. კვანტურ მექანიკაში კი, ვიცით რა ჰელიუმის ატომის ტალღური ფუნქციები, შეგვიძლია $\overline{r^2}$ გამოვთვალოთ $\overline{r^2} = \int \psi^* r^2 \psi d\tau$ ფორმულით. გამოთვლები დიამაგნიტური ამოვისებლობისათვის იძლევა სიდიდეს, რომელიც კარგად ეთანხმება ექსპერიმენტულ მნიშვნელობას.

§ 115. ატომური ერთეულები

გამოყენებით საკითხებში ხშირად იხმარება ე. წ. ატომური ერთეულები, რომლებიც შემოყვანილი იყო პარტრის მიერ¹. ეს ერთეულები საკმაოდ ამარტივებს იმ ფორმულებს, რომლებიც გვხვდება ატომის თეორიაში.

ამ სისტემაში ერთეულებად აღებულია შემდეგი სიდიდეები:

მუხტის ერთეული—ელექტრონის მუხტი $e=4,8 \cdot 10^{-10}$ CGSE,

მასის ერთეული—ელექტრონის მასა $\mu=9.1 \cdot 10^{-28}$ გრ.,

სიგრძის ერთეული—ბორის პირველი ორბიტის რადიუსი $a_0 = \frac{\hbar^2}{\mu e^2} = 0,529 \times 10^{-8}$ სმ.

ყველა წარმოებული სიდიდეები შეგვიძლია განვსაზღვროთ ამ ერთეულებით; მაგალითად, ენერგიის ერთეულისათვის გვქვნება

$$\frac{e^2}{a_0} = \frac{\mu e^4}{\hbar^2} = 4,304 \cdot 10^{-11} \text{ ერგი} = 27,07 \text{ eV}, \quad (115,1)$$

¹ D. R. Hartree, Proc. Camb. Phil. Soc. 24,89 (1928).

რომელიც წარმოადგენს წყალბადის ატომის გარკვეული იონიზაციის ენერგიას. სიჩქარის ერთეულისათვის გვექნება

$$v_0 = \frac{e^2}{\hbar} = \frac{c}{137}, \quad (115,2)$$

დროის ერთეული იქნება ტოლი

$$\frac{a_0}{v_0} = \frac{\hbar^3}{\mu e^4}, \quad (115,3)$$

სიხშირის ერთეული მიიღება დროის ერთეულის შებრუნებით

$$\frac{v_0}{a_0} = \frac{\mu e^4}{\hbar^3}, \quad (115,4)$$

ქმედების ერთეული კი იქნება $\hbar = 1,05 \cdot 10^{-27}$ ერგი სეკ. და ა. შ.

ატომურ ერთეულებზე გადასვლა მარტივად ხდება. ამისათვის საკმარისია ყველა გამოსახულებაში ავიღოთ $e = \mu = \hbar = 1$; მაგალითად, ატომურ ერთეულებში წყალბადის ატომის ენერგია გამოისახება ფორმულით

$$E_n = -\frac{1}{2n^2}, \quad n = 1, 2, \dots \quad (115,5)$$

ხოლო ტალღური ფუნქცია

$$\psi_{100} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} e^{-r}. \quad (115,6)$$

და ა. შ. თუ ატომური ერთეულებიდან გვსურს დავუბრუნდეთ ჩვეულებრივ ერთეულებს, მაშინ საჭიროა სიგრძე გავამრავლოთ სიგრძის ერთეულზე, ე. ი. $0,529 \cdot 10^{-8}$ სმ-ზე. ენერგია — ენერგიის ერთეულზე, ე. ი. $27,07 \text{ eV}$ -ზე და ა. შ. მაგალითად, ატომურ ერთეულებში წყალბადის ატომის ძირითადი მდგომარეობის ენერგია იქნება $E_1 = -\frac{1}{2}$. ჩვეულებრივი ერთეულების მისაღებად საჭიროა ეს

სიდიდე გავამრავლოთ ენერგიის ერთეულზე, ე. ი. $27,07$ -ზე. მივიღებთ $E_1 = -13,5 \text{ eV}$ და ა. შ.

ხშირად, ატომის ფიზიკაში ენერგიას გამოხატავენ რიდბერგებშიც — Ry . რიდბერგი წარმოადგენს ენერგიის ატომური ერთეულის ნახევარს, ე. ი. იგი ემთხვევა წყალბადის ატომის იონიზაციის ენერგიას $Ry = 13,5 \text{ eV}$, ამასთან, რიცხვით მნიშვნელობას მარჯვნივ უწერენ Ry სიმბოლოს.

დავამყაროთ მნიშვნელოვანი თანაფარდობები სამ უნივერსალურ სიგრძის განზომილების სიდიდეს შორის

$$r_0 = \frac{e^2}{\mu e^2}, \quad \lambda_c = \frac{\hbar}{\mu c}, \quad a_0 = \frac{\hbar}{\mu e^2}, \quad (115,7)$$

პირველი წარმოადგენს ელექტრონის კლასიკურ რადიუსს, მეორე — კომპტონის ტალღის სიგრძეს, ხოლო მესამე — ბორის პირველი ორბიტის რადიუსს.

აშკარაა, რომ

$$\frac{r_0}{\lambda_c} = \frac{e^2}{\hbar c} = \alpha_0. \quad (115,8)$$

ასევე,

$$\frac{\lambda_c}{a_0} = \frac{e^2}{\hbar c} = \alpha_0 \quad \text{და} \quad \frac{r_0}{a_0} = \left(\frac{e^2}{\hbar c} \right)^2 = \alpha_0^2. \quad (115,9)$$

სადაც α_0 არის ზომერფელდის ნაზი სტრუქტურის მუდმივი.