ი. ვაშაკიძე, ვ. მამასახლისოვი, გ. ჭილაშვილი

კვანტური მექანიკა

მეორე შევსებული და გადამუშავებული გამოცემა

თბილისის უნივერსიტეტის გამომცემლობა
თბილისი 1978

530.145
ვ-251

სახელმძღვანელოში ფართოდაა განხილული როგორც ერთი ნაწილაკის, ისე ნაწილაკთა სისტემის კვანტური მექანიკა და ელექტრონის რელატივისტური კვანტური მექანიკა.

წიგნი განკუთვნილია სახელმძღვანელოდ ფიზიკის ფაკულტეტის სტუდენტებისათვის.

©/თბილისის უნივერსიტეტის გამომცემლობა, 1978

ᲛᲔᲝᲠᲔ ᲒᲐᲛᲝᲪᲔᲛᲘᲡ ᲬᲘᲜᲐᲡᲘᲢᲧᲕᲐᲝᲑᲐ

წიგნი წარმოადგენს მეორე შევსებულ და გადამუშავებულ გამოცემას. პირველი გამოცემიდან გავიდა თითქმის ორი ათეული წელი. მართალია, ამ ხნის განმავლობაში კვანტურ მექანიკაში არსებითი ცვლილებები არ მომხდარა, მაგრამ შეიცვალა მისი აპარატი და მთელი რიგი ფუნდამენტური საკითხების გადმოცემის მეთოდიკა. ვარლა ამისა, აღნიშნულ დისციპლინაში გამოქვეყნდა მაღალმეცნიერულ დონეზე დაწერილი მრავალი ნაშრომი. აქედან გამომდინარე, სახელმძღვანელოს ბევრი თავი და პარაგრაფი ან თავიდან დაიწერა, ანდა არსებითად გადამუშავდა.

წიგნი დაწერილია იმ ვარაუდით, რომ შესაძლებელი იყოს ზოგიერთი საკითხის [illegible] კვეთის გამოტოვება. ამას დიდი მნიშვნელობა აქვს, რამდენადაც [illegible] სპეციალობის სტუდენტები ამ საგანს სხვადასხვა მოცულობის პროგრამით სწავლობენ.

სახელმძღვანელოზე მუშაობისას თვალწინ გვედგა ჩვენი მასწავლებლისა და [illegible] ვ. მამასახლისოვის ნათელი სახე, რომელიც, სამწუხაროდ, ვერ [illegible] ამ წიგნის ხელახალ გამოცემას.

ი. ვაშაკიძე, გ. ჭილაშვილი

პირველი გამოცემის წინასიტყვაობა

წინამდებარე კვანტური მექანიკის სახელმძღვანელოს დაწერას საფუძვლად დაედო ლექციების კურსი, რომელიც ორ ათეულზე მეტი წელია იკითხება თბილისის სახელმწიფო უნივერსიტეტის ფიზიკის ფაკულტეტზე პროფ. ვ. ი. მამასახლისოვის, ბოლო დროს კი, მისი მოწაფეების — დოც. ი. შ. ვაშაკიძისა და დოც. გ. ა. ჭილაშვილის მიერ.

კურსი შეესაბამება იმ პროგრამას, რომელიც დამტკიცებულია სახელმწიფო უნივერსიტეტების ფიზიკისა და ფიზიკა-მათემატიკის ფაკულტეტებისათვის. ამ სახელმძღვანელოსათვის დამახასიათებელია ის, რომ მასში ფართოდაა განხილული როგორც ერთი ნაწილაკის, ისე ნაწილაკთა სისტემის კვანტური მექანიკა და ელექტრონის რელატივისტური კვანტური მექანიკა.

წიგნის ხარისხის მნიშვნელოვნად გაუმჯობესებას ხელი შეუწყო პროფ. გ. რ. ხუციშვილისა და პროფ მ. მ. მირიანაშვილის შენიშვნებმა, რომლებმაც ყურადღებით წაიკითხეს მთელი წიგნი. ავტორები მათ უღრმეს მადლობას უცხადებენ. მადლობას მოვახსენებთ აგრეთვე ასპირანტ გ. ნიკობაძეს, რომელმაც გადათვალიერა ხელნაწერის დიდი ნაწილი.

წინამდებარე კვანტური მექანიკის კურსი პირველი სახელმძღვანელოა ქართულ ენაზე და ამიტომ, ბუნებრივია, დაზღვეული არ იქნება ნაკლისაგან. ავტორები სიამოვნებით მიიღებენ მკითხველთა უმნიშვნელო შენიშვნასაც კი, რომელიც დაეხმარება მათ წიგნის ხარისხის შემდგომ გაუმჯობესებაში.

ნაშრომის გამოსცემა ქართულ ენაზე გაამართლებს თავის მიზანს, თუ ნაწილობრივ მაინც შეავსებს იმ ხარვეზებს, რომლებსაც სისტემატურად აქვთ ადგილი კვანტური მექანიკის საფუძვლების შესწავლის დროს და ხელს შეუწყობს ქართველი ახალგაზრდების მომზადების დონის ამაღლებას თანამედროვე ფიზიკის ამ მეტად მნიშვნელოვან დარგში.

შესავალი

XX საუკუნის დასაწყისისათვის ფიზიკა თავისი განვითარების გზაზე სერიოზულ სიძნელეებს წააწყდა. სიძნელეთა ერთი ჯგუფი შეეხებოდა სინათლის ყოფაქცევას. აღმოჩნდა, რომ სინათლის სიჩქარე არ არის დამოკიდებული არც დამკვირვებლისა და არც სინათლის წყაროს მოძრაობაზე. სინათლის ასეთი თვისებები ვერ აიხსნა კლასიკური ფიზიკით და ამიტომ საჭირო გახდა იმ ზოგადი დებულებების გადასინჯვა, რომლებზე დაყრდნობითაც ჩამოყალიბებული იყო კლასიკური ფიზიკა.

რადგანაც ყოველი მოძრაობა წარმოადგენს სხეულის მდებარეობის შეცვლას სივრცესა და დროში, ამიტომ ბუნებრივია, კლასიკური ფიზიკის ძირითადი დებულებებიც დროისა და სივრცის თვისებებს შეეხებოდა. კლასიკური ფიზიკა უშვებდა, რომ სივრცე არის აბსოლუტური, დრო კი უნივერსალური. ამასთან, სივრცის აბსოლუტურობა ნიშნავს შემდეგს: რომ ავიღოთ ორი იდეალურად მყარი ღერო, რომლებიც სივრცის ერთ. რომელიმე ადგილას ტოლი არიან, მაშინ ეს ღეროები ერთმანეთის ტოლი დარჩება მიუხედავად ფარდობითი მოძრაობისა, რომელსაც ერთი ღერო მეორეს მიმართ შეიძლება ასრულებდეს. ასევე დროის უნივერსალურობის ქვეშ იგულისხმება, რომ დროის მსვლელობა არაა დამოკიდებული იმ სხეულების მოძრაობაზე, რომლებშიც ეს დრო დაიმზირება. თუ ავიღებთ ორ იდეალური სიზუსტით მომუშავე საათს და დავუშვებთ, რომ სივრცის ერთი და იგივე ადგილას ეს საათები ერთი და იგივე დროს უჩვენებენ, მაშინ დროის უნივერსალობაში უნდა გავიგოთ ის, რომ ამ საათების ჩვენება ყოველთვის თანხვედნილი იქნება, მიუხედავად ფარდობითი მოძრაობისა, რომელიც ერთმა საათმა შეიძლება შეასრულოს მეორის მიმართ.

არავის არ ეპარებოდა ეჭვი ამ დებულების სისწორეში, სანამ მასზე დამყარებული მექანიკა არ წააწყდა არსებით წინააღმდეგობებს. ამ წინააღმდეგობათა თავიდან აცილება მოხდა სივრცის აბსოლუტურობისა და დროის უნივერსალობის ცნებათა უარყოფის გზით.

ა. აინშტაინმა დაამტკიცა, რომ ნიუტონის მექანიკაში აღებული სივრცის აბსოლუტურობისა და დროის უნივერსალობის ცნებები, საზოგადოდ, სინამდვილეს არ შეესაბამებიან და რომ სივრცე და დრო ფარდობით ხასიათს ატარებს. მანძილი სივრცის ორ წერტილს შორის, ისევე როგორც შუალედი დროის ორ მომენტს შორის, დამოკიდებულია ათვლის სისტემაზე. ორი მოვლენა, რომელიც ერთდროულია ერთ რომელიმე ათვლის სისტემაში, არ არის ერთდროული სხვა ათვლის სისტემაში, რომელიც ნებისმიერად მოძრაობს პირველის მიმართ.

იმ მექანიკას, რომელიც ემყარება სივრცისა და დროის ფარდობითობის დებულებებს, რელატივისტურ მექანიკას უწოდებენ. როგორც ცნობილია, რელატივისტური მექანიკა უფრო ზოგადია და მისგან, როგორც კერძო შემთხვევა, მიიღება ნიუტონის მექანიკა. რელატივისტური მექანიკა გამოიყენება ნებისმიერი სიჩქარე-

ებისათვის, რომლებიც ნაკლებია სინათლის სიჩქარეზე. კლასიკური მექანიკა კი გამოსაყენებელი აღმოჩნდა მხოლოდ ისეთი სიჩქარეებისათვის, რომლებიც გაცილებით ნაკლებია სინათლის სიჩქარეზე. ამასთან, რელატივისტურ მექანიკაში მაქსიმალური სიჩქარე, რომელიც შეიძლება სხეულს გააჩნდეს, ტოლია სინათლის სიჩქარისა. რელატივისტური მექანიკის შექმნამ საშუალება მოგვცა კლასიკური ფიზიკის მთელი რიგი წინააღმდეგობების ახსნისა. მრავალი მოვლენა, რომელიც გაუგებარი იყო კლასიკური მექანიკისათვის, მარტივად აიხსნა რელატივისტური მექანიკით.

მაგრამ ამ პერიოდში აღმოჩენილ იქნა მთელი რიგი ახალი ფაქტებისა, რომლებიც ვერ აიხსნებოდა რელატივისტური მექანიკითაც. ეს ფაქტები ატომის ფიზიკას შეეხებოდა.

XX საუკუნის დასაწყისში დამტკიცებულ იქნა, რომ ატომი შედგება დადებითად დამუხტული ატომგულისაგან, რომლის ირგვლივ მოძრაობს ელექტრონები. სივრცისა და დროის ფარდობითობაზე დამყარებული კლასიკური ელექტროდინამიკა უძლური აღმოჩნდა აეხსნა ატომის მდგრადობის საკითხი. საქმე ისაა, რომ ელექტრონები გულის ირგვლივ მოძრაობენ მრუდხაზობრივად, რის გამოც მათ გააჩნიათ აჩქარება. კლასიკური ელექტროდინამიკის თანახმად კი აჩქარებული მუხტი უნდა ასხივებდეს ენერგიას. ამიტომ კლასიკური ელექტროდინამიკით ელექტრონი ენერგიის განუწყვეტელი კარგვის გამო თანდათან უნდა უახლოვდებოდეს გულს და ბოლოს მას უნდა ეცემოდეს. ექსპერიმენტული დაკვირვებები კი გვიჩვენებს, რომ ატომი საკმარისად მდგრადი სისტემაა და იგი გარედან ჩარევის გარეშე არ იშლება. გარდა ამისა, არსებობს მთელი რიგი სხვა მოვლენებისა ატომის სფეროში, რომლებიც ვერ აიხსნება როგორც ნიუტონის, ისე რელატივისტური მექანიკის თვალსაზრისით.

რადგან რელატივისტური მექანიკა საკმარისი არ აღმოჩნდა ატომური მოვლენების ასახსნელად, ბუნებრივია ვიფიქროთ, რომ კიდევ არსებობს რაღაც დებულება, რომლითაც სარგებლობს ნიუტონის მექანიკა და რომელიც უცვლელად იქნა დატოვებული რელატივისტური მექანიკის ჩამოყალიბების დროს. ამასთან, გასაგებია, რომ მას განსაკუთრებით დიდი მნიშვნელობა უნდა ჰქონდეს ატომური მოვლენების (ე. ი. მიკრო ობიექტების) შესწავლისას, რადგან მისი მცდარობა არ გამომჟღავნდა ისეთი დიდი სხეულების შესწავლის დროს, რომლებთანაც საქმე ჰქონდა ნიუტონის მექანიკას.

როგორც გამოირკვა, ეს დებულება შეეხებოდა ფიზიკური სიდიდის გაზომვის საკითხს. როგორც რელატივისტურ, ისე კლასიკურ ფიზიკაში უშვებდნენ, რომ ნებისმიერი სიდიდე პრინციპულად შეიძლება გაიზომოს რაგინდ დიდი სიზუსტით. თუ დღეს ტექნიკის დონე ისეთია, რომ საზომ იარაღს აქვს გარკვეული Δ ცდომილება, მომავალში, ტექნიკის განვითარებასთან ერთად, ცდომილება თანდათან შემცირდება და ბოლოს ნულს გაუტოლდება. ეს გარემოება ჩვენ შეგვიძლია ასეც გამოვხატოთ: როცა დრო მიისწრაფის უსასრულობისაკენ ($t \to \infty$), მაშინ ცდომილება მიისწრაფის ნულისაკენ ($\Delta \to 0$).

რადგან კლასიკურ მექანიკას საქმე ჰქონდა დიდ (მაკრო) სხეულებთან, გაზომვისას დაშვებული ცდომილება გაცილებით ნაკლები იყო გასაზომ სიდიდესთან შედარებით. ამიტომ, ბუნებრივია, გაზომვისას დაშვებულ ცდომილებებს პრინციპული მნიშვნელობა არ ენიჭებოდათ. მაგრამ როდესაც ფიზიკა გადავიდა მიკრო ობიექტების შესწავლაზე, მდგომარეობა სრულიად შეიცვალა. საქმე ისაა, რომ გაზომვის პროცესი თავისთავად გულისხმობს გასაზომი იარაღისა და გასაზომი ობიექტის ურთიერთქმედებას. რადგან გაზომვას ახდენს ადამიანი, ამიტომ გასაზომი

იარაღი ყოველთვის მაკროსკოპულია (კლასიკურია). გასაზომი იარაღი გაზომვის პროცესში იწვევს ცვლილებებს ან, როგორც ამბობენ, შეშფოთება შეაქვს გასაზომ ობიექტში. მიკრო ობიექტის შემთხვევაში გაზომვის პროცესმა შეიძლება ისეთი დიდი შეშფოთება შეიტანოს, რომ შედეგად მიღებული ცდომილება ისეთივე რიგისა გამოვიდეს, რაც თვით გასაზომი სიდიდე. ამგვარად, ცდომილებას, რომელსაც არსებითი მნიშვნელობა არ ჰქონდა კლასიკურ მექანიკაში, დიდი როლი ენიჭება მიკრო ობიექტების შესწავლის დროს. თუ გასაზომი სიდიდის ზომას აღვნიშნავთ A-თი, მაშინ ჩვენ შეგვეძლო პირიქითაც გვეთქვა, რომ, როცა $A \gg \Delta$, მაშინ გვაქვს დიდი სხეული, და იგი უნდა შევისწავლოთ კლასიკური მექანიკით, ხოლო როცა გასაზომი ობიექტი იგივე რიგისაა. რაც გაზომვისას დაშვებული ცდომილება, ე. ი. $A \sim \Delta$, მაშინ ჩვენ საქმე გვაქვს მიკროობიექტთან, რომელიც უნდა შევისწავლოთ რაღაც ახალი ტიპის მექანიკით. იბადება კითხვა, ხომ შეიძლება ტექნიკის განვითარებით ცდომილება Δ საკმარისად შემცირდეს და $A \sim \Delta$ პირობა შეიცვალოს $A \gg \Delta$ პირობით, ე. ი. მიკრო სხეული გახდეს მაკრო სხეული და თუ იგი წინათ კლასიკური მექანიკით არ აიწერებოდა, ახლა უკვე ამ მექანიკას უნდა ემორჩილებოდეს. მაგრამ აღმოჩნდა, რომ თურმე არსებობს გაზომვის ცდომილების ისეთი ზღვრული მნიშვნელობა Δ_0, რომელიც ტექნიკის განვითარებასთან არ არის დაკავშირებული. გამოირკვა, რომ მიკრო სამყაროში ზოგიერთ ფიზიკურ სიდიდეთა წყვილები ერთდროულად და ზუსტად პრინციპულად არ განისაზღვრება. ასეთი ფიზიკური სიდიდეებია არაკომუტატურ ოპერატორთა საკუთარი მნიშვნელობები, რომელთა კერძო შემთხვევასაც წარმოადგენს ჰაიზენბერგის განუზღვრელობის თანაფარდობა კოორდინატისა და იმპულსისათვის [1]

$$\Delta x \Delta p = 2\pi\hbar, \qquad (1)$$

სადაც Δp არის ზღვრული ცდომილება, დაშვებული იმპულსის გაზომვაში, Δx კი ასეთივე ცდომილებაა, დაკავშირებული კოორდინატის გაზომვასთან. როცა $\Delta x = 0$, მაშინ $\Delta p = \infty$ და პირიქით. მნიშვნელოვანია აღვნიშნოთ, რომ ამ ცდომილებებში არ იგულისხმება იარაღის სიზუსტესთან და დაკვირვებელთან დაკავშირებული ცდომილებანი. კოორდინატისა და იმპულსის განუზღვრელობის საკითხი პრინციპული საკითხია და იგი არ არის დაკავშირებული ტექნიკის განვითარებასა და დამკვირვებლის დახელოვნებასთან. კოორდინატისა და იმპულსის ერთდროულად და ზუსტად გაზომვის შეუძლებლობა თვით მიკრო ობიექტების თვისებაა.

როგორც ვხედავთ, დებულება გაზომვის შესახებ მეტად მნიშვნელოვანი ყოფილა და თუ ჩვენ გვსურს აეხსნათ მიკრო სამყაროში მიმდინარე მოვლენები, საჭიროა მისი გათვალისწინებაც.

კლასიკური მექანიკა, გარდა სივრცისა და დროის აბსოლუტურობის დებულებებისა, ემყარებოდა აგრეთვე მესამე დებულებასაც, რომლის თანახმად, პრინციპულად მაინც, შესაძლებელი იყო ყველა ფიზიკური სიდიდის ერთდროულად რაგინდ დიდი სიზუსტით გაზომვა. რელატივისტურმა მექანიკამ შეცვალა პირველი ორი დებულება, ხოლო დებულება გაზომვის შესახებ იგივე დატოვა. მიკრო სხეულებისათვის კი საჭიროა სწორედ მესამე დებულების გადასინჯვა. გასაგებია, რომ მიკრო სხეულების მექანიკის ჩამოსაყალიბებლად გვაქვს ორი გზა: პირველის თანახმად უნდა შეიცვალოს კლასიკური მექანიკის მხოლოდ მესამე დებულება. ამ შემთხვევაში ნათელია, რომ სათანადო მექანიკა, რომელსაც კვანტურ მექანიკას უწოდებენ,

[1] $\hbar$ არის პლანკის მუდმივი გაყოფილი 2π-ზე, ე. ი. $\hbar = h/2\pi$. რიცხობრივად იგი ტოლია $\hbar = 1{,}05\ 10^{-27}$ ერგი წმ.

იქნება არარელატივისტური, ე. ი. იგი გამოდგება მხოლოდ მცირე სიჩქარეებისათვის. მეორე შემთხვევაში კი ერთდროულად უნდა შეიცვალოს სამივე დებულება. ამ მექანიკას უწოდებენ რელატივისტურ კვანტურ მექანიკას. ამ უკანასკნელში გათვალისწინებული იქნება როგორც მიკრო სხეულების დამახასიათებელი თავისებურებანი. ისე სივრცისა და დროის ფარდობითობის თვისებებიც.

თუ რელატივისტური მექანიკის ჩამოყალიბება ისე შეიძლება, რომ სულაც არ ვისარგებლებთ კლასიკური მექანიკით, კვანტურ მექანიკას ის დამახასიათებელი თავისებურება აქვს, რომ იგი, ასე ვთქვათ, მოითხოვს კლასიკური მექანიკის არსებობასაც. ამიტომაც კვანტური მექანიკა ჩამოყალიბდა კლასიკური ფიზიკის ანალოგიის გზით.

კვანტური მექანიკის ჩამოყალიბება დაიწყო მას შემდეგ, რაც ლუი დე ბროილის მიერ 1924 წელს აღმოჩენილ იქნა ნივთიერების ორმაგი ბუნება. დე ბროილის თანახმად, არა მხოლოდ სინათლეს ახასიათებს ორმაგი ბუნება, ტალღური და კორპუსკულური, არამედ ნემისმიერ ნივთიერ ნაწილაკსაც. კერძოდ, აინშტაინის ცნობილი ფორმულები, რომლებიც აკავშირებენ სინათლის კორპუსკულების — ფოტონების დამახასიათებელ სიდიდეებს E-ენერგიასა და $\mathbf{p}$ იმპულსს, სინათლის ტალღური ბუნების დამახასიათებელ სიდიდეებთან ω-სიხშირესა და k-ტალღურ ვექტორთან, ე. ი. ფორმულები

$$E=\hbar\omega, \qquad \mathbf{p}=\hbar\mathbf{k} \tag{2}$$

დე ბროილის მიერ გავრცელებული იქნა ნებისმიერ მიკრო ნაწილაკზედაც.

დე ბროილის ჰიპოთეზის თანახმად, ყოველ მიკრო ნაწილაკს, რომელიც მოძრაობს $\mathbf{v}$ სიჩქარით, უნდა შევუსაბამოთ $\lambda=1/k=\hbar/p$ ტალღის სიგრძე.

რამდენიმე წლის შემდეგ ცდებით დამტკიცდა, რომ ნივთიერ ნაწილაკთა ნაკადი კრისტალებზე გაფანტვისას ისეთივე დიფრაქციულ სურათს იძლევა, რასაც $\lambda=\hbar/m\mathbf{v}$ ტალღის სიგრძის მქონე სინათლის ნაკადი, სადაც m ნაწილაკის მასაა, $\mathbf{v}$ კი — მისი სიჩქარე.

დე ბროილის ჰიპოთეზაზე დაყრდნობით ერვინ შრედინგერმა დაწერა კვანტური მექანიკის მოძრაობის განტოლება, რომელსაც შრედინგერის განტოლებას უწოდებენ. ცოტათი უფრო ადრე სხვა მოსაზრებებზე დაყრდნობით კვანტური მექანიკის განვითარებას საფუძველი ჩაუყარა ვერნერ ჰაიზენბერგმა. 1928 წელს კი პოლ მორის დირაკმა შექმნა ელექტრონის რელატივისტური კვანტური მექანიკა. კვანტური მექანიკის დაფუძნებასა და განვითარებაში დიდი როლი შეასრულა ნილს ბორის, მაქს ბორნის, ვოლფგანგ პაულის და სხვათა შრომებმა.

თავი I

კვანტური მექანიკის მოძრაობის განტოლება

ატომური მოვლენების ერთიანი მეთოდით შესწავლის მიზნით საჭიროა კვანტური მექანიკის მოძრაობის განტოლების დაწერა. როგორც ცნობილია, მოძრაობის განტოლების გამოყვანა შეუძლებელია. ფიზიკაში, როგორც წესი, ხდება მოძრაობის განტოლების პოსტულირება კერძო შემთხვევებისათვის ცნობილ კანონზომიერებათა განზოგადების საფუძველზე. იმის გამო, რომ კვანტური მექანიკა კლასიკური მექანიკის ანალოგიის გზით ჩამოყალიბდა, ამ თავში მოძრაობის განტოლების დასაწერად გამოიყენება სწორედ ანალოგია კლასიკურ მექანიკასა და ოპტიკას შორის.

წინამდებარე თავში დაწერილია შრედინგერის მოძრაობის განტოლება, გარკვეულია ტალღური ფუნქციის ფიზიკური შინაარსი, სუპერპოზიციის პრინციპი და ნაჩვენებია, რომ კვანტურ მექანიკაში მდგომარეობის აღწერას აქვს სტატისტიკური ხასიათი.

§ 1. ანალოგია კლასიკურ მექანიკასა და გეომეტრიულ ოპტიკას შორის

ანალოგია კლასიკურ მექანიკასა და გეომეტრიულ ოპტიკას შორის, ჯერ კიდევ კვანტური მექანიკის ჩამოყალიბებიდან დიდი ხნით ადრე, შემჩნეული იყო ჰამილტონის მიერ. ჰამილტონმა მიუთითა, რომ გარეგნულად გეომეტრიული ოპტიკის კანონები ძალიან ჰგავს კლასიკური მექანიკის კანონებს. მაგრამ მან ვერ შეამჩნია მძლავრი შინაგანი კავშირი ამ ორ, ერთი შეხედვით, სხვადასხვა დარგს შორის. აღნიშნულ ანალოგიას ფიზიკური შინაარსი ლუი დე ბროილმა მისცა.

როგორც აღვნიშნეთ, აინშტაინმა აჩვენა, რომ სინათლეს ორმაგი ბუნება ახასიათებს—ტალღური და კორპუსკულური. აინშტაინის თანახმად, სინათლე შეიძლება განვიხილოთ როგორც ნულოვანი უძრაობის მასის მქონე ნაწილაკების (ფოტონების) ნაკადი. ეს მოსაზრება სინათლის ორმაგი ბუნების შესახებ დე ბროილმა განაზოგადა ნივთიერებისათვისაც [1]. მისი აზრით, არა მხოლოდ სინათლეს, არამედ ნებისმიერ ნაწილაკსაც ახასიათებს ორმაგი ბუნება—ტალღური და კორპუსკულური. ამ მოსაზრების უკეთ გარკვევისთვის მოკლედ შევჩერდეთ კლასიკური მექანიკისა და გეომეტრიული ოპტიკის კანონების შედარებაზე და მივიდეთ იმ დასკვნამდე, რომელიც 1924 წელს გააკეთა დე ბროილმა და რომელიც საფუძვლად დაედო თანამედროვე კვანტურ მექანიკას.

---

[1] L de Brogle, Dissertation, Mason, Paris (1924); ასევე Phil. Mag. 47,446 (1924)

კლასიკური მექანიკა. განვიხილოთ ერთი ნაწილაკის მოძრაობა დეკარტის მართკუთხა კოორდინატთა სისტემაში. მოძრაობა შეგვიძლია აღვწეროთ ლაგრანჟის მეთოდით. შემოვიღოთ ლაგრანჟის ფუნქცია $L(x,\ y,\ z;\ \dot{x},\ \dot{y},\ \dot{z};\ t)$, სადაც $\dot{x},\ \dot{y},\ \dot{z}$ სიჩქარის მდგენელებია. ვთქვათ, ნაწილაკი დროის საწყის $t=0$ მომენტში იმყოფება სივრცის A წერტილში, გარკვეული დროის შემდეგ კი იგი გადავიდა B წერტილში. კლასიკური მექანიკის მიზანია ვიპოვოთ ის გზა, რომლითაც ნაწილაკი A-დან B-წერტილში იმოძრავებს. ნაწილაკი A-დან B-წერტილში შეიძლება გადავიდეს მრავალი შესაძლო გზით. რომელი იქნება მათ შორის ჭეშმარიტი ტრაექტორია? ამ შეკითხვაზე პასუხს გვაძლევს ჰამილტონის უმცირესი ქმედების პრინციპი. შემოვიღოთ ქმედების ფუნქცია. ქმედების ფუნქცია, ან მოკლედ ქმედება, განისაზღვრება ფორმულით

$$S=\int_0^t L\,(x,\ y,\ z,\ \dot{x},\ \dot{y},\ z;\ t)dt. \tag{1,1}$$

ჰამილტონის პრინციპის თანახმად, ნაწილაკი A-დან B-წერტილში გადასვლისას „აირჩევს" იმ გზას, რომლის გასწვრივ ქმედების ფუნქციას აქვს ექსტრემალური მნიშვნელობა, ე. ი. როცა ქმედების ვარიაცია ნულის ტოლია: $\delta S=0$. ამ პირობიდან მივიღებთ მოძრაობის ლაგრანჟის განტოლებებს.

საინტერესოა აღვნიშნოთ, რომ, როცა მოცემული გვაქვს ქმედება, მაშინ მისი საშუალებით შეგვიძლია განვსაზღვროთ ნაწილაკის იმპულსიც, სახელდობრ, გვაქვს შემდეგი ფორმულა:

$$\mathbf{p}=\mathrm{grad}S. \tag{1,2}$$

თუ შემოვიღებთ თანატოლი ქმედების ზედაპირს, ე. ი. ფართეულს, რომელზედაც ქმედებას აქვს ერთი და იგივე მნიშვნელობა

$$S\,(x,\ y,\ z;\ t)=S_0, \tag{1,3}$$

მაშინ ნათელია, რომ ნაწილაკის იმპულსი მართობია თანატოლი ქმედების ზედაპირისა. ე. ი. ნაწილაკის ტრაექტორია და ტოლი ქმედების ზედაპირი ურთიერთ ორთოგონალურია. აღსანიშნავია, რომ კლასიკურ მექანიკაში არც ქმედებას და, მაშასადამე, არც თანატოლი ქმედების ზედაპირს არავითარი ფიზიკური შინაარსი არა აქვს. კლასიკურ მექანიკაში ქმედების ფუნქცია მოიძებნება ჰამილტონ-იაკობის განტოლების ამოხსნით. ამ განტოლებას აქვს შემდეგი სახე:

$$\frac{\partial S}{\partial t}+H\,(\mathbf{r},\ \nabla S;\ t)=0, \tag{1,4}$$

სადაც H არის ე. წ. ჰამილტონიანი

$$H=\frac{1}{2m}\cdot(\nabla S)^2+V\,(\mathbf{r},\ t). \tag{1,5}$$

$V\,(\mathbf{r},\ t)$ წარმოადგენს პოტენციალურ ენერგიას. როცა ამოცანა სტაციონარულია, მაშინ პოტენციალური ენერგია დროზე არ არის დამოკიდებული და ჰამილტონის ფუნქცია სრულ ენერგიას ემთხვევა $H=E$; ამ დროს ადგილი აქვს ენერგიის შენახვას. ასეთ შემთხვევაში ველს კონსერვატულსაც უწოდებენ. კონსერვატული ველისათვის ჰამილტონ-იაკობის განტოლება ღებულობს სახეს

$$E=-\frac{\partial S}{\partial t}. \tag{1,6}$$

ე. ი. ენერგიაც ქმედების ფუნქციის საშუალებით განისაზღვრება. (1,6)-ის ამოხსნით ადვილად მივიღებთ დამოკიდებულებას

$$S(\mathbf{r},\ t) = -Et + A(\mathbf{r}). \tag{1,7}$$

$A(\mathbf{r})$-ს შემოკლებული ქმედების ფუნქციას უწოდებენ. ცხადია, რომ სტაციონარულ შემთხვევაში საკმარისია შემოკლებული ქმედების ფუნქციის ცოდნა, რამდენადაც იმპულსისათვის გვექნება

$$\mathbf{p} = \mathbf{grad}S = \mathbf{grad}A. \tag{1,8}$$

ხოლო ჰამილტონ-იაკობის განტოლება მიიღებს $E = H(\mathbf{r}, \nabla A)$ სახეს ან, რაც იგივეა,

$$(\nabla A)^2 = 2m(E - V(r)). \tag{1,9}$$

ადვილი საჩვენებელია, რომ, მაგალითად, თავისუფალი ნაწილაკის ($V = 0$) ქმედების ფუნქციისათვის მივიღებთ გამოსახულებას

$$S(\mathbf{r},\ t) = \mathbf{pr} - Et. \tag{1,9'}$$

საინტერესოა აღინიშნოს, რომ სტაციონარულ შემთხვევაში ჰამილტონის უმცირესი ქმედების პრინციპი დაიყვანება ე. წ. ლაგრანჟ-მოპერტუის პრინციპზე, რომელსაც აქვს შემდეგი გამოსახულება:

$$\delta A = \delta \int_A^B (\mathbf{p}d\mathbf{r}) = 0. \tag{1,10}$$

ტალღური ოპტიკა. ჯერ განვიხილოთ ტალღის მოძრაობა ერთგვაროვან გარემოში. თუ რაიმე სიდიდის ცვლილება დამოკიდებულია დროზე და სივრცეზე

$$\psi = \psi(\mathbf{kr} - \omega t) \tag{1,11}$$

სახით, მაშინ ამბობენ, რომ ეს სიდიდე ტალღის სახით ვრცელდება და ψ ფუნქცია, რომელიც საზოგადოდ კომპლექსურიც შეიძლება იყოს, აღწერს ბრტყელ ტალღას k_1, k_2, k_3 და ω მუდმივებს შორის არსებობს გარკვეული დამოკიდებულება. გამოსახულებას

$$\Theta(\mathbf{r},\ t) = (\mathbf{kr}) - \omega t \tag{1,12}$$

უწოდებენ ბრტყელი ტალღის ფაზას. $\mathbf{k}$-ს ეწოდება ტალღური ვექტორი, ხოლო ω წარმოადგენს სიხშირეს.

$$\Theta(\mathbf{r},\ t) = \Theta_0 \tag{1,13}$$

გამოსახულებას უწოდებენ თანატოლი ფაზის ზედაპირს. შემოვიღოთ აღნიშვნა

$$\Phi(\mathbf{r}) = \mathbf{kr} = k_1 x + k_2 y + k_3 z; \tag{1,14}$$

ამ სიდიდეს უწოდებენ შემოკლებულ ფაზას. აშკარაა, რომ

$$\mathbf{k} = \mathbf{grad}\,\Theta = \mathbf{grad}\,\Phi, \tag{1,15}$$

ე. ი. ტალღური ვექტორი მართობია თანატოლი ტალღის ფაზის ზედაპირისა (ან თანატოლი შემოკლებული ფაზის ზედაპირის). შევნიშნოთ, რომ (1,12) ფორმულის თანახმად,

$$\omega = -\frac{\partial \Theta}{\partial t}, \tag{1,16}$$

ე. ი. ფაზის საშუალებით განისაზღვრება არა მხოლოდ ტალღური ვექტორი, არამედ სიხშირეც.

თუ სისტემის z-ღერძს მივმართავთ $\mathbf{k}$ ვექტორის გასწვრივ, მაშინ გვექნება

$$kz = \Theta_0 + \omega t, \tag{1,17}$$

ე. ი. თანატოლი ფაზის ზედაპირი წარმოადგენს z-ღერძის მართობ სიბრტყეს

$$z = \frac{\omega}{k} t + \frac{\Theta_0}{k}, \tag{1,18}$$

რომელიც გადაადგილდება სივრცეში z-ღერძის გასწვრივ $u = \omega/k$ ფაზური სიჩქარით.

ცნობილია, რომ ψ ფუნქცია აკმაყოფილებს ტალღის, ან, როგორც მას ხშირად უწოდებენ, დალამბერის განტოლებას

$$\Delta\psi - \frac{1}{u^2} \frac{\partial^2\psi}{\partial t^2} = 0, \tag{1,19}$$

სადაც Δ ლაპლასისანია. ამ განტოლების ერთ-ერთი ამონახსნი იქნება ბრტყელი ჰარმონიული ტალღა

$$\psi(\mathbf{r}, t) = Ae^{i[\mathbf{kr} - \omega t]}, \tag{1,20}$$

სადაც A მუდმივი რიცხვია, რომელსაც ამპლიტუდას უწოდებენ. (1,20)-ის დალამბერის განტოლებაში შეტანით მივიღებთ ტალღურ ვექტორსა და სიხშირეს შორის ცნობილ დამოკიდებულებას $k^2 = \omega^2/u^2$.

ახლა განვიხილოთ ტალღის მოძრაობა არაერთგვაროვან გარემოში. ამ შემთხვევაში ფაზის გავრცელების სიჩქარე მუდმივი აღარ იქნება და ადგილმდებარეობის ძიხედვით შეიცვლება, ე. ი. იგი დამოკიდებული იქნება კოორდინატებზე $u = u(\mathbf{r})$. ტალღის განტოლება ამ შემთხვევაში მიიღებს სახეს

$$\Delta\psi - \frac{1}{u^2(\mathbf{r})} \frac{\partial^2\psi}{\partial t^2} = 0. \tag{1,21}$$

რადგან u ცვლადია, ამიტომ ამ განტოლების ამონახსნი აღარ იქნება ბრტყელი ჰარმონიული ტალღა. ამონახსნი ჰარმონიული ტალღის ანალოგიით შეგვიძლია ვეძებოთ შემდეგი სახით:

$$\psi(\mathbf{r}, t) = A(\mathbf{r}) e^{i[\Phi(\mathbf{r}) - \omega t]}. \tag{1,22}$$

ერთგვაროვან გარემოში ტალღის მოძრაობის ანალოგიით $A(\mathbf{r})$-ს შეიძლება ვუწოდოთ ამპლიტუდა, $[\Phi(\mathbf{r}) - \omega t]$-ს—ფაზა, ხოლო $\Phi(\mathbf{r})$-ს—შემოკლებული ფაზა. ψ შეგვიძლია ასე წარმოვიდგინოთ:

$$\psi = \psi_0(\mathbf{r}) e^{i\omega t}, \tag{1,23}$$

სადაც $\psi_0(\mathbf{r})$ დამოკიდებულია მხოლოდ კოორდინატებზე და ტოლია

$$\psi_0(\mathbf{r}) = A(\mathbf{r}) e^{i\Phi(\mathbf{r})} \tag{1,24}$$

თუ (1,23)-ს შევიტანთ ტალღის (1,21) განტოლებაში, მივიღებთ:

$$\Delta\psi_0 + \frac{\omega^2}{u^2} \psi_0 = 0. \tag{1,25}$$

ტოლი ფაზის ზედაპირი განისაზღვრება შემდეგნაირად:

$$\Theta = \Phi(\mathbf{r}) - \omega t = \Theta_0. \tag{1,26}$$

აშკარაა, რომ $\Theta = \Theta_0$ განხილულ შემთხვევაში, საზოგადოდ, სიბრტყეს აღარ წარმოადგენს. ტალღური ვექტორი განვსაზღვროთ ფორმულით

$$\mathbf{k} = \operatorname{grad}\Theta = \operatorname{grad}\Phi. \tag{1,27}$$

მაშასადამე, ტალღური ვექტორი კვლავ მართობია თანატოლი ფაზის ზედაპირისა, მაგრამ იგი მუდმივი აღარ არის და იცვლება წერტილიდან წერტილში გადასვლისას. შემოვიღოთ სხივის ცნება. მრუდს, რომლის ყველა წერტილში მხების მიმართულება ემთხვევა ტალღური ვექტორის მიმართულებას, უწოდებენ სხივს. მაშასადამე, სხივი და თანატოლი ფაზის ზედაპირი ურთიერთორთოგონალურია. აღსანიშნავია, რომ სხივს არავითარი ფიზიკური შინაარსი არ გააჩნია.

როგორც (1,24) ფორმულიდან ჩანს, ψ_0 ფუნქციის განსაზღვრა დაიყვანება A და Φ ფუნქციების მოძებნაზე. ეიპოეთ განტოლებათა სისტემა, რომლიდანაც განისაზღვრება ეს სიდიდეები. ამისათვის მოვძებნოთ $\psi_0(r)$ ფუნქციის წარმოებულები კოორდინატებით. რადგან

$$\nabla\psi_0 = \nabla A e^{i\Phi} + Ai(\nabla\Phi)e^{i\Phi}, \tag{1,28}$$

ამიტომ

$$\nabla^2\psi_0 = [\nabla^2 A + 2i(\nabla A\nabla\Phi) + iA\nabla^2\Phi - A(\nabla\Phi)^2]e^{i\Phi} \tag{1,29}$$

შევიტანოთ ეს გამოსახულება (1,25) ტალღის განტოლებაში, მაშინ $e^{i\Phi}$-ზე შეკვეცის შემდეგ მივიღებთ:

$$\Delta A - A(\nabla\Phi)^2 + \frac{\omega^2}{u^2}A + i[2(\nabla A\nabla\Phi) + A\Delta\Phi] = 0, \tag{1,30}$$

საიდანაც გამომდინარეობს:

$$\begin{cases} \dfrac{\Delta A}{A} - (\nabla\Phi)^2 + \dfrac{\omega^2}{u^2} = 0, \\ 2\left(\dfrac{\nabla A}{A}\nabla\Phi\right) + \Delta\Phi = 0. \end{cases} \tag{1,31}$$

განტოლებათა ეს სისტემა ზუსტია და ტოლფასია ტალღის განტოლებისა. თუ ამ სისტემიდან ამოვხსნით A და Φ-ს, შევიტანთ მათ (1,24)-ში, ვიპოვით ψ_0-ს და, მაშასადამე, ψ-საც; ამით ჩვენ გვეცოდინება (1,21) განტოლების ზუსტი ამონახსნი.

არსებობს (1,31) განტოლებათა სისტემის ამოხსნის მიახლოებითი მეთოდი, რომელსაც გეომეტრიული ოპტიკის მიახლოებას უწოდებენ, ხოლო ოპტიკის იმ მოვლენებს, რომლებიც ამ მიახლოებაში აიწერებიან — გეომეტრიული ოპტიკის მოვლენებს.

გარემო რომ ერთგვაროვანი ყოფილიყო, მაშინ გვექნებოდა ჰარმონიული ტალღები მუდმივი ამპლიტუდითა და ტალღური ვექტორით; ამ შემთხვევაში, (1,31)-ში $\nabla A = \Delta A = \Delta\Phi = 0$ და მივიღებდით $(\nabla\Phi)^2 = \dfrac{\omega^2}{u^2}$; ეს უკანასკნელი, რადგან ერთგვაროვან გარემოში სიჩქარე ადგილმდებარეობის ფუნქცია არ არის, უბრალოდ ტალღური ვექტორის განმარტებას იძლევა $k^2 = \dfrac{\omega^2}{u^2} = \text{const}$.

გეომეტრიული ოპტიკის მიახლოებაში გარემოს არაერთგვაროვნება ტალღის სიგრძის მანძილზე იმდენად მკირედ ითვლება, რომ ტალღის ჰარმონიულობის პირობები თითქმის შესრულებულია. გეომეტრიული ოპტიკის მიახლოება სამართლიანი იქნება იმ შემთხვევაში, როცა ტალღის სიგრძის მანძილზე გარემო შეგვეძლია განვიხილოთ როგორც ერთგვაროვანი, ტალღური ვექტორი კი — როგორც მუდმივი. ამ შემთხვევაში ჩვენ გვექნება პირობები:

$$\lambda\frac{\nabla A}{A} \ll 1, \quad \lambda^2\frac{\Delta A}{A} \ll 1, \tag{1,32}$$

სადაც λ არის ტალღის სიგრძე გაყოფილი 2π-ზე, ე. ი.

$$\lambda = \frac{\lambda}{2\pi} = \frac{1}{k}. \tag{1,33}$$

გეომეტრიული ოპტიკის მიახლოება მნიშვნელოვანია იმდენად, რამდენადაც შესაძლებელია u სიჩქარისა და შემოკლებული Φ ფაზის განსაზღვრა ამპლიტუდის განსაზღვრის გარეშე. რადგან განმარტებით $k^2 = (\nabla\Phi)^2 = 1/\lambda^2$, ამიტომ, თუ გავითვალისწინებთ (1,32) უტოლობებს, (1,31) სისტემის პირველ განტოლებაში შეგვიძლია უგულებელვყოთ $\frac{\Delta A}{A}$ წევრი. მაშინ დაგვრჩება

$$(\nabla\Phi)^2 = \frac{\omega^2}{u^2}, \tag{1,34}$$

ხოლო λ^2-ზე გამრავლების შემდეგ იგივე სისტემის მეორე განტოლება მოგვცემს

$$2\lambda^2 \frac{\nabla A}{A} \nabla\Phi + \Delta\Phi\lambda^2 = 0. \tag{1,35}$$

თუ გავითვალისწინებთ (1,34) და (1,32) ფორმულებს, გვექნება $|\lambda^2\Delta\Phi| \ll 1$ და, რადგან $\nabla\Phi = \mathbf{k}$, ამიტომ გეომეტრიული ოპტიკის მიახლოების სამართლიანობისათვის გვექნება პირობა

$$|\nabla\lambda| \ll 1. \tag{1,36}$$

ამ შემთხვევაში (1,31) განტოლებათა სისტემა დაიყვანება (1,34) განტოლებაზე, რომელსაც ეიკონალის განტოლება ეწოდება.

ახლა გავიხსენოთ ოპტიკაში კარგად ცნობილი ფერმას პრინციპი. ტალღური ვექტორის (1,27) განმარტებიდან ცხადია, რომ

$$d\Phi = d\Theta = (\mathbf{k}d\mathbf{r}). \tag{1,37}$$

ამ გამოსახულებიდან ავიღოთ ინტეგრალი სხივის გასწვრივ A-დან B-მდე

$$\Phi = \int_A^B (\mathbf{k}d\mathbf{r}) \tag{1,38}$$

$d\mathbf{r}$ აღებულია სხივის გასწვრივ. ფერმას პრინციპის თანახმად, ეს ინტეგრალი ნამდვილ გზაზე ექსტრემალურ მნიშვნელობას ღებულობს შედარებით სხვა შესაძლო გზებთან, რომლებსაც იგივე საწყისი და საბოლოო მდგომარეობა აქვთ. ე. ი.

$$\delta\Phi = \delta \int_A^B (\mathbf{k}d\mathbf{r}) = 0. \tag{1,39}$$

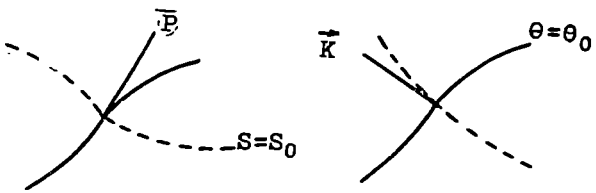
რადგან $u = \omega/k$ და $\mathbf{u} = \frac{d\mathbf{r}}{dt}$, ამიტომ $(\mathbf{k}d\mathbf{r}) = \omega \frac{dr}{dt}$ და გვექნება

$$\delta \int \frac{dr}{u} = \delta \int dt = 0. \tag{1,40}$$

მიღებული შედეგის შესაბამისად ფერმას პრინციპი ასე შეიძლება ჩამოყალიბდეს: A-დან B წერტილში გავრცელებისას „სხივი ირჩევს“ იმ გზას, რომლის გავლასაც მინიმალურ დროს ანდომებს. აშკარაა, რომ (1,39) სახით ფერმას პრინციპს შეგვიძლია ვუწოდოთ შემოკლებული ფაზის პრინციპი.

ანალოგია. კლასიკური მექანიკისა და ოპტიკის ზემოთ მიღებული ფორმულები საშუალებას გვაძლევს დავამყაროთ მათ შორის ანალოგია. ამ მიზნით ჩამოვწეროთ ფორმულები, რომლებიც მივიღეთ ამ პარაგრაფში:

მ ე ქ ა ნ ი კ ა	ო პ ტ ი კ ა
ქმედება $S(\mathbf{r}, t)$	ფაზა $\Theta(\mathbf{r}, t)$
თანატოლი ქმედების ზედაპირი	თანატოლი ფაზის ზედაპირი
$S(\mathbf{r}, t) = S_0$	$\Theta(\mathbf{r}, t) = \Theta_0$
ქმედება კონსერვატულ ველში	ფაზა ჰარმონიულ მიახლოებაში
$S(\mathbf{r}, t) = A(\mathbf{r}) - Et$	$\Theta(\mathbf{r}, t) = \Phi(\mathbf{r}) - \omega t$
თავისუფალი ნაწილაკის ქმედება	ბრტყელი ტალღის ფაზა
$S(\mathbf{r}, t) = \mathbf{pr} - Et$	$\Theta(\mathbf{r}, t) = \mathbf{kr} - \omega t$
იმპულსი	ტალღური ვექტორი
$\mathbf{p} = \nabla S = \nabla A$	$\mathbf{k} = \nabla\Theta = \nabla\Phi$



ნახ. 1 ა

ე ნ ე რ გ ი ა	ს ი ხ შ ი რ ე
$E = -\frac{\partial S}{\partial t}$	$\omega = -\frac{\partial\Theta}{\partial t}$
ლაგრანჟ-მოპერტუის პრინციპი (შემოკლებული ქმედების პრინციპი)	ფერმას პრინციპი (შემოკლებული ფაზის პრინციპი)
$\delta A = \delta \int_A^B (p\,dr) = 0$	$\delta\Phi = \delta \int_A^B (k\,dr) = 0$
ჰამილტონ-იაკობის განტოლება კონსერვატულ ველში	ეიკონალის განტოლება
$(\nabla A)^2 = 2m[E - V(\mathbf{r})]$	$(\nabla\Phi)^2 = \frac{\omega^2}{u^2}$
	ტალღური ოპტიკის ძირითადი განტოლება
	$\Delta\psi_0 + \frac{\omega^2}{u^2}\psi_0 = 0$

ტოლი ქმედების ზედაპირი და სხივი აღებული არიან წყვეტილი ხაზებით, რადგან მათ კლასიკურ ფიზიკაში არავითარი ფიზიკური შინაარსი არა აქვთ; კლასიკურ ფიზიკაში აზრი აქვს მხოლოდ ნაწილაკის ტრაექტორიასა და ტალღის ზედაპირს. როგორც ვხედავთ, მათემატიკური ანალოგია კლასიკურ მექანიკასა და ოპტიკას

შორის ძალზე დიდია. საკმარისია დავუშვათ, რომ ფაზა და ქმედება ერთმანეთის პროპორციული სიდიდეებია, რომ ოპტიკისა და მექანიკის კანონები გარეგნულად ერთი და იგივე სახეს მიიღებენ. მართლაც, ავიღოთ,

$$\Theta = a\mathrm{S}. \tag{1,41}$$

აშკარაა, a-მუდმივს უნდა ჰქონდეს ქმედების შებრუნებული განზომილება; რათა, კერძო შემთხვევაში, სინათლისათვის, ავტომატურად გამომდინარეობდეს აინშტაინის ფორმულები $E = \hbar\omega$ და $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$ საჭიროა ავიღოთ $a = 1/\hbar$. ამგვარად, გვექნება

$$\Theta = \frac{S}{\hbar}. \tag{1.42}$$

თუ ამ გამოსახულებას გავაწარმოებთ დროთი და გავითვალისწინებთ (1,6) და (1,16) ფორმულებს, მივიღებთ

$$E = -\frac{\partial S}{\partial t} = -\hbar\frac{\partial\Theta}{\partial t} = \omega\hbar, \tag{1,43}$$

ხოლო, თუ (1,42) გამოსახულებიდან ავიღებთ გრადიენტს, ანალოგიურად ვაჩვენებთ, რომ

$$\mathbf{p} = \nabla S = \hbar\nabla\Theta = \hbar\mathbf{k}. \tag{1,44}$$

ამგვარად, საბოლოოდ მივიღებთ შემდეგ ფორმულებს:

$$E = \hbar\omega, \tag{1,45}$$

$$\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}. \tag{1,46}$$

ნაწილაკისათვის მივიღეთ ისეთივე თანაფარდობები, როგორიც გვქონდა სინათლისათვის. სწორედ ამაში მდგომარეობს დე ბროილის იდეა. მისი აზრით, სულ ერთია, ვილაპარაკებთ ნაწილაკზე, რომელიც ხასიათდება იმპულსითა და ენერგიით, ე. ი. ოთხვექტორით $P\left(\mathbf{p}, \frac{i}{c}E\right)$, თუ ტალღაზე, რომელიც ხასიათდება ისეთი ტალღური ვექტორითა და სიხშირით $K\left(\mathbf{k}, \frac{i}{c}\omega\right)$, რომელიც დაკავშირებულია ნაწილაკის ენერგიასა და იმპულსთან (1,45) და (1,46) ფორმულებით ან $P = \hbar K$. დე ბროილის დამსახურება სწორედ იმაში მდგომარეობს, რომ ზემოთ აღნიშნულ ფორმალურ ანალოგიას მან ღრმა ფიზიკური აზრი მიანიჭა. (1,46) ფორმულიდან ცხადად ჩანს, რომ ყოველ ნაწილაკს, რომელსაც აქვს m მასა და მოძრაობს v სიჩქარით, შეესაბამება ტალღის სიგრძე

$$\lambda = \frac{\hbar}{mv}, \tag{1,47}$$

რომელსაც დე ბროილის ტალღის სიგრძეს უწოდებენ. აქვე ვაჩვენოთ, რომ დუალური ბუნება გასათვალისწინებელია მხოლოდ მიკრო სხეულებისათვის. მაგალითად, თუ ავიღებთ მაკროსხეულს, რომლის მასა $m = 1$ გრ. და $v = 10^6 \frac{\text{სმ}}{\text{წმ}}$, მივიღებთ

$$\lambda = \frac{1.05.10^{-27}}{10^6}\ \text{სმ} = 1{,}05\ \ 10^{-33}\ \text{სმ}, \tag{1,48}$$

რაც მეტად მცირე სიდიდეს წარმოადგენს. ახლა თუ ავიღებთ, მაგალითად ელექტრონს, რომლის მასა რიგით 10^{-27} გრამია, მივიღებთ $\lambda = 1{,}05 \cdot 10^{-8}\ \text{სმ} = 105\mathring{A}$,

რაც საკმარისად დიდი სიდიდეა. ეს კი იმას გვიჩვენებს, რომ დე ბროილის მოსაზრებები ნივთიერების ორმაგი ბუნების შესახებ დამახასიათებელია მხოლოდ და მხოლოდ მიკრო სხეულებისათვის.

ბრტყელი ტალღა აიწერება (1,20) ფუნქციით, ამიტომ მისი ფაზის შესაბამისი ქმედების ფუნქცია იქნება

$$S(\mathbf{r},\ t)=\hbar\,(\mathbf{kr}-\omega t)=\mathbf{pr}-Et, \tag{1,49}$$

რომელიც ემთხვევა თავისუფალი ნაწილაკის ქმედების ფუნქციას. მაშასადამე, დე ბროილის მოსაზრების თანახმად თავისუფალ ნაწილაკს უნდა შეეუსაბამოთ ბრტყელი მონოქრომატული ტალღა

$$\psi(\mathbf{r},\ t)=Ae^{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{pr}-\omega t)} \tag{1,50}$$

აღსანიშნავია, რომ (1,42) ფორმულის თანახმად კავშირს ტალღური ოპტიკის განტოლების ამონახსნსა და კლასიკური მექანიკის დამახასიათებელ ქმედების ფუნქციას შორის ახორციელებს დამოკიდებულება

$$\psi(\mathbf{r},\ t)=e^{\frac{i}{\hbar}S(\mathbf{r},\ t)} \tag{1,51}$$

სადაც $S(\mathbf{r},\ t)$ არის ქმედების ფუნქცია; კერძოდ, თავისუფალი ნაწილაკის შემთხვევაში იგი ტოლია $(\mathbf{pr}-\omega t)$ გამოსახულებისა.

§ 9. შრედინგერის სტაციონარული მდგომარეობების განტოლება

წინა პარაგრაფში მოტანილი სქემა გვიჩვენებს, რომ ანალოგია სრული არ არის. მართლაც, ჩვენ გვაქვს ეიკონალის განტოლება, რომლის ანალოგს წარმოადგენს ჰამილტონ-იაკობის განტოლება. მაგრამ ეიკონალის განტოლება გეომეტრიული ოპტიკის მიახლოების შედეგია. ამიტომ, თუ ანალოგია სრულია, მაშინ ჰამილტონ-იაკობის განტოლებაც რაღაც გარკვეული, გეომეტრიული ოპტიკის შესაბამისი მიახლოების შედეგი უნდა იყოს. ჩვენ ვნახეთ, რომ კლასიკური მექანიკა არ გამოდგება ატომური მოვლენების შესასწავლად, ე. ი. არ ვარგა ჰამილტონ-იაკობის განტოლება. შესაძლებელია, რომ ჰამილტონ-იაკობის განტოლება ისევე მიახლოებითია, როგორც გეომეტრიული ოპტიკის ეიკონალის განტოლება, რომლის ანალოგიასაც იგი წარმოადგენს. იქნებ ამით აიხსნება ის გარემოება, რომ კლასიკურმა მექანიკამ სრული მარცხი განიცადა ატომური მოვლენების შესწავლისას? ხომ არ შეიძლება დაიწეროს უფრო ზუსტი განტოლება, ვიდრე ჰამილტონ-იაკობის განტოლებაა? მაგალითად, ოპტიკაში გეომეტრიული ოპტიკის ეიკონალის განტოლების გარდა არსებობს უფრო ზუსტი განტოლებაც, რომელსაც ტალღის განტოლება ეწოდება და რომელიც კარგად აღწერს ისეთ მოვლენებს, რომლებიც გეომეტრიული ოპტიკის გამოყენების ფარგლებს გარეთ ძნელი ფიქრობს. თუ ჩვენ ანალოგიის გზით წავალთ, მექანიკისათვის უნდა ვეძებოთ ისეთი განტოლება, რომელიც ტალღური ოპტიკის განტოლების ანალოგიური იქნება; ამრიგად, რათა დავწეროთ ზუსტი განტოლება, რომლის ზღვრული შედეგი იქნება ჰამილტონ-იაკობის განტოლება, საჭიროა ვიპოვოთ ზუსტი ოპტიკური განტოლების (1,25) ანალოგიური განტოლება კლასიკური მექანიკისათვის, ე. ი. საჭიროა ტალღური ოპტიკის ანალოგიური „ტალღური მექანიკის“ შექმნა. ეს ამოცანა გადაწყვიტა შრედინგერმა დე ბროილის შრომის გამოქვეყნებიდან ორი წლის შემდეგ. შრედინგერმა ტალღის

განტოლებაში გაითვალისწინა ნაწილაკთა ორმაგი ბუნება, ე. ი. (1,45) და (1,46) თანაფარდობები. რადგან $\frac{\omega^2}{u^2} = k^2$, ამიტომ აღნიშნული თანაფარდობების გამოყენებით გვექნება $\omega^2/u^2 = p^2/\hbar^2$ და, რადგან სრული ენერგია ტოლია გამოსახულების

$$E = \frac{p^2}{2m} + V(r), \tag{2,1}$$

სადაც $V(r)$ პოტენციალური ენერგიაა, ამიტომ

$$k^2 = \frac{\omega^2}{u^2} = \frac{2m}{\hbar^2}[E - V(r)]. \tag{2,2}$$

ამ გამოსახულების შეტანით ტალღის (1,25) განტოლებაში საბოლოოდ მივიღებთ[1],

$$\Delta\psi(r) + \frac{2m}{\hbar^2}[E - V(r)]\psi(r) = 0 \tag{2,3}$$

ამასთან, $\psi(r)$ ფუნქციას ნულოვანი ნიშნაკი მოვაცილეთ. (2,3) განტოლებას უწოდებენ შრედინგერის განტოლებას სტაციონარული მოძრაობისათვის. (1.23) ფორმულის ანალოგიით (2,3) განტოლების ამონახსნი უნდა გავამრავლოთ $\exp(-i\omega t) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}Et\right)$ მამრავლზე, ე. ი.

$$\Psi(r, t) = \psi(r) e^{-\frac{i}{\hbar}Et} \tag{2,4}$$

აღმოჩნდა, რომ შრედინგერის განტოლება სწორად აღწერს ყველა ატომურ მოვლენას, ამიტომ იგი წარმოადგენს ტალღური მექანიკის, ან, როგორც მას ახლა უწოდებენ, კვანტური მექანიკის საფუძველს.

შრედინგერის განტოლების თეორიული გზით, მკაცრი გამოყვანა ისევე როგორც ნიუტონის განტოლებისა, შეუძლებელია. იგი მხოლოდ არსებული თეორიის შემდგომ განვითარებას—განზოგადებას—წარმოადგენს, ამიტომ მისი სამართლიანობა შეიძლება მხოლოდ ცდით შემოწმდეს.

აშკარაა, რომ შრედინგერის განტოლება თავისთავში ავტომატურად შეიცავს ნივთიერების ორმაგ ბუნებას. შევნიშნოთ, რომ (2,3) განტოლების მიღება შეიძლება უშუალოდ დე ბროილის მოსაზრებებიდანაც. მართლაც, დე ბროილმა თავისუფალ ნაწილაკს შეუსაბამა ბრტყელი ტალღა

$$\Psi(r, t) = Ae^{\frac{i}{\hbar}[pr - Et]} = \psi(r)\, e^{-\frac{i}{\hbar}Et} \tag{2,5}$$

ცხადია, $\psi(r)$ აკმაყოფილებს განტოლებას

$$\Delta\psi(r) + \frac{2m}{\hbar^2}E\psi(r) = 0, \tag{2,6}$$

სადაც E წარმოადგენს კინეტიკურ ენერგიას, რომელიც თავისუფალი ნაწილაკის შემთხვევაში ემთხვევა სრულ ენერგიას. როცა ნაწილაკი თავისუფალი არ არის, ე. ი. როცა პოტენციალური ენერგია $V(r) \neq 0$, მაშინ კინეტიკური ენერგია $[E - V(r)]$-ის ტოლია და ამიტომ ბუნებრივია (2,6) განტოლების ისეთი განზოგადება, რომელიც მოგვცემს (2,3) განტოლებას.

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

$\psi(r)$-ფუნქციას ეწოდება ტალღური ფუნქცია; როგორც შემდგომში დავინახავთ, თითოეული კონკრეტული ამოცანისათვის საჭირო იქნება სათანადო შრედინგერის განტოლების ამოხსნის შედეგად ψ ფუნქციის პოვნა.

შევნიშნოთ, რომ დე ბროილისა და შრედინგერის მოსაზრებები რამოდენიმე წლის შემდეგ (1927 წ) ბრწყინვალედ დადასტურდა ცდებით. დევისონმა და ჯერმერმა აღმოაჩინეს ელექტრონების დიფრაქციის მოვლენა და დაამტკიცეს, რომ ელექტრონების ნაკადი ისეთივე სახის დიფრაქციულ სურათს იძლევა, რასაც $\lambda = \hbar/mv$ ტალღის სიგრძის მქონე სინათლე. შემდეგ (1930 წ) ო. შტერნისა და მისი თანამშრომლების მიერ აღმოჩენილ იქნა ატომებისა და მოლეკულების ტალღური ყოფაქცევა, რამაც საბოლოოდ დაადასტურა დე ბროილის მოსაზრების სინამდვილე. ამჟამად ეჭვს არ იწვევს, რომ ნებისმიერ ნაწილაკებს: პროტონებს, ნეიტრონებს, პოზიტრონებს, მეზონებს და სხვა აგრეთვე ორმაგი ბუნება ახასიათებს.

შევნიშნოთ, რომ შრედინგერის სტაციონარული მდგომარეობების განტოლება ასეც შეგვიძლია გადავწეროთ:

$$H\psi(r) = E\psi(r), \tag{2,7}$$

სადაც

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(r). \tag{2,8}$$

ეს განტოლება კი შეიძლება მივიღოთ კლასიკური მექანიკის სტაციონარული მდგომარეობის ჰამილტონ-იაკობის განტოლებიდან

$$H(r, \nabla S) = E, \tag{2,9}$$

თუ დავუშვებთ, რომ ამ განტოლების ორივე მხარე გამრავლებულია $\psi(r)$ ფუნქციაზე, ხოლო იმპულსის კლასიკური გამოხატულება შეცვლილია ოპერატორით

$$\mathbf{p} = \nabla S = -i\hbar\nabla. \tag{2,10}$$

მართლაც, თუ იმპულსის ოპერატორის ამ მნიშვნელობას შევიტანთ კლასიკური მექანიკის ჰამილტონის ფუნქციაში

$$H = \frac{1}{2m}\mathbf{p}^2 + V(r) \tag{2,11}$$

და გავითვალისწინებთ, რომ $\nabla^2 = \Delta$, მივიღებთ (2,8) ოპერატორს, რომელსაც ჰამილტონის ოპერატორს უწოდებენ.

ამგვარად, შრედინგერის სტაციონარული მდგომარეობების (2,7) განტოლება ყოფილა ჰამილტონის ოპერატორის საკუთარი ფუნქციებისა და საკუთარი მნიშვნელობების განტოლება; ამასთან, საკუთარი მნიშვნელობები სრული ენერგიის მნიშვნელობებს ემთხვევა. აღვნიშნოთ, რომ (2,8) გამოსახულებას სრული ენერგიის ოპერატორსაც უწოდებენ, რამდენადაც (2,11) ჰამილტონიანი სრულ ენერგიას ემთხვევა.

§ 8. შრედინგერის არასტაციონარული მდგომარეობების განტოლება

წინა პარაგრაფში ჩვენ გამოვიყვანეთ შრედინგერის სტაციონარული მდგომარეობების განტოლება. სტაციონარულ მდგომარეობაში პოტენციალური ენერგია დროზე ცხადად არ არის დამოკიდებული. ახლა ვთქვათ საქმე გვაქვს არასტაციონარულ მოძრაობასთან. შევეცადოთ დავწეროთ ისეთი განტოლება, რომელიც აღწერს ატომში მიმდინარე არასტაციონარულ პროცესებს. ამასთან ცხადია, რომ

არასტაციონარულ შემთხვევაში ტალღური ფუნქცია დროზე მხოლოდ $\exp\left(-\frac{i}{\hbar}Et\right)$

ჰარმონიული მამრავლის სახით აღარ იქნება დამოკიდებული. ამგვარად, საჭიროა დაიწეროს ისეთი განტოლება, რომელიც ტალღური ფუნქციის მნიშვნელობას $t=t_0>0$ მომენტში განსაზღვრავს $\psi(\mathbf{r}, t)$ ფუნქციის $t=0$ საწყისი მნიშვნელობის (ე. ი. $\psi(\mathbf{r}, 0)$) საშუალებით. ისევე, როგორც სტაციონარულ შემთხვევაში, ამ განტოლების გამოყვანაც შეუძლებელია, ამიტომ საჭიროა მისი პოსტულირება. ამ საქმეში კვლავ დაგვეხმარება ანალოგია კლასიკურ მექანიკასთან. ამისათვის გავიხსენოთ, რომ შრედინგერის განტოლება მივიღეთ (2,9) კლასიკური მექანიკის ჰამილტონ-იაკობის სტაციონარული მდგომარეობების განტოლებისაგან ოპერატორებზე გადასვლით. ბუნებრივია შრედინგერის არასტაციონარული მდგომარეობების განტოლების მიღებაც ჰამილტონ-იაკობის არასტაციონარული განტოლებიდან

$$\frac{\partial S}{\partial t}+H(\mathbf{r}, \nabla S, t)=0. \tag{3,1}$$

ეს განტოლება ვერ აღწერს მიკროსამყაროს მოვლენებს, ამიტომ, ისევე, როგორც სტაციონარულ შემთხვევაში, საჭიროა ისეთი განტოლება დაიწეროს, რომელიც ანალოგიური იქნება ტალღური ოპტიკის დროზე დამოკიდებული განტოლებისა. (3,1) განტოლება გავამრავლოთ $\psi(\mathbf{r}, t)$ ფუნქციაზე; გვექნება

$$\frac{\partial S}{\partial t}\psi(\mathbf{r}, t)+H\psi(\mathbf{r}, t)=0; \tag{3,2}$$

ამასთან, უნდა ვიგულისხმოთ, რომ რამდენადაც $\mathbf{p}=\nabla S=-i\hbar\nabla$ ოპერატორს წარმოადგენს, H-იც ოპერატორი იქნება და იგი კვლავ (2,8) ფორმულით გამოიხატება. ბუნებრივია, რომ $\frac{\partial S}{\partial t}$ დროითი წარმოებულიც ოპერატორი იქნება. ამ ოპერატორის მოძებნის მიზნით გავიხსენოთ, რომ კავშირს კლასიკურ და ტალღურ მოვლენებს შორის ახორციელებს $\psi=\exp\left(\frac{i}{\hbar}S\right)$ ფუნქცია. ამ ფუნქციიდან გრადიენტის აღებით მივიღებთ (2,10) ოპერატორს, ხოლო დროის მიხედვით გაწარმოებით გვექნება

$$\frac{\partial S}{\partial t}\psi=-i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi, \tag{3,3}$$

საიდანაც

$$\frac{\partial S}{\partial t}=-i\hbar\frac{\partial}{\partial t}; \tag{3,4}$$

მაშასადამე, (3.2) განტოლება მიიღებს სახეს

$$i\hbar\frac{\partial\psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t}=H\psi(\mathbf{r}, t) \tag{3,5}$$

ან, თუ გავითვალისწინებთ ჰამილტონის ოპერატორის (2,8) ფორმულას, შეგვიძლია დავწეროთ

$$i\hbar\frac{\partial\psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t}=-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi(\mathbf{r}, t)+V(\mathbf{r}, t)\psi(\mathbf{r}, t). \tag{3,6}$$

ამ განტოლებას უწოდებენ შრედინგერის დროით ან არასტაციონარულ მდგომარეობათა განტოლებას. რადგან (3,6) განტოლებაში დრო შედის ცხადად, ამიტომ

იგი წარმოადგენს კვანტური მექანიკის დინამიკურ განტოლებას და საშუალებას გვაძლევს შევისწავლოთ ფიზიკური სიდიდეების დროისა და სივრცის მიხედვით ცვლილება.

(3,5) განტოლება დროითი წარმოებულის მიმართ პირველი ხარისხისაა, ამიტომ საკმარისია ერთი საწყისი პირობის ცოდნა. მაგალითად, საკმარისია ვიცოდეთ ფუნქცია $\psi(\mathbf{r}, 0)$ საწყის მომენტში, რომ განვსაზღვროთ $\psi(\mathbf{r}, t)$ ფუნქცია დროის შემდგომ მომენტებში.

იმ დროს, როცა კლასიკურ მექანიკაში პერიოდული პროცესები მხოლოდ დროის მიხედვით მეორე რიგის განტოლებებიდან მიიღებოდა, კვანტურ მექანიკაში (3,5) განტოლებაში i-მამრავლის არსებობის გამო, (3,5) დროის მიმართ პირველი რიგის განტოლება პერიოდულ პროცესებსაც აღწერს. აღსანიშნავია, რომ კლასიკურ მექანიკაში დროის მიმართ პირველი რიგის განტოლებები მხოლოდ შეუქცევად პროცესებს აღწერენ, მაგალითად, დიფუზიას, სითბოგამტარობას და ა. შ.

თუ შრედინგერის არასტაციონარული მდგომარეობების განტოლებას შევადარებთ სტაციონარული მდგომარეობების (2,7) განტოლებას, დავინახავთ, რომ არასტაციონარულ შემთხვევაში ენერგიის ოპერატორისათვის შეგვიძლია დავწეროთ

$$E = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}. \qquad (3,7)$$

ენერგიის ოპერატორისათვის იგივე ფორმულას მივიღებთ, თუ იმპულსის ოპერატორის გამოსახულებას გავავრცელებთ ოთხ-იმპულსზე $P\left(\mathbf{p}, \frac{i}{c}E\right)$. მართლაც, რომ დავწეროთ $P_j = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_j}$, მაშინ, რადგან $x_4 = ict$ მივიღებთ (3,7)-ს, ასე რომ, კვანტურ მექანიკაში იმპულსის ოთხ-ვექტორის ოპერატორს აქვს შემდეგი სახე:

$$P\left(-i\hbar\nabla,\ i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\right). \qquad (3,8)$$

ბოლოს საინტერესოა შევნიშნოთ, რომ ქმედების ფუნქციასა და იმპულსისა და ენერგიის ოპერატორებს შორის არსებობს შემდეგი კავშირი:

$$\mathbf{p} = \nabla S \to -i\hbar\nabla;\ E = -\frac{\partial S}{\partial t} \to i\hbar\frac{\partial}{\partial t}. \qquad (3,9)$$

საკმარისია მოვახდინოთ ეს შეცვლა, რომ კლასიკური მექანიკის ჰამილტონ-იაკობის განტოლება მოგვცემს შრედინგერის განტოლებას.

§ 4. ტალღური ფუნქციის ფიზიკური შინაარსი

ვთქვათ, რაიმე გარკვეული ამოცანისათვის ამოვხსენით შრედინგერის განტოლება და ვიპოვეთ ψ ფუნქცია, რა აზრი მივაწეროთ ამ ფუნქციას? რა ფიზიკურ სიდიდეს შეეუსაბამოთ ეს ფუნქცია? სიმარტივისათვის განვიხილოთ თავისუფალი ნაწილაკი, რომელიც მოძრაობს x-ღერძის გასწვრივ; როგორც აღვნიშნეთ, ამ შემთხვევაში (2,6) შრედინგერის განტოლების ამოხსნა იქნება ბრტყელი ტალღა

$$\psi(x, t) = Ae^{i(kx - \omega t)}. \qquad (4,1)$$

აშკარაა, რომ თვით $\psi(x, t)$ ფუნქციას არავითარი ფიზიკური აზრი არ უნდა ჰქონდეს. მართლაც, თუ თავისუფალ ნაწილაკს, რომლის იმპულსია $\mathbf{p}$ და ენერ-

გია E შევუსაბამებთ (4,1) ტალღას, მაშინ ამ ტალღის ფაზური სიჩქარე იქნება $u=\omega/k$ ან დე ბროილის თანაფარდობის გათვალისწინებით $u=E/p$; რადგან $E=mc^2$ და $\mathbf{p}=m\mathbf{v}$, სადაც m მოძრაობის მასაა, ამიტომ მივიღებთ

$$c^2=uv, \tag{4,2}$$

სადაც v ნაწილაკის შესაბამისი სიჩქარეა. უკანასკნელი ყოველთვის სინათლის სიჩქარეზე ნაკლებია, ამიტომ (4,2) ფორმულის თანახმად გამოდის, რომ ფაზური სიჩქარე სინათლის სიჩქარეზე მეტია; როგორც ცნობილია, ფარდობითობის თეორიიდან, რეალურ პროცესებში c-ზე მეტი სიჩქარის მიღწევა პრინციპულად შეუძლებელია, ამიტომ უშუალოდ $\psi(x, t)$ ფუნქციას ფიზიკური შინაარსი არ უნდა ჰქონდეს.

გარდა ამისა, (4,1) ტალღა გავრცელებულია მთელს სივრცეზე და ამიტომ არ შეიძლება იგი შეესაბამებოდეს ნაწილაკს, რომელიც ლოკალიზებულია მხოლოდ სივრცის სასრულ არეში.

ამ ორი წინააღმდეგობის თავიდან აცილება შეიძლება, თუ ნაწილაკს შევუსაბამებთ ერთ მონოქრომატულ ტალღას კი არა, არამედ (4,1) ტალღათა ჯგუფს, რომელთა სიხშირეები და გავრცელების მიმართულება მოთავსებულია მცირე ინტერვალში, ასეთ ტალღათა ჯგუფს ტალღის პაკეტს უწოდებენ. თუ ავიღებთ ამ ტალღათა ჯგუფში რაიმე ცენტრალურ სიხშირეს ω_0 და განვიხილავთ სიხშირეთა ძალიან მცირე ინტერვალს $\Delta\omega$, რომელიც სიმეტრიულად არის განლაგებული ω_0-ის მიმართ, მაშინ პაკეტის ტალღური ფუნქცია მოიცემა გამოსახულებით

$$\Psi(x, t)=\int_{\omega_0-\Delta\omega/2}^{\omega_0+\Delta\omega/2} A(\omega)\, e^{i(kx-\omega t)}\, d\omega. \tag{4,3}$$

ვაჩვენოთ, რომ ეს ტალღური პაკეტი ფაქტიურად ლოკალიზებულია სივრცის სასრულ არეში და მისი მოძრაობის სიჩქარე (ე. წ. ჯგუფური სიჩქარე) ისეთივეა, როგორც ნაწილაკის სიჩქარე.

ცხადია, რომ ზოგად შემთხვევაში ω არის k-ს ფუნქცია, ამიტომ შეგვიძლია k გავშალოთ $(\omega-\omega_0)$-ის ხარისხების მწკრივად, ე. ი.

$$k=k_0+\left(\frac{dk}{d\omega}\right)_0(\omega-\omega_0)+\left(\frac{d^2k}{d\omega^2}\right)_0\frac{(\omega-\omega_0)^2}{2}+\ldots+ \tag{4,4}$$

ვიგულისხმოთ, რომ ამპლიტუდა $A(\omega)$ სიხშირეზე დამოკიდებით იმდენად ნელა იცვლება სხვა სიდიდეებთან შედარებით, რომ მისთვის შეგვიძლია ავიღოთ მნიშვნელობა $\omega=\omega_0$ წერტილში და ინტეგრალის ნიშნის გარეთ გავიტანოთ. ამასთანავე, რადგან $\Delta\omega$ ინტერვალი ძალიან მცირეა, (4,4) მწკრივში შემოვისაზღვროთ პირველი ორი წევრით. მაშინ (4,3) გამოსახულებისათვის გვექნება

$$\Psi(x, t)=A(\omega_0)e^{i\left\{k_0x-\left(\frac{dk}{d\omega}\right)_0\omega_0x\right\}}\cdot$$

$$\int_{\omega_0-\Delta\omega/2}^{\omega_0+\Delta\omega/2} e^{i\left\{\left(\frac{dk}{d\omega}\right)_0x-t\right\}\omega}\, d\omega$$

ანდა, თუ შემოვიღებთ ახალ ცვლადს $\xi=\omega-\omega_0$, მივიღებთ

$$\Psi(x, t)=A(\omega_0)e^{i(k_0x-\omega t)}\int_{-\Delta\omega/2}^{\Delta\omega/2} e^{i\left\{\left(\frac{dk}{d\omega}\right)_0x-t\right\}\xi}\, d\xi \tag{4,5}$$

ინტეგრალის ამოხსნით გვექნება

$$\Psi(x,\ t)=e^{i(k_0 x-\omega_0 t)}\ \frac{2A\sin\left\{\frac{\Delta\omega}{2}\left[\left(\frac{dk}{d\omega}\right)_0 x-t\right]\right\}}{\left(\frac{dk}{d\omega}\right)_0 x-t} \tag{4,6}$$

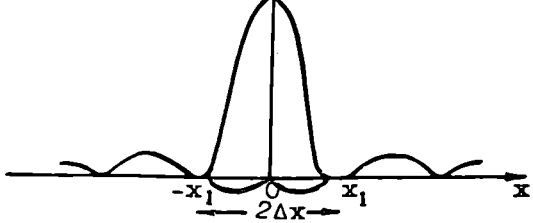
მიღებული $\Psi(x,\ t)$ ფუნქციის აბსოლუტური მნიშვნელობის კვადრატისათვის შეგვიძლია დავწეროთ

$$|\Psi(x,\ t)|^2=4|A(\omega_0)|^2\ \frac{\sin^2\left\{\frac{\Delta\omega}{2}\left[\left(\frac{dk}{d\omega}\right)_0 x-t\right]\right\}}{\left[\left(\frac{dk}{d\omega}\right)_0 x-t\right]^2}, \tag{4,7}$$

გამოვარკვიოთ ამ გამოსახულების ყოფაქცევა დროის საწყისი მომენტისათვის ($t=0$); გვექნება

$$|\Psi(x,\ 0)|^2=4|A|^2\ \frac{\sin^2\left\{\frac{\Delta\omega}{2}\left(\frac{dk}{d\omega}\right)_0 x\right\}}{\left\{\left(\frac{dk}{d\omega}\right)_0 x\right\}^2} \tag{4,8}$$

პირველ ნახაზზე მოცემულია ამ ფუნქციის გრაფიკი. $x=0$ წერტილში მას აქვს მაქსიმუმი. მაქსიმუმის შესაბამის კოორდინატს [უწოდებენ პაკეტის ცენტრს. თუ



ნახ. 1.

მივიღებთ მხედველობაში, რომ შემდგომი მაქსიმუმები სწრაფად კლებულობენ სიდიდით, მაშინ შეგვიძლია დავასკვნათ, რომ ფაქტიურად პაკეტი სასრულ არეშია გავრცელებული. კერძოდ, პაკეტის სიგანეს ვუწოდებთ იმ მანძილს, რომელიც გვაქვს ცენტრიდან ორ უახლოეს მინიმუმს შორის (x_1 და $-x_1$ წერტილები); აღვნიშნოთ იგი $2\Delta x$-ით. (4,8) ფორმულის თანახმად, რადგან პირველი ნული გვექნება ცენტრიდან Δx მანძილზე, ამიტომ პაკეტის სიგანე შეგვიძლია განვსაზღვროთ პირველი მინიმუმის პირობიდან, ე. ი.

$$\frac{1}{2}\left(\frac{dk}{d\omega}\right)_0 \Delta x\Delta\omega=\pi. \tag{4,9}$$

მაგრამ, რადგან $\Delta\omega$ სიმცირის გამო (4,4)-ში შემოვისაზღვრეთ მხოლოდ ორი წევრით, ე. ი. მივიღეთ, რომ

$$\Delta k = \left(\frac{dk}{d\omega}\right) \Delta\omega,$$

ამიტომ (4,9) ფორმულა მოგვცემს

$$\Delta k \Delta x = 2\pi. \tag{4,10}$$

როგორც ვხედავთ, უყველაზე დიდი მაქსიმუმი გვაქვს კოორდინატთა სათავეში, ე. ი. ეს ტალღები სათავეში ერთმანეთს აძლიერებენ, შორ მანძილზე კი აქრობენ[1].

როცა $t \neq 0$, მაშინ პაკეტი სივრცეში გადაინაცვლებს და მაქსიმუმისათვის საჭიროა პირობა

$$\left(\frac{dk}{d\omega}\right)_0 x - t = 0.$$

ამ განტოლებიდან ამოხსნილი

$$x = \left(\frac{d\omega}{dk}\right)_0 t \tag{4,11}$$

არის ის ადგილი, სადაც $|\Psi(x, t)|^2$-ს აქვს მაქსიმუმი. (4,11) გამოხატავს ამ მაქსიმუმის, ე. ი. ტალღური პაკეტის მიერ განვლილ გზას t დროის განმავლობაში. ამგვარად, ტალღური პაკეტი იმოძრავებს სიჩქარით

$$v' = \left(\frac{d\omega}{dk}\right)_0. \tag{4,12}$$

ამ სიჩქარეს უწოდებენ ჯგუფურ სიჩქარეს. (4,6) ფორმულა გვიჩვენებს, რომ ტალღის პაკეტის ცენტრი ისე მოძრაობს, როგორც ბრტყელი ტალღა k_0 ტალღური ვექტორით, ω_0 სიხშირითა და კოორდინატებისა და დროის ნელად ცვლადი ამპლიტუდით

$$\frac{2A(\omega_0)\,\mathrm{sim}\left\{\frac{1}{2}\Delta\omega\left[\left(\frac{dk}{d\omega}\right)_0 x - t\right]\right\}}{\left\{\left(\frac{dk}{d\omega}\right)_0 x - t\right\}}. \tag{4,13}$$

(ეს გამოსახულება ნელად ცვლადია იმიტომ, რომ არგუმენტში გვაქვს მცირე $\Delta\omega$ სიდიდე).

გამოვარკვიოთ ახლა, როგორია ჯგუფური სიჩქარე იმ ნაწილაკისა, რომელსაც ვესაბამებთ ტალღათა ჯგუფს. რადგან

$$E^2 = p^2c^2 + m^2c^4, \quad E = \hbar\omega, \quad \mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}, \tag{4,14}$$

ამიტომ

$$(\hbar\omega)^2 = c^2(\hbar k)^2 + m^2c^4. \tag{4,15}$$

ამ გამოსახულების გადიფერენციალება მოგვცემს $\omega d\omega = c^2 k dk$, საიდანაც ვღებულობთ

$$v' = \left(\frac{d\omega}{dk}\right)_0 = \frac{dE}{dp} = v, \tag{4,16}$$

ე. ი. ტალღათა ჯგუფის სიჩქარე ემთხვევა ნაწილაკის სიჩქარეს. ამგვარად, ისეთი შთაბეჭდილება იქმნება, რომ ნაწილაკი თითქოს შეგვიძლია განვიხილოთ როგორც ტალღათა ჯგუფი—პაკეტი. მაგრამ ტალღური პაკეტის შემოღება თავის მხრივ

[1] სინამდვილეში უნდა დავწეროთ $\Delta k \Delta x \geqslant 2\pi$, რადგან პაკეტში გარკვეული წვლილი სხვა მაქსიმუმებსაც შეაქვს.

აწყდება სერიოზულ წინააღმდეგობას, რომელიც გვაიძულებს ეს მოსაზრებაც უკუვაგდოთ. სახელდობრ, დე ბროილის ტალღას ის დამახასიათებელი თავისებურება აქვს, რომ იგი დამოკიდებულია სიჩქარეზე (ეს ჩანს განმარტებიდან $\lambda = \hbar/mv$), ამიტომ სიცარიელეშიც კი ტალღები დისპერსიას განიცდიან. მაშასადამე, ტალღური პაკეტი არ შეიძლება რაიმე მყარსა და უცვლელს წარმოადგენდეს, იგი გარკვეული დროის გავლის შემდეგ, დისპერსიის გამო, სხვადასხვა სიხშირის ტალღებად უნდა დაიშალოს, რაც ნაწილაკის უცვლელ ზომას არ შეიძლება შეესაბამებოდეს.

ტალღური ფუნქციის სწორი ფიზიკური შინაარსი განსაზღვრული იყო მ. ბორნის მიერ[1]. ბორნის თანახმად, ფიზიკური შინაარსი აქვს არა თვით $\psi(x, y, z, t)$ ფუნქციას[2], არამედ მისი აბსოლუტური მნიშვნელობის კვადრატს, რომელიც ცდით შეიძლება გაიზომოს; სახელდობრ,

$$dw = |\psi(\mathbf{r}, t)|^2 d\tau = \psi^* \psi \, d\tau \tag{4,17}$$

გამოხატავს ალბათობას იმისა, რომ დროის t მომენტში ნაწილაკი მოხვდება სივრცის $d\tau$ მოცულობაში. $|\psi(\mathbf{r}, t)|^2 = \psi^* \psi$ კი იქნება ალბათობის სიმკვრივე. ალბათობის ჩვეულებრივი განმარტების შედეგად ყველა ალბათობის ჯამი ერთის ტოლი უნდა იყოს, ე. ი.

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(\mathbf{r}, t)|^2 d\tau = 1. \tag{4,18}$$

ეს უკანასკნელი წარმოადგენს ალბათობას იმისა, რომ ნაწილაკი სადღაც იმყოფება, ე. ი. უბრალოდ ნაწილაკის არსებობის ფაქტს აღნიშნავს. (4,18) ამავე დროს ტალღური ფუნქციის ნორმირების პირობასაც წარმოადგენს. რადგან შრედინგერის განტოლება წრფივი დიფერენციალური განტოლებაა, ამიტომ მისი ამონახსნი დამოკიდებული იქნება ნებისმიერ მუდმივებზე. ნორმირების (4,18) პირობა ერთი ნებისმიერი მუდმივის განსაზღვრის საშუალებას მოგვცემს. სახელდობრ, ნებისმიერი მუდმივი ისე შეგვიძლია შევარჩიოთ, რომ დაცული იყოს (4,18) ნორმირების პირობა; თუ (4,18) დაცული არ არის, მაშინ $d\tau$ მოცულობაში მოხვედრის ალბათობა შემდეგნაირად ჩაიწერება

$$\frac{|\psi(\mathbf{r}, t)|^2 d\tau}{\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(\mathbf{r}, t)|^2 d\tau}. \tag{4,19}$$

ამ გამოხატულების ინტეგრალი, რადგან მნიშვნელი მუდმივ რიცხვია, უდრის ერთს.

ნორმირების (4,18) პირობა მოითხოვს, რომ ψ-ფუნქცია იყოს კვადრატულად ინტეგრებადი, ე. ი. მას ჰქონდეს ისეთი სახე, რომელიც უსასრულობაში სწრაფად ისპობა. ასეთი მდგომარეობა დამახასიათებელია დისკრეტული სპექტრისათვის. მაგრამ შრედინგერის განტოლებას შეიძლება ჰქონდეს როგორც დისკრეტული, ისე უწყვეტი სპექტრი. უწყვეტი სპექტრისათვის (4,18) ტიპის ინტეგრალი განშლადია, ამიტომ საჭირო ხდება ტალღური ფუნქციის სხვა ტიპის ნორმირების შემოღება. ასე მაგალითად, ჩვენ შეიძლება ვიგულისხმოთ, რომ ალბათობა ნორ-

---

[1] M. Born. Zeits. f. Phys. 37, 863, (1926).

[2] თვით ტალღურ ფუნქციას რომ ფიზიკური შინაარსი არა აქვს, იქიდანაც ჩანს, რომ საზოგადოდ იგი არის კომპლექსური სიდიდე.

მირებულია ძალიან დიდ, მაგრამ სასრულ მოცულობაზე, რომელიც შემდგომ უსასრულობისაკენ უნდა მივასწრაფოთ. ამასთან, ცხადია ნორმირების ხასიათი ფიზიკური სიდიდეების მნიშვნელობაზე არ იმოქმედებს.

სპექტრის ხასიათი დამოკიდებულია ამოცანის პირობებზე. დისკრეტული სპექტრი დამახასიათებელია ბმული მდგომარეობებისათვის, როცა ნაწილაკის მოძრაობის არე შემოსაზღვრულია სივრცის სასრული არით, ე. ი. მოძრაობა ფინიტურია. ამ შემთხვევაში თუ მიზიდვის პოტენციალური ენერგია ისეა ნორმირებული, რომ უსასრულობაში იგი ნულის ტოლია, სრული ენერგია უარყოფითია $E<0$. შრედინგერის განტოლების ამონახსნს ფინიტური მოძრაობისათვის უნდა მოვთხოვოთ, რომ უსასრულობაში იგი სწრაფად ისპობოდეს. ასეთი სასაზღვრო პირობა უზრუნველყოფს განტოლების დისკრეტულ სპექტრს როცა მოძრაობა ინფინიტურია, მაშინ ნაწილაკს შეუძლია მოძრაობა მთელს უსასრულო სივრცეში; სრული ენერგია დადებითია $E>0$ და სასაზღვრო პირობებში ასახული უნდა იყოს ის გარემოება, რომ ნაწილაკს შეუძლია გარკვეული ალბათობით უსასრულობაში მოხვედრა. ამ შემთხვევაში შრედინგერის განტოლების სპექტრი იქნება უწყვეტი. სრული ენერგია უწყვეტ მნიშვნელობებს მიიღებს და ტალღური ფუნქციაც ენერგიაზე როგორც პარამეტრზე უწყვეტად იქნება დამოკიდებული: $\psi=\psi(\mathbf{r}, E)$.

რადგან, საზოგადოდ, ψ ფუნქცია გაერცელებულია მთელს სივრცეზე, ამიტომ არსებობს ალბათობა იმისა, რომ ნაწილაკი აღმოჩნდება სივრცის ნებისმიერ წერტილში; მაშასადამე, მკაცრი კვანტური მექანიკური მსჯელობის თანახმად ნაწილაკი თითქოს მთელ სივრცეზეა „განფენილი“.

ამგვარად, გვაქვს შემდეგი დასკვნა: შრედინგერის განტოლებიდან ნაპოვნ ψ ფუნქციას არავითარი ფიზიკური შინაარსი არა აქვს. ფიზიკური აზრი აქვს ამ ფუნქციის აბსოლუტური მნიშვნელობის კვადრატს, რომელიც მდებარეობის ალბათობის სიმკვრივეს გამოხატავს.

აშკარაა, რომ ψ ფუნქცია უნდა აკმაყოფილებდეს გარკვეულ სასაზღვრო პირობებს. ამ პირობების სახე დამოკიდებულია კონკრეტულ ამოცანებზე, ე. ი. პოტენციალურ ენერგიაზე. მის შემდეგ, რაც ტალღური ფუნქციის აბსოლუტური მნიშვნელობის კვადრატს მივაწერეთ ალბათობის შინაარსი, ბუნებრივია, შრედინგერის განტოლების ამოხსნას მოვთხოვოთ შემდეგი პირობები, რომლებსაც სტანდარტულ პირობებს უწოდებენ. ψ ფუნქცია უნდა იყოს:

1) უწყვეტი და ჰქონდეს უწყვეტი პირველი რიგის წარმოებულები, 2) სასრული, 3) ცალსახა.

ტალღური ფუნქციისათვის უწყვეტობის, სასრულობისა და ცალსახობის მოთხოვნა ფიზიკურად გასაგებია, რადგან მდებარეობის განმსაზღვრელი ალბათობა არ შეიძლება იყოს უსასრულოდ დიდი ანდა მრავალსახა. შრედინგერის განტოლება მეორე რიგის დიფერენციალური განტოლებაა, ამიტომ, თუ პოტენციალური ენერგია სასრულოა (ამასთან შეიძლება უწყვეტი არც იყოს), მაშინ როცა მოცემულია ტალღური ფუნქცია და მისი წარმოებულები რაიმე ზედაპირზე, შეგვიძლია მოვახდინოთ შრედინგერის განტოლების ინტეგრაცია და ვიპოვოთ $\psi(\mathbf{r}, t)$ ფუნქციის მნიშვნელობა ნებისმიერ წერტილში. მაშასადამე, რადგან ჩვენ გვსურს ტალღურმა ფუნქციამ ცალსახად განსაზღვროს ნაწილაკის მდგომარეობა, საჭიროა მოვითხოვოთ, რომ არა მხოლოდ $\psi(\mathbf{r}, t)$ იყოს უწყვეტი, არამედ უწყვეტი უნდა იყოს მისი პირველი რიგის წარმოებულებიც.

დაბოლოს, შევნიშნოთ, რომ რადგან ფიზიკური აზრი აქვს $\psi^*\psi$-ს, ამიტომ ტალღური ფუნქციები განსაზღვრული იქნება $\exp(\pm i\alpha)$ ფაზური მამრავლის სი-

ზუსტით, სადაც α არის ნამდვილი რიცხვი. ამიტომ, ყოველი ფიზიკური სიდიდე, რომელსაც კი შემდეგში გამოვთვლით ψ ფუნქციის დახმარებით, არ უნდა იცვლებოდეს ψ ფუნქციის $\psi e^{\pm i\alpha}$ შეცვლის დროს; კერძოდ, აქედან გამომდინარეობს, რომ ის ნებისმიერი კოეფიციენტი, რომელიც უნდა განისაზღვროს ნორმირების პირობიდან, შეგვიძლია ჩავთვალოთ ნამდვილ სიდიდედ.

§ 5. ᲓᲔᲜᲘᲡ ᲕᲔᲥᲢᲝᲠᲘ, ᲣᲬᲕᲔᲢᲝᲑᲘᲡ ᲒᲐᲜᲢᲝᲚᲔᲑᲐ

ჩვენ ვაჩვენეთ, რომ შრედინგერის განტოლების ამონახსნის საშუალებით შეგვიძლია ვიპოვოთ დროის რომელიმე მომენტში ნაწილაკის მოხვედრის ალბათობა სივრცის ამა თუ იმ ადგილას. კერძოდ, $\psi^*\psi$ სიდიდე წარმოადგენს მდებარეობის ალბათობის სიმკვრივეს. ცხბდია, რომ თუ ამ გამოსახულებას გავამრავლებთ ელექტრონის მუხტზე, მაშინ იგი მოგვცემს ელექტრული მუხტის სიმკვრივეს. მისი საშუალებით შეგვიძლია ვიპოვოთ მასის სიმკვრივეც, ნაწილაკთა რიცხვიც და სხვა. რადგან, ისევე როგორც კლასიკურ მექანიკაში, ადგილი უნდა ჰქონდეს მუხტის მუდმივობას, ნაწილაკთა რიცხვის შენახვასა და სხვა, კვანტურ მექანიკაში შესაძლებელი უნდა იყოს უწყვეტობის განტოლების გამოყვანა. ქვემოთ ვაჩვენებთ, რომ ასეთი განტოლება მართლაც ადვილად მიიღება შრედინგერის განტოლებიდან.

დავწეროთ შრედინგერის დროითი განტოლება

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta\psi + V(\mathbf{r}, t)\psi. \tag{5,1}$$

ამ განტოლებაში გადავიდეთ კომპლექსურად შეუღლებულზე; ამასთან, გავითვალისწინოთ, რომ პოტენციალური ენერგია ნამდვილი ფუნქციაა; გვექნება

$$-i\hbar \frac{\partial \psi^*}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta\psi^* + V(\mathbf{r}, t)\psi^*. \tag{5,2}$$

(5,1) განტოლება გავამრავლოთ მარცხნიდან ψ^*-ზე, (5,2) კი ψ-ზე და პირველს გამოვაკლოთ მეორე, მივიღებთ

$$i\hbar \left(\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} + \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \right) = -\frac{\hbar^2}{2m} (\psi^* \Delta\psi - \psi \Delta\psi^*). \tag{5,3}$$

გარდავქმნათ ამ გამოსახულების მარჯვენა მხარე. ამისათვის გავითვალისწინოთ ვექტორული ანალიზის შემდეგი ფორმულა:

$$\operatorname{div} A\varphi = \varphi \operatorname{div} \mathbf{A} + (\mathbf{A} \operatorname{grad} \varphi). \tag{5,4}$$

რამდენადაც $\operatorname{div} \operatorname{grad} \varphi = \Delta\varphi$, გვექნება

$$\operatorname{div} (\psi^* \nabla\psi - \psi \nabla\psi^*) = \psi^* \Delta\psi - \psi \Delta\psi^* + (\nabla\psi^*, \nabla\psi) - (\nabla\psi, \nabla\psi^*) \tag{5,5}$$

ბოლო ორი წევრი ერთმანეთს აბათილებს, ამიტომ დაგვრჩება

$$\psi^* \Delta\psi - \psi \Delta\psi^* = \operatorname{div} (\psi^* \nabla\psi - \psi \nabla\psi^*). \tag{5,5'}$$

ამგვარად, (5,3) განტოლება მიიღებს სახეს

$$\frac{\partial}{\partial t} \psi^* \psi = \frac{i\hbar}{2m} \operatorname{div} (\psi^* \nabla\psi - \psi \nabla\psi^*) \tag{5,6}$$

თუ შემოვიღებთ აღნიშვნებს:

$$w = \psi^* \psi, \tag{5,7}$$

$$\mathbf{J}=\frac{i\hbar}{2m}(\psi\nabla\psi^*-\psi^*\nabla\psi), \tag{5,8}$$

მაშინ (5,6) განტოლება მიიღებს უწყვეტობის განტოლების კარგად ცნობილ გამოხატულებას

$$\frac{\partial w}{\partial t}+\operatorname{div}\mathbf{J}=0. \tag{5,9}$$

რამდენადაც w ალბათობის სიმკვრივეა, იმდენად, ბუნებრივია, $\mathbf{J}$-ს ვუწოდოთ ალბათობის დენის სიმკვრივის ვექტორი. (5,9) უწყვეტობის განტოლებას შეიძლება მივცეთ ინტეგრალური ფორმა. ამისათვის განვიხილოთ რაიმე τ-მოცულობა, რომელიც შემოსაზღვრულია S-ფართით და ავიღოთ ინტეგრალი (5,9) გამოსახულებიდან მთელს მოცულობაზე; მივიღებთ

$$-\frac{\partial}{\partial t}\int_\tau w\,d\tau=\int_\tau \operatorname{div}\mathbf{J}d\tau. \tag{5,10}$$

თუ მარჯვენა მხარისათვის გამოვიყენებთ გაუს-ოსტროგრადსკის თეორემას, გვექნება

$$-\frac{\partial}{\partial t}\int_\tau w\,d\tau=\oint_S J_n dS. \tag{5,11}$$

ეს უკანასკნელი გვიჩვენებს, რომ აღებულ τ-მოცულობაში ალბათობის შემცირება დროის ერთეულში უდრის ალბათობის დენის ვექტორის ნაკადს τ-მოცულობის შემომსაზღვრელ ჩაკეტილ ზედაპირში.

იმის მიხედვით, თუ რა სიდიდეებთან გვაქვს საქმე (5,9), შეგვიძლია განვიხილოთ როგორც მუხტის ისე მასის, ნაწილაკთა რიცხვისა და სხვათა მუდმივობის კანონი. მართლაც, თუ გავამრავლებთ w და $\mathbf{J}$-ს მასაზე, გვექნება

$$\rho_m=m\psi^*\psi,\quad \mathbf{J}_m=\frac{i\hbar m}{2}(\psi\nabla\psi^*-\psi^*\nabla\psi). \tag{5,12}$$

ρ_m იქნება მასის სიმკვრივე, ხოლო $\mathbf{J}_m$ მასის სიმკვრივის ნაკადის ვექტორი. შესაბამისად (5,9)-ის გამრავლებით მასაზე მივიღებთ მასის უწყვეტობის განტოლებას. ასევე, აშკარაა, რომ თუ e ნაწილაკის მუხტია, მაშინ

$$\rho_e=e\psi^*\psi,\quad \mathbf{J}_e=\frac{ie\hbar}{2m}(\psi\nabla\psi^*-\psi^*\nabla\psi). \tag{5,13}$$

შეგვიძლია განვიხილოთ როგორც მუხტის სიმკვრივე და ელექტრული დენის სიმკვრივის ვექტორი შესაბამისად. ხოლო (5,9) ამ შემთხვევაში გამოხატავს მუხტის მუდმივობის კანონს.

როცა ალბათობა დროის მიხედვით არ იცვლება, მაშინ $\frac{\partial}{\partial t}\psi^*\psi=0$ და უწყვეტობის განტოლება მიიღებს მარტივ სახეს

$$\operatorname{div}\mathbf{J}=0. \tag{5,14}$$

ავიღოთ ამ გამოსახულებიდან მოცულობითი ინტეგრალი და შემდეგ გამოვიყენოთ გაუს-ოსტროგრადსკის თეორემა. გვექნება

$$\oint_S J_n dS=0; \tag{5,15}$$

მაშასადამე, ამ შემთხვევაში τ-მოცულობის შემოსაზღვრელ ფართში ნაკადი ნულის ტოლია.

აშკარაა, რომ დენის ვექტორის (5,8) ფორმულა შემდეგი სახითაც შეგვიძლია გადავწეროთ:

$$\mathbf{J} = -\frac{\hbar}{m} Im\,(\psi \nabla \psi^*) \tag{5,16}$$

სადაც Im აღნიშნავს კომპლექსურ ნაწილს. აღსანიშნავია, რომ როცა ტალღური ფუნქცია ნამდვილია, მაშინ დენის ვექტორი ნულის ტოლია.

§ 6. კვანტური მექანიკის სტატისტიკური ხასიათი

ჩვენ ვნახეთ, რომ კვანტური მექანიკის ძირითადი განტოლების ამოხსნა საშუალებას გვაძლევს განვსაზღვროთ ნაწილაკის მდებარეობის ალბათობა, ე. ი. კვანტურ მექანიკას აქვს სტატისტიკური ხასიათი. გამოვარკვიოთ, რით არის გამოწვეული ალბათობებზე გადასვლისა და მოვლენების სტატისტიკური მეთოდით აღწერის აუცილებლობა. ამ საკითხის გასარკვევად განვიხილოთ წინა პარაგრაფის (4.10) ფორმულა

$$\Delta k \Delta x = 2\pi$$

რადგან $\Delta p_x = \hbar \Delta k$, ამიტომ

$$\Delta p_x \Delta x = 2\pi\hbar. \tag{6,1}$$

ეს დამოკიდებულება ცნობილია როგორც ჰაიზენბერგის განუზღვრელობის თანაფარდობა[1]. $2\Delta x$ აღნიშნავდა პაკეტის ზომას, იგი წარმოადგენს სივრცის იმ ნაწილს, რომელიც შეესაბამება ნაწილაკს, ე. ი. ნაწილაკის მდებარეობა ზუსტად კი არ განისაზღვრება, არამედ მისთვის მოცემულია კოორდინატის გაზომვის Δx შეცდომა. ამიტომ, Δx შეგვიძლია განვიხილოთ, როგორც კოორდინატის განუზღვრელობის ზომა. ასევე, Δp_x იქნება იმპულსის განუზღვრელობა. ჩვენ ვხედავთ, რომ კოორდინატისა და იმპულსის განუზღვრელობათა ნამრავლი უნივერსალური მუდმივია, ე. ი. თუ განუზღვრელობა იმპულსის გაზომვისას ნულის ტოლია, $\Delta p_x = 0$ (ეს იმას ნიშნავს, რომ იმპულსის x მდგენელს ზუსტად ვზომავთ), მაშინ განუზღვრელობა კოორდინატის გაზომვაში $\Delta x = \infty$. ამგვარად, როდესაც ნაწილაკის იმპულსის სიდიდე ზუსტად ვიცით, მაშინ ნაწილაკის მდებარეობის შესახებ არაფერი არ ვიცით და პირიქით. შევნიშნოთ, რომ კოორდინატისა და იმპულსის ერთდროულად ზუსტად ცოდნის შეუძლებლობის საკითხი პრინციპული საკითხია და იგი არაა გამოწვეული გასაზომი იარაღის არა სიზუსტით ან ტექნიკის დონით.

შევნიშნოთ, რომ სამ განზომილებიანი მოძრაობის დროს, (6,1)-თან ერთად გვექნებოდა ასეთივე ფორმულები დანარჩენი ორი კოორდინატისათვისაც.

რადგან კოორდინატი და იმპულსი აუცილებელია ნაწილაკის ტრაექტორიის დასადგენად, ამიტომ განუზღვრელობის თანაფარდობის თანახმად, კვანტურ მექანიკაში ნაწილაკის ტრაექტორიაზე ლაპარაკს აზრი არა აქვს. ამიტომაც ისმის საკითხი ნაწილაკის მხოლოდ მდებარეობის ალბათობის შესწავლაზე. ამითაა გამოწვეული კვანტური მექანიკის სტატისტიკური ხასიათი.

განუზღვრელობის თანაფარდობას ადგილი აქვს არა მხოლოდ იმპულსისა და კოორდინატისათვის. განუზღვრელ სიდიდეთა წყვილები კვანტურ მექანიკაში მრავალია. ჩვენ ამ საკითხს შევეხებით მაშინ, როცა მოვიყვანთ განუზღვრელობის

[1] W. Heisenberg. Zeits. f. Phys. 43, 172, (1927)

თანაფარდობის ზოგად დამტკიცებას. წინასწარ შევნიშნოთ, რომ ჩვენ შეგვეძლო § 4-ში k კი არ გაგვეშალა ω-ს ხარისხებად, არამედ, პირიქით, ω გაგვეშალა $(k-k_0)$ ხარისხების მიხედვით, მაშინ სრულიად ანალოგიური მსჯელობით მივიღებდით ფორმულას

$$|\Psi(0,\ t)|^2 = 4|A|^2 \frac{\sin^2\left(\frac{d\omega}{dk}\frac{t\Delta k}{2}\right)}{\left(\frac{d\omega}{dt}t\right)^2}, \qquad (6,2)$$

რომლის მინიმუმის წერტილი Δt დროისათვის განისაზღვრებოდა პირობით

$$\frac{\Delta\omega}{\Delta k}\Delta t\Delta k = 2\pi.$$

საიდანაც, თუ გავითვალისწინებთ, რომ $\Delta E = \hbar\Delta\omega$, მივიღებთ

$$\Delta E\Delta t = 2\pi\hbar; \qquad (6,3)$$

ე. ი. განუზღვრელობას აქვს ადგილი ენერგიასა და დროს შორისაც. აღვნიშნოთ, რომ ამ ფორმულის შინაარსი განსხვავდება კოორდინატისა და იმპულსისათვის დაწერილი განუზღვრელობის თანაფარდობის შინაარსისაგან, ამ საკითხსაც ჩვენ შემდგომში გავარკვევთ.

დაბოლოს ვაჩვენოთ, რომ განუზღვრელობის თანაფარდობას არ შეიძლება რაიმე მნიშვნელობა ჰქონოდა კლასიკურ მექანიკაში და რომ იგი მიკროსამყაროს დამახასიათებელ პრინციპს გამოხატავს. მართლაც დავუშვათ, რომ გვაქვს მაკრო სხეული 1 გრ. მასით. რა სიზუსტით შეგვიძლია ამ ნაწილაკის მდებარეობის განსაზღვრა, თუ სიჩქარის განსაზღვრაში დაშვებული ცდომილება, მაგალითად, $\Delta v \sim 10^{-5}\ \frac{\text{სმ}}{\text{წმ}}$ რიგისაა? (6,1) ფორმულის თანახმად

$$\Delta x = \frac{2\pi\hbar}{m\Delta v} \sim 10^{-22}\ \text{სმ}, \qquad (6,4)$$

ე. ი. ცდომილება კოორდინატის გაზომვაში ფაქტიურად ნულის ტოლია. ეს კი იმას ნიშნავს, რომ კოორდინატი ამ შემთხვევაში ზუსტად იზომება. თუ ახლა ავიღებთ ელექტრონს, რომლის მასა $\sim 10^{-27}$ გრამია, გვექნება, რომ $\Delta x \sim 10^{5}$ სმ., ე. ი. ამ შემთხვევაში კოორდინატის გაზომვის ცდომილება 1 კმ-ის რიგისაა, რისი მხედველობაში მიღებლობაც შეუძლებელია.

როდესაც კლასიკურ მექანიკაში მოცემულია კოორდინატი და იმპულსი, მაშინ ამბობენ, რომ მოცემულია მდგომარეობაო. თუ ჩვენ ვიცით ნაწილაკის კოორდინატისა და იმპულსის მნიშვნელობები დროის ყოველი მომენტისათვის, მაშინ შეგვიძლია ვიპოვოთ ნაწილაკის დამახასიათებელი ყველა ფიზიკური სიდიდე. ამისათვის კი, კლასიკურ მექანიკაში საჭიროა ამოიხსნას ნიუტონის მოძრაობის განტოლებანი. ამ განტოლებების ამოსახსნელად გვჭირდება საწყისი პირობები, რომლებიც განსაზღვრავენ საწყის მდგომარეობას (სამი კოორდინატი და სამი იმპულსის მდგენელი). საწყისი მდგომარეობითა და ნიუტონის განტოლებებით კლასიკურ მექანიკაში ნაწილაკის მოძრაობის ამოცანა ცალსახად იხსნება. მოკლედ რომ ვთქვათ, როდესაც კლასიკურ მექანიკაში „ნაწილაკის აწმყო" ზუსტადაა განსაზღვრული, მოძრაობის განტოლებები საშუალებას გვაძლევს „ნაწილაკის მომავალიც" ზუსტად განვსაზღვროთ. აშკარაა, რომ მიკროსამყაროში მდგომარეობის ასეთ აღწერას აზრი აღარა აქვს. ამ შემთხვევაში ჩვენ ზუსტად არ გვეცოდინება

არათუ მომავალი მდგომარეობა. არამედ საწყისიც კი (ჰაიზენბერგის განუზღვრელობის თანაფარდობის ძალით შეუძლებელია კოორდინატებისა და იმპულსების ერთდროულად ზუსტად გაზომვა!). მაგრამ ეს გარემოება სრულებითაც არ უშლის ხელს კვანტურ მექანიკას მოვლენები აღწეროს ახალი სიდიდეებით, რომლებიც დამახასიათებელი არიან მიკრო სამყაროსათვის და რომელთათვისაც გარკვეული საწყისი მონაცემებისა და შრედინგერის განტოლების დახმარებით აღვწერთ ყველა იმ მოვლენას, რომელსაც კი ადგილი აქვს მიკრო სამყაროში. ამ საკითხს დაწვრილებით § 40-ში შევეხებით.

§ 7. სტაციონარული მდგომარეობა

ახლა გამოვარკვიოთ, რას ვუწოდებთ სტაციონარულ მდგომარეობას კვანტურ მექანიკაში. როცა ნაწილაკი არ იმყოფება გარეშე ცვალებად ველში, მაშინ ნაწილაკის ჰამილტონიანი დროზე ცხადად დამოკიდებული არ არის, ე. ი.

$$\frac{\partial H}{\partial t}=0. \tag{7,1}$$

ამ შემთხვევაში შრედინგერის განტოლებაში

$$i\hbar\frac{\partial\Psi(\mathbf{r},\ t)}{\partial t}=H(\mathbf{r})\,\Psi(\mathbf{r},\ t) \tag{7,2}$$

შესაძლებელია ცვლადთა განცალება ფურიეს მეთოდით. ამონახსნი ვეძებოთ ორი $\psi(\mathbf{r})$ და $\varphi(t)$ ფუნქციის ნამრავლის სახით, ე. ი.

$$\Psi(\mathbf{r},\ t)=\psi(\mathbf{r})\,\varphi(t) \tag{7,3}$$

და შევიტანოთ (7,2) განტოლებაში; მიღებული შედეგი გავყოთ $\psi(\mathbf{r})\,\varphi(t)$ ნამრავლზე; გვექნება

$$\frac{i\hbar\dfrac{\partial\varphi(t)}{\partial t}}{\varphi(t)}=\frac{H\psi(\mathbf{r})}{\psi(\mathbf{r})}. \tag{7,4}$$

მარცხენა მხარე მხოლოდ დროის ფუნქციაა, მარჯვენა კი—კოორდინატების. ამიტომ ტოლობა მაშინაა შესაძლებელი, როცა თითოეული წევრი ამ შეფარდებისა მუდმივი რიცხვის ტოლია. ამ რიცხვს ცხადია ექნება ენერგიის განზომილება. აღვნიშნოთ იგი E-თი; მივიღებთ:

$$i\hbar\frac{\partial\varphi(t)}{\partial t}=E\varphi(t), \tag{7,5}$$

$$H\psi(\mathbf{r})=E\psi(\mathbf{r}). \tag{7,6}$$

(7,6) წარმოადგენს დროზე დამოუკიდებელ შრედინგერის განტოლებას. (7,5)-ის ამონახსნს ექნება შემდეგი სახე:

$$\varphi(t)=e^{-\frac{i}{\hbar}Et} \tag{7,7}$$

ამიტომ შრედინგერის (7,2) განტოლების ამონახსნი შეგვიძლია წარმოვიდგინოთ შემდეგნაირად:

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \psi(\mathbf{r}) e^{-\frac{i}{\hbar} Et} \tag{7,8}$$

მდგომარეობას, რომელიც აიწერება (7,8) ტიპის ფუნქციით, სტაციონარულ მდგომარეობას უწოდებენ. ამ შემთხვევაში ტალღური ფუნქცია დროზე მხოლოდ ჰარმონიულად არის დამოკიდებული $\exp\left(-\frac{i}{\hbar} Et\right)$ მამრავლის სახით. თუ (7,8) ამონახსნს შევიტანთ შრედინგერის (7,2) განტოლებაში, მივიღებთ შრედინგერის სტაციონარული მდგომარეობების (7,6) განტოლებას.

სტაციონარული მდგომარეობა იმით ხასიათდება, რომ ამ მდგომარეობაში ალბათობა და დენის სიმკვრივის ვექტორი დროზე არაა დამოკიდებული. მართლაც, ალბათობისათვის გვექნება

$$w(\mathbf{r}) = \Psi^*(\mathbf{r}, t)\Psi(\mathbf{r}, t) = \psi^*(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}). \tag{7,9}$$

ასევე, რადგან დენის ვექტორის გამოსახულებაში შედის $\Psi^* \nabla \Psi$ კომბინაცია, მასში დროის შემცველი წევრი ამოვარდება.

ახლა ვთქვათ შრედინგერის (7,6) სტაციონარული მდგომარეობების განტოლებას აქვს დისკრეტული სპექტრი. ეს იმას ნიშნავს, რომ ენერგიებისათვის მივიღებთ დისკრეტულ მიმდევრობას $E_1, E_2, \ldots E_n, \ldots$, ასევე, ტალღური ფუნქციებიც გადანომრება და გვექნება $\psi_1, \psi_2, \ldots \psi_n \ldots$ და ამ შემთხვევაში (7,8) გამოსახულებიდან გვექნება

$$\Psi_n(\mathbf{r}, t) = \psi_n(\mathbf{r}) e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} \tag{7,10}$$

რადგან შრედინგერის (7,2) განტოლება წრფივია, ამიტომ მას დააკმაყოფილებს შემდეგი წრფივი კომბინაციაც

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \sum_{n=1}^{\infty} C_n \psi_n(\mathbf{r}) e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} \tag{7,11}$$

სადაც C_n ნებისმიერი, საზოგადოდ კომპლექსური, დროზე დამოუკიდებელი, მუდმივებია. ცხადია, რომ (7,11) ფუნქცია იქნება შრედინგერის არასტაციონარული მდგომარეობების განტოლების ამონახსნი.

შრედინგერის განტოლებას შეიძლება ჰქონდეს უწყვეტი სპექტრიც. ამ შემთხვევაში მისი ამონახსნი უწყვეტად იქნება დამოკიდებული ენერგიაზე და ნაცვლად (7,11)-სა გვექნება შემდეგი გამოსახულება:

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} C(E)\psi(\mathbf{r}, E) e^{-\frac{i}{\hbar} Et} dE. \tag{7,12}$$

აღსანიშნავია მეტად მნიშვნელოვანი გარემოება, რომ არც (7,11) და არც (7,12) სტაციონარულ მდგომარეობებს აღარ გამოხატავენ. როცა სხვადასხვა სტაციონარული მდგომარეობების ენერგიები ერთმანეთისაგან განსხვავებულია, მაშინ ამ ფუნქციებით გამოთვლილი ალბათობა და ალბათობის დენის ვექტორი დროზე

დამოუკიდებლები აღარ არიან. ამიტომ სტაციონარული მდგომარეობა ისეთ მდგომარეობას ეწოდება, რომელიც ხასიათდება ენერგიის განსაზღვრული მნიშვნელობით.

§ 8. სუპერპოზიციის პრინციპი

კვანტური მექანიკის ერთ-ერთ ფუნდამენტურ პრინციპს წარმოადგენს სუპერპოზიციის პრინციპი რომელიც უშუალოდ ექსპერიმენტის შედეგია.

განვიხილოთ რაიმე ფიზიკური A სიდიდე, რომელმაც შეიძლება მიიღოს მნიშვნელობათა დისკრეტული მიმდევრობა:

$$A_1,\ A_2,\cdots,A_n,\cdots \tag{8,1}$$

შესაბამისი მდგომარეობის ფუნქციები აღვნიშნოთ:

$$\psi_1,\ \psi_2,\cdots \psi_n,\cdots \tag{8,2}$$

რომელიმე ψ_k ფუნქციის მოცემა ნიშნავს, რომ მისი შესაბამისი A ზუსტად უდრის A_k-ს, ე. ი. $A=A_k$.

სუპერპოზიციის პრინციპი ასე შეგვიძლია ჩამოვაყალიბოთ: თუ მოცემულ ფიზიკურ პირობებში ნაწილაკს შეუძლია იმყოფებოდეს თითოეულ (8,2) მდგომარეობაში, მაშინ მას შეუძლია იმყოფებოდეს მდგომარეობაშიც, რომელიც ხასიათდება (8,2) ფუნქციების წრფივი კომბინაციით, ე. ი.

$$\Psi=\sum_{n=1}^{\infty} C_n\psi_n \tag{8,3}$$

აღსანიშნავია, რომ სუპერპოზიციის ამ პირობას აკმაყოფილებს შრედინგერის განტოლება, რამდენადაც იგი წრფივი განტოლებაა. შრედინგერის განტოლების ეს თვისება ჩვენ უკვე გამოვიყენეთ წინა პარაგრაფში. ამგვარად, მათემატიკურ ენაზე სუპერპოზიციის პრინციპი იმას ნიშნავს, რომ კვანტური მექანიკის ყველა განტოლება, რომელსაც კი აკმაყოფილებს ψ ფუნქცია, წრფივი უნდა იყოს.

თუ ცალკეულ ψ_i ფუნქციას შეესაბამება გარკვეული $A=A_i$ მნიშვნელობა, (8,3) ფუნქციით განსაზღვრულ მდგომარეობას გარკვეული A-სიდიდე აღარ შეესაბამება.

განვიხილოთ თავისუფალი ნაწილაკის ორი სხვადასხვა მდგომარეობა

$$\psi_1(\mathbf{r})=e^{\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}_1\mathbf{r}} \qquad \psi_2(\mathbf{r})=e^{\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}_2\mathbf{r}} \tag{8,4}$$

პირველ ნაწილაკს აქვს განსაზღვრული იმპულსი $\mathbf{p}_1$ მეორეს კი $\mathbf{p}_2$. მათი სუპერპოზიციით მივიღებთ მდგომარეობას

$$\Psi(\mathbf{r})=C_1 e^{\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}_1\mathbf{r}}+C_2 e^{\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}_2\mathbf{r}} \tag{8,5}$$

რომელსაც განსაზღვრული იმპულსი აღარ შეესაბამება. ადვილი დასანახია, რომ $|C_1|^2$ არის ალბათობა იმისა, რომ იმპულსს აქვს $\mathbf{p}=\mathbf{p}_1$ მნიშვნელობა, ხოლო $|C_2|^2$ წარმოადგენს $\mathbf{p}=\mathbf{p}_2$ მნიშვნელობის ალბათობას. სუპერპოზიციის პრინციპი გვეუბნება, რომ თავისუფალი ნაწილაკი შესაძლებელია ნაწილობრივ მოხვდეს მდგომა-

რეობაში, რომელშიაც აქვს $\mathbf{p}_1$ იმპულსი და ნაწილობრივ მდგომარეობაში, რომლის იმპულსი $\mathbf{p}_2$-ის ტოლია, ამას აშკარად დავინახავთ, თუ ვიპოვით $|\Psi(\mathbf{r})|^2$-ს. გვექნება:

$$|\Psi(\mathbf{r})|^2 = |C_1|^2 + |C_2|^2 + 2ReC_1C_2^* e^{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_2)\mathbf{r}}, \qquad (8,6)$$

ბოლო წევრი გამოხატავს ინტერფერენციას აღნიშნულ ორ გარკვეულ მდგომარეობას შორის.

შევნიშნოთ, რომ სუპერპოზიციის პრინციპს ადგილი აქვს კლასიკურ მექანიკაშიაც. ვთქვათ, გვაქვს რაიმე პერიოდული მოძრაობა, რომელიც ხასიათდება ψ_i ფუნქციებით ($i=1, 2\ldots$), მაშინ კლასიკურ მექანიკაში Ψ (სუპერპოზიცია) ნიშნავს რაღაც ახალ მდგომარეობას, რომელიც განსხვავდება ψ_1, $\psi_2, \ldots \psi_n, \ldots$ მდგომარეობისაგან. მაგალითად, კლასიკურ მექანიკაში ψ-ს შეკრება თავისთავთან $\psi+\psi=2\psi$ გვაძლევს ახალ მდგომარეობას, რომელიც განსხვავდება მოცემული ψ მდგომარეობისაგან (გავიხსენოთ ორი ერთნაირი ამპლიტუდისა და ფაზის მქონე ტალღის შეკრება, რის შედეგადაც ვღებულობთ ტალღას, რომლის ამპლიტუდა ორჯერ აღემატება მოცემული ტალღის ამპლიტუდას). კვანტურ მექანიკაში კი ψ და $C\psi$ ერთიდაიგივე მდგომარეობას გამოხატავს.

თავი II

ოპერატორული აღრიცხვა

მექანიკა თავისი განვითარების სხვადასხვა ეტაპზე მათემატიკის სხვადასხვა დარგებს იყენებდა. მათემატიკის ზოგიერთი დარგის შექმნა და განვითარება თვით მექანიკის განვითარების უშუალო შედეგი იყო. ასე მაგალითად, ნიუტონის მექანიკის ჩამოყალიბებასთან დაკავშირებულია დიფერენციალური და ინტეგრალური აღრიცხვის შექმნა. აინშტაინის რელატივისტურმა მექანიკამ ფართოდ გამოიყენა ტენზორული აღრიცხვის მეთოდები. კვანტურ მექანიკასაც დასჭირდა მათემატიკის სპეციალური დარგები, სახელდობრ, ოპერატორული და მატრიცული აღრიცხვა. ჩვენ ვხედავთ, რომ ახალი მოვლენების აღმოჩენასთან ერთად, ხდება მათემატიკური მეთოდების გაღრმავება და მათემატიკის ახალი ცნებების გამოყენება. ძველი მეთოდები და ცნებები, რომლებიც საკმარისი იყო ცნობილი მოვლენების ასახსნელად, აღარ გამოდგებიან ბუნების მოვლენების უფრო დეტალურ თავისებურებათა ასაწერად. ატომური მოვლენების ახსნის აუცილებლობამ მოითხოვა ფიზიკაში ახალი მათემატიკური მეთოდების გამოყენება. იმ მათემატიკურ მეთოდებს შორის, რომლებიც გამოიყენება კვანტურ მექანიკაში, ძირითადია ოპერატორთა თეორია, რომლის მთავარი დებულებანი მოცემულია ამ თავში.

§ 9. ოპერატორთა თვისებები

L ოპერატორის ცნების ქვეშ იგულისხმება მათემატიკურ ოპერაციათა ის ერთობლიობა, რომელიც უნდა ჩატარდეს რაიმე $\varphi(r)$ ფუნქციაზე, რომ მივიღოთ $f(r)$ ფუნქცია. ე. ი.

$$L\varphi(r) = f(r). \tag{9,1}$$

L შეიძლება იყოს ნებისმიერი ოპერაცია: კოორდინატზე გამრავლების, გაყოფის, n-ჯერ გაწარმოების და სხვა.

კვანტურ მექანიკაში, ძირითადად, ისეთი ოპერატორები გამოიყენება, რომელთაც აქვთ შემდეგი თვისება:

$$L\left\{\sum_i C_i \varphi_i(r)\right\} = \sum_i C_i L\varphi_i(r) \tag{9,2}$$

ასეთ ოპერატორებს წრფივ ოპერატორებს უწოდებენ. წრფივი ოპერატორია, მაგალითად, ლაპლასის ოპერატორი

$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}. \tag{9,3}$$

წრფივია აგრეთვე

$$L = a\frac{\partial}{\partial x} \tag{9,4}$$

ოპერატორი და ა. შ.[1]

ოპერატორს ზოგჯერ შეიძლება ინტეგრალური სახეც ჰქონდეს; მაგალითად

$$Lf(\mathbf{r}) = \int G(\mathbf{r}, \mathbf{r}')\, f(\mathbf{r}')\, d\mathbf{r}'. \tag{9,5}$$

ასეთ შემთხვევაში $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ ფუნქციას ინტეგრალური ოპერატორის გულს უწოდებენ[2].

განვიხილოთ მაგალითად პუასონის განტოლება:

$$\Delta\varphi(\mathbf{r}) = F(\mathbf{r}); \tag{9,6}$$

$\mathbf{r}$ არის რადიუსვექტორი. ცნობილია, რომ (9,6)-ის ამონახსნს აქვს სახე

$$\varphi(\mathbf{r}) = -\frac{1}{4\pi}\int \frac{F(\mathbf{r}')\,d\mathbf{r}'}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}, \tag{9,7}$$

სადაც $d\mathbf{r}' = dx'\,dy'\,dz'$ არის მოცულობის ელემენტი. (9,7) შეგვიძლია ჩავწეროთ ოპერატორული სახითაც

$$DF(\mathbf{r}) = \varphi(\mathbf{r}), \tag{9,8}$$

სადაც D შემდეგი ინტეგრალური ოპერატორია

$$D = -\frac{1}{4\pi}\int \frac{d\mathbf{r}'\ldots}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}. \tag{9,9}$$

ანახმად განმარტებისა D ინტეგრალური ოპერატორის გული ყოფილა (9,6) განტოლების გრინის ფუნქცია:

$$G = -\frac{1}{4\pi}\,\frac{1}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}. \tag{9,10}$$

თუ (9,6)-ზე ვიმოქმედებთ მარცხნიდან D ოპერატორით, მივიღებთ

$$D\Delta\varphi = DF = \varphi. \tag{9,11}$$

ეს კი იმას გვიჩვენებს, რომ ნამრავლი $D\Delta$ ერთზე გამრავლების ტოლფასია. ამ გარემოებას ფორმალურად ასე წერენ

$$D\Delta = 1. \tag{9,12}$$

ამ შემთხვევაში ამბობენ, რომ D და Δ ოპერატორები ერთმანეთის შებრუნებულია, ე. ი.

$$D = \Delta^{-1} \quad \text{ან} \quad D^{-1} = \Delta. \tag{9,13}$$

საზოგადოდ, თუ ორი ოპერატორის ნამრავლი ტოლფასია ერთზე გამრავლებისა, მაშინ ამ ოპერატორებს ურთიერთშებრუნებულს უწოდებენ. იმისათვის, რომ შემდგომში საშუალება გვქონდეს გამოსახულებების მოკლედ ჩაწერისა და ფორმალური ოპერაციების ჩატარებისა, ხელსაყრელია გამოვიყენოთ დირაკის აბსტრაქტული უსასრულო ვექტორული (საზოგადოდ კომპლექსური) სივრცის მეთოდი. დირაკის

---

[1] წრფივია მაგალითად, ჩვენს მიერ წინა თავში განხილული ჰამილტონის ოპერატორი:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\mathbf{r}).$$

[2] შემდგომში მოცულობის ელემენტის აღსანიშნავად გამოვიყენებთ $d\mathbf{r} = dxdydz$ აღნიშვნას.

აბსტრაქტულ სივრცეში შემოვიღოთ სკალარული ნამრავლი $\langle \psi \mid \varphi \rangle$, რომელიც განვსაზღვროთ შემდეგნაირად:

$$\langle \psi \mid \varphi \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(\mathbf{r})\, \varphi(\mathbf{r})\, d\mathbf{r}. \tag{9,14}$$

აშკარაა, რომ ასეთნაირად განმარტებულ სკალარულ ნამრავლს ექნება შემდეგი თვისებები:

$$\langle \psi \mid \varphi \rangle^* = \langle \varphi \mid \psi \rangle, \tag{9,15}$$

$$\langle \psi \mid \varphi_1 \pm \varphi_2 \rangle = \langle \psi \mid \varphi_1 \rangle \pm \langle \psi \mid \varphi_2 \rangle; \tag{9,16}$$

თუ C არის მუდმივი, მაშინ

$$\langle C\psi \mid \varphi \rangle = C^* \langle \psi \mid \varphi \rangle, \tag{9,17}$$

$$\langle \psi \mid C\varphi \rangle = C \langle \psi \mid \varphi \rangle; \tag{9,18}$$

როცა ψ და φ ფუნქციები უწყვეტად არიან დამოკიდებული რაიმე t პარამეტრზე, მაშინ აშკარაა შემდეგი ტოლობის სამართლიანობაც:

$$\frac{d}{dt} \langle \psi \mid \varphi \rangle = \left\langle \frac{\partial \psi}{\partial t} \mid \varphi \right\rangle + \left\langle \psi \mid \frac{\partial \varphi}{\partial t} \right\rangle. \tag{9,19}$$

შეიძლება დამტკიცდეს, რომ შესრულებულია შვარც-ბუნიაკოვსკის უტოლობა[1]

$$| \langle \psi \mid \varphi \rangle |^2 \leqslant \langle \psi \mid \psi \rangle \langle \varphi \mid \varphi \rangle. \tag{9,20}$$

დაბოლოს ნათელია, რომ $\langle \psi \mid \psi \rangle \geqslant 0$; ამასთან, ნულთან ტოლობა გვექნება მაშინ, როცა ψ იგივურად ნულის ტოლია. სიდიდეს

$$\langle \psi \mid \psi \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^* \psi d\mathbf{r} = \int_{-\infty}^{+\infty} | \psi |^2 d\mathbf{r} \tag{9,21}$$

უწოდებენ ფუნქციის ნორმას. ამასთან, თუ ფუნქციის ნორმა სასრულია, მაშინ ψ ფუნქცია კვადრატულად ინტეგრებადია. ასეთ შემთხვევაში ყოველთვის შეიძლება ნორმა ერთის ტოლი გავხადოთ

$$\langle \psi \mid \psi \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} | \psi(\mathbf{r}) |^2 d\mathbf{r} = 1. \tag{9,22}$$

ასეთ ფუნქციებს ნორმირებულს უწოდებენ. შევნიშნოთ, რომ ჩვენ ხშირად საქმე გვექნება ისეთ ფუნქციებთანაც, რომელთა ნორმა სასრულო სიდიდე არ არის. ასე მაგალითად, ცხადია, რომ თავისუფალი ნაწილაკის შესაბამისი ტალღური ფუნქციის, ე. ი. ბრტყელი ტალღის $\psi(\mathbf{r}) = A \exp\left(\frac{i}{\hbar} \mathbf{pr}\right)$ ნორმა უსასრულობის ტოლია.

ახლა გავარკვიოთ, რას წარმოადგენენ ჩვენ მიერ ზემოთ შემოღებულ აბსტრაქტულ სივრცეში განხილული ვექტორები. ავიღოთ $\langle \psi \mid \varphi \rangle$ სკალარული ნამ-

---

[1] შვარც-ბუნიაკოვსკის უტოლობის გამოყვანა ადვილია, თუ გამოვალთ აშკარა გამოსახულებიდან

$$(a\psi + b\varphi \mid a\psi + b\varphi) = |a|^2 \langle \psi \mid \psi \rangle + ab^* \langle \varphi \mid \psi \rangle + a^* b \langle \psi \mid \varphi \rangle + |b|^2 \langle \varphi \mid \varphi \rangle \geqslant 0.$$

ამ კვადრატული ფორმის არაუარყოფითობისათვის საჭიროა

$$\langle \psi \mid \psi \rangle \langle \varphi \mid \varphi \rangle - \langle \psi \mid \varphi \rangle \langle \varphi \mid \psi \rangle \geqslant 0,$$

რაც გვაძლევს დასამტკიცებელ უტოლობას.

რავლი და გავყოთ იგი ორ შემადგენელ ნაწილად $\langle\psi|$ და $|\varphi\rangle$. პირველს დირაკის მიხედვით ეწოდება ბრა-ვექტორი, მეორეს კი—კეტ-ვექტორი. ასეთი სახელწოდებები წარმოდგება ინგლისური სიტყვის „ფრჩხილების“ „bracket“ შუაზე გაყოფით. ამასთან, თანახმად (9,15) თვისებისა

$$\langle\psi|^* = |\psi\rangle \tag{9,23}$$

ე. ი. ბრა-ვექტორის შეუღლებული წარმოადგენს კეტ-ვექტორს და პირიქით. თუ უურადღებით დავაკვირდებით სკალარული ნამრავლის თვისებებს, დავინახავთ, რომ აბსტრაქტული სივრცის ვექტორებს ჩვეულებრივი ვექტორების (ოლონდ კომპლექსური) ყველა თვისება გააჩნიათ. მაგალითად, (9,16)-დან ნათელია, რომ

$$|\psi_1+\psi_2\rangle = |\psi_1\rangle + |\psi_2\rangle \tag{9,24}$$

და სხვა.

თვითშეუღლებული ოპერატორები. შემოვიღოთ შეუღლებული ოპერატორის ცნება. მოცემული L ოპერატორის ერმიტულად შეუღლებული (და არა კომპლექსურად შეუღლებული !) L^+ ოპერატორი განისაზღვრება შემდეგი პირობით:

$$\langle\psi|L\varphi\rangle = \langle L^+\psi|\varphi\rangle \tag{9,25}$$

ან ცხადი სახით

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi^* L\varphi\, dx = \int_{-\infty}^{+\infty} (L^+\psi)^*\varphi dx, \tag{9,26}$$

სადაც ψ და φ ნებისმიერი ფუნქციებია, რომლებიც ისპობიან ინტეგრების საზღვარზე.

კვანტურ მექანიკაში განსაკუთრებულ როლს თამაშობენ ე. წ. თვითშეუღლებული, ანდა ერმიტული ოპერატორები. თუ ადგილი აქვს ტოლობას $L^+ = L$, მაშინ ოპერატორს თვითშეუღლებული (ერმიტული) ეწოდება. ამ შემთხვევაში თანახმად (9,25) ფორმულისა გვაქვს

$$\langle\psi|L\varphi\rangle = \langle L\psi|\varphi\rangle, \tag{9,27}$$

ანდა ცხადად ერმიტულობის პირობას შემდეგი სახე ექნება:

$$\int \psi^*(L\varphi)\, dx = \int (L\psi)^*\varphi dx. \tag{9,28}$$

ვიპოვოთ ახლა იმ ერმიტული ოპერატორების სახე, რომლებიც ფართოდ გამოიყენებიან კვანტურ მექანიკაში. ვაჩვენოთ, მაგალითად, რომ ოპერატორი $L = ia\dfrac{\partial}{\partial x}$, სადაც a ნამდვილი მუდმივია, ერმიტული ოპერატორია. ამისათვის შევამოწმოთ (9,27) პირობა. გვექნება

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \left(ia\psi^* \frac{\partial\varphi}{\partial x} - i^* a \frac{\partial\psi^*}{\partial x}\varphi \right) dx = ia \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\psi^* \frac{\partial\varphi}{\partial x} + \varphi \frac{\partial\psi^*}{\partial x} \right) dx = 0,$$

ე. ი.

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d}{dx}(\psi^*\varphi)\, dx = (\psi^*\varphi)\Big|_{-\infty}^{+\infty} = 0,$$

რადგან ψ და φ პირობის თანახმად საზღვრებზე ისპობა. ჩვენ ვხედავთ, რომ (9,28) პირობა დაცულია და, მაშასადამე, $ia\dfrac{\partial}{\partial x}$ ყოფილა ერმიტული ოპერა-

ტორი. აშკარაა, რომ ოპერატორი $L=a\dfrac{\partial}{\partial x}$ არ იქნება თვითშეუღლებული, რადგან (9,28) პირობა დაცული აღარ არის. ამგვარად, თუ განვიხილავთ სამგანზომილებიან შემთხვევას, შეიძლება ვთქვათ, რომ ოპერატორი

$$L=ia\nabla=\widehat{ia}\,\mathrm{grad} \tag{9,29}$$

არის თვითშეუღლებული.

ასევე ცხადია, რომ ყველა ნამდვილ. სიდიდეზე გამრავლების ოპერატორიც თვითშეუღლებულია. მართლაც, თუ $L=x$, რადგან კოორდინატი ნამდვილი სიდიდეა, გვექნება

$$\langle\psi\,|\,x\varphi\rangle=\langle x\psi\,|\,\varphi\rangle.$$

ცხადია, რომ ასევე ერმიტული იქნება კოორდინატების ნებისმიერი ნამდვილი ფუნქცია. ახლა დავამტკიცოთ, რომ ლაპლასის ოპერატორიც ერმიტული ოპერატორია. ამისათვის გავიხსენოთ, რომ $\Delta=\nabla\cdot\nabla$ შეგვიძლია წარმოვიდგინოთ შემდეგი სახით: $\Delta=\nabla/i\,(i\nabla)$. შევამოწმოთ (9,28) ერმიტულობის პირობა. ამისათვის განვიხილოთ $\langle\psi\,|\,\Delta\varphi\rangle$ სკალარული ნამრავლი. იგი ასე შეგვიძლია დავწეროთ:

$$\langle\psi\,|\,\Delta\varphi\rangle=\langle\psi\;|\;-i\nabla i\nabla\varphi\rangle=\langle\psi\;|\;-i\nabla\varphi_1\rangle, \tag{9,30}$$

სადაც $\varphi_1\equiv i\nabla\varphi$. გავიხსენოთ ახლა, რომ ∇/i ერმიტული ოპერატორია; მაშინ (9,30) ტოლობა მიიღებს სახეს

$$\langle\psi\,|\,\Delta\varphi\rangle=\langle-i\nabla\psi\,|\,\varphi_1\rangle. \tag{9,31}$$

შევიტანოთ მარჯვენა მხარეში $\varphi_1=i\nabla\varphi$ და კვლავ გამოვიყენოთ $i\nabla$ ოპერატორის ერმიტულობის თვისება. შედეგად მივიღებთ

$$\langle\psi\;|\;\Delta\varphi\rangle=\langle\Delta\psi\;|\;\varphi\rangle.$$

ამგვარად, ლაპლასის ოპერატორიც ერმიტული ყოფილა, ამრიგად, ჩვენ ვიპოვეთ შემდეგი ერმიტული ოპერატორები:

x-ზე გამრავლების ოპერატორი,

$$ia\,\frac{\partial}{\partial x} \tag{9,32}$$

$$\Delta=\nabla^2=\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}, \tag{9,33}$$

შემდეგში ჩვენ დავინახავთ, რომ ფიზიკურ სიდიდეებს სწორედ ერმიტული ოპერატორები შეესაბამება. მაგალითად, ჩვენ მიერ განხილული ჰამილტონის ოპერატორი ერმიტულია, რამდენადაც იგი შეიცავს ლაპლასიანს და პოტენციალურ ენერგიას, რომლებიც ერმიტულებია.

ალგებრული მოქმედებანი ოპერატორებზე. A და B ორი ოპერატორის ჯამი ან სხვაობა ეწოდება ისეთ L ოპერატორს, რომლისთვისაც ადგილი აქვს ტოლობას

$$L\psi=A\psi\pm B\psi$$

ან ფორმალურად

$$L=A\pm B. \tag{9,34}$$

ვიმოქმედოთ ახლა ტოლობაზე

$$L\psi=\varphi$$

მარცხნიდან M ოპერატორით. მივიღებთ

$$ML\psi=M\varphi\equiv f.$$

ოპერატორს

$$K=ML \tag{9,35}$$

ეწოდება M და L ოპერატორების ნამრავლი. აშკარაა, რომ საზოგადოდ $ML\neq LM$. მაგალითად, თუ $L=x$ და $M=\frac{\partial}{\partial x}$, მაშინ

$$\left(x\frac{\partial}{\partial x}\right)\psi \neq \frac{\partial}{\partial x}(x\psi) \tag{9,36}$$

როცა $LM=ML$ ოპერატორებს ურთიერთ გადასმადი ან კომუტატური ეწოდებათ.

ვთქვათ, მოცემულია ორი ოპერატორი A და B და ცნობილია მათი შეუღლებული ოპერატორები A^+ და B^+. როგორ ვიპოვოთ ამ ორი ოპერატორის ნამრავლის შეუღლებული ოპერატორი $(AB)^+$? განმარტებით

$$\langle\psi \mid AB\varphi\rangle=\langle(AB)^+\psi \mid \varphi\rangle. \tag{9,37}$$

გარდავქმნათ მარცხენა მხარე. $B\varphi$ დროებით φ_1-ით აღვნიშნოთ და გამოვიყენოთ შეუღლებულობის პირობა A ოპერატორისათვის

$$\langle\psi \mid AB\varphi\rangle=\langle\psi \mid A\varphi_1\rangle=\langle A^+\psi \mid \varphi_1\rangle. \tag{9,38}$$

ახლა $A^+\psi$ აღვნიშნოთ დროებით ψ_1-ით და φ_1-ისათვის შევიტანოთ $B\varphi$; გვექნება

$$\langle A^+\psi\mid\varphi_1\rangle=\langle\psi_1\mid B\varphi\rangle. \tag{9,39}$$

გამოვიყენოთ შეუღლებულობის პირობა B ოპერატორისათვის და შემდეგ ψ_1-ისათვის კვლავ დავუბრუნდეთ $A^+\psi$ მნიშვნელობას; მივიღებთ

$$\langle\psi_1 \mid B\varphi\rangle=\langle B^+\psi_1 \mid \varphi\rangle=\langle B^+A^+\psi \mid \varphi\rangle. \tag{9,40}$$

ასე გარდაიქმნება (9,37) ტოლობის მარცხენა მხარე და გვექნება ტოლობა

$$\langle B^+A^+\psi \mid \varphi\rangle=\langle(AB)^+\psi \mid \varphi\rangle, \tag{9,41}$$

საიდანაც დავასკვნით, რომ

$$(AB)^+=B^+A^+. \tag{9,42}$$

როცა A და B ერმიტული ოპერატორებია, მაშინ

$$(AB)^+=BA \tag{9,43}$$

ე. ი. AB ჯერ კიდევ არ არის ერმიტული. AB-ს ერმიტულობისათვის A და B-ს ერმიტულობის გარდა საჭიროა მათი კომუტატურობაც [1].

ვაჩვენოთ, რომ შეუდმივი რიცხვისათვის ერმიტულად შეუღლებულობა ემთხვევა კომპლექსურად შეუღლებულობას. მართლაც დავუშვათ, რომ $L=c$, სადაც c რაიმე რიცხვია, კომპლექსური ან ნამდვილი; მაშინ ოპერატორის შეუღლებულობის (9,15) პირობა მოგვცემს

$$\langle\psi \mid c\varphi\rangle=\langle c^+\psi \mid \varphi\rangle.$$

რადგან c მუდმივია, გვექნება, რომ

$$c=(c^+)^* \tag{9,44}$$

---

[1] (9,42) ფორმულის გამოყენებით ადვილად ვაჩვენებთ, რომ ლაპლასიანი ერმიტული ოპერატორია. მართლაც, $\Delta^+=[(i\nabla)(\nabla/i)]^+=\Delta$, ე. ი. $\Delta^+=\Delta$.

საიდანაც $c^+=c^*$. კერძო შემთხვევაში, როცა $c=i$ მივიღებთ

$$i^+=i^*=-i. \tag{9,45}$$

როცა c ნამდვილია, $c^+=c$, ე. ი. ნამდვილი რიცხვი ყოველთვის თვითშეუღლებულია.

როგორც მაგალითი ვაჩვენოთ: თუ ოპერატორი ერმიტულია, მისი შებრუნებული ოპერატორიც ერმიტული იქნება. ვთქვათ, $AB=1$. ავიღოთ ერმიტულად შეუღლებული და გამოვიყენოთ (9,42), გვექნება $B^+A^+=1$. ცხადია, რომ თუ $A^+=A$, მაშინ $B^+=A^{-1}$. მაგრამ მეორეს მხრივ, $A^{-1}=B$ და მაშასადამე $B^+=B$. ნათელია, ამიტომ, რომ ლაპლასის ოპერატორის შებრუნებული ოპერატორი D, რომელიც განმარტებულია (9,9) ფორმულით, ერმიტული ოპერატორი იქნება.

§ 10. ოპერატორთა საკუთარი ფუნქციები და საკუთარი მნიშვნელობები

ავიღოთ რაიმე წრფივი ოპერატორი L და შევადგინოთ შემდეგი ერთგვაროვანი განტოლება:

$$L\psi=\lambda\psi, \tag{10,1}$$

სადაც λ რაღაც პარამეტრია. ამ განტოლებას, სათანადო სასაზღვრო პირობების გათვალისწინებით, ნებისმიერი λ პარამეტრისათვის საზოგადოდ ამოხსნა არა აქვს. პარამეტრის იმ მნიშვნელობებს, რომელთათვისაც (10,1) განტოლებას აქვს არა ტრივიალური ამოხსნა (ψ ნულს არ უდრის იგივურად) ეწოდება საკუთარი მნიშვნელობები, შესაბამის ამოხსნებს კი საკუთარი ფუნქციები. ხოლო (10,1)-ს უწოდებენ საკუთარი ფუნქციებისა და საკუთარი მნიშვნელობების განტოლებას. საკუთარი მნიშვნელობების ერთობლიობას განტოლების სპექტრი ეწოდება. როცა საკუთარი მნიშვნელობები ისეთია, რომ ისინი შეადგენენ სიდიდეთა წყვეტილ მიმდევრობას ისე, რომ შეიძლება მათი გადანომერა

$$\lambda_1,\ \lambda_2,\ \lambda_3,\dots\ \lambda_n,\dots \tag{10,1'}$$

მაშინ ამბობენ, რომ სპექტრი წყვეტილია (დისკრეტულია). ასეთ შემთხვევაში შესაძლებელია საკუთარი ფუნქციების გადანომვრაც: $\psi_1,\ \psi_2,\ \psi_3,\dots\psi_n$. როცა საკუთარი მნიშვნელობები უწყვეტად იცვლებიან რაიმე შუალედში, მაშინ სპექტრს უწყვეტი ეწოდება და ამ შემთხვევაში არ შეიძლება არც საკუთარი ფუნქციებისა და არც საკუთარი მნიშვნელობების გადანომვრა. ამ შემთხვევაში ფუნქციები უწყვეტად იქნებიან დამოკიდებული λ პარამეტრზე (საკუთარ მნიშვნელობებზე) $\psi=\psi(x,\ \lambda)$.

როცა ერთ საკუთარ მნიშვნელობას შეესაბამება ერთი საკუთარი ფუნქცია, მაშინ ამბობენ, რომ სპექტრი მარტივია; ხოლო როცა ერთ საკუთარ მნიშვნელობას რამოდენიმე საკუთარი ფუნქცია შეესაბამება, სპექტრს გადაგვარებული ეწოდება. ხოლო ფუნქციათა რიცხვი, რომელიც ერთ საკუთარ მნიშვნელობას შეესაბამება, განსაზღვრავს გადაგვარების ჯერადობას.

თუ (10,1) განტოლებას გავამრავლებთ მარცხნიდან ψ^* და ავიღებთ ინტეგრალს, გვექნება

$$\int\psi^*L\psi d\mathbf{r}=\lambda\int\psi^*\psi d\mathbf{r},$$

საიდანაც შეგვიძლია განვსაზღვროთ საკუთარი მნიშვნელობა

$$\lambda=\frac{\int\psi^*L\psi d\mathbf{r}}{\int\psi^*\psi d\mathbf{r}}=\frac{\langle\psi|\,L\psi\rangle}{\langle\psi\,|\psi\rangle} \tag{10,2}$$

ახლა დავამტკიცოთ მეტად მნიშვნელოვანი დებულება, რომ ერმიტული ოპერატორის საკუთარი მნიშვნელობა ნამდვილი (არსი) სიდიდეა. რადგან (10,2) გამოსახულების მნიშვნელი ყოველთვის ნამდვილია, ამ დებულების დასამტკიცებლად საკმარისია ვაჩვენოთ, რომ მრიცხველიც ნამდვილი სიდიდეა. ავიღოთ $\langle\psi \mid L\psi\rangle^*$ და გამოვიყენოთ L-ოპერატორის ერმიტულობის პირობა

$$\langle\psi \mid L\psi\rangle^* = \langle L\psi \mid \psi\rangle = \langle\psi \mid L\psi\rangle. \tag{10,3}$$

ამრიგად, (10,2)-ის მრიცხველიც ნამდვილი სიდიდეა და, მაშასადამე, $\lambda^* = \lambda$, რაც ამტკიცებს დებულებას. ერმიტული ოპერატორების ამ თვისების გამო მათ განსაკუთრებული მნიშვნელობა ენიჭებათ კვანტურ მექანიკაში.

ბოლოს განვიხილოთ მაგალითი. ვიპოვოთ

$$H_0 = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} \tag{10,4}$$

ოპერატორის საკუთარი ფუნქციები და საკუთარი მნიშვნელობები. ადვილი შესამჩნევია, რომ ეს ოპერატორი ემთხვევა ჰამილტონის ოპერატორს ერთგანზომილებიანი მოძრაობის შემთხვევაში, როცა პოტენციალური ენერგია $V(x) = 0$. დავწეროთ საკუთარი ფუნქციებისა და საკუთარი მნიშვნელობების განტოლება

$$H_0\psi(x) = E\psi(x), \tag{10,5}$$

სადაც E ენერგიის საკუთარი მნიშვნელობებია. ამ განტოლებას სასაზღვრო პირობების მიხედვით შეიძლება ჰქონდეს როგორც უწყვეტი, ისე წყვეტილი სპექტრი. ჯერ ვიპოვოთ ისეთი ამონახსნები, რომლებიც სასრულია, უწყვეტია და აქვთ უწყვეტი წარმოებულები მთელს x-ღერძზე. ამ მიზნით (10,5) განტოლება გადავწეროთ შემდეგი სახით:

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + k^2\psi(x) = 0, \tag{10,6}$$

სადაც

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}. \tag{10,7}$$

როგორც ვიცით, (10,6) განტოლებას ექნება ორი წრფივად დამოუკიდებელი ამონახსნი

$$\psi_1(x) = Ae^{ikx}, \quad \psi_2(x) = Be^{-ikx}, \tag{10,8}$$

სადაც A და B ნებისმიერი მუდმივებია. სასაზღვრო პირობები დაცულია ნებისმიერი ნამდვილი k-თვის, რომელიც ძევს შუალედში $-\infty \leqslant k \leqslant +\infty$, ე. ი., როცა ენერგია E უწყვეტად იცვლება $(0, \infty)$ შუალედში:

$$0 \leqslant E \leqslant \infty; \tag{10,8'}$$

მაშასადამე, აღნიშნული სასაზღვრო პირობების დროს (10,5) განტოლების სპექტრი უწყვეტია. ამასთან, ენერგიის ერთ მნიშვნელობას შეესაბამება ორი საკუთარი ფუნქცია, რაც იმას ნიშნავს, რომ (10,5) განტოლების სპექტრი ორჯერადად გადაგვარებულია.

რადგან (10,5) განტოლება წრფივია, ამიტომ ადგილი ექნება სუპერპოზიციის პრინციპს და განტოლებას დააკმაყოფილებს ფუნქციაც

$$\psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}, \tag{10,9}$$

რომელსაც ზოგადი ამონახსნი ეწოდება.

ახლა (10,5) განტოლების ამონახსნს დამატებით დავაღოთ შემდეგი სასაზღვრო პირობები:

$$\psi(0)=0, \quad \psi(a)=0; \tag{10,10}$$

მაშინ პირველი პირობის გამოყენებით (10,9)-ს შეიძლება მივცეთ სახე

$$\psi(x)=c\sin kx. \tag{10,11}$$

მეორე სასაზღვრო პირობა კი გვეუბნება, რომ

$$\sin ka=0, \tag{10,12}$$

რომლის ამონახსნია $ka=n\pi$, სადაც $n=1, 2, 3\ldots$. თუ გავიხსენებთ (10,7) ფორმულას საკუთარი მნიშვნელობებისათვის მივიღებთ

$$E_n=\frac{n^2\hbar^2}{2ma^2}\pi^2 \tag{10,13}$$

ე. ი. განტოლებას ჰქონია დისკრეტული სპექტრი: E_1, E_2, E_3,..., რომელთა შესაბამის ფუნქციებს ექნებათ სახე

$$\psi_n(x)=C\sin\frac{n\pi}{a}x. \tag{10,14}$$

ენერგიის ერთ საკუთარ მნიშვნელობას შეესაბამება ერთი საკუთარი ფუნქცია, ამიტომ სპექტრი მარტივია. ზემოთ ნაპოვნ ამონახსნებში შემავალი ნებისმიერი მუდმივების განსაზღვრა შეიძლება ნორმირების პირობით, რომელსაც ქვემოთ განვიხილავთ.

როგორც ვხედავთ, წყვეტილი სპექტრის ფუნქცია დამოკიდებულია ინდექსზე, რომელიც ღებულობს დისკრეტულ მნიშვნელობებს მაშინ, როცა უწყვეტი სპექტრის ფუნქციები უწყვეტად არის დამოკიდებული საკუთარ მნიშვნელობებზე.

§ 11. კრონეკერ-ვეიერშტრასის სიმბოლო და დირაკის ფუნქცია

ფიზიკაში და მათემატიკაში ხშირად იხმარება ე. წ. კრონეკერ-ვეიერშტრასის სიმბოლო, რომელიც ასეა განმარტებული:

$$\delta_{mn}=\begin{cases}1, & \text{როცა } m=n\\ 0, & \text{როცა } m\neq n\end{cases} \tag{11,1}$$

ცხადია, δ_{mn} შეგვიძლია წარმოვიდგინოთ როგორც მეორე რანგის ტენზორი. განმარტებიდან გამომდინარეობს, რომ მას აქვს მხოლოდ ერთის ტოლი დიაგონალური ელემენტები. იგი სიმეტრიულია, ე. ი. $\delta_{mn}=\delta_{nm}$. ამ სიმბოლოს გააჩნია მთელი რიგი მნიშვნელოვანი თვისებები. განვიხილოთ ასეთი ჯამი

$$\sum_n \delta_{mn}A_n.$$

ამ ჯამში ნულისაგან განსხვავდება მხოლოდ ის ერთი წევრი, სადაც δ_{mn}-ის ორივე ინდექსი ტოლია. ამიტომ აშკარაა, რომ

$$\sum_n \delta_{mn}A_n=A_m. \tag{11,2}$$

ეს არის δ_{mn} სიმბოლოს ფილტრაციის თვისება.

განვიხილოთ ინტეგრალი

$$J=\frac{1}{2\pi}\int_{-\pi}^{+\pi}e^{i(m-n)x}\,dx$$

როცა $m=n$, მაშინ $J=1$, ხოლო როცა $m\neq n$, $J=0$. ამგვარად

$$\delta_{mn}=\frac{1}{2\pi}\int_{-\pi}^{+\pi}e^{i(m-n)x}\,dx \tag{11,3}$$

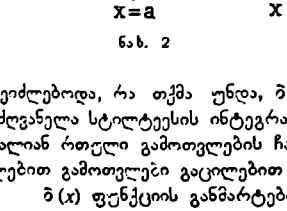
მაგრამ ფიზიკაში საქმე გვაქვს არა მხოლოდ ისეთ სიდიდეებთან, რომელთა განმარეაც შეიძლება (ე. ი. სიდიდეებთან, რომლებიც დამოკიდებული არიან რაიმე მთელ ინდექსზე), არამედ ისეთ სიდიდეებთანაც, რომლებიც უწყვეტად არიან დამოკიდებული გარკვეულ პარამეტრზე, ე. ი. როცა საქმე გვაქვს უწყვეტ სპექტრთან. ასეთ შემთხვევაში იძულებული ვართ δ_{mn}-ის ნაცვლად შემოვიღოთ მისი ანალოგიური სიმბოლო უწყვეტი სიდიდეებისათვისაც. ასეთი სიმბოლო შემოღებული იყო დირაკის მიერ 1926 წელს და მას დირაკის $\delta(x)$ ფუნქციას უწოდებენ. იმისათვის, რათა $\delta(x)$ ფუნქციას უწყვეტი სპექტრისათვის ისეთივე თვისებები ჰქონდეს, რაც δ_{mn}-ს—წყვეტილი სპექტრისათვის, საჭიროა $\delta(x)$ ფუნქცია განვმარტოთ ასე:

$$\delta(x-a)=\begin{cases}0, & x\neq a\\ \infty, & x=a\end{cases} \tag{11,4}$$

და

$$\int_{\alpha}^{\beta}\delta(x-a)dx=1 \tag{11,5}$$

აქ აუცილებელია, რომ a მოცემული იყოს საინტეგრაციო შუალედში. კერძო შემთხვევაში შეგვიძლია ავიღოთ $a=0$. $\delta(x)$ ფუნქციის გრაფიკი მოცემულია ნახ. 2. აშკარაა, რომ $\delta(x)$ ფუნქციის ეს განსაზღვრა არ ემთხვევა მათემატიკაში ცნობილი ფუნქციის განსაზღვრას, მაგრამ მიუხედავად ამისა, $\delta(x)$ ფუნქცია ყოველთვის შეგვიძლია წარმოვიდგინოთ როგორც რაიმე უწყვეტი ფუნქციის ზღვრული მნიშვნელობა. აღსანიშნავია, რომ ისეთი უწყვეტი ფუნქცია, რომელსაც ექნებოდა (11,4) თვისება, სინამდვილეში არ არსებობს; სამაგიეროდ, არსებობს (11,5) ინტეგრალი. ამიტომ, საბოლოო ფორმულებში $\delta(x-a)$ ფუნქცია ინტეგრალქვეშა გამოსახულებაში უნდა შედიოდეს როგორც მამრავლი.



ნახ. 2

შეიძლებოდა, რა თქმა უნდა, $\delta(x)$ ფუნქცია სულაც არ შემოგვეღო და გვეხელმძღვანელა სტილტეესის ინტეგრალებით, მაგრამ ამ შემთხვევაში საჭირო იქნებოდა ძალიან რთული გამოთვლების ჩატარება, იმ დროს, როცა $\delta(x)$ ფუნქციის საშუალებით გამოთვლები გაცილებით მარტივია.

$\delta(x)$ ფუნქციის განმარტებიდანვე ჩანს, რომ იგი ლუწი ფუნქციაა

$$\delta(-x)=\delta(x). \tag{11,6}$$

ასევე განმარტებიდანვე აშკარაა, რომ მას აქვს ფილტრაციის თვისება

$$\int f(x)\,\delta(x-a)\,dx=f(a). \tag{11,7}$$

მართლაც, რადგან $\delta(x-a)$ მხოლოდ მაშინაა ნულისაგან განსხვავებული, როცა $x=a$, შეგვიძლია ფუნქციის მნიშვნელობა ამ წერტილში ინტეგრალის ნიშნის გარეთ გავიტანოთ; დარჩენილი ინტეგრალი კი (11,5)-ის თანახმად ერთის ტოლია. კერძო შემთხვევაში, როცა $a=0$, (11,7) მოგვცემს

$$\int f(x)\,\delta(x)\,dx = f(0). \tag{11,7'}$$

სამი განზომილების შემთხვევაში გვაქვს ფორმულა

$$\delta(r) = \delta(x)\,\delta(y)\,\delta(z). \tag{11,8}$$

ვაჩვენოთ, ახლა, რომ

$$\lim_{k\to\infty} \frac{\sin kx}{\pi x} = \delta(x). \tag{11,9}$$

მართლაც, როცა $x=0$, ზღვარი გვაძლევს უსასრულობას, ხოლო როცა $x\neq 0$, ზღვარს საზოგადოდ მათემატიკურად აზრი არა აქვს. როცა $k\to\infty$, $\dfrac{\sin kx}{\pi x}$ ძალიან სწრაფად ცვალებადი ფუნქციაა, ან, როგორც ამბობენ, სწრაფად ოსცილირებადია, ამიტომ მისი საშუალო მნიშვნელობა x-ის ნებისმიერად მცირე ინტერვალში ნულის ტოლი იქნება. გარდა ამისა,

$$\frac{1}{\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\sin kx}{x}\,dx = \frac{1}{\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\sin t}{t}\,dt = 1. \tag{11,9'}$$

ამგვარად (11,9) სამართლიანია. ასევე მარტივად ვაჩვენებთ, რომ

$$\lim_{k\to\infty} \frac{\sin^2 kx}{\pi k x^2} = \delta(x). \tag{11,10}$$

განვიხილოთ ახლა შემდეგი გამოსახულება

$$\frac{1}{2\pi}\int_{-\varepsilon}^{+\varepsilon} e^{ikx}\,dk = \frac{\sin x\varepsilon}{\pi x}. \tag{11,10'}$$

თუ გადავალთ ზღვარზე, როცა $\varepsilon\to\infty$, თანახმად (11,9), გვექნება

$$\delta(x) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} e^{ikx}\,dk \tag{11,11}$$

ან

$$\delta(x-x') = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} e^{i(x-x')k}\,dk. \tag{11,11'}$$

როგორც ვხედავთ, ეს ფორმულაც სრულიად ანალოგიურია (11,3), ოღონდ წყვეტილი m, n ინდექსების ნაცვლად გვაქვს უწყვეტი x და x' პარამეტრები.

დავამტკიცოთ ახლა, რომ თუ $\alpha>0$, მაშინ სამართლიანია ფორმულა

$$\delta(\alpha x) = \frac{1}{\alpha}\,\delta(x). \tag{11,12}$$

თუ გამოვიყენებთ (11,11) გამოსახულებას, გვექნება

$$\delta(\alpha x) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} e^{ik\alpha x}\,dk. \tag{11,13}$$

ამ ინტეგრალში შემოვიღოთ ახალი ცვლადი $\alpha k=t$, მაშინ $dk=dt/\alpha$. რადგან $\alpha>0$ ინტეგრაციის საზღვრები იგივე დარჩება და, ამიტომ

$$\delta(\alpha x)=\frac{1}{2\pi\alpha}\int_{-\infty}^{+\infty}e^{itx}\,dt=\frac{1}{\alpha}\,\delta(x). \tag{11,14}$$

(11,11) გამოსახულებიდან გამოვყოთ ნამდვილი ნაწილი, მივიღებთ მნიშვნელოვან ფორმულას

$$\delta(x)=\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty}\cos kx\,dk. \tag{11,15}$$

სამგანზომილებიან შემთხვევაში (11,11) ასე გადაიწერება:

$$\delta(\mathrm{r})=\frac{1}{(2\pi)^3}\int_{-\infty}^{+\infty}e^{i\mathrm{kr}}\,d\mathrm{k}, \tag{11,16}$$

სადაც $d\mathrm{k}=dk_x dk_y dk_z$.

წინამდებარე კურსში დაგვჭირდება დირაკის $\delta(x)$ ფუნქციის ზოგიერთი სხვა თვისებაც, რომელთაც ქვემოთ მოვიტანთ და რომელთა დამტკიცება არ არის ძნელი ზემოთ მიღებული ფორმულების გამოყენებით. ეს თვისებებია:

$$x\delta(x)=0, \tag{11,17}$$

$$f(x)\,\delta(x-a)=f(a)\,\delta(x-a), \tag{11,18}$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\delta(x'-x)\,\delta(x''-x)\,dx=\delta(x'-x'') \tag{11,19}$$

$$\delta[\varphi(x)]=\sum_i\frac{\delta(x-x_i)}{\left|\left(\frac{d\varphi}{dx}\right)_{x=x_i}\right|} \tag{11,20}$$

სადაც $x=x_i$ არის $\varphi(x)=0$ განტოლების მარტივი ფესვი. კერძო შემთხვევაში გვექნება მნიშვნელოვანი ფორმულა

$$\delta(x^2-a^2)=\frac{1}{2|a|}\{\delta(x-a)+\delta(x+a)\}. \tag{11,21}$$

ადვილად ვაჩვენებთ, რომ $\delta(x)$ ფუნქციის წარმოებული აკმაყოფილებს პირობას

$$x\frac{d\delta(x)}{dx}=-\delta(x). \tag{11,22}$$

ამასთან, წარმოებული კენტი ფუნქციაა x-ისა, რამდენადაც $\delta(x)$ ფუნქცია ლუწია, ამდენად იგი აკმაყოფილებს პირობას

$$\int_0^a\delta(x)\,dx=\begin{cases}1/2, & \text{როცა } \alpha>0;\\ -1/2, & \text{როცა } \alpha<0.\end{cases} \tag{11,23}$$

ადვილია ჩვენება, რომ

$$\delta(\mathrm{r}-\mathrm{r}')=\frac{1}{rr'}\,\delta(r-r')\,\delta(\mathrm{n}-\mathrm{n}'), \tag{11,24}$$

სადაც $\mathbf{n}=\mathbf{r}/r'$, $\mathbf{n}'=\mathbf{r}'/r'$ ერთეულოვანი ვექტორებია $\mathbf{r}$ და $\mathbf{r}'$-ის გასწვრივ. რადგან $r\geqslant 0$, ამიტომ ასეთი დელტა ფუნქციის განხილვის დროს ინტეგრირება აიღება $r=0$ წერტილიდან.

თუ გავიხსენებთ, რომ სფერული ფუნქციები ჩაკეტილ სისტემას ადგენენ, მაშინ ჩვენ შეგვიძლია დავწეროთ

$$\sum_{l=0}^{\infty}\sum_{m=-l}^{+l} Y_{lm}^{*}(\overline{n})\,Y_{lm}(\overline{n'})=\delta(\mathbf{n}-\mathbf{n}'), \tag{11,25}$$

სადაც $Y_{lm}(\theta,\varphi)$ ფუნქციაში $\overline{n}$ არგუმენტი აღნიშნავს იმას, რომ იგი დამოკიდებულია $\mathbf{n}=\mathbf{r}/r$ ორტის z-ღერძთან შედგენილ θ კუთხეზე და შესაბამის φ-აზიმუტზე; მაშასადამე, დირაკის $\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}')$ ფუნქცია შეგვიძლია გამოვხატოთ შემდეგი მწკრივის სახით:

$$\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}')=\frac{\delta(r-r')}{rr'}\sum_{l=0}^{\infty}\sum_{m=-l}^{+l} Y_{lm}^{*}(\overline{n})\,Y_{lm}(\overline{n'}) \tag{11,26}$$

დელტა ფუნქციის ამ წარმოდგენას ხშირად იყენებენ გაფანტვის თეორიაში.

§ 12. საკუთარი ფუნქციების ორთო-ნორმირება

ახლა შევისწავლოთ საკუთარი ფუნქციების ნორმირებისა და ორთოგონალობის საკითხი. ჯერ განვიხილოთ დისკრეტული სპექტრის შემთხვევა, ე. ი. დავუშვათ, რომ L ერმიტული ოპერატორის საკუთარი ფუნქციებია ψ_1, $\psi_2,\ldots\psi_k$. დავმტკიცოთ, რომ ნებისმიერი ერმიტული ოპერატორის საკუთარი ფუნქციები ორთოგონალური და ნორმირებულია. ამისათვის ვიგულისხმოთ, რომ გადაგვარებას ადგილი არა აქვს და დავწეროთ ორი რომელიმე ψ_n და ψ_m ფუნქციისათვის საკუთარი ფუნქციებისა და საკუთარი მნიშვნელობების განტოლება:

$$\begin{aligned} L\psi_m&=\lambda_m\psi_m,\\ L\psi_n&=\lambda_n\psi_n. \end{aligned} \tag{12,1}$$

λ_m და λ_n საკუთარი მნიშვნელობებია შესაბამისად ψ_m და ψ_n-ისა. ავიღოთ პირველი განტოლების კომპლექსურად შეუღლებული და შევადგინოთ სხვაობა

$$\int \psi_m^{*}L\psi_n-\int \psi_n\,(L\psi_m)^{*}=(\lambda_n-\lambda_m)\int \psi_m^{*}\psi_n, \tag{12,1'}$$

თუ მოვახდენთ ინტეგრაციას და გავიხსენებთ L ოპერატორის ერმიტულობის პირობას, გვექნება

$$(\lambda_n-\lambda_m)\int \psi_m^{*}\psi_n\,d\mathbf{r}=0. \tag{12,2}$$

განვიხილოთ ორი შემთხვევა. როცა $n\neq m$, მაშინ, რადგან გადაგვარება არა გვაქვს, ე. ი. $\lambda_n\neq\lambda_m$, მივიღებთ

$$\int \psi_m^{*}(\mathbf{r})\,\psi_n(\mathbf{r})\,d\mathbf{r}=0 \tag{12,2'}$$

როცა $n=m$, მაშინ $\lambda_n-\lambda_m=0$. ამ შემთხვევაში ინტეგრალი შეგვიძლია ავიღოთ ნებისმიერი სიდიდის. ჩვენ მივიღებთ, რომ იგი ერთის ტოლია, ე. ი.

$$\langle\psi_m\,|\,\psi_m\rangle=\int \psi_m^{*}\psi_m\,d\mathbf{r}=\int |\,\psi_m\,|^2 d\mathbf{r}=1. \tag{12,2''}$$

ორთოგონალობის (12,2′) და ნორმირების (12,2″) პირობები ერთად ასე ჩაიწერება

$$\langle \psi_m | \psi_n \rangle = \int \psi_m^* \psi_n \, d\tau = \delta_{mn}, \tag{12,3}$$

სადაც δ_{mn} არის კრონეკერ-ვეიერშტრასის სიმბოლო. (12,3) პირობას საკუთარ ფუნქციათა ორთო-ნორმირების პირობას უწოდებენ. შევნიშნოთ, რომ ორთოგონალური ფუნქციები ყოველთვის წრფივად დამოუკიდებლები არიან. მართლაც, ფუნქციები რომ წრფივად დამოკიდებული ყოფილიყვნენ გვექნებოდა

$$\sum_{i=1}^{n} c_i \psi_i = c_1 \psi_1 + c_2 \psi_2 + \cdots + c_n \psi_n = 0, \tag{12,3′}$$

სადაც c_i მუდმივი კოეფიციენტებიდან ყველა არ არის ნულის ტოლი. თუ გავამრავლებთ ამ ტოლობას ψ_k^* და ავიღებთ ინტეგრალს, მივიღებთ

$$\sum c_i \int \psi_k^* \psi_i \, d\tau = \sum_{i=1}^{n} c_i \delta_{ik} = 0 \tag{12,4}$$

საიდანაც გვექნება, რომ ყველა $c_i = 0$. ეს კი იმას ნიშნავს, რომ ორთოგონალური ფუნქციების სისტემა წრფივად დამოუკიდებელია.

ახლა განვიხილოთ ორთო-ნორმირების საკითხი გადაგვარების შემთხვევაში. დავუშვათ, რომ ერთ საკუთარ მნიშვნელობას შეესაბამება n საკუთარი ფუნქცია $\psi_1, \psi_2, \ldots \psi_n$, ე. ი. ადგილი აქვს

$$\hat{L}\psi_1 = \lambda_k \psi_1, \quad \hat{L}\psi_2 = \lambda_k \psi_2 \ldots \hat{L}\psi_n = \lambda_k \psi_n \tag{12,5}$$

მაშინ აშკარაა, რომ $\psi_1, \psi_2, \ldots \psi_n$ ფუნქციებიდან შეგვიძლია შევადგინოთ უსასრულო რაოდენობის კომბინაციები, რომლებიც იგივე განტოლებას აკმაყოფილებს და ეკუთვნის იგივე λ საკუთარ მნიშვნელობას. მართლაც, თუ ავიღებთ

$$\Phi = \sum_{i=1}^{n} c_i \psi_i \tag{12,6}$$

და ვიმოქმედებთ მასზე L ოპერატორით, მივიღებთ

$$\hat{L} \sum_{i=1}^{n} c_i \psi_i = \sum_{i} c_i \hat{L} \psi_i = \lambda_k \sum c_i \psi_i, \tag{12,7}$$

ზოგადობის დაურღვეველად შეგვიძლია ვიგულისხმოთ, რომ $\psi_1, \psi_2, \ldots \psi_n$ წრფივად დამოუკიდებლები არიან. ვაჩვენოთ რომ გადაგვარებული საკუთარი ფუნქციებიდან შეგვიძლია შევადგინოთ ისეთი წრფივი კომბინაციები, რომლებიც ორთო-ნორმირებული იქნებიან. ამისათვის მოვახდინოთ ჯერ ψ_1 ფუნქციის ნორმირება. a იყოს ნორმირების კოეფიციენტი. მაშინ $a^2 \int \psi_1^* \psi_1 dx = 1$, საიდანაც $a = \dfrac{1}{\sqrt{\langle \psi_1 | \psi_1 \rangle}}$.

თუ შემოვიღებთ ახალ φ_1 ფუნქციას, რომელიც ასეა განმარტებული

$$\varphi_1 = \frac{\psi_1}{\sqrt{\langle \psi_1 | \psi_1 \rangle}}, \tag{12,8}$$

მაშინ იგი ერთზე ნორმირებული იქნება. ავიღოთ ახლა ნებისმიერი ორი ისეთი c_1 და c_2 რიცხვი, რომელიც ერთდროულად ნულის ტოლი არ არის და შევადგი-

ნოთ ისეთი ახალი ფუნქცია $\varphi_2' = c_1\varphi_1 + c_2\psi_2$, რომელიც ორთოგონალური იქნება φ_1-თან, ე. ი. რომ ადგილი ჰქონდეს ტოლობას

$$0 = \langle \varphi_1 \mid \varphi_2' \rangle = c_1' + c_2 \langle \varphi_1 \mid \psi_2 \rangle. \qquad (12,9)$$

ψ_1, ψ_2 და, მაშასადამე, φ_1 და ψ_2-ის წრფივად დამოუკიდებლობის ძალით φ_2' ფუნქცია იგივურად არ შეიძლება ნული იყოს. ადვილია იმის ჩვენება, რომ

$$\varphi_2 = \frac{\varphi_2'}{\sqrt{\langle \varphi_2' \mid \varphi_2' \rangle}} \qquad (12,10)$$

იქნება ნორმირებული ფუნქცია, რომელიც ამავე დროს ორთოგონალურია φ_1 ფუნქციასთან. შემდეგ შევდგინოთ $\varphi_3' = c_1^* \varphi_1 + c_2^* \varphi_2 + c_3^* \psi_3$ ფუნქცია, სადაც კოეფიციენტები c_1^*, c_2^*, c_3^*, რომლებიც ერთდროულად ნული არ არის, ისე შევარჩიოთ, რომ φ_3' ორთოგონალური იყოს φ_1 და φ_2-თან, ე. ი. ადგილი ჰქონდეს დამოკიდებულებებს:

$$\langle \varphi_1 \mid \varphi_3' \rangle = c_1^* + c_3^* \langle \varphi_1 \mid \psi_3 \rangle = 0 \quad \text{და} \quad \langle \varphi_2 \mid \varphi_3' \rangle = c_2^* + c_3^* \langle \varphi_2 \mid \psi_3 \rangle = 0 \qquad (12,11)$$

ψ_1, ψ_2, ψ_3 და მაშასადამე φ_1, φ_2, ψ_3 ფუნქციების წრფივად დამოუკიდებლობის ძალით φ_3' ფუნქცია არ შეიძლება იგივურად ნულის ტოლი იყოს. აქაც

$$\varphi_3 = \frac{\varphi_3'}{\sqrt{\langle \varphi_3' \mid \varphi_3' \rangle}} \qquad (12,12)$$

იქნება ნორმირებული ფუნქცია, ორთოგონალური φ_1 და φ_2-თან. შეგვიძლია ეს პროცესი გავაგრძელოთ მანამ, სანამ $\psi_1, \psi_2, \ldots \psi_n$ ფუნქციების ნაცვლად არ შემოვიყვანთ ისეთ ახალ $\varphi_1, \varphi_2, \ldots \varphi_n$ ფუნქციებს, რომლებიც ორთონორმირებული იქნებიან.

მოვახდინოთ ახლა უწყვეტი სპექტრის შესაბამისი ფუნქციების ნორმირება. უწყვეტი სპექტრის შემთხვევაში ტალღური ფუნქციების გადანომვრა ისე, როგორც ეს გვქონდა წყვეტილი სპექტრის შემთხვევაში, აღარ შეიძლება. თუ წყვეტილი სპექტრის შემთხვევაში გვქონდა, m და n ინდექსებზე დამოკიდებული ψ_m და ψ_n ფუნქციები, უწყვეტი სპექტრის შემთხვევაში ტალღური ფუნქციები დამოკიდებული არიან უწყვეტ λ და λ' პარამეტრზე (საკუთარ მნიშვნელობაზე), ე. ი.

$$\psi_\lambda(r) = \psi(r, \lambda) \quad \text{და} \quad \psi_{\lambda'}(r) = \psi(r, \lambda'). \qquad (12,13)$$

ჩვენ ვნახეთ, რომ უწყვეტი სპექტრი ფორმალურად ისეთივე ფორმულებით უნდა დავახასიათოთ, როგორიც გვაქვს წყვეტილი სპექტრის შემთხვევაში, ოღონდ წყვეტილი სპექტრის დამახასიათებელი δ_{mn} სიმბოლო უნდა შევცვალოთ დირაკის $\delta_{\lambda\lambda'} = \delta(\lambda - \lambda')$ ფუნქციით. ამიტომ (12,3) ფორმულის ანალოგიით უწყვეტი სპექტრისათვის გვექნება შემდეგი ორთო-ნორმირების პირობა:

$$\langle \psi_\lambda \mid \psi_{\lambda'} \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(r, \lambda)\, \psi(r', \lambda')\, d\tau = \delta(\lambda - \lambda'), \qquad (12,14)$$

როცა ადგილი აქვს ამ პირობას, მაშინ ამბობენ, რომ $\psi(r, \lambda)$ ფუნქცია ნორმირებულია დირაკის $\delta(\lambda - \lambda')$ ფუნქციაზე, ანდა ნორმირება მოხდენილია λ საკუთარი მნიშვნელობის სკალაზე. როგორც ვხედავთ, (12,14) ინტეგრალი, როცა $\lambda = \lambda'$, განშლადია. ეს მდგომარეობა დამახასიათებელია უწყვეტი სპექტრისათვის[1].

[1] შეიძლება ჩვენება, რომ თუ უწყვეტი სპექტრის ფუნქციების ნაცვლად ავიღებთ მათ პაკეტებს $\Psi = \int_{\lambda}^{\lambda+\Delta\lambda} \psi(x, \lambda)\, d\lambda$, მაშინ ამ პაკეტების ნორმირება და ორთოგონალობა ზუსტად ისეთი იქნება, რაც დისკრეტული სპექტრის ფუნქციებისათვის.

მოვახდინოთ მეათე პარაგრაფში განხილული მაგალითის შესაბამისი საკუთარი ფუნქციების ნორმირება. ჯერ განვიხილოთ დისკრეტული სპექტრი. შესაბამის ფუნქციას აქვს (10,14) სახე. (12,2′′) პირობის თანახმად გვექნება

$$C^2\int_0^a \sin^2\left(\frac{n\pi}{a}x\right)dx=1, \tag{12,15}$$

საიდანაც C-სთვის მივიღებთ მნიშვნელობას $C=(2/a)^{1/2}$. ამგვარად, განხილულ მაგალითში ნორმირებულ დისკრეტული სპექტრის ფუნქციებს ექნებათ გამოსახულება

$$\psi_n(x)=\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right); \tag{12,16}$$

აშკარაა, რომ ეს ფუნქციები ორთოგონალურებიცაა.

ახლა მოვახდინოთ უწყვეტი სპექტრის (10,9) ფუნქციების ნორმირება. ეს ფუნქცია ჩავწეროთ შემდეგი სახით:

$$\psi_k(x)=Ae^{ikx} \tag{12,17}$$

და ნორმირება მოვახდინოთ დირაკის $\delta(k-k')$ ფუნქციაზე. გვექნება

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\psi_k^*(x)\,\psi_{k'}(x)\,dx=\delta(k-k'). \tag{12,18}$$

შევიტანოთ (12,17) ფუნქციის მნიშვნელობა; მივიღებთ

$$A^2\int_{-\infty}^{+\infty}e^{i(k'-k)x}\,dx=\delta(k-k'). \tag{12,19}$$

თუ ამ გამოსახულებას შევადარებთ დირაკის დელტა ფუნქციის (11,11′) წარმოდგენას, დავინახავთ, რომ $A=(2\pi)^{-1/2}$. მაშასადამე,

$$\psi_k(x)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{ikx}. \tag{12,20}$$

საინტერესოა აღვნიშნოთ, რომ უწყვეტი სპექტრის განხილული ფუნქციის ნორმა განშლადია $\langle\psi_k|\psi_k\rangle=\infty$. ამიტომაც არ შეიძლება მათი ნორმირება (12,2′′) პირობით.

§ 13. ნებისმიერი ფუნქციის გაშლა საკუთარი ფუნქციების მიხედვით

განვიხილოთ ახლა ერთი მნიშვნელოვანი საკითხი ფურიეს მწკრივთა თეორიიდან. ვთქვათ, გვაქვს ერმიტული ოპერატორი L და მისი ორთო-ნორმირებული სპექტრი; განვიხილოთ ჯერ დისკრეტული სპექტრის შემთხვევა. ვთქვათ, რომ $f(\mathbf{r})$ არის რაიმე ნებისმიერი კვადრატულად ინტეგრებადი ფუნქცია და შევეცადოთ იგი გავშალოთ L ოპერატორის საკუთარი ფუნქციების მიხედვით. დავუშვათ, რომ ეს გაშლა მოვახერხეთ და მას აქვს შემდეგი სახე:

$$f(\mathbf{r})=\sum_{m=0}^{n}a_m\psi_m(\mathbf{r})+R_n(\mathbf{r}). \tag{13,1}$$

$R_n(\mathbf{r})$ არის ნაშთი. ჩვენი მიზანია გამოვარკვიოთ, თუ როდის გვექნება ისეთი გაშლა, როცა ნაშთი ნულია და $f(\mathbf{r})$ საკმაებით დახასიათდება (13,1)-ის პირველი

წევრით. ამისათვის საჭიროა a_m კოეფიციენტების სათანადოდ შერჩევა. ცდომილებად არჩევენ შემდეგ სიდიდეს:

$$\rho_n = \int | R_n(r)|^2 dr = \int \left| f(r) - \sum_{m=0}^{n} a_m \psi_m(r) \right|^2 dr. \qquad (13,2)$$

საკუთარ ψ_m ფუნქციათა ორთო-ნორმირების გამო

$$\rho_n = \int | f(r)|^2 dr - \sum_m a_m^* \int f(r)\psi_m^*(r) dr -$$

$$- \sum_m a_m \int f^*(r)\psi_m(r) dr + \sum_m a_m^* a_m. \qquad (13,3)$$

ჩვენი მიზნისათვის საჭიროა ამ გამოსახულებას ჰქონდეს მინიმუმი a_m და a_m^* კოეფიციენტების მიმართ. მინიმუმის $\frac{\partial \rho_n}{\partial a_m^*} = 0$ პირობიდან გვექნება

$$- \int f(r)\psi_m^*(r) dr + a_m = 0, \qquad (13,3')$$

საიდანაც

$$a_m = \int f(r)\psi_m^*(r) dr. \qquad (13,4)$$

ანალოგიურად

$$a_m^* = \int f^*(r)\psi_m(r) dr. \qquad (13,5)$$

კოეფიციენტების ეს ექსტრემალური მნიშვნელობანი შევიტანოთ (13,3)-ში, მივიღებთ:

$$\rho_n = \int | f(r)|^2 dr - \sum_{m=0}^{n} | a_m|^2. \qquad (13,6)$$

რადგან ვანმარტების თანახმად $\rho_n \geqslant 0$, ამიტომ უკანასკნელი ტოლობა მოგვცემს

$$\sum_{m=0}^{n} | a_m|^2 \leqslant \int | f(r)|^2 dr. \qquad (13,7)$$

ამ უტოლობას ბესელის უტოლობას უწოდებენ. თუ $f(r)$ ნებისმიერი ფუნქციისათვის

$$\lim_{n \to \infty} \rho_n = 0 \qquad (13,7')$$

ან, რაც იგივეა,

$$\sum_{m=0}^{\infty} | a_m|^2 = \int | f(r)|^2 dr. \qquad (13,7'')$$

მაშინ ψ_m საკუთარ ფუნქციათა ერთობლიობას ეწოდება ჩაკეტილი. ასეთ შემთხვევაში არ შეიძლება მოინახოს ისეთი სხვა ახალი ფუნქცია, რომელიც ორთოგონალური იქნებოდა ყველა ψ_m ფუნქციასთან. მაშასადამე, ჩაკეტილი ფუნქციებისათვის ნაშთი $R_n = 0$ და ნებისმიერი $f(r)$ ფუნქციისათვის გვექნება შემდეგი გაშლა:

$$f(r) = \sum_{m=0}^{\infty} a_m \psi_m(r), \qquad (13,8)$$

$$a_m = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_m^*(\mathbf{r}) f(\mathbf{r})\, d\mathbf{r}; \tag{13,9}$$

a_m-ს ფურიეს კოეფიციენტი ეწოდება.

როცა ოპერატორის სპექტრი უწყვეტია, ე. ი. როცა ფუნქციებს აქვთ $\psi = \psi(\mathbf{r}, \lambda)$ სახე, მაშინ ნებისმიერი ფუნქცია სრულიად ანალოგიურად შეგვიძლია გავშალოთ ფურიეს ინტეგრალად

$$f(\mathbf{r}) = \int a(\lambda)\, \psi(\mathbf{r}, \lambda)\, d\lambda \tag{13,10}$$

სადაც

$$a(\lambda) = \int f(\mathbf{r}) \psi^*(\mathbf{r}, \lambda) d\mathbf{r}. \tag{13,11}$$

$f(\mathbf{r})$ შევიტანოთ (13,10) ფორმულიდან (13,11) ფორმულაში. მივიღებთ

$$a(\lambda) = \int a(\lambda') \left\{ \int \psi^*(\mathbf{r}, \lambda) \psi(\mathbf{r}, \lambda') d\mathbf{r} \right\} d\lambda'. \tag{13,12}$$

იგივეობა რომ მივიღოთ, საჭიროა უწყვეტი სპექტრის ფორმულები აკმაყოფილებდნენ პირობას

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(\mathbf{r}, \lambda)\, \psi(\mathbf{r}, \lambda')\, d\mathbf{r} = \delta(\lambda - \lambda'); \tag{13,13}$$

ეს კი უწყვეტი სპექტრის ფუნქციების ნორმირების პირობაა.

ნებისმიერი ფუნქციის გაშლას ერმიტული ოპერატორის საკუთარი ფუნქციების მიხედვით დიდი გამოყენება აქვს კვანტურ მექანიკაში.

ახლა ტალღური ფუნქციების სრულობის პირობა ჩავწეროთ სხვა სახითაც. ამ მიზნით შევიტანოთ (13,9) ტოლობით განსაზღვრული ფურიეს კოეფიციენტი (13,8) გაშლაში; გვექნება

$$f(\mathbf{r}) = \sum_{m=0}^{\infty} \left(\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_m^*(\mathbf{r}')\, f(\mathbf{r}')\, d\mathbf{r}' \right) \psi_m(\mathbf{r}). \tag{13,14}$$

შევცვალოთ ჯამისა და ინტეგრაციის რიგი; მივიღებთ

$$f(\mathbf{r}) = \int_{-\infty}^{+\infty} d\mathbf{r}' f(\mathbf{r}') \left(\sum_{m=0}^{\infty} \psi_m^*(\mathbf{r}')\, \psi_m(\mathbf{r}) \right), \tag{13,15}$$

საიდანაც ნათელია, რომ

$$\sum_{m=0}^{\infty} \psi_m^*(\mathbf{r}')\, \psi_m(\mathbf{r}) = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \tag{13,16}$$

ამ ფორმულას უწოდებენ დისკრეტული სპექტრის $\psi_m(\mathbf{r})$ ფუნქციების სრულობის პირობას[1]. თუ (13,11) კოეფიციენტს შევიტანთ (13,10) გაშლაში, სრულიად ანალოგიურად მივიღებთ $\psi(\mathbf{r}, \lambda)$ უწყვეტი სპექტრის სრულობის შემდეგ პირობას:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_\lambda^*(\mathbf{r})\, \psi_\lambda(\mathbf{r}')\, d\lambda = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \tag{13,17}$$

[1] ამ ფორმულის კერძო შემთხვევას წარმოადგენს, მაგალითად, (11,26) გამოსახულება.

კვანტურ მექანიკაში ჩვენ გვხვდება ისეთი ოპერატორებიც, რომელთაც აქვთ როგორც დისკრეტული, ისე უწყვეტი სპექტრი; ამასთან, უწყვეტი სპექტრის ფუნქციები ორთოგონალური არიან დისკრეტული სპექტრის ფუნქციებისა. აღნიშნულ შემთხვევაში ჩაკეტილ სისტემას ცალკე დისკრეტული და ცალკე უწყვეტი სპექტრის ფუნქციები აღარ ადგენენ. სრულ სისტემას ამ დროს ადგენენ ორივე სპექტრის ფუნქციები. ამიტომ ნებისმიერი ფუნქცია შეგვიძლია გაეშალოთ ამ სრულ სისტემად; გვექნება

$$f(\mathbf{r}) = \sum_{m=0}^{\infty} a_m \psi_m(\mathbf{r}) + \int_{-\infty}^{+\infty} a(\lambda)\,\psi(\mathbf{r},\ \lambda)\,d\lambda, \tag{13,18}$$

სადაც ჯამი აიღება მთელი დისკრეტული სპექტრის მიხედვით, ინტეგრალი—მთელი უწყვეტი სპექტრით. საკუთარ ფუნქციათა ჩაკეტილობის პირობას კი ექნება სახე

$$\sum_m \psi_m^*(\mathbf{r}')\psi_m(\mathbf{r}) + \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_\lambda^*(\mathbf{r})\,\psi_\lambda(\mathbf{r}')d\lambda = \delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}'). \tag{13,19}$$

ამ გამოსახულებას ხშირად ფორმალურად ასეც წერენ ხოლმე

$$\left(\sum + \int\right)\psi_\lambda^*(\mathbf{r})\psi_\lambda(\mathbf{r}')d\lambda = \delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}'), \tag{13,20}$$

სადაც იგულისხმება, რომ λ იღებს როგორც დისკრეტულ, ისე უწყვეტ მნიშვნელობებს.

§(14.) კომუტატურ ოპერატორთა თვისებები

კომუტატურ ოპერატორებს დიდი მნიშვნელობა აქვს კვანტურ მექანიკაში; კერძოდ დიდი გამოყენება აქვს შემდეგ თეორემას:

კომუტატურ ოპერატორებს აქვთ საერთო საკუთარი ფუნქცია. ვთქვათ, მოცემული გვაქვს L და M ოპერატორი, რომლებიც აკმაყოფილებენ პირობას $ML = LM$. დავწეროთ L ოპერატორის საკუთარი ფუნქციებისა და საკუთარი მნიშვნელობების განტოლება

$$L\psi = \lambda\psi. \tag{14,1}$$

ამ ტოლობაზე მარცხნიდან ვიმოქმედოთ M ოპერატორით; გვექნება

$$ML\psi = \lambda M\psi. \tag{14,2}$$

კომუტატურობის ძალით ეს ტოლობა ასეც შეგვიძლია გადავწეროთ:

$$L(M\psi) = \lambda(M\psi), \tag{14,3}$$

თუ აღვნიშნავთ $M\psi = \psi_1$, მივიღებთ

$$L\psi_1 = \lambda\psi_1. \tag{14,4}$$

ვიგულისხმოთ, რომ (14,1) განტოლებას აქვს ერთადერთი ამოხსნა[1]. ამისათვის საჭიროა, რომ ψ და ψ_1 ერთმანეთისაგან მხოლოდ მუდმივით განსხვავდებოდნენ, ე. ი.

$$\psi_1 = \mu\psi \tag{14,5}$$

ან, თუ გავიხსენებთ ψ_1 აღნიშვნას, მაშინ

$$M\psi = \mu\psi. \tag{14,6}$$

[1] აღნიშნულ თეორემას გადაგვარების შემთხვევაში, საზოგადოდ, ადგილი არა აქვს.

ამრიგად ψ ფუნქცია აკმაყოფილებს M ოპერატორის საკუთარი ფუნქციებისა და საკუთარი მნიშვნელობების განტოლებასაც და ამით თეორემა დამტკიცებულია.

ვაჩვენოთ. რომ ადგილი აქვს შებრუნებულ თეორემასაც. გარკვეულობის მიზნით განვიხილოთ დისკრეტული სპექტრი და დავუშვათ, რომ ψ_n არის საერთო საკუთარი ფუნქცია ორი L და M ოპერატორის, ე. ი. ადგილი აქვს ტოლობებს:

$$L\psi_n = \lambda_n \psi_n, \tag{14,7}$$

$$M\psi_n = \mu_n \psi_n. \tag{14,8}$$

ვაჩვენოთ, რომ L და M ოპერატორები კომუტატური არიან. ამისათვის პირველ ტოლობაზე მარცხნიდან ვიმოქმედოთ M ოპერატორით, მეორეზე კი— L-ით. მივიღებთ:

$$ML\psi_n = \lambda_n M\psi_n = \lambda_n \mu_n \psi_n,$$

$$LM\psi_n = \mu_n L\psi_n = \mu_n \lambda_n \psi_n.$$

თუ პირველს გამოვაკლებთ მეორეს, გვექნება

$$(ML - LM)\,\psi_n = 0. \tag{14,9}$$

გავშალოთ ნებისმიერი $\varphi(x)$ ფუნქცია L და M ოპერატორის საერთო საკუთარი ψ_n ფუნქციების ფურიეს მწკრივად

$$\varphi(x) = \sum a_n \psi_n(x). \tag{14,10}$$

რადგან (14,9) ტოლობა დაცულია ყველა $\psi_n(x)$ ფუნქციებისათვის. იგი დაცული იქნება ნებისმიერი $\varphi(x)$ ფუნქციისათვისაც, საიდანაც დავასკვნით, რომ

$$ML = LM. \tag{14,11}$$

ბოლოს მივიღებდით ოპერატორებს უწყვეტი სპექტრი რომ ჰქონოდა. აღვნიშნოთ, რომ იგივე თეორემებს ადგილი აქვთ ოპერატორთა ნებისმიერი რიცხვის შემთხვევაშიც. სახელდობრ, იმისათვის, რომ რამოდენიმე ოპერატორს ჰქონდეს საერთო საკუთარი ფუნქცია, საჭიროა ყველა ეს ოპერატორი ერთმანეთთან კომუტატური იყოს.

ამგვარად, ჩვენ დავამტკიცეთ შემდეგი: თუ ოპერატორები კომუტატურნი არიან, მათ საერთო საკუთარი ფუნქცია აქვთ და, პირიქით, თუ ოპერატორებს აქვთ საერთო საკუთარი ფუნქცია, მაშინ ისინი ერთმანეთთან კომუტატურნი არიან.

დავამთავრეთ რა ოპერატორთა ზოგიერთი თვისების შესწავლა, გავაკეთოთ შემდეგი შენიშვნები:

1. კვანტურ მექანიკას საქმე აქვს წრფივ ერმიტულ ოპერატორებთან, ამიტომ ხშირად ერმიტულობასა და წრფივობას აღარ მივუთითებთ. ოპერატორებზე მოქმედებისას შეცდომა რომ არ დაუშვათ, საჭიროა ოპერატორს მარჯვნივ მივუწეროთ ის ფუნქცია, რომელზედაც იგი მოქმედებს. როცა გვაქვს ოპერატორთა ნამრავლი, ყოველთვის უნდა დავიცვათ ოპერატორთა რიგი; ჯერ მოქმედებს ψ-თან მარცხნიდან უველაზე ახლოს მდგომი ოპერატორი, შემდეგ მარცხნიდან მეორე უახლოესი ოპერატორი და ა. შ. წინააღმდეგ შემთხვევაში, როცა ოპერატორები კომუტატური არ არიან, დავუშვებთ შეცდომას. $\left(\text{გავიხსენოთ } \frac{\partial}{\partial x} x\psi \neq x \frac{\partial \psi}{\partial x} \text{ მაგალითი}\right)$.

2. ოპერატორთა ჯამის ხარისხში უნდა გავიგოთ ამ ჯამის მოქმედება თანმიმდევრობით იმდენჯერ, რამდენიც არის ხარისხის მაჩვენებელი, მაგალითად, ორი ოპერატორის კვადრატის შემთხვევაში

$$(L+M)^2\psi=(L+M)(L+M)\psi=(L^2+LM+ML+M^2)\psi \qquad (14,12)$$

და არა

$$(L+M)^2\psi=(L^2+2LM+M^2)\psi \qquad (14,13)$$

ეს უკანასკნელი ტოლობა სამართლიანია მხოლოდ მაშინ, როცა L და M ოპერატორები კომუტატურებია, ე. ი. როცა $LM=ML$.

3. როდესაც მოცემული გვაქვს L ოპერატორის რაიმე ფუნქცია $f(L)$, მაშინ ასეთი რთული ოპერატორის მოქმედება უნდა განვიხილოთ როგორც $f(L)$ ოპერატორის მწკრივად გაშლა, ე. ი.

$$f(L)=f(0)+L\left(\frac{\partial f}{\partial L}\right)_0+\frac{L^2}{2!}\left(\frac{\partial^2 f}{\partial L^2}\right)_0+\cdots \qquad (14,14)$$

ასე, მაგალითად, $f(L)=\exp(L)$ ოპერატორში იგულისხმება შემდეგი მწკრივი

$$e^L=1+L+\frac{L^2}{2}+\ldots=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{L^n}{n!} \qquad (14,15)$$

4. ოპერატორსა და მის შესაბამის საკუთარ მნიშვნელობას ზოგჯერ ერთიდაიგივე ასოთი აღნიშნავენ. ოღონდ ოპერატორს თავზე „ქუდს" — $\hat{}$ —გავუკეთებთ. ასე მაგალითად, იმპულსის ოპერატორს აღნიშნავენ $\hat{p}$-თი, ხოლო მის საკუთარ მნიშვნელობას — p-თი, და ა. შ. თუ ოპერატორი ამავე დროს ვექტორიც არის, მაშინ იგი უფრო მუქი ასოთი იქნება აღნიშნული. მაგალითად, $\hat{\mathbf{p}}$ არის იმპულსის ვექტოროპერატორი, ხოლო $\mathbf{p}$ იქნება მისი საკუთარი მნიშვნელობა.

§ 15. ბრა- და კეტ-ვექტორების თვისებები

ჩვენ ადრე შემოვიღეთ დირაკის ბრა- და კეტ-ვექტორები. ახლა შევისწავლოთ მათი ზოგიერთი მნიშვნელოვანი თვისება. ჯერ ერთი, ცხადია, რომ $|\psi\rangle$ ვექტორზე წრფივი ოპერატორის მოქმედებით კვლავ კეტ-ვექტორს მივიღებთ

$$\hat{A}\,|\,\psi\rangle=|\Phi\rangle; \qquad (15,1)$$

ამიტომ ჩვენ შეგვიძლია დავწეროთ რაიმე $\hat{A}$ ოპერატორის საკუთარი ვექტორებისა და საკუთარი მნიშვნელობების განტოლება

$$\hat{A}\,|\,\psi\rangle=a\,|\,\psi\rangle. \qquad (15,2)$$

ამ განტოლებას შეიძლება ჰქონდეს როგორც დისკრეტული, ისე უწყვეტი სპექტრი. დისკრეტული სპექტრის შემთხვევაში საკუთარი ვექტორები შეგვიძლია აღვნიშნოთ $|\,\psi_n\rangle$-ით. როცა $\hat{A}$ ერმიტული ოპერატორია, მაშინ ეს ვექტორები ორთო-ნორმირებული იქნებიან პირობით

$$\langle\psi_n\,|\,\psi_m\rangle=\delta_{mn}. \qquad (15,3)$$

უწყვეტი სპექტრის შემთხვევაში საკუთარი ვექტორები შეგვიძლია აღვნიშნოთ $|\,\psi_a\rangle$-ით, მაშინ მათი ორთო-ნორმირება შეგვიძლია მოვახდინოთ დირაკის დელტა ფუნქციაზე

$$\langle\psi_{a'}\,|\,\psi_a\rangle=\delta(a'-a). \qquad (15,4)$$

აქვე მივუთითოთ, რომ ხშირად წერის გამარტივების მიზნით დირაკის ვექტორებს მხოლოდ მათი საკუთარი მნიშვნელობებით გამოხატავენ; ასე მაგალითად, ნაცვლად $|\psi_m\rangle$-ისა წერენ $|m\rangle$, ხოლო ნაცვლად $|\psi_a\rangle$-სი წერენ $|a\rangle$.

დირაკის ვექტორებს აქვთ ორი შესანიშნავი თვისება. ერთი, რომ ბრა და კეტ-ვექტორების ნამრავლი წარმოადგენს წრფივ ოპერატორს, ე. ი.

$$\hat{B} = |\psi\rangle\langle\varphi| \tag{15,5}$$

წრფივი ოპერატორია. დამტკიცების მიზნით ეს გამოსახულება გავამრავლოთ მარჯვნიდან რაიმე. $|\chi\rangle$ კეტ-ვექტორზე; გვექნება

$$\hat{B}|\chi\rangle = |\psi\rangle\langle\varphi|\chi\rangle. \tag{15,6}$$

$\langle\varphi|\chi\rangle$ სკალარული ნამრავლი მუდმივი რიცხვია, თუ მას აღვნიშნავთ b-თი, მაშინ

$$\hat{B}|\chi\rangle = b|\psi\rangle, \tag{15,7}$$

რომელიც გვიჩვენებს, რომ კეტ-ვექტორზე რაიმე $\hat{B}$ ოპერატორის მოქმედებით მიიღება კვლავ კეტ-ვექტორი.

მეორე თვისების თანახმად ბრა- და კეტ-ვექტორებისაგან შეგვიძლია შევადგინოთ ერთეულოვანი ოპერატორი; კერძოდ, დისკრეტული სპექტრის შემთხვევაში, შეგვიძლია დავწეროთ

$$\sum_{n=1}^{\infty} |\psi_n\rangle\langle\psi_n| = 1, \tag{15,8}$$

სადაც იგულისხმება, რომ $\{\psi_n\rangle$ ვექტორები ადგენენ სრულ სისტემას. (15,8) ტოლობის დამტკიცების მიზნით გავამრავლოთ იგი მარცხნიდან $\langle\psi_m|$-ზე, ხოლო მარჯვნიდან $|\psi_{m'}\rangle$-ვექტორზე, გვექნება

$$\sum_{n=1}^{\infty} \langle\psi_m|\psi_n\rangle\langle\psi_n|\psi_{m'}\rangle = \langle\psi_m|\psi_{m'}\rangle. \tag{15,9}$$

დირაკის ვექტორების ორთო-ნორმირების ძალით

$$\sum_n \delta_{mn}\delta_{nm'} = \delta_{mm'}, \tag{15,10}$$

საიდანაც ფილტრაციის თვისების გათვალისწინებით მივიღებთ იგივეობას. უწყვეტი სპექტრის შემთხვევაში ჩვენ შეგვიძლია შევადგინოთ შემდეგი ერთეულოვანი ოპერატორი:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} da\,|\psi_a\rangle\langle\psi_a| = 1, \tag{15,11}$$

რომელიც ასევე მარტივად დამტკიცდება.

როცა ოპერატორს აქვს როგორც დისკრეტული, ისე უწყვეტი სპექტრი, მაშინ სრულ სისტემას ადგენენ დისკრეტული და უწყვეტი სპექტრის ვექტორები, ამიტომ ერთეულოვან ოპერატორს ექნება სახე:

$$\sum_m |\psi_m\rangle\langle\psi_m| + \int_{-\infty}^{+\infty} da\,|\psi_a\rangle\langle\psi_a| = 1 \tag{15,12}$$

ბრა- და კეტ-ვექტორების (15,8) და (15,11) თვისებები დიდ შესაძლებლობებს იძლევა ამ ვექტორებზე ფორმალური ოპერაციების ჩატარებისა, რამდენადაც ოპერატორებს ან ვექტორებს შორის ყოველთვის შეგვიძლია ჩავსვათ ამ ტოლობებით განსაზღვრული ერთიანები; მაგალითად, $\langle \chi \mid \varphi \rangle$ სკალარული ნამრავლი ასე შეგვიძლია წარმოვადგინოთ:

$$\langle \chi \mid \varphi \rangle = \sum_n \langle \chi \mid \psi_n \rangle \langle \psi_n \mid \varphi \rangle. \tag{15,13}$$

იბადება კითხვა, როგორ გადავიდეთ რაიმე ოპერატორის შესაბამისი დირაკის ვექტორებიდან საკუთარ ფუნქციებზე? ამასთან, საკუთარი ფუნქციები შეიძლება დამოკიდებული იყოს სხვადასხვა ცვლადზე: კოორდინატებზე, იმპულსებზე და სხვ. კოორდინატების შერჩევას კვანტურ მექანიკაში წარმოდგენის შერჩევას უწოდებენ. როცა $\psi = \psi(\mathbf{r})$, მაშინ ამბობენ, რომ არჩეული გვაქვს კოორდინატული, ან „x-წარმოდგენა“, როცა $\psi = \psi(\mathbf{p})$, მაშინ ტალღური ფუნქცია მოცემულია იმპულსურ ან, „p-წარმოდგენაში“ და ა. შ. ჯერ განვიხილოთ კოორდინატული წარმოდგენა; ამ მიზნით დავწეროთ რადიუსვექტორის (კოორდინატების) საკუთარი ვექტორებისა და საკუთარი მნიშვნელობების განტოლება

$$\hat{\mathbf{r}} \mid \psi_{\mathbf{r}} \rangle = \mathbf{r} \mid \psi_{\mathbf{r}} \rangle, \tag{15,14}$$

აქ $\mid \psi_{\mathbf{r}} \rangle \equiv \mid \mathbf{r} \rangle$ რადიუსვექტორის საკუთარი კეტ-ვექტორია. (15,14) განტოლებას უწყვეტი სპექტრი ექნება; თუ მას მარცხნიდან გავამრავლებთ $\langle \psi_{\mathbf{r}'} \mid \equiv \langle \mathbf{r}' \mid$ ბრა-ვექტორზე გვექნება

$$\langle \psi_{\mathbf{r}'} \mid \hat{\mathbf{r}} \mid \psi_{\mathbf{r}} \rangle = \mathbf{r} \langle \psi_{\mathbf{r}'} \mid \psi_{\mathbf{r}} \rangle. \tag{15,15}$$

უწყვეტი ფუნქციების ორთო-ნორმირების პირობით

$$\langle \psi_{\mathbf{r}'} \mid \psi_{\mathbf{r}} \rangle \equiv \langle \mathbf{r}' \mid \mathbf{r} \rangle = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'), \tag{15,16}$$

ამიტომ კოორდინატულ წარმოდგენაში

$$\langle \mathbf{r}' \mid \hat{\mathbf{r}} \mid \mathbf{r} \rangle = \mathbf{r} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \tag{15,17}$$

საინტერესოა აღვნიშნოთ, რომ ნებისმიერ $V(\mathbf{r})$ ოპერატორს კოორდინატულ წარმოდგენაში ექნება სახე

$$\langle \mathbf{r} \mid \hat{V} \mid \mathbf{r}' \rangle = V(\mathbf{r}) \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \tag{15,18}$$

ამ ტოლობის დამტკიცება ადვილია, თუ გამოვალთ განტოლებიდან

$$\hat{V}(\mathbf{r}) \mid \psi \rangle = V(\mathbf{r}) \mid \psi \rangle, \tag{15,19}$$

საიდანაც

$$\int \langle \mathbf{r} \mid \hat{V} \mid \mathbf{r}' \rangle \langle \mathbf{r}' \mid \psi \rangle d\mathbf{r}' = V(\mathbf{r}) \langle \mathbf{r} \mid \psi \rangle, \tag{15,20}$$

რომელსაც აკმაყოფილებს (15,18) გამოსახულება.

როგორც ვხედავთ, საკუთარი $\mid \mathbf{r} \rangle$ ვექტორები ადგენენ სრულ სისტემას, ამიტომ შეგვიძლია შემოვიღოთ მეტად მნიშვნელოვანი ერთეულოვანი ოპერატორი

$$\int_{-\infty}^{+\infty} d\mathbf{r} \mid \mathbf{r} \rangle \langle \mathbf{r} \mid = 1, \tag{15,21}$$

რომელსაც კოორდინატული ბაზისის ერთეულოვანი ოპერატორი ეუწოდოთ. (15,21) ფორმულის სამართლიანობაში ადვილად დავრწმუნდებით მარცხნიდან

$\langle r' \mid$ მარჯვნიდან კი $\mid r\rangle$- ვექტორზე გამრავლებით და ორთო-ნორმირების (15,16) პირობის გათვალისწინებით.

ახლა ჩავსვათ (15,21) ოპერატორი $\langle \psi \mid \varphi\rangle$ სკალარულ ნამრავლში; გვექნება

$$\langle \psi \mid \varphi\rangle = \int dr \langle \psi \mid r\rangle \langle r \mid \varphi\rangle. \tag{15,22}$$

თუ ამ გამოსახულებას შევადარებთ სკალარული ნამრავლის (9,14) განმარტებას, დავინახავთ, რომ

$$\langle r \mid \psi\rangle = \psi(r); \quad \langle \psi \mid r\rangle = \psi^*(r), \tag{15,23}$$

მაშასადამე, თუ ჩვენ გვაქვს რაიმე $\hat{A}$ ოპერატორის საკუთარი $\mid \psi\rangle$ კეტ-ვექტორი და მას სკალარულად გავამრავლებთ კოორდინატული ბაზისის $\langle r \mid$ ვექტორზე, მივიღებთ ამავე ოპერატორის კოორდინატული წარმოდგენის $\psi(r)$ ფუნქციას. როგორც ვხედავთ, გვაქვს სრული ანალოგია ჩვეულებრივ ვექტორებთან. თუ e_i არის i-ური ღერძის ორტი, მაშინ A ვექტორის i-ური მდგენელის მისაღებად საჭიროა A სკალარულად გავამრავლოთ e_i-ზე, ე. ი. $A_i = (A, e_i)$. დირაკის ვექტორის საშუალებით ანალოგიურად შეგვიძლია განვსაზღვროთ საკუთარი ფუნქცია სხვა ცვლადებში. ვთქვათ, მაგალითად, ჩვენ გვსურს დირაკის $\mid \psi\rangle$ ვექტორიდან მივიღოთ საკუთარი $\psi(p)$ ფუნქცია იმპულსურ წარმოდგენაში. ამ მიზნით უნდა შემოვიღოთ იმპულსური წარმოდგენის ბაზისის $\langle p \mid$ ვექტორი, რომლის სკალარული ნამრავლი $\mid \psi\rangle$-სთან მოგვცემს იმპულსური წარმოდგენის საკუთარ $\psi(p)$ ფუნქციას. ცხადია ამასთან, რომ

$$\langle p \mid p'\rangle = \delta(p - p'), \tag{15,24}$$

ხოლო იმპულსური ბაზისის ერთეულოვან ოპერატორს ექნება სახე

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dp \mid p\rangle \langle p \mid = 1. \tag{15,25}$$

ასევე ნათელია, რომ იმპულსურ წარმოდგენაში

$$\langle p' \mid \hat{p} \mid p\rangle = p\,\delta(p - p'). \tag{15,26}$$

სრულიად ანალოგიურად ვიპოვით საკუთარ ფუნქციებს ნებისმიერ სხვა წარმოდგენაში.

დირაკის ფუნქციის ფურიე-ინტეგრალად წარმოდგენის ფორმულის თანახმად ნათელია, რომ (15,24) ასე შეგვიძლია დავწეროთ:

$$\langle p \mid p'\rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{i}{\hbar} pr} e^{\frac{i}{\hbar} p'r} dr, \tag{15,27}$$

საიდანაც, რამდენადაც ადგილი აქვს იგივეობას

$$\langle p \mid p'\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \langle p \mid r\rangle \langle r \mid p'\rangle dr, \tag{15,28}$$

გვექნება

$$\langle r \mid p\rangle = \psi_p(r) = (2\pi\hbar)^{-3/2} e^{\frac{i}{\hbar} pr} \tag{15,29}$$

რომელიც წარმოადგენს ბრტყელ ტალღას. მაშასადამე, კოორდინატული და იმპულსური წარმოდგენების ბაზისური ვექტორების სკალარული ნამრავლი ბრტყელ

ტალღას გამოხატავს. ნათელია, რომ $\langle \mathbf{r} \mid \mathbf{p} \rangle$ სკალარულ ნამრავლში $\mathbf{r}$ და $\mathbf{p}$ სიდიდეები სრულიად სიმეტრიულად შედიან. $\mathbf{r}$-ს განვიხილავთ ცვლადად, $\mathbf{p}$-ს კი საკუთარ მნიშვნელობად, თუ პირიქით ტალღური ფუნქცია მხოლოდ კომპლექსურად შეუღლებულით იცვლება $\langle \mathbf{p} \mid \mathbf{r} \rangle = \langle \mathbf{r} \mid \mathbf{p} \rangle^*$.

ადვილად ჩაიწერება შრედინგერის განტოლება დირაკის აბსტრაქტულ ვექტორულ სივრცეში. მაგალითად, სტაციონარულ შემთხვევაში გვექნება

$$\hat{H} \mid \psi \rangle = E \mid \psi \rangle. \tag{15,30}$$

შრედინგერის განტოლების ასე ჩაწერა მეტად მოსახერხებელია სხვადასხვა წარმოდგენაზე გადასვლის დროს. კოორდინატულ წარმოდგენაში (15,30)-დან ჩვენ მივიღებთ შრედინგერის განტოლების ცნობილ სახეს. მართლაც, (15,30) გავამრავლოთ კოორდინატული წარმოდგენის ბაზისის $\langle \mathbf{r} \mid$ ვექტორზე და თანაც გამოვიყენოთ (15,21) ოპერატორი; გვექნება:

$$\int \langle \mathbf{r} \mid \hat{H} \mid \mathbf{r}' \rangle \langle \mathbf{r}' \mid \psi \rangle \, d\mathbf{r}' = E \langle \mathbf{r} \mid \psi \rangle. \tag{15,31}$$

კოორდინატულ წარმოდგენაში (15,18) ფორმულის თანახმად

$$\langle \mathbf{r} \mid \hat{H} \mid \mathbf{r}' \rangle = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\mathbf{r}) \right] \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'), \tag{15,32}$$

ამიტომ მივიღებთ

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi(\mathbf{r}) + V(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}) = E \psi(\mathbf{r}), \tag{15,33}$$

რომელიც შრედინგერის ჩვენთვის ცნობილი სტაციონარული მდგომარეობების განტოლებას ემთხვევა.

ასევე მარტივია დირაკის აბსტრაქტულ სივრცეში არასტაციონარული მდგომარეობების შრედინგერის განტოლების ჩაწერა. სახელდობრ, გვექნება

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \mid \psi(t) \rangle = \hat{H} \mid \psi(t) \rangle. \tag{15,34}$$

$\mid \psi(t) \rangle$ შრედინგერის დროზე დამოკიდებული კეტ-ვექტორია. ცხადია, რომ $\langle \mathbf{r} \mid \psi(t) \rangle \equiv \psi(\mathbf{r}, t)$ არასტაციონარული მდგომარეობის ტალღურ ფუნქციას წარმოადგენს.

§ 16. პუასონის ფრჩხილები

პუასონის კლასიკური ფრჩხილები. გავიხსენოთ ჯერ პუასონის კლასიკური ფრჩხილების განმარტება. ვთქვათ, მოცემული გვაქვს განზოგადოებული კოორდინატებისა და იმპულსების რაიმე ფუნქცია $F = F(q_1, q_2 \cdots q_n; p_1, p_2 \cdots p_n; t)$. დავწეროთ მისი სრული წარმოებული დროით

$$\frac{dF}{dt} = \frac{\partial F}{\partial t} + \sum_{k=1}^{n} \left(\frac{\partial F}{\partial q_k} \frac{dq_k}{dt} + \frac{\partial F}{\partial p_k} \frac{dp_k}{dt} \right). \tag{16,1}$$

თუ შევიტანთ $\dot{q}_k$ და $\dot{p}_k$ მნიშვნელობებს ჰამილტონის განტოლებებიდან

$$\dot{q}_k = \frac{\partial H}{\partial p_k}, \quad \dot{p}_k = -\frac{\partial H}{\partial q_k}, \tag{16,2}$$

მივიღებთ

$$\frac{dF}{dt}=\frac{\partial F}{\partial t}+[H,\ F], \tag{16,2'}$$

სადაც

$$[H,\ F]=\sum_{k=1}^{n}\left(\frac{\partial H}{\partial p_k}\frac{\partial F}{\partial q_k}-\frac{\partial H}{\partial q_k}\frac{\partial F}{\partial p_k}\right) \tag{16,2''}$$

წარმოადგენს პუასონის კლასიკურ ფრჩხილებს (შემდგომში ვექტორულ ნამრავლს განსხვავების მიზნით $[\mathbf{A}\times\mathbf{B}]$ აღვნიშნავთ). (16,2'') ფრჩხილები შეიძლება განვაზოგადოთ და ორი ფუნქციის კლასიკური პუასონის ფრჩხილები ასე განვმარტოთ:

$$[f,\ g]=\sum_{k=1}^{n}\left(\frac{\partial f}{\partial p_k}\frac{\partial g}{\partial q_k}-\frac{\partial f}{\partial q_k}\frac{\partial g}{\partial p_k}\right); \tag{16,3}$$

ასეთნაირად განმარტებულ პუასონის ფრჩხილებს აქვს შემდგი ძირითადი თვისებები:

$$[f,\ g]=-[g,\ f], \tag{16,4}$$

$$[f,\ c]=0,\quad c=\text{const}, \tag{16,5}$$

$$[f_1\pm f_2,\ g]=[f_1,g]\pm[f_2,\ g], \tag{16,6}$$

$$[f,\ cg]=[cf,\ g]=c\,[f,\ g], \tag{16,7}$$

$$[f_1f_2,\ g]=f_1\,[f_2,\ g]+f_2\,[f_1,\ g], \tag{16,8}$$

$$[f,\ g_1g_2]=g_1\,[f,\ g_2]+g_2\,[f,\ g_1], \tag{16,9}$$

$$[p_k,\ q_l]=\delta_{kl}, \tag{16,10}$$

$$[q_k,\ q_l]=[p_k,\ p_l]=0, \tag{16,11}$$

$$[p_i,\ f]=\frac{\partial f}{\partial q_i}$$

პუასონის კვანტური ფრჩხილები. ახლა ვნახოთ, რა სახე აქვს პუასონის კვანტურ ფრჩხილებს. პუასონის კვანტური ფრჩხილების გამოხატულება პირველად ნაპოვნი იყო დირაკის მიერ. მან დაუშვა, რომ პუასონის კვანტურ ფრჩხილებს ისეთივე მნიშვნელობა აქვს, რაც კლასიკურს, ოღონდ პუასონის კვანტური ფრჩხილები აიღება ოპერატორებიდან და ისინი მოქმედებენ ψ ფუნქციაზე, რის გამოც საჭიროა დავიცვათ ოპერატორთა თანმიმდევრობის წესი. ამგვარად პუასონის კვანტურ ფრჩხილებს ექნებათ შემდეგი თვისებები:

$$[\hat{A},\ \hat{B}]=-[\hat{B},\ \hat{A}], \tag{16,12}$$

$$[\hat{A},\ c]=0,\ c=\text{const}, \tag{16,13}$$

$$[\hat{A}_1\pm\hat{A}_2,\ \hat{B}]=[\hat{A}_1,\ \hat{B}]\pm[\hat{A}_2,\ \hat{B}], \tag{16,14}$$

$$[\hat{A},\ c\hat{B}]=[c\hat{A},\ \hat{B}]=c\,[\hat{A},\ \hat{B}]. \tag{16,15}$$

$$[\hat{A}_1\hat{A}_2,\ \hat{B}]=\hat{A}_1\,[\hat{A}_2,\ \hat{B}]+[\hat{A}_1,\ \hat{B}]\,\hat{A}_2, \tag{16,16}$$

$$[\hat{A},\ \hat{B}_1\hat{B}_2]=\hat{B}_1\,[\hat{A},\ \hat{B}_2]+[\hat{A},\ \hat{B}_1]\,\hat{B}_2, \tag{16,17}$$

$$[\hat{p}_k,\ \hat{q}_l]=\delta_{lk}, \tag{16,18}$$

$$[\hat{q}_k,\ \hat{q}_l]=[\hat{p}_k,\ \hat{p}_l]=0,\quad [\hat{p}_l,\ f]=\frac{\partial f}{\partial q_l} \tag{16,19}$$

გამოვიყენოთ (16,18) და (16,19) თვისებები პუასონის კვანტური ფრჩხილების გამოსახულების დასადგენად. პირველ ტოლობაში ავიღოთ $\hat{B}=\hat{B}_1\hat{B}_2$, მეორეში კი $\hat{A}=\hat{A}_1\hat{A}_2$ და მარჯვენა მხარეში თითოეული პუასონის ფრჩხილებისათვის გამოვიყენოთ იგივე თვისებები. გვექნება

$$[\hat{A}_1\hat{A}_2,\ \hat{B}_1\hat{B}_2]=\hat{A}_1[\hat{A}_2,\ \hat{B}_1\hat{B}_2]+[\hat{A}_1,\ \hat{B}_1\hat{B}_2]\hat{A}_2=\cdot$$

$$=\hat{A}_1\hat{B}_1[\hat{A}_2,\ \hat{B}_2]+\hat{A}_1[\hat{A}_2,\ \hat{B}_1]\hat{B}_2+\hat{B}_1[\hat{A}_1,\ \hat{B}_2]\hat{A}_2+[\hat{A}_1,\ \hat{B}_1]\hat{B}_2\hat{A}_2,$$

ანალოგიურად მეორე განტოლება მოგვცემს

$$[\hat{A}_1\hat{A}_2,\ \hat{B}_1\hat{B}_2]=\hat{B}_1\hat{A}_1[\hat{A}_2,\ \hat{B}_2]+\hat{B}_1[\hat{A}_1,\ \hat{B}_2]\hat{A}_2+$$

$$+\hat{A}_1[\hat{A}_2,\ \hat{B}_1]\hat{B}_2+[\hat{A}_1,\ \hat{B}_1]\hat{A}_2\hat{B}_2.$$

ამ ორი უკანასკნელი ტოლობის შედარება გვაძლევს

$$\hat{A}_1\hat{B}_1[\hat{A}_2,\ \hat{B}_2]+[\hat{A}_1,\ \hat{B}_1]\hat{B}_2\hat{A}_2=\hat{B}_1\hat{A}_1[\hat{A}_2,\ \hat{B}_2]+[\hat{A}_1,\ \hat{B}_1]\hat{A}_2\hat{B}_2,$$

საიდანაც, დაჯგუფებით, მივიღებთ:

$$(\hat{A}_1\hat{B}_1-\hat{B}_1\hat{A}_1)[\hat{A}_2,\ \hat{B}_2]=[\hat{A}_1,\ \hat{B}_1](\hat{A}_2\hat{B}_2-\hat{B}_2\hat{A}_2).$$

ეს ტოლობა რომ იგივურად სამართლიანი იყოს ნებისმიერი ოპერატორისათვის, საჭიროა პუასონის კვანტურ ფრჩხილებს შემდეგი სახე ჰქონდეს:

$$[\hat{A},\ \hat{B}]=c(\hat{A}\hat{B}-\hat{B}\hat{A}), \tag{16,20}$$

სადაც c არის ყველა ოპერატორთან კომუტატური ოპერატორი, ე. ი. მუდმივი. რადგან შემდგომში პუასონის კვანტურ ფრჩხილებს ფიზიკური სიდიდეების შესაბამისი ოპერატორებიდან, ე. ი. ერმიტული ოპერატორებიდან ავიღებთ, ამიტომ უნდა მოვითხოვოთ, რომ პუასონის ფრჩხილებიც ერმიტული ოპერატორი იყოს:

$$[\hat{A},\ \hat{B}]^+=[\hat{A},\ \hat{B}]. \tag{16,21}$$

ადვილად ვაჩვენებთ, რომ თუ ეს პირობა შესრულებულია, როცა $A^+=A$, $B^+=B$, მაშინ c არის წმინდა წარმოსახვითი სიდიდე. მართლაც, რადგან $c^+=c^*$, ამიტომ გვექნება

$$[\hat{A},\ \hat{B}]^+=c^+(B^+A^+-A^+B^+)=-c^*(\hat{A}\hat{B}-\hat{B}\hat{A}). \tag{16,22}$$

მეორეს მხრივ, რადგან ადგილი აქვს (16,20) და (16,21) ტოლობებს, ამიტომ $c^*=-c$, ე. ი. მართლაც c წმინდა წარმოსახვითი რიცხვია. რათა შემდგომში პუასონის კვანტური ფრჩხილებიდან განსაზღვრული ფიზიკური სიდიდეები სწორი განზომილებისა გამოვიდნენ და ცდის მონაცემებს ემთხვეოდნენ, საჭიროა ავიღოთ

$$c=\frac{i}{\hbar}, \tag{16,23}$$

სადაც $\hbar$ პლანკის მუდმივია. ამგვარად, პუასონის კვანტურ ფრჩხილებს ექნება სახე

$$[\hat{A},\ \hat{B}]=\frac{i}{\hbar}(\hat{A}\hat{B}-\hat{B}\hat{A}). \tag{16,24}$$

ადვილად შეიძლება შემოწმდეს, რომ ასეთნაირად განმარტებულ კვანტურ ფრჩხილებს აქვს ყველა ის თვისება, რომელიც ზემოთ მოცემულია (16,12)—(16,19) ფორმულებით.

როცა პუასონის ფრჩხილები ნულის ტოლია,

$$[\hat{A},\ \hat{B}]=\frac{i}{\hbar}(\hat{A}\hat{B}-\hat{B}\hat{A})=0, \tag{16,25}$$

მაშინ $\hat{A}\hat{B}=\hat{B}\hat{A}$, ე. ი. ოპერატორები კომუტატური არიან.

$$[A, B]=\hat{A}\hat{B}-\hat{B}\hat{A}=\frac{\hbar}{i}[\hat{A},\ \hat{B}] \tag{16,26}$$

სიდიდეს კომუტატურს უწოდებენ.

განვიხილოთ ასეთი ფრჩხილები $\left[\frac{\partial}{\partial x}, f(x)\right]$. განმარტების თანახმად, გვექნება:

$$\left[\frac{\partial}{\partial x}, f(x)\right]\psi(x)=\frac{i}{\hbar}\left\{\frac{\partial}{\partial x}(f\psi)-f\frac{\partial\psi}{\partial x}\right\}, \tag{16,27}$$

საიდანაც, გაწარმოების ოპერაციის ჩატარების შემდეგ, მივიღებთ

$$\left[\frac{\partial}{\partial x}, f(x)\right]=\frac{i}{\hbar}\frac{\partial f}{\partial x} \quad \text{ან} \quad \left[\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x},\ f(x)\right]=\frac{\partial f}{\partial x}. \tag{16,28}$$

კერძო შემთხვევაში, როცა $f(x)=x$, გვექნება, რომ

$$\left[\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}, x\right]=1, \tag{16,29}$$

ე. ი. ასეთი პუასონის ფრჩხილები ერთზე გამრავლების ოპერატორის ტოლფასია. რადგან პუასონის კვანტური ფრჩხილები ოპერატორებიდან აიღება, ბუნებრივია (16,2′) მოძრაობის განტოლება ოპერატორებისათვის შევდეგნაირად განზოგადდეს:

$$\frac{d\hat{A}}{dt}=\frac{\partial\hat{A}}{\partial t}+[\hat{H}, \hat{A}], \tag{16,30}$$

სადაც $\hat{H}$ წარმოადგენს ჰამილტონის ოპერატორს. ამ გამოსახულებას უწოდებენ ოპერატორის დროითი წარმოებულის ფორმულას ან მოძრაობის კვანტურ განტოლებას. ამ ფორმულით განსაზღვრულ დროით წარმოებულს გაწარმოების ყველა თვისება გააჩნია, ოღონდ, რადგან საქმე გვაქვს ოპერატორებთან, ყოველთვის უნდა დავიცვათ ოპერატორთა რიგი. ვიპოვოთ, მაგალითად, $\frac{d}{dt}(\hat{L}\hat{M})$ წ.რმოებული. (16,30) ფორმულის თანახმად გვექნება

$$\frac{d}{dt}(\hat{L}\hat{M})=\frac{\partial\hat{L}}{\partial t}\hat{M}+\hat{L}\frac{\partial\hat{M}}{\partial t}+\hat{L}[\hat{H}, \hat{M}]+[\hat{H}, \hat{L}]\hat{M}, \tag{16,31}$$

ან დაჯგუფებით მივიღებთ

$$\frac{d}{dt}(\hat{L}\hat{M}) = \left\{\frac{\partial \hat{L}}{\partial t} + [\hat{H}, \hat{L}]\right\}\hat{M} + \hat{L}\left\{\frac{\partial \hat{M}}{\partial t} + [\hat{H}, \hat{M}]\right\}, \qquad (16,32)$$

საიდანაც საბოლოოდ შეგვიძლია დავწეროთ

$$\frac{d}{dt}(\hat{L}\hat{M}) = \frac{d\hat{L}}{dt}\hat{M} + \hat{L}\frac{d\hat{M}}{dt}. \qquad (16,33)$$

ასევე ნათელია, რომ ოპერატორთა ჯამის წარმოებული ცალის წარმოებულთა ჯამს და ა. შ.

სავარჯიშო მაგალითები

1 ვიმოქმედოთ $\hat{L} = \left(\frac{\partial}{\partial x} + x\right)^2$ ოპერატორით რაიმე ψ ფუნქციაზე.

2. ვიმოქმედოთ $\hat{M} = \left(\frac{\partial}{\partial x} + A\right)^2$ ოპერატორით რაიმე ψ ფუნქციაზე. $A = \text{const}$.

3. ვიმოქმედოთ $\hat{N} = \left(\frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial y}\right)^2$ ოპერატორით რაიმე ψ ფუნქციაზე. გამოვარკვიოთ რატომაა, რომ მეორე და მესამე მაგალითის შემთხვევაში შეგვიძლია ოპერატორის როგორც ორი წევრის ჯამის კვადრატის წარმოდგენა, პირველ შემთხვევაში კი არა.

4. თუ $\hat{A}$ და $\hat{B}$ ოპერატორებია, იქნება თუ არა ერთმანეთის ტოლი ორი ოპერატორი $\exp(\hat{A} + \hat{B})$ და $\exp(\hat{B} + \hat{A})$?

5. თუ მოცემულია, რომ $\hat{L}\psi = \lambda\psi$, მაშინ ვაჩვენოთ, რომ $\hat{L}^n\psi = \lambda^n\psi$ (n-მთელი რიცხვია $n = 1, 2, 3, \ldots$).

6. თუ მოცემულია $\hat{L}\psi = \lambda\psi$, ვაჩვენოთ, რომ $\hat{L}^{-1}\psi = \lambda^{-1}\psi$.

7. რის ტოლი იქნება $\hat{B} = \exp(\hat{A})$ ოპერატორის საკუთარი მნიშვნელობა, თუ $\hat{A}$ ოპერატორის საკუთარი მნიშვნელობა a-სია?

8. ვაჩვენოთ, რომ თუ ნებისმიერ $\hat{A}$ ოპერატორს აქვს შებრუნებული, მაშინ ეგი ერთადერთია.

9. ვაჩვენოთ, რომ პუასონის ფრჩხილი

$$\left[x, (\cos^2\alpha)x\frac{d}{dx} + \sin^2\alpha\frac{d}{dx}x\right],$$

სადაც $\alpha = \text{const}$, დამოკიდებული არ არის α-ზე.

10. იგივე ვაჩვენოთ პუასონის შემდეგი ფრჩხილისათვის

$$\left[\frac{d}{dx}, (\cos^2\alpha)\,x\frac{d}{dx} + (\sin^2\alpha)\frac{d}{dx}x\right].$$

11. ვიპოვოთ პუასონის $\left[x\frac{d}{dx} + ax^2, \sin ax\frac{d}{dx}x + bx\right]$ ფრჩხილის გამოსახულება (a და b მუდმივებია).

12. ვაჩვენოთ, რომ $\hat{L} = x\frac{\partial}{\partial x}$ და $\hat{M} = \frac{\partial}{\partial x}x$ ოპერატორები ერთმანეთთან კომუტატორია.

13. დავამტკიცოთ, რომ პუასონის ფრჩხილები $-i\hbar[(ap), r] = a$, სადაც a მუდმივი ვექტორია.

14. დავამტკიცოთ, რომ ადგილი აქვს ფორმულას

$$e^{\lambda\hat{A}}\hat{B}e^{-\lambda\hat{A}} = \hat{B} + \lambda\frac{\hbar}{i}[\hat{A}, \hat{B}] + \frac{\lambda^2}{2!}\left(\frac{\hbar}{i}\right)^2[\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]] + \ldots +.$$

თუ $\hat{M} \equiv e^{-\lambda \hat{A}}\ \hat{B} e^{-\lambda \hat{A}}$, მაშინ

$$\hat{M} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\lambda^n}{n!} \left(\frac{d^n \hat{M}}{d\lambda^n} \right)_{\lambda=0}$$

ვიპოვოთ წარმოებულები. ცხადია, რომ

$$\frac{d\hat{M}}{d\lambda} = e^{\lambda \hat{A}}\ \hat{A}\ \hat{B} e^{-\lambda \hat{A}} - e^{\lambda \hat{A}} \hat{B}\ \hat{A} e^{-\lambda \hat{A}} = e^{\lambda \hat{A}}\ (\hat{A}\ \hat{B} - \hat{B}\ \hat{A}) e^{-\lambda \hat{A}} .$$

ან, თუ გავიხსენებთ პუასონის ფრჩხილების განმარტებას, მივიღებთ

$$\frac{d\hat{M}}{dt} = \frac{\hbar}{i}\ e^{\lambda \hat{A}}\ [\hat{A},\ \hat{B}]\ e^{-\lambda \hat{A}} .$$

სრულიად ანალოგიურად ამ გამოსახულების გაწარმოებით გვექნება

$$\frac{d^2 \hat{M}}{dt^2} = \left(\frac{\hbar}{i} \right)^2 e^{\lambda \hat{A}}\ [\hat{A}\ [\hat{A},\ \hat{B}]]\ e^{-\lambda \hat{A}}$$

და ა. შ. წარმოებულების შეტანით $\hat{M}$-ის მწკრივად გაშლაში მივიღებთ დასამტკიცებელ ტოლობას.

თავი III

მატრიცული აღრიცხვის ელემენტები

ამ თავში ჩვენ შევისწავლით მატრიცული აღრიცხვის ძირითად ელემენტებს, რამდენადაც კვანტურ მექანიკაში ოპერატორებთან ერთად მატრიცებიც გამოიყენება. ამასთან აღსანიშნავია, რომ ოპერატორსა და მატრიცას შორის განსხვავება არ არსებობს, ეს არის ერთი და იგივე სიდიდის ორი სხვადასხვა წარმოდგენა. მაგრამ სანამ ეს გაირკვეოდა, ეგონათ, რომ კვანტურ მექანიკას ორი ერთმანეთისაგან განსხვავებული მეთოდი ჰქონდა: ოპერატორული და მატრიცული. გარკვეულ პერიოდში ეს ორი მეთოდი ერთმანეთისაგან დამოუკიდებლად ვითარდებოდა. ოპერატორული მეთოდით სარგებლობდა შრედინგერი, მატრიცული მეთოდი კი, პირველად რამდენადმე ადრე, შემოიღო ჰაიზერბერგმა. შრედინგერის მექანიკას ტალღურ მექანიკას უწოდებდნენ, ჰაიზენბერგისას კი — მატრიცულს. შემდგომში შრედინგერმა და ეკარტმა იპოვეს კავშირი ამ ორ მეთოდს შორის და ეს გაერთიანებული მეთოდი დაედო საფუძვლად თანამედროვე კვანტურ მექანიკას.

§ 17. ოპერატორის სახე სხვადასხვა წარმოდგენაში

დავუშვათ გვაქვს წრფივი ოპერატორი $\hat{A}$, რომელიც შეიცავს კოორდინატებზე ჩასატარებელ ოპერაციებს. ასეთ შემთხვევაში ამბობენ, რომ ოპერატორი განსაზღვრულია კოორდინატულ წარმოდგენაში. ხშირად საჭიროა იგივე ოპერატორის სახის მოძებნა სხვა რომელიმე წარმოდგენაში, მაგალითად: იმპულსურში, ენერგეტულში და სხვა.

ვთქვათ, $\hat{A}$ — ოპერატორი, რომლის სახე მოცემულია კოორდინატულ წარმოდგენაში, გვსურს გამოვხატოთ რაიმე $\hat{B}$ ოპერატორის შესაბამისი საკუთარი b მნიშვნელობების წარმოდგენაში. გარკვეულობის მიზნით ვიგულისხმოთ, რომ $\hat{B}$ ოპერატორის სპექტრი დისკრეტულია, მაშინ

$$\hat{B}\psi_n(\mathbf{r}) = b_n\psi_n(\mathbf{r}). \tag{17,1}$$

ამ განტოლების ამონახსნების საშუალებით შევადგინოთ შემდეგი გამოსახულება:

$$\langle \psi_m | \hat{A} | \psi_n \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_m^*(\mathbf{r})\, \hat{A}\psi_n(\mathbf{r})\, d\mathbf{r}. \tag{17,2}$$

მივიღებთ გარკვეულ რიცხვებს, რომელთა ერთობლიობას უწოდებენ მატრიცას. თვით $\langle \psi_m | \hat{A} | \psi_n \rangle$-ს, რომელიც შეგვიძლია ასეც აღვნიშნოთ

$$A_{mn} = \langle m \mid A \mid n \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_m^*(\mathbf{r})\, \hat{A}\psi_n(\mathbf{r})\, d\mathbf{r} \tag{17,3}$$

მატრიცულ ელემენტს უწოდებენ; ამასთან $m, n = 1, 2, \ldots \infty$.

განხილულ შემთხვევაში ამბობენ, რომ A_{mn} მატრიცა განსაზღვრულია $\hat{B}$ ოპერატორის $\{\psi_n\}$ საკუთარი ფუნქციების წარმოდგენაში. ამ $\{\psi_n\}$ საკუთარ ფუნქციებს წარმოდგენის ბაზისს უწოდებენ. ცხადია, რომ ერთი და იგივე ოპერატორიდან სხვადასხვა წარმოდგენის ბაზისის არჩევით სხვადასხვა მატრიცას მივიღებთ.

A_{mn} რიცხვების ერთობლიობა შეგვიძლია წარმოვიდგინოთ შემდეგი კვადრატული ცხრილის სახით:

$$A \equiv \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & A_{1\infty} \\ A_{21} & A_{22} \cdots & A_{2\infty} \\ & \vdots & \\ A_{\infty 1} & A_{\infty 2} \cdots & A_{\infty\infty} \end{pmatrix}, \tag{17,4}$$

რომელსაც მატრიცას უწოდებენ. m ინდექსი მიუთითებს სტრიქონს, n კი — სვეტს. აშკარაა, რომ ჩვენს შემთხვევაში m და n ერთი და იგივე ფარგლებში იცვლება, ამიტომ მატრიცა კვადრატული იქნება, ე. ი. მას სვეტებისა და სტრიქონების ტოლი რიცხვი ექნება.

როცა მატრიცის წარმოდგენის ბაზისი უწყვეტი სპექტრის ფუნქციებია $\{\psi(\mathbf{r}, a)\}$, მაშინ მატრიცულ ელემენტს ექნება შემდეგი სახე:

$$\langle a' \mid A \mid a \rangle \equiv A_{a'a} = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(\mathbf{r}, a')\, \hat{A}\psi(\mathbf{r}, a)\, d\mathbf{r}. \tag{17,5}$$

შემდეგ პარაგრაფებში განხილულია მატრიცათა ძირითადი თვისებები.

§ 18. მატრიცათა ზოგადი თვისებები

სვეტების (ან სტრიქონების) რიცხვი განსაზღვრავს კვადრატული მატრიცის რანგს. (17,4) მატრიცის რანგი უსასრულობის ტოლია. ჩვენ შემდგომში საქმე გვექნება სხვადასხვა რანგის მატრიცებთან.

მატრიცულ ელემენტებს, რომელთათვისაც $m = n$, უწოდებენ დიაგონალურ ელემენტებს. ისეთ მატრიცას, რომელშიაც ნულისაგან განსხვავებულია მხოლოდ A_{mm} ელემენტები, უწოდებენ დიაგონალურ მატრიცას, ე. ი.

$$A = \begin{pmatrix} A_{11} & 0 & 0 & 0\ldots \\ 0 & A_{22} & 0 & 0\ldots \\ 0 & 0 & A_{33} & 0\ldots \\ \cdot & & & \end{pmatrix}. \tag{18,1}$$

დიაგონალურ ელემენტებს ეწოდება მატრიცის საკუთარი მნიშვნელობები, დიაგონალური ელემენტების ჯამს $A_{11} + A_{22} + A_{33} + \cdots + A_{\infty\infty}$ უწოდებენ მატრიცის კვალს და აღნიშნავენ ასე[1]

$$Sp(A) = \sum_{i=1}^{\infty} A_{ii}. \tag{18,2}$$

[1] იკითხება ასე „შპური A-სი".

დიაგონალურ მატრიცას წარმოადგენს კრონეკერ-ვეიერშტრასის მატრიცა, რომლის მატრიცული ელემენტები შეგვიძლია განვიხილოთ როგორც ერთეულოვანი ოპერატორის შესაბამისი მატრიცული ელემენტები

$$\delta_{mn} = \int \psi_m^*(\mathbf{r}) \psi_n(\mathbf{r})\, d\mathbf{r} \tag{18,3}$$

ან, მატრიცის სახით,

$$\delta = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 1 & 0 & 0 & \\ 0 & 0 & 1 & & \\ . & & & . & \end{pmatrix}. \tag{18,3'}$$

აშკარაა, რომ ერთეულოვანი (18,3′) მატრიცა ნებისმიერ წარმოდგენაში ერთეულოვანია. ნათელია აგრეთვე, რომ ნებისმიერი დიაგონალური მატრიცა δ_{mn}-ის საშუალებით ასე შეგვიძლია წარმოვიდგინოთ:

$$A_{mn} = A_n \delta_{mn}. \tag{18,4}$$

ვთქვათ, მოცემული გვაქვს რაიმე L მატრიცა. მის კომპლექსურად შეუღლებულს უწოდებენ ისეთ მატრიცას, რომელიც მიიღება, თუ ყველა L_{mn} ელემენტს შევცვლით მისი კომპლექსურად შეუღლებულით, ე. ი. L_{mn}^*-ით. მაგალითად, მეორე რანგის მატრიცის შემთხვევაში

$$\begin{pmatrix} L_{11} & L_{12} \\ L_{21} & L_{22} \end{pmatrix}^* = \begin{pmatrix} L_{11}^* & L_{12}^* \\ L_{21}^* & L_{22}^* \end{pmatrix}. \tag{18,5}$$

ტრანსპონირებულს უწოდებენ ისეთ მატრიცას, რომელსაც მიიღება L მატრიციდან ყველა სვეტის სათანადო სტრიქონებით შეცვლისას. აშკარაა, ტრანსპონირებული მატრიცის ელემენტი მიიღება, თუ L_{mn} ელემენტში m-ს შევცვლით n-ით. ტრანსპონირებულ მატრიცას თავზე უკეთებენ ~ ნიშანს (ტილდა). მაგალითად, მეორე რანგის მატრიცის შემთხვევაში

$$\tilde{L} = \begin{pmatrix} L_{11} & L_{21} \\ L_{12} & L_{22} \end{pmatrix}. \tag{18,6}$$

L-ის ერმიტულად შეუღლებულ L^+ მატრიცას უწოდებენ ისეთ მატრიცას, რომლის მისაღებად საჭიროა სვეტები შევცვალოთ სტრიქონებით და გადავიდეთ კომპლექსურად შეუღლებულზე, ე. ი. რომლის მატრიცული ელემენტებია L_{nm}^*.

მაგალითად, თუ L მეორე რანგის მატრიცაა, მაშინ

$$L^+ = \begin{pmatrix} L_{11}^* & L_{21}^* \\ L_{12}^* & L_{22}^* \end{pmatrix}. \tag{18,7'}$$

როცა $L^+ = L$, მაშინ მატრიცას თვითშეუღლებული ანდა ერმიტული ეწოდება. ერმიტულია, მაგალითად, მატრიცა

$$L = \begin{pmatrix} a & -i \\ i & b \end{pmatrix}, \tag{18,8}$$

სადაც a და b ნამდვილი რიცხვებია. მართლაც

$$L^+ = \begin{pmatrix} a & i \\ -i & b \end{pmatrix}^* = \begin{pmatrix} a & -i \\ i & b \end{pmatrix}. \tag{18,8'}$$

თვითშეუღლებულობის პირობა მატრიცული ელემენტებისათვის ასე დაიწერება

$$L_{mn} = L_{nm}^*. \tag{18,9}$$

ახლა ვაჩვენოთ, რომ როცა $\hat{L}$ ოპერატორი ერმიტულია, ე. ი. $\hat{L}^+=\hat{L}$, მაშინ მისი შესაბამისი მატრიცაც ერმიტული იქნება. მართლაც, ავიღოთ

$$L_{mn}=\langle\psi_m\,|\,\hat{L}\psi_n\rangle \quad \text{და} \quad L^*_{nm}=\langle\psi_n\,|\,\hat{L}\psi_m\rangle^*=\langle\hat{L}\psi_m\,|\,\psi_n\rangle. \tag{18,9'}$$

ცხადია, რომ $\hat{L}$ ოპერატორის ერმიტულობის გამო (გავიხსენოთ ფორმულა (9,27)) გვექნება

$$L_{mn}-L^*_{nm}=\langle\psi_m\,|\,\hat{L}\psi_n\rangle-\langle\hat{L}\psi_m\,|\,\psi_n\rangle=0,$$

ე. ი. $L_{mn}=L^*_{nm}$, რის დამტკიცებაც გვინდოდა.

ხშირად შეიძლება შეგვხვდეს შემდეგი ტიპის მატრიცები:

$$A=\begin{pmatrix}A_1 & 0 & 0\ldots\\ A_2 & 0 & 0\\ A_3 & 0 & 0\end{pmatrix}, \quad B=\begin{pmatrix}B_1 & B_2\cdots B_n\\ 0 & 0\ldots 0\\ 0 & 0\end{pmatrix}, \tag{18,10}$$

ე. ი. ისეთი მატრიცები, რომელთაც ნულისაგან განსხვავებული აქვთ მხოლოდ ერთ სვეტზე ან ერთ სტრიქონზე მოთავსებული ელემენტები. ფორმალურად ეს მატრიცები შეგვიძლია წარმოვიდგინოთ შემდეგნაირად:

$$A=\begin{pmatrix}A_1\\ A_2\\ \vdots\\ A_n\end{pmatrix}, \quad B=(B_1\,B_2\cdots B_n). \tag{18,10'}$$

ცხადია, რომ

$$A^+=(A_1^*\,A_2^*\cdots A_n^*); \quad B^+=\begin{pmatrix}B_1^*\\ B_2^*\\ \vdots\\ B_n^*\end{pmatrix}. \tag{18,11}$$

შევნიშნოთ, რომ მატრიცის ნულთან ტოლობა ნიშნავს იმას, რომ ამ მატრიცის ყველა ელემენტი ნულის ტოლია.

ახლა დავამტკიცოთ, რომ ყოველი მატრიცა თავის საკუთარ წარმოდგენაში დიაგონალურია. ვთქვათ, $\hat{L}$ ოპერატორის საკუთარი ფუნქციებია ψ_1, ψ_2,..., ψ_n,... საკუთარი მნიშვნელობებით: λ_1, λ_2,... λ_n,..., ე. ი. გვაქვს განტოლება

$$\hat{L}\psi_n=\lambda_n\psi_n. \tag{18,11'}$$

$\hat{L}$-ის მატრიცული ელემენტის პოვნა თავის საკუთარ წარმოდგენაში ნიშნავს იმას, რომ L_{mn} მატრიცული ელემენტი უნდა შევადგინოთ $\hat{L}$-ის საკუთარი ფუნქციებით. მაშინ (18,11')-ის ძალით და ψ_n ფუნქციების ორთო-ნორმირების პირობის გამოყენებით მივიღებთ

$$L_{mn}=\int\psi_m^*\,\hat{L}\,\psi_n\,d\tau=\lambda_n\,\delta_{mn}, \tag{18,12}$$

რაც ამტკიცებს მატრიცის დიაგონალობას. ცხადია, რომ დიაგონალზე მოთავსებულია $\hat{L}$-ის λ_n-საკუთარი მნიშვნელობები.

მაგალითად, ენერგეტულ წარმოდგენაში ენერგიის ოპერატორის H_{mn} მატრიცა დიაგონალურია, ე. ი.

$$H_{mn}=E_n\delta_{mn} \tag{18,13}$$

ან, გაშლილი სახით,

$$H=\begin{pmatrix} E_1 & 0 & 0 & 0 \dots \\ 0 & E_2 & 0 & 0 \dots \\ 0 & 0 & E_3 & 0 \dots \\ & & & \end{pmatrix}. \tag{18,14}$$

როცა ბაზისი უწყვეტი სპექტრის ფუნქციებია, მაშინ საკუთარ წარმოდგენაში მატრიცა ტოლი იქნება შემდეგი სიდიდის:

$$\langle a' | \hat{L} | a \rangle = a\delta(a'-a). \tag{18,15}$$

§ 19. მოქმედებანი მატრიცებზე

მატრიცათა შეკრება. როდესაც $\hat{L}=\hat{A}\pm\hat{B}$, მაშინ

$$L_{mn}=A_{mn}\pm B_{mn}; \tag{19,1}$$

მაშასადამე, ორი მატრიცის შესაკრებად საჭიროა შესაბამისი მატრიცული ელემენტები შევკრიბოთ; მაგალითად,

$$\begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{pmatrix} \pm \begin{pmatrix} B_{11} & B_{12} \\ B_{21} & B_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A_{11}\pm B_{11}, & A_{12}\pm B_{12} \\ A_{21}\pm B_{21}, & A_{22}\pm B_{22} \end{pmatrix}. \tag{19,2}$$

მატრიცათა გამრავლება. ვიპოვოთ მატრიცათა გამრავლების წესი. ვთქვათ, $\hat{L}=\hat{A}\hat{B}$; განმარტების ძალით

$$(\hat{A}\hat{B})_{kn}=\int \psi_k^* \hat{A}\hat{B}\psi_n d\mathbf{r}. \tag{19,3}$$

$\hat{B}\psi_n(\mathbf{r})$ გამოხატულება წარმოადგენს რაღაც ფუნქციას. გავშალოთ იგი $\psi_m(\mathbf{r})$ ორთოგონალური ფუნქციების მიხედვით

$$\hat{B}\psi_n(\mathbf{r})=\sum_n c_m \psi_m(\mathbf{r}). \tag{19,4}$$

ვნახოთ, რის ტოლია c_m. ამისათვის ტოლობის ორივე მხარე გავამრავლოთ მარცხნიდან $\psi_k^*(\mathbf{r})$-ზე და ავიღოთ ინტეგრალი. მივიღებთ

$$B_{kn}=\int \psi_k^*(\mathbf{r})\,\hat{B}\psi_n(\mathbf{r})\,d\mathbf{r}=c_k. \tag{19,5}$$

ამგვარად, $c_m=B_{mn}$ და ამიტომ

$$\hat{B}\,\psi_n(\mathbf{r})=\sum_m B_{mn}\,\psi_m(\mathbf{r}). \tag{19,6}$$

შევიტანოთ (19,6) გამოსახულება (19,3) განტოლებაში

$$(AB)_{kn}=\sum_m B_{mn}\int \psi_k^*\,\hat{A}\,\psi_m\,d\mathbf{r}=\sum_m B_{mn}\,A_{km}. \tag{19,7}$$

საბოლოოდ ორი მატრიცის ნამრავლის მატრიცული ელემენტებისათვის ვღებულობთ შემდეგ ფორმულას:

$$(AB)_{kn}=\sum_m A_{km}\,B_{mn}. \tag{19,8}$$

აჯამვა m-ით ხდება ერთიდან მატრიცის რანგის განმსაზღვრელ რიცხვამდე.

ვიპოვოთ, მაგალითად ორი, მეორე რანგის მატრიცის ნამრავლი. თანახმად (19,8) ფორმულისა, გვაქვს:

$$(AB)_{11}=\sum_m A_{1m}\,B_{m1}=A_{11}\,B_{11}+A_{12}\,B_{21},$$

$$(AB)_{12}=\sum_m A_{1m}\,B_{m2}=A_{11}\,B_{12}+A_{12}\,B_{22},$$

$$(AB)_{21}=\sum_m A_{2m}\,B_{m1}=A_{21}\,B_{11}+A_{22}\,B_{21},$$

$$(AB)_{22}=\sum_m A_{2m}\,B_{m2}=A_{21}\,B_{12}+A_{22}\,B_{22},$$

ამიტომ

$$\begin{pmatrix}A_{11}\,A_{12}\\A_{21}\,A_{22}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}B_{11}\,B_{12}\\B_{21}\,B_{22}\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}A_{11}\,B_{11}+A_{12}\,B_{21} & A_{11}\,B_{12}+A_{12}\,B_{22}\\A_{21}\,B_{11}+A_{22}\,B_{21} & A_{21}\,B_{12}+A_{22}\,B_{22}\end{pmatrix}. \qquad (19,9)$$

მაშასადამე, ორი მატრიცის გამრავლებისათვის საჭიროა პირველი მატრიცის პირველი სტრიქონის ელემენტები გავამრავლოთ მეორე მატრიცის პირველი სვეტის შესაბამის ელემენტებზე და ავჯამოთ. მივიღებთ ნამრავლის პირველი სტრიქონის პირველ ელემენტს. დანარჩენი ელემენტების მისაღებად საჭიროა პირველი მატრიცის იგივე სტრიქონი გავამრავლოთ მეორე მატრიცის მეორე, მესამე და ა. შ. სვეტებზე. ნამრავლის მეორე სტრიქონის მისაღებად პირველი მატრიცის მეორე სტრიქონს ვამრავლებთ მეორე მატრიცის სვეტებზე და ა. შ. საინტერესოა აღვნიშნოთ, რომ მატრიცათა გამრავლების ფორმულა მარტივად მიიღება დირაკის ბრა- და კეტ-ვექტორების გამოყენებით. ამისათვის განვიხილოთ რაიმე სრული სისტემა $|\psi_m\rangle\equiv|m\rangle$ ვექტორებისა და შევადგინოთ ერთეულოვანი ოპერატორი

$$\sum_k |k\rangle\langle k|=1, \quad (\langle m|n\rangle=\delta_{mn}) \qquad (19,10)$$

მაშინ ამ ოპერატორის ჩასმით $\langle m|AB|n\rangle$ მატრიცულ ელემენტში მივიღებთ

$$\langle m|AB|n\rangle=\sum_k\langle m|A|k\rangle\langle k|B|n\rangle, \qquad (19,11)$$

რომელიც ემთხვევა (19,8) ფორმულას.

ანალოგიურად მივიღებთ სამი მატრიცის ნამრავლის ფორმულას; კერძოდ, გვექნება

$$\langle m|ABC|n\rangle=\sum_k\sum_l\langle m|A|k\rangle\langle k|B|l\rangle\langle l|C|n\rangle \qquad (19,12)$$

ან სხვა აღნიშვნებში

$$(ABC)_{mn}=\sum_k\sum_l A_{mk}\,B_{kl}\,C_{ln}. \qquad (19,13)$$

ამ ფორმულას ადვილად განვაზოგადებთ ν-მატრიცის ნამრავლისათვის

$$(A^{(1)}\,A^{(2)}\ldots\,A^{(\nu)})_{mn}=\sum_{k_1}\sum_{k_2}\cdots\sum_{k_{\nu-1}}A^{(1)}_{mk_1}\,A^{(2)}_{k_1k_2}\cdots\,A^{(\nu)}_{k_{\nu-1}n}. \qquad (19,14)$$

ისევე როგორც ოპერატორები, მატრიცებიც შეიძლება იყოს როგორც კომუტატური, ისე არაკომუტატური. არაკომუტატური მატრიცებია, მაგალითად:

$$A=\begin{pmatrix}0 & -i\\ i & 0\end{pmatrix},\quad B=\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix},\quad C=\begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix}. \tag{19,15}$$

მართლაც, ადვილად შევამოწმებთ, რომ

$$AB\neq BA;\ AC\neq CA;\ BC\neq CB.$$

მატრიცის გასამრავლებლად რაიმე λ რიცხვზე საჭიროა მისი ყველა ელემენტი გავამრავლოთ ამ რიცხვზე, ე. ი.

$$\lambda\begin{pmatrix}A_{11} & A_{12}\\ A_{21} & A_{22}\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\lambda A_{11} & \lambda A_{12}\\ \lambda A_{21} & \lambda A_{22}\end{pmatrix}. \tag{19,16}$$

აშკარაა, რომ ყოველი რიცხვი შეგვიძლია წარმოვიდგინოთ როგორც ნებისმიერი რანგის ისეთი დიაგონალური მატრიცა, რომლის დიაგონალზე მოთავსებულია ეს რიცხვი. მაგალითად,

$$A=\begin{pmatrix}A & 0 & 0 & 0\dots 0\\ 0 & A & 0 & 0\\ 0 & 0 & A & 0\dots 0\\ & & \cdot & \\ & \cdot & \cdot & \cdot\\ 0 & 0 & 0 & \dots\dots A\end{pmatrix}. \tag{19,17}$$

ნულოვანი მატრიცა ეწოდება ისეთ მატრიცას, რომლის ყოველი ელემენტი ნულის ტოლია.

ვიცით რა ორი მატრიცის გამრავლების წესი, ვაჩვენოთ, რომ, თუ $L=AB$, მაშინ

$$(AB)^{+}=B^{+}A^{+}. \tag{19,18}$$

მართლაც, განმარტების ძალით

$$(AB)^{*}_{mn}=(AB)^{*}_{nm}=\sum_{k}A^{*}_{nk}B^{*}_{km}=\sum_{k}\widetilde{A}^{*}_{kn}\widetilde{B}^{*}_{mk}.$$

თუ უკანასკნელ ჯამში წევრებს გადავაადგილებთ, რის უფლებაცა გვაქვს, რადგან მატრიცული ელემენტები ჩვეულებრივ რიცხვებს წარმოადგენენ, მივიღებთ დასამტკიცებელ (19,18) ტოლობას. (19,18)-დან ჩანს, რომ, თუ $A^{+}=A$ და $B^{+}=B$, ეს ჯერ კიდევ არ ნიშნავს იმას, რომ ნამრავლიც ერმიტული იქნება. ნამრავლის ერმიტულობისათვის დამატებით საჭიროა A და B მატრიცების კომუტატურობა. დავუშვათ, რომ A და B ერმიტული მატრიცებია და განვიხილოთ სხვაობა $AB-BA=C$. ცხადია, C მატრიცა არ იქნება ერმიტული, რადგან $C^{+}=-C$, ამიტომ გასაგებია, რომ გამოსახულება

$$C=i(AB-BA) \tag{19,19}$$

უკვე ერმიტული იქნება.

A და B მატრიცებს უწოდებენ ურთიერთ შებრუნებულს, თუ ადგილი აქვს ტოლობას

$$AB=1, \tag{19,20}$$

ე. ი. $A=B^{-1}$ და $B=A^{-1}$ ანუ $AA^{-1}=1$. აღვნიშნოთ, რომ ყველა მატრიცას როდი გააჩნია შებრუნებული მატრიცა; როგორც მტკიცდება, A მატრიცას მაშინ გააჩნია შებრუნებული A^{-1} მატრიცა, როცა ამ მატრიციდან შედგენილი დეტერმინანტი $\mathrm{Det}\,A\neq 0$. ასეთ მატრიცებს ეწოდება არასინგულარული მატრიცები. შემდგომში ჩვენ საქმე გვექნება მხოლოდ არასინგულარულ მატრიცებთან. ადვილად შემოწმდება, რომ

$$(AB)^{-1}=B^{-1}A^{-1},$$
$$(ABC)^{-1}=C^{-1}B^{-1}A^{-1}; \tag{19,21}$$

მართლაც, პირველ ტოლობას რომ აჯგილი ჰქონდეს, საჭიროა დაცული იყოს პირობა $ABB^{-1}A^{-1}=1$. ეს უკანასკნელი კი გამომდინარეობს ტოლობიდან

$$BB^{-1}=AA^{-1}=1.$$

$AB=1$ ნამრაელის მატრიცული ელემენტები შემდეგნაირად შეგვიძლია ჩაეწეროთ:

$$\sum_k A_{mk}B_{kn}=\delta_{mn}. \tag{19,22}$$

ან, რადგან $B=A^{-1}$, გვექნება

$$\sum_k A_{mk}A^{-1}_{kn}=\delta_{mn}. \tag{19,23}$$

§20. უნიტარული მატრიცები

უნიტარული მატრიცები კვანტურ მექანიკაში დიდ როლს ასრულებენ. უნიტარული S-მატრიცა განისაზღვრება შემდეგნაირად:

$$SS^+=S^+S=1. \tag{20,1}$$

ამ ტოლობას მატრიცულ ელემენტებში ექნება სახე

$$\sum_k S_{mk}S^*_{kn}=\sum_k S^*_{mk}S_{kn}=\delta_{mn}, \tag{20,2}$$

ან, რამდენადაც $S^*_{mk}=S^*_{km}$, გვექნება

$$\sum_k S_{mk}S^*_{nk}=\sum_k S^*_{km}S_{kn}=\delta_{mn}. \tag{20,3}$$

(20,1) განმარტებიდან ჩანს, რომ $S^+=S^{-1}$, ე. ი. უნიტარული მატრიცა, საზოგადოდ, ერმიტული არ არის (იგი რომ ერმიტული იყოს, გვექნებოდა $S^+=S!$). ცხადია, რომ მხოლოდ ისეთი მატრიცა იქნება ერთდროულად უნიტარულიცა და ერმიტულიც, რომელიც აკმაყოფილებს პირობას: $S^+S=1$, $S^2=1$.

საკუთარ ფუნქციაზე უნიტარული მატრიცის მოქმედებით მივიღებთ ახალ ფუნქციას, რომელიც ψ_s-ით აღვნიშნოთ, ე. ი.

$$\psi_s=S\psi. \tag{20,4}$$

ამ გარდაქმნას უნიტარულ გარდაქმნას უწოდებენ. შებრუნებულ გარდაქმნას ცხადია ექნება სახე:

$$\psi=S^{-1}\psi_s=S^+\psi_s. \tag{20,5}$$

ასევე ნათელია, რომ რამდენადაც $(S\psi)^*=\psi^*S^+$, იმდენად კომპლექსურად შეუღლებული ფუნქცია უნიტარული გარდაქმნის დროს მიიღებს სახეს

$$\psi^*_s=\psi^*S^+. \tag{20,6}$$

ახლა გამოვარკვიოთ როგორ გარდაიქმნება მატრიცა, როცა ψ ფუნქციებზე მოხდენილია უნიტარული გარდაქმნა. A-მატრიცა, აღებული $\{S\psi_n\}$ უნიტარული გარდაქმნების ბაზისში, აღვნიშნოთ A'-ით, მაშინ

$$A'_{mn}=\int (S\psi_m)^*\hat{A}(S\psi_n)\,d\tau=\int \psi^*_m\hat{A}'\psi_n\,d\tau, \tag{20,7}$$

სადაც

$$A' = S^{+}AS. \tag{20,8}$$

გამოვარკვიოთ უნიტარული გარდაქმნების შინაარსი. ამ მიზნით ვისარგებლოთ აბსტრაქტული ვექტორული სივრცით, რომელშიაც მოვახდინოთ უნიტარული გარდაქმნა კეტ-ვექტორზე; გვექნება

$$|\psi_s\rangle = \hat{S}\,|\psi\rangle. \tag{20,9}$$

გავამრავლოთ ეს გამოსახულება სკალარულად კოორდინატული ბაზისის ერთეულოვან $\langle \mathbf{r}|$-ვექტორზე

$$\langle \mathbf{r}|\psi_s\rangle = \langle \mathbf{r}|\hat{S}|\psi\rangle. \tag{20,10}$$

მოვახდინოთ რაიმე სხვა ერთეულოვანი ბაზისის ოპერატორის ჩასმა S და $|\psi\rangle$-ს შორის. ავიღოთ, მაგალითად, იმპულსური ბაზისი

$$\int_{-\infty}^{+\infty} d\mathbf{p}\,|\mathbf{p}\rangle\langle\mathbf{p}| = 1, \tag{20,11}$$

მაშინ გვექნება

$$\langle \mathbf{r}|\psi_s\rangle = \int \langle \mathbf{r}|\hat{S}|\mathbf{p}\rangle\langle\mathbf{p}|\psi\rangle\, d\mathbf{p}. \tag{20,12}$$

ჩვენ ვიცით, რომ $\langle \mathbf{r}|\psi_s\rangle = \psi_s(\mathbf{r})$, ხოლო $\langle \mathbf{p}|\psi\rangle = \psi(\mathbf{p})$; მაშასადამე, (20,12) უნიტარული გარდაქმნა გამოხატავს ერთი ცვლადებიდან მეორეზე გადასვლას (ჩვენს შემთხვევაში იმპულსებიდან კოორდინატებზე გადასვლას). ასეთ გარდაქმნას კი როგორც ვიცით, კანონიკურს უწოდებენ. მაშასადამე, უნიტარული გარდაქმნები წარმოადგენენ კანონიკურ გარდაქმნებს. (20,12) გარდაქმნის შემთხვევაში კავშირს კოორდინატებსა და იმპულსებს შორის ახორციელებს $\langle \mathbf{r}|S|\mathbf{p}\rangle$ უწყვეტი მატრიცა; როცა გადასვლა ხდება ერთი დისკრეტული წარმოდგენიდან მეორეზე, მაშინ გვექნება

$$\langle m|\psi_s\rangle = \sum_k \langle m|S|k\rangle\langle k|\psi\rangle. \tag{20,13}$$

უნიტარულ გარდაქმნებს მთელი რიგი მნიშვნელოვანი თვისებები აქვთ. ვაჩვენოთ, მაგალითად, რომ საკუთარ ფუნქციებზე უნიტარული მატრიცის მოქმედებით ფუნქციის ნორმა არ იცვლება. ვთქვათ $\langle\psi|\psi\rangle = 1$; ჩავატაროთ ψ ფუნქციაზე (20,4) უნიტარული გარდაქმნა, მაშინ გვექნება

$$\langle S\psi|S\psi\rangle = \langle S^{+}S\psi|\psi\rangle = \langle\psi|\psi\rangle. \tag{20,14}$$

ადვილი საჩვენებელია, რომ უნიტარული გარდაქმნის დროს ოპერატორის საკუთარი მნიშვნელობები არ იცვლება. ვთქვათ, $\hat{A}\psi = a\psi$ და ჩავატაროთ ფუნქციებზე უნიტარული გარდაქმნა; გვექნება $\hat{A}(S\psi) = a(S\psi)$. გავამრავლოთ ეს ტოლობა მარცხნიდან S^{+} ოპერატორზე. რადგან $S^{+}S = 1$, ამიტომ მივიღებთ

$$(S^{+}AS)\psi = a\psi, \tag{20,15}$$

რომელიც გვიჩვენებს, რომ როგორც $\hat{A}$, ისე $S^{+}AS$ ოპერატორებს ერთი და იგივე საკუთარი მნიშვნელობები აქვს.

ახლა ვაჩვენოთ, რომ უნიტარული გარდაქმნა ინვარიანტულს სტოვებს მატრიცის კვალს — დიაგონალური ელემენტების ჯამს. ავიღოთ (20,8) ტოლობის მატრიცული ელემენტი

$$A'_{mn} = \sum_k \sum_l S^+_{mk} A_{kl} S_{ln}. \tag{20,16}$$

მატრიცის შპურის მისაღებად საჭიროა ამ გამოსახულებაში m გაუტოლოთ n-ს და ავჯამოთ; გვექნება

$$\mathrm{Sp}\, A' = \sum_k \sum_l A_{kl} \sum_m S^+_{mk} S_{lm}. \tag{20,17}$$

ჯამი m-ით (20,2) პირობის თანახმად გვაძლევს δ_{lk}-ს, ასე რომ, ფილტრაციის შემდეგ დაგვრჩება

$$\mathrm{Sp}\, A' = \mathrm{Sp}\, A = \mathrm{Jnv}. \tag{20,18}$$

მაშასადამე, მატრიცის დიაგონალური ელემენტების ჯამი მართლაც ინვარიანტული რჩება უნიტარული გარდაქმნების დროს.

ვაჩვენოთ, რომ თუ $\hat{L}$ არის ერმიტული ოპერატორი, მაშინ $\hat{S} = \exp(i\hat{L})$ იქნება უნიტარული; თანაც S უნდა გავიგოთ რიგორც შემდეგი მწკრივი:

$$\hat{S} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} (i\hat{L})^n. \tag{20,19}$$

რადგან $i^+ = -i$, ამიტომ $S^+ = \exp(-i\hat{L})$, საიდანაც $S^+S = 1$, რაც ამტკიცებს $S = \exp(i\hat{L})$ ოპერატორის უნიტარობას.

ამგვარად, ყოველი უნიტარული ოპერატორი შეგვიძლია წარმოვიდგინოთ შემდეგი სახით:

$$\hat{S} = e^{i\hat{L}}, \tag{20,20}$$

სადაც $\hat{L}$ — ერმიტული ოპერატორია. კერძო შემთხვევაში, როცა $\hat{L} = \alpha$ ნამდვილი მუდმივი რიცხვია, $\hat{S} = e^{i\alpha}$ უნიტარული ოპერატორი გამოხატავს ტალღური ფუნქციის ფაზის ცვლილებას.

§21. დროზე დამოკიდებული უნიტარული გარდაქმნები

უნიტარულ გარდაქმნას დიდი მნიშვნელობა აქვს კვანტურ მექანიკაში. დროზე დამოკიდებული გარკვეული უნიტარული მატრიცის დახმარებით შესაძლებელია აღწერილი იქნას ტალღური ფუნქციის ცვლილება დროის მიხედვით. ეს იმას ნიშნავს, რომ უნიტარული მატრიცების გამოყენებით შესაძლებელია იგივე შედეგების მიღება რასაც შრედინგერის განტოლება იძლევა.

დავუშვათ, ვიხილავთ სტაციონარულ შემთხვევას, ე. ი. შემთხვევას, როცა ჰამილტონიანი დროზე ცხადად არ არის დამოკიდებული. დავწეროთ ჰამილტონის ოპერატორის საკუთარი ფუნქციებისა და საკუთარი მნიშვნელობის განტოლება. თუ გარკვეულობის მიზნით ვიგულისხმებთ, რომ ენერგიის სპექტრი დისკრეტულია, მაშინ გვექნება

$$\hat{H}\psi_n = E_n\psi_n. \tag{21,1}$$

შემოვიღოთ ოპერატორი

$$S(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t} = \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{-i\hat{H}t}{\hbar}\right)^n \frac{1}{n!}, \tag{21,2}$$

რომელიც იქნება უნიტარული, რამდენადაც $\hat{H}$ არის ერმიტული ოპერატორი, ე. ი.

$$S^{+}(t)\,S(t)=1. \tag{21,3}$$

ვიმოქმედოთ ამ ოპერატორით $\psi_n(\mathbf{r})$ ფუნქციაზე. გვექნება

$$S(t)\,\psi_n(\mathbf{r})=\sum_n\left(\frac{-it}{\hbar}\right)^n\frac{\hat{H}^n\,\psi_n(\mathbf{r})}{n!} \tag{21,4}$$

(21,1) განტოლებიდან ადვილი დასანახია, რომ $\hat{H}^n\,\psi_n(\mathbf{r})=E^n\,\psi_n(\mathbf{r})$, ამიტომ

$$S(t)\,\psi_n(\mathbf{r})=\sum_n\left(\frac{-it}{\hbar}\right)^n\frac{E^n\,\psi_n(\mathbf{r})}{n!} \tag{21,5}$$

მარჯვენა მხარე კვლავ ექსპონენტით გამოვხატოთ; გვექნება

$$S(t)\,\psi_n(\mathbf{r})=e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}\,\psi_n(\mathbf{r}) \tag{21,6}$$

ან, რაც იგივეა

$$e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}\,\psi_n(\mathbf{r})=e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}\,\psi_n(\mathbf{r}). \tag{21,7}$$

ახლა ვთქვათ მოცემული გვაქვს ტალღური ფუნქციის მნიშვნელობა დროის საწყის $t=0$ მომენტში, ე. ი. ფუნქცია $\psi_n(\mathbf{r},0)$. გავშალოთ იგი $\psi_n(\mathbf{r})$ ტალღური ფუნქციების მიხედვით ფურიეს მწკრივად

$$\psi(\mathbf{r},0)=\sum_n c_n\,\psi_n(\mathbf{r}). \tag{21,8}$$

ამ ტოლობის ორივე მხარეზე ვიმოქმედოთ (21,2) უნიტარული ოპერატორით; გვექნება

$$S(t)\,\psi(\mathbf{r},0)=\sum_n c_n\,S(t)\,\psi_n(\mathbf{r}). \tag{21,9}$$

(21,6) ტოლობის თანახმად კი მივიღებთ

$$S(t)\,\psi(\mathbf{r},0)=\sum_n c_n\,\psi_n(\mathbf{r})\,e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t} \tag{21,10}$$

მარჯვენა მხარე წარმოადგენს $\Psi(\mathbf{r},t)$ ფუნქციას, ასე რომ გვექნება შემდეგი გამოსახულება:

$$\Psi(\mathbf{r},t)=S(t)\,\psi(\mathbf{r},0); \tag{21,11}$$

ეს ფორმულა შეგვიძლია განვიხილოთ როგორც დამოკიდებულება, რომლის მიხედვით ტალღური ფუნქციის საწყისი მნიშვნელობიდან შეგვიძლია ვიპოვოთ ტალღური ფუნქცია დროის ნებისმიერ შემდგომ მომენტში. ასე, რომ (21,11) დამოკიდებულება სავსებით ეკვივალენტურია შრედინგერის დროითი განტოლებისა.

აღსანიშნავია, რომ (21,11)-ით განსაზღვრული დროზე დამოკიდებული ფუნქციის ნორმა მუდმივი სიდიდეა, იგი დროის მიხედვით არ იცვლება. მართლაც,

$$\langle\Psi(t)\,|\,\Psi(t)\rangle=\langle S\psi(0)\,|\,S\psi(0)\rangle=\langle S^{+}S\psi(0)\,|\,\psi(0)\rangle \tag{21,12}$$

რადგან $S^{+}S=1$, ამიტომ შეგვიძლია დავასკვნათ, რომ ტალღური ფუნქციის ნორმა დროის მიხედვით არ იცვლება. იგივე შეგვიძლია დავამტკიცოთ შრედინგერის განტოლების გამოყენებითაც. ამისათვის ვიპოვოთ $\langle\Psi(t)\,|\,\Psi(t)\rangle$ სკალარული ნამრავლის დროის მიხედვით წარმოებული

$$\frac{d}{dt}\langle\Psi(t)\,|\,\Psi(t)\rangle = \langle\,\frac{\partial\Psi}{\partial t}\,|\,\Psi\rangle + \langle\Psi\,|\,\frac{\partial\Psi}{\partial t}\,\rangle. \qquad (21{,}13)$$

შრედინგერის განტოლების მიხედვით $\frac{\partial\Psi}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar}\hat{H}\Psi$, ამიტომ

$$\frac{d}{dt}\langle\Psi\,|\,\Psi\rangle = \frac{i}{\hbar}\,\{\langle\hat{H}\Psi\,|\,\Psi\rangle - \langle\Psi\,|\,\hat{H}\Psi\rangle\}. \qquad (21{,}14)$$

$\hat{H}$-ოპერატორის ერმიტულობის გამო მარჯვენა მხარე ნულის ტოლია; მაშასადამე, $\langle\Psi(t)\,|\,\Psi(t)\rangle$ ნორმა მართლაც მუდმივი ყოფილა.

§(22). საკუთარი მნიშვნელობებისა და საკუთარი ფუნქციების მოძებნის მატრიცული მეთოდი

დავუშვათ, რომ საჭიროა ვიპოვოთ საკუთარი λ მნიშვნელობები და საკუთარი ψ ფუნქციები

$$\hat{L}\psi = \lambda\psi \qquad (22{,}1)$$

ოპერატორული განტოლებისა. წინათ ამ განტოლებას ვხსნიდით x-წარმოდგენაში, როგორც დიფერენციალურ განტოლებას. ახლა ჩვენი მიზანია ვიპოვოთ საკუთარი მნიშვნელობები და საკუთარი ფუნქციები მატრიცული მეთოდით. ამ მიზნით ჩაეწეროთ ჯერ (22,1) განტოლება მატრიცული სახით. ამისათვის გადავიდეთ ახალ წარმოდგენაზე; ვიგულისხმოთ, რომ ახალი წარმოდგენის სპექტრი დისკრეტულია, მაშინ

$$\psi = \sum_n a_n\,\psi_n(\mathbf{r}). \qquad (22{,}2)$$

შევიტანოთ ეს გამოსახულება (19,1)-ში, გავამრავლოთ $\psi^*_m(\mathbf{r})$-ზე, ავიღოთ ინტეგრალი და გამოვიყენოთ ψ_n ფუნქციების ორთო-ნორმირების პირობა. გვექნება

$$\sum_n a_n\,L_{mn} = \sum_n \lambda_n\,a_n\,\delta_{mn}.$$

საიდანაც

$$\sum_n a_n\,(L_{mn} - \lambda_n\,\delta_{mn}) = 0. \qquad (22{,}3)$$

მივიღეთ უსასრულო რიგის ალგებრულ განტოლებათა სისტემა a_n ფუნქციებისა და λ საკუთარი მნიშვნელობების განსასაზღვრავად. თუ ვიპოვით ამ განტოლების ამონახსნებს, გვეცოდინება (22,1) განტოლების ამონახსნებიც; მაშასადამე, გვეცოდინება ψ საკუთარი ფუნქციები. ამგვარად, ახალ წარმოდგენაზე გადასვლით (22,1) დიფერენციალური განტოლება დავიყვანეთ (22,3) ალგებრულ განტოლებათა სისტემაზე.

ალგებრიდან ცნობილია, რომ (22.3) განტოლებათა სისტემას ნულისაგან განსხვავებული ამონახსნი აქვს მხოლოდ მაშინ, როცა სისტემის დეტერმინანტი ნულის ტოლია

$$\begin{vmatrix} L_{11}-\lambda & L_{12} & L_{13}\cdots & L_{1m}\cdots \\ L_{21} & L_{22}-\lambda & L_{23}\cdot & \\ L_{31} & L_{32} & L_{33}-\lambda\cdot & \\ \vdots & & & \\ L_{m1} & L_{m2} & & L_{mm}-\lambda\cdots \end{vmatrix} = 0, \qquad (22{,}4)$$

ეს უკანასკნელი წარმოადგენს λ-ს მიმართ უსასრულო ხარისხის განტოლებას. რადგან $\hat{L}$ ოპერატორი ერმიტულია, ამიტომ (22,4) განტოლების ფესვები $\lambda=\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3, \ldots \lambda_\infty$ ნამდვილი სიდიდეებია. ფესვების ის ერთობლიობა, რომლისათვისაც (22,3) განტოლება ამოხსნადია, იქნება სწორედ $\hat{L}$ ოპერატორის საკუთარი მნიშვნელობები.

ვთქვათ, ვიპოვეთ (22,4) განტოლების რომელიმე ფესვი $\lambda=\lambda_k$; შევიტანოთ იგი (22,3) განტოლებათა სისტემაში

$$\sum_n a_n(\lambda_k)\{L_{mn} - \lambda_k \delta_{mn}\}=0, \qquad (22,3')$$

ჟრომლის ამოხსნაც მოგვცემს

$$a_1=a_1(\lambda_k), \quad a_2=a_2(\lambda_k) \ldots a_\infty=a_\infty(\lambda_k). \qquad (22,5)$$

ცხადია, რომ $a_1(\lambda_k)$ შეადგენენ საკუთარ ფუნქციას ახალ წარმოდგენაში, რომლებიც შეესაბამებიან ერთ საკუთარ მნიშვნელობას $\lambda=\lambda_k$.

თანახმად (22,2) ფორმულისა $\lambda=\lambda_k$ საკუთარი მნიშვნელობის შესაბამის ტალღურ ფუნქციას x-წარმოდგენაში ექნება შემდეგი სახე:

$$\psi_k(\mathbf{r})=\sum_n a_n(\lambda_k)\,\psi_n(\mathbf{r}), \qquad (22,6)$$

ანალოგიურად ვიპოვით სხვა საკუთარი მნიშვნელობების შესაბამის ტალღურ ფუნქციებსაც ახალ წარმოდგენაში: $\{a_n(\lambda_1)\}$, $\{a_n(\lambda_2)\} \ldots \{a_n(\lambda_\infty)\}$. ასე რომ x წარმოდგენაში (22,1) განტოლებისათვის აღნიშნული პროცედურის ჩატარების შემდეგ მივიღებთ ყველა საკუთარ მნიშვნელობასა და საკუთარ ფუნქციას.

როგორც ვნახეთ, ყოველი მატრიცა თავის საკუთარ წარმოდგენაში დიაგონალურია, ე. ი. $L_{mn}=\lambda_n \delta_{mn}$, სადაც λ_n არის n-ური საკუთარი მნიშვნელობა. ამიტომ $\hat{L}$ ოპერატორის საკუთარი მნიშვნელობის მოძებნის ამოცანა შეგვიძლია დავიყვანოთ $\hat{L}$ ოპერატორის შესაბამისი მატრიცის დიაგონალურ სახეზე დაყვანის ამოცანაზე, ე. ი. $\hat{L}$ ოპერატორის საკუთარი λ მნიშვნელობების მოძებნა ეკვივალენტურია L_{mn} მატრიცის დიაგონალურ სახეზე დაყვანისა. დიაგონალზე მდგომი რიცხვები მოგვცემს შესაბამის ოპერატორის საკუთარ მნიშვნელობებს. მატრიცის დაყვანას დიაგონალურ სახეზე ახდენს უნიტარული მატრიცები.

§ 23. კავშირი მატრიცის ორ სხვადასხვა წარმოდგენას შორის

ახლა დავამყაროთ კავშირი მატრიცის ორ სხვადასხვა წარმოდგენას შორის. ვთქვათ, გვაქვს მატრიცის წარმოდგენის ორი ბაზისი. ერთი რაიმე $\hat{L}$-ოპერატორის $\{\psi_n\}$ დისკრეტული სპექტრის ფუნქციები და მეორე $\hat{M}$ ოპერატორის საკუთარი ფუნქციების $\{\varphi_n\}$ ერთობლიობა. პირველ ბაზისში მატრიცა აღვნიშნოთ A', მეორეში კი — A''-ით. მაშინ მატრიცული ელემენტის განმარტების თანახმად გვექნება

$$A'_{mn}=\int \psi_m^*(\mathbf{r})\,\hat{A}\,\psi_n(\mathbf{r})\,d\mathbf{r} \qquad (23,1)$$

და

$$A''_{kl}=\int \varphi_k^*(\mathbf{r})\,\hat{A}\,\varphi_l(\mathbf{r})\,d\mathbf{r}. \qquad (23,2)$$

ჩვენი მიზანია გამოვარკვიოთ, თუ რა კავშირი არსებობს ერთი და იგივე ოპერატორის ამ ორი სხვადასხვა წარმოდგენის მატრიცას შორის. ამ მიზნით ერთი წარმოდგენის ბაზისის ფუნქციები გავშალოთ მეორე ბაზისის ფუნქციებად. გავშალოთ. მაგალითად, $\psi_n(r)$ ფუნქცია $\varphi_l(r)$ ფუნქციების მწკრივად. გვექნება

$$\psi_n(r) = \sum_l S_{ln}\,\varphi_l(r). \tag{23,3}$$

ამასთან, S_{ln} ფურიე-კოეფიციენტს ექნება ორი ინდექსი, რამდენადაც გასაშლელ ფუნქციას თვითონ აქვს n-ინდექსი. ცხადია, რომ S_{ln} მატრიცა განისაზღვრება ტოლობით

$$S_{ln} = \int \psi_n(r)\,\varphi_l^*(r)\,dr. \tag{23,4}$$

შევიტანოთ (23,3) ფუნქცია (23,1) მატრიცულ ელემენტში; გვექნება

$$A'_{mn} = \sum_k \sum_l S^*_{km}\,S_{ln} \int \varphi_k^*(r)\,\hat{A}\varphi_l(r)\,dr \tag{23,5}$$

ან, (23,2) განმარტების თანახმად, მივიღებთ

$$A'_{mn} = \sum_k \sum_l S^*_{km}\,A''_{kl}\,S_{ln}. \tag{23,6}$$

შეუღლებული მატრიცის განმარტებით $S^*_{km} = S^+_{mk}$; ასე რომ,

$$A'_{mn} = \sum_k \sum_l S^+_{mk}\,A''_{kl}\,S_{ln}. \tag{23,7}$$

მივიღეთ საძიებელი კავშირი. გამოვხატოთ იგი მატრიცული სახით. თუ გავიხსენებთ სამი მატრიცის გამრავლების ფორმულას, შეგვიძლია დავწეროთ

$$A' = S^+ A'' S. \tag{23,8}$$

ამგვარად, მატრიცის ორ სხვადასხვა წარმოდგენას შორის კავშირს ამყარებს S-მატრიცა. ვაჩვენოთ, რომ იგი უნიტარული მატრიცაა, ე. ი. რომ $S^+S = SS^+ = 1$. ამ მიზნით (23,3) ფუნქციებიდან შევადგინოთ სკალარული ნამრავლი

$$\int \psi_m^*\,\psi_n\,dr = \sum_{k,l} S^*_{km}\,S_{ln} \int \varphi_k^*(r)\,\varphi_l(r)\,dr, \tag{23,9}$$

სადაც ψ_m და φ_n ფუნქციების ორთო-ნორმირების ძალით მივიღებთ

$$\sum_k S^*_{km}\,S_{kn} = \delta_{mn}. \tag{23,10}$$

ან, რადგან $S^*_{km} = S^+_{mk}$, გვექნება $S^+S = 1$. ასევე დამტკიცდება, რომ $SS^+ = 1$. მაშასადამე, S-მატრიცა ყოფილა უნიტარული.

§(24) ერმიტული მატრიცის დაყვანა დიაგონალურ სახეზე

როგორც ვაჩვენეთ, ოპერატორის საკუთარი ფუნქციებისა და საკუთარი მნიშვნელობების მოძებნა (ე. ი. დიფერენციალური განტოლების ამოხსნა) ეკვივალენტურია ამ ოპერატორის შესაბამისი რაიმე ბაზისში აღებული მატრიცის დიაგონალურ სახეზე დაყვანისა. ამიტომ თავისთავად ცხადია, რომ მატრიცის დიაგონალურ სახეზე დაყვანის ამოცანა ერთ-ერთი ფუნდამენტური ამოცანაა. ამ ამოცანის

გადაწყვეტაში გვეხმარება უნიტარული მატრიცები რამდენადაც, როგორც წინა პარაგრაფში ვაჩვენეთ, ისინი ამყარებენ კავშირს მატრიცის სხვადასხვა წარმოდგენებს შორის. ამ თვალსაზრისით ერმიტული ოპერატორის დიაგონალურ სახეზე დაყვანის ამოცანა შემდეგნაირად ისმება. თუ მოცემულ ერმიტულ მატრიცას დიაგონალური სახე არა აქვს, მაშინ საჭიროა ისეთ ახალ წარმოდგენაზე გადასვლა, რომელშიაც მატრიცა დიაგონალური იქნება. ერთი წარმოდგენიდან მეორეზე გადასვლას კი ახორციელებს უნიტარული მატრიცები, ამიტომ საჭიროა მოიძებნოს ისეთი უნიტარული მატრიცა, რომელიც მოცემულ ერმიტულ მატრიცას დიაგონალურ სახეზე დაიყვანს. გავიხსენოთ წინა პარაგრაფის (23,8) ფორმულა, რომელიც მარცხნიდან S მატრიცაზე გამრავლებით და $SS^{+}=1$ პირობის გათვალისწინებით, მიიღებს სახეს $SA'=A''S$. ან, მატრიცულ ელემენტებში,

$$\sum_{m} S_{km} A'_{mn}=\sum_{l} A''_{kl} S_{ln} \tag{24,1}$$

მოვითხოვოთ, რომ A მატრიცა ახალ წარმოდგენაში იყოს დიაგონალური, ე. ი. $A''_{kl}=a\delta_{kl}$, მაშინ

$$\sum_{m} S_{km} A'_{mn}=A''_{kk} S_{kn} \tag{24,2}$$

ცხადია, რომ $A''_{kk}\equiv a$ რიცხვია. თუ აღვნიშნავთ $S_{kn}\equiv S_n$, მაშინ (24,2) შემდეგნაირად გადაიწერება:

$$\sum_{m} S_m A'_{mn}=aS_n \tag{24,3}$$

ან, რადგან S_n შეგვიძლია წარმოვიდგინოთ როგორც $\sum_{m} \delta_{mn} S_m$, ამიტომ

$$\sum_{m} (A'_{mn}-a\delta_{mn}) S_m=0. \tag{24,4}$$

მივიღეთ უსასრულო რიგის ალგებრულ ერთგვაროვან განტოლებათა სისტემა. ამოხსნისათვის საჭიროა სისტემის დეტერმინანტი ნულის ტოლი იყოს

$$\begin{vmatrix} A'_{11}-a, & A'_{12}, & A'_{13} & \\ A'_{21} & A'_{22}-a, & A'_{23} & \\ A'_{31}, & A'_{32}, & A'_{33}-a, & \ldots\ldots \\ & & & \end{vmatrix}=0. \tag{24,5}$$

(24,5) ზღუდავს a-ს; იგი a-ს მიმართ უსასრულო ხარისხის განტოლებაა. მისი ამოხსნა მოგვცემს ფესვებს $a_1, a_2, a_3, \cdots a_\infty$, ე. ი. $A''_{11}, A''_{22}, \cdots A''_{\infty\infty}$ დიაგონალზე მდგომ საკუთარ მნიშვნელობებს. ფესვების ამ მნიშვნელობების (24,4) განტოლებაში შეტანით და ამოხსნით მივიღებთ თითოეული ფესვის შესაბამის S_m ერთობლიობას:

$$\begin{matrix} S_1(a_1), & S_2(a_1), \cdots & S_\infty(a_1), \\ S_1(a_2), & S_2(a_2) \cdots & S_\infty(a_2), \\ & & \\ S_1(a_\infty), & S_2(a_\infty) \cdots & S_\infty(a_\infty). \end{matrix} \tag{24,6}$$

მაგრამ აღნიშვნის ძალით $a = A'_{kk}$ და $S_n = S_{kn}$, ამიტომ

$$S_{11}(a_1),\ S_{12}(a_1) \cdots S_{1\infty}(a_1)$$
$$S_{21}(a_2),\ S_{22}(a_2) \cdots S_{2\infty}(a_2), \qquad (24,7)$$

ამგვარად, ჩვენ მივიღებთ იმ S მატრიცას, რომელსაც აუებული მატრიცა დაჰყავს დიაგონალურ სახეზე- თვით $a_1 = A'_{11}$, $a_2 = A'_{22}$, $a_3 = A'_{33} \cdots a_\infty = A''_{\infty\infty}$ წარმოადგენს დიაგონალურ სახეზე დაყვანილ მატრიცის ელემენტებს.

რადგან კომუტატურ ოპერატორებს აქვთ საერთო საკუთარი ფუნქციები, ამიტომ კომუტატური მატრიცები ერთდროულად შეიძლება დავიყვანოთ დიაგონალურ სახეზე.

§ 25. შრედინგერის განტოლება მატრიცული სახით

როგორც ვიცით, შრედინგერის დროით განტოლებას კოორდინატულ წარმოდგენაში აქვს სახე

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \hat{H}\Psi(\mathbf{r}, t). \qquad (25,1)$$

შევეცადოთ ეს განტოლება ჩავწეროთ მატრიცულად. ამ მიზნით შემოვიღოთ რაიმე ერმიტული ოპერატორის დისკრეტული სპექტრის $\{\psi_n\}$ ბაზისი და $\Psi(\mathbf{r}, t)$ ფუნქცია გავშალოთ ფურიეს მწკრივად

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \sum_{n=0}^{\infty} \Phi_n(t)\, \psi_n(\mathbf{r}), \qquad (25,2)$$

სადაც $\Phi(t)$ ფურიეკოეფიციენტი დამოკიდებული იქნება მხოლოდ დროზე. (25,2) გამოსახულება შევიტანოთ (25,1) განტოლებაში და მიღებული შედეგი სკალარულად გავამრავლოთ $\psi^*_m(\mathbf{r})$ ფუნქციაზე; გვექნება

$$i\hbar \sum_n \frac{d\Phi_n(t)}{dt} \int \psi^*_m\, \psi_n\, d\mathbf{r} = \sum_n \Phi_n(t) \int \psi^*_m \hat{H} \psi_n\, d\mathbf{r}. \qquad (25,3)$$

ბაზისის ფუნქციების ორთო-ნორმირების ძალით საბოლოოდ მივიღებთ

$$i\hbar \frac{d\Phi_n(t)}{dt} = \sum_n H_{mn}\, \Phi_n(t), \qquad (25,4)$$

სადაც H_{mn} წარმოადგენს ჰამილტონის ოპერატორის მატრიცულ ელემენტს

$$H_{mn} = \int \psi^*_m(\mathbf{r}) \hat{H} \psi_n(\mathbf{r})\, d\mathbf{r}. \qquad (25,5)$$

(25,4)-ს უწოდებენ შრედინგერის მატრიცულ განტოლებას. თუ $\Phi_n(t)$ ფუნქციათა ერთობლიობას წარმოვიდგენთ ერთსვეტიანი მატრიცის სახით, მაშინ მატრიცათა გამრავლების წესის გამოყენებით (25,4) შრედინგერის განტოლებას შეიძლება მივცეთ შემდეგი გამოხატულებაც:

$$i\hbar \frac{d}{dt} \begin{pmatrix} \Phi_1(t) \\ \Phi_2(t) \\ \vdots \\ \Phi_\infty(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} H_{11} & H_{12} & \cdots & H_{1\infty} \\ H_{21} & H_{22} & \cdots & H_{2\infty} \\ & & \cdot & \\ H_{\infty 1} & H_{\infty 2} & \cdots & H_{\infty\infty} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Phi_1(t) \\ \Phi_2(t) \\ \vdots \\ \Phi_\infty(t) \end{pmatrix}. \qquad (25,6)$$

ამ განტოლების დახმარებით მოცემული $\Phi_n(0)$ საწყისი მნიშვნელობით განვსაზღვრავთ $\Phi_n(t)$ სიდიდეებს, რომელთა შეტანით (25,2) გამოსახულებაში ვიპოვით $\psi(r, t)$ საძიებელ ფუნქციას.

განვიხილოთ სტაციონარული შემთხვევა და დავუშვათ, რომ ჰამილტონიანი დროზე ცხადად არ არის დამოკიდებული; ამ შემთხვევაში, იგი წარმოადგენს სრული ენერგიის ოპერატორს. განვიხილოთ ენერგეტული წარმოდგენა, ე. ი. ისეთი წარმოდგენა, როცა ბაზისად აღებულია $\hat{H}\psi_n = E_n\psi_n$ შრედინგერის განტოლების დისკრეტული სპექტრის საკუთარი ფუნქციები. ამ შემთხვევაში, (თავის საკუთარ წარმოდგენაში!), ჰამილტონიანის შესაბამისი მატრიცა იქნება დიაგონალური

$$H_{mn} = \langle \psi_m | \hat{H} | \psi_n \rangle = \langle \psi_m | E_n | \psi_n \rangle = E_n \delta_{mn}. \tag{25,7}$$

მაშასადამე, ენერგეტულ წარმოდგენაში შრედინგერის (25.4) განტოლება მოგვცემს

$$i\hbar \frac{d\Phi_m(t)}{dt} = E_m \Phi_m(t) \tag{25,8}$$

საიდანაც

$$\Phi_m(t) = \Phi_m(0)\, e^{-i\frac{E_m t}{\hbar}} \tag{25,9}$$

მივიღეთ ცნობილი შედეგი, რომ სტაციონარულ შემთხვევაში ტალღური ფუნქცია დროზე ჰარმონიულად არის დამოკიდებული. (25,2) ფორმულის თანახმად ტალღური ფუნქციისათვის მივიღებთ

$$\Psi(r, t) = \sum_n c_n \psi_n(r)\, e^{-i\frac{E_n t}{\hbar}} \tag{25,10}$$

სადაც $c_n = \Phi_n(0)$ მუდმივი რიცხვია. მივიღეთ ჩვენთვის უკვე კარგად ცნობილი ტალღური ფუნქცია კოორდინატულ წარმოდგენაში.

§ 26. მატრიცების გაწარმოება დროით, მატრიცა ენერგეტულ წარმოდგენაში

ჩვენ ადრე დავწერეთ ოპერატორის დროის მიხედვით გაწარმოების ფორმულა, ახლა გამოვიყვანოთ ანალოგიური ფორმულა მატრიცის წარმოებულისათვის. რადგან განმარტების თანახმად $A_{mn} = \langle \psi_m | \hat{A} | \psi_n \rangle$. ამიტომ ამ გამოსახულების დროის მიხედვით სრული წარმოებულისათვის გვექნება

$$\frac{dA_{mn}}{dt} = \left\langle \frac{\partial \psi_m}{\partial t} \middle| \hat{A} \middle| \psi_n \right\rangle + \langle \psi_m | \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} | \psi_n \rangle + \left\langle \psi_m \middle| \hat{A} \middle| \frac{\partial \psi_n}{\partial t} \right\rangle \tag{26,1}$$

ტალღური ფუნქციის დროითი წარმოებული განვსაზღვროთ შრედინგერის განტოლებიდან; მივიღებთ

$$\frac{dA_{mn}}{dt} = \left(\frac{\partial A}{\partial t}\right)_{mn} + \frac{i}{\hbar} \langle \hat{H}\psi_m | \hat{A} | \psi_n \rangle - \frac{i}{\hbar} \langle \psi_m | \hat{A} | \hat{H}\psi_n \rangle \tag{26,2}$$

$\hat{H}$ ოპერატორის ერმიტულობის გამო შეგვიძლია დავწეროთ

$$\frac{dA_{mn}}{dt} = \left(\frac{\partial A}{\partial t}\right)_{mn} + \langle \psi_m | \frac{i}{\hbar} (\hat{H}\hat{A} - \hat{A}\hat{H}) | \psi_n \rangle, \tag{26,3}$$

საიდანაც საბოლოოდ გვექნება

$$\frac{dA_{mn}}{dt} = \left(\frac{\partial A}{\partial t}\right)_{mn} + [\hat{H}, \hat{A}]_{mn}. \tag{26,4}$$

მეორე მხრივ, თუ ოპერატორის დროის მიხედვით გაწარმოების

$$\frac{d\hat{A}}{dt} = \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} + [\hat{H}, \hat{A}] \tag{26,5}$$

ფორმულას გავამრავლებთ მარცხნიდან ψ_m^* ფუნქციაზე, ხოლო მარჯვნიდან $\psi_n(r)$-ზე და გავაინტეგრალებთ, მივიღებთ

$$\left(\frac{dA}{dt}\right)_{mn} = \left(\frac{\partial A}{\partial t}\right)_{mn} + [\hat{H}, \hat{A}]_{mn}. \tag{26,6}$$

მაშასადამე, (26,6) და (26,4)-ის შედარება მოგვცემს

$$\frac{dA_{mn}}{dt} = \left(\frac{dA}{dt}\right)_{mn}; \tag{26,7}$$

ე. ი. მნიშვნელობა არა აქვს მატრიცულ ელემენტს უშუალოდ გავაწარმოებთ დროთი, თუ ოპერატორს ჯერ გავაწარმოებთ, შემდეგ კი მატრიცულ ელემენტს ავიღებთ.

(26,4)-ს უწოდებენ კვანტური მექანიკის მოძრაობის განტოლებას მატრიცული სახით. როცა ოპერატორი დროზე ცხადად არ არის დამოკიდებული, მაშინ მოძრაობის განტოლება მიიღებს სახეს

$$\frac{dA_{mn}}{dt} = [\hat{H}, \hat{A}]_{mn}. \tag{26,8}$$

ახლა განვიხილოთ მატრიცები ენერგეტულ წარმოდგენაში. ჩვენი მიზანია $\hat{A}$ ოპერატორი გამოვხატოთ ენერგიის ოპერატორის დისკრეტული სპექტრის ბაზისში. მაშასადამე, ბაზისი წარმოადგენს

$$\hat{H}\psi_n = E_n\psi_n \tag{26,9}$$

განტოლების საკუთარი ფუნქციების ერთობლიობას. ენერგეტულ წარმოდგენაში $\hat{H}$ დიაგონალური მატრიცაა. ე. ი.

$$H_{mn} = E_n \delta_{mn}. \tag{26,10}$$

ვთქვათ $\hat{A}$ ოპერატორი დროზე ცხადად არ არის დამოკიდებული; მაშინ (26,8) ფორმულის თანახმად

$$\frac{dA_{mn}}{dt} = \frac{i}{\hbar}(\hat{H}\hat{A} - \hat{A}\hat{H})_{mn}. \tag{26,11}$$

ან, თუ გამოვიყენებთ ორი მატრიცის გამრავლების წესს, შეგვიძლია დავწეროთ

$$\frac{dA_{mn}}{dt} = \frac{i}{\hbar}\left\{\sum_k H_{mk}A_{kn} - \sum_k A_{mk}H_{kn}\right\}, \tag{26,12}$$

საიდანაც, (26,10) ფორმულის გათვალისწინებით გვექნება

$$\frac{dA_{mn}}{dt} = \frac{i}{\hbar}\left\{\sum_k E_k \delta_{mk} A_{kn} - \sum_k A_{mk}\delta_{kn}E_n\right\}. \tag{26,13}$$

ჩაეტაროთ ფილტრაცია და შემოვიღოთ ბორის სიხშირე

$$\hbar\omega_{mn} = E_m - E_n, \tag{26,14}$$

მაშინ საბოლოოდ მივიღებთ

$$\frac{dA_{mn}(t)}{dt} = i\omega_{mn} A_{mn}(t). \tag{26,15}$$

ამ ფორმულის მიხედვით შეგვიძლია დავწეროთ ნებისმიერი სიდიდის შესაბამისი მატრიცის დროითი წარმოებულის ფორმულა ენერგეტულ წარმოდგენაში. ასე მაგალითად, კოორდინატისა და იმპულსისათვის გვექნება:

$$\begin{aligned} \frac{d\mathbf{r}_{mn}(t)}{dt} &= i\omega_{mn}\,\mathbf{r}_{mn}(t), \\ \frac{d\mathbf{p}_{mn}(t)}{dt} &= i\omega_{mn}\,\mathbf{p}_{mn}(t), \end{aligned} \tag{26,16}$$

ხოლო ნიუტონის განტოლება მატრიცულად ასე ჩაიწერება:

$$\mu\,\frac{d^2\mathbf{r}_{mn}(t)}{dt^2} = -\,\mu\omega_{mn}^2\,\mathbf{r}_{mn}(t). \tag{26,17}$$

მატრიცული წარმოდგენა კვანტურ მექანიკაში შემოტანილი იყო ჰაიზენბერგის მიერ. შემდგომ ივი განვითარებული იქნა თვით ჰაიზენბერგის, ბორნისა და იორდანის შრომებში. ჰაიზენბერგი გამოდიოდა შესაბამისობის კანონიდან და აღნიშნავდა, რომ რადგან კლასიკურ მექანიკას მიკროობიექტებზე გამოყენებისას გააჩნია პრინციპული წინააღმდეგობები, ამიტომ კოორდინატს, იმპულსს და ა. შ. ფიზიკური აზრი არა აქვს. რადგან ფიზიკური სიდიდეები პრაქტიკულად განისაზღვრება არა კოორდინატების და იმპულსების საშუალებით, რომლებიც კლასიკური მექანიკის თანახმად წარმოადგენს დროის გარკვეულ ფუნქციებს, არამედ ისეთი სიდიდეების საშუალებით, რომლებიც დამოკიდებულია ორ ინდექსზე, ამიტომ ეს სიდიდეები სინამდვილეში წარმოადგენენ მატრიცებს. ჰაიზენბერგის თანახმად, აზრი აქვს კოორდინატის, იმპულსისა და ა. შ. მატრიცებს, რომლებსაც ასე განმარტავდა:

$$x_{mn}(t) = x_{mn}\, e^{i\omega_{mn}t}, \quad p_{mn}(t) = p_{mn}\, e^{i\omega_{mn}t} \quad \text{და ა. შ.}$$

მან დაუშვა, რომ ნიუტონის განტოლება სამართლიანია მატრიცული სახით და ჩამოაყალიბა მექანიკა, რომელსაც მატრიცული ან მიკრომექანიკა უწოდეს. ჰაიზენბერგმა დამატებით შემოიღო ე. წ. დაკვანტვის წესი, რომლის შინაარსი არის ის, რომ პუასონის ფრჩხილების მნიშვნელობა იმპულსისა და კოორდინატისათვის $[\hat{p}_x, x] = 1$ ჩაწერილია მატრიცული სახით. სახელდობრ:

$$\begin{aligned} (\hat{p}_x\, x - x\hat{p}_x)_{mn} &= \frac{\hbar}{i}\,\delta_{mn}, \\ (\hat{p}_y\, y - y\hat{p}_y)_{mn} &= \frac{\hbar}{i}\,\delta_{mn}, \\ (\hat{p}_z\, z - z\hat{p}_z)_{mn} &= \frac{\hbar}{i}\,\delta_{mn}. \end{aligned} \tag{26,18}$$

დიდხანს ეგონათ, რომ შრედინგერის ტალღური მექანიკა და ჰაიზენბერგის მიკრომექანიკა სხვადასხვაა; მაგრამ შრედინგერმა შემდეგში აჩვენა[1], რომ შრედინგერის ოპერატორებსა და ჰაიზენბერგის მატრიცებს შორის არსებობს ჩვენს მიერ ზემოთ განხილული კავშირი $L_{mn}=\int \psi_m \hat{L} \psi_n \, d\mathbf{r}$, სადაც ψ_n ტალღური ფუნქციაა. აღმოჩნდა, რომ ორივე ეს მექანიკა ერთი და იგივე მოვლენას აღწერს ორ სხვადასხვა წარმოდგენაში. სწორედ ამ „ორი“ მექანიკის გაერთიანებამ მოგვცა თანამედროვე კვანტური მექანიკა. თანაც ორივე მეთოდი ერთი და იგივე მნიშვნელობისაა. თუ ზოგიერთი მოვლენები უფრო ადვილად აიწერება შრედინგერის ოპერატორული მეთოდით, სამაგიეროდ სხვა ტიპის მოვლენების აღწერა უფრო ადვილია ჰაიზენბერგის მატრიცული მეთოდით. ჰაიზენბერგის მეთოდი განსაკუთრებით მნიშვნელოვანია ამოცანის მიახლოებითი ამოხსნის დროს.

§ 27. შრედინგერისა და ჰაიზენბერგის წარმოდგენები

კვანტურ მექანიკაში ფიზიკური სიდიდეების დროის მიხედვით ცვლილების აღსაწერად გამოიყენება ორი მეთოდი, რომლებიც ცნობილია შრედინგერისა და ჰაიზენბერგის წარმოდგენების სახელწოდებით. განვიხილოთ თითოეული მათგანი ცალ-ცალკე.

შრედინგერის წარმოდგენა. შრედინგერის წარმოდგენაში ოპერატორები დროზე არ არის დამოკიდებული, ამიტომ დროში ცვლილებას აღწერს ტალღური ფუნქცია, რომელიც აკმაყოფილებს შრედინგერის არასტაციონარული მდგომარეობების განტოლებას. როგორც ვიცით, ტალღური ფუნქციის დროში ცვლილება შეგვიძლია აღვწეროთ დროზე დამოკიდებული უნიტარული მატრიცითაც

$$\Psi(\mathbf{r}, t)=S(t)\,\psi(\mathbf{r}), \tag{27,1}$$

სადაც

$$S(t)=e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}, \quad S(0)=1, \tag{27,2}$$

$\hat{H}$ — წარმოადგენს სტაციონარული მდგომარეობის ჰამილტონიანს. ფუნქცია $\psi(\mathbf{r})$ კი აღნიშნავს $\Psi(\mathbf{r}, t)$-ს მნიშვნელობას $t=0$ მომენტში, ე. ი. $\Psi(\mathbf{r}, 0)$ ფუნქციას.

ამგვარად, შრედინგერის წარმოდგენაში, ოპერატორები დროზე დამოკიდებული არ არის, ტალღური ფუნქციები კი დროზეა დამოკიდებული.

ჰაიზენბერგის წარმოდგენა. ჰაიზენბერგის მეთოდში გვაქვს შებრუნებული სურათი; ამ წარმოდგენაში ტალღური ფუნქციები დროის მიხედვით არ იცვლება, ხოლო ოპერატორები დროის ფუნქციებია. მაშასადამე, ჰაიზენბერგის წარმოდგენაში დროზე დამოკიდებულება ფუნქციებიდან ოპერატორებზეა გადატანილი. შრედინგერის წარმოდგენაში ტალღური ფუნქცია იყოს $\Psi(\mathbf{r}, t)$. ჰაიზენბერგისაში კი — $\psi(\mathbf{r})$. ასევე, ჰაიზენბერგის წარმოდგენაში ოპერატორი აღვნიშნოთ $\hat{A}(t)$-თი, შრედინგერის წარმოდგენაში კი $\hat{A}$-თი.

ცხადია, რომ $\Psi(\mathbf{r}, t)$ და $\psi(\mathbf{r})$ ფუნქციებს შორის კავშირს ახორციელებს $S(t)$ მატრიცა. (27,1) ფორმულიდან გასაგებია, რომ ჰაიზენბერგის წარმოდგენაში ტალღურ ფუნქციას ექნება გამოხატულება

$$\psi(\mathbf{r})=S^{-1}(t)\,\Psi(\mathbf{r}, t). \tag{27,3}$$

---

[1] იგივე დამოუკიდებლად გააკეთა ეკარტმა.

როგორც ვიცით, უნიტარული გარდაქმნით აგრეთვე დამყარდება კავშირი ჰაიზენბერგის წარმოდგენის $\hat{A}(t)$ და შრედინგერის წარმოდგენის $\hat{A}$ მატრიცებს შორის; გვექნება

$$\hat{A}(t)=S^{+}(t)\,\hat{A}\,S(t), \tag{27,4}$$

$t=0$ საწყის მომენტში ორივე წარმოდგენის სიდიდეები ერთმანეთს ემთხვევა, რამდენადაც $\Psi(\mathbf{r},0)=\psi(\mathbf{r})$ და $S(0)=1$. ამიტომაც (27,4) შეკვეთლია განვიხილოთ, როგორც ტოლობა

$$\hat{A}(t)=S^{+}(t)\,A(0)\,S(t), \tag{27,5}$$

ე. ი. როგორც ჰაიზენბერგის ოპერატორის ცვლილება დროში. ამიტომ, ჰაიზენბერგის ოპერატორის Δt უსასრულოდ მცირე დროში ცვლილება განსაზღვრული იქნება ფორმულით

$$\hat{A}(t+\Delta t)=S^{+}(\Delta t)\,\hat{A}(t)\,S(\Delta t). \tag{27,6}$$

ამ ტოლობაში შევიტანოთ (27,2) ოპერატორი, რომელიც გაშალოთ მწკრივად და, Δt-ს სიმცირის გამო, შევინარჩუნოთ მხოლოდ პირველი რიგის უსასრულოდ მცირე სიდიდეები; გვექნება

$$\hat{A}(t+\Delta t)=\left(1+\frac{i}{\hbar}\hat{H}\Delta t+\ldots+\right)\hat{A}(t)\left(1-\frac{i}{\hbar}\hat{H}\Delta t+\ldots+\right)=$$

$$=\hat{A}(t)+\frac{i}{\hbar}(\hat{H}\hat{A}-\hat{A}\hat{H})\,\Delta t+\ldots+ \tag{27,7}$$

თუ ამ გამოსახულებაში გადავალთ ზღვარზე, როცა $\Delta t\to 0$, მივიღებთ ჩვენთვის უკვე კარგად ცნობილ ფორმულას

$$\frac{d\hat{A}(t)}{dt}=[\hat{H},\ \hat{A}]. \tag{27.8}$$

ახლა ვიპოვოთ მატრიცული ელემენტი ჰაიზენბერგის წარმოდგენაში. ცხადია, რომ ამ წარმოდგენაში

$$A_{mn}(t)=\int\psi_m^{*}(\mathbf{r})\,\hat{A}(t)\,\psi_n(\mathbf{r})\,d\mathbf{r}. \tag{27,9}$$

გამოვიყენოთ (27,4) ფორმულა და $A(t)$ ჰაიზენბერგის წარმოდგენის ოპერატორი გამოვსახოთ შრედინგერის $\hat{A}$ ოპერატორით; გვექნება

$$A_{mn}(t)=\int\psi_m^{*}(\mathbf{r})(S^{+}\hat{A}S)\,\psi_n(\mathbf{r})\,d\mathbf{r}. \tag{27,10}$$

განვიხილოთ ბაზისი, რომლის ფუნქციები ენერგიის ოპერატორის საკუთარი ფუნქციებია, მაშინ (27,8) ფორმულის თანახმად მივიღებთ

$$A_{mn}(t)=A_{mn}\,e^{i\omega_{mn}t}, \tag{27,11}$$

სადაც ω_{mn} ბორის სიხშირეებია, ხოლო $A_{mn}=A_{mn}(0)$ დროზე დამოუკიდებელი მატრიცული ელემენტები განისაზღვრება ფორმულით

$$A_{mn}=\int\psi_m^{*}(\mathbf{r})\,\hat{A}\psi_n(\mathbf{r})\,d\mathbf{r}. \tag{27,12}$$

მაშასადამე, ჰაიზენბერგის მატრიცული ელემენტები აღებულია შრედინგერის ოპერატორიდან სტაციონარული მდგომარეობის ტალღური ფუნქციების მიხედვით.

(27,11) ფორმულიდან ცხადია, რომ

$$\frac{dA_{mn}(t)}{dt}=i\omega_{mn}A_{mn}(t) \qquad (27,13)$$

რომელიც წარმოადგენს ჰაიზენბერგის წარმოდგენის ოპერატორის წარმოებულის ფორმულას ენერგეტულ წარმოდგენაში.

სავარჯიშო მაგალითები

1. მოვძებნოთ

$$\sigma_x^0=\begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix},\ \sigma_y^0=\begin{pmatrix}0 & -i\\ i & 0\end{pmatrix},\ \sigma_z^0=\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}$$

მატრიცების საკუთარი მნიშვნელობები. ამისათვის საჭიროა ისინი დავიყვანოთ დიაგონალურ სახეზე. რადგან σ_z^0-ს უკვე აქვს დიაგონალური სახე, ამიტომ აშკარაა, რომ მისი საკუთარი მნიშვნელობებია ± 1. ვიჩვენოთ, რომ იგივე საკუთარი მნიშვნელობები აქვს σ_x^0 და σ_y^0 მატრიცებსაც. ამ მიზნით გამოვიყენოთ ზემოთ მიღებული შედეგები. ჩვენს შემთხვევაში $A'_{11}=A'_{22}=0$, $A_{12}=A_{21}=1$, ამიტომ (24,5) განტოლებას უქნება სახე

$$\begin{vmatrix}-a & 1\\ 1 & -a\end{vmatrix}=0,\ \text{ე. ი. } a^2=1,$$

$a_1=A''_{11}=1$, $a_2=A''_{22}=-1$. მაშასადამე, დიაგონალზე მოთავსებულია 1 და -1; ასე რომ საკუთარი მნიშვნელობა ყოფილა ± 1. სავსებით ანალოგიურად σ_y^0-ისათვის, რადგან $A'_{11}=A'_{22}=0$, $A'_{12}=-i$ და $A'_{21}=i$ (24,5) განტოლება მოგვცემს

$$\begin{vmatrix}-a & -i\\ i & -a\end{vmatrix}=0,\ \text{ე. ი. } a^2=1,$$

საკუთარი მნიშვნელობები ისევ ± 1-ის ტოლია.

ახლა მოვძებნოთ ის უნიტარული მატრიცა S, რომელიც σ_x^0-ს დაიყვანს დიაგონალურ სახეზე. ამისათვის შევიტანოთ ფესვების მნიშვნელობა (24,4) განტოლებაში. შევიტანოთ ჯერ $a_1=+1$. გვექნება სისტემა:

$$-S_1+S_2=0,$$
$$S_1-S_2=0,$$

საიდანაც $S_1=S_2$, ე. ი. თანახმად (24,7)-სა, $S_{11}=S_{12}$, მეორე $a=-1$ ფესვის შეტანა მოგვცემს $S_{21}=-S_{22}$. ამგვარად

$$S=\begin{pmatrix}S_{11} & S_{11}\\ S_{21} & -S_{21}\end{pmatrix}$$

გამოვიყენოთ უნიტარობის პირობა $SS^+=1$. ეს პირობა გაშლილი სახით ასე დაიწერება:

$$\begin{pmatrix}S_{11} & S_{11}\\ S_{21} & -S_{21}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}S_{11}^* & S_{21}^*\\ S_{11}^* & -S_{21}^*\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\end{pmatrix}$$

თუ ჩავატარებთ გამრავლებას და გავიხსენებთ, რომ მატრიცები ტოლია, როცა მათი ყველა შესაბამისი ელემენტი ტოლია, მივიღებთ შემდეგ ტოლობებს:

$$2[S_{11}]^2=1,\ S_{11}S_{21}^*-S_{11}S_{21}^*=0,\ S_{21}S_{11}^*-S_{11}^*S_{21}=0 \text{ და } 2[S_{21}]^2=1,$$

საიდანაც გამომდინარეობს:

$$S_{11}=\pm\frac{1}{\sqrt{2}}e^{i\alpha},\ S_{21}=\pm\frac{1}{\sqrt{2}}e^{i\beta}$$

აქ α და β ნებისმიერი ფაზებია. ამგვარად

$$S=\pm\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}\exp(i\alpha) & \exp(i\alpha)\\ \exp(i\beta) & -\exp(i\beta)\end{pmatrix}.$$

ადვილად შევამოწმებთ, რომ მართლაც $S\sigma_x^0 S^+$ წარმოადგენს დიაგონალურ მატრიცას ± 1 საკუთარი მნიშვნელობებით. როგორც ვხედავთ, უნიტარული მატრიცები, რომლებსაც მატრიცა დაჰყავს დიაგონალურ სახეზე, მრავალი ყოფილა. აშკარაა, რომ რადგან α და β ნებისმიერებია, ამიტომ შეგვიძლია ავიღოთ $\alpha=\beta=0$, მაშინ გვექნება

$$S=\pm\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1 & 1\\ 1 & -1\end{pmatrix}.$$

2. რატომ არ შეიძლება ამ უნიტარული მატრიცით σ_x^0, σ_y^0, σ_z^0 მატრიცების ერთდროულად დიაგონალურ სახეზე დაყვანა?

3. ვაჩვენოთ, რომ σ_x^0, σ_y^0, σ_z^0 მატრიცები ერმიტულებიც არიან და უნიტარულებიც.

4. ვაჩვენოთ, რომ მსგავსი გარდაქმნის დროს დეტერმინანტი არ იცვლება.

ა მ ო ხ ს ნ ა: მართლაც, გვაქვს

$$B=CAC^{-1}.\ CC^{-1}=1$$

განვიხილოთ ამ ტოლობის დეტერმინანტი

$$Det\ (B)=Det\ (C)\ Det\ (A)\ Det\ (C^{-1}).$$

რადგან $CC^{-1}=1$, ამიტომ $Det\ (C)\ Det\ (C^{-1})=1$ და მივიღებთ

$$Det\ (CAC^{-1})=Det\ (A).$$

5. ვთქვათ მოცემული გვაქვს მეორე რანგის მატრიცა

$$A'=\begin{pmatrix}a & b\\ b & d\end{pmatrix},$$

სადაც a, b, d ნამდვილი რიცხვებია. ვიპოვოთ ამ მატრიცის საკუთარი მნიშვნელობები იმ პირობის გამოყენებით, რომ $SpA'=SpA''$ და $Det\ (SAS^+)=Det\ (SA'S^{-1})=Det\ (A'')$, სადაც A'' არის A' მატრიცა იმ წარმოდგენაში, სადაც იგი დიაგონალურია.

ა მ ო ხ ს ნ ა: აშკარაა, რომ

$$Sp\ A'=a+d,\ Det\ A'=ad-b^2.$$

თუ A'' მატრიცის დიაგონალურ ელემენტებს აღვნიშნავთ n_1 და n_2-ით, გვექნება შემდეგი პირობები:

$$Sp\ A'=a+d=n_1+n_2$$

და

$$Det\ A'=ad-b^2=n_1n_2$$

ან, თუ გამოვიყენებთ ვიეტას თეორემას კვადრატული განტოლების ფესვების შესახებ, მივიღებთ, რომ n_1 და n_2 მნიშვნელობები მოიძებნება შემდეგი კვადრატული განტოლების ამოხსნით:

$$n^2-(Sp\ A')\ n+Det\ A'=0,$$

საიდანაც

$$n_{1,2}=\frac{1}{2}\ Sp\ A'\pm\sqrt{Sp\left(\frac{A'}{2}\right)-Det\ A'},$$

ან, რაც იგივეა,

$$n_{1,2}=\frac{a+d}{2}\pm\sqrt{\left(\frac{a+d}{2}\right)^2-(ad-b^2)}.$$

6. გამოარკვიეთ, ექნება თუ არა შებრუნებული შემდეგ მატრიცას:

$$\begin{pmatrix}a & b\\ a & b\end{pmatrix},$$

a და b რიცხვებია.

7. დავამტკიცოთ, რომ $Sp\ (AB)=Sp\ (BA)$.

ა მ ო ხ ს ნ ა: მატრიცის კვალის განმარტებით

$$Sp\ (AB)=\sum_n (AB)_{nn}=\sum_n\sum_k A_{nk}B_{kn}.$$

მატრიცული ელემენტები რიცხვებია, ამიტომ შეგვიძლია მათი გადასმა. ასე რომ, გვექნება

$$Sp\,(AB)=\sum_n\sum_k B_{kn}\,A_{nk}=Sp\,(BA).$$

8. დავამტკიცოთ, რომ კვალის მნიშვნელობა არ შეიცვლება Sp-ის ნიშნის ქვეშ მატრიცათა ციკლური გადასმით, ე. ი. რომ

$$Sp\,(ABC)=Sp\,(CAB)=Sp\,(BCA).$$

9. ვაჩვენოთ, რომ A მატრიცაზე მსგავსი გარდაქმნის ჩატარებით კვალი არ იცვლება. მართლაც,

$$Sp\,(CAC^{-1})=Sp\,(C^{-1}CA)=Sp\,(A).$$

10. ვაჩვენოთ, რომ უნიტარული ოპერატორის საკუთარი მნიშვნელობა მოდულით ერთის ტოლია.

11. ვიპოვოთ განტოლება, რომელსაც აკმაყოფილებს დროზე დამოკიდებული უნიტარული გარდაქმნა

$$S(t)=\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t\right).$$

ა მ ო ხ ს ნ ა: რადგან ჰამილტონიანი დროს ცხადად არ შეიცავს, ამიტომ უშუალო გაწარმოებით დავინახავთ, რომ $S(t)$ ოპერატორი აკმაყოფილებს განტოლებას

$$i\hbar\frac{\partial S(t)}{\partial t}=\hat{H}S(t),$$

რომელიც გარეგნულად ემთხვევა შრედინგერის განტოლებას.

თავი IV

ფიზიკურ სიდიდეთა ოპერატორებით წარმოდგენა

მეოთხე თავში განხილულია კვანტური მექანიკის ძირითადი ჰიპოთეზა, რომლის მიხედვით ყველა ფიზიკურ სიდიდეს კვანტურ მექანიკაში შეესაბამება წრფივი ერმიტული ოპერატორი. ნაპოვნია ფიზიკური სიდიდეების შესაბამისი ოპერატორების კონკრეტული გამოხატულებანი.

§ 28. კვანტური მექანიკის ძირითადი ჰიპოთეზა

როგორც უკვე ვიცით, კვანტური მექანიკის მოძრაობის განტოლებას წარმოადგენს შრედინგერის განტოლება, რომელიც სტაციონარული მდგომარეობისათვის იწერება შემდეგი სახით:

$$\Delta\psi(r)+\frac{2m}{\hbar^2}[E-V(r)]\psi(r)=0. \tag{28,1}$$

ეს განტოლება შეგვიძლია გადავწეროთ ოპერატორული განტოლების ფორმითაც; სახელდობრ, გვექნება

$$\hat{H}\psi(r)=E\psi(r), \tag{28,2}$$

სადაც $\hat{H}$ ოპერატორი განისაზღვრება ფორმულით

$$\hat{H}=-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta+V(r), \tag{28,3}$$

რომელსაც ჩვენ სრული ენერგიის ოპერატორი ან სტაციონარული მდგომარეობის ჰამილტონიანი ვუწოდეთ. ეს ოპერატორი არის წრფივი და ერმიტული. ერმიტული ოპერატორის საკუთარი მნიშვნელობები ნამდვილია, ამიტომ (28,2) განტოლებაში E იქნება ნამდვილი სიდიდე. ცხადია, ეს ასეც უნდა იყოს, რამდენადაც შრედინგერის განტოლებაში E არის სრული ენერგია, რომელიც ცდაზე იზომება და ამიტომ იგი შეუძლებელია ნამდვილი არ იყოს.

ჩვენ ვხედავთ, რომ შრედინგერის განტოლების ამოხსნა და ენერგიის მნიშვნელობებისა და ტალღური ფუნქციის მოძებნის ამოცანა ეკვივალენტურია ენერგიის ოპერატორის საკუთარი ფუნქციებისა და საკუთარი მნიშვნელობების მოძებნისა.

აღვნიშნოთ, რომ ფიზიკას საქმე აქვს არა მხოლოდ ენერგიასთან, არამედ მთელ რიგ მნიშვნელოვან სიდიდეებთან, იმპულსთან, იმპულსის მომენტთან და ასე შემდეგ. ამიტომ ბუნებრივია ვიფიქროთ, რომ სხვა ფიზიკური სიდიდეების მნიშვნელობებიც, რომლებიც ცდაზე იზომებიან, აგრეთვე უნდა წარმოადგენდეს (28,2) განტოლების ანალოგიური ოპერატორული განტოლების საკუთარ მნიშვნე-

ლობებს. მაგრამ ოპერატორს საზოგადოდ ექნება არა (28,3) სახე, არამედ სხვა, შესაბამისად განხილული ფიზიკური სიდიდისა.

ამგვარად, ჩვენ შეგვიძლია დავუშვათ, რომ ოპერატორის საკუთარი მნიშვნელობანი ეს ის მნიშვნელობებია, რომლებსაც ამ ოპერატორის შესაბამისი ფიზიკური სიდიდე იღებს გაზომვის პროცესში.

რადგან ფიზიკური სიდიდის ცდით გაზომილი მნიშვნელობები აუცილებლად ნამდვილი რიცხვებია, ამიტომ ზემოთ დამტკიცებული თეორემის ძალით ამ ფიზიკური სიდიდის შესაბამისი ოპერატორი ერმიტული უნდა იყოს.

იმის გამო, რომ კვანტურ მექანიკაში სამართლიანია სუპერპოზიციის პრინციპი, ფიზიკური სიდიდის შესაბამისი ოპერატორი წრფივიც უნდა იყოს.

ამგვარად, ყოველ ფიზიკურ სიდიდეს უნდა შეეუსაბამოთ წრფივი ერმიტული ოპერატორი. ბუნებრივად იბადება კითხვა, როგორ ვიპოვოთ მოცემული ფიზიკური სიდიდის შესაბამისი ოპერატორი. ამ საკითხის გარკვევაში დაგვეხმარება კლასიკური მექანიკა. რადგან კვანტური მექანიკა აიგება კლასიკური მექანიკის ანალოგიით, ამიტომ კვანტურ მექანიკაში დინამიური ცვლადები ისეთივე რჩება, რაც კლასიკურ მექანიკაში. ამ ცვლადების თავისებურება ის არის, რომ ისინი ახალ მათემატიკურ ბუნებას ავლენენ—გამოიხატებიან ოპერატორებით.

ზემოთ თქმული წარმოადგენს იმ ჰიპოთეზის შინაარსს, რომელიც ერთ-ერთი მნიშვნელოვანია კვანტური მექანიკის სხვა ჰიპოთეზებს შორის; ჩვენ მას კვანტური მექანიკის ძირითად ჰიპოთეზას ვუწოდებთ. კვანტური მექანიკის ძირითადი ჰიპოთეზა ასე შეგვიძლია ჩამოვაყალიბოთ:

ფიზიკური სიდიდეები აიწერება წრფივი ერმიტული ოპერატორებით. ამ ოპერატორების საკუთარი მნიშვნელობები იძლევა ცდაზე გაზომილი ფიზიკური სიდიდის მნიშვნელობებს, ხოლო ოპერატორთა შორის ისეთივე დამოკიდებულებანი არსებობს, როგორც ამ ოპერატორების შესაბამის ფიზიკურ სიდიდეებს შორის კლასიკურ მექანიკაში.

ასე, მაგალითად, რადგან კლასიკურ მექანიკაში სრული ენერგია წარმოადგენს კინეტიკური და პოტენციალური ენერგიების ჯამს, ამიტომ კვანტურ მექანიკაში ენერგიის ოპერატორი უნდა წარმოადგენდეს კინეტიკური და პოტენციალური ენერგიების ოპერატორთა ჯამს. რადგან კლასიკურ მექანიკაში კინეტიკური ენერგია იმპულსთან დაკავშირებულია შემდეგი ფორმულით:

$$T = \frac{\mathbf{p}^2}{2\mu} = \frac{1}{2\mu}\,(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2), \tag{28,4}$$

ამიტომ კვანტურ მექანიკაში კინეტიკური ენერგიის ოპერატორი იქნება

$$\hat{T} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2\mu}, \tag{28,5}$$

ამასთან, შემდგომში, რადგან m-ით მაგნიტური კვანტური რიცხვი გვექნება აღნიშნული, მასას μ-ით აღვნიშნავთ.

კვანტური მექანიკის ძირითადი ჰიპოთეზის თანახმად მოძრაობის კვანტურ განტოლებას მივიღებთ, თუ კლასიკური მოძრაობის განტოლებაში

$$\frac{dA}{dt} = \frac{\partial A}{\partial t} + [H, A] \tag{28,6}$$

გადავალთ ოპერატორებზე, ე. ი. დავწერთ

$$\frac{d\hat{A}}{dt} = \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} + [\hat{H}, \hat{A}], \tag{28,7}$$

სადაც $\hat{H}$ ჰამილტონის ოპერატორია. (28,7) გამოსახულება ჩვენ უკვე განვიხილეთ როგორც ოპერატორის დროითი წარმოებულის ფორმულა.

სრულიად ანალოგიურად დავწერთ კვანტური მექანიკის სხვა ფიზიკური სიდიდეების ოპერატორებსაც.

ამის შემდეგ მთავარია კონკრეტულად მოვძებნოთ ფიზიკური სიდიდეების შესაბამისი ოპერატორების გამოხატულებანი.

ფიზიკური სიდიდეების შესაბამისი ოპერატორების კონკრეტული სახის დასადგენად, როგორც ოპერატორთა და მატრიცათა თვისებების განხილვის დროს დავინახეთ, საჭიროა წარმოდგენის შერჩევა.

ჰამილტონის ოპერატორში შედის ორი წევრი, რომელთაგან პირველი შეიცავს ლაპლასიანს, მეორე კი წარმოადგენს პოტენციალურ ენერგიას. ლაპლასიანი შეიცავს კოორდინატების მიხედვით წარმოებულებს, პოტენციალური ენერგია კი ოპერატორი არ არის, ან, როგორც ამბობენ, „გამრავლების ოპერატორია“ $V\psi = \psi V$. ასეთი თვისება კი აქვს დამოუკიდებელ ცვლადს და ამ ცვლადის ფუნქციას. ამიტომ ჩვენ შეგვიძლია დავასკვნათ, რომ $\hat{H}$ ოპერატორი დაწერილია კოორდინატულ წარმოდგენაში. მართლაც, იგი შეიცავს კოორდინატების ფუნქციას, კოორდინატების მიხედვით წარმოებულებს და მოქმედებს ψ-ზე, რომელიც აგრეთვე სივრცულ კოორდინატებზეა დამოკიდებული. მაშასადამე, როდესაც შრედინგერის განტოლება დაგწერეთ ჩვენ „შემთხვევით“ აგვირჩევია „კოორდინატული წარმოდგენა“. ამ წარმოდგენაში დამოუკიდებელი ცვლადები, რომლებზედაც ψ ფუნქციაა დამოკიდებული, არის სივრცული კოორდინატები; კოორდინატები და მათი ფუნქციები გამრავლების ოპერატორებია, ხოლო ყველა სხვა ოპერატორი გამოხატული იქნება კოორდინატებზე ჩასატარებელი ოპერაციებით.

მატრიცათა ენაზე ყოველი ფიზიკური სიდიდის შესაბამისი მატრიცა, თავის საკუთარ წარმოდგენაში დიაგონალურია მაშინ, როცა სხვა სიდიდეების შესაბამისი მატრიცები დიაგონალური არ არიან.

რადგან კოორდინატულ წარმოდგენაში r გამრავლების ოპერატორია, ამიტომ კოორდინატების საკუთარი მნიშვნელობების განტოლება ასე დაიწერება:

$$r\psi(r) = r_0\psi(r). \tag{28,8}$$

ამ განტოლების ამონახსნი იქნება დირაკის დელტა ფუნქცია

$$\psi_{r_0}(r) = A\delta(r - r_0), \tag{28,9}$$

სადაც A ნორმირების მუდმივია. იგი შეგვიძლია განვსაზღვროთ უწყვეტი სპექტრის ნორმირების პირობიდან

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(r, r_0')\psi(r, r_0)dr = \delta(r_0' - r_0), \tag{28,10}$$

რომელშიც (28,9) ფუნქციის შეტანით მივიღებთ $A = 1$. მაშასადამე,

$$\psi(r, r_0) = \delta(r - r_0) \tag{28,11}$$

მიღებული ტალღური ფუნქცია ყველგან ნულია, გარდა $r = r_0$ წერტილისა, სადაც იგი უსასრულობა ხდება.

ქვემოთ ჩვენ განვიხილავთ ფიზიკური სიდიდეების შესაბამის ოპერატორებს კოორდინატულ წარმოდგენაში. შემდეგ თავში ვაჩვენებთ, რომ სხვადასხვა წარმოდგენის ტალღურ ფუნქციებს და ოპერატორებს შორის არსებობს გარკვეული კავშირი.

§ 29. იმპულსის ოპერატორი

ვიპოვოთ იმპულსის ოპერატორი კოორდინატულ წარმოდგენაში. ეს ოპერატორი სხვადასხვა გზით შეგვიძლია მოვძებნოთ. კვანტური მექანიკის ძირითადი ჰიპოთეზის თანახმად კვანტური მექანიკის ჰამილტონის ოპერატორი მიიღება კლასიკურ ჰამილტონიანში

$$H=\frac{1}{2\mu}\left(p_x^2+p_y^2+p_z^2\right)+V(\mathbf{r},\ t) \tag{29,1}$$

ოპერატორებზე გადასვლით; შედეგად მივიღებთ (28,3) ოპერატორს, საიდანაც ჩანს, რომ იმპულსის ოპერატორს ექნება სახე

$$\hat{\mathbf{p}}=-i\hbar\nabla \tag{29,2}$$

ან მდგენელებში:

$$\hat{p}_x=-i\hbar\frac{\partial}{\partial x},\quad \hat{p}_y=-i\hbar\frac{\partial}{\partial y},\quad \hat{p}_z=-i\hbar\frac{\partial}{\partial z}. \tag{29,3}$$

ჩვენ შეგვეძლო აგვერჩია საწინააღმდეგო ნიშანიც, მაგრამ შევთანხმდეთ და იმპულსის ოპერატორი სწორედ (29,3) ფორმულებით განსაზღვრული სახით ავირჩიოთ. რადგან კვანტურ მექანიკაში ოპერატორები განსაზღვრულია უნიტარული გარდაქმნის სიზუსტით, ამიტომ ასეთი შერჩევა ფიზიკურ შედეგებზე არ იმოქმედებს.

იმპულსის ოპერატორის გამოსახულება შეგვიძლია ვიპოვოთ პუასონის კვანტური ფრჩხილების დახმარებითაც. კვანტური მექანიკის ძირითადი ჰიპოთეზის თანახმად პუასონის ფუნდამენტურ ფრჩხილებს კოორდინატულ წარმოდგენაში ექნება შემდეგი სახე:

$$[\hat{p}_i,\ x_k]=\delta_{ik}\quad (i,k=1,\ 2,\ 3), \tag{29,4}$$

ეს ფრჩხილები აიღება ოპერატორებიდან და მაშასადამე, ისინი თითონაც ოპერატორს წარმოადგენენ, რომელიც მოქმედებს ψ ფუნქციაზე. განვიხილოთ ერთგანზომილებიანი შემთხვევა; მაშინ $[\hat{p}_x,\ x]=1$ და პუასონის კვანტური ფრჩხილების (16.24) განმარტების ძალით გვექნება

$$\frac{i}{\hbar}\left(\hat{p}_x x-x\hat{p}_x\right)\psi=\psi \tag{29,5}$$

ამ ოპერატორულ განტოლებას კი აკმაყოფილებს $\hat{p}_x=-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$. ასევე. ადვილად ვიპოვით დანარჩენი ორი მდგენელის ოპერატორებსაც.

ჩვენ ვხედავთ, რომ იმპულსის ოპერატორი ერმიტული ოპერატორია. კოორდინატულ წარმოდგენაში იგი დაკავშირებული აღმოჩნდა გრადიენტთან.

ვიპოვოთ ახლა იმპულსის ოპერატორის საკუთარი ფუნქციები და საკუთარი მნიშვნელობები. ამისათვის საჭიროა დავწეროთ საკუთარი ფუნქციებისა და საკუთარი მნიშვნელობების განტოლება

$$\hat{\mathbf{p}}\,\psi_{\mathbf{p}}(x,\ y,\ z)=p\psi_{\mathbf{p}}(x,\ y,\ z) \tag{29,6}$$

შევიტანოთ $\hat{\mathbf{p}}$-ს მნიშვნელობა და გავიხსენოთ, რომ $\nabla=\mathbf{i}\,\frac{\partial}{\partial x}+\mathbf{j}\,\frac{\partial}{\partial y}+\mathbf{k}\,\frac{\partial}{\partial z}$, სადაც $\mathbf{i},\ \mathbf{j},\ \mathbf{k}$ ერთეულოვანი ვექტორებია x, y, და z-ღერძების გასწვრივ. (29,6) განტოლება მიიღებს სახეს:

$$\frac{\hbar}{i}\left(\mathbf{i}\,\frac{\partial}{\partial x}+\mathbf{j}\,\frac{\partial}{\partial y}+\mathbf{k}\,\frac{\partial}{\partial z}\right)\psi_{\mathbf{p}}(x,\ y,\ z)=(\mathbf{i}p_x+\mathbf{j}p_y+\mathbf{k}p_z)\psi_{\mathbf{p}}(x,\ y,\ z). \tag{29,7}$$

ამ განტოლების ამონახსნი ვეძებოთ შემდეგი სამი ფუნქციის ნამრავლის სახით:

$$\psi_{\mathbf{p}}=\psi_{p_x}(x)\,\psi_{p_y}(y)\,\psi_{p_z}(z), \tag{29,8}$$

თუ შევიტანთ (29,8)-ს (29,7)-ში, მივიღებთ განტოლებათა სისტემას:

$$\begin{aligned}\frac{d\psi_{p_x}(x)}{dx}&=\frac{i}{\hbar}\,p_x\psi_{p_x}(x),\\ \frac{d\psi_{p_y}(y)}{dy}&=\frac{i}{\hbar}\,p_y\psi_{p_y}(y),\\ \frac{d\psi_{p_z}(z)}{dz}&=\frac{i}{\hbar}\,p_z\psi_{p_z}(z).\end{aligned} \tag{29,9}$$

ამ განტოლებების ამონახსნებს ექნება სახე:

$$\psi_{p_x}(x)=c_1e^{\frac{i}{\hbar}p_xx},\quad \psi_{p_y}(y)=c_2e^{\frac{i}{\hbar}p_yy}\qquad \psi_{p_z}(z)=c_3e^{\frac{i}{\hbar}p_zz} \tag{29,10}$$

ახლა საჭიროა განისაზღვროს საკუთარი მნიშვნელობები p_x, p_y, p_z. საკუთარი მნიშვნელობების განსაზღვრის საშუალებას მოგვცემს სასაზღვრო პირობები (სტანდარტული პირობები). (29,10) ფუნქციები უწყვეტია და აქვთ უწყვეტი წარმოებულები, ასევე ისინი ცალსახა ფუნქციებია. ეს ფუნქციები მხოლოდ და მხოლოდ მაშინ შეიძლება სასრული არ ყოფილიყო, p_x, p_y, p_z წარმოსახვითი რიცხვები რომ იყოს. მაგრამ $\hat{\mathbf{p}}$ ოპერატორი ერმ-ტულია, მაშასადამე, p_x, p_y, p_z ნამდვილი სიდიდეებია. (29,10) ფუნქციები ამიტომ სასრული იქნებიან ნებისმიერი p_x, p_y, p_z-სათვის $-\infty$ და $+\infty$ შუალედში, ე. ი. იმპულსის ოპერატორის სპექტრი ყოფილა უწყვეტი. (29,10) ფუნქციებში განსასაზღვრავი დაგვრჩა c_1, c_2, c_3 მუდმივები. რადგან იმპულსის ოპერატორის სპექტრი უწყვეტია, ამიტომ ნორმირება უნდა მოვახდინოთ დირაკის დელტა ფუნქციაზე. სახელდობრ, უნდა გვქონდეს

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\psi^*_{p'_x}(x)\psi_{p_x}(x)dx=\delta(p'_x-p_x).$$

თუ შევიტანთ ფუნქციების მნიშვნელობებს, მივიღებთ:

$$\int_{-\infty}^{+\infty}e^{\frac{i}{\hbar}(p'_x-p_x)x}\,dx=\delta(p'_x-p_x).$$

გავიხსენოთ (11,11) ფორმულა, მაშინ გვექნება:

$$c_1^2 2\pi\delta\left(\frac{p_x'-p_x}{\hbar}\right)=\delta(p_x'-p_x).$$

მაგრამ $a>0$ დროს $\delta(ax)=\frac{1}{a}\delta(x)$, ამიტომ

$$2\pi\hbar c_1^2\delta(p_x'-p_x)=\delta(p_x'-p_x),$$

თუ ამ გამოსახულებიდან ავიღებთ ინტეგრალს, გვექნება

$$2\pi\hbar c_1^2=1. \tag{29,11}$$

ამგვარად, იმპულსის სკალაზე ნორმირებულ ფუნქციას ექნება სახე:

$$\psi_{p_x}(x)=(2\pi\hbar)^{-1/2}\,e^{\frac{i}{\hbar}p_x x} \tag{29,12}$$

სრულიად ანალოგიურად მივიღებთ იგივე მნიშვნელობას c_1 და c_2 კოეფიციენტებისათვის, ხოლო სრული საკუთარი ფუნქციისათვის (29,8) ფორმულის თანახმად გვექნება

$$\psi_p(x,\,y,\,z)=(2\pi\hbar)^{-3/2}\,e^{\frac{i}{\hbar}(p_x x+p_y y+p_z z)} \tag{29,13}$$

ანდა

$$\psi_p(\mathrm{r})=(2\pi\hbar)^{-3/2}\,e^{\frac{i}{\hbar}(\mathrm{pr})} \tag{29,14}$$

რომელიც წარმოადგენს ბრტყელ ტალღას. მაშასადამე, იმპულსის ოპერატორის საკუთარი ფუნქცია ყოფილა ბრტყელი ტალღა.

სავარჯიშო მაგალითები

1. დაამტკიცოთ, რომ $[\hat{p}_l^n,\ x_l]=n\hat{p}_l^{n-1}$.

2. ეაჩვენოთ, რომ კომუტატორი $\hat{E}x-x\hat{E}$, სადაც $\hat{E}=\sqrt{a^2+\hat{p}_x^2}$, ტოლია შემდეგი გამოსახულებისა

$$\hat{E}x-x\hat{E}=-\frac{i\hat{p}_x\hbar}{\hat{E}}$$

მ ი თ ი თ ე ბ ა: $\hat{E}$ ოპერატორი უნდა გაიგოთ, როგორც $\sqrt{a^2+\hat{p}_x^2}$ ფესვის მწკრივად გაშლა.

3. დაამტკიცოთ, რომ $[\hat{p}_x,\ f(x)]=\left[\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x},\ f(x)\right]=\frac{\partial f}{\partial x}$.

§ 30. ნებისმიერი ფუნქციის გაშლა იმპულსის ოპერატორის საკუთარი ფუნქციების მიხედვით

რამდენადაც ჩვენ ვიპოვეთ იმპულსის ოპერატორის საკუთარი ფუნქციები, შეგვიძლია გამოვიყენოთ (13,10) ფორმულა და ნებისმიერი $F(\mathrm{r})$ ფუნქცია გავშალოთ ამ საკუთარი ფუნქციების ფურიეინტეგრალად.
გვექნება

$$F(\mathrm{r})=\frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\int_{-\infty}^{+\infty}a(\mathrm{p})e^{\frac{i}{\hbar}\mathrm{pr}}\,d\mathrm{p}, \tag{30,1}$$

სადაც ფურიეკომპონენტი $a(\mathbf{p})$ განისაზღვრება ფორმულით

$$a(\mathbf{p}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int_{-\infty}^{+\infty} F(\mathbf{r}) e^{-\frac{i}{\hbar}\mathbf{pr}} d\mathbf{r}. \tag{30,2}$$

ამ ფორმულებში $d\mathbf{p} = dp_x dp_y dp_z$ იმპულსური სივრცის მოცულობის ელემენტია.

იმპულსის ოპერატორის საკუთარ ფუნქციებად გაშლის ფორმულები ადვილად შეიძლება გამოვიყვანოთ დირაკის აბსტრაქტული სივრცის მეთოდის გამოყენებით. ჩვენ ვიცით, რომ $F(\mathbf{r}) = \langle \mathbf{r}|F\rangle$. მოვახდინოთ ერთეულოვანი

$$\int d\mathbf{p}\, |\mathbf{p}\rangle\langle \mathbf{p}\,| = 1 \tag{30,3}$$

ოპერატორის ჩასმა; გვექნება

$$\langle \mathbf{r}|F\rangle = \int \langle \mathbf{r}\,|\,\mathbf{p}\rangle\langle\, \mathbf{p}|\, F\rangle d\mathbf{p}. \tag{30,4}$$

(15,29) ფორმულის თანახმად $\langle \mathbf{r}\,|\,\mathbf{p}\rangle$ ფუნქცია გამოხატავს (29,14) ბრტყელ ტალღას, ამიტომ (30,4)-დან მივიღებთ

$$F(\mathbf{r}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{\frac{i}{\hbar}\mathbf{pr}} F(\mathbf{p}) dp, \tag{30,5}$$

ოღონდ დირაკის მეთოდის გამოყენების დროს უნდა გვახსოვდეს, რომ ფუნქცია და მისი ფურიეკომპონენტი ერთი და იგივე ასოთია აღნიშნული და მათ შორის განსხვავებას მიუთითებს მხოლოდ არგუმენტი.

სრულიად ანალოგიურად (30,2) ფორმულას მივიღებთ შემდეგი ტოლობიდან

$$\langle \mathbf{p}|F\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \langle \mathbf{p}\,|\,\mathbf{r}\rangle\langle \mathbf{r}\,|\,F\rangle d\mathbf{r}. \tag{30,6}$$

მართლაც, რამდენადაც $\langle \mathbf{p}|\mathbf{r}\rangle = \langle \mathbf{r}|\mathbf{p}\rangle^* = \psi_{\mathbf{p}}^*(\mathbf{r})$, მივიღებთ დასამტკიცებელ ტოლობას.

§ 31. იმპულსის მომენტის ოპერატორი

ახლა ვიპოვოთ იმპულსის მომენტის შესაბამისი ოპერატორი კოორდინატულ წარმოდგენაში. რამდენადაც იმპულსის ოპერატორი ნაპოვნი გვაქვს, მომენტის ოპერატორის სახის დადგენა სიძნელეს აღარ წარმოადგენს.

ნაწილაკის იმპულსის მომენტის ოპერატორის მოსაძებნად გავიხსენოთ, რომ კლასიკურ მექანიკაში ნაწილაკის იმპულსის მომენტი რაიმე ცენტრის მიმართ განისაზღვრება შემდეგი ფორმულით:

$$\mathbf{l} = [\mathbf{r} \times \mathbf{p}], \tag{31.1}$$

ან, მდგენელებში,

$$\begin{aligned} l_x &= yp_z - zp_y, \\ l_y &= zp_x - xp_z, \\ l_z &= xp_y - yp_x, \end{aligned} \tag{31,2}$$

სადაც $\mathbf{r}$ ნაწილაკის რადიუსვექტორია, $\mathbf{p}$ კი—მისი იმპულსი. კვანტური მექანიკის ძირითადი ჰიპოთეზის თანახმად, იმპულსის მომენტი იგივე ფორმულებით განი-

საზღვრება, ოღონდ ჩვეულებრივი სიდიდეების ნაცვლად უნდა ვიგულისხმოთ სათანადო ოპერატორები; თუ გავიხსენებთ იმპულსის ოპერატორის გამოსახულებას, მივიღებთ, რომ იმპულსის მომენტის მდგენელების ოპერატორებს „x-წარმოდგენაში“ აქვთ შემდეგი სახე:

$$\hat{l}_x = \frac{\hbar}{i}\left(y\,\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}\right),$$

$$\hat{l}_y = \frac{\hbar}{i}\left(z\,\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}\right), \tag{31,3}$$

$$\hat{l}_z = \frac{\hbar}{i}\left(x\,\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right).$$

სანამ საკუთარი ფუნქციებისა და საკუთარი მნიშვნელობების მოძებნაზე გადავიდოდეთ, შევისწავლოთ მომენტის ოპერატორის ზოგადი თვისებები.

ვიპოვოთ მომენტის პროექციების კომუტაციის თვისებები კოორდინატებთან, იმპულსებთან და ა. შ. თუ გავიხსენებთ პუასონის ფრჩხილების (16,16) თვისებას და, რომ $[\hat{p}_i, \hat{p}_k] = [x_i, x_k] = 0$ ასევე $[\hat{p}_i, \hat{x}_k] = \delta_{ik}$, მივიღებთ:

$$[\hat{l}_x, x] = [y\hat{p}_z, x] - [z\hat{p}_y, x] = 0,$$

$$[\hat{l}_y, y] = [z\hat{p}_x, y] - [x\hat{p}_z, y] = 0, \tag{31,4}$$

$$[\hat{l}_z, z] = [x\hat{p}_y, z] - [y\hat{p}_z, z] = 0$$

ასევე

$$[\hat{l}_x, y] = [y\hat{p}_z, y] - [z\hat{p}_y, y] = -z\,[\hat{p}_y, y] = -z$$
$$[\hat{l}_y, z] = [z\hat{p}_x, z] - [x\hat{p}_z, z] = -x\,[\hat{p}_z, z] = -x \tag{31,5}$$

და ა. შ. ადვილად დავინახავთ, რომ საზოგადოდ $\mathcal{E}_{imn}$ ტენზორის დახმარებით შეიძლება დავწეროთ[1]

$$[\hat{l}_i, x_m] = -\mathcal{E}_{imn}x_n; \tag{31,6}$$

ასე, მაგალითად,

$$[\hat{l}_y, x] = -\mathcal{E}_{213}r_3 = z, \qquad [\hat{l}_x, z] = -\mathcal{E}_{132}x_2 = y \qquad \text{და ა. შ.}$$

ახლა ვიპოვოთ მომენტისა და იმპულსის ოპერატორის კომუტაციის ფორმულები. თუ გავიხსენებთ, რომ $\left[\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}, f(x)\right] = \frac{\partial f}{\partial x}$, ვღებულობთ:

$$[\hat{l}_x, \hat{p}_x] = -\frac{\partial}{\partial x}\hat{l}_x = -\frac{\partial}{\partial x}\,(y\hat{p}_z - z\hat{p}_y) = 0,$$

$$[\hat{l}_y, \hat{p}_y] = -\frac{\partial}{\partial y}\,(zp_x - x\hat{p}_z) = 0, \tag{31,7}$$

$$[\hat{l}_z, \hat{p}_z] = -\frac{\partial}{\partial z}\,(x\hat{p}_y - y\hat{p}_x) = 0.$$

---

[1] $\mathcal{E}_{imn}$-ტენზორის თვისებების შესახებ იხილეთ: ვ. მამასახლისოვი, გ. ჯილაშვილი, თეორიული ფიზიკა, I შეკრება, 1967.

ასევე

$$[\hat{l}_x,\ \hat{p}_y]=-\frac{\partial}{\partial y}\hat{l}_x=-\frac{\partial}{\partial y}(y\hat{p}_z-z\hat{p}_y)=-p_z.$$

ან ზოგადად,

$$[\hat{l}_i,\hat{p}_m]=-\mathcal{E}_{imn}\hat{p}_n. \tag{31,8}$$

ვიპოვოთ ბოლოს $[\hat{l}_i,\hat{l}_m]$ ფრჩხილების გამოსახულება. აშკარაა, $[\hat{l}_x,\ \hat{l}_x]=[\hat{l}_y,\ \hat{l}_y]=[\hat{l}_z,\ \hat{l}_z]=0$. შემდეგ, (31,8) ფორმულების გათვალისწინებით ადვილად მივიღებთ

$$[\hat{l}_x,\ \hat{l}_y]=[\hat{l}_x,\ z\hat{p}_x-x\hat{p}_z]=[\hat{l}_x,\ z\hat{p}_x]-[\hat{l}_x,\ x\hat{p}_z]=$$

$$=[\hat{l}_x,\ z]\hat{p}_x-x[\hat{l}_x,\hat{p}_z]=-\mathcal{E}_{132}y\hat{p}_x+x\mathcal{E}_{132}p_y=y\hat{p}_x-x\hat{p}_y=-\hat{l}_z \tag{31,8'}$$

სრულიად ანალოგიურად მიიღება ფორმულები $\hat{l}_x$, $\hat{l}_y$, $\hat{l}_z$-ის სხვა კომბინაციებისათვის; ასე, რომ, საზოგადოდ, შეგვიძლია დაეწეროთ:

$$[\hat{l}_i,\hat{l}_m]=-\mathcal{E}_{imn}\hat{l}_n. \tag{31,9}$$

მიღებული ფორმულა გვიჩვენებს, რომ მომენტის მდგენელების ოპერატორები ერთმანეთთან კომუტატური არ არის, ე. ი. მათ არ შეიძლება ჰქონდეთ საერთო საკუთარი ფუნქციები.

ახლა ვაჩვენოთ, რომ მომენტის კვადრატის ოპერატორი კომუტატურია მომენტის მდგენელების ოპერატორებთან. მართლაც, რადგან

$$\hat{l}^2=\hat{l}_x^2+\hat{l}_y^2+\hat{l}_z^2, \tag{31,10}$$

თანახმად (16,16) ფორმულისა გვექნება

$$[\hat{l}^2,\ \hat{l}_z]=[\hat{l}_x^2,\ \hat{l}_z]+[\hat{l}_y^2,\ \hat{l}_z]+[\hat{l}_z^2,\ \hat{l}_z]=$$

$$=\hat{l}_x[\hat{l}_x,\ \hat{l}_z]+[\hat{l}_x,\ \hat{l}_z]\hat{l}_x+\hat{l}_y[\hat{l}_y,\ \hat{l}_z]+[\hat{l}_y,\ \hat{l}_z]\hat{l}_y. \tag{31,11}$$

თუ გამოვიყენებთ (31,9) ფორმულას, მივიღებთ

$$[\hat{l}^2,\ \hat{l}_z]=-\mathcal{E}_{132}(\hat{l}_x\hat{l}_y+\hat{l}_y\hat{l}_x)-\mathcal{E}_{231}(\hat{l}_y\hat{l}_x+\hat{l}_x\hat{l}_y)=$$

$$=\hat{l}_x\hat{l}_y+\hat{l}_y\hat{l}_x-(\hat{l}_x\hat{l}_y+\hat{l}_y\hat{l}_x)=0. \tag{31,12}$$

სავსებით ანალოგიურად ვაჩვენებთ, რომ $\hat{l}_y$, $\hat{l}_z$ მდგენელებიც კომუტატურებია $\hat{l}^2$-თან; ამგვარად, გვაქვს

$$[\hat{l}^2,\ \hat{l}_x]=[\hat{l}^2,\ \hat{l}_y]=[\hat{l}^2,\ \hat{l}_z]=0. \tag{31,13}$$

რადგან $\hat{l}_x$, $\hat{l}_y$, $\hat{l}_z$ ოპერატორები ერთმანეთთან კომუტატური არ არის, ამიტომ საერთო საკუთარი ფუნქცია შეიძლება ჰქონდეს მხოლოდ $\hat{l}^2$ და მომენტის რომელიმე ერთ მდგენელს.

ჩვენ ვხედავთ, რომ პაულისონის კვანტური ფრჩხილების გამოსახულებანი ფიზიკური სიდიდეებიდან სავსებით ისეთივეა, როგორც კლასიკურ მექანიკაში, ოღონდ კვანტურ მექანიკაში ნაცვლად ამ სიდიდეებისა, განიხილება მათი ოპერატორები.

მომენტის ოპერატორისათვის ხშირად ხელსაყრელია სფერულ კოორდინატებზე გადასვლა. ამ მიზნით შემოვიღოთ სფერული კოორდინატები:

$$\begin{aligned} x &= r\sin\theta\cos\varphi, \quad 0\leqslant r\leqslant\infty \\ y &= r\sin\theta\sin\varphi, \quad 0\leqslant\theta\leqslant\pi \\ z &= r\cos\theta, \quad 0\leqslant\varphi\leqslant 2\pi \end{aligned} \tag{32,1}$$

ან, რაც იგივეა,

$$\begin{aligned} x \pm iy &= r\sin\theta\, e^{\pm i\varphi} \\ z &= r\cos\theta. \end{aligned} \tag{32,1'}$$

განვიხილოთ ოპერაცია $\frac{\partial}{\partial\varphi}$. გვექნება

$$\frac{\partial}{\partial\varphi} = \frac{\partial}{\partial x}\frac{\partial x}{\partial\varphi} + \frac{\partial}{\partial y}\frac{\partial y}{\partial\varphi} + \frac{\partial}{\partial z}\frac{\partial z}{\partial\varphi}, \tag{32,2}$$

რადგან $\frac{\partial x}{\partial\varphi} = -r\sin\theta\sin\varphi = -y$, $\frac{\partial y}{\partial\varphi} = r\sin\theta\cos\varphi = x$ და $\frac{\partial z}{\partial\varphi} = 0$, ამიტომ უკანასკნელი ფორმულა მიიღებს სახეს:

$$\frac{\partial}{\partial\varphi} = x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}. \tag{32,3}$$

მაშასადამე, თუ გავიხსენებთ (31,3) ფორმულას, შეიძლება დავწეროთ

$$\hat{l}_z = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\varphi}; \tag{32,4}$$

ამგვარად, მომენტის z მდგენელის ოპერატორი გამოვხატეთ სფერულ კოორდინატებში. დანარჩენი ორი მდგენელის გამოსახატავად სფერულ კოორდინატებში ხელსაყრელია ჯერ $\hat{l}_x \pm i\hat{l}_y$ კომბინაციების გამოხატვა ამ კოორდინატებში. თუ გავითვალისწინებთ (32,1) ფორმულებს, ადვილად მივიღებთ

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial\theta} &= \frac{\partial}{\partial x}\frac{\partial x}{\partial\theta} + \frac{\partial}{\partial y}\frac{\partial y}{\partial\theta} + \frac{\partial}{\partial z}\frac{\partial z}{\partial\theta} = \\ &= \operatorname{ctg}\theta\left(x\frac{\partial}{\partial x} + y\frac{\partial}{\partial y}\right) - z\frac{\partial}{\partial z}\operatorname{tg}\theta. \end{aligned} \tag{32,5}$$

(31,3) ფორმულებიდან შევადგინოთ $(\hat{l}_x + i\hat{l}_y)$ კომბინაცია. მარტივი დაჯგუფების შემდეგ მივიღებთ

$$(\hat{l}_x + i\hat{l}_y)\psi = \hbar\left\{iz\frac{\partial\psi}{\partial y} + z\frac{\partial\psi}{\partial x} - (x+iy)\frac{\partial\psi}{\partial z}\right\}. \tag{32,6}$$

(32,1') ფორმულების დახმარებით გვექნება

$$\begin{aligned} (\hat{l}_x + i\hat{l}_y)\,\psi &= \hbar\, e^{i\varphi}\left\{ire^{-i\varphi}\cos\theta\frac{\partial\psi}{\partial y} + \right. \\ &\left. + re^{-i\varphi}\cos\theta\frac{\partial\psi}{\partial x} - r\sin\theta\frac{\partial\psi}{\partial z}\right\} = \hbar\, e^{i\varphi}\left\{i(x-iy)\operatorname{ctg}\theta\frac{\partial\psi}{\partial y} + \right. \end{aligned}$$

$$+(x-iy)\operatorname{ctg}\theta\frac{\partial\psi}{\partial x}-r\sin\theta\frac{\partial\psi}{\partial z}\Big\} = \hbar e^{i\varphi}\Big\{\operatorname{ctg}\theta\Big(x\frac{\partial\psi}{\partial x}+y\frac{\partial\psi}{\partial y}\Big)+$$

$$+ i\operatorname{ctg}\theta\Big(x\frac{\partial\psi}{\partial y}-y\frac{\partial\psi}{\partial x}\Big)-z\operatorname{tg}\theta\frac{\partial\psi}{\partial z}\Big\}. \qquad (32,7)$$

თუ გავითვალისწინებთ (32,5) ფორმულას, შეიძლება დავწეროთ

$$(\hat{l}_x + i\hat{l}_y)=\hbar e^{i\varphi}\Big\{\frac{\partial}{\partial\theta}+ i\operatorname{ctg}\theta\frac{\partial}{\partial\varphi}\Big\}. \qquad (32,8)$$

(31,3) ფორმულიდან ჩანს, რომ $\hat{l}_x$ და $\hat{l}_y$ წმინდა ვითარსი სიდიდეებია, ამიტომ $(\hat{l}_x + i\hat{l}_y)^*=(-\hat{l}_x + i\hat{l}_y)=-(\hat{l}_x - i\hat{l}_y)$ და, მაშასადამე, (32,8) ფორმულის თანახმად $(\hat{l}_x - i\hat{l}_y)$ ოპერატორისათვის სფერულ კოორდინატებში მივიღებთ

$$(\hat{l}_x - i\hat{l}_y)=-\hbar e^{-i\varphi}\Big\{\frac{\partial}{\partial\theta}-i\operatorname{ctg}\theta\frac{\partial}{\partial\varphi}\Big\}; \qquad (32,9)$$

(32,8) და (32,9) ფორმულებიდან შეიძლება განვსაზღვროთ $\hat{l}_x$ და $\hat{l}_y$-ის სახე სფერულ კოორდინატებში; რადგან შემდგომში ამ ოპერატორების გამოსახულებებს სფერულ კოორდინატებში არ გამოვიყენებთ, ამიტომ ამ განსაზღვრაზე აღარ შევჩერდებით.

ჩვენთვის დიდი მნიშვნელობა ექნება მომენტის კვადრატის ოპერატორის სახის დადგენას სფერულ კოორდინატებში. ამას ადვილად მოვახერხებთ (32,8) და (32,9) ფორმულების დახმარებით; მართლაც, ადვილად შევამოწმებთ, რომ ადგილი აქვს შემდეგ იგივეობას.

$$\hat{l}^2 = \hat{l}_x^2 + \hat{l}_y^2 + \hat{l}_z^2=(\hat{l}_x+ i\hat{l}_y)\ (\hat{l}_x -i\hat{l}_y)- i(\hat{l}_y\hat{l}_x - \hat{l}_x\hat{l}_y) + \hat{l}_z^2 \qquad (32,10)$$

ან, (31,8′) ფორმულის თანახმად,

$$\hat{l}^2 = (\hat{l}_x+ i\hat{l}_y)\ (\hat{l}_x- i\hat{l}_y)-\hbar\hat{l}_z + \hat{l}_z^2. \qquad (32,11)$$

ვიპოვოთ ჯერ $(\hat{l}_x+i\hat{l}_y)(\hat{l}_x - i\hat{l}_y)$ გამოსახულება. თანახმად (32,8) და (32,9) ფორმულებისა შეგვიძლია დავწეროთ:

$$(\hat{l}_x + i\hat{l}_y)\ (\hat{l}_x -i\hat{l}_y)\psi =$$

$$=-\hbar^2 e^{i\varphi}\Big\{\frac{\partial}{\partial\theta}+i\operatorname{ctg}\theta\ \frac{\partial}{\partial\varphi}\Big\}\Big\{e^{-i\varphi}\frac{\partial\psi}{\partial\theta}-i\Big(e^{-i\varphi}\operatorname{ctg}\theta\frac{\partial\psi}{\partial\varphi}\Big)\Big\}. \qquad (32,12)$$

გაწარმოების ოპერაციის ჩატარების შემდეგ მივიღებთ

$$(\hat{l}_x + i\hat{l}_y)\ (\hat{l}_x - i\hat{l}_y)=-\hbar^2\Big\{\frac{\partial^2}{\partial\theta^2}+\operatorname{ctg}\theta\frac{\partial}{\partial\theta}+\operatorname{ctg}^2\theta\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}+i\frac{\partial}{\partial\varphi}\Big\}; \qquad (32,13)$$

თუ შევიტანთ (32,13) და $\hat{l}_z=\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\varphi}$ გამოსახულებას (32,11)-ში, გვექნება

$$\hat{l}^2 = -\hbar^2 \left\{ \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \operatorname{ctg} \theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right\} \tag{32,14}$$

ან

$$\hat{l}^2 = -\hbar^2 \Delta_{\theta,\varphi} \tag{32,15}$$

სადაც

$$\Delta_{\theta,\varphi} = \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}. \tag{32,16}$$

არის ლაპლასის ოპერატორის კუთხური ნაწილი. მას ხშირად ლეჟანდრის ოპერატორსაც უწოდებენ. ამგვარად, მომენტის კვადრატის ოპერატორი ლეჟანდრის ოპერატორთან დაკავშირებული ყოფილა (32,15) ფორმულით.

§ 33. მომენტის მდგენელისა და კვადრატის ოპერატორის საკუთარი ფუნქციები და საკუთარი მნიშვნელობები

რადგან მომენტის კვადრატის ოპერატორი კომუტატურია მომენტის მდგენელის ოპერატორთან, ამიტომ ამ ორ ოპერატორს ექნება საერთო საკუთარი ფუნქცია. ვიპოვოთ ჯერ მომენტის z მდგენელის ოპერატორის საკუთარი ფუნქციები და საკუთარი მნიშვნელობები. ამისათვის დავწეროთ საკუთარი ფუნქციებისა და საკუთარი მნიშვნელობების განტოლება

$$\hat{l}_z \Phi = l_z \Phi. \tag{33,1}$$

თუ შევიტანთ $\hat{l}_z = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \varphi}$, მივიღებთ

$$\frac{\partial \Phi}{\partial \varphi} = \frac{i l_z}{\hbar} \Phi. \tag{33,1'}$$

l_z არის მომენტის z მდგენელის ოპერატორის საკუთარი მნიშვნელობა. ამ განტოლების ამოხსნას ექნება შემდეგი სახე:

$$\Phi = c f(r, \theta) \exp\left(\frac{i l_z \varphi}{\hbar} \right), \tag{33,2}$$

სადაც $c = \text{const}$, $f(r, \theta)$ კი r და θ ნებისმიერი ფუნქციაა. მოითხოვება, რომ Φ ფუნქცია იყოს უწყვეტი, სასრული და ცალსახა. ამ ფუნქციის უწყვეტობა და სასრულობა აშკარაა. რადგან φ იცვლება 0 და 2π შუალედში, ამიტომ როდესაც 2π კუთხის შემოწერის შემდეგ φ დაუბრუნდება თავის საწყის მნიშვნელობას, $\Phi(\varphi)$ ფუნქციის ცალსახობისათვის საჭიროა, რომ მისი მნიშვნელობაც $(\varphi + 2\pi)$-ზე თავის თავს დაებრუნდეს. ამგვარად, $\Phi(\varphi)$ ფუნქციის ცალსახობისათვის საჭიროა Φ ფუნქცია იყოს პერიოდული 2π პერიოდით, ანუ

$$\Phi(\varphi + 2\pi) = \Phi(\varphi). \tag{33,2'}$$

ამ პირობის გამოყენება (33,2)-ზე მოგვცემს

$$\exp\left[\frac{i l_z (\varphi + 2\pi)}{\hbar} \right] = \exp\left(\frac{i l_z \varphi}{\hbar} \right).$$

ეს ტოლობა კი მხოლოდ მაშინ იქნება დაცული, როცა $\exp\left(\frac{i l_z}{\hbar} 2\pi \right) = 1$. ამისათვის კი საჭიროა, რომ

$$l_z = m\hbar, \tag{33,3}$$

სადაც m მთელი დადებითი ან უარყოფითი რიცხვია ნულის ჩათვლით, ე. ი.

$$m = 0,\ \pm 1,\ \pm 2,\ \pm 3 \pm \ldots$$

ამგვარად, მოძრაობის რაოდენობის მომენტის მდგენელის (ჩვენს შემთხვევაში z მდგენელის) საკუთარი მნიშვნელობა იკვანტება. მას შეუძლია მიიღოს პლანკის მუდმივის მხოლოდ მთელი ჯერადი მნიშვნელობანი. ამასთან, მისი მნიშვნელობები დამოკიდებულია m მთელ რიცხვზე. ამ რიცხვს მაგნიტურ კვანტურ რიცხვს უწოდებენ. მაშასადამე, მომენტის z მდგენელის ოპერატორის საკუთარ ფუნქციებს ექნებათ შემდეგი სახე:

$$\Phi(\varphi) = cf(r, \theta)e^{im\varphi}. \tag{33,4}$$

შემდგომი მიზნებისათვის მნიშვნელოვანია ამ ფუნქციის მხოლოდ φ-ზე დამოკიდებული ნაწილის შესწავლა. აღვნიშნოთ

$$\Phi_m(\varphi) = c\ e^{im\varphi}. \tag{33,4'}$$

c მუდმივი შეგვიძლია განვსაზღვროთ ნორმირების პირობიდან; რადგან მომენტის მდგენელისათვის მივიღეთ დისკრეტული სპექტრი, ამიტომ ნორმირების პირობას ექნება შემდეგი სახე:

$$\int_0^{2\pi} \Phi_m^* \Phi_m d\Phi = 1. \tag{33,4''}$$

თუ შევიტანთ Φ_m-ის მნიშვნელობას (33,4')-დან, მივიღებთ $c = (2\pi)^{-1/2}$. ამგვარად, მომენტის z მდგენელის ნორმირებული ფუნქციისათვის გვექნება

$$\Phi_m(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\, e^{im\varphi} \tag{33,5}$$

(11,3) ფორმულის თანახმად ნათელია, რომ $\Phi_m(\varphi)$ ფუნქციები ორთოგონალურიც არიან.

ახლა ვიპოვოთ მომენტის კვადრატის საკუთარი ფუნქციები და საკუთარი მნიშვნელობები. $\hat{\mathbf{l}}^2$-ის საკუთარი მნიშვნელობა აღვნიშნოთ l^2, მაშინ საკუთარი ფუნქციებისა და საკუთარი მნიშვნელობების განტოლებას ექნება შემდეგი სახე:

$$\hat{\mathbf{l}}^2 Y(\theta, \varphi) = l^2 Y(\theta, \varphi). \tag{33,6}$$

თუ შევიტანთ $\hat{\mathbf{l}}^2$ ოპერატორის გამოსახულებას (32,15) და (32,16) ფორმულებიდან, გვექნება

$$\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\,\frac{\partial Y}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2 Y}{\partial\varphi^2} + \frac{l^2}{\hbar^2}Y = 0. \tag{33,7}$$

ეს კი წარმოადგენს სფერული ფუნქციების განტოლებას. საჭიროა ვიპოვოთ ამ განტოლების ისეთი ამოხსნა, რომელიც აკმაყოფილებს სტანდარტულ პირობებს (უწყვეტობა, სასრულობა, ცალსახობა). მათემატიკიდან ცნობილია, რომ ამ სასაზღვრო პირობებში (33,7) განტოლებას ამოხსნა აქვს მხოლოდ მაშინ, როცა შესრულებულია პირობა

$$\frac{l^2}{\hbar^2} = l(l+1). \tag{33,7'}$$

სადაც l არის მთელი დადებითი რიცხვი ნულის ჩათვლით. მაშასადამე, მომენტის კვადრატის საკუთარი მნიშვნელობებისათვის მივიღებთ

$$l^2=\hbar^2 l(l+1), \tag{33,8}$$

ე. ი. მომენტის კვადრატი იკვანტება. l-ს უწოდებენ აზიმუტალურ კვანტურ რიცხვს. ცნობილია, რომ ყოველი მოცემული l-ისათვის არსებობს (33,7) განტოლების წრფივად დამოუკიდებელი $2l+1$ ამონახსნი. ეს ამონახსნები სფერულ ფუნქციებს წარმოადგენენ; ისინი დამოკიდებული არიან ორ მთელ რიცხვზე l-ზე და m-ზე. ამ ფუნქციებს $Y_{lm}(\theta,\varphi)$-თი აღნიშნავენ და განმარტავენ შემდეგნაირად:

$$Y_{lm}(\theta,\varphi)=(-1)^m\sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}\frac{(l-m)!}{(l+m)!}}P_{lm}(\cos\theta)e^{im\varphi} \tag{33,9}$$

აქ $m=0,\pm1,\pm2,\pm,\ldots\pm l$, ე. ი. m იღებს სულ $2l+1$ მნიშვნელობას. ეს ფუნქციები ორთო-ნორმირებულია პირობით

$$\int_0^{\pi}\int_0^{2\pi}Y^*_{l'm'}(\theta,\varphi)Y_{lm}(\theta,\varphi)d\Omega=\delta_{ll'}\delta_{mm'}, \tag{33,10}$$

სადაც

$$d\Omega=\sin\theta d\theta d\varphi \tag{33,11}$$

სხეულოვანი კუთხეა.

(33,9) განმარტებაში შემავალ $P_{lm}(\cos\theta)$-ს ლეჟანდრის მიკავშირებულ პოლინომს უწოდებენ. იგი ლეჟანდრის $P_l(\cos\theta)$ პოლინომთან

$$P_l(\xi)=\frac{1}{2^l l!}\frac{d^l}{d\xi^l}(\xi^2-1)^l, \quad (\xi=\cos\theta) \tag{33,12}$$

შემდეგნაირადაა დაკავშირებული

$$P_{lm}(\xi)=(1-\xi^2)^{\frac{m}{2}}\frac{d^m}{d\xi^m}P_l(\xi), \tag{33,13}$$

სადაც $0\leqslant m\leqslant l$. როცა $|m|>l$, მაშინ, ცხადია, $P_{lm}(\xi)=0$. ნათელია, რომ ლეჟანდრის მიკავშირებული პოლინომი ასეც შეგვიძლია წარმოვიდგინოთ:

$$P_{lm}(\xi)=\frac{(-1)^{l+m}}{2^l l!}\frac{(l+m)!}{(l-m)!}(1-\xi^2)^{-\frac{m}{2}}\frac{d^{l-m}}{d\xi^{l-m}}(1-\xi^2)^l. \tag{33,14}$$

ეს გამოსახულება განმარტებულია m-ის ორივე ნიშნისათვის და $-l\leqslant m\leqslant+l$. აღვილი დასანახია, რომ $P_{l0}(\xi)=P_l(\xi)$ და შესრულებულია ტოლობა

$$P_{lm}(-\xi)=(-1)^{l+m}P_{lm}(\xi) \tag{33,15}$$

როგორც ლეჟანდრის, ისე ლეჟანდრის მიკავშირებული პოლინომები ორთო-ნორმირებელი არიან; სახელდობრ,

$$\int_{-1}^{+1}P_{l'}(\xi)P_l(\xi)d\xi=\frac{2}{2l+1}\delta_{ll'} \tag{33,16}$$

და

$$\int_{-1}^{+1}P_{l'm}(\xi)P_{lm}(\xi)d\xi=\frac{2}{2l+1}\frac{(l+m)!}{(l-m)!}\delta_{ll'}. \tag{33,17}$$

აშკარაა, რომ სფერული ფუნქციებისათვის გვექნება შემდეგი დამოკიდებულება:

$$Y^*_{lm}(\theta, \varphi) = (-1)^m Y_{l-m}(\theta, \varphi) \tag{33,18}$$

ამ ტოლობის სამართლიანობა ადვილად შემოწმდება სფერული ფუნქციის განმარტებიდან და ლეჟანდრის მიკავშირებული პოლინომის შემდეგი თვისებიდან:

$$P_{l-m}(\xi) = (-1)^m \frac{(l-m)!}{(l+m)!} P_{lm}(\xi). \tag{33,19}$$

ასევე ადვილად ვაჩვენებთ, რომ

$$Y_{lm}(\pi-\theta,\ \pi+\varphi) = (-1)^l Y_{lm}(\theta, \varphi) \tag{33,20}$$

მტკიცდება, რომ ადგილი აქვს მეტად მნიშვნელოვან დამოკიდებულებას, რომელსაც შეკრების ფორმულას უწოდებენ. ამ ფორმულას აქვს შემდეგი სახე:

$$P_l(\cos\theta) = \frac{4\pi}{2l+1} \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^{+l} Y^*_{lm}(\theta_1, \varphi_1) Y_{lm}(\theta_2, \varphi_2), \tag{33,21}$$

სადაც θ არის კუთხე (θ_1, φ_1) და (θ_2, φ_2) კუთხეებით განსაზღვრულ ორ მიმართულებას შორის.

მოვიტანოთ სფერული ფუნქციების გამოსახულება l-ის რამდენიმე მნიშვნელობისათვის. ავიღოთ $l=0$ $(m=0)$, $l=1$ $(m=0,\ \pm 1)$ და $l=2$ $(m=0,\ \pm 1, \pm 2)$. გვექნება:

$$Y_{00}(\theta, \varphi) = (4\pi)^{-\frac{1}{2}}, \tag{33,22}$$

$$Y_{10}(\theta,\ \varphi) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos\theta, \tag{33,23}$$

$$Y_{1\pm 1}(\theta,\ \varphi) = \pm \sqrt{\frac{3}{8\pi}}\ \sin\theta e^{\pm i\varphi}, \tag{33,24}$$

$$Y_{20}(\theta,\ \varphi) = \sqrt{\frac{5}{16\pi}}\ (3\cos^2\theta - 1), \tag{33,25}$$

$$Y_{2\pm 1}(\theta) = \pm \sqrt{\frac{15}{8\pi}}\ \sin\theta\cos\theta\ e^{\pm i\varphi}, \tag{33,26}$$

$$Y_{2\pm 2}(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{15}{32\pi}}\ \sin^2\theta\ e^{\pm 2i\varphi} \tag{33,27}$$

ცხადია, კერძო შემთხვევაში, როცა $m=0$, გვექნება კავშირი

$$P_l(\cos\theta) = \left(\frac{4\pi}{2l+1}\right)^{\frac{1}{2}} Y_{l0}(\theta). \tag{33,28}$$

დაბოლოს აღვნიშნოთ, რომ სამართლიანია შემდეგი რეკურენტული ფორმულები:

$$\cos\theta\, Y_{lm}(\theta, \varphi) = \left\{\frac{(l-m+1)(l+m+1)}{(2l+1)(2l+3)}\right\}^{\frac{1}{2}} Y_{l+1,m}(\theta, \varphi) +$$

$$+ \left\{\frac{(l-m)(l+m)}{(2l-1)(2l+1)}\right\}^{\frac{1}{2}} Y_{l-1,m}(\theta, \varphi) \tag{33,29}$$

$$\sin\theta\, Y_{lm}(\theta,\varphi) = \left\{\left[\frac{(l+m+1)(l+m+2)}{(2l+1)(2l+3)}\right]^{\frac{1}{2}} Y_{l+1,\,m+1}(\theta,\varphi) - \right.$$

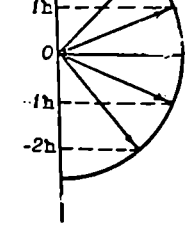
$$\left. - \left[\frac{(l-m)(l-m-1)}{(2l-1)(2l+1)}\right]^{\frac{1}{2}} Y_{l-1,\,m+1}(\theta,\varphi)\right\} e^{-i\varphi}, \qquad (33{,}30)$$

$$\sin\theta\, Y_{lm}(\theta,\varphi) = -\left\{\left[\frac{(l-m+1)(l-m+2)}{(2l+1)(2l+3)}\right]^{\frac{1}{2}} Y_{l+1,m-1}(\theta,\varphi) + \right.$$

$$\left. + \left[\frac{(l+m)(l+m-1)}{(2l-1)(2l+1)}\right]^{\frac{1}{2}} Y_{l-1,m-1}(\theta,\varphi)\right\} e^{i\varphi}. \qquad (33{,}31)$$

! როგორც ვხედავთ, მომენტის კვადრატის საკუთარი მნიშვნელობები დამოკიდებულია მხოლოდ ერთ l კვანტურ რიცხვზე, მაშინ როცა საკუთარი ფუნქციები $Y_{lm}(\theta,\varphi)$ ორ l და m კვანტურ რიცხვებზეა დამოკიდებული. ამიტომ ერთ საკუთარ მნიშვნელობას შეესაბამება $2l+1$ საკუთარი ფუნქცია, რაც ნიშნავს, რომ ადგილი აქვს $2l+1$ ჯერად გადაგვარებას. კერძო შემთხვევაში, როცა $l=0$, მაშინ $m=0$ და გადაგვარება არა გვაქვს.

ამ პარაგრაფის დასაწყისში აღვნიშნეთ, რომ $\hat{l}^2$ და $\hat{l}_z$ ოპერატორებს საერთო საკუთარი ფუნქცია უნდა ჰქონდეთ. ადვილად დავინახავთ, რომ (33,9) ფუნქცია, რომელიც $\hat{l}^2$-ის საკუთარ ფუნქციას წარმოადგენს, აკმაყოფილებს აგრეთვე (33,1′) განტოლებას. მართლაც, თუ შევიტანთ $Y_{lm}(\theta,\varphi)$ ფუნქციას (33,1′)-ში, მივიღებთ $m=l_z/\hbar$, რაც ემთხვევა (33,3). ამგვარად $Y_{lm}(\theta,\varphi)$-ს m ინდექსი ყოფილა l_z-ის საკუთარი მნიშვნელობების დამახასიათებელი, მაგნიტური კვანტური რიცხვი.



ნახ. 3.

მოვიტანოთ ზემოთ მიღებული შედეგების გეომეტრიული ინტერპრეტაცია. (33,8) ფორმულიდან გვაქვს

$$|\mathbf{l}| = \hbar\sqrt{l(l+1)}, \qquad (33{,}32)$$

საიდანაც გამომდინარეობს, რომ მომენტი არ შეიძლება ნებისმიერი იყოს, ხოლო (23,3) ფორმულის თანახმად მომენტის ვექტორს სივრცეში ისეთი მიმართულება უნდა ჰქონდეს, რომ მისი მდგენელი z-ღერძზე მხოლოდ და მხოლოდ $m\hbar$ მნიშვნელობებს იღებდეს. ავიღოთ z-ღერძი და მის რომელიმე წერტილში მოვდოთ მომენტის ვექტორი. შემოვახაზოთ ამ წერტილის ირგვლივ ისეთი ნახევარი წრე, რომლის რადიუსია $|\mathbf{l}| = \hbar\sqrt{l(l+1)}$, მაშინ მომენტის ვექტორი ისეთ ორიენტაციას უნდა იკავებდეს სივრცეში, რომ მას z-ღერძზე ჰქონდეს მხოლოდ შემდეგი მდგენელები:

$$l_z = \hbar l,\ \hbar(l-1),\ldots\ \hbar,\ 0,\ -\hbar,\ldots\ -\hbar(l-1),\ -\hbar l. \qquad (33{,}33)$$

ჩვენ ვხედავთ, რომ კვანტურ მექანიკაში მომენტის ვექტორი იმით ხასიათდება, რომ, ჯერ ერთი, მას შეუძლია სივრცეში მიიღოს მხოლოდ მკაცრად განსაზღვრული ორიენტაცია და, მეორე, მომენტის ვექტორის სიგრძე არ ემთხვევა

მის მაქსიმალურ პროექციას $|l| \neq l\hbar$. ასეთ ვექტორებს კვანტურ ვექტორებს უწოდებენ.

იმ კერძო შემთხვევაში, როცა $l \geqslant 1$ (33,8) ფორმულის თანახმად შეგვიძლია დავწეროთ $l \simeq l\hbar$, რაც ბორის დაკვანტვის პირობას ემთხვევა. მაშინ მომენტის ვექტორის მაქსიმალური პროექცია მომენტის ვექტორის სიგრძეს უტოლდება.

მე-3 ნახაზზე მოტანილია კერძო შემთხვევა, როცა $l=2$. ამ შემთხვევაში მომენტის სიდიდე $|l| = \sqrt{2 \cdot 3}\,\hbar = \sqrt{6}\,\hbar$ და მას ექნება მხოლოდ პროექციები: $l_z = 2\hbar, 1\hbar, 0, -1\hbar, -2\hbar$, ე. ი. მომენტის ვექტორმა შეიძლება მიიღოს მხოლოდ 5 ორიენტაცია. ამ მოვლენას სივრცითი დაკვანტვა ეწოდება და, როგორც აღვნიშნეთ, იგი ცნობილი იყო ჯერ კიდევ ელემენტარულ კვანტურ თეორიაში.

პრაქტიკულ შემთხვევაში გამოყოფილ z მიმართულებას წარმოადგენს მაგნიტური ველის დაძაბულობის მიმართულება. ამ შემთხვევაში m განსაზღვრავს მომენტის პროექციის მნიშვნელობას მაგნიტური ველის დაძაბულობის გასწვრივ. აქედან წარმოდგება, სწორედ, მისი სახელწოდება—მაგნიტური კვანტური რიცხვი.

მომენტებს ხშირად ზომავენ $\hbar$ ერთეულებში. მაშინ (33,8) და (33,3) ფორმულები მომენტის კვადრატისა და z მდგენელის საკუთარი მნიშვნელობებისათვის მოგვცემენ:

$$l^2 = l(l+1), \quad l_z = m. \tag{33,34}$$

ჩვენ ვხედავთ, რომ l აზიმუტალური კვანტური რიცხვის ფიზიკური შინაარსი ისაა, რომ იგი წარმოადგენს მომენტის პროექციის მაქსიმალურ მნიშვნელობას.

შ ე ნ ი შ ვ ნ ა. აშკარაა, რომ საზოგადოდ, როგორც $\hat{l}_z$ ისე $\hat{l}^2$ ოპერატორების განტოლებებს დააკმაყოფილებს (33,9) გამრავლებული რადიუსის ნებისმიერ ფუნქციაზე, ე. ი. ფუნქცია

$$R(r)Y_{lm}(\theta, \varphi), \tag{33,35}$$

მაგრამ $R(r)$ ნებისმიერი ფუნქციის განსაზღვრა მხოლოდ მომენტის ოპერატორებიდან შეუძლებელია. ეს იმას ნიშნავს, რომ მოძრაობის სრული დახასიათებისათვის კიდევ უნდა არსებობდეს ისეთი მესამე ოპერატორი, რომელიც კომუტატურია $\hat{l}_z$ და $\hat{l}^2$-თან, მაშასადამე, ექნება საერთო საკუთარი ფუნქცია ამ ოპერატორებთან. შემდეგში ვაჩვენებთ, რომ ასეთ ოპერატორს ცენტრალური სიმეტრიის ველში წარმოადგენს ენერგიის ოპერატორის რადიალური ნაწილი. ეს უკანასკნელი კი მოგვცემს შრედინგერის რადიალური ფუნქციების განტოლებას, რომლის ამოხსნითაც დავადგენთ $R(r)$-ის სახეს. ამგვარად, ნაწილაკის მოძრაობის სრული ხასიათის დასადგენად საჭიროა შრედინგერის განტოლების ამოხსნა. $\hat{l}^2$ და $\hat{l}_z$-ის საკუთარი ფუნქციებისა და საკუთარი მნიშვნელობების მოძებნით ჩვენ ვიცით ნაწილაკის მოძრაობის მხოლოდ კინემატიკური მხარე. დინამიკური თვისებების დასადგენად კი საჭიროა შრედინგერის რადიალური განტოლების ამოხსნა, ამიტომ ხშირად l და m კვანტურ რიცხვებს კინემატიკურ კვანტურ რიცხვებსაც უწოდებენ.

აღვნიშნოთ, რომ კვანტურ მექანიკაში იმპულსის მომენტს ორბიტალურ მომენტსაც უწოდებენ, ხოლო მის შესაბამის კვანტურ l რიცხვს—ორბიტალურ კვანტურ რიცხვს. როცა l მოცემულია, მაშინ განსაზღვრულია ორბიტალური მომენტის სიგრძე $\hbar\sqrt{l(l+1)}$, ამიტომ, ხშირად, როდესაც ამბობენ მოცემულია ორბიტალური მომენტის მნიშვნელობაო, გულისხმობენ, რომ განსაზღვრულია l კვანტური რიცხვი. მაგალითად, როცა ამბობენ, ორბიტალური მომენტი უდრის 2-ს, ეს იმას ნიშნავს, რომ $l=2$, მომენტის სიგრძე კი $\hbar\sqrt{6}$-ის ტოლია.

§ 34. სრული ენერგიის ოპერატორი. ჰამილტონიანი

ენერგიის ოპერატორი ერთ-ერთი მნიშვნელოვანი ოპერატორია კვანტურ მექანიკაში თუნდაც იმიტომ, რომ შრედინგერის განტოლება — კვანტური მექანიკის მოძრაობის განტოლება — წარმოადგენს ამ ოპერატორის საკუთარი ფუნქციებისა და საკუთარი მნიშვნელობების განტოლებას

როგორც კლასიკური მექანიკიდან არის ცნობილი, ჰამილტონიანი ფუნქციაა კოორდინატებისა და იმპულსების. მას ველში მოძრავი ერთი ნაწილაკისათვის, დეკარტის კოორდინატებში, აქვს შემდეგი სახე:

$$H=\frac{1}{2\mu}\left(p_x^2+p_y^2+p_z^2\right)+V(\mathrm{r},\ t). \tag{34,1}$$

კვანტური მექანიკის ძირითადი ჰიპოთეზის თანახმად, კოორდინატულ წარმოდგენაში, ჰამილტონის ოპერატორს ექნება გამოსახულება

$$\hat{H}=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta+V(\mathrm{r},\ t). \tag{34,2}$$

სტაციონარულ შემთხვევაში, როცა პოტენციალური ენერგია დროზე ცხადად არ არის დამოკიდებული, კლასიკური ჰამილტონის ფუნქცია სრულ ენერგიას ემთხვევა. შესაბამისი ჰამილტონის ოპერატორი გამოხატავს სრული ენერგიის ოპერატორს, რომელსაც კვლავ $\hat{H}$-ით აღვნიშნავთ, ე. ი.

$$\hat{H}=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta+V(\mathrm{r}). \tag{34,3}$$

როგორც აღვნიშნეთ, ამ ოპერატორის საკუთარი ფუნქციებისა და საკუთარი მნიშვნელობების განტოლება

$$\hat{H}\psi=E\psi \tag{34,4}$$

შრედინგერის განტოლებას ემთხვევა; შრედინგერის დროით განტოლებაში

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}=\hat{H}\psi, \tag{34,5}$$

კი მონაწილეობს (34,2) დროზე დამოკიდებული ჰამილტონის ოპერატორი.

აღსანიშნავია, რომ (34,4) განტოლების საკუთარი მნიშვნელობები სრულ ენერგიას წარმოადგენენ. კვანტურ მექანიკაში სრული ენერგია არ არის ჯამი კინეტიკური და პოტენციალური ენერგიებისა. ეს რომ ასე ყოფილიყო, მაშინ, განუზღვრელობის პრინციპის თანახმად, ერთდროულად და ზუსტად ვერ გავზომავდით კინეტიკურ ენერგიას (როგორც იმპულსების ფუნქციას!) და პოტენციალურ ენერგიას (როგორც კოორდინატების ფუნქციას!); მაშასადამე, ვერ განვსაზღვრავდით მათ ჯამსაც. მართალია კვანტურ მექანიკაში სრული ენერგიის ოპერატორი წარმოადგენს კინეტიკური და პოტენციალური ენერგიების ოპერატორების ჯამს, მაგრამ აქ არავითარი წინააღმდეგობა არა გვაქვს, რამდენადაც ოპერატორი მათემატიკური სიმბოლოა და არაა დაკავშირებული გაზომვის პროცესთან; რაც შეეხება სრული ენერგიის ოპერატორის საკუთარ მნიშვნელობას, იგი იზომება როგორც ერთი მთლიანი სიდიდე.

ისევე, როგორც კლასიკურ მექანიკაში, კვანტურშიაც ამოცანის ხასიათს განსაზღვრავს პოტენციალური ენერგია. ჰამილტონიანში შემავალი კინეტიკური ენერგიის ოპერატორი

$$\hat{T} = \frac{\hat{p}^2}{2\mu} = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta \tag{34,6}$$

ნებისმიერი ამოცანისათვის ერთნაირია; რაც შეეხება პოტენციალურ ენერგიას, მას სხვადასხვა ამოცანისათვის სხვადასხვა სახე აქვს. ამასთან, პოტენციალური ენერგიის კონკრეტული გამოსახულების შესაბამისად, შრედინგერის განტოლების ამოხსნა შესაძლოა ხელსაყრელი აღმოჩდეს სხვადასხვა კოორდინატთა სისტემაში. ამ მიზნით მეტად დიდი მნიშვნელობა აქვს ჰამილტონიანის ჩაწერას ყველა შესაძლო კოორდინატებში. ამისათვის კი საკმარისია მხოლოდ და მხოლოდ ლაპლასიანის გამოხატულების დაწერა აღნიშნულ კოორდინატებში.

ლაპლასიანს ნებისმიერ ორთოგონალურ კოორდინატებში აქვს შემდეგი სახე: [1]

$$\Delta = \frac{1}{h_{11}h_{22}h_{33}}\left\{\frac{\partial}{\partial u_1}\left(\frac{h_{22}h_{33}}{h_{11}}\frac{\partial}{\partial u_1}\right) + \right.$$

$$\left. + \frac{\partial}{\partial u_2}\left(\frac{h_{11}h_{33}}{h_{22}}\frac{\partial}{\partial u_2}\right) + \frac{\partial}{\partial u_3}\left(\frac{h_{11}h_{22}}{h_{33}}\frac{\partial}{\partial u_3}\right)\right\}, \tag{34,7}$$

სადაც h_{11}, h_{22}, h_{33} ე. წ. ლამეს პარამეტრებია:

$$h_{ii}^2 = \left(\frac{\partial x}{\partial u_i}\right)^2 + \left(\frac{\partial y}{\partial u_i}\right)^2 + \left(\frac{\partial z}{\partial u_i}\right)^2, \tag{34,8}$$

ხოლო u_1, u_2, u_3 ის კოორდინატებია, რომლებზედაც გვსურს გადასვლა x, y, z დეკარტის კოორდინატებიდან. სფერულ კოორდინატებში $u_1 = r$, $u_2 = \theta$, $u_3 = \varphi$, ხოლო $h_{11} = 1$, $h_{22} = r$, $h_{33} = r\sin\theta$.

შედეგად სფერულ კოორდინატებში ლაპლასის ოპერატორებისათვის მივიღებთ გამოხატულებას

$$\Delta = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{\Delta_{\theta,\varphi}}{r^2}, \tag{34,9}$$

სადაც

$$\Delta_{\theta,\varphi} = \frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\cdot\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} \tag{34,10}$$

წარმოადგენს ჩვენთვის უკვე კარგად ცნობილ ლეჟანდრის ოპერატორს.

ჰამილტონიანში სფერულ კოორდინატებზე გადასვლა ხელსაყრელია, როცა პოტენციალურ ენერგიას ცენტრალური სიმეტრია ახასიათებს. რადგან იმპულსის მომენტის ოპერატორის კვადრატი განსაზღვრულია $\hat{l}^2 = -\hbar^2\Delta_{\theta,\varphi}$ ფორმულით, ამიტომ ჰამილტონის ოპერატორი ცენტრალური სიმეტრიის ველში მოძრავი ნაწილაკისათვის ასეც შეგვიძლია გადავწეროთ:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{\hat{l}^2}{2\mu r^2} + V(r). \tag{34,11}$$

ჰამილტონიანის ეს გამოსახულება შეიძლება საშუალებას გვაძლევდეს ცენტრალური სიმეტრიის ველის შესაბამის კლასიკურ ჰამილტონიანს, თუ შემოვიღებთ შემდეგ ოპერატორს:

---

[1] იხილეთ, მაგალითად, „ტენზორული ანალიზის ელემენტები“ გ. პილაშვილი, თსუ გამომცემლობა, 1978 წ.

$$\hat{p}_r = -i\hbar\,\frac{1}{r}\,\frac{\partial}{\partial r}\,r = -i\hbar\left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r}\right). \tag{34,12}$$

მართლაც, რადგან

$$\hat{p}_r^2\psi = -\hbar^2\left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r}\right)\left(\frac{\partial\psi}{\partial r} + \frac{1}{r}\,\psi\right) = -\frac{\hbar^2}{r^2}\,\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\,\frac{\partial\psi}{\partial r}\right). \tag{34,13}$$

გვექნება

$$\hat{H} = \frac{1}{2\mu}\left(\hat{p}_r^2 + \frac{\hat{l}^2}{r^2}\right) + V(r), \tag{34,14}$$

როგორც ვხედავთ, $\hat{p}_r$ ყოფილა რადიალური იმპულსის ოპერატორი.

სრულიად ანალოგიურად ვიპოვით ჰამილტონიანის გამოხატულებას სხვა ნებისმიერ ორთოგონალურ კოორდინატებშიაც.

სავარჯიშო მაგალითები

გამოიყვანეთ ლაპლასის ოპერატორის (34,7) გამოსახულება და დაამტკიცეთ, რომ

1. ცილინდრულ კოორდინატებში (ρ, φ, z) მას აქვს შემდეგი სახე:

$$\Delta = \frac{1}{\rho}\,\frac{\partial}{\partial\rho}\left(\rho\,\frac{\partial}{\partial\rho}\right) + \frac{1}{\rho^2}\,\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

($h_{11}=1$, $h_{22}=\rho$, $h_{33}=1$)

2. პოლარკოორდინატებში სიბრტყეზე (ρ, φ) გვექნება

$$\Delta = \frac{1}{\rho}\,\frac{\partial}{\partial\rho}\left(\rho\,\frac{\partial}{\partial\rho}\right) + \frac{1}{\rho^2}\,\frac{\partial^2}{\partial\rho^2}.$$

3. პარაბოლურ კოორდინატებში (ξ, η, φ) გვექნება

$$\left(h_{11}^2 = \frac{\xi+\eta}{4\xi},\quad h_{22}^2 = \frac{\xi+\eta}{4\eta},\quad h_{33}^2 = \xi\eta\right)$$

$$\Delta = \frac{4}{\xi+\eta}\left[\frac{\partial}{\partial\xi}\left(\xi\,\frac{\partial}{\partial\xi}\right) + \frac{\partial}{\partial\eta}\left(\eta\,\frac{\partial}{\partial\eta}\right)\right] + \frac{1}{\xi\eta}\,\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}.$$

§ 35. შრედინგერის განტოლება ფარდობითი მოძრაობისათვის

აქამდე ჩვენ ვიხილავდით ერთ ნაწილაკს ველში. ახლა შევისწავლოთ ორი ნაწილაკის ფარდობითი მოძრაობა. ვიქნათ, გვაქვს ორი ნაწილაკის სისტემა m_1 და m_2 მასებით. ამ ნაწილაკების ურთიერთქმედების ენერგია აღვნიშნოთ V-თი. ცხადია, რომ პოტენციალური ენერგია დამოკიდებული იქნება მხოლოდ ნაწილაკთა შორის მანძილზე $\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$ და შესაძლოა დროზე. ასე რომ, $V = V(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2,\ t)$. ამ ორი ნაწილაკის სისტემის შესაბამისი კლასიკური ჰამილტონის ფუნქცია ასე დაიწერება:

$$\hat{H} = \frac{\mathbf{p}_1^2}{2m_1} + \frac{\mathbf{p}_2^2}{2m_2} + V(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2,\ t), \tag{35,1}$$

სადაც $\mathbf{p}_1$ და $\mathbf{p}_2$ შესაბამისად პირველი და მეორე ნაწილაკის იმპულსებია. ძირითადი ჰიპოთეზის თანახმად განხილული ამოცანის შესატყვისი კვანტურ-მექანიკური ჰამილტონიანი მიიღება სახეს

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_1}\Delta_1 - \frac{\hbar^2}{2m_2}\Delta_2 + V(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2, t); \qquad (35,2)$$

Δ_1 და Δ_2 ლაპლასიანებია აღებული პირველი და მეორე ნაწილაკის კოორდინატების მიხედვით. ამის შემდეგ შრედინგერის განტოლების დაწერა ძნელი აღარ არის. სახელდობრ, გვექნება

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; t)}{\partial t} = \hat{H}\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, t). \qquad (35,3)$$

იმის გამო, რომ პოტენციალური ენერგია დამოკიდებულია მხოლოდ ნაწილაკთა შორის მანძილზე და არა ცალკეული ნაწილაკის მდებარეობაზე, ამიტომ შესაძლებელია აღნიშნული ორი ნაწილაკის ამოცანის დაყვანა ერთი ნაწილაკის მოძრაობაზე, ისევე, როგორც ამას ადგილი აქვს კლასიკურ მექანიკაში.

შემოვიღოთ იაკობის კოორდინატები:

$$\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2, \quad \mathbf{R} = \frac{m_1\mathbf{r}_1 + m_2\mathbf{r}_2}{m_1 + m_2}. \qquad (35,3')$$

ლაპლასის Δ_1 და Δ_2 ოპერატორები გაეწვხატოთ ამ ახალ ცვლადებში; ამისათვის წინასწარ ვიპოვოთ $\nabla_1 = \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_1}$ და $\Delta_2 = \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_2}$ ოპერატორები; გვექნება

$$\nabla_1 = \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}}\frac{\partial \mathbf{r}}{\partial \mathbf{r}_1} + \frac{\partial}{\partial \mathbf{R}}\frac{\partial \mathbf{R}}{\partial \mathbf{r}_1}; \quad \nabla_2 = \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}}\frac{\partial \mathbf{r}}{\partial \mathbf{r}_2} + \frac{\partial}{\partial \mathbf{R}}\frac{\partial \mathbf{R}}{\partial \mathbf{r}_2}, \qquad (35,4)$$

საიდანაც მარტივად მივიღებთ:

$$\nabla_1 = \nabla_{\mathbf{r}} + \frac{m_1}{m_1 + m_2}\nabla_{\mathbf{R}}, \qquad (35,5)$$

$$\nabla_2 = -\nabla_{\mathbf{r}} + \frac{m_2}{m_1 + m_2}\nabla_{\mathbf{R}}.$$

∇_1 და ∇_2 ოპერატორების კვადრატში აყვანით ვიპოვით ლაპლასიანებს $\Delta_1 = \nabla_1^2$, $\Delta_2 = \nabla_2^2$. ასე რომ, (35,2) ჰამილტონიანს ექნება სახე:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta_{\mathbf{r}} - \frac{\hbar^2}{2M}\Delta_{\mathbf{R}} + V(\mathbf{r}, t), \qquad (35,6)$$

სადაც $\Delta_{\mathbf{r}}$ აღნიშნავს ლაპლასის ოპერატორს ფარდობით $\mathbf{r}(x, y, z)$ ვექტორის კოორდინატებით, ხოლო $\Delta_{\mathbf{R}}$—სიმძიმის ცენტრს $\mathbf{R}(X, Y, Z)$ ვექტორის კოორდინატებით. (35,6) გამოსახულებაში μ დაყვანილი მასაა, M კი სრულ მასას წარმოადგენს:

$$\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}, \quad M = m_1 + m_2. \qquad (35,7)$$

პოტენციალური ენერგია სიმძიმის ცენტრის კოორდინატებს არ შეიცავს, ამიტომ მისი მოძრაობა შეგვიძლია ან ცალკე გამოვყოთ, ანდა საერთოდ ამოვაგდოთ ათვლის სისტემის ინერციის ცენტრში მოთავსებით.

შრედინგერის განტოლებას იაკობის კოორდინატებში ექნება სახე

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\mathbf{r}, \mathbf{R}, t)}{\partial t} = \left\{-\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta_{\mathbf{r}} + V(\mathbf{r}, t) - \frac{\hbar^2}{2M}\Delta_{\mathbf{R}}\right\}\Psi(\mathbf{r}, \mathbf{R}, t). \qquad (35,8)$$

გამოვიყენოთ ცვლადთა განცალების ფურიეს მეთოდი და ამონახსნი ვეძებოთ შემდეგი ნამრავლის სახით:

$$\Psi(\mathbf{r},\ \mathbf{R},\ t)=\psi_0(\mathbf{r},\ t)\,\Phi(\mathbf{R})\cdot \tag{35,9}$$

ეს ფუნქცია შევიტანოთ (35,8) განტოლებაში და შედეგი გავყოთ ამავე ფუნქციაზე; მივიღებთ

$$\frac{1}{\psi_0(\mathbf{r},\ t)}\left\{i\hbar\,\frac{\partial\psi_0(\mathbf{r},\ t)}{\partial t}+\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta_{\mathbf{r}}\,\psi_0(\mathbf{r},\ t)-V(\mathbf{r},\ t)\right\}+$$

$$+\frac{\hbar^2}{2M\Phi(\mathbf{R})}\Delta_{\mathbf{R}}\,\Phi(\mathbf{R})=0, \tag{35,10}$$

საიდანაც დავასკვნით, რომ

$$i\hbar\,\frac{\partial\psi_0(\mathbf{r},\ t)}{\partial t}+\frac{\hbar^2}{2\mu}\,\Delta_{\mathbf{r}}\psi_0(\mathbf{r},\ t)-V(\mathbf{r},\ t)\psi_0(\mathbf{r},\ t)=W\psi_0(\mathbf{r},t), \tag{35,11}$$

$$\frac{\hbar^2}{2M}\,\Delta_{\mathbf{R}}\,\Phi(\mathbf{R})=-\,W\,\Phi(\mathbf{R}), \tag{35,12}$$

W ენერგიის განზომილების მქონე მუდმივია.

(35,12) განტოლება ადვილად ამოიხსნება. იგი გამოხატავს სისტემის სიმძიმის ცენტრის თავისუფალ მოძრაობას. მას აკმაყოფილებს ბრტყელი ტალღა

$$\Phi(\mathbf{R})=(2\pi\,\hbar)^{-3/2}\,e^{\frac{i}{\hbar}\mathbf{PR}} \tag{35,13}$$

სადაც

$$W=\frac{\mathbf{P}^2}{2M} \tag{35,14}$$

წარმოადგენს ინერციის ცენტრის გადატანითი მოძრაობის ენერგიას, ხოლო ნორმირება მოხდენილია პირობით:

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\Phi_{P'}(\mathbf{R})\;\Phi_{P}(\mathbf{R})\,d\mathbf{R}=\delta(\mathbf{P}'-\mathbf{P}). \tag{35,15}$$

ამგვარად, ამოხსნას ექვემდებარება მხოლოდ (35,11) შრედინგერის განტოლება, რომელიც აღწერს სისტემის ფარდობით მოძრაობას. შემდგომში ლაპლასიანს $\mathbf{r}$ ინდექსს ჩამოვაშორებთ და ვიგულისხმებთ, რომ იგი აღება ფარდობითი კოორდინატების მიხედვით. მაშასადამე, ფარდობითი მოძრაობის შესასწავლად უნდა ვისარგებლოთ განტოლებით

$$\left(i\hbar\,\frac{\partial}{\partial t}-W\right)\psi_0(\mathbf{r},\ t)=\hat{H}\psi_0(\mathbf{r},\ t), \tag{35,16}$$

სადაც

$$\hat{H}=-\,\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta+V(\mathbf{r},t) \tag{35,17}$$

ფარდობითი მოძრაობის ჰამილტონიანია. ხელსაყრელია (35,16) განტოლებიდან გამოვრიცხოთ გადატანითი მოძრაობის ენერგია. ამისათვის შემოვიღოთ ახალი ტალღური ფუნქცია

$$\Psi_0(\mathbf{r},t)=\psi(\mathbf{r},\ t)\,e^{-\frac{iWt}{\hbar}} \tag{35,18}$$

მაშინ შრედინგერის ფარდობითი მოძრაობის შესაბამისი განტოლება მიიღებს სახეს

$$i\hbar \frac{\partial\psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \hat{H}\psi(\mathbf{r}, t). \tag{35,19}$$

(35,9) ფორმულის თანახმად, სრული ტალღური ფუნქცია გამოხატული იქნება შემდეგნაირად:

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \psi(\mathbf{r}, t)\frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{PR}-Wt)} \tag{35,20}$$

სადაც $\psi(\mathbf{r}, t)$ წარმოადგენს ფარდობითი მოძრაობის შესაბამისი შრედინგერის (35,19) განტოლების ამონახსნს.

როცა ფარდობითი მოძრაობის ჰამილტონიანი დროზე ცხადად არ არის დამოკიდებული, მაშინ

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \psi(\mathbf{r})e^{-\frac{i}{\hbar}Et} \tag{35,21}$$

და (35, 19) განტოლება გადაიქცევა $\hat{H}\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r})$ განტოლებად, რომელსაც გაშლილად ექნება შემდეგი სახე:

$$\Delta\psi(\mathbf{r}) + \frac{2\mu}{\hbar^2}[E - V(\mathbf{r})]\psi(\mathbf{r}) = 0, \tag{35,22}$$

ამ განტოლებაში E ფარდობითი მოძრაობის ენერგიაა. (35,22) ადრე განხილული შრედინგერის განტოლებისაგან ფორმალურად იმით განსხვავდება, რომ ნაწილაკის მასა შეცვლილია ორი ნაწილაკის დაყვანილი მასით.

ამგვარად, ორი ნაწილაკის სისტემის კვანტურ-მექანიკური მოძრაობა ორ ნაწილად გაიყო. ერთია ნაწილაკთა ურთიერთფარდობითი მოძრაობა, რომელიც აიწერება (35,19) ან, სტაციონარულ შემთხვევაში, (35,22) განტოლებით; ამ განტოლების ამოხსნა დამოკიდებულია ურთიერთქმედების პოტენციალური ენერგიის სახეზე და, მეორე, ინერციის ცენტრის თავისუფალი მოძრაობა, რომელსაც ყველა ამოცანაში ერთი და იგივე (35,13) ბრტყელი ტალღა შეესაბამება.

თუ გადავალთ ინერციის ცენტრის სისტემაზე, რომელშიაც სისტემის იმპულსი $\mathbf{P} = 0$, მაშინ ინერციის ცენტრის თავისუფალი მოძრაობა ამოვარდება და შესასწავლი დაგვრჩება მხოლოდ ნაწილაკთა ურთიერთფარდობითი მოძრაობა. ამგვარად, ორი ნაწილაკისაგან შედგენილი სისტემის მოძრაობის შესწავლა დაიყვანება ერთი ფიქტიური ნაწილაკის მოძრაობაზე, რომლის მასა დაყვანილი მასის ტოლია.

§ 36. შრედინგერის განტოლება ელექტრომაგნიტურ ველში მოძრავი ნაწილაკისათვის

ვთქვათ, ნაწილაკს გააჩნია e მუხტი და იგი მოძრაობს ელექტრომაგნიტურ ველში, რომლის ვექტორპოტენციალია $\mathbf{A}$, სკალარპოტენციალი კი φ. ელექტრომაგნიტური ველის $\vec{\mathcal{E}}$ ელექტრული და $\vec{\mathcal{H}}$ მაგნიტური დაძაბულობები, როგორც ცნობილია, გამოისახება ფორმულებით:

$$\vec{\mathcal{E}} = -\nabla\varphi - \frac{1}{c}\frac{\partial\mathbf{A}}{\partial t}, \qquad \vec{\mathcal{H}} = \mathrm{rot}\mathbf{A}. \tag{36,1}$$

$\mathbf{A}$ და φ პოტენციალებს ფიზიკური შინაარსი არ გააჩნიათ, რამდენადაც ისინი ცალსახად არ არიან განსაზღვრული. ფიზიკური შინაარსი აქვთ ველის დაძაბულობებს $\vec{\mathscr{E}}$ და $\vec{\mathscr{H}}$, რომლებიც ცდაზე იზომებიან. (36,1) ფორმულების მიხედვით $\vec{\mathscr{E}}$ და $\vec{\mathscr{H}}$ ის ერთი და იგივე სიდიდეები შეგვიძლია მივიღოთ $\mathbf{A}$ და φ-ს სხვადასხვა მნიშვნელობებით.

ადვილად დავინახავთ, რომ (36,1) ფორმულებში, თუ ნაცვლად $\mathbf{A}$ და φ პოტენციალებისა განვიხილავთ გამოსახულებებს;

$$\mathbf{A}' = \mathbf{A} + \nabla f(\mathbf{r}, t), \tag{36,2}$$

$$\varphi' = \varphi - \frac{1}{c}\frac{\partial f(\mathbf{r}, t)}{\partial t},$$

სადაც $f(\mathbf{r}, t)$ კოორდინატებისა და დროის ფუნქციაა, მაშინ $\vec{\mathscr{E}}$ და $\vec{\mathscr{H}}$-ის მნიშვნელობები უცვლელი დარჩება. (36,2) ფორმულებს გრადიენტულ გარდაქმნებს უწოდებენ. მაშასადამე, ველის თეორიაში ვექტორ და სკალარპოტენციალები განსაზღვრულია გრადიენტის სიზუსტით. თუ მოვითხოვთ, რომ ნებისმიერი $f(\mathbf{r}, t)$ ფუნქცია აკმაყოფილებს დალამბერის განტოლებას, მაშინ პოტენციალებს შეგვიძლია მოვთხოვოთ ე. წ. ლორენცის ჭალიბრობის პირობა

$$\operatorname{div}\mathbf{A} + \frac{1}{c}\frac{\partial \varphi}{\partial t} = 0. \tag{36,3}$$

შემდგომში განსაკუთრებით მნიშვნელოვანი იქნება იმ შემთხვევის განხილვა, როცა მუხტი მოძრაობს სინათლის ელექტრომაგნიტურ ველში. ამ დროს ზოგადობას დაურღვეველად შეგვიძლია დავუშვათ, რომ $\varphi = 0$ და, მაშასადამე, (36,3) პირობის თანახმად, $\operatorname{div}\mathbf{A} = 0$. ვექტორპოტენციალი სინათლისათვის განისაზღვრება დალამბერის განტოლებიდან

$$\Delta\mathbf{A} - \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2 \mathbf{A}}{\partial t^2} = 0. \tag{36,4}$$

ამ განტოლების ტიპიური ამონახსნი შეგვიძლია წარმოვიდგინოთ ბრტყელი ტალღის სახით $\mathbf{k}$ ტალღური ვექტორით და ω სიხშირით:

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = A_0 \mathbf{v} \cos(\mathbf{kr} - \omega t) = \frac{1}{2} A_0 \mathbf{v} e^{i(\mathbf{kr}-\omega t)} + \frac{1}{2} A_0 \mathbf{v} e^{-i(\mathbf{kr}-\omega t)}, \tag{36,5}$$

სადაც $\mathbf{v}$ არის ელექტრული ველის დაძაბულობის ვექტორის ორტი, ე. ი. პოლარიზაციის მიმართულება; ამასთან, $k = \omega/c$.

ველის დაძაბულობებს ექნებათ სახე:

$$\vec{\mathscr{E}} = A_0 \mathbf{v} k \sin(\mathbf{kr} - \omega t), \tag{36,6}$$

$$\vec{\mathscr{H}} = -[\mathbf{k} \times \mathbf{v}] A_0 \sin(\mathbf{kr} - \omega t). \tag{36,7}$$

როგორც ცნობილია, ელექტრომაგნიტურ ველში მოძრავი დადებითად დამუხტული ნაწილაკის იმპულსი და პოტენციალური ენერგია ველის კლასიკურ თეორიაში ასე იცვლება:

$$\mathbf{p} \to \mathbf{p} - \frac{e}{c}\mathbf{A}, \qquad V \to V + e\varphi. \tag{36,7}$$

მაშასადამე, კვანტურ მექანიკაში საჭიროა მოვახდინოთ შემდეგი შეცვლა:

$$\mathbf{p} \to \hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c}\mathbf{A} = -i\hbar\nabla - \frac{e}{c}\mathbf{A}$$
$$V \to V + e\varphi. \tag{36,8}$$

რადგან პოტენციალები კოორდინატების ფუნქციებია, ამიტომ ისინი გამრავლების ოპერატორები იქნება. ამგვარად, კვანტურ მექანიკაში ელექტრომაგნიტურ ველში მოძრავი დადებითი მუხტის ჰამილტონიანს ექნება გამოხატულება

$$\hat{H} = \frac{1}{2\mu}(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c}\mathbf{A})^2 + V(\mathbf{r}, t) + e\varphi. \tag{36,9}$$

მოვძებნოთ ამ ოპერატორის ცხადი სახე. ამისათვის ვიპოვოთ შემდეგი ოპერატორი:

$$(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c}\mathbf{A})^2 = \sum_{\alpha=1}^{3} (\hat{p}_\alpha - \frac{e}{c}A_\alpha)(\hat{p}_\alpha - \frac{e}{c}A_\alpha) \tag{36,10}$$

ან, თუ გავხსნით ფრჩხილებს, მაშინ

$$(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c}\mathbf{A})^2 = \sum_{\alpha=1}^{3} [\hat{p}_\alpha^2 + \frac{e^2}{c^2}A_\alpha^2 - \frac{e}{c}(\hat{p}_\alpha A_\alpha + A_\alpha \hat{p}_\alpha)] \tag{36,11}$$

ვიპოვოთ $\hat{p}_\alpha A_\alpha + A_\alpha \hat{p}_\alpha$ გამოსახულება. ამისათვის შევნიშნოთ, რომ (16,28) ფორმულის თანახმად გვექნება

$$\hat{p}_\alpha A_\alpha - A_\alpha \hat{p}_\alpha = -i\hbar \frac{\partial A_\alpha}{\partial x_\alpha}. \tag{36,12}$$

თუ ორივე მხარეს დავუმატებთ $2A_\alpha \hat{p}_\alpha$ სიდიდეს, მივიღებთ

$$\hat{p}_\alpha A_\alpha + A_\alpha \hat{p}_\alpha = 2A_\alpha \hat{p}_\alpha - i\hbar \frac{\partial A_\alpha}{\partial x_\alpha}. \tag{36,13}$$

და, მაშასადამე,

$$(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c}\mathbf{A})^2 = \sum_{\alpha=1}^{3} \hat{p}_\alpha^2 - \frac{2e}{c}\sum_{\alpha=1}^{3} A_\alpha \hat{p}_\alpha +$$
$$+ \frac{i\hbar e}{c}\sum_{\alpha=1}^{3} \frac{\partial A_\alpha}{\partial x_\alpha} + \frac{e^2}{c^2}\sum_{\alpha=1}^{3} A_\alpha^2. \tag{36,14}$$

შევიტანოთ ეს გამოსახულება (36,9)-ში და გავითვალისწინოთ, რომ $\hat{\mathbf{p}}^2 = -\hbar^2\nabla^2$ და $\sum_{\alpha=1}^{3} \frac{\partial A_\alpha}{\partial x_\alpha} = \operatorname{div}\mathbf{A}$. მივიღებთ

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta - \frac{e}{\mu c}(\mathbf{A}\hat{\mathbf{p}}) + \frac{ie\hbar}{2\mu c}\operatorname{div}\mathbf{A} + \frac{e^2}{2\mu c^2}\mathbf{A}^2 + e\varphi + V(\mathbf{r}, t), \tag{36,15}$$

თუ ჰამილტონიანს ელექტრომაგნიტური ველის გარეშე ($A = \varphi = 0$) აღვნიშნავთ $\hat{H}_0$-ით, მაშინ ელექტრომაგნიტურ ველში მოძრავი დამუხტული ნაწილაკის ჰამილტონიანი ასე დაიწერება:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 - \frac{e}{\mu c}(\mathbf{A}\hat{\mathbf{p}}) + \frac{ie\hbar}{2\mu c}\operatorname{div}\mathbf{A} + \frac{e^2}{2\mu c^2}\mathbf{A}^2 + e\varphi. \tag{36,16}$$

შრედინგერის სტაციონარული მდგომარეობის განტოლებას $\hat{H}\psi = E\psi$ ელექტრომაგნიტური ველის შემთხვევაში ექნება სახე

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta\psi + V(r)\psi - \frac{e}{\mu c}(\mathbf{Ap})\psi + \frac{i\hbar c}{2\mu c}(\mathrm{div}\,\mathbf{A})\psi + \frac{e^2}{2\mu c^2}\mathbf{A}^2\psi + e\varphi\psi = E\psi. \qquad (36,17)$$

როცა პოტენციალები ისე შეგვიძლია შევარჩიოთ, რომ $\varphi = \mathrm{div}\mathbf{A} = 0$, მაშინ (36,16) გამოსახულება საგრძნობლად გამარტივდება. კერძოდ,

$$\hat{H} = \hat{H}_0 - \frac{e}{\mu c}(\mathbf{A}\hat{p}) + \frac{e^2}{2\mu c^2}\mathbf{A}^2. \qquad (36,18)$$

თუ გარდა ამისა ველი სუსტია, მაშინ $\mathbf{A}^2$-ის შემცველი წევრი, როგორც მეორე რიგის მცირე წევრი, შეგვიძლია უგულებელვყოთ, მაშინ ჰამილტონიანი მიიღებს გამოხატულებას

$$\hat{H} = \hat{H}_0 - \frac{e}{\mu c}(\mathbf{A}\hat{p}). \qquad (36,19)$$

შესაბამისი შრედინგერის განტოლება ასე შეიძლება დავწეროთ:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta\psi + \frac{ie\hbar}{\mu c}(\mathbf{A}\nabla)\psi + V(r)\psi = E\psi. \qquad (36,20)$$

კერძო შემთხვევაში, ელექტრონისათვის, რომელსაც აქვს უარყოფითი მუხტი, ზევით მიღებულ ფორმულებში საჭიროა მოვახდინოთ $e \to -e$ შეცვლა

შევნიშნოთ, რომ $\mathrm{div}\,\mathbf{A} = 0$-ის დროს (მაგალითად, ერთგვაროვანი მაგნიტური ველისათვის), (36,12) ტოლობის ძალით, A და p ერთმანეთთან კომუტატურია.

შ ე ნ ი შ ვ ნ ა: როცა გვაქვს შრედინგერის განტოლება ელექტრომაგნიტური ველის გარეშე $E\psi = \left(\frac{\hat{p}^2}{2\mu} + V\right)\psi$, მაშინ ψ^* ფუნქციაც იგივე განტოლებას აკმაყოფილებს. მართლაც, რადგან E და $\hat{p}^2$ ნამდვილი სიდიდეებია, $E\psi^* = \left(\frac{1}{2\mu}\hat{p}^2 + V\right)\psi^*$. ელექტრომაგნიტურ ველში კი $+e$ მუხტის მქონე ნაწილაკი აკმაყოფილებს განტოლებას

$$E\psi = \frac{1}{2\mu}(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c}\mathbf{A})^2\psi + V\psi + e\varphi\psi. \qquad (35,21)$$

თუ გადავალთ კომპლექსურად შეუღლებაზე, მაშინ ψ^* ფუნქცია დააკმაყოფილებს განტოლებას

$$E\psi^* = \frac{1}{2\mu}(\hat{\mathbf{p}} + \frac{e}{c}\mathbf{A})^2\psi^* + V\psi^* + e\varphi\psi^*, \qquad (36,22)$$

ე. ი. იმ მდგომარეობაში, რომელიც ხასიათდება ψ^* ფუნქციით, ნაწილაკის იმპულსი ველში უდრის არა $\hat{\mathbf{p}}' = \hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c}\mathbf{A}$, არამედ $\hat{\mathbf{p}}' = \hat{\mathbf{p}} + \frac{e}{c}\mathbf{A}$, სადაც $\hat{\mathbf{p}}$ ნაწილაკის იმპულსია თავისუფალ მდგომარეობაში.

მაშასადამე, მუხტის ელექტრომაგნიტურ ველში მოძრაობისას საჭიროა მოვახდინოთ შემდეგი შეცვლა:

$$\hat{\mathbf{p}}\psi^* \to (\hat{\mathbf{p}} + \frac{e}{c}\mathbf{A})\psi^*; \quad \hat{\mathbf{p}}\psi \to (\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c}\mathbf{A})\psi. \tag{36,23}$$

ამ ფორმულების გამოყენებით ადვილად გამოვიყვანთ ალბათობის დენის ვექტორის ფორმულას. (5,8)-დან მარტივად მივიღებთ

$$\mathbf{J} = \frac{i\hbar}{2\mu}(\psi\nabla\psi^* - \psi^*\nabla\psi) - \frac{e}{\mu c}\mathbf{A}\psi^*\psi. \tag{36,24}$$

მაშასადამე, ელექტრომაგნიტურ ველში დამატებით ჩნდება

$$-\frac{e}{\mu c}\mathbf{A}\psi^*\psi \tag{36,25}$$

სიდიდე. ცხადია, რომ ველში მოძრავი ნაწილაკის ალბათობის სიმკვრივე კვლავ $\psi^*\psi$ გამოსახულებით განისაზღვრება.

თავი V

მდგომარეობის კვანტური აღწერა

ამ თავში განხილულია მდგომარეობის აღწერა კვანტური მექანიკის თვალსაზრისით. მდგომარეობის კვანტური აღწერა პრინციპულად განსხვავდება მდგომარეობის კლასიკური აღწერისაგან. ამის მიზეზი ის არის, რომ კვანტურ მექანიკაში ყველა სიდიდე ერთდროულად და ზუსტად არ იზომება. ამ ფაქტის ნათელ ილუსტრაციას წარმოადგენს ჰაიზენბერგის განუზღვრელობის პრინციპი კოორდინატისა და იმპულსისათვის.

ნაპოვნია პირობები, როდესაც შესაძლებელია რამდენიმე ფიზიკური სიდიდის ერთდროულად და ზუსტად გაზომვა. დაწერილია კვანტურ-მექანიკური საშუალო მნიშვნელობის მოსაძებნი ფორმულა. გამოყვანილია ფორმულები ტალღური ფუნქციის ერთი რომელიმე წარმოდგენიდან სხვა წარმოდგენაში გადასვლისა. შემოტანილია სიმკვრივის მატრიცა და განხილულია მისი საშუალებით მდგომარეობის კვანტური აღწერის მეთოდი. ბოლოს განხილულია ერენფესტის განტოლებები.

§ 37. ფიზიკური სიდიდის საშუალო მნიშვნელობა

განუზღვრელობის თანაფარდობის ძალით კოორდინატისა და იმპულსის ერთდროულად და ზუსტად გაზომვა შეუძლებელია. ქვემოთ ჩვენ დავინახავთ, რომ კვანტურ მექანიკაში ასეთი განუზღვრელი წყვილები მრავალია. კერძოდ, არაკომუტატურ ოპერატორთა საკუთარი მნიშვნელობების ერთდროულად და ზუსტად გაზომვა არ შეიძლება. ის ფაქტი, რომ სიდიდეს გარკვეული მნიშვნელობა არა აქვს, იმას ნიშნავს, რომ მისი განსაზღვრა ერთი და იმავე მდგომარეობაში მყოფი ნაწილაკისათვის მკვეთრად განსხვავებულ შედეგებს მოგვცემს. კვანტურ მექანიკაში იგულისხმება, რომ თუმცა ცალკეული გაზომვის შედეგი შემთხვევითია, მრავალი ცდით მიღებული სიდიდეთა საშუალო მნიშვნელობა სრულიად გარკვეულია და განისაზღვრება იმ მდგომარეობით, რომელშიაც იმყოფება ნაწილაკი. ჩვენს მიზანს წარმოადგენს ფიზიკური სიდიდის კვანტურ-მექანიკური საშუალო მნიშვნელობის განმსაზღვრელი ფორმულის გამოყვანა.

გავიხსენოთ ცნება საშუალო მნიშვნელობის ან სიდიდის მათემატიკური მოლოდინის შესახებ, რომელიც მოცემულია ალბათობის თეორიაში. განვიხილოთ დისკრეტული სიდიდეების შემთხვევა. ვთქვათ λ სიდიდეს შეუძლია მიიღოს მნიშვნელობანი:

$$\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3, \ldots \lambda_k, \ldots \tag{37,1}$$

შესაბამისი ალბათობანი აღვნიშნოთ

$$w_1, w_2, \ldots w_k, \ldots \tag{37,2}$$

მაშინ როგორც ალბათობათა თეორიიდანაა ცნობილი, λ სიდიდის მათემატიკურ მოლოდინს, ან საშუალო მნიშვნელობას, უწოდებენ გამოსახულებას

$$\overline{\lambda} = \sum_k \lambda_k w_k, \tag{37,3}$$

სადაც იგულისხმება, რომ ალბათობა ნორმირებულია ერთზე

$$\sum_k w_k = 1. \tag{37,4}$$

ამ შემთხვევაში, როცა λ სიდიდე იცვლება უწყვეტად (λ_1, λ_2) არეში, ალბათობა იმისა, რომ მისი საშუალო მნიშვნელობა ძევს (λ, $\lambda + d\lambda$) შუალედში იქნება $w(\lambda)d\lambda$; მაშინ საშუალო მნიშვნელობისათვის გვექნება

$$\overline{\lambda} = \int_{\lambda_1}^{\lambda_2} \lambda w(\lambda) d\lambda. \tag{37,5}$$

ამასთან, კვლავ იგულისხმება, რომ ალბათობა ნორმირებულია ერთზე

$$\int_{\lambda_1}^{\lambda_2} w(\lambda)\, d\lambda = 1. \tag{37,6}$$

როცა ალბათობა ნორმირებული არ არის, მაშინ საშუალო მნიშვნელობისათვის გვექნება ფორმულა

$$\overline{\lambda} = \frac{\int \lambda w(\lambda) d\lambda}{\int w(\lambda)\, d\lambda}. \tag{37,7}$$

ახლა გადავიდეთ კვანტურ მექანიკაზე. ვთქვათ ჩვენთვის ცნობილია შრედინგერის განტოლების ამონახსნი $\psi(\mathbf{r})$, მაშინ როგორც ვიცით $|\psi|^2 d\mathbf{r}$ გამოხატავს ნაწილაკის მდებარეობის ალბათობას და კოორდინატების რაიმე $A(\mathbf{r})$ ფუნქციის საშუალოსათვის პირდაპირ შეგვიძლია გამოვიყენოთ (37,7) ფორმულა

$$\overline{A(\mathbf{r})} = \frac{\int A(\mathbf{r}) |\psi(\mathbf{r})|^2 d\mathbf{r}}{\int |\psi|^2 d\mathbf{r}}. \tag{37,8}$$

სანამ $A(\mathbf{r})$ გამრავლების ოპერატორია, (37,8) გამოსახულება ასეც შეგვიძლია გადავწეროთ:

$$\overline{A(\mathbf{r})} = \frac{\int \psi^* A(\mathbf{r})\, \psi\, d\mathbf{r}}{\int |\psi^2|\, d\mathbf{r}}; \tag{37,9}$$

მაგრამ, როცა A ოპერატორს წარმოადგენს, (37,8) ფორმულის გადაწერა (37,9) სახით აღარ შეიძლება. მიუხედავად ამისა კვანტური მექანიკის თავისებურება გვკარნახობს, რომ კვანტურ მექანიკური საშუალო განვმარტოთ შემდეგი ფორმულით:

$$\overline{A} = \frac{\int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(\mathbf{r})\, \hat{A}\psi(\mathbf{r}) d\mathbf{r}}{\int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}) d\mathbf{r}} = \frac{\langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle}. \tag{37,10}$$

როცა ψ ფუნქცია ნორმირებულია ერთზე, მაშინ (37,10) მიიღებს სახეს[1]

$$\overline{A} = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^* \hat{A} \psi d\tau = \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle. \qquad (37,11)$$

საშუალოს ასეთი განზოგადება აუცილებელია, რამდენადაც სხვა გზით ვერ მივიღებდით ფორმულას, რომლის მიხედვით საშუალო მნიშვნელობას ექნებოდა საშუალო სიდიდის ყველა თვისება. მაგალითად, როცა სიდიდეს გარკვეული მნიშვნელობა აქვს, მაშინ მისი საშუალო ამ სიდიდეს უნდა ემთხვეოდეს. კვანტური მექანიკის თანახმად სიდიდეს გარკვეული მნიშვნელობა აქვს იმას ნიშნავს, რომ $\hat{A}\psi = A\psi$, მაშინ საშუალოსათვის გვექნება

$$\overline{A} = \int \psi^* \hat{A} \psi \, d\tau = A \int \psi^* \psi d\tau = A. \qquad (37,12)$$

(37,11) განმარტებიდან აგრეთვე გამომდინარეობს, რომ ჯამის საშუალო მნიშვნელობა უდრის საშუალო მნიშვნელობათა ჯამს; მართლაც, როცა $\hat{A} = \hat{L} + \hat{M}$, მაშინ

$$\int \psi^* \hat{A} \psi d\tau = \int \psi^* \hat{L} \psi d\tau + \int \psi^* \hat{M} \psi d\tau, \qquad (37,13)$$

საიდანაც

$$\overline{A} = \overline{L} + \overline{M}. \qquad (37,14)$$

(37,11) განმარტებიდან ასევე მარტივად გამომდინარეობს საშუალოს ყველა სხვა თვისება.

როცა საშუალო მნიშვნელობას განვმარტავთ დროზე დამოკიდებული ფუნქციებით, მაშინ საშუალო სიდიდე დროის ფუნქცია იქნება

$$\overline{A(t)} = \int \psi^* (\mathbf{r}, t) \hat{A} \psi (\mathbf{r}, t) \, d\tau = \langle \psi(t) | \hat{A} | \psi(t) \rangle. \qquad (37,15)$$

ახლა ვიპოვოთ საშუალო მნიშვნელობის ფორმულა მატრიცული სახით. ამ მიზნით გავშალოთ $\psi(\mathbf{r})$ ფუნქცია რაიმე დისკრეტული სპექტრის მქონე ოპერატორის საკუთარი $\{\psi_n\}$ ფუნქციების მწკრივად

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_n a_n \psi_n(\mathbf{r}), \qquad (37,16)$$

სადაც a_n ფურიე-კოეფიციენტია. ეს ფუნქცია შევიტანოთ (37,11) განმარტებაში; გვექნება

$$\overline{A} = \sum_n \sum_m a_m^* a_n \int \psi_m^* \hat{A} \psi_n d\tau. \qquad (37,17)$$

თუ გავიხსენებთ მატრიცული ელემენტის განმარტებას, შეგვიძლია დავწეროთ

$$\overline{A} = \sum_m \sum_n a_m^* A_{mn} a_n. \qquad (37,18)$$

ამ ფორმულით გამოითვლება ნებისმიერი ფიზიკური სიდიდის საშუალო მნიშვნელობა. როცა მატრიცა მოცემულია თავის საკუთარ წარმოდგენაში, მაშინ $A_{mn} = A_n \delta_{mn}$ და (37,18)-დან მივიღებთ

---

[1] კვანტურ მექანიკაში საშუალო მნიშვნელობას ხშირად ასეც აღნიშნავენ $\overline{A} = \langle A \rangle$; ამ აღნიშვნას ზოგჯერ ჩვენც გამოვიყენებთ.

$$\overline{A}=\sum_m A_m|a_m|^2. \tag{37,19}$$

თუ a_m^* კოეფიციენტების ერთობლიობას განვიხილავთ როგორც ერთსტრიქონიან მატრიცას

$$\Phi^+=(a_1^*\ a_2^*\ a_3^*\ldots), \tag{37,20}$$

ხოლო a_m კოეფიციენტების ერთობლიობას როგორც ერთსვეტიან Φ-მატრიცას, მაშინ სამი მატრიცის გამრავლების წესის თანახმად (37,18) შეგვიძლია შემდეგი სახითაც გადავწეროთ:

$$\overline{A}=\Phi^+A\Phi. \tag{37,21}$$

ეს არის საშუალო მნიშვნელობის ფორმულა მატრიცული სახით; ამასთან, A არის მატრიცა, რომლის ელემენტებია A_{mn}.

ვიპოვოთ საშუალო მნიშვნელობის ცვლილება დროის მიხედვით. (37,15) ფორმულის თანახმად შეგვიძლია დავწეროთ

$$\frac{d\overline{A}}{dt}=\left\langle\frac{\partial\psi}{\partial t}\,|\,\hat{A}\,|\psi\right\rangle+\langle\psi|\,\frac{\partial\hat{A}}{\partial t}\,|\psi\rangle+\left\langle\psi\,|\,\hat{A}\,|\frac{\partial\psi}{\partial t}\right\rangle \tag{37,22}$$

მარჯვნივ მეორე წევრი წარმოადგენს $\frac{\partial A}{\partial t}$-ს საშუალოს. პირველ და ბოლო წევრში $\frac{\partial\psi}{\partial t}$ განვსაზღვროთ შრედინგერის განტოლებიდან $\frac{\partial\psi}{\partial t}=\frac{1}{i\hbar}\hat{H}\psi$; გვექნება

$$\frac{d\overline{A}}{dt}=\overline{\frac{\partial\hat{A}}{\partial t}}+\langle\psi|\,\frac{i}{\hbar}\,(\hat{H}\hat{A}-\hat{A}\hat{H})|\psi\rangle. \tag{37,23}$$

თუ გავიხსენებთ პუასონის კვანტური ფრჩხილების განმარტებას, საბოლოოდ მივიღებთ:

$$\overline{\frac{d\hat{A}}{dt}}=\frac{\partial\hat{A}}{\partial t}+\overline{[\hat{H},\hat{A}]}; \tag{37,24}$$

მეორე მხრივ, მოძრაობის კვანტური განტოლების გასაშუალოებით გვექნება

$$\overline{\frac{d\hat{A}}{dt}}=\frac{\overline{\partial\hat{A}}}{dt}+\overline{[\hat{H},\hat{A}]}, \tag{37,25}$$

საიდანაც მივიღებთ

$$\frac{\overline{d\hat{A}}}{dt}=\frac{d\overline{A}}{dt}, \tag{37,26}$$

ე. ი. ოპერატორის საშუალო მნიშვნელობის წარმოებული დროით უდრის ოპერატორის დროის მიხედვით წარმოებულის საშუალოს. (37,26) თვისებაც კლასიკური საშუალო მნიშვნელობის ერთ-ერთ თვისებას ემთხვევა.

§ 38. ერთი წარმოდგენის ფუნქციიდან მეორეზე გადასვლა

აქამდე ჩვენ ვსარგებლობდით კოორდინატული წარმოდგენით. ამ შემთხვევაში, $|\psi(x,y,z)|^2d\tau$ გამოხატავდა ნაწილაკის მოხვედრის ალბათობას $d\tau$ მოცულობაში. ხშირად საჭიროა არა მხოლოდ მდებარეობის ალბათობის განსაზღვრა, არამედ ნაწილაკის იმპულსის, ენერგიის, მომენტის და ა. შ. ალბათობების განსაზღვრაც. აშკარაა ამისათვის საჭიროა ψ ფუნქცია ისე გარდავქმნათ, რომ დამო-

უკიდებელ ცვლადებად გვქონდეს არა კოორდინატები, არამედ იმპულსები, ენერგია, მომენტი და ა. შ. ან, სხვანაირად რომ ვთქვათ, საჭიროა კოორდინატული წარმოდგენიდან გადავიდეთ ახალ წარმოდგენაზე: იმპულსურზე, ენერგეტიკულზე და ა. შ. ჩვენი მიზანია გამოვარკვიოთ, თუ როგორ ხდება ერთი წარმოდგენის ტალღური ფუნქციებიდან მეორე წარმოდგენის ფუნქციებზე გადასვლა.

დავუშვათ, რომ მოცემული გვაქვს ტალღური ფუნქცია $\psi(r)$ კოორდინატულ წარმოდგენაში. როგორ გადავიდეთ ახალ წარმოდგენაზე? ამისათვის საჭიროა გამოვარკვიოთ, თუ რა სახე ექნება ტალღურ ფუნქციას ახალ ცვლადებში.

განვიხილოთ ჯერ დისკრეტული სპექტრის შემთხვევა. ვთქვათ, ჩვენ გვაინტერესებს იმ ფიზიკური სიდიდის შესაბამის $\hat{L}$ ოპერატორის წარმოდგენაზე გადასვლა, რომელსაც აქვს დისკრეტული სპექტრი:

$$\psi_1,\ \psi_2,\ \psi_3 \cdots \psi_n, \cdots \tag{38,1}$$

აშკარაა, რომ $\hat{L}$ ოპერატორის ერმიტულობის გამო (38,1) ფუნქციები ორთონორმირებული იქნებიან. კოორდინატული წარმოდგენის $\psi(r)$ ტალღური ფუნქცია გავშალოთ (38,1) ფუნქციების მიხედვით. თანახმად (13,8) ფორმულისა გვექნება

$$\psi(r) = \sum_{k=1}^{n} c_k \psi_k(r), \tag{38,2}$$

სადაც კოეფიციენტი c_k განისაზღვრება შემდეგი ფორმულით:

$$c_k = \int \psi(r)\, \psi_k^*(r)\, dr. \tag{38,3}$$

ადვილია იმის ჩვენება, რომ c_k კოეფიციენტების ერთობლიობა წარმოადგენს ტალღურ ფუნქციას $\hat{L}$ ოპერატორით განსაზღვრული ფიზიკური სიდიდის წარმოდგენაში. კერძოდ ვაჩვენოთ, რომ $|c_k|^2$ არის ალბათობა იმისა, რომ იმ მდგომარეობაში, რომელიც $\psi(r)$-ით აღიწერება, ნაწილაკის დამახასიათებელ λ ფიზიკურ სიდიდეს აქვს მნიშვნელობა $\lambda = \lambda_k$.

ამისათვის ვიპოვოთ $\hat{L}$ ოპერატორის შესაბამისი ფიზიკური სიდიდის საშუალო მნიშვნელობა. თანახმად (37,11) ფორმულისა, გვაქვს

$$\overline{\lambda} = \int \psi^*(r) \hat{L} \psi(r)\, dr, \tag{38,4}$$

თუ $\psi(r)$ ფუნქციის მნიშვნელობას შევიტანთ (38,2) ფორმულიდან, მივიღებთ

$$\overline{\lambda} = \sum_k \sum_n c_k^* c_n \int \psi_k^*(r)\, \hat{L} \psi_n(r)\, dr. \tag{38,5}$$

რადგან $\psi_n(r)$ ფუნქციები $\hat{L}$ ოპერატორის საკუთარი ფუნქციებია, ამიტომ $\hat{L}\psi_n = \lambda_n \psi_n$; შედეგად $\overline{\lambda}$ მიიღებს შემდეგ სახეს:

$$\overline{\lambda} = \sum_k \sum_n c_k^* c_n \lambda_n \int \psi_k^*(r)\, \psi_n(r)\, dr. \tag{38,6}$$

თუ გავითვალისწინებთ, რომ $\psi_n(r)$ ფუნქციები ორთო-ნორმირებულია, შეიძლება დავწეროთ

$$\overline{\lambda} = \sum_k \sum_n c_k^* c_n \lambda_n \delta_{kn}, \tag{38,7}$$

რაც საბოლოოდ მოგვცემს

$$\overline{\lambda}=\sum_k \lambda_k |c_k|^2. \qquad (38,8)$$

თუ (38,8)-ს შევადარებთ (37,3) ფორმულას, მართლაც დავინახავთ, რომ

$$w_k=|c_k|^2 \qquad (38,9)$$

ასრულებს ალბათობის როლს. სახელდობრ, იგი გამოხატავს იმის ალბათობას, რომ ფიზიკურ λ სიდიდეს ექნება λ_k მნიშვნელობა. $\psi(\mathbf{r})$ ფუნქციის გაშლის კოეფიციენტთა ერთობლიობა $\{c_k\}$ ყოფილა ტალღური ფუნქცია ახალ წარმოდგენაში. როცა გვინდა გადასვლა ისეთი ფიზიკური სიდიდის წარმოდგენაზე, რომელსაც აქვს უწყვეტი სპექტრი, საჭიროა კოორდინატული $\psi(\mathbf{r})$ ტალღური ფუნქცია გავშალოთ უწყვეტი სპექტრის შესაბამისი ტალღური $\psi(\mathbf{r}, \lambda)$ ფუნქციების მიხედვით ფურიეს ინტეგრალად, ე. ი.

$$\psi(\mathbf{r})=\int a(\lambda)\psi(\mathbf{r},\lambda)d\lambda. \qquad (38.10)$$

სრულიად ანალოგიურად წყვეტილი სპექტრისა, კომპონენტი

$$a(\lambda)=\int \psi(\mathbf{r})\,\psi^*(\mathbf{r},\lambda)\,d\mathbf{r} \qquad (38,10)$$

იქნება ტალღური ფუნქცია ფიზიკური „λ სიდიდის წარმოდგენაში". სახელდობრ, $|a(\lambda)|^2 d\lambda$ გამოხატავს ალბათობას იმისა, რომ სიდიდე λ მოხვდება $(\lambda, \lambda+d\lambda)$ შუალედში. შევნიშნოთ, რომ ტალღური ფუნქციები ახალ წარმოდგენაში ნორმირებული იქნება, თუ ისინი ნორმირებული იყვნენ ძველ წარმოდგენაში. მართლაც, თანახმად (38,2) ფორმულისა, გვექნება

$$\int \psi^*\,\psi\,d\mathbf{r}=\sum_{k,n} c_k^*\,c_n \int \psi_k^*\,\psi_n\,d\mathbf{r}=\sum_{k,n} c_k c_n\,\delta_{kn}=\sum_k |c_k|^2=1. \qquad (38,11)$$

უწყვეტი სპექტრის შემთხვევაში, თანახმად (38,10) ფორმულისა, შეიძლება დავწეროთ

$$\int \psi^*(\mathbf{r})\,\psi(\mathbf{r})\,d\mathbf{r}=\int d\mathbf{r}\int\int d\lambda\,d\lambda'\,a(\lambda)a^*(\lambda')\,\psi(\mathbf{r},\lambda)\,\psi^*(\mathbf{r},\lambda)=$$

$$=\iint a^*(\lambda')\,a(\lambda)d\lambda\,d\lambda'\int \psi^*(\mathbf{r},\lambda')\,\psi(\mathbf{r},\lambda)\,d\mathbf{r}=1. \qquad (38,12)$$

რადგან

$$\int \psi^*(\mathbf{r},\lambda')\,\psi(\mathbf{r},\lambda)\,d\mathbf{r}=\delta(\lambda'-\lambda), \qquad (38,13)$$

ამიტომ

$$\int \psi^*(\mathbf{r})\,\psi(\mathbf{r})\,d\mathbf{r}=\int a^*(\lambda)a(\lambda)d\lambda=1. \qquad (38,14)$$

შემდგომში განსაკუთრებით მნიშვნელოვანი იქნება იმპულსურ წარმოდგენაზე გადასვლა. ამ მიზნით, რადგან იმპულსის ოპერატორის სპექტრი უწყვეტია, საჭიროა ტალღური ფუნქცია კოორდინატულ წარმოდგენაში გავშალოთ ფურიეს ინტეგრალად იმპულსის ოპერატორის საკუთარი ფუნქციების მიხედვით. ეს გაშლა ჩვენ ნაპოვნი გვაქვს § 30-ში, ამიტომ ტალღურ ფუნქციას იმპულსურ წარმოდგენაში (30,2) ფორმულის თანახმად ექნება შემდეგი სახე:

$$a(\mathbf{p})=(2\pi\hbar)^{-3/2}\int_{-\infty}^{+\infty}\psi(\mathbf{r})\,e^{-\frac{i}{\hbar}\mathbf{pr}}d\mathbf{r}. \qquad (38,15)$$

$|a(\mathbf{p})|^2 d\mathbf{p}$ გამოხატავს ალბათობას იმისა, რომ ნაწილაკის იმპულსი ძევს $(\mathbf{p}, \mathbf{p}+d\mathbf{p})$ შუალედში.

ჩვენ ზემოთ განვიხილეთ კოორდინატულიდან ახალ წარმოდგენაზე გადასვლა. აშკარაა, რომ იგივე ფორმულები სამართლიანია ერთი ნებისმიერი წარმოდგენიდან მეორე ნებისმიერ წარმოდგენაზე გადასასვლელად. ამგვარად, გვაქვს მნიშვნელოვანი შედეგი:

თუ მოცემული გვაქვს ტალღური ფუნქცია ერთ რომელიმე წარმოდგენაში, მაშინ იმისათვის, რათა გადავიდეთ რაიმე სხვა ფიზიკური სიდიდის შესაბამის წარმოდგენაზე, საჭიროა მოცემული წარმოდგენის ტალღური ფუნქცია გავშალოთ ამ ფიზიკური სიდიდის შესაბამისი ოპერატორის საკუთარი ფუნქციების მწკრივად (როცა ოპერატორს აქვს დისკრეტული სპექტრი) ან ინტეგრალად (როცა ოპერატორს აქვს უწყვეტი სპექტრი). გაშლის კოეფიციენტი (კომპონენტი) წარმოადგენს სწორედ ტალღურ ფუნქციას ახალ წარმოდგენაში.

§ 28-ში აღვნიშნეთ, რომ ყოველი ოპერატორი თავის საკუთარ წარმოდგენაში გამრავლების ოპერატორია, იმ დროს როდესაც სხვა ოპერატორებს ამ წარმოდგენაში შეიძლება ჰქონდეთ რთული სახე. მაგალითად, „x-წარმოდგენაში“ კოორდინატი და მისი ნებისმიერი ფუნქცია გამრავლების ოპერატორებია, იმპულსი კი გამოხატავს $\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar\nabla$ ოპერაციას. ასევე იმპულსურ წარმოდგენაში იმპულსი და მისი ნებისმიერი ფუნქცია გამრავლების ოპერატორი იქნება, კოორდინატი კი — რთული ოპერატორი. ვიპოვოთ ამ ოპერატორის სახე. ამისათვის, ისევე, როგორც იმპულსის ოპერატორის მოძებნისას მოვიქცეთ, გამოვიდეთ პუასონის ფრჩხილების თვისებიდან. ჩვენ გვქონდა, რომ $[p_x, \hat{x}] = 1$, გავამრავლოთ ეს ფრჩხილები $a(p_x)$ ფუნქციაზე და გამოვიყენოთ პუასონის ფრჩხილების განმარტება; გვექნება

$$\frac{i}{\hbar}(p_x \hat{x} - x\hat{p}_x)\, a(p_x) = a(p_x). \tag{38,16}$$

ამ განტოლებას კი აკმაყოფილებს შემდეგი გამოსახულება:

$$\hat{x} = i\hbar \frac{\partial}{\partial p_x}. \tag{38,17}$$

სრულიად ანალოგიურად გვექნება

$$\hat{y} = i\hbar \frac{\partial}{\partial p_y}, \qquad \hat{z} = i\hbar \frac{\partial}{\partial p_z}. \tag{38,18}$$

ან, ვექტორულად,

$$\hat{\mathbf{r}} = i\hbar \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}} = i\hbar \nabla_p. \tag{38,19}$$

რადგან ვიცით კოორდინატისა და იმპულსის ოპერატორები „p-წარმოდგენაში“, შეგვიძლია ამ წარმოდგენაში ვიპოვოთ სხვა ნებისმიერი ოპერატორის სახეც. მაგალითად, ენერგიის ოპერატორისათვის მივიღებთ გამოსახულებას

$$\hat{H} = \frac{\mathbf{p}^2}{2\mu} + V\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}}, t\right), \tag{38,20}$$

სადაც $V(i\hbar\nabla_p, t)$ არის პოტენციალური ენერგიის ოპერატორი. შრედინგერის არასტაციონარული მდგომარეობების განტოლებას იმპულსურ წარმოდგენაში ექნება შემდეგი სახე:

$$\left\{V\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}}, t\right) + \frac{\mathbf{p}^2}{2\mu}\right\} a(\mathbf{p}, t) = i\hbar \frac{\partial a(\mathbf{p}, t)}{\partial t}. \tag{38,21}$$

სტაციონარულ მდგომარეობაში მარჯვნივ, ნაცვლად $i\hbar\frac{\partial}{\partial t}$ ოპერატორისა, სრული ენერგია დაიწერება

$$\left\{V(i\hbar\nabla_p)+\frac{p^2}{2\mu}\right\}a(\mathbf{p})=Ea(\mathbf{p}). \tag{38,22}$$

როცა ტალღური ფუნქცია განსაზღვრულია ერთ წარმოდგენაში, მაშინ სხვა რომელიმე წარმოდგენაში ტალღური ფუნქციის საპოვნელად საჭიროა ზემოთ მიღებული ფორმულების გამოყენება. თუ ტალღური ფუნქცია ცნობილი არ არის არც ერთ წარმოდგენაში, მაშინ საჭიროა შრედინგერის განტოლების ამოხსნა სასურველ წარმოდგენაში. ამასთან, მნიშვნელოვანია აღინიშნოს, რომ ერთი და იმავე ამოცანის ამოხსნა სხვადასხვა წარმოდგენაში განსხვავებული სირთულისა შეიძლება იყოს. ამიტომ კონკრეტული ამოცანის გადაწყვეტისას დიდი მნიშვნელობა აქვს წარმოდგენის შერჩევას.

§ 39. ჰაიზენბერგის განუზღვრელობის თანაფარდობა

ჩვენ ადრე ვაჩვენეთ, რომ კვანტურ მექანიკაში ადგილი აქვს ე. წ. ჰაიზენბერგის განუზღვრელობის თანაფარდობას კოორდინატებისა და იმპულსებისათვის. თურმე, კოორდინატისა და იმპულსის განუზღვრელობა ოპერატორთა ენაზე იმას ნიშნავს, რომ კოორდინატისა და იმპულსის ოპერატორები ერთმანეთთან არ კომუტირებენ; სახელდობრ, როგორც ვიცით, მათი პუასონის ფრჩხილები ტოლია ერთის $[\hat{p}_x, x]=1$. მაგრამ კვანტურ მექანიკაში ბევრია ისეთი ფიზიკური სიდიდე, რომელთა შესაბამისი ოპერატორები ერთმანეთთან კომუტატური არ არიან, ამიტომ განუზღვრელობის თანაფარდობას ადგილი ექნება ნებისმიერი ისეთი ორი ფიზიკური სიდიდისათვის, რომელთა შესაბამისი ოპერატორები გადასმადი არ არიან.

განვიხილოთ ორი ერმიტული ოპერატორი $\hat{L}$ და $\hat{M}$. დავუშვათ, რომ ეს ოპერატორები არაკომუტატურია და გვაქვს შემდეგი ტოლობა:

$$[\hat{L},\hat{M}]\psi=\hat{O}\psi, \tag{39,1}$$

სადაც $\hat{O}$ აგრეთვე ერმიტული ოპერატორია. კერძო შემთხვევაში $\hat{O}$ ოპერატორი შეიძლება მუდმივიც იყოს. კანონიკური $\hat{L}$ და $\hat{M}$ ოპერატორებისათვის $\hat{O}=1$ (მაგალითად p_x და x-ისათვის).

ψ ფუნქცია ცხადია საკუთარი ფუნქცია არ იქნება $\hat{L}$ და $\hat{M}$ ოპერატორებისა. განვიხილოთ $\hat{L}$ და $\hat{M}$ ოპერატორთა საშუალო მნიშვნელობები

$$\overline{L}=\langle\psi|\hat{L}|\psi\rangle,\quad \overline{M}=\langle\psi|\hat{M}|\psi\rangle, \tag{39,2}$$

შევადგინოთ ფლუქტუაციები

$$\overline{(\Delta L)^2}=\overline{(\hat{L}-\overline{L})^2},\ \overline{(\Delta M)^2}=\overline{(\hat{M}-\overline{M})^2}. \tag{39,3}$$

დავამტკიცოთ, რომ თუ შესრულებულია (39,1) ტოლობა, მაშინ

$$\overline{(\Delta L)^2}\ \overline{(\Delta M)^2}\geqslant\frac{\hbar^2}{4}|\overline{O}|^2, \tag{39,4}$$

რომელსაც განუზღვრელობის ზოგად თანაფარდობას ეუწოდებთ. დამტკიცების მიზნით შემოვიღოთ აღნიშვნები:

$$\hat{a}=\Delta\hat{L}=\hat{L}-\overline{L},\quad \hat{b}=\Delta\hat{M}=\hat{M}-\overline{M}, \tag{39,5}$$

მაშინ (39,1)-ის თანახმად

$$[\hat{a}+\bar{L},\ \hat{b}+\bar{M}]=\hat{O}. \tag{39,6}$$

რადგან $\bar{L}$ და $\bar{M}$ ჩვეულებრივი რიცხვებია, ამიტომ

$$[\hat{a},\hat{b}]=\frac{i}{\hbar}(\hat{a}\hat{b}-\hat{b}\hat{a})=\hat{O}. \tag{39,7}$$

შევადგინოთ სკალარული ნამრავლი

$$\langle\hat{a}\psi|\hat{b}\psi\rangle=\int(\hat{a}\psi)^{*}\hat{b}\psi\,d\tau \tag{39,8}$$

და განვიხილოთ მისი წარმოსახვითი ნაწილი. აშკარაა, რომ

$$2iIm\langle\hat{a}\psi|\hat{b}\psi\rangle=\langle\hat{a}\psi|\hat{b}\psi\rangle-\langle\hat{a}\psi|\hat{b}\psi\rangle^{*}. \tag{39,9}$$

თუ გამოვიყენებთ სკალარული ნამრავლის თვისებას $\langle\hat{a}\psi|\hat{b}\psi\rangle^{*}=\langle\hat{b}\psi|\hat{a}\psi\rangle$, მაშინ მივიღებთ

$$2iIm\langle\hat{a}\psi|\hat{b}\psi\rangle=\langle\psi|\hat{a}\hat{b}-\hat{b}\hat{a}|\psi\rangle. \tag{39,10}$$

(39 7) გამოსახულების გასაშუალებით და (39,10)-ის გათვალისწინებით გვექნება

$$2i\,Im\langle\hat{a}\psi|\hat{b}\psi\rangle=\frac{\hbar}{i}\overline{O}, \tag{39,11}$$

სადაც $\overline{O}=\langle\psi|\hat{O}|\psi\rangle$. (39,11) გამოსახულების მოდულის კვადრატისათვის გვექნება შემდეგი უტოლობა:

$$\hbar^{2}|\overline{O}|^{2}=4|Im\langle\hat{a}\psi|\hat{b}\psi\rangle|^{2}\leqslant 4|\langle\hat{a}\psi|\hat{b}\psi\rangle|^{2}. \tag{39,12}$$

დაბოლოს, თუ გამოვიყენებთ შვარც-ბუნიაკოვსკის (9,20) უტოლობას შეგვიძლია დავწეროთ

$$\frac{\hbar^{2}}{4}|\overline{O}|^{2}\leqslant|\langle\hat{a}\psi|\hat{b}\psi\rangle|^{2}\leqslant\langle\hat{a}\psi|\hat{a}\psi\rangle\langle\hat{b}\psi|\hat{b}\psi\rangle. \tag{39,13}$$

$\hat{a}$ და $\hat{b}$ ერმიტული ოპერატორებია, ამიტომ $\langle\hat{a}\psi|\hat{a}\psi\rangle=\langle\psi|\hat{a}^{2}|\psi\rangle$ და $\langle\hat{b}\psi|\hat{b}\psi\rangle=\langle\psi|\hat{b}^{2}|\psi\rangle$. მაშასადამე

$$\frac{\hbar^{2}}{4}|\overline{O}|^{2}\leqslant\langle\psi|\hat{a}^{2}|\psi\rangle\langle\psi|\hat{b}^{2}|\psi\rangle=\overline{(\Delta L)^{2}}\,\overline{(\Delta M)^{2}}, \tag{39,14}$$

რაც ეწოდება დასამტკიცებელ ფორმულას.

რადგან იმპულსისა და კოორდინატების პუასონის ფრჩხილები $[\hat{p_i},\hat{x_k}]=\delta_{ik}$, ამიტომ გვექნება ჰაიზენბერგის განუზღვრელობის პრინციპის ზოგადი გამოხატვა კოორდინატისა და იმპულსის მდგენელებისათვის:

$$\overline{(\Delta p_{x})^{2}}\,\overline{(\Delta x)^{2}}\geqslant\frac{\hbar^{2}}{4}, \tag{39,15}$$

$$\overline{(\Delta p_{y})^{2}}\,\overline{(\Delta y)^{2}}\geqslant\frac{\hbar^{2}}{4}, \tag{39,16}$$

$$\overline{(\Delta p_{z})^{2}}\,\overline{(\Delta z)^{2}}\geqslant\frac{\hbar^{2}}{4}. \tag{39,17}$$

ათვლის სისტემა ყოველთვის შეგვიძლია ისე შევარჩიოთ, რომ $\overline{x_i} = \overline{p_i} = 0$, მაშინ

$$\overline{(\Delta x_i)^2} = \overline{x_i^2} \quad \text{და} \quad \overline{(\Delta p_i)^2} = \overline{p_i^2}. \tag{39,18}$$

და (39,18) ფორმულა ასე გადაიწერება:

$$\overline{x^2}\,\overline{p_x^2} \geqslant \frac{\hbar^2}{4}, \tag{39,18'}$$

საიდანაც

$$\sqrt{\overline{x^2}}\,\sqrt{\overline{p_x^2}} \geqslant \frac{\hbar}{2}. \tag{39,19}$$

განუზღვრელობის პრინციპის გამოხატულება კოორდინატისა და იმპულსისათვის შეიძლება შეგვხვდეს ერთ-ერთი ზემოთ განხილული სახით.

როგორც ვიცით, ენერგიის ოპერატორი $\hat{E} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$ და t დრო კანონიკურად შეუღლებული სიდიდეებია (ე. ფორმალურად პაუსონის ფრჩხილები $[\hat{E}, t] = 1$). ამიტომ გვექნება

$$\Delta E\, \Delta t \geqslant \frac{\hbar}{2}. \tag{39,20}$$

ამ თანაფარდობას უწოდებენ განუზღვრელობის თანაფარდობას ენერგიისათვის, თუმცა მას არაფერი აქვს საერთო განუზღვრელობის იმ შინაარსთან, რომელიც (39,18) ფორმულას ახასიათებს.

როცა ამბობენ, არსებობს განუზღვრელობა კოორდინატსა და იმპულსს შორის, აუცილებლად გულისხმობენ, რომ ეს ორი სიდიდე არ შეიძლება ერთდროულად ზუსტად გაიზომოს, იმ დროს როცა ენერგია შეიძლება ზუსტად გაიზომოს დროის ნებისმიერად ზუსტად განსაზღვრულ მომენტში. სიდიდე $\Delta E = E' - E$ არის სხვაობა დროის სხვადასხვა მომენტში ზუსტად გაზომილ ენერგიის მნიშვნელობებს შორის და არა ენერგიის განუზღვრელობა დროის განსაზღვრულ მომენტში. ჩვენ შეგვიძლია ΔE-ს ქვეშ ვიგულისხმოთ კვანტური მექანიკური სისტემის (მაგალითად ატომის) აღგზნების ენერგია, მაშინ Δt წარმოადგენს სისტემის აღგზნებულ მდგომარეობაში ყოფნის ხანგრძლივობას. (39,20) თანაფარდობა ამ შემთხვევაში ნიშნავს, რომ რაც დიდია აღგზნების ენერგია, მით ნაკლებია აღგზნებული მდგომარეობის სიცოცხლის ხანგრძლივობა.

განუზღვრელობის თანაფარდობის გამოყენებით ხშირად მარტივად შეიძლება დადგინდეს მთელი რიგი მნიშვნელოვანი კვანტური დამოკიდებულებანი. საილუსტრაციოდ განვიხილოთ რამდენიმე მაგალითი.

1. ვიპოვოთ წრფივი ჰარმონიული ოსცილატორის ენერგიის მინიმალური მნიშვნელობა. როგორც ვიცით, ასეთი ოსცილატორის პოტენციალური ენერგია განისაზღვრება ფორმულით $V(x) = \frac{1}{2}\mu\omega^2 x^2$, სადაც μ მასაა, ω-სიხშირე. ჰამილტონის ოპერატორს ექნება სახე

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_x^2}{2\mu} + \frac{\mu\omega^2 x^2}{2}. \tag{39,21}$$

ცხადია, ენერგიის საშუალო მნიშვნელობა განისაზღვრება ფორმულით

$$\overline{E} = \frac{\overline{p_x^2}}{2\mu} + \frac{\mu\omega^2\overline{x^2}}{2}. \tag{39,22}$$

შევიტანოთ (38,18)-დან $\overline{x^2}$-ის მნიშვნელობა. მივიღებთ

$$\overline{E} \geqslant \frac{\overline{p_x^2}}{2\mu} + \frac{\mu\omega^2\hbar^2}{8\overline{p_x^2}}. \qquad (39,23)$$

ვიპოვოთ ამ გამოსახულების ექსტრემალური მნიშვნელობა $\overline{p_x^2}$-ის მიმართ. ამისათვის ამოვხსნათ $\partial\overline{E}/\partial\overline{p_x^2}=0$ განტოლება; მივიღებთ $(\overline{p_x^2})_{ext}=\frac{1}{2}\mu\omega\hbar$, რაც ენერგიის მინიმალური მნიშვნელობისათვის მოგვცემს

$$E_{min} \geqslant \frac{\hbar\omega}{2}. \qquad (39,24)$$

2. ვაჩვენოთ, რომ შეუძლებელია ელექტრონის არსებობა ატომის გულში. ელექტრონის საშუალო კინეტიკური ენერგია, (39.18) ფორმულის თანახმად, იქნება

$$\overline{E} = \frac{\overline{p^2}}{2\mu} \geqslant \frac{\hbar^2}{8\mu\overline{x^2}}, \qquad (39,25)$$

სადაც $\sqrt{\overline{x^2}}$ შეგვიძლია განვიხილოთ როგორც ელექტრონის ლოკალიზაციის ზომა, რომელიც ატომგულის საშუალო რადიუსის რიგისაა. თუ (39,25)-ში შევიტანთ $\sqrt{\overline{x^2}} \sim 10^{-13}$ სმ, $\mu = 10^{-28}$ გრ გვექნება

$$\overline{E} \simeq 10^{10} eV = 10^4 MeV; \qquad (39,26)$$

ასეთი იქნება ელექტრონის მოძრაობის ენერგია გულში, ელექტრონის პოტენციალური ენერგია კი, $V=\frac{e^2}{r}$, $1MeV$-ის რიგისაა. ეს იმას ნიშნავს, რომ ასეთი მცირე მიზიდვის ენერგია ელექტრონს ატომის გულში ვერ დააკავებს.

3. განუზღვრელობის თანაფარდობიდან შეგვიძლია დავადგინოთ ის არე, სადაც მნიშვნელოვანია კვანტური ეფექტები. მართლაც,

$$\sqrt{\overline{x^2}} \geqslant \frac{\hbar}{\sqrt{\overline{p^2}}} = \frac{\hbar}{\mu\sqrt{\overline{v^2}}}, \qquad (39,27)$$

მაგრამ $\frac{\hbar}{\mu\sqrt{\overline{v^2}}}$ რიგით დე-ბროილის ტალღის სიგრძის ტოლია, ამიტომ კვანტური ეფექტები მნიშვნელოვანი იქნება იმ არეებში, რომლებისთვისაც დაცულია უტოლობა $x > \lambda\!\!\!^{-}_c$, სადაც $\lambda\!\!\!^{-}_c = \frac{\hbar}{\mu c}$ კომპტონის ტალღის სიგრძეა.

4. ვიპოვოთ, რისი ტოლია მეზონის მასა. გამოვიყენოთ განუზღვრელობის თანაფარდობა ენერგიისა და დროისათვის. ვიგულისხმოთ, რომ გვაქვს ნუკლონი (ნეიტრონი ან პროტონი), რომელიც ასხივებს და შთანთქავს მეზონს. მეზონის მასა იყოს μ_x. რადგან გამოსხივებული მეზონის უძრაობის ენერგია $\mu_x c^2$-ის ტოლია, ამიტომ, თანახმად (39,20) ფორმულისა, გვექნება

$$\Delta t \sim \frac{\hbar}{\mu_x c^2}. \qquad (39,27')$$

მაქსიმალური მანძილი, რომელზედაც შეიძლება გამოსხივებული მეზონი დაშორდეს ნუკლონს, იქნება $\sim c\Delta t$, ე. ი.

$$\Delta x_{max} \simeq = c\Delta t \frac{\hbar}{\mu_x c} = \lambda_c, \qquad (39,28)$$

სადაც Δx_{max} შეგვიძლია განვიხილოთ როგორც მეზონის ლოკალიზაციის ზომა. თუ მოვითხოვთ, რომ Δx_{max} სიდიდის რიგით ატომგულური ძალების რადიუსის ტოლი იყოს, ე. ი. $\Delta x_{max} \sim 10^{-13}$ სმ, მაშინ მივიღებთ $\mu_x \sim 200\mu_e$.

5. გამოვარკვიოთ ერთი მნიშვნელოვანი საკითხი. განუზღვრელობის თანაფარდობის არსებობის გამო ტრაექტორიას კვანტურ მექანიკაში აზრი არა აქვს. ჩვენ კი ვიცით, რომ ვილსონის კამერაში მთელი რიგი დაკვირვებების დროს ხედავენ ნაწილაკის ტრაექტორიას და მის ფოტოგრაფირებასაც ახდენენ. ამიტომ თითქოს წინააღმდეგობა გვაქვს განუზღვრელობის თანაფარდობასთან; მაგრამ მარტივად ვაჩვენებთ, რომ სინამდვილეში აქ არავითარი წინააღმდეგობა არა გვაქვს. მართლაც, როცა იმპულსის გაზომვის ცდომილება ძალიან მცირეა თვით იმპულსის სიდიდესთან შედარებით, ე.ი. როცა

$$\Delta p_x \ll p_x, \ \Delta p_y \ll p_y, \ \Delta p_z \ll p_z, \qquad (39,29)$$

მაშინ ტრაექტორიას გარკვეული აზრი აქვს და სწორედ ამ შემთხვევაში ვხედავთ მას ვილსონის კამერაში. გამოვითვალოთ, როგორი უნდა იყოს კვალის ხაზოვანი ზომა ვილსონის კამერაში, რომ შესრულებული იყოს (33,29) უტოლობები. განუზღვრელობის თანაფარდობის თანახმად, კვალის ხაზოვანი ზომა შეიძლება განვსაზღვროთ ფორმულით

$$\Delta x \sim \hbar/\Delta p_x. \qquad (39,30)$$

დავუშვათ, კამერაში გადის ნაწილაკი, რომლის ენერგია ტოლია $1 MeV$-ის. ამ შემთხვევაში ნაწილაკის იმპულსი ტოლი იქნება $p = \sqrt{2\mu E} = 5{,}4 \cdot 10^{-17}$ გრ. სმ. სეკ^{-1}. თუ ვიგულისხმებთ, რომ $p_x \approx \Delta p_x$, მაშინ $\Delta x \sim 10^{-10}$ სმ. ამიტომ ტრაექტორიას რომ აზრი ჰქონდეს, საჭიროა კვალის ხაზოვანი ზომა გაცილებით მეტი იყოს 10^{-10} სმ-ზე, რაც დაკვირვებული ტრაექტორიებისათვის ვილსონის კამერაში დაცულია.

საინტერესოა აღვნიშნოთ, რომ კვანტური მექანიკის ჩამოყალიბების დასაწყის პერიოდში ნაწილაკის ტრაექტორიის გამოჩენა ვილსონის კამერაში გაუგებარ მოვლენას წარმოადგენდა. სწორედ ამ მოვლენის ახსნამ მიიყვანა ჰაიზენბერგი განუზღვრელობის თანაყარდობის აღმოჩენამდე.

§ 40. მდგომარეობის კვანტური აღწერა

როგორც ცნობილია, კლასიკურ მექანიკაში ნაწილაკის (ან ნაწილაკთა სისტემის) აღწერისათვის საჭიროა ამოიხსნას მოძრაობის განტოლებანი შესაბამისი საწყისი პირობების გათვალისწინებით. კლასიკურ მექანიკაში მდგომარეობა სავსებით განსაზღვრულია, როცა ცნობილია ნაწილაკის მდებარეობა და იმპულსი. როდესაც მოცემულია ნაწილაკის მდებარეობა და იმპულსი დროის საწყისი $t = 0$ მომენტისათვის, კლასიკური მექანიკის მოძრაობის განტოლება საშუალებას გვაძლევს ვიპოვოთ ნაწილაკის მდგომარეობა დროის ყოველი შემდგომი მომენტისათვის. მაგალითად, თუ ნაწილაკისათვის ვიპოვეთ ნიუტონის განტოლების ამონახსნები:

$$x = f_1(t), \ y = f_2(t), \ z = f_3(t),$$

მაშინ მათი საშუალებით შეიძლება ზუსტად გამოითვალოს დროის მოცემული მომენტისათვის ყველა სხვა სიდიდე, მაგალითად, იმპულსი, ენერგია და სხვა.

იბადება კითხვა, როგორ უნდა მოხდეს ნაწილაკის (ან სისტემის) მდგომარეობის აღწერა კვანტურ მექანიკაში? კვანტურ მექანიკაში რომ მდგომარეობა კლასიკური მექანიკის ანალოგიურად, კოორდინატითა და იმპულსით ვერ დახასიათდება, ჩანს განუზღვრელობის თანაფარდობის არსებობიდან. ჩვენ ვაჩვენეთ, რომ

$$\Delta x\, \Delta p_x \sim \hbar. \qquad (40,1)$$

ეს იმას ნიშნავს, რომ კოორდინატის განსაზღვრის ცდომილება დაკავშირებულია იმპულსის განსაზღვრის ცდომილებასთან $\Delta x \sim \hbar/\Delta p_x$. არსებითია, რომ $\hbar$ უნივერსალური მუდმივია; ასე რომ უკანასკნელი ტოლობა არ არის დამოკიდებული არც იარაღის სიზუსტეზე და არც დამკვირვებლის მოხერხებულობაზე. თუ იმპულსი განსაზღვრულია ზუსტად, ე. ი $\Delta p_x = 0$, მაშინ ცდომილება კოორდინატის განსაზღვრაში $\Delta x = \infty$. ეს იმას ნიშნავს, რომ ნაწილაკის კოორდინატს გარკვეული მნიშვნელობა არა აქვს. უკანასკნელი შედეგია იმ ზოგადი ნებისა, რომელსაც ახდენს იმპულსის განმსაზღვრელი იარაღი მიკროობიექტზე.

§ 39-ში ჩვენ ვაჩვენეთ, რომ განუზღვრელობის თანაფარდობას ადგილი აქვს მთელი რიგი სხვა ფიზიკური სიდიდეების წყვილებს შორისაც—ე. წ. კანონიკურად შეუღლებულ სიდიდეებს შორის. ამგვარად, კვანტურ მექანიკაში არსებობს ისეთი ფიზიკური სიდიდეები, რომელთა ზუსტი გაზომვა ხელს უშლის სხვა სიდიდეების მნიშვნელობების ცოდნას ამიტომ კვანტურ მექანიკაში მდგომარეობის დახასიათებას კოორდინატითა და იმპულსით აზრი არა აქვს, რადგან მათ ერთდროულად ზუსტად განსაზღვრული მნიშვნელობები არა აქვთ. აშკარაა, რომ კვანტურ მექანიკაში მდგომარეობა უნდა დავახასიათოთ სხვანაირად. კერძოდ, იმ ფიზიკური სიდიდეებით, რომელთა გაზომვა ერთდროულად შეიძლება. თანაც ნათელია, რომ სხვადასხვა ამოცანაში მდგომარეობის დამახასიათებელი ფიზიკური სიდიდეები სულ სხვადასხვა იქნება.

თუ რამდენი ფიზიკური სიდიდით უნდა დახასიათდეს ესა თუ ის მდგომარეობა, დამოკიდებულია სისტემის თავისუფლების ხარისხთა რიცხვზე. კლასიკურ მექანიკაში, თუ სისტემის თავისუფლების ხარისხთა რიცხვი არის n, მა ინ მდგომარეობა ხასიათდება $2n$ სიდიდით (n კოორდინატითა და n იმპულსით). ირკვევა, რომ კვანტურ მექანიკაში მდგომარეობის დასახასიათებლად ორჯერ უფრო ნაკლები რიცხვი გვაქვს. კვანტურ მექანიკაში ამა თუ იმ ამოცანის გადაწყვეტა ნიშნავს შრედინგერის განტოლების ამოხსნას. როცა მოცემული გვაქვს ტალღური ფუნქციის საწყისი $\psi(r, 0)$ მნიშვნელობა, მაშინ შრედინგერის დროითი განტოლება საშუალებას გვაძლევს ვიპოვოთ ტალღური ფუნქცია დროის ნებისმიერ შემდგომ მომენტში, ე. ი. მოცემული საწყისი განაწილების ალბათობის საშუალებით შესაძლებელია განისაზღვროს განაწილების ალბათობა დროის ნებისმიერ შემდგომ მომენტში. განსაზღვრულობის მიზნით განვიხილოთ სტაციონარული მოძრაობა. შესაბამის შრედინგერის განტოლებას აქვს სახე

$$\hat{H}\psi = E\psi. \qquad (40,2)$$

ამ განტოლების სათანადო სასაზღვრო პირობებში ამოხსნის შედეგად ვიპოვით ენერგიასა და ტალღურ ფუნქციას. რადგან შრედინგერის განტოლება მოძრაობის განტოლებაა, ამიტომ ბუნებრივია დავასკვნათ, რომ $\psi(r)$ ფუნქცია განსაზღვრავს

მოცემული ამოცანის კვანტურ მდგომარეობას. ψ—ფუნქცია შეიცავს მაქსიმალურ ინფორმაციას, რისი მოცემაც კი შეუძლია კვანტურ მექანიკას.

ცხადია, რომ სისტემის დასახასიათებლად მხოლოდ სრული ენერგიის განსაზღვრა საკმარისი არ არის. ჩვენ დაგვჭირდება სხვა ფიზიკური სიდიდეების ცოდნაც. მაგალითად, იმპულსის, იმპულსის მომენტის და სხვა. ამიტომ საჭიროა გარკვეს, თუ ψ-ფუნქციით დახასიათებულ კვანტურ მდგომარეობაში როდისაა შესაძლებელი ენერგიასთან ერთად სხვა ფიზიკური სიდიდეების განსაზღვრაც. რადგან აღნიშნული სიდიდეების მოძებნა გვაინტერესებს ψ-მდგომარეობაში, ამიტომ სხვა რომელიმე ფიზიკური სიდიდის საპოვნელად, იგივე ψ-ფუნქციისათვის ადგილი უნდა ჰქონდეს განტოლებას

$$\hat{A}\psi = a\psi, \tag{40,3}$$

სადაც a ჩვენთვის საინტერესო ფიზიკური სიდიდეა, $\hat{A}$ კი მისი შესაბამისი ერმიტული ოპერატორი. ან, სხვანაირად რომ ვთქვათ, ψ ფუნქციით დახასიათებულ მდგომარეობაში ენერგიასთან ერთად a-ფიზიკური სიდიდის გაზომვა რომ შეიძლებოდეს, საჭიროა ψ ფუნქცია საერთო საკუთარი ფუნქცია იყოს $\hat{H}$ და $\hat{A}$ ოპერატორებისა, ე. ი. საჭიროა, რომ ეს ოპერატორები ურთიერთკომუტატურნი იყვნენ: $\hat{H}\hat{A} = \hat{A}\hat{H}$. თუ იგივე მდგომარეობაში გვაინტერესებს კიდევ სხვა რაიმე b ფიზიკური სიდიდის განსაზღვრა, მაშინ შესაბამისი $\hat{B}$ ოპერატორი კომუტატური უნდა იყოს როგორც ჰამილტონიანთან, ისე $\hat{A}$ ოპერატორთანაც.

ამგვარად, მივიღეთ მეტად მნიშვნელოვანი დასკვნა: ψ-ფუნქციით დახასიათებულ კვანტურ მდგომარეობაში ერთდროულად და ზუსტად გაიზომება ყველა ის ფიზიკური სიდიდე, რომელთა შესაბამისი ოპერატორებისათვის ψ იქნება საერთო საკუთარი ფუნქცია, ან სხვანაირად, რომელთა შესაბამისი ოპერატორები კომუტატური იქნებიან როგორც ერთმანეთთან, ისე ჰამილტონიანთან.

თავისთავად ცხადია, რომ ჰამილტონიანთან არაკომუტატური ოპერატორების საკუთარი მნიშვნელობების მოძებნა, ψ-თი დახასიათებულ მდგომარეობაში, შეუძლებელია. რადგან იმპულსის ოპერატორი კომუტატური არ არის კოორდინატთან $[\hat{p}_x, x] = 1$, ამიტომაც აქვს ადგილი კოორდინატისა და იმპულსის განუზღვრელობას. ასევე, როგორც ვნახეთ, იმპულსის მომენტის მდგენელების ოპერატორები ერთმანეთთან კომუტატური არ არიან, რის გამოც მათი საკუთარი მნიშვნელობების ერთდროულად ზუსტად განსაზღვრა შეუძლებელია. ერთდროულად შეიძლება გაიზომოს მომენტის კვადრატი და მისი მხოლოდ ერთ-ერთი მდგენელი.

აქედან გამომდინარეობს, რომ რაიმე მდგომარეობაში, რომელიც აიწერება ψ ფუნქციით, ყველა ფიზიკურ სიდიდეს როდი აქვს გარკვეული მნიშვნელობა. ჩვენ ვხედავთ, განსხვავებით კლასიკური მექანიკისაგან, რომ ფიზიკურ სიდიდეთა ერთობლიობა ორ ჯგუფად იყოფა. ერთ ჯგუფს მიეკუთვნება ის სიდიდეები, რომელთა შესაბამისი ოპერატორებისათვის ψ ფუნქცია წარმოადგენს საერთო საკუთარ ფუნქციას და რომლებსაც, მაშასადამე, განხილულ მდგომარეობაში აქვს გარკვეული მნიშვნელობა. ფიზიკური სიდიდეების ერთობლიობას, რომლებიც აღებულ მდგომარეობაში ერთდროულად ზუსტად გაიზომება, უწოდებენ გასაზომ სიდიდეთა სრულ კრებულს. ფიზიკურ სიდიდეთა მეორე ჯგუფს შეადგენენ დანარჩენი სიდიდეები, რომელთათვისაც ψ ფუნქცია არ წარმოადგენს საკუთარ ფუნქციას და რომელთა ოპერატორებიც წინა ჯგუფის ფიზიკურ სიდიდეთა შესაბამის ოპერა-

ტორებთან კომუტატური არ არიან. ამ ჯგუფის სიდიდეებზე ამბობენ, რომ მათ იმ მდგომარეობაში, რომელიც აიწერება $\psi(r)$ ფუნქციით, გარკვეული მნიშვნელობა არა აქვთ.

მდგომარეობის აღწერას $\psi(r)$ ფუნქციით, რომლის საშუალებით განისაზღვრება ერთი ჯგუფის ფიზიკურ სიდიდეთა მნიშვნელობა, ე. ი. ფიზიკურ სიდიდეთა სრული კრებული, უწოდებენ მდგომარეობის კვანტურ აღწერას.

ამგვარად, თუ ვიცით ტალღური ფუნქცია $\psi(r)$, მაშინ კვანტურ მექანიკაში მდგომარეობა განსაზღვრულია და შესაძლებელია მოვძებნოთ ფიზიკურ სიდიდეთა სრული კრებული.

ახლა იბადება კითხვა, ψ ტალღური ფუნქციით განსაზღვრულ მდგომარეობაში რა შეიძლება ვიცოდეთ მეორე ჯგუფის, ე. ი. არაკომუტატურ ოპერატორთა, საკუთარი მნიშვნელობების შესახებ? მართალია, როგორც ზემოთ გავარკვიეთ, ამ ჯგუფის სიდიდეებს ზუსტად განსაზღვრული მნიშვნელობები არა აქვთ, მაგრამ ψ-მდგომარეობაში შეგვიძლია ვიპოვოთ მათი კვანტურმექანიკური საშუალო მნიშვნელობები ჩვენთვის ცნობილი ფორმულით

$$\langle L\rangle = \langle \psi | \hat{L} | \psi \rangle. \qquad (40,4)$$

მდგომარეობის კვანტურ აღწერასთან მჭიდროდაა დაკავშირებული ბორის ე. წ. დამატებითობის პრინციპი, რომელიც მან ჩამოაყალიბა 1928 წელს და ამით საფუძველი ჩაუყარა კვანტური მექანიკის ე. წ. კოპენჰაგენისეულ ინტერპრეტაციას.

ბორის თანახმად, კვანტურ მექანიკაში ყოველი ფიზიკური სიდიდე თავის კანონიკურ შეუღლებულ სიდიდესთან ერთად ადგენს გარკვეულ წყვილს (მაგალითად, p_x და x, E და t და სხვა მრავალი), რომელთაგან მხოლოდ ერთი შეიძლება ზუსტად გაიზომოს. ბორის მიხედვით გასაზომ სიდიდეთა ერთობლიობა იყოფა ორ ერთმანეთის გამომრიცხავ ჯგუფად, რომლებიც ერთმანეთის მიმართ არიან დამატებითობაში იმ თვალსაზრისით, რომ მათ ერთობლიობას შეეძლო მოეცა სისტემის სრული აღწერა კლასიკური მექანიკის თვალსაზრისით. ამაში ძდგომარეობს სწორედ ბორის დამატებითობის პრინციპის შინაარსი.

როდესაც ზემოთ მდგომარეობის კვანტურ აღწერას ვსწავლობდით, ყველგან ვგულისხმობდით, რომ სისტემას ტალღური ფუნქცია გააჩნია. ასეთ მდგომარეობაში ჩვენ შეგვიძლია ვიპოვოთ ნებისმიერი ფიზიკური სიდიდე, რომელთა შესაბამი ოპერატორებისათვის ψ არის საერთო საკუთარი ფუნქცია. მაგრამ კვანტურ მექანიკაში ჩვენ გვხვდება ისეთი მდგომარეობებიც, რომლებსაც ტალღური ფუნქცია არ გააჩნიათ. ვთქვათ, მაგალითად, ალბათობა იმისა, რომ კვანტურმექანიკური სისტემის რაიმე λ ფიზიკური სიდიდე ღებულობს $\lambda=\lambda_n$ მნიშვნელობას არის $w_n=|a_n|^2$. ცხადია, რომ ამ ალბათობიდან ჩვენ ვერ განვსაზღვრავთ თვით a_n კოეფიციენტებს, ამიტომ

$$\psi(r) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n \psi_n(r) \qquad (40,5)$$

გაშლის ფორმულის გამოყენებით ვერ ვიპოვით $\psi(r)$ ფუნქციას. მაშასადამე, ამ შემთხვევაში, სისტემას მართლაც არ ექნება ტალღური ფუნქცია. კვანტურ მდგომარეობას, რომელსაც ტალღური ფუნქცია არა აქვს, ნარევს უწოდებენ. ნარევის აღწერა შესაძლებელია ე. წ. სიმკვრივის მატრიცით.

1. როგორც § 40-ში აღვნიშნეთ, თუ ნაწილაკს (ან სისტემას) გააჩნია ტალღური ფუნქცია, მაშინ ჩვენ გვაქვს მაქსიმალური ცნობები ამ ნაწილაკის შესახებ, ე. ი. ვიცით ყველაფერი ის, რის მოცემაც შეუძლია კვანტურ მექანიკას. ასეთ შემთხვევაში, როგორც აღვნიშნეთ, ამბობენ, რომ სისტემის მდგომარეობა არის სუფთა ვიცით რა ტალღური ფუნქცია, ჩვენ ამ მდგომარეობაში შეგვიძლია ვიპოვოთ გასაზომ სიდიდეთა სრული კრებული და ყველა სხვა ფიზიკურ სიდიდეთა საშუალო მნიშვნელობები.

ვთქვათ, სისტემა შეიძლება იმყოფებოდეს სხვადასხვა სუფთა მდგომარეობაში, რომელთა ტალღური ფუნქციები შესაბამისად იყოს

$$\psi_1,\ \psi_2,\ \psi_3,\ \ldots\psi_n; \tag{41,1}$$

მაშინ, როგორც ვიცით, სუპერპოზიციის პრინციპის ძალით ტალღური ფუნქცია

$$\psi=\sum_{i=1}^{n}C_i\psi_i \tag{41,2}$$

(C_i გამოხატავს მდგომარეობის ალბათობის ამპლიტუდას) აგრეთვე შესაძლო მდგომარეობას გამოხატავს. სუპერპოზიციაში თითოეული კერძო მდგომარეობა შედის განსაზღვრული ამპლიტუდით, ე. ი. გარკვეული მოდულით და გარკვეული ფაზით $C_i=|C_i|\exp(i\alpha)$, სადაც α ნამდვილი რიცხვია. ამგვარად, თუ (41,1) ფუნქციები კერძო სუფთა მდგომარეობათა ტალღური ფუნქციებია, მაშინ მათი სუპერპოზიციაც სუფთა მდგომარეობას შეესაბამება. თუ ვიცით სუფთა მდგომარეობის ფუნქცია, შეგვიძლია ვიპოვოთ ალბათობის სიმკვრივე. სახელდობრ, ალბათობის სიმკვრივეს მოგვცემს ტალღური ფუნქციის აბსოლუტური მნიშვნელობის კვადრატი

$$W=|\psi|^2. \tag{41,3}$$

როცა მდგომარეობა ხასიათდება (41,1) ფუნქციათა ერთობლიობით, მაშინ ალბათობის სიმკვრივეს მოგვცემს (41,2) გამოსახულების აბსოლუტური მნიშვნელობის კვადრატი

$$W=|\psi|^2=\sum_{k,i}C_i^*C_k\psi_i^*\psi_k=\sum_{i=1}^{n}|C_i|^2|\psi_i|^2+\sum_{i\neq k}^{n}C_i^*C_k\psi_i^*\psi_k. \tag{41,4}$$

რაიმე $\hat{L}$ ოპერატორის შესაბამისი λ ფიზიკური სიდიდის საშუალო კი შეგვიძლია ვიპოვოთ შემდეგი ფორმულით:

$$\langle\lambda\rangle=\int\psi^*\hat{L}\psi\,dx=\sum_{i,k}C_i^*C_k\int\psi_i^*\hat{L}\psi_k dx=\sum_{i,k}C_i^*L_{ik}C_k. \tag{41,5}$$

2. კვანტურ მექანიკაში შეიძლება საქმე გვქონდეს ისეთ მდგომარეობასთანაც, რომელსაც გარკვეული ტალღური ფუნქცია არ გააჩნია. ასეთ მდგომარეობას უწოდებენ ნარევს, ნარევთან ჩვენ საქმე გვაქვს მაშინ, როდესაც ადგილი არა აქვს სრულ გაზომვას, რის გამოც სისტემის დახასიათება ამა თუ იმ ტალღური ფუნქციით სხვადასხვა ალბათობით ხდება, ე. ი. სისტემის დასახასიათებლად მხოლოდ

[1] ეს საკითხი უფრო დაწვრილებით განხილულია ჟურნალებში Phys. Rev. March, I, vol 49, 1936, Rev. of Mod, Phys, January 1, vol 29. 1957, (U. Fano).

(41,1) ფუნქციების ერთობლიობა საკმარისი აღარ არის. იმისათვის, რათა მდგომარეობა დავახასიათოთ (41,1) კერძო სუფთა მდგომარეობებით, საჭიროა დამატებით ვიცოდეთ ამ ფუნქციებით განსაზღვრულ სუფთა მდგომარეობათა დამახასიათებელი ალბათობებიც p_1, p_2,...p_n. ან, სხვანაირად რომ ვთქვათ, უნდა ვიცოდეთ ის ალბათობებიც, რომლებიც გვიჩვენებენ, თუ ნარევში როგორი სიხშირით გვხვდება სუფთა მდგომარეობები. ამგვარად, ნარევის დასახასიათებლად ნაცვლად (41,1) ფუნქციებისა საჭიროა ვიცოდეთ შემდეგი ერთობლიობა:

$$\begin{matrix} \psi_1,\ \psi_2,\ \psi_3,\cdots\psi_n \\ p_1,\ p_2,\ p_3,\cdots p_n, \end{matrix} \tag{41,6}$$

სადაც p_i არის ψ_i ფუნქციით დახასიათებული სუფთა მდგომარეობის ალბათობა ნარევში. ამასთან,

$$\sum_{i=1}^{n} p_i = 1. \tag{41,7}$$

თუ $p_1 = p_2 = \ldots = p_n = 1$, მაშინ მივიღებთ სუფთა მდგომარეობას, ე. ი. ნარევი წარმოადგენს გაცილებით უფრო რთულსა და ზოგად მდგომარეობას სუფთა მდგომარეობასთან შედარებით. იმისათვის, რომ გასაგები გახდეს, რა განსხვავებაა ნარევსა და სუფთა მდგომარეობას შორის, ვიპოვოთ მდგომარეობის ალბათობა ნარევის შემთხვევაში და იგი შევადაროთ (41,4) ფორმულას.

ნარევის დროს ალბათობა იმისა, რომ $\psi_i(r)$-ით დახასიათებული ნაწილაკი (სისტემა) მოხვდეს სივრცის ერთეულოვან მოცულობაში, იქნება $|\psi_i(r)|^2$, ხოლო ალბათობა იმისა, რომ საერთო მდგომარეობიდან შეგვხვდეს ის მდგომარეობა, რომელიც ხასიათდება $\psi_i(r)$ ფუნქციით, არის p_i; ამიტომ, i-ურ მდგომარეობაში მყოფი ნაწილაკის ალბათობის სიმკვრივე იქნება $p_i\,|\psi_i(r)|^2$, ხოლო სრული ალბათობის სიმკვრივეს ექნება სახე

$$W(x) = \sum_{i=1}^{n} p_i |\psi_i(r)|^2. \tag{41,8}$$

თუ ამ ფორმულას შევადარებთ (41,4)-ს, დავინახავთ, რომ ალბათობის სიმკვრივეები სუფთა მდგომარეობისა და ნარევის დროს ერთმანეთისაგან განსხვავდება. სუფთა მდგომარეობაში სუპერპოზიციის გამო მივიღეთ ინტერფერენცია სხვადასხვა მდგომარეობას შორის; ნარევის შემთხვევაში კი ასეთ ინტერფერენციას ადგილი არა აქვს.

სუფთა მდგომარეობაში ალბათობის გამოთვლის დროს იკრიბება ამპლიტუდები, ნარევის დროს კი—ინტენსიობები. აქ ისეთივე მდგომარეობა გვაქვს, როგორც ოპტიკაში კოჰერენტული და არაკოჰერენტული ტალღების შეკრების დროს.

აშკარაა, რომ ნარევის დროს რაიმე ფიზიკური სიდიდის საშუალო მნიშვნელობისათვის გვექნება ფორმულა

$$\langle\lambda\rangle = \sum_{i=1}^{n} p_i \int \psi_i^* \hat{L} \psi_i dx = \sum_{i=1}^{n} p_i \langle\psi_i|\hat{L}|\psi_i\rangle. \tag{41,9}$$

3. ნარევის დასახასიათებლად, ერთმანეთისაგან დამოუკიდებლად, ნეიმანისა და ლანდაუს მიერ შემოღებული იყო სტატისტიკური, ან, როგორც მას ხშირად

უწოდებენ, სიმკვრივის მატრიცის ცნება[1]. როგორც ვნახეთ, სუფთა მდგომარეობაში სიდიდის საშუალო მნიშვნელობა გამოისახება (41,5) ფორმულით, ხოლო ნარევის შემთხვევაში (41,9) და (41,3)-ის ძალით

$$\langle\lambda\rangle=\sum_k p_k\langle\lambda_k\rangle=\sum_k\sum_m\sum_n p_k C_m^*(k)L_{mn}C_n(k); \tag{41,10}$$

k მიუთითებს გარკვეულ მდგომარეობაზე.

გამოსახულებას

$$\rho_{nm}=\sum_k p_k C_m^*(k)C_n(k) \tag{41,11}$$

უწოდებენ სიმკვრივის მატრიცას. ამ მატრიცის დახმარებით ფიზიკური სიდიდის საშუალო შემდეგნაირად ჩაიწერება:

$$\langle\lambda\rangle=\sum_{m,n}\rho_{nm}L_{mn}=\sum_n(\rho L)_{nn} \tag{41,12}$$

ან, თუ გავიხსენებთ მატრიცის კვალის განმარტებას, გვექნება

$$\langle\lambda\rangle=Sp(\rho L) \tag{41,13}$$

აშკარაა, რომ სიმკვრივის მატრიცის დიაგონალური ელემენტი

$$\rho_{nn}=\sum_k p_k|C_n(k)|^2\geqslant 0 \tag{41,14}$$

გამოხატავს ალბათობას იმისა, რომ ნარევში λ ფიზიკურ სიდიდეს ჰქონდეს $\lambda=\lambda_k$ მნიშვნელობა, ე. ი. გამოხატავს სისტემის მოხვედრის ალბათობას მდგომარეობაში, რომელიც ხასიათდება ψ_n ფუნქციით.

(41,13) ფორმულა უნდა განვიხილოთ როგორც სიმკვრივის მატრიცის განმარტება. იგი საშუალებას გვაძლევს აღებული კვანტური მდგომარეობისათვის სიმკვრივის მატრიცის მოძებნისა ნარევში ზოგიერთი ფიზიკური სიდიდის საშუალო მნიშვნელობების გაზომვით.

სიმკვრივის მატრიცა იმ რანგისაა, რამდენი დამოუკიდებელი მდგომარეობითაც გამოხატულია (41,2) სუფთა მდგომარეობა. ეს რიცხვი შეიძლება იყოს როგორც სასრულო, ისე უსასრულო. სიმკვრივის მატრიცის ელემენტები, საზოგადოდ, კომპლექსური რიცხვებია, მთელი მატრიცა კი ერმიტულია. მართლაც, (40,12) განმარტების თანახმად, რადგან საშუალო მნიშვნელობა ნამდვილია, ამიტომ $\rho^+=\rho$, ე. ი.

$$\rho_{mn}=\rho_{nm}^*. \tag{41,15}$$

სიმკვრივის მატრიცას შეიძლება მოვთხოვოთ ნორმირების შემდეგი პირობის შესრულება:

$$Sp\,\rho=1. \tag{41,16}$$

მართლაც, მოვითხოვოთ, რომ ერთეულოვან $\hat{L}=1$ ოპერატორს ჰქონდეს ერთის ტოლი საშუალო მნიშვნელობა, მაშინ (41,13) დაემთხვევა (41,16) ნორმირების პირობას.

4. ახლა განვიხილოთ სიმკვრივის მატრიცა სხვა ასპექტში. ვთქვათ გვაქვს იზოლირებული სისტემა, რომლიდანაც გამოყოფილია მცირე ქვესისტემა. ქვესისტემის დამახასიათებელი ყველა კოორდინატი აღვნიშნოთ x-ით, სისტემის დანარ-

[1] იხ, УФН, том LXIV, 1958 г., выпуск 3.

ჩენი ნაწილის კოორდინატთა ერთობლიობა კი ξ-თი. ვთქვათ, მთელი ჩაკეტილი სისტემა იმყოფება რაიმე კვანტურ მდგომარეობაში, რომელიც ხასიათდება $\psi(x, \xi)$ ტალღური ფუნქციით. დავუშვათ, λ არის გამოყოფილი ქვესისტემის დამახასიათებელი რაიმე ფიზიკური სიდიდე. მისი შესაბამისი ოპერატორი $\hat{L}$ იმოქმედებს მხოლოდ x კოორდინატზე, ამიტომ $\overline{\lambda}$ საშუალო მნიშვნელობისათვის შეგვიძლია დავწეროთ

$$\langle\lambda\rangle = \int\int \psi^*(x, \xi)\, \hat{L}\psi(x,\xi)\, dx\, d\xi. \tag{41,17}$$

შემოვიღოთ შემდეგი უწყვეტი მატრიცა:

$$\langle x|\rho|x'\rangle = \int \psi^*(x', \xi)\, \psi(x, \xi)\, d\xi. \tag{41,18}$$

ამ სიდიდეს უწოდებენ სიმკვრივის მატრიცას. ცხადია, რომ იგი არის ერმიტული

$$\langle x|\rho|x'\rangle^* = \langle x'|\rho|x\rangle. \tag{41,19}$$

ამ მატრიცის დიაგონალური ელემენტი

$$\langle x|\rho|x\rangle = \int |\psi(x, \xi)|^2 d\xi \tag{41,20}$$

გვაძლევს x კოორდინატის განაწილების ალბათობას.

რადგან კოორდინატულ წარმოდგენაში $\hat{L}$ ოპერატორი შეგვიძლია წარმოვიდგინოთ შემდეგი სახით:

$$\langle x'|\hat{L}|x\rangle = \hat{L}\,\delta(x - x'), \tag{41,21}$$

ამიტომ (40,17) საშუალო მნიშვნელობისათვის გვექნება

$$\langle\lambda\rangle = \int\int\int \psi^*(x', \xi)\, \langle x'|\hat{L}|x\rangle \psi(x, \xi)\, d\xi\, dx\, dx', \tag{41,22}$$

ოპერატორი x' კოორდინატზე არ მოქმედებს, ამიტომ (41,22) ფორმულას (41,18)-ის გამოყენებით შეგვიძლია მივცეთ სახე:

$$\langle\lambda\rangle = \int \langle x|\rho|x'\rangle\, \langle x'|\hat{L}|x\rangle\, dx\, dx' \tag{41,23}$$

ან, რაც იგივეა,

$$\langle\lambda\rangle = \int \langle x|\rho L|x\rangle dx = Sp(\rho L), \tag{41,24}$$

სადაც Sp აღნიშნავს ინტეგრალს დიაგონალური ელემენტებიდან.

ამგვარად, ჩვენ ვხედავთ, რომ სიმკვრივის მატრიცის საშუალებით შეიძლება გამოვთვალოთ ნაწილში ნებისმიერი ფიზიკური სიდიდის საშუალო. ეს იმას ნიშნავს, რომ სიმკვრივის მატრიცა შეგვიძლია გამოვიყენოთ მდგომარეობის აღსაწერად იმ შემთხვევაში, როცა სისტემას ტალღური ფუნქცია არ გააჩნია. ამასთან, მდგომარეობის აღწერა სიმკვრივის მატრიცით ზოგადია და გამოდგება მაშინაც, როცა მდგომარეობა სუფთაა.

ვიპოვოთ სიმკვრივის მატრიცის ცვლილება დროის მიხედვით. ჩვენ ვიცით, რომ უნიტარული $S(t)$ მატრიცით შეგვიძლია აღვწეროთ სისტემის ტალღური ფუნქციის ცვლილება დროში. კერძოდ, $\psi(r,t) = S(t)\psi(0)$, სადაც $S(t) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}\,t\right)$. გამოვარკვიოთ ტალღური ფუნქციის ასეთი უნიტარული

გარდაქმნის დროს როგორ გარდაიქმნება სიმკვრივის მატრიცა. სიმკვრივის მატრიცა $t=0$ მომენტში აღვნიშნოთ $\rho(0)$-ით. მაშინ (41,18) განმარტება ფორმალურად ასე შეგვიძლია წარმოვიდგინოთ:

$$\rho(0)=|\psi(0)\rangle\langle\psi(0)|. \tag{41,25}$$

რადგან

$$|\psi(t)\rangle=S|\psi(0)\rangle,\ \langle\psi(t)|=\langle\psi(0)|S^{+}, \tag{41,26}$$

ამიტომ

$$S\rho(0)S^{+}=|\psi(t)\rangle\langle\psi(t)|. \tag{41,27}$$

მაშასადამე,

$$\rho(t)=S\rho(0)S^{+}. \tag{41,28}$$

ვიპოვოთ ამ გამოსახულების დროის მიხედვით კერძო წარმოებული

$$\frac{\partial\rho(t)}{\partial t}=\frac{\partial S}{\partial t}\rho(0)S^{+}+S\rho(0)\frac{\partial S^{+}}{\partial t}. \tag{41,29}$$

$S(t)$ ოპერატორის განმარტებიდან ცხადია, რომ

$$\frac{\partial S}{\partial t}=-\frac{i}{\hbar}\hat{H}S,\quad \frac{\partial S^{+}}{\partial t}=\frac{i}{\hbar}\hat{H}S^{+}. \tag{41,30}$$

ამ გამოსახულებების შეტანით (41,29) წარმოებულში საბოლოოდ მივიღებთ განტოლებას

$$\frac{\partial\rho(t)}{\partial t}=-[\hat{H},\rho(t)], \tag{41,31}$$

რომელსაც აკმაყოფილებს სიმკვრივის მატრიცა.

ფიზიკური სიდიდის საშუალო მნიშვნელობა ამ შემთხვევაში განისაზღვრება ფორმულით

$$\langle\lambda(t)\rangle=Sp(\hat{L}\rho(t)). \tag{41,32}$$

შევიტანოთ $\rho(t)$-ს მნიშვნელობა (41,28) ფორმულიდან და შპურის ნიშნის ქვეშ მოვახდინოთ ციკლური გადანაცვლება

$$\langle\lambda(t)\rangle=Sp(\hat{L}S\rho(0)S^{+})=Sp(S^{+}\hat{L}S\rho(0)); \tag{41,33}$$

მაშასადამე, საბოლოოდ მივიღებთ

$$\langle\lambda(t)\rangle=Sp\{\hat{L}(t)\rho(0)\}, \tag{41,34}$$

ე. ი. სიმკვრივის მატრიცის დროზე დამოკიდებულება გადატანილია ოპერატორზე.

+ § 42. მოძრაობის კვანტური განტოლებები

როგორც ცნობილია, კლასიკურ მექანიკაში ნებისმიერი $F(x,y,z,p_x,p_y,p_z;t)$ ფუნქციის დროით წარმოებულს

$$\frac{dF}{dt}=\frac{\partial F}{\partial t}+[H,F], \tag{42,1}$$

უწოდებენ კლასიკური მექანიკის მოძრაობის განტოლებას, სადაც H არის ჰამილტონის ფუნქცია. თუ F დროის ცხადი ფუნქცია არ არის, მაშინ

$$\frac{dF}{dt} = [H, F]. \tag{42,2}$$

როცა $F = x_\alpha$ და $F = p_\alpha$ გვექნება:

$$\frac{dx_\alpha}{dt} = [H, x_\alpha] = \frac{\partial H}{\partial p_\alpha}, \quad (\alpha = 1,2,3), \tag{42,3}$$

$$\frac{dp_\alpha}{dt} = [H, p_\alpha] = -\frac{\partial H}{\partial x_\alpha}, \tag{42,4}$$

რომლებიც ჰამილტონის მოძრაობის განტოლებებს წარმოადგენენ.

კვანტურ მექანიკაში, ანალოგიით გამოსახულებას

$$\frac{d\hat{A}}{dt} = \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} + [\hat{H}, \hat{A}] \tag{42,5}$$

მოძრაობის კვანტური განტოლება ეწოდება. როცა $\hat{A}$ დროზე ცხადად არ არის დამოკიდებული, მაშინ

$$\frac{d\hat{A}}{dt} = [\hat{H}, \hat{A}], \tag{42,6}$$

სადაც $\hat{H}$ ჰამილტონის ოპერატორია.

ვიპოვოთ კოორდინატისა და იმპულსის მოძრაობის განტოლებანი. გვექნება:

$$\frac{dx_\alpha}{dt} = [\hat{H}, x_\alpha], \tag{42,7}$$

$$\frac{dp_\alpha}{dt} = [\hat{H}, \hat{p}_\alpha]. \quad (\alpha = 1, 2, 3). \tag{42,8}$$

ამ განტოლებებს შეგვიძლია ვუწოდოთ ჰამილტონის კვანტური განტოლებები. ვიპოვოთ $[\hat{H}, x_\alpha]$ და $[\hat{H}, \hat{p}_\alpha]$ პუასონის ფრჩხილების ცხადი გამოსახულებანი. ამისათვის გავიხსენოთ, რომ ჰამილტონის ოპერატორს აქვს სახე

$$\hat{H} = \frac{1}{2\mu} \sum_{\beta=1}^{3} \hat{p}_\beta^2 + V(x, y, z, t). \tag{42,9}$$

რადგან კოორდინატები კომუტატური იქნებიან პოტენციალურ ენერგიასთან როგორც კოორდინატების ფუნქციასთან, ამიტომ

$$\frac{dx_\alpha}{dt} = \frac{1}{2\mu} \sum_{\beta} [\hat{p}_\beta^2, x_\alpha] = \frac{1}{2\mu} \sum_{\beta} \{\hat{p}_\beta [\hat{p}_\beta, x_\alpha] + [\hat{p}_\beta, x_\alpha] \hat{p}_\beta\}. \tag{42,10}$$

ჩვენ ვიცით, რომ $[\hat{p}_\beta, x_\alpha] = \delta_{\beta\alpha}$, ამიტომ

$$\mu \frac{dx_\alpha}{dt} = \hat{p}_\alpha, \tag{42,11}$$

ე. ი. იმპულსის ოპერატორი მასისა და სიჩქარის ოპერატორის ნამრავლის ტოლია.

ანალოგიურად, (42,8) ფორმულის მიხედვით, იმპულსის ოპერატორის დროითი წარმოებულისათვის გვექნება

$$\frac{d\hat{p}_x}{dt} = [\hat{V}, \hat{p}_\alpha] = -\frac{\partial V}{\partial x_\alpha}. \qquad (42,12)$$

ან ვექტორულ აღნიშვნებში

$$\frac{d\hat{\mathbf{p}}}{dt} = -\operatorname{grad} V, \qquad (42,13)$$

რომელიც წარმოადგენს ნიუტონის განტოლებას ოპერატორული სახით. როგორც ვხედავთ, კვანტურ მექანიკაში სავსებით ისეთივე დამოკიდებულებები გვაქვს, როგორც კლასიკურ მექანიკაში, ოღონდ ოპერატორული სახით.

§ 43. ერენფესტის განტოლებები

კვანტური მექანიკის ძირითადი ჰიპოთეზის თანახმად, კლასიკური მექანიკის ფიზიკურ სიდიდეებს წარფიერმიტული ოპერატორები შეეუსაბამეთ. აშკარად ჩანს, რომ რაღაც ღრმა კავშირი არსებობს კლასიკურსა და კვანტურ მექანიკას შორის. ახლა ჩვენ ვაჩვენებთ, რომ ასეთი კავშირი მართლაც არსებობს და ამ კავშირის გამოხატულებას წარმოადგენს ერენფესტის განტოლებები. მათი შინაარსი მდგომარეობს იმაში, რომ მიკროსკოპული სხეულების მოძრაობის დამახასიათებელი ფიზიკური სიდიდეების საშუალო მნიშვნელობები ისევე იქცევა როგორც კლასიკური მექანიკის შესაბამი სიდიდეები. ამ დებულების დასამტკიცებლად საკმარისია ვაჩვენოთ, რომ მიკროობიექტის იმპულსისა და კოორდინატის საშუალო მნიშვნელობები ისეთსავე განტოლებებს ემორჩილება, როგორსაც შესაბამისი კლასიკური სიდიდეები.

წინა პარაგრაფში ჩვენ დავინახეთ, რომ

$$\frac{d\hat{x}_\alpha}{dt} = \frac{\hat{p}_x}{\mu}, \qquad \frac{d\hat{p}_x}{dt} = -\frac{\partial V}{\partial x_\alpha} = \hat{F}_\alpha. \quad (x = 1, 2, 3) \qquad (43,1)$$

ვიპოვოთ ამ გამოსახულებათა საშუალო მნიშვნელობები. ამისათვის საკმარისია ეს ტოლობები მარცხნიდან გავამრავლოთ ψ^*-ზე, მარჯვნიდან ψ-ზე, და ავიღოთ ინტეგრალი მთელს სივრცეზე; გვექნება

$$\frac{\overline{dx_\alpha}}{dt} = \frac{1}{\mu}\overline{p_\alpha}, \quad \frac{\overline{dp_x}}{dt} = -\overline{\frac{\partial V}{\partial x_\alpha}}. \qquad (43,2)$$

რადგან $\dfrac{\overline{dA}}{dt} = \dfrac{d}{dt}\overline{A}$, ამიტომ

$$\frac{d}{dt}\overline{x_\alpha} = \frac{1}{\mu}\overline{p_\alpha}, \qquad \frac{d}{dt}\overline{p_\alpha} = -\overline{\frac{\partial V}{\partial x_\alpha}}. \qquad (43,3)$$

როგორც ვიცით, $p_\alpha = \mu\dfrac{dx_\alpha}{dt}$, ამიტომ მეორე განტოლება ასეც შეგვიძლია გადავწეროთ:

$$\mu\frac{d^2\overline{x}}{dt^2} = -\overline{\frac{\partial V}{\partial x}}, \quad \mu\frac{d^2\overline{y}}{dt^2} = -\overline{\frac{\partial V}{\partial y}}, \quad \mu\frac{d^2\overline{z}}{dt^2} = -\overline{\frac{\partial V}{\partial z}}. \qquad (43,34)$$

ან, ვექტორული სახით

$$\mu\frac{d^2}{dt^2}\int \psi^* \mathbf{r}\,\psi\, d\tau = -\int \psi^* \nabla V \psi d\tau. \qquad (43,5)$$

ამ განტოლებებს ერენფესტის განტოლებებს უწოდებენ. ეს განტოლებები მართლაც გვიჩვენებენ, რომ კოორდინატების საშუალო მნიშვნელობები აკმაყოფილებენ კლასიკური მექანიკის მოძრაობის ნიუტონის განტოლებებს. თუ ძალის საშუალო მნიშვნელობა ნულის ტოლია, ე. ი. $\overline{F_\alpha}=0$, მაშინ $\frac{\overline{dp_\alpha}}{dt}=0$ და $\overline{p_\alpha}=\text{const}$, ე. ი. როცა ნაწილაკი იზოლირებულია, მაშინ საშუალო მნიშვნელობისათვის დაცულია ინერციის კანონი. ამის შესახებ ამბობენ, რომ „იზოლირებული ნაწილაკის ალბათობის სიმჭიდის ცენტრი მოძრაობს სწორხაზობრივად და თანაბრად".

სავარჯიშო მაგალითები

1. დავამტკიცოთ, რომ ფრინტური მოძრაობისთვის $n(V)=2\langle T\rangle$, სადაც n არის პოტენციალური ენერგიის ერთგვაროვნების რიგი. $\langle V\rangle$ და $\langle T\rangle$ წარმოადგენენ ნაწილაკის პოტენციალური და კინეტიკური ენერგიების კვანტურმექანიკურ საშუალო მნიშვნელობებს. (ვირიალის თეორემა).

ა მ ო ხ ს ნ ა : თუ პოტენციალური ენერგია კოორდინატების ერთგვაროვანი ფუნქციაა, რომლის ერთგვაროვნების რიგი n-ის ტოლია, მაშინ ეილერის თეორემის თანახმად შეგვიძლია დავწეროთ

$$nV(x_1, x_2, x_3)=\sum_{j=1}^{3} x_j \frac{\partial V}{\partial x_j} \tag{1}$$

განვიხილოთ შემდეგი სხვაობა:

$$2\hat{T}-nV=\sum_{j=1}^{3}\frac{\hat{p}_j^2}{\mu}-\sum_{j=1}^{3} x_j \frac{\partial V}{\partial x_j}, \tag{2}$$

რომელიც, თუ გავიხსენებთ, რომ $p_j=\mu\dot{x}_j$ და $\dot{p}_j=-\frac{\partial V}{\partial x_j}$ ასეც გადაიწერება:

$$2\hat{T}-nV=\sum_{j=1}^{3}(\dot{x}_j\hat{p}_j+x_j\hat{\dot{p}}_j). \tag{3}$$

განვიხილოთ ფრინტური მოჭრობა. ამ შემთხვევაში ენერგიის სპექტრი იქნება დისკრეტული. მოვახდინოთ (3) გამოსახულების გასაშუალოება ამ დისკრეტული სპექტრის ტალღური ფუნქციების მიხედვით. გასაშუალოება ეკვივალენტურია დიაგონალური მატრიცული ელემენტის აღებისა, ამიტომ შეგვიძლია დავწეროთ

$$2\langle T\rangle-n\langle V\rangle=(2\hat{T}-nV)_{mm}=\sum_{j=1}^{3}\sum_{k}[(\dot{x}_j)_{mk}(\hat{p}_j)_{km}+(x_j)_{mk}(\hat{\dot{p}}_j)_{km}]$$

ენერგიულ წარმოდგენაში

$$(\dot{x}_j)_{mk}=i\omega_{mk}(x_j)_{mk};\quad (\hat{\dot{p}}_j)_{km}=i\omega_{km}(p_j)_{km},$$

ამიტომ ამ მნიშვნელობებს შეტანით წინა ფორმულაში მივიღებთ

$$2\langle T\rangle-n\langle V\rangle=i\sum_{j=1}^{3}\sum_{k}(\omega_{mk}+\omega_{km})(x_j)_{mk}(p_j)_{km},$$

რადგან $\omega_{mk}=-\omega_{km}$, ამიტომ მარჯვენა მხარე ნულის ტოლია და ადგილი ექნება დასამტკიცებელ ტოლობას

$$n\langle V\rangle=2\langle T\rangle, \tag{4}$$

რომელსაც კვანტური მექანიკის ვირიალის თეორემას უწოდებენ. აღსანიშნავია, რომ განსხვავებით კლასიკური მექანიკის ვირიალის თეორემისაგან, კვანტურ მექანიკაში აღება პოტენციალური და კინეტიკური ენერგიების არა დროითი, არამედ კვანტურმექანიკური საშუალო.

როცა $n=2$ (ჰარმონიული ოსცილატორი), მაშინ $\langle V\rangle=\langle T\rangle$ ხოლო, როცა $n=-1$ (კულონური მიზიდვა) $\langle V\rangle=-2\langle T\rangle$ და ა. შ. ვირიალის თეორემა ადვილად განზოგადდება ნაწილაკთა სისტემის შემთხვევაში.

2. აჩვენეთ რა სახე ექნება განუზღვრელობის თანაფარდობას მომენტის z-მდგენელისა $\left(\hat{l}_z=\dfrac{\hbar}{i}\dfrac{\partial}{\partial\varphi}\right)$ და აზიმუტალურ φ კუთხეს შორის. მიღებული შედეგი ახსენით ფიზიკურად.

3. გამოიყენეთ (39,4) ფორმულა და დაწერეთ განუზღვრელობის თანაფარდობა მომენტის მდგენელებისათვის. (გაიხსენეთ, რომ $[\hat{l}_\alpha,\hat{l}_\beta]=-\mathfrak{E}_{\alpha\beta\gamma}\hat{l}_\gamma$).

თავი VI

შრედინგერის განტოლების ინვარიანტობა და შენახვის კანონები

შრედინგერის განტოლებას მთელი რიგი ინვარიანტული თვისებები გააჩნია. მათ შესწავლას დიდი მნიშვნელობა აქვს კვანტურმექანიკური მოძრაობის ხასიათის დადგენის თვალსაზრისით. ჩვენ განვიხილავთ შრედინგერის განტოლების ინვარიანტობას მომავლის წარსულით შეცვლის მიმართ (ე. ი. $t \to -t$ გარდაქმნის მიმართ), ინვარიანტობას გალილეის და გრადიენტული გარდაქმნების მიმართ და სხვა.

ჩვენ ვიცით, რომ ოპერატორები კვანტურ მექანიკაში განსაზღვრულია კანონიკური გარდაქმნების სიზუსტით, ამიტომ საჭიროა ვაჩვენოთ, რომ შრედინგერის განტოლებიდან გამომდინარე შედეგები არ შეიცვლება მასზე კანონიკური გარდაქმნების ჩატარების შედეგად.

ჰამილტონიანის ინვარიანტობასთან სხვადასხვა გარდაქმნების მიმართ დაკავშირებულია შენახვის კანონებიც. ამასთან, კვანტურ მექანიკაში გარდა კლასიკურში ცნობილი შვიდი ადიტიური მოძრაობის ინტეგრალისა, კიდევ გვაქვს ლუწობის შენახვის კანონი, რომელსაც აგრეთვე ფუნდამენტური მნიშვნელობა აქვს.

§ 44. შრედინგერის განტოლების ინვარიანტული თვისებები

ვაჩვენოთ, რომ შრედინგერის განტოლება ფორმას არ იცვლის—ინვარიანტული რჩება მთელი რიგი გარდაქმნების მიმართ. ინვარიანტობის ეს თვისება ხელს გვიწყობს ღრმად ჩავწვდეთ შრედინგერის განტოლებიდან გამომდინარე ფიზიკურ შედეგებს. ამასთან, შრედინგერის განტოლების ინვარიანტობა ისე კი არ უნდა გავიგოთ, რომ გარკვეული გარდაქმნების მიმართ იგი საზოგადოდ არ იცვლება, არამედ ინვარიანტობა გულისხმობს, რომ განტოლებას გარეგნულად იგივე ფორმა რჩება, ტალღური ფუნქცია კი შეიძლება შეიცვალოს, ოღონდ ეს ცვლილება ისეთი იქნება, რომ მისი საშუალებით გამოთვლილი ფიზიკური სიდიდეები, როგორიცაა: ალბათობის სიმკვრივე, დენის ვექტორი, საშუალო მნიშვნელობა და სხვა უცვლელი დარჩება. ან სხვანაირად, შრედინგერის განტოლებას აქვს ინვარიანტული ფორმა რაიმე გარდაქმნის მიმართ, თუ იგი იღებს შემდეგ სახეს:

$$i\hbar \frac{\partial \psi'}{\partial t} = H\psi'; \qquad (44,1)$$

ამასთან, ახალი ψ' ფუნქციით გამოთვლილი ზემოთ ჩამოთვლილი სიდიდეები არ უნდა შეიცვალოს.

თუ გარდაქმნის დროს შეიცვალა ჰამილტონიანიც, ინვარიანტობას ადგილი ექნება მაშინ, როცა ახალი ჰამილტონიანითა და ახალი ფუნქციებით ფიზიკური სიდიდეების სწორი მნიშვნელობანი მიიღება.

ინვარიანტობა გალილეის გარდაქმნების მიმართ. დავწეროთ შრედინგერის ფარდობითი მოძრაობის შესაბამისი განტოლება

$$i\hbar \frac{\partial \psi (\mathbf{r},\ t)}{\partial t} = \left\{ -\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta + V (\mathbf{r},\ t) \right\} \psi (\mathbf{r},\ t) \tag{44,2}$$

ამასთან გავიხსენოთ, რომ ფარდობითი რადიუსვექტორი $\mathbf{r}=\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2$. ვთქვათ, (44,2) განტოლება დაწერილია რაიმე უძრავი ათვლის სისტემის მიმართ. გადავიდეთ ახალ ინერციულ სისტემაზე, რომელიც პირველის მიმართ მოძრაობს $\mathbf{v}=\text{const}$ სიჩქარით. მაშინ უძრავ სისტემაში განსაზღვრულ $\mathbf{r}_1$, $\mathbf{r}_2$ რადიუსვექტორებსა და იგივე ნაწილაკების $\mathbf{r}_1'$, $\mathbf{r}_2'$ რადიუსვექტორებს შორის მოძრავ სისტემაში, გალილეის თანახმად, გვაქვს კავშირი

$$\mathbf{r}_1=\mathbf{r}_1'+\mathbf{v}t,\ \mathbf{r}_2=\mathbf{r}_2'+\mathbf{v}t,\quad t=t' \tag{44,3}$$

საიდანაც ჩანს, რომ $\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2=\mathbf{r}_1'-\mathbf{r}_2'$, ე. ი. გალილეის გარდაქმნების დროს $\mathbf{r}=\mathbf{r}'$. ცხადია, რომ გალილეის გარდაქმნების მიმართ არ შეიცვლება არც ჰამილტონიანი და არც ტალღური ფუნქცია, ე. ი. შტრიხიან სისტემაში შრედინგერის განტოლება ინვარიანტული დარჩება. ჩვენ ვიცით, რომ გალილეის გარდაქმნები სამართლიანია მცირე სიჩქარეებისათვის, ამიტომ შრედინგერის განტოლება გამოდგება მხოლოდ ისეთი ნაწილაკებისათვის, რომელთა სიჩქარე გაცილებით ნაკლებია სინათლის სიჩქარეზე $v \ll c$. შრედინგერის განტოლება რომ აღწერდეს დიდი სიჩქარეებით მოძრავ ნაწილაკს, მაშინ იგი ინვარიანტული უნდა იყოს ლორენცის გარდაქმნების მიმართ, რასაც ადგილი არა აქვს, რამდენადაც ლორენცის გარდაქმნები დროისა და სივრცის მიმართ სიმეტრიულია, შრედინგერის განტოლებას კი ასეთი სიმეტრია არა აქვს—ამ განტოლებაში დროითი წარმოებული პირველ ხარისხში შედის, სივრცული კი—მეორე.

შრედინგერის განტოლების ინვარიანტობა მომავლის წარსულით შეცვლის მიმართ. ახლა გამოვარკვიოთ როგორ იცვლება შრედინგერის განტოლება $t \to -t$ გარდაქმნის დროს. როგორც ცნობილია, კლასიკური მექანიკის განტოლებები, ასეთი შეცვლისას ინვარიანტული რჩებოდა. განვიხილოთ იზოლირებული სისტემა ან ისეთი სისტემა, რომელიც მუდმივი გარეშე ველების მოქმედებას განიცდის. ასეთი სისტემის ჰამილტონიანი დროზე ცხადად არ არის დამოკიდებული.

შრედინგერის განტოლებაში შევცვალოთ $t \to -t$-თი, მაშინ გვექნება

$$-i\hbar \frac{\partial \psi (\mathbf{r},\ -t)}{\partial t} = \hat{H} \psi (\mathbf{r},\ -t). \tag{44,4}$$

გადავიდეთ კომპლექსურად შეუღლებულზე; მივიღებთ

$$i\hbar \frac{\partial \psi^* (\mathbf{r},\ -t)}{\partial t} = \hat{H}^* \psi^* (\mathbf{r},\ -t). \tag{44,5}$$

ფიზიკურ ამოცანებში, როცა ურთიერთქმედების პოტენციალი მხოლოდ კოორდინატებზეა დამოკიდებული, მაშინ ჰამილტონიანი ნამდვილია $\hat{H}^* = \hat{H}$ [1]. ამის გამო, (44,5)-დან გვექნება

$$i\hbar \frac{\partial \psi' (\mathbf{r},\ t)}{\partial t} = \hat{H} \psi' (\mathbf{r},\ t), \tag{44,6}$$

---

[1] დროის ინვერსიის საკითხი, როცა ჰამილტონიანი არაა ნამდვილი (მაგალითად, ნახევარსპინიანი ნაწილაკებისათვის) განხილულია § 135-ში.

სადაც $\psi'(\mathbf{r}, t) = \psi^*(\mathbf{r}, -t)$. ამგვარად, შრედინგერის განტოლებას ინვარიანტული სახე აქვს.

გრადიენტული ინვარიანტობა. როგორც დავინახეთ, შრედინგერის განტოლებას ელექტრომაგნიტურ ველში მოძრავი დადებითად დამუხტული ნაწილაკისათვის აქვს სახე

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{1}{2\mu}\left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c}\mathbf{A}\right)^2 \psi + e\varphi\psi + V(\mathbf{r}, t)\psi. \qquad (44,6)$$

როგორც მივუთითეთ $\mathbf{A}$ და φ პოტენციალებს ფიზიკური შინაარსი არა აქვთ, რადგან ისინი ცალსახად არ არიან განსაზღვრული. სახელდობრ, ჩვენ ვიჩვენეთ, რომ მაგნიტური და ელექტრული დაძაბულობის ვექტორები არ შეიცვლება თუ ნაცვლად $\mathbf{A}$ და φ პოტენციალებისა ავიღებთ შემდეგ გამოსახულებებს:

$$\mathbf{A}' = \mathbf{A} + \nabla f,$$
$$\varphi' = \varphi - \frac{1}{c}\frac{\partial f}{\partial t}. \qquad (44,7)$$

ან, როგორც ამბობენ, ადგილი აქვს გრადიენტულ ინვარიანტობას. თავისთავად ცხადია, რომ ამის გამო (44,6) განტოლებას აზრი ექნება მხოლოდ და მხოლოდ მაშინ, როცა იგი იქნება გრადიენტულად ინვარიანტული, ე. ი. როცა მისგან გამომდინარე შედეგები არ იქნება დამოკიდებული პოტენციალების შერჩევის (44,7) არაცალსახობაზე.

მაშასადამე, თუ ჩვენ (44,6) განტოლებაში ნაცვლად $\mathbf{A}$ და φ პოტენციალებისა შევიტანთ (44,7)-ით განსაზღვრულ $\mathbf{A}'$ და φ'-ს, მაშინ შრედინგერის განტოლებიდან გამომდინარე ფიზიკური შედეგები არ უნდა შეიცვალოს.

(44,6) განტოლება დავწეროთ $\mathbf{A}'$ და φ' პოტენციალებისათვის; ამავე დროს გავითვალისწინოთ, რომ ასეთი გარდაქმნისას შეიძლება შეიცვალოს ტალღური ფუნქციაც; ახალი ტალღური ფუნქცია აღვნიშნოთ ψ'-ით. ამგვარად,

$$i\hbar \frac{\partial \psi'}{\partial t} = \frac{1}{2\mu}\left\{\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c}\mathbf{A} - \frac{e}{c}\nabla f\right\}^2 \psi' + e\left(\varphi - \frac{1}{c}\frac{\partial f}{\partial t}\right)\psi' + V\psi'. \qquad (44,8)$$

რადგან ψ' იგივე ფიზიკურ მდგომარეობას უნდა გამოხატავდეს, ამიტომ ψ-საგან იგი შეიძლება განსხვავდებოდეს მხოლოდ უნიტარული გარდაქმნით. მოვითხოვოთ, რომ

$$\psi' = e^{\frac{ie}{\hbar c}f(\mathbf{r}, t)}\psi. \qquad (44,9)$$

აშკარაა, რომ

$$i\hbar \frac{\partial \psi'}{\partial t} = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} e^{\frac{ie}{\hbar c}f} - \frac{e}{c}\frac{\partial f}{\partial t}\psi'; \qquad (44,10)$$

ასევე

$$\frac{1}{2\mu}\left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c}\mathbf{A} - \frac{e}{c}\nabla f\right)\left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c}\mathbf{A} - \frac{e}{c}\nabla f\right)\psi' =$$
$$= e^{\frac{ie}{\hbar c}f}\frac{1}{2\mu}\left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c}\mathbf{A}\right)^2 \psi. \qquad (44,11)$$

ამ გამოსახულების შეტანით (44,8) განტოლებაში მივიღებთ (44,6) განტოლებას. რადგან $f(\mathbf{r}, t)$ ნამდვილი ფუნქციაა, ამიტომ ტალღური ფუნქციის ასეთი გარდაქმნის დროს არ შეიცვლება არც ერთი ფიზიკური სიდიდე.

მაშასადამე, შრედინგერის განტოლება ინვარიანტული ყოფილა (44,7) გარდაქმნის მიმართ, ანდა როგორც ამბობენ, ადგილი აქვს შრედინგერის განტოლების გრადიენტულ ინვარიანტობას.

ინვარიანტობა კანონიკური გარდაქმნების მიმართ. შრედინგერის განტოლება გავამრავლოთ დროზე დამოუკიდებელ უნიტარულ $\hat{S}$-ოპერატორზე. გვექნება

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{S}\psi = \hat{S}\hat{H}\psi, \tag{44,12}$$

რომელიც გადავწეროთ იგივურად

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} (\hat{S}\psi) = \hat{S}\hat{H}\hat{S}^{+}(\hat{S}\psi). \tag{44,13}$$

შემოვიღოთ აღნიშვნები:

$$\hat{H}' = \hat{S}\hat{H}\hat{S}^{+}, \quad \psi' = S\psi, \tag{44,14}$$

მაშინ გვექნება

$$i\hbar \frac{\partial \psi'}{\partial t} = \hat{H}'\psi', \tag{44,15}$$

ე. ი. განტოლებას გარეგნულად ექნება ინვარიანტული ფორმა. ამასთან, როგორც ვიცით, უნიტარული გარდაქმნა ეკვივალენტურია კოორდინატთა სისტემის შეცვლის, ამიტომ ახალ სისტემაში განსაზღვრულ ფიზიკურ სიდიდეებს ისეთივე სახე ექნებათ, რაც ძველ სისტემაში. ასე მაგალითად, ენერგიის საშუალო მნიშვნელობისათვის გვექნება

$$\overline{E} = \int \psi'^{*} \hat{H}'\psi' d\mathbf{r} = \int \psi^{*} \hat{H}\psi d\mathbf{r}. \tag{44,16}$$

მაშასადამე, $\overline{E}$ ორივე სისტემაში ერთი და იგივეა.

§ 45. უსასრულოდ მცირე გარდაქმნის ოპერატორები

როგორც კლასიკურ მექანიკაში, კვანტურშიც უსასრულოდ მცირე გარდაქმნებს დიდი მნიშვნელობა აქვთ. კლასიკურ მექანიკაში ჰამილტონის ფუნქციის ინვარიანტობა უსასრულოდ მცირე გარდაქმნების მიმართ გვაძლევს ამა თუ იმ ფიზიკური სიდიდის შენახვის კანონს. ეს გარემოება სამართლიანია კვანტურ მექანიკაშიც. ამიტომ ამ პარაგრაფში განვიხილავთ უსასრულოდ მცირე გარდაქმნის ოპერატორებს და მათ თვისებებს.

ტალღური ფუნქციის ცვლილება კოორდინატების გარდაქმნისას შეგვიძლია განვიხილოთ ორი მეთოდით. ერთი, როცა ცვლილებას განიცდის წერტილთა მდებარეობის გამომხატველი რადიუსვექტორები, კოორდინატთა სისტემა კი უცვლელი რჩება და, მეორე, როცა იცვლება კოორდინატთა სისტემის მდებარეობა, წერტილთა რადიუსვექტორები კი ადგილზე რჩება. ჩვენ ვისარგებლებთ პირველი მეთოდით.

მეტად დიდი მნიშვნელობა აქვს კერძო ტიპის გარდაქმნებს, როცა ნაწილაკთა მდებარეობის დამახასიათებელი რადიუსვექტორები წაინაცვლებენ რაიმე $\boldsymbol{\rho}$ ვექტორზე, მობრუნდებიან გარკვეულ კუთხეზე, განიცდიან ინვერსიას და სხვა. შემოვიღოთ $\hat{\Omega}$ ოპერატორი, რომელსაც ის თვისება აქვს, რომ $\mathbf{r}$ რადიუსვექტორზე მოქმედებისას ახალ $\mathbf{r}'$ რადიუსვექტორს იძლევა

$$\hat{\Omega}\mathbf{r} = \mathbf{r}' \tag{45,1}$$

შებრუნებულ გარდაქმნას ექნება სახე

$$\mathbf{r}=\hat{\Omega}^{-1}\mathbf{r}'. \tag{45,2}$$

მაგალითად, ρ ვექტორზე წანაცვლებისას

$$\hat{\Omega}(\rho)\mathbf{r}=\mathbf{r}+\rho, \qquad \hat{\Omega}^{-1}(\rho)\mathbf{r}=\mathbf{r}-\rho. \tag{45,3}$$

$\delta\varphi$ კუთხეზე მობრუნებისას კი

$$\hat{\Omega}(\delta\varphi)\mathbf{r}=\mathbf{r}+[\delta\varphi\times\mathbf{r}], \qquad \hat{\Omega}^{-1}(\delta\varphi)\mathbf{r}=\mathbf{r}-[\delta\varphi\times\mathbf{r}], \tag{45,4}$$

სადაც $\delta\varphi$ არის ვექტორი, რომლის სიდიდე აღნიშნავს მობრუნების კუთხეს, მიმართულება კი ემთხვევა ბრუნვის ღერძს და განისაზღვრება ბურღის წესით.

როცა

$$\hat{\Omega}\mathbf{r}=-\mathbf{r}, \tag{45,5}$$

მაშინ $\hat{\Omega}$-ს ინვერსიის ოპერატორი ჰქვია.

ახლა გამოვარკვიოთ, როგორ გარდაიქმნება ტალღური ფუნქცია. გამოვიდეთ აშკარა ტოლობიდან

$$\psi'(\mathbf{r}')=\psi(\mathbf{r}), \tag{45,6}$$

სადაც ψ' აღნიშნავს ტალღური ფუნქციის ახალ მნიშვნელობას, რომელიც მიიღება ძველ ტალღურ ფუნქციაზე გარკვეული გარდაქმნის ჩატარების შედეგად.

შემოვიღოთ გარდაქმნის ოპერატორი $\hat{R}(\Omega)$, რომელსაც აქვს თვისება $\hat{R}\psi=\psi'$. მაშინ

$$\hat{R}(\Omega)\psi(\mathbf{r}')=\psi'(\mathbf{r}')=\psi(\mathbf{r}). \tag{45,7}$$

აშკარაა იმიტომ, რომ

$$\hat{R}(\hat{\Omega})\psi(\mathbf{r}')=\psi(\hat{\Omega}^{-1}\mathbf{r}'), \tag{45,8}$$

საიდანაც მივიღებთ

$$\hat{R}(\hat{\Omega})\psi(\mathbf{r})=\psi(\hat{\Omega}^{-1}\mathbf{r}). \tag{45,9}$$

ეს არის ძირითადი ფორმულა, რომლითაც ჩვენ შემდგომში ვიხელმძღვანელებთ.

ყველა უსასრულო მცირე გარდაქმნის ოპერატორისათვის ერთსა და იმავე $\hat{R}$ აღნიშვნას გამოვიყენებთ; მათ ერთმანეთისაგან განვასხვავებთ გარდაქმნის შესაბამისი ინდექსით. ასე მაგალითად, $\hat{R}_\rho$ იქნება წანაცვლების ოპერატორი ρ ვექტორზე, $\hat{R}_\varphi$—მობრუნება φ კუთხეზე და ა. შ.

წანაცვლება უსასრულოდ მცირე ვექტორზე. ვიპოვოთ უსასრულოდ მცირე ε—ვექტორზე წანაცვლების ოპერატორის ცხადი გამოხატულება. (45,9) და (45,3) ფორმულების თანახმად

$$\hat{R}_\varepsilon\psi(\mathbf{r})=\psi(\mathbf{r}-\varepsilon). \tag{45,10}$$

რადგან ε უსასრულოდ მცირე ვექტორია, ამიტომ $\psi(\mathbf{r}-\varepsilon)$ გავშალოთ მწკრივად

$$\hat{R}_\varepsilon\psi(\mathbf{r})=\left\{1-(\varepsilon\nabla)+\frac{1}{2}(\varepsilon\nabla)^2+\ldots+\right\}\psi(\mathbf{r}). \tag{45,11}$$

თუ გაშლაში შევინარჩუნებთ ε ვექტორის პირველ ხარისხს, მაშინ უსასრულოდ მცირე წანაცვლების ოპერატორი შეგვიძლია წარმოვიდგინოთ შემდეგი სახით:

$$\hat{R}_\varepsilon=1-\frac{i}{\hbar}(\hat{\varepsilon}\,\hat{\mathbf{p}}), \tag{45,12}$$

სადაც $\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar\nabla$ იმპულსის ოპერატორია. შებრუნებულ ოპერატორს კი შემდეგი სახე ექნება:

$$\hat{R}_\varepsilon^{-1} = 1 + \frac{i}{\hbar}(\varepsilon\hat{\mathbf{p}}). \tag{45,13}$$

შევნიშნოთ, რომ რადიუსვექტორის წანაცვლება ε ვექტორზე გამოიხატება ფორმულით

$$\mathbf{r}' = \hat{R}_\varepsilon^{-1}\,\mathbf{r}\,\hat{R}_\varepsilon \tag{45,14}$$

მართლაც

$$\mathbf{r}' = \left\{1 + \frac{i}{\hbar}(\varepsilon\hat{\mathbf{p}})\right\}\mathbf{r}\left\{1 - \frac{i}{\hbar}(\varepsilon\hat{\mathbf{p}})\right\} = \mathbf{r} + [(\varepsilon\hat{\mathbf{p}}),\ \mathbf{r}] = \mathbf{r} + \varepsilon, \tag{45,14'}$$

რამდენადაც $[(\varepsilon\hat{\mathbf{p}}), \mathbf{r}]$ პუასონის ფრჩხილები, როცა ε მუდმივი ვექტორია ε-ის ტოლია.

ასევე ადვილად ვაჩვენებთ, რომ თუ $\hat{H}(\mathbf{r})$ ჰამილტონის ფუნქციაა, მაშინ

$$\hat{H}' = \hat{R}_\varepsilon^{-1}\hat{H}\hat{R}_\varepsilon = \hat{H}(\mathbf{r}) + [(\varepsilon\hat{\mathbf{p}}),\ \hat{H}] \tag{45,15}$$

რადგან

$$[(\varepsilon\hat{\mathbf{p}}),\ \hat{H}] = (\varepsilon\nabla)\hat{H},$$

ამიტომ

$$\hat{H}' = \hat{R}_\varepsilon^{-1}\hat{H}\hat{R}_\varepsilon = \hat{H}(\mathbf{r} + \varepsilon). \tag{45,15'}$$

სასრულ ρ ვექტორზე წანაცვლების ოპერატორი (45,11) ფორმულის თანახმად ტოლი იქნება გამოსახულების

$$\hat{R}_\rho = e^{-\frac{i}{\hbar}(\rho\hat{\mathbf{p}})} \tag{45,16}$$

ამ ოპერატორს ტრანსილაციის ოპერატორს უწოდებენ. ცხადია, იგი უნიტარული ოპერატორია $\hat{R}_\rho^{+} = \hat{R}_\rho^{-1}$, სადაც

$$\hat{R}_\rho^{-1} = e^{\frac{i}{\hbar}(\rho\hat{\mathbf{p}})} \tag{45,17}$$

რადგან $\hat{R}_\rho$ უნიტარული ოპერატორია, ამიტომ $\psi' = \hat{R}_\rho\psi$ ფუნქციის ფიზიკური შინაარსი არ შეიცვლება.

ადვილად ვაჩვენებთ, რომ სასრულ ρ ვექტორზე ტრანსილაციის შემთხვევაში გვექნება:

$$\mathbf{r}' = \hat{R}_\rho^{-1}\mathbf{r}\hat{R}_\rho = e^{\frac{i}{\hbar}(\rho\hat{\mathbf{p}})}\,\mathbf{r}\,e^{-\frac{i}{\hbar}(\rho\hat{\mathbf{p}})} = \mathbf{r} + \rho, \tag{45,18}$$

$$\hat{H}' = e^{\frac{i}{\hbar}(\rho\hat{\mathbf{p}})}\,\hat{H}\,e^{-\frac{i}{\hbar}(\rho\hat{\mathbf{p}})} = \hat{H}(\hat{\mathbf{r}} + \rho). \tag{45,19}$$

ამ ფორმულების სამართლიანობას ადვილად დავამტკიცებთ, თუ გავიხსენებთ რომ (იხ. მაგალითი II-ე თავის ბოლოში)

$$e^{\frac{i}{\hbar}(\rho\hat{\mathbf{p}})}\,\mathbf{r}\,e^{-\frac{i}{\hbar}(\rho\hat{\mathbf{p}})} = \mathbf{r} + [(\rho\hat{\mathbf{p}}),\ \mathbf{r}] + [(\rho\hat{\mathbf{p}}),\ [(\rho\hat{\mathbf{p}}),\ \mathbf{r}]] + \ldots = \mathbf{r} + \rho, \tag{45,20}$$

რამდენადაც $[(\rho \hat{\mathbf{p}}), \mathbf{r}] = \rho$ და პირველის გარდა ყველა სხვა პუასონის ფრჩხილების შემცველი წევრები ნულის ტოლია.

შევნიშნოთ, რომ როცა ვიხილავთ არა ერთ ნაწილაკს, არამედ ნაწილაკთა სისტემას, რომელიც ხასიათდება $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \ldots, \mathbf{r}_n$ რადიუსვექტორებით, მაშინ უსასრულოდ მცირე ვექტორზე წანაცვლება უნდა გავიგოთ, როგორც ყოველი რადიუს-ვექტორის წანაცვლება ამ ვექტორზე, ე. ი.

$$\hat{R}_\varepsilon \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \ldots, \mathbf{r}_n) = \psi(\mathbf{r}_1 + \varepsilon, \mathbf{r}_2 + \varepsilon, \ldots \mathbf{r}_n + \varepsilon). \tag{45,21}$$

ამ შემთხვევაში $\hat{R}_\varepsilon$ ოპერატორს ექნება სახე

$$\hat{R}_\varepsilon = 1 - \frac{i}{\hbar}(\varepsilon \hat{\mathbf{P}}), \tag{45,22}$$

სადაც $\hat{\mathbf{P}}$ სისტემის იმპულსის ოპერატორია

$$\hat{\mathbf{P}} = -i\hbar(\nabla_1 + \nabla_2 + \ldots + \nabla_n) \tag{45,23}$$

სასრულ ρ ვექტორზე წანაცვლების ოპერატორისათვის კი გვექნება

$$\hat{R}_\rho = e^{-\frac{i}{\hbar}(\rho \hat{\mathbf{P}})}. \tag{45,24}$$

მობრუნება უსასრულო მცირე კუთხეზე. განვიხილოთ ნაწილაკის რადიუს-ვექტორის მობრუნება უსასრულოდ მცირე $\delta\varphi$ კუთხეზე. (45,9) და (45,4) ფორმულების თანახმად ამ გარდაქმნას ექნება სახე

$$\hat{R}_{\delta\varphi}\psi(\mathbf{r}) = \psi(\mathbf{r} - [\delta\varphi \times \mathbf{r}]), \tag{45,25}$$

მოვახდინოთ მწკრივად გაშლა; მივიღებთ

$$\hat{R}_{\delta\varphi}\psi(\mathbf{r}) = \{1 - (\delta\varphi\,[\mathbf{r} \times \nabla]) + \ldots + \}\psi(\mathbf{r}), \tag{45,26}$$

საიდანაც პირველი რიგის უსასრულო მცირე წევრების სიზუსტით შეგვიძლია დავწეროთ

$$\hat{R}_{\delta\varphi} = 1 - (\mathbf{n}\,[\mathbf{r} \times \nabla])\,\delta\varphi, \tag{45,27}$$

სადაც $\mathbf{n}$ არის ბრუნვის ფიქსირებული ღერძის ორტი. თუ შემოვიღებთ იმპულსის მომენტს $\hat{\mathbf{l}} = [\mathbf{r} \times \hat{\mathbf{p}}]$, საბოლოოდ მივიღებთ უსასრულოდ მცირე კუთხეზე მობრუნების შემდეგ ოპერატორს:

$$\hat{R}_{\delta\varphi} = 1 - \frac{i}{\hbar}(\mathbf{n}\hat{\mathbf{l}})\,\delta\varphi. \tag{45,28}$$

შებრუნებულ ოპერატორს ექნება გამოხატულება

$$\hat{R}^{-1}_{\delta\varphi} = 1 + \frac{i}{\hbar}(\mathbf{n}\hat{\mathbf{l}})\,\delta\varphi. \tag{45,28'}$$

სასრულ φ კუთხეზე მობრუნების ოპერატორს და მის შებრუნებულს ექნებათ სახე:

$$\hat{R}_\varphi = e^{-\frac{i}{\hbar}(\mathbf{n}\hat{\mathbf{l}})\varphi} \qquad R^{-1}_\varphi = e^{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{n}\hat{\mathbf{l}})\varphi} \tag{45,29}$$

აღსანიშნავია, რომ $\hat{R}_\varphi$-ც უნიტარული ოპერატორია.

ადვილად შევამოწმებთ, რომ ადგილი აქვს ფორმულებს:

$$\mathbf{r}' = \hat{R}_{\delta\varphi}^{-1}\,\mathbf{r}\,\hat{R}_{\delta\varphi} = \mathbf{r} + [(\mathbf{n}\hat{\mathbf{l}}),\ \mathbf{r}]\delta\varphi, \tag{45,29'}$$

$$\hat{H}' = \hat{R}_{\delta\varphi}^{-1}\,\hat{H}\,\hat{R}_{\delta\varphi} = \hat{H} + [(\mathbf{n}\hat{\mathbf{l}}),\ \hat{H}]\delta\varphi. \tag{45,29''}$$

როცა $\hat{H}$ ინვარიანტულია $\hat{R}_{\delta\varphi}$ გარდაქმნის მიმართ, მაშინ $\hat{H} = \hat{H}'$ და $[(\mathbf{n}\hat{\mathbf{l}}),\ \hat{H}] = 0$.

ნაწილაკთა სისტემის შემთხვევაში მობრუნების ოპერატორებში $\hat{\mathbf{l}}$-ის ნაცვლად შემოვა სისტემის იმპულსის მომენტი $\hat{\mathbf{L}} = \sum \hat{\mathbf{l}}_i$.

დროში წანაცვლების ოპერატორი. გარდა სივრცული კოორდინატების ცვლილებისა შეგვიძლია შემოვიღოთ დროში წანაცვლების ოპერატორიც. განვიხილოთ უსასრულოდ მცირე წანაცვლება τ დროში $\hat{\Omega}_t = t + \tau$, მაშინ

$$\hat{R}_\tau \psi(\mathbf{r},\ t) = \psi(\mathbf{r},\ t - \tau). \tag{45,30}$$

ცხადია, მწკრივად გაშლით მივიღებთ

$$\hat{R}_\tau \psi(\mathbf{r},\ t) = \left\{1 - \tau\frac{\partial}{\partial t} + \ldots + \right\}\psi(\mathbf{r},\ t), \tag{45,31}$$

ე. ი.

$$\hat{R}_\tau = 1 + \frac{i}{\hbar}\tau\hat{E}, \tag{45,32}$$

სადაც $\hat{E} = i\hbar\dfrac{\partial}{\partial t}$. სასრული წანაცვლებისათვის გვექნება ოპერატორი

$$\hat{R}_\tau = e^{\frac{i}{\hbar}(\tau\hat{E})} \tag{45,33}$$

რომელიც გვიჩვენებს, რომ ჩვენს ძიერ ადრე შემოღებული დროზე დამოკიდებული უნიტარული ოპერატორები ყოფილან სასრულო t დროში წანაცვლების ოპერატორები.

ინვერსიის ოპერატორი. ინვერსიის ოპერაცია განსხვავებით ზემოთ განხილული ოპერაციებისაგან დისკრეტულია. იგი გამოხატავს კოორდინატების ნიშნის შეცვლას საწინააღმდეგოთი, ე. ი. $\mathbf{r} \to -\mathbf{r}$ გარდაქმნას. თუ ამ ოპერაციას ჩავატარებთ სისტემის კოორდინატთა ღერძებზე, მაშინ მარჯვენა სისტემა გადავა მარცხენაში და პირიქით. $\psi(\mathbf{r})$ ფუნქციაზე ამ ოპერაციის ჩატარება ნიშნავს $\psi(-\mathbf{r})$-ს. ინვერსიის ოპერატორი აღვნიშნოთ $\hat{I}$-თი, მაშინ

$$\hat{I}\psi(\mathbf{r}) = \psi(-\mathbf{r}). \tag{45,34}$$

თუ ფუნქციას გარკვეული ლუწობა ახასიათებს, მაშინ ასეთი გარდაქმნის დროს მას წინ დაუჯდება ± 1 მამრავლი.

საინტერესოა დავადგინოთ როგორ გარდაიქმნება ფიზიკური სიდიდეები ინვერსიის ოპერაციის დროს. რადგან იმპულსის ოპერატორი შეიცავს

$$\nabla\left(\frac{\partial}{\partial x},\ \frac{\partial}{\partial y},\ \frac{\partial}{\partial z}\right)$$

ოპერატორს, ამიტომ ცხადია, ინვერსიის დროს $\hat{\mathbf{p}}$ იცვლება — $\hat{\mathbf{p}}$-თი. ნათელია აგრეთვე, რომ ნიშანს შეიცვლის კლასიკური იმპულსიც, სიჩქარეც და აჩქარებაც. მაშასადამე, ნიშანს შეიცვლის ძალაც. აქედან კი გამომდინარეობს, რომ ინვერსიის დროს ელექტრული ველის დაძაბულობის ვექტორი ნიშანს იცვლის, მაგნიტური ველის დაძაბულობის ვექტორი კი არა და ა. შ. როგორც ცნობილია ვექტორებს, რომლებიც ინვერსიის დროს მიმართულებას იცვლიან, პოლარულს უწოდებენ, ხოლო რომლებიც მიმართულებას არ იცვლიან—აქსიალურს.

ჰამილტონიანის ინვარიანტობა უსასრულოდ მცირე გარდაქმნების მიმართ. განვიხილოთ სისტემა, რომელიც ხასიათდება $\hat{H}$ ჰამილტონის ოპერატორით. ვთქვათ, შრედინგერის განტოლებაზე ჩავატაროთ კოორდინატების გარდაქმნის რომელიმე ზემოთ განხილული ოპერაცია. მაშინ, საზოგადოდ, ჩვენ მივიღებთ ახალ ჰამილტონიანს, რომელიც ტოლია $\hat{H}' = \hat{R}^{-1}\hat{H}\hat{R}$. გამოვარკვიოთ, რას ნიშნავს $\hat{H}$ ოპერატორის ინვარიანტობა ამ გარდაქმნების მიმართ. ადვილად ვაჩვენებთ, რომ შრედინგერის განტოლების ინვარიანტობა $\hat{R}$ გარდაქმნის მიმართ ნიშნავს იმას, რომ $\hat{H}' = \hat{H}$, ე. ი. $\hat{H}\hat{R} = \hat{R}\hat{H}$; მაშასადამე, $\hat{R}$ ოპერატორი კომუტატურია ჰამილტონის ოპერატორთან. ამ შემთხვევაში, შრედინგერის განტოლებაზე $\hat{R}$ ოპერატორის მოქმედებით მივიღებთ

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}(\hat{R}\psi) = \hat{R}\hat{H}\psi = \hat{H}(\hat{R}\psi). \tag{45,35}$$

თუ შემოვიღებთ ახალ ფუნქციას

$$\psi' = \hat{R}\psi, \tag{45,36}$$

მაშინ (45,35) განტოლებას მართლაც ექნება ინვარიანტული ფორმა

$$i\hbar \frac{\partial \psi'}{\partial t} = \hat{H}\psi'. \tag{45,37}$$

ამგვარად, მივიღეთ მნიშვნელოვანი დასკვნა, რომ ჰამილტონის ოპერატორის ინვარიანტობა $\hat{R}$ გარდაქმნის მიმართ ნიშნავს $\hat{H}\hat{R} = \hat{R}\hat{H}$ ტოლობას, რაც ეკვივალენტურია პუასონის ფრჩხილების ნულთან ტოლობის

$$[\hat{H}, \hat{R}] = 0. \tag{45,38}$$

მეორე მხრივ, თანახმად (45,12) ფორმულისა, ეს პირობა, როცა $\hat{R}$ წარმოადგენს მცირე წანაცვლებას, ეკვივალენტურია $[\hat{H}, \hat{\mathbf{p}}] = 0$ პირობისა, ხოლო როცა $\hat{R}$ არის მობრუნების ოპერატორი, მაშინ—$[\hat{H}, \hat{\mathbf{l}}] = 0$ პირობისა.

§ 46. შენახვის კანონები

როგორც ვიცით, მოძრაობის კვანტურ განტოლებას აქვს შემდეგი სახე:

$$\frac{d\hat{A}}{dt} = \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} + [\hat{H}, \hat{A}], \tag{46,1}$$

სადაც $\hat{A}$ არის A—ფიზიკური სიდიდის შესაბამისი ერმიტული ოპერატორი. დავუშვათ, რომ $\frac{d\hat{A}}{dt} = 0$. ასეთ შემთხვევაში ამბობენ, რომ გვაქვს მოძრაობის ინტეგ-

რალი. თუ $\frac{d\hat{A}}{dt}$ გამოსახულებას მარცხნიდან გავამრავლებთ ψ^*-ზე, მარჯვნიდან კი ψ-ზე და ავიღებთ ინტეგრალს, მივიღებთ $\langle\psi\left|\frac{d\hat{A}}{dt}\right|\psi\rangle=0$, ე. ი. $\frac{\overline{dA}}{dt}=0$. მაგრამ ჩვენ ვიცით, რომ $\frac{\overline{dA}}{dt}=\frac{d}{dt}\overline{A}$, ამიტომ $\frac{d}{dt}\overline{A}=0$ და $\overline{A}=\text{const}$. ამგვარად, თუ $\frac{d\hat{A}}{dt}=0$, ე. ი.

$$\frac{\partial\hat{A}}{\partial t}+[\hat{H},\ \hat{A}]=0, \tag{46,2}$$

მაშინ $\hat{A}$ ოპერატორის შესაბამისი ფიზიკური A-სიდიდის საშუალო მნიშვნელობა მოძრაობის ინტეგრალს წარმოადგენს. როცა ფიზიკურ სიდიდეს ψ მდგომარეობაში გარკვეული მნიშვნელობა აქვს, ე. ი. როცა $\hat{A}\psi=A\psi$, მაშინ $\overline{A}=A$ და მივიღებთ, რომ (46,2) ეკვივალენტურია A ფიზიკური სიდიდის შენახვისა. ამგვარად, მივიღეთ მნიშვნელოვანი დასკვნა: თუ ადგილი აქვს (46,2) ტოლობას და, ამავე დროს, A-ს გარკვეული მნიშვნელობები აქვს, მაშინ ეს A სიდიდე მოძრაობის ინტეგრალს წარმოადგენს: $A=\text{const}$. იმ კერძო შემთხვევაში, როცა $\hat{A}$ დროზე ცხადად არ არის დამოკიდებული, იმისათვის, რომ A იყოს მოძრაობის ინტეგრალი საჭიროა

$$\frac{d\hat{A}}{dt}=[\hat{H},\ \hat{A}]=0. \tag{46,3}$$

მაშასადამე, ამ შემთხვევაში, A იქნება მოძრაობის ინტეგრალი, თუ მისი შესაბამისი $\hat{A}$ ოპერატორი კომუტატურია სისტემის ჰამილტონიანთან

$$[\hat{H},\ \hat{A}]=0. \tag{46,4}$$

რადგან კომუტატურ ოპერატორებს საერთო საკუთარი ფუნქცია აქვთ, ამიტომ თუ აღმოჩნდა, რომ $\hat{A}$ ოპერატორსა და ჰამილტონიანს აქვთ საერთო საკუთარი ψ ფუნქცია, მაშინ ადგილი ექნება $\hat{A}$-ს შესაბამისი ფიზიკური სიდიდის შენახვას და იმ მდგომარეობაში, რომელიც ψ ფუნქციით ხასიათდება, ერთდროულად და ზუსტად გაიზომება ის ფიზიკური სიდიდეები, რომლებიც მოძრაობის ინტეგრალებს წარმოადგენენ.

კვანტურ მექანიკაში გვაქვს ენერგიის, იმპულსის, იმპულსის მომენტისა და ლუწობის შენახვის კანონები. განვიხილოთ ისინი ცალ-ცალკე.

ენერგიის შენახვის კანონი. ენერგიის შენახვის კანონი ერთ-ერთი ძირითადი კანონია ბუნებისა. მოძრაობის განტოლებას ჰამილტონის ოპერატორისათვის ექნება სახე

$$\frac{d\hat{H}}{dt}=\frac{\partial\hat{H}}{\partial t}+[\hat{H},\ \hat{H}], \tag{46,5}$$

საიდანაც

$$\frac{d\hat{H}}{dt}=\frac{\partial\hat{H}}{\partial t}. \tag{46,6}$$

აქედან ჩანს, რომ, როცა $\frac{\partial \hat{H}}{\partial t}=0$, ე. ი. როცა სისტემის ჰამილტონიანი დროზე ცხადად არ არის დამოკიდებული, მაშინ $\frac{d\hat{H}}{dt}$-ც უდრის ნულს. სტაციონარულ მდგომარეობაში ჰამილტონიანი ემთხვევა სრული ენერგიის ოპერატორს, ამიტომ სტაციონარულ მდგომარეობაში სამართლიანი იქნება ენერგიის შენახვის კანონი. ჰამილტონიანი დროზე ცხადად არ არის დამოკიდებული ან მაშინ, როცა სისტემა იზოლირებულია ანდა, როცა სისტემაზე მოქმედი გარე ველები დროის მიხედვით არ იცვლება.

ადვილი დასანახია, რომ ენერგიის შენახვის კანონი დაკავშირებულია დროის ერთგვაროვნების თვისებასთან. მართლაც, იმის გამო, რომ დრო ერთგვაროვანია, იზოლირებული სისტემის ჰამილტონიანი ინვარიანტული რჩება, სისტემის დროში უსასრულოდ მცირე წანაცვლებისას, ე. ი. $\hat{H}\,\hat{R}_\tau=\hat{R}_\tau\hat{H}$, რაც შედეგად გვაძლევს $\frac{\partial \hat{H}}{\partial t}=0$ პირობას; ეს უკანასკნელი კი ეკვივალენტურია ენერგიის შენახვისა.

იმპულსის შენახვის კანონი. განვიხილოთ იზოლირებული ნაწილაკი. ასეთი ნაწილაკის ჰამილტონიანი ემთხვევა კინეტიკური ენერგიის ოპერატორს

$$\hat{H}=\frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2\mu}. \tag{46,7}$$

მაშასადამე,

$$\frac{d\hat{\mathbf{p}}}{dt}=[\hat{H},\ \hat{\mathbf{p}}]=0. \tag{46,8}$$

რაც გვეუბნება, რომ იზოლირებული ნაწილაკის იმპულსი $\mathbf{p}=\text{const}$. ეს კანონი ანალოგიურია კლასიკური მექანიკის ინერციის კანონისა. რადგან $[\hat{H},\ \hat{\mathbf{p}}]=0$, ამიტომ თავისუფალი ნაწილაკის იმპულსი და ენერგია შეიძლება ერთდროულად და ზუსტად გაიზომოს.

თავისუფალი ნაწილაკის ჰამილტონიანი კომუტატური იქნება $\hat{R}_\rho$-ტრანსლაციის ოპერატორთან, ე. ი. სივრცის ერთგვაროვნების გამო ნაწილაკის ჰამილტონიანი არ შეიცვლება სისტემის ρ ვექტორზე წანაცვლებისას. ეს კი ეკვივალენტურია თავისუფალი ნაწილაკის იმპულსის შენახვის.

როცა გვაქვს არა ერთი იზოლირებული ნაწილაკი, არამედ იზოლირებული სისტემა, მაშინ i და k ნაწილაკთა ურთიერთქმედების პოტენციალური ენერგია დამოკიდებულია მხოლოდ $\mathbf{r}_i-\mathbf{r}_k$ სხვაობაზე, ამიტომ

$$\hat{R}_\rho V(\mathbf{r}_i-\mathbf{r}_k)=V([\mathbf{r}_i-\rho]-[\mathbf{r}_k-\rho])=V(\mathbf{r}_i-\mathbf{r}_k). \tag{46,9}$$

მაშასადამე, ტრანსლაციის ოპერაცია არ შეცვლის ჰამილტონის ოპერატორსაც, საიდანაც დავასკვნით, რომ ადგილი ექნება იზოლირებული სისტემის იმპულსის მუდმივობის კანონს.

იმპულსის მომენტის შენახვის კანონი. სივრცის იზოტროპულობის თვისების გამო იზოლირებული სისტემის ჰამილტონიანი არ შეიცვლება სისტემის რაიმე ღერძის ირგვლივ უსასრულოდ მცირე კუთხეზე შემობრუნებისას. სივრცის ამ თვისებასთან დაკავშირებულია იმპულსის მომენტის შენახვის კანონი. მაგრამ იმის გამო, რომ იმპულსის მომენტის მდგენელები ურთიერთ კომუტატური არ არიან,

კვანტურ მექანიკაში მომენტის მუდმივობის კანონი კლასიკურისაგან განსხვავებულ შინაარსს ატარებს.

განვიხილოთ იზოლირებული ნაწილაკი. მისი ჰამილტონიანი (46,7) ფორმულით განისაზღვრება; ამიტომ

$$\frac{d\hat{l}_z}{dt}=[\hat{H},\ \hat{l}_z]=\frac{1}{2\mu}\{[\hat{p}_x^2,\ \hat{l}_z]+[\hat{p}_y^2,\ \hat{l}_z]+[\hat{p}_z^2,\ \hat{l}_z]\}. \qquad (46,9')$$

თუ გავიხსენებთ, რომ $[\hat{p}_x,\ \hat{l}_z]=\hat{p}_y$, $[\hat{p}_y,\ \hat{l}_z]=-\hat{p}_x$ და $[\hat{p}_z,\ \hat{l}_z]=0$ ადვილად დავინახავთ, რომ $\frac{d\hat{l}_z}{dt}=0$, ე. ი. $l_z=\text{const}$; სრულიად ანალოგიურად ვაჩვენებთ, რომ $\hat{l}_x=0$ და $\hat{l}_y=0$. ახლა განვიხილოთ $\hat{\mathbf{l}}^2$-ის დროითი წარმოებული; გვექნება

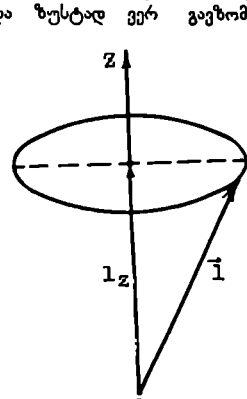
$$\frac{d\hat{\mathbf{l}}^2}{dt}=[\hat{H},\ \hat{l}_x^2+\hat{l}_y^2+\hat{l}_z^2]=\hat{l}_x[\hat{H},\ \hat{l}_x]+[\hat{H},\ \hat{l}_x]\hat{l}_x+$$
$$+\hat{l}_y[\hat{H},\ \hat{l}_y]+[\hat{H},\ \hat{l}_y]\hat{l}_y+\hat{l}_z[\hat{H},\ \hat{l}_z]+[\hat{H},\hat{l}_z]\hat{l}_z. \qquad (46,10)$$

ზემოთ ვაჩვენეთ, რომ $[\hat{H},\ \hat{l}_\alpha]=0$, ამიტომ $\frac{d\hat{\mathbf{l}}^2}{dt}=0$, ე. ი. $\mathbf{l}^2=\text{const}$.

კლასიკურ მექანიკაში ინახებოდა იმპულსის მომენტის სამივე მდგენელი, ე. ი. მთელი ვექტორი. კვანტურ მექანიკაში კი იმპულსის მომენტის ვექტორის შენახვა არ ხდება, რამდენადაც $\hat{l}_x$, $\hat{l}_y$, $\hat{l}_z$ ოპერატორების არაკომუტატორობის გამო მათ საკუთარ მნიშვნელობას ერთდროულად და ზუსტად ვერ გავზომავთ. ამიტომ კვანტურ მექანიკაში იზოლირებული ნაწილაკისათვის შეინახება მხოლოდ ორი სიდიდე:

$$\mathbf{l}^2=\text{const},\ l_z=\text{const} \qquad (46,11)$$

ე. ი. ინახება მომენტის სიგრძე და მისი რომელიმე ერთი პროექცია, განხილულ შემთხვევაში z-პროექცია. ეს იმას ნიშნავს, რომ მომენტის მიმართულება სივრცეში დაფიქსირებული არ არის. იმპულსის მომენტის ვექტორს შეუძლია ბრუნვა z-ღერძის ირგვლივ.



ნახ. 4.

ახლა ვაჩვენოთ, რომ მომენტი შეიძლება შეინახოს გარეშე ველში მოძრაობის შემთხვევაშიაც, თუკი ამ ველს ახასიათებს ცენტრალური სიმეტრია. ცენტრალურ ველში მოძრაობის შემთხვევაში ნაწილაკის ჰამილტონიანს აქვს გამოხატულება

$$\hat{H}=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right)+\frac{\hat{\mathbf{l}}^2}{2\mu r^2}+V(r,\ t). \qquad (46,12)$$

მოძრაობის განტოლება $\hat{\mathbf{l}}^2$ და $\hat{l}_\alpha$ ოპერატორებისათვის ($\alpha=1,\ 2,\ 3$) მიიღებს სახეს

$$\frac{d\hat{\mathbf{l}}^2}{dt} = [\hat{H},\ \hat{\mathbf{l}}^2], \quad \frac{d\hat{l}_z}{dt} = [\hat{H},\ \hat{l}_z]. \tag{46,12'}$$

რადგან $\hat{\mathbf{l}}^2$ და $\hat{l}_z$ ოპერატორების გამოხატულებაში სფერულ კოორდინატებში, რადიალური ნაწილები არ შედიან და $[\hat{\mathbf{l}}^2,\ \hat{l}_z]=0$, ამიტომ $\frac{d\hat{\mathbf{l}}^2}{dt}=0$ და $\frac{d\hat{l}_z}{dt}=0$, საიდანაც დავასკვნით, რომ დაცულია (46,11) შენახვის კანონი.

ამგვარად, ცენტრალურ ველში ადგილი აქვს იმპულსის მომენტის შენახვის კანონს.

ლუწობის შენახვის კანონი. იზოლირებული ნაწილაკის ჰამილტონიანს კიდევ ერთი მნიშვნელოვანი ინვარიანტობა ახასიათებს, რომელსაც ასევე შეესაბამება შენახვის კანონი. ესაა ჰამილტონის ოპერატორის ინვარიანტობა სივრცის ინვერსიის მიმართ. რადგან კინეტიკური ენერგიის ოპერატორი კოორდინატებით გაწარმოების მიმართ კვადრატულია, იზოლირებული ნაწილაკის პოტენციალური ენერგია კი მანძილის სიდიდეზე დამოკიდებული, ამიტომ ინვერსიის დროს გვექნება ტოლობა

$$\hat{H}\left((-i\hbar\nabla)^2,\ -x,\ -y,\ -z\right) = \hat{H}\left((-i\hbar\nabla)^2,\ x,\ y,\ z\right). \tag{46,13}$$

რადგან $\hat{H}$ ოპერატორი მოქმედებს ψ ფუნქციაზე, ამიტომ (46,13) პირობა ასე შეგვიძლია ჩავწეროთ:

$$\hat{I}\hat{H} = \hat{H}\hat{I}, \tag{46,14}$$

სადაც $\hat{I}$ ინვერსიის ოპერატორია. ფიზიკურად ეს პირობა მიგვითითებს იმაზე, რომ მოვლენა ერთნაირად უნდა აიწეროს კოორდინატთა როგორც მარჯვენა, ისე მარცხენა სისტემაში (ე. ი. შრედინგერის $\hat{H}\psi = E\psi$ განტოლებას ერთნაირი სახე ექნება როგორც მარჯვენა ისე მარცხენა სისტემაში). (46,14) ტოლობა თავის მხრივ უკვე ნიშნავს $\hat{I}$-ოპერატორის საკუთარი I მნიშვნელობის შენახვას

$$I = \text{const}. \tag{46,15}$$

ვპოვოთ I-ს შესაძლო მნიშვნელობები და მისი შესაბამისი საკუთარი ფუნქციები. ψ ფუნქცია საერთო საკუთარი ფუნქციაა $\hat{H}$ და $\hat{I}$ კომუტატური ოპერატორებისა, ამიტომ ψ ფუნქცია უნდა აკმაყოფილებდეს განტოლებას

$$\hat{I}\psi = I\psi. \tag{46,16}$$

ამ განტოლებაზე კიდევ ერთხელ ვიმოქმედოთ $\hat{I}$ ოპერატორით და გავითვალისწინოთ, რომ $\hat{I}^2=1$, რამდენადაც ორჯერ ზედიზედ ჩატარებული ინვერსია აღადგენს საწყის მდგომარეობას. მაშინ მივიღებთ $I^2=1$, საიდანაც $I=\pm 1$. ამგვარად,

$$\hat{I}\psi(\mathbf{r}) = \psi(-\mathbf{r}) = \pm\psi(\mathbf{r}). \tag{46.17}$$

მაშასადამე, კვანტურ მექანიკაში ტალღურ ფუნქციას უსათუოდ გარკვეული ლუწობა ახასიათებს, იგი ან ლუწია ან კენტი; ამასთან, იზოლირებული სისტემის ტალღური ფუნქციის ლუწობა დროის მიხედვით არ იცვლება. ამაში მდგომარეობს ლუწობის შენახვის კანონი. აღსანიშნავია, რომ ეს კანონი წმინდა კვანტურმექანიკური კანონია და მას ანალოგია კლასიკურ მექანიკაში არ გააჩნია.

ცენტრალური სიმეტრიის ველში ტალღური ფუნქცია წარმოიდგინება შემდეგი სახით:

$$\psi_{lm}(\mathbf{r}) = R_l(r)Y_{lm}(\theta,\ \varphi), \tag{46,18}$$

სადაც $R_l(r)$ რადიალური ფუნქცია დამოკიდებულია მხოლოდ რადიუსვექტორის $|r|$ სიდიდეზე, $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ კი სფერული ფუნქციაა. $l=0, 1, 2\ldots$ მომენტის კვანტური რიცხვია m კი მისი პროექციისა $m=0, \pm 1, \ldots \pm l$. ადვილი შესამოწმებელია, რომ $r \to -r$ ინვერსიას სფერულ კოორდინატებში შეესაბამება გარდაქმნა

$$r \to r, \quad \theta \to \pi - \theta, \quad \varphi \to \pi + \varphi, \tag{46,19}$$

რაც მოგვცემს

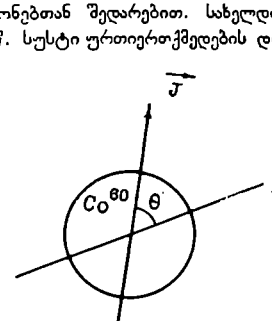
$$Y_{lm}(\pi - \theta, \pi + \varphi) = (-1)^l Y_{lm}(\theta, \varphi) \tag{46,20}$$

მაშასადამე, $\psi_{lm}(-r) = (-1)^l \psi_{lm}(r)$ და ლუწობის საკუთარი მნიშვნელობა ტოლი იქნება სიდიდის

$$I = (-1)^l; \tag{46,21}$$

საიდანაც ჩანს, რომ ცენტრალურ ველში ლუწობა დაკავშირებულია მომენტის l კვანტურ რიცხვთან, ე. ი. ერთი ნაწილაკის ცენტრალურ ველში მოძრაობისას მომენტისა და ლუწობის ინტეგრალები დამოუკიდებელი არ არიან [1].

საინტერესოა აღვნიშნოთ, რომ ლუწობის შენახვის კანონი ნაკლებად უნივერსალური აღმოჩნდა სხვა მუდმივობის კანონებთან შედარებით. სახელდობრ, ლიმ და იანგმა იწინასწარმეტყველეს, რომ ე. წ. სუსტი ურთიერთქმედების დროს, როგორიცაა, მაგალითად, ბირთვული β-დაშლა, ლუწობის შენახვის კანონი შესაძლებელია დაირღვეს. მართლაც, 1956 წელს ვუმ და მისმა თანაავტორებმა ექსპერიმენტით დაამტკიცეს ზემოთ აღნიშნული თეორიული მოსაზრების სისწორე. ექსპერიმენტზე შესწავლილი იქნა დაპოლარებული Co^{60} ბირთვების β-გამოსხივება. ვთქვათ, β-დაშლისას გამოსხივებულ ელექტრონებს ვაკვირდებით ბირთვის $\mathbf{J}$ სპინის მიმართ რაიმე θ კუთხეზე. დავუშვათ, რომ ამ მიმართულებით დროის ერთეულში გამოიტყორცნება $N(0)$ ელექტრონი. მოვახდინოთ „ექსპერიმენტის ინვერსია“ (სარკისებური არეკვლა სათავის მიმართ). ინვერსიის შედეგად გამოტყორცნილი ელექტრონის იმპულსი $\mathbf{p}_e$ როგორც ნამდვილი ვექტორი, მიმართულებას შეიცვლის საწინააღმდეგოთი, მაშინ, როცა ბირთვის სპინი, რომელიც აქსიალური ვექტორია, ადგილზე დარჩება. მაშასადამე, ინვერსიას შეესაბამება ელექტრონთა გამოსხივება $\pi - \theta$ მიმართულებით. დროის ერთეულში გამოსხივებულ ელექტრონთა რიცხვი $\pi - \theta$ კუთხეზე აღვნიშნოთ $N(\pi - \theta)$-თი. ლუწობის შენახვის კანონი მოითხოვს, რომ გამოსხივებულ ელექტრონთა რიცხვი θ მიმართულებით და სარკისებური არეკვლით მიღებული $\pi - \theta$ მიმართულებით ერთნაირი იყოს, ე. ი. $N(\theta) = N(\pi - \theta)$. ვუს მიერ ჩატარებულ ექსპერიმენტზე კი აღმოჩნდა, რომ გამოსხივებულ ნაწილაკთა რიცხვებს შორის განსხვავება ამ ორი მიმართულებით თითქმის 40%-ს შეადგენს. ელექტრონები უფრო მეტი რაოდენობით ბირთვული სპინის საწინააღმდეგო მიმართულებით გამოიტყორცნებიან, რაც უტყუარი საბუთია იმისა, რომ β-დაშლის დროს ლუწობა



ნახ. 5.

[1] ნაწილაკთა სისტემის განხილვის დროს ჩვენ დავინახეთ, რომ მომენტი და ლუწობა ერთმანეთთან დაკავშირებული აღარ არის და ისინი დამოუკიდებელ შენახვის კანონებს წარმოადგენენ.

არ ინახება. ლუწობის შენახვის კანონის სამართლიანობა დამოკიდებული აღმოჩნდა ურთიერთქმედების ხასიათზე. ზოგი ტიპის ურთიერთქმედების შემთხვევაში იგი დაცულია (მაგალითად, ბირთვული და ელექტრომაგნიტური ურთიერთქმედების დროს) ზოგი ტიპის ურთიერთქმედებისათვის კი (მაგალითად, β-დაშლა, $\mu^{\pm}$ მეზონების დაშლა და სხვა) ირღვევა. აქედან კი შეგვიძლია დავასკვნათ, რომ სუსტი ურთიერთქმედების დროს შრედინგერის განტოლება ინვარიანტული არ არის მარცხენა და მარჯვენა სისტემების მიმართ, ან სხვანაირად „მარცხენა" და „მარჯვენა" აბსოლუტურ ხასიათს ატარებს.

დაბოლოს შევნიშნოთ შემდეგი: ჩვენ რომ გვქონდეს ატომის ბირთვი, რომელსაც საკუთარი მომენტი (სპინი) გააჩნია, მაშინ მომენტის ამ მნიშვნელობას ვერ მივიღებთ ბირთვის შემადგენელი ფერმიონების მხოლოდ და მხოლოდ მოძრაობით გამოწვეული ორბიტალური მომენტების შეკრებით (ეს ჩანს თუნდაც იქიდან, რომ ორბიტალური მომენტები მთელია იმ დროს, როცა ბირთვის სპინი მთელის ნახევარიც შეიძლება იყოს). საქირო იქნებოდა ნუკლონებისათვის მიგვეწერა კენტი რიცხვის ნახევრის ტოლი საკუთარი მექანიკური მომენტები—სპინი.

სრულიად ანალოგიურად კვანტურ მექანიკაში სისტემის ლუწობა წარმოდგება ფარდობითი მოძრაობის შესაბამისი და ნაწილაკთა საკუთარი, ან შინაგანი ლუწობისაგან. ასე რომ, ყოველ ელემენტარულ ნაწილაკს გააჩნია თავისი შინაგანი ლუწობა. ამასთან, ზოგი ნაწილაკის ლუწობა ერთის ტოლია, ზოგისა კი—მინუს ერთის.

შინაგანი ლუწობის ბუნება ისევე, როგორც სპინისა, ჯერჯერობით კიდევ გასარკვევია. ჩვენს მიერ განხილული ლუწობის (46,21) საკუთარი მნიშვნელობა ფარდობითი ლუწობის საკუთარ მნიშვნელობას წარმოადგენს. როცა გვაქვს ორი A და B ნაწილაკის (ან სისტემის) ცენტრალური ურთიერთქმედება, მაშინ სრული ლუწობის საკუთარი მნიშვნელობა ტოლი იქნება

$$w_{AB}=(-1)^{l_{AB}}\, w_A w_B \qquad (46,22)$$

სადაც l_{AB} წარმოადგენს A და B ნაწილაკების (სისტემის) ფარდობითი მოძრაობის ორბიტალური მომენტს, ხოლო w_A და w_B შინაგანი ლუწობებია. იზოლირებული სისტემის ლუწობის შენახვასა ან არ შენახვაში იგულისხმება სრული ლუწობის შენახვა ან არ შენახვა.

თავი VII

მომენტები

ამ თავში, მათი დიდი მნიშვნელობის გამო, ცალკეა განხილული მომენტები. კვანტურ მექანიკაში მომენტი კინემატიკური სიდიდეა, ამიტომ მისი თვისებების შესწავლა შეიძლება შრედინგერის განტოლებისაგან დამოუკიდებლად. ვადგენილია მომენტთა შეკრების წესი. გამოყვანილია ფორმულები, რომლებიც საშუალებას გვაძლევენ მომენტთა მატრიცული ელემენტების განსაზღვრისა. ნაპოვნია მომენტთა საკუთარი ფუნქციები და საკუთარი მნიშვნელობები. შემოყვანილია ვექტორული შეკრების ანუ კლებშ-ჟორდანის კოეფიციენტები, განხილულია მათი თვისებები.

აღსანიშნავია, რომ ამ თავში განხილული მომენტთა თეორია ეხება არამხოლოდ ორბიტალურ მომენტს, არამედ ნებისმიერ სხვა მომენტსაც, როგორიცაა სპინი, ერთი ნაწილაკის სრული მომენტი, ნაწილაკთა სისტემის მომენტები და სხვა.

§ 47. მომენტი

ადრე ჩვენ შემოვიღეთ იმპულსის მომენტის ოპერატორი და შევისწავლეთ მისი თვისებები. განსაკუთრებით მნიშვნელოვანი აღმოჩნდა მომენტის კომუტაციის თვისებების დადგენა. იმპულსის მომენტის ეს თვისებები შეგვიძლია გამოვხატოთ შემდეგი ფორმულებით:

$$[\hat{l}_x, \hat{l}_y] = -i\hbar\hat{l}_z, \quad [\hat{l}^2, \hat{l}_x] = 0, \tag{47,1}$$

ე. ი. იმპულსის მომენტის მდგენელები ერთმანეთთან კომუტატური არ არის. იმპულსის მომენტის კვადრატის ოპერატორი კი კომუტირებადია მომენტის ნებისმიერ მდგენელთან. შემდეგ ჩვენ ვიპოვეთ იმპულსის მომენტის z-მდგენელისა და კვადრატის საკუთარი მნიშვნელობები და საკუთარი ფუნქციები.

აღსანიშნავია, რომ კვანტურ მექანიკაში გარდა იმპულსის მომენტისა გვხვდება სხვა ტიპის მომენტებიც, როგორიცაა, მაგალითად, ნაწილაკის საკუთარი მექანიკური მომენტი, ან სპინი. ამასთან, სპინი წმინდა კვანტური სიდიდეა, მას ანალოგი კლასიკურ მექანიკაში არა აქვს. სამწუხაროდ, სპინის წარმოშობის არსი დღესაც გაურკვეველია, იგი გამოხატავს ნაწილაკისა და ნაწილაკთა სისტემის დამახასიათებელ უცნობ შინაგან ბუნებას. აღმოჩნდა, რომ სპინური მომენტიც ზუსტად (47,1) კომუტაციის თვისებებს აკმაყოფილებს, ე. ი. იგიც კვანტური ვექტორია; ეს ვექტორი, განსხვავებით ორბიტალური მომენტისაგან, დამოკიდებული არ არის არც სივრცით კოორდინატებზე და არც იმპულსებზე. ცხადია, თუ ნაწილაკს სპინი გააჩნია, მაშინ ჩვენ დაგვჭირდება ახალი მექანიკური მომენტის განხილვა, რომელიც წარმოადგენს ჯამს იმპულსის მომენტისა და სპინური მექანიკური მომენტებისა. ამ საჯამო მომენტს ნაწილაკის სრულ მომენტს უწოდებენ და $\mathbf{j}$-თი აღნიშნავენ, ე. ი.

$$\mathbf{j} = \mathbf{l} + \mathbf{s}, \tag{47,2}$$

სადაც s სპინის ვექტორია და როგორც აღვნიშნეთ

$$[\hat{s}_\alpha,\ \hat{s}_\beta] = -\mathcal{E}_{\alpha\beta\gamma}\hat{s}_\gamma;\quad [\hat{s}^2,\hat{s}_\alpha]=0. \tag{47,3}$$

აგვილი საჩვენებელია, რომ სრულ მომენტსაც ექნება იგივე კომუტაციის თვისებები:

$$[\hat{j}_\alpha,\hat{j}_\beta] = -\mathcal{E}_{\alpha\beta\gamma}\hat{j}_\gamma;\quad [\hat{j}^2,\hat{j}_\alpha[=0. \tag{47,4}$$

ამასთან, $\hat{j}^2=\hat{j}_x^2+\hat{j}_y^2+\hat{j}_z^2$ და $\hat{s}^2$-იც ანალოგიურად განისაზღვრება. კერძოდ, $\hat{s}^2=\hat{s}_x^2+\hat{s}_y^2+\hat{s}_z^2$. (47,4) ფორმულების სამართლიანობას ადვილად დავამტკიცებთ (47,1) და (47,3) კომუტაციის თვისებების გათვალისწინებით; მართლაც,

$$[\hat{j}_\alpha,\hat{j}_\beta] = [\hat{l}_\alpha+\hat{s}_\alpha,\hat{l}_\beta+\hat{s}_\beta] = [\hat{l}_\alpha,\hat{l}_\beta]+[\hat{s}_\alpha,\hat{s}_\beta]=$$

$$=-\mathcal{E}_{\alpha\beta\gamma}\hat{l}_\gamma-\mathcal{E}_{\alpha\beta\gamma}\hat{s}_\gamma=-\mathcal{E}_{\alpha\beta\gamma}(\hat{l}_\gamma+\hat{s}_\gamma)=-\mathcal{E}_{\alpha\beta\gamma}\hat{j}_\gamma. \tag{47,5}$$

ამასთან, ჩვენ გავითვალისწინეთ, რომ $[\hat{l}_\alpha.\ \hat{s}_\beta]$ პუასონის ფრჩხილები ნულის ტოლია, რადგან $\hat{l}_\alpha$ ოპერატორები კოორდინატებზე მოქმედებენ, $\hat{s}_\beta$ კი, როგორც აღვნიშნეთ, კოორდინატებზე დამოკიდებული არ არის. უშუალო შეტანით და პუასონის ფრჩხილების თვისებების გათვალისწინებით ასევე ადვილად ვაჩვენებთ (47,4)-ის მეორე ფორმულის სამართლიანობასაც.

ჩვენ ვხედავთ, რომ ისევე როგორც იმპულსის მომენტის შემთხვევაში, სპინისა და სრული მომენტისათვისაც ერთდროულად და ზუსტად გასაზომ სიდიდეებს წარმოადგენენ მომენტის კვადრატი და მისი ერთ-ერთი პროექცია.

ნაწილაკთა სისტემის განხილვის დროს ჩვენ დავეჭირდება სხვა ტიპის მომენტების შემოღებაც. ასე მაგალითად, თუ სისტემა შედგება n ნაწილაკისაგან, მაშინ ჩვენ შეგვიძლია შემოვიტანოთ სისტემის ორბიტალური მომენტი, რომელიც წარმოადგენს ყველა ნაწილაკის მომენტების ჯამს

$$\mathbf{L}=\sum_{i=1}^{n}\mathbf{l}_i. \tag{47,6}$$

როცა ნაწილაკებს აქვთ სპინი, მაშინ შეგვიძლია შემოვიღოთ სისტემის სპინი

$$\mathbf{S}=\sum_{i=1}^{n}\mathbf{S}_i. \tag{47,7}$$

და ბოლოს, შეგვიძლია შემოვიღოთ სისტემის სრული მომენტიც

$$J=\mathbf{L}+\mathbf{S}=\sum_{i=1}^{n}\mathbf{j}_i; \tag{47,8}$$

სადაც $\mathbf{j}_i$ არის i-ური ნ:წილაკის სრული მომენტი.

აგვილი საჩვენებელია, რომ როგორც **L**-ს, ისე **S**-სა და **J**-ს ზუსტად იგივე კომუტაციის თვისებები აქვთ, როგორიც ჰქონდა ზემოთ განხილულ მომენტებს, კერძოდ, ორბიტალურ მომენტს. ამიტომ ამ თავში ჩვენ ცალკე აღარ გამოვყოფთ რომელიმე მომენტს, რამდენადაც ყველა თვისება, რომელსაც შევისწავლით ერთი რომელიმე მომენტის შემთხვევაში, გავრცელდება ყველა სხვა მომენტზედაც. ამის გამო შემდგომში ჩვენ მომენტს ვუწოდებთ ისეთი სამი A_x, A_y, A_z სიდიდის ერთობლიობას, რომელთა შესაბამისი ოპერატორები აკმაყოფილებენ კომუტაციის შემდეგ თვისებას:

$$[\hat{A}_\alpha,\ \hat{A}_\beta] = -\mathcal{E}_{\alpha\beta\gamma}\hat{A}_\gamma, \tag{47,9}$$

ან გაშლილი სახით

$$[\hat{A}_x,\ \hat{A}_y] = -\hat{A}_z,\ [\hat{A}_y,\ \hat{A}_z] = -A_x,\ [\hat{A}_z, \hat{A}_x] = -A_y. \tag{47,10}$$

ადვილად ვაჩვენებთ, რომ $\hat{\mathbf{A}}^2 = \hat{A}_x^2 + \hat{A}_y^2 + \hat{A}_z^2$ ოპერატორი კომუტატორია თავის ნებისმიერ მდგენელთან. რადგან $\mathbf{A}^2 = \hat{A}_\alpha \hat{A}_\alpha$, სადაც α-თი იგულისხმება აჯამვა ერთიდან სამამდე, ამიტომ პუასონის ფრჩხილების თვისების ძალით

$$[\hat{A}_\alpha \hat{A}_\alpha,\ \hat{A}_\beta] = A_\alpha\ [\hat{A}_\alpha,\ \hat{A}_\beta] + [\hat{A}_\alpha,\ \hat{A}_\beta]\ \hat{A}_\alpha =$$
$$= -\mathcal{E}_{\alpha\beta\gamma} \hat{A}_\alpha \hat{A}_\gamma - \mathcal{E}_{\alpha\beta\gamma} \hat{A}_\gamma \hat{A}_\alpha. \tag{47,11}$$

ამ ტოლობაში იგულისხმება აჯამვა α და γ ინდექსებით. მეორე მხრივ, რადგან ორმაგ ჯამში შეგვიძლია α შევცვალოთ γ-თი და პირიქით, ამიტომ (47,11)-ის მარჯვენა მხარის მეორე წევრი ასე შეგვიძლია გარდავქმნათ:

$$\mathcal{E}_{\alpha\beta\gamma} \hat{A}_\gamma \hat{A}_\alpha = \mathcal{E}_{\gamma\beta\alpha} \hat{A}_\alpha \hat{A}_\gamma = -\mathcal{E}_{\alpha\beta\gamma} \hat{A}_\alpha \hat{A}_\gamma, \tag{47,12}$$

სადაც გამოვიყენეთ $\mathcal{E}_{\alpha\beta\gamma}$ ტენზორის ანტისიმეტრიულობის თვისება $\mathcal{E}_{\alpha\beta\gamma} = -\mathcal{E}_{\gamma\beta\alpha}$. (47,12) ტოლობის გათვალისწინებით მივიღებთ

$$[\hat{\mathbf{A}}^2,\ \hat{A}_z] = 0. \tag{47,13}$$

ე. ი. $\mathbf{A}^2$ და A_z ერთდროულად და ზუსტად იზომება. მივუთითოთ, რომ $\mathbf{A}$ ვექტორის ქვეშ შეგვიძლია ვიგულისხმოთ ნებისმიერი მომენტი, რომელთანაც კი შეიძლება საქმე გვქონდეს კვანტურ მექანიკაში. ისევე როგორც ორბიტალური მომენტი, $\mathbf{A}$ მომენტიც კვანტურ ვექტორს წარმოადგენს. გარდა ამისა, იგი იქნება აქსიალური ვექტორი, ე. ი. კოორდინატთა სისტემის ღერძების ინვერსიისას მისი კომპონენტები ნიშანს არ იცვლიან.

§ 48. მომენტის საკუთარი მნიშვნელობები და მატრიცული ელემენტები

ახლა ვიპოვოთ მომენტის საკუთარი მნიშვნელობები. განვიხილოთ $\mathbf{A}$ მომენტი. როგორც ვიცით, მისი მდგენელების ოპერატორებს აქვთ შემდეგი კომუტაციის თვისებები:

$$[\hat{A}_\alpha,\ \hat{A}_\beta] = -\mathcal{E}_{\alpha\beta\gamma} \hat{A}_\gamma, \tag{48,1}$$

$$[\hat{\mathbf{A}}^2,\ \hat{A}_z] = 0. \tag{48,2}$$

აქედან ჩანს, რომ $\mathbf{A}^2$ და A_z შეიძლება ერთდროულად და ზუსტად გაიზომოს. ვიპოვოთ ამ სიდიდეების საკუთარი მნიშვნელობები. საკუთარი მნიშვნელობების მოძებნა ხელსაყრელია მატრიცული სახით. მატრიცათა ენაზე $\mathbf{A}^2$ და A_z საკუთარი მნიშვნელობების მოძებნა ნიშნავს შესაბამისი მატრიცების დაყვანას დიაგონალურ სახეზე.

ჯერ ვიპოვოთ A_x, A_y, A_z ოპერატორების შესაბამისი მატრიცები იმ წარმოდგენაში, რომელშიაც A_z დიაგონალურია, ე. ი. როცა

$$\langle m' | \hat{A}_z | m \rangle = m \hbar \delta_{mm'}, \tag{48,3}$$

სადაც m რაღაც რიცხვია, რომლის შესაძლო მნიშვნელობები უნდა ვიპოვოთ.

(48,1) ფორმულა დავწეროთ გაშლილი სახით:

$$\hat{A}_x\hat{A}_y-\hat{A}_y\hat{A}_x=i\hbar\hat{A}_z, \tag{48,4}$$

$$\hat{A}_z\hat{A}_x-\hat{A}_x\hat{A}_z=i\hbar\hat{A}_y, \tag{48,5}$$

$$\hat{A}_y\hat{A}_z-\hat{A}_z\hat{A}_y=i\hbar\hat{A}_x. \tag{48,6}$$

განვიხილოთ (48,6) ტოლობის მატრიცული ელემენტი

$$\langle m'|\hat{A}_y\hat{A}_z-\hat{A}_z\hat{A}_y|m\rangle=i\hbar\langle m'|\hat{A}_x|m\rangle. \tag{48,7}$$

თუ გავიხსენებთ მატრიცათა გამრავლების წესს, მივიღებთ:

$$\sum_{m''}\langle m'|\hat{A}_y|m''\rangle\langle m''|\hat{A}_z|m\rangle-\sum_{m''}\langle m'|\hat{A}_z|m''\rangle\langle m''|\hat{A}_y|m\rangle=$$

$$=i\hbar\langle m'|\hat{A}_x|m\rangle; \tag{48,8}$$

რადგან A_z დიაგონალური მატრიცაა, ამიტომ (48,3) ფორმულის თანახმად შეგვიძლია დავწეროთ

$$m\langle m'|\hat{A}_y|m\rangle-m'\langle m'|\hat{A}_y|m\rangle=i\langle m'|\hat{A}_x|m\rangle, \tag{48,9}$$

საიდანაც

$$i\frac{\langle m'|\hat{A}_x|m\rangle}{\langle m'|A_y|m\rangle}=m-m'. \tag{48,10}$$

სრულიად ანალოგიურად, თუ განვიხილავთ (48,5) ტოლობის მატრიცულ ელემენტს

$$\sum_{m''}\langle m'|\hat{A}_z|m''\rangle\langle m''|\hat{A}_x|m\rangle-\sum_{m''}\langle m'|\hat{A}_x|m''\rangle\langle m''|\hat{A}_z|m\rangle=$$

$$=i\hbar\langle m'|\hat{A}_y|m\rangle, \tag{48,11}$$

ადვილად მივიღებთ:

$$i\frac{\langle m'|\hat{A}_y|m\rangle}{\langle m'|A_x|m\rangle}=m'-m; \tag{48,12}$$

როცა A_y და A_x მატრიცული ელემენტები ნულს არ უდრიან, მაშინ (48,10) და (48,12) ტოლობებიდან გვექნება

$$(m'-m)^2=1, \tag{48,13}$$

საიდანაც

$$m'=m\pm1; \tag{48,14}$$

ამგვარად, როცა A_z მატრიცა დიაგონალურია, A_x და A_y მატრიცებს ნულისაგან განსხვავებული აქვთ მხოლოდ დიაგონალურის უშუალო მეზობელი ელემენტები; მატრიცული ელემენტები, რომლებიც (48,14) პირობას არ აკმაყოფილებენ, ყველა ნულის ტოლი იქნება. (48,10) და (48,12) ფორმულებიდან (48,14)-ის გათვალისწინებით შეგვიძლია დავწეროთ:

$$\langle m\pm1|\hat{A}_x|m\rangle=\pm i\langle m\pm1|\hat{A}_y|m\rangle. \tag{48,15}$$

ამ ტოლობიდან ჩანს, რომ თუ, მაგალითად, $\hat{A}_x$ ნამდვილია, მაშინ $\hat{A}_y$ წარმო-

სახვითია და პირიქით. რადგან $\hat{A}_\alpha$ ერმიტული ოპერატორებია, ამიტომ შესაბამისი მატრიცებიც ერმიტულები იქნება. შევიხსენებთ და შემდგომში ჩავთვალოთ, რომ A_x ნამდვილი მატრიცაა. მაშინ ჩვენ გვექნება:

$$\langle m\pm1|\hat{A}_x|m\rangle = \langle m|\hat{A}_x|m\pm1\rangle, \tag{48,16}$$

$$\langle m\pm1|\hat{A}_y|m\rangle = -\langle m|\hat{A}_y|m\pm1\rangle. \tag{48,17}$$

დაბოლოს ავიღოთ (48,4) ტოლობის დიაგონალური მატრიცული ელემენტიც:

$$\sum_{m''}\langle m|\hat{A}_x|m''\rangle\langle m''|\hat{A}_y|m\rangle - \sum_{m''}\langle m|\hat{A}_y|m''\rangle\langle m''|\hat{A}_x|m\rangle =$$

$$= i\hbar\langle m|\hat{A}_z|m\rangle. \tag{48,18}$$

ამ ჯამებში, (48,14) პირობის თანახმად, ნულისაგან განსხვავებული იქნება ორ-ორი წევრი, რომლებიც შეესაბამებიან პირობას $m''=m+1$ და $m''=m-1$, ამიტომ გვექნება

$$\langle m|\hat{A}_x|m+1\rangle\langle m+1|\hat{A}_y|m\rangle + \langle m|\hat{A}_x|m-1\rangle\langle m-1|\hat{A}_y|m\rangle -$$
$$-\langle m|\hat{A}_y|m+1\rangle\langle m+1|A_x|m\rangle -$$
$$-\langle m|\hat{A}_y|m-1\rangle\langle m-1|A_x|m\rangle = i\hbar^2 m. \tag{48,19}$$

ან, თუ გაეითვალისწინებთ (48,16) და (48,17) თვისებებს, შეგვიძლია დავწეროთ:

$$\langle m-1|\hat{A}_x|m\rangle^2 - \langle m+1|\hat{A}_x|m\rangle^2 = \frac{m}{2}\hbar^2. \tag{48,20}$$

ამ ტოლობის დაკმაყოფილება მაშინ შეიძლება, როცა m რიცხვი შემოსაზღვრულია; წინააღმდეგ შემთხვევაში ზოგიერთი არსებითად დადებითი $\langle m\pm1|\hat{A}_x|m\rangle^2$ სიდიდეები უარყოფითი გამოვიდოდა. m-ის ეს მაქსიმალური მნიშვნელობა აღვნიშნოთ a-თი. მაშინ $m\geqslant a$-თვის ყველა $\langle m+1|\hat{A}_x|m\rangle = 0$ და (48,20) ტოლობიდან შეგვიძლია განვსაზღვროთ $\hat{A}_x$-ის მატრიცული ელემენტები. მართლაც, აშკარაა, რომ (48,20) ტოლობას აკმაყოფილებს შემდეგი გამოსახულება:

$$\langle m+1|\hat{A}_x|m\rangle = \langle m|\hat{A}_x|m+1\rangle = \frac{\hbar}{2}\sqrt{(a-m)(a+m+1)}. \tag{48,21}$$

$\langle m-1|A_x|m\rangle$ ელემენტის მისაღებად საკმარისია (48,21)-ში m შევცვალოთ $(m-1)$-ით. ამასთან, $\langle -a-1|\hat{A}_x|-a\rangle$ ელემენტი ნულის ტოლი იქნება. A_y-ის მატრიცული ელემენტების გამოხატულებას მივიღებთ (48,15)-ის გამოყენებით. ასე რომ, ჩვენ გვაქვს მეტად მნიშვნელოვანი ფორმულები:

$$\langle m+1|\hat{A}_x|m\rangle = \langle m|\hat{A}_x|m+1\rangle = \frac{\hbar}{2}\sqrt{(a-m)(a+m+1)}, \tag{48,22}$$

$$-\langle m+1|\hat{A}_y|m\rangle = \langle m|\hat{A}_y|m+1\rangle = \frac{i\hbar}{2}\sqrt{(a-m)(a+m+1)}, \tag{48,23}$$

$$\langle m-1|\hat{A}_x|m\rangle = \langle m|\hat{A}_x|m-1\rangle = \frac{\hbar}{2}\sqrt{(a+m)(a-m+1)}, \tag{48,24}$$

$$\langle m-1|\hat{A}_y|m\rangle = -\langle m|\hat{A}_y|m-1\rangle = \frac{i\hbar}{2}\sqrt{(a+m)(a-m+1)}, \qquad (48,25)$$

$$\langle m|\hat{A}_z|m\rangle = m\hbar; \quad -a \leqslant m \leqslant +a \qquad (48,26)$$

აშკარაა, რომ ამ მატრიცების რანგი არის $(2a+1)$. მაშასადამე, მომენტის შესაბამის მატრიცას ექნება შემდეგი სახე:

$$\begin{pmatrix} A_{a,a} & A_{a,a-1} \cdots\cdots A_{a,-a} \\ A_{a-1,a} & A_{a-1,a-1} \cdots A_{a-1,-a} \\ \vdots & \vdots \\ A_{-a,a} & A_{-a,a-1} \cdots A_{-a,-a} \end{pmatrix} \qquad (48,27)$$

მომენტის მატრიცული ელემენტების მოძებნის დროს ჩვენ არ მოგვეთხოვია, რომ m იყოს მთელი რიცხვი, ამიტომ ზოგიერთი მომენტისათვის, მაგალითად სპინისათვის, შეიძლება აღმოჩნდეს, რომ m იღებს კენტი რიცხვის ნახევრის ჯერად მნიშვნელობებსაც. ამ შემთხვევაში მატრიცული ელემენტები უნდა გადავნომროთ წილადი რიცხვებით. ასე მაგალითად, როცა $a=1/2$, მაშინ $m=\pm 1/2$ და მატრიცას ექნება სახე

$$\begin{pmatrix} A_{1/2\,1/2} & A_{1/2-1/2} \\ A_{-1/2\,1/2} & A_{-1/2-1/2} \end{pmatrix}. \qquad (48,28)$$

აღვნიშნოთ, რომ (48,27) მატრიცაში A_x და A_y-ისათვის დიაგონალური მატრიცული ელემენტები ნულის ტოლია, მაშინ, როცა A_z-ს ნულისაგან განსხვავებული ექნება მხოლოდ დიაგონალური ელემენტები. სახელდობრ, როგორც დავამტკიცეთ, ნულისაგან განსხვავებული დიაგონალური ელემენტები ტოლია:

$$a\hbar,\ (a-1)\hbar,\ (a-2)\hbar, \ldots -(a-2)\hbar, -(a-1)\hbar, -a\hbar. \qquad (48,29)$$

ამასთან, როცა a მთელია, A_z ნულოვან მნიშვნელობასაც ღებულობს. როცა a კენტი რიცხვის ნახევარია, მაშინ შესაბამისი მომენტის z-პროექციას ნულოვანი საკუთარი მნიშვნელობა არა აქვს.

ახლა ვიპოვოთ მომენტის კვადრატის საკუთარი მნიშვნელობები. ამისათვის ვიპოვოთ $\mathbf{A}^2$ მატრიცის დიაგონალური ელემენტები. რადგან $\mathbf{A}^2 = A_x^2 + A_y^2 + A_z^2$, ამიტომ

$$(\mathbf{A}^2)_{mm} = (A_x A_x)_{mm} + (A_y A_y)_{mm} + (A_z A_z)_{mm}. \qquad (48,30)$$

გამოვიყენოთ მატრიცათა გამრავლების წესი, გავითვალისწინოთ, რომ A_x დიაგონალური მატრიცაა, ხოლო A_x და A_y-ს ნულისაგან განსხვავებული აქვთ მხოლოდ დიაგონალის მეზობელი ელემენტები. (48,22)—(48,26) ფორმულების გამოყენებით, მარტივი გარდაქმნების შემდეგ, მივიღებთ

$$(\mathbf{A}^2)_{mm} = \hbar^2 a(a+1). \qquad (48,31)$$

მაშასადამე, მომენტის კვადრატიც იკვანტება. a-ს უწოდებენ მომენტის კვანტურ რიცხვს; ცხადია, რომ $a = m_{max}$. m-ს, რომელიც ზემოთ შემოვიღეთ, უწოდებენ მაგნიტურ კვანტურ რიცხვს. ჩვენ ვხედავთ, რომ როგორც მომენტის პროექციების, ისე კვადრატის მატრიცები დიაგონალურია a კვანტური რიცხვის მიმართ.

მომენტთა თეორიაში ხშირად ნაცვლად A_x, A_y, A_z მდგენელებისა ხელსაყრელია შემდეგი სიდიდეების განხილვა:

$$A^+ = A_x + iA_y, \quad A^- = A_x - iA_y, \quad A_z = A_z. \qquad (48,32)$$

ამ ოპერატორების საშუალებით ადვილად გამოვხატავთ $(\mathbf{A}, \mathbf{B})$ სკალარულ ნამრავლს

$$(\mathbf{A}, \mathbf{B}) = \frac{1}{2}(A^+B^- + A^-B^+) + A_zB_z, \tag{48,33}$$

რომლიდანაც კერძო შემთხვევაში ვიპოვით მომენტის კვადრატს

$$\mathbf{A}^2 = \frac{1}{2}(A^+A^- + A^-A^+) + A_z^2. \tag{48,34}$$

ჩვენს მიერ გამოყვანილი (48,22)—(48,26) ფორმულებიდან ადვილად ვიპოვით (48,32) სიდიდეების მატრიცულ ელემენტებს. სახელდობრ,

$$\langle am \pm 1 | \hat{A}^{\pm} | am \rangle = \hbar [(a \mp m)(a \pm m + 1)]^{1/2},$$
$$\langle am | \hat{A}_z | am \rangle = \hbar m. \tag{48,35}$$

ამასთან, ამ მატრიცულ ელემენტებში მივუთითეთ ის გარემოება, რომ ისინი დიაგონალურებია a-კვანტური რიცხვის მიმართ. მომენტის კვადრატისა და g-პროექციის საერთო საკუთარი ფუნქცია აღვნიშნოთ χ_{a,m_a}-თი, მაშინ (48,35)-დან ნათელია, რომ

$$\hat{A}^{\pm}\chi_{a,m_a} = \hbar [(a \mp m)(a \pm m_a + 1)]^{1/2}\chi_{a,m_a \pm 1}, \tag{48,36}$$

$$\hat{A}_z\chi_{a,m_a} = m\hbar\chi_{a,m_a}, \tag{48,37}$$

$$\hat{\mathbf{A}}^2\chi_{a,m_a} = \hbar^2 a(a+1)\chi_{a,m_a}, \tag{48,38}$$

$$\hat{A}^+\chi_{a,a} = 0, \quad A^-\chi_{a-a} = 0, \quad -a \leqslant m_a \leqslant +a. \tag{48,39}$$

როცა $\mathbf{A}$ მომენტი ემთხვევა იმპულსის $\hat{\mathbf{l}}$ მომენტს, მაშინ χ_{a,m_a} საკუთარი ფუნქცია ემთხვევა სფერულ $Y_{lm_l}(\theta,\varphi)$ ფუნქციას, სადაც $a=l$ აზიმუტალური კვანტური რიცხვია, ხოლო $-l \leqslant m_l \leqslant l$ წარმოადგენს მაგნიტურ კვანტურ რიცხვს.

მაშასადამე, ორბიტალური მომენტისათვის გვექნება ფორმულები

$$(\hat{l}_x \pm i\hat{l}_y)Y_{lm_l}(\theta,\varphi) = \hbar[(l \mp m_l)(l \pm m_l + 1)]^{1/2}Y_{l,m_l \pm 1}(\theta,\varphi), \tag{48,40}$$

$$\hat{l}_zY_{lm_l}(\theta,\varphi) = m\hbar Y_{lm_l}(\theta,\varphi), \tag{48,41}$$

$$\hat{\mathbf{l}}^2Y_{lm_l}(\theta,\varphi) = \hbar^2 l(l+1)\,Y_{lm_l}(\theta,\varphi). \tag{48,42}$$

როცა $\mathbf{A}$ მომენტი ემთხვევა სპინს $A=\mathbf{s}$, მაშინ χ_{s,m_s} სპინურ ფუნქციას უწოდებენ. კერძოდ, როცა ნაწილაკის სპინი $a=s={}^1/_2$ გვექნება ორი ფუნქცია: $\chi_{{}^1/_2,\,{}^1/_2}$ და $\chi_{{}^1/_2,\,-{}^1/_2}$. ამ ფუნქციებს მეტად მარტივი შინაარსი აქვთ. $\chi_{{}^1/_2,\,{}^1/_2}$ მხოლოდ და მხოლოდ იმას მიუთითებს, რომ სპინის g-პროექცია დადებითი მიმართულებითაა ორიენტირებული, $\chi_{{}^1/_2,\,-{}^1/_2}$—კი მის საწინააღმდეგოდ. ეს ფუნქციები შეგვიძლია გამოვხატოთ შემდეგი მეორე რანგის ერთსვეტიანი მატრიცებით:

$$\chi_{{}^1/_2,\,{}^1/_2} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \qquad \chi_{{}^1/_2,\,-{}^1/_2} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}; \tag{48,43}$$

ამასთან, პირველ ფუნქციას, რომელიც შეესაბამება სპინის მიმართულებას g-ის გასწვრივ, α-თი აღნიშნავენ, ხოლო მეორე ფუნქციას, რომელიც უარყოფით პროექციას განსაზღვრავს, β-თი, ე. ი.

$$\alpha \equiv \chi_{1/2,1/2}, \quad \beta \equiv \chi_{1/2,-1/2}. \tag{48,44}$$

ადვილად ვიპოვით სპინის შესაბამის მატრიცებს, თუ გავიხსენებთ (48,28) და (48,22)—(48,26) ფორმულებს, რომლებშიაც შევიტანთ $a=1/2$ და $m=\pm 1/2$; გვექნება

$$s_x=\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix}, \quad s_y=\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}0&-i\\0&0\end{pmatrix}, \quad s_z=\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix} \tag{48,45}$$

ან

$$\mathbf{s}=\frac{\hbar}{2}\boldsymbol{\sigma}^0, \tag{48,46}$$

სადაც $\boldsymbol{\sigma}^0(\sigma_x^0, \sigma_y^0, \sigma_z^0)$ პაულის მატრიცებია:

$$\sigma_x^0=\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix}, \quad \sigma_y^0=\begin{pmatrix}0&-i\\i&0\end{pmatrix}, \quad \sigma_z^0=\begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix}. \tag{48,47}$$

ეს მატრიცები უნიტარულებიცაა და ერმიტულებიც; მათი კვადრატი ერთის ტოლია, საკუთარი მნიშვნელობები კი ± 1-ს უდრის.

მატრიცათა გადამრავლების წესის გამოყენებით ადვილად ვაჩვენებთ, რომ

$$\sigma_i^0\sigma_k^0+\sigma_k^0\sigma_i^0=2\delta_{ik}. \quad (i,k=1,\ 2,\ 3) \tag{48,48}$$

როცა $i\neq k$ ეს ტოლობა გვიჩვენებს, რომ $\sigma_i^0\sigma_k^0=-\sigma_k^0\sigma_i^0$, ე. ი. პაულის მატრიცები ერთმანეთთან ანტიკომუტატურებია, ხოლო, როცა $i=k$, მაშინ ამ მატრიცების კვადრატი ერთის ტოლია.

§ 49. მომენტთა შეკრების წესი

ვთქვათ მოცემულია ორი მომენტი **A** და **B**, მაშინ ორივესათვის გვექნება ფორმულები:

$$\mathbf{A}^2=\hbar^2a(a+1), \qquad \mathbf{B}^2=\hbar^2b(b+1), \tag{49,1}$$

$$A_z=m_a\hbar, \qquad B_z=\hbar m_b,$$

$$-a\leqslant m_a\leqslant +a, \qquad -b\leqslant m_b\leqslant +b.$$

შემოვიღოთ ამ ორი ოპერატორის ვექტორული ჯამი

$$\hat{\mathbf{C}}=\hat{\mathbf{A}}+\hat{\mathbf{B}}. \tag{49,2}$$

ვიგულისხმოთ, რომ $\hat{A}_\alpha$ და $\hat{B}_\alpha$ მდგენელები ურთიერთკომუტატურია. მაშინ, როგორც წინა პარაგრაფში ვაჩვენეთ, ისევე როგორც **A** და **B** ოპერატორები, $\hat{\mathbf{C}}$ ოპერატორიც აკმაყოფილებს კომუტაციის პირობას

$$[\hat{C}_\alpha, \hat{C}_\beta]=-\mathcal{E}_{\alpha\beta\gamma}\hat{C}_\gamma, \tag{49,3}$$

ამიტომ მისთვისაც სამართლიანი იქნება (48,35) ფორმულები. ამასთან, (49,2) ტოლობიდან ნათელია, რომ $\hat{C}_z$ მატრიცა დიაგონალური იქნება $\hat{A}_z$ და $\hat{B}_z$ მატრიცების დიაგონალობის გამო. მაშასადამე, **C**-მომენტისათვის გვექნება:

$$\mathbf{C}^2=\hbar^2c(c+1),$$

$$C_z=\hbar m_c \tag{49,4}$$

$$-c\leqslant m_c\leqslant +c,$$

სადაც c არის C- მომენტის კვანტური რიცხვი. ჩვენი მიზანია ვიპოვოთ ფორმულა, რომლის საშუალებითაც c კვანტურ რიცხვს ვიპოვით a და b კვანტური რიცხვების საშუალებით. ამ პროცედურას მომენტთა შეკრებას უწოდებენ. რადგან (49,2) ფორმულის თანახმად $\hat{C}_z=\hat{A}_z+\hat{B}_z$, ხოლო A_z და B_z საკუთარი მნიშვნელობები შესაბამისად ტოლია $m_a\hbar$ და $m_b\hbar$-ისა, ამიტომ მომენტის პროექციები ჩვეულებრივი ალგებრული წესით შეიკრიბება და მივიღებთ $C_z=m_c\hbar$, სადაც

$$m_c=m_a+m_b. \tag{49,5}$$

ამგვარად, m_c-ს ყველა შესაძლო მნიშვნელობების მისაღებად საჭიროა m_a და m_b რიცხვების ჯამის ყველა შესაძლო მნიშვნელობების აღება. გავითვალისწინოთ, რომ

$$m_a=a,\ a-1,\ a-2,\ldots-(a-1),-a, \tag{49,6}$$

$$m_b=b,\ b-1,\ b-2,\ldots-(b-1),-b. \tag{49,7}$$

ვთქვათ $b>a$ და (49,6)-ის თითოეული წევრი შევკრიბოთ (49,7)-ის ყველა წევრთან; მივიღებთ შემდეგ ცხრილს:

$a+b,\quad a+b-1,\ a+b-2,\cdots a-b+2,\ a-b+1$			$a-b$
$a+b-1,\ a+b-2,\ a+b-3,\ \cdots\ a-b+1$		$a-b$	$a-b-1$
$a+b-2,\ a+b-3,\quad a+b-4,\ \cdots\ a-b$		$a-b-1$	$a-b-2$
.	. .	.	
. .	.	.	
$b-a,\ b-a-1,\ b-a-2,\ldots\ldots$	$-(a+b)+2$	$-(a+b)+1$	$-(a+b)$

(49,8)

პროექციების ამ ცხრილში მოცემული მნიშვნელობებიდან შეგვიძლია აღვადგინოთ საჯამო c-მომენტის მნიშვნელობები. ასე მაგალითად, ცხრილის გარე შრიდან ჩანს, რომ c-ს შეიძლება ჰქონდეს $a+b$ მნიშვნელობა, რადგან $(a+b)$-დან $-(a+b)$-მდე პროექციები აქვს სწორედ $c=a+b$ მომენტს. მეორე შრიდან ჩანს, რომ $c=a+b-1$ და ა. შ. გვექნება

$$c=a+b,\ a+b-1,\ a+b-2,\ldots\ldots,\ b-a \tag{49,9}$$

როცა $a>b$, ანალოგიურად მივიღებთ ცხრილს, რომლის მიხედვით დავადგენთ, რომ

$$c=a+b,\ a+b-1,\ a+b-2,\ldots\ldots,\ a-b \tag{49,10}$$

ასე რომ, ზოგად შემთხვევაში, დამოუკიდებლად იმისა, თუ რომელია მეტი a და b-ს შორის, მივიღებთ

$$c=a+b,\ a+b-1,\ a+b-2,\ldots\ldots|a-b|. \tag{49,11}$$

მაშასადამე, საჯამო მომენტის კვანტური რიცხვი განისაზღვრება ფორმულით

$$|a-b|\leqslant c\leqslant a+b \tag{49,12}$$

რომელსაც უწოდებენ სამკუთხედის წესს და აღნიშნავენ $\Delta(a,\ b;\ c)$-თი.

განვიხილოთ მაგალითები. ვთქვათ, გვინდა შევკრიბოთ ორი ორბიტალური მომენტი $l_1=1$ (ეს იმას ნიშნავს, რომ მომენტის სიგრძეა $\hbar\sqrt{l_1(l_1+1)}=\sqrt{2}\,\hbar$ და $l_2=1$ (ე. ი. მომენტის სიგრძეა $\hbar\sqrt{l_2(l_2+1)}=\sqrt{2}\,\hbar$). სამკუთხედის წესის მიხედვით საჯამო მომენტის (რომლის სიგრძეა $\hbar\sqrt{l(l+1)}$ l კვანტურ რიცხვს ეწინა-

ბა მნიშვნელობები $0 \leqslant l \leqslant 2$, ე. ი. $l=0, 1, 2$. ვთქვათ, გვინდა შევკრიბოთ ორი სპინი, რომელთა კვანტური რიცხვებია $s_1 = {}^1/_2$ და $s_2 = {}^1/_2$. სამკუთხედის წესის თანახმად საჯამო სპინის S-კვანტური რიცხვი მიიღებს მნიშვნელობებს $S=0,1$.

ახლა განვიხილოთ ნახევარსპინიანი ნაწილაკი და ვიპოვოთ სრული

$$\mathbf{j} = \mathbf{l} + \mathbf{s}$$

მომენტის საკუთარი მნიშვნელობები, სადაც $\hat{\mathbf{l}}$ ორბიტალური მომენტია, ხოლო s-სპინი. რადგან j-საც იგივე კომუტაციის თვისებები აქვს, რაც l და $\hat{\mathbf{s}}$-ს, ამიტომ

$$\begin{aligned} \mathbf{j}^2 &= \hbar^2 j(j+1), \\ j_z &= m_j \hbar. \end{aligned} \tag{49,12}$$

სადაც $-j \leqslant m_j \leqslant +j$, ე. ი. m_j სულ ღებულობს $2j+1$ მნიშვნელობას. გამოვიყენოთ მომენტთა შეკრების სამკუთხედის წესი და ვიპოვოთ j კვანტური რიცხვის მნიშვნელობები l და s კვანტური რიცხვების საშუალებით. რადგან $s={}^1/_2$, ამიტომ j-ს ექნება ორად ორი მნიშვნელობა: $j = |l - {}^1/_2|$ და $j = l + {}^1/_2$. კერძო შემთხვევაში, როცა $l=0$, მაშინ $j={}^1/_2$. თუ სპინის მნიშვნელობა არის $S=1$, მაშინ სრული მომენტის კვანტური რიცხვი $|l-1| \leqslant j \leqslant l+1$, ე. ი. $j=l-1$, $j=l$, $j=l+1$. ამასთან, $S=1$ სპინის შესაბამისი მატრიცები ადვილად მიიღება (48,21) ფორმულიდან.

ორი მომენტის შეკრების წესი ადვილად განზოგადდება უფრო დიდი რიცხვის მომენტებზედაც. ასე მაგალითად, სამი მომენტის შესაკრებად ჩვენ შეგვიძლია ჯერ შევკრიბოთ ორი რომელიმე მომენტი, შემდეგ კი მიღებულ შედეგთან შევკრიბოთ მესამე. ვთქვათ, გვინდა შევკრიბოთ მომენტები: **A**, **B**, **C**. საჯამო მომენტი აღვნიშნოთ **D**-თი, მაშინ

$$\mathbf{D} = \mathbf{A} + \mathbf{B} + \mathbf{C}. \tag{49,13}$$

იგულისხმება, რომ A_α, B_α, C_α მდგენელები ურთიერთკომუტატურია. შესაბამისი კვანტური რიცხვები აღვნიშნოთ a, b, c-თი. საჯამო **D** მომენტის კვანტური რიცხვი კი d-თი. ზემოთქმულის თანახმად, ჩვენ ჯერ შეგვიძლია შევკრიბოთ **A** და **B** მომენტები; ამისათვის გამოვიყენოთ სამკუთხედის წესი $\Delta(a, b; \gamma)$. შემდეგ კი მიღებული შედეგი შევკრიბოთ c მომენტთან, ე. ი. გამოვიყენოთ სამკუთხედის წესი $\Delta(\gamma, c; d)$. განვიხილოთ მაგალითი. ვთქვათ გვინდა შევკრიბოთ სამი ორბიტალური მომენტი: $l_1=1$, $l_2=2$ და $l_3=3$. პირველი ორის შეკრებით მივიღებთ მნიშვნელობებს: $l_{12}=1, 2, 3$. ახლა თითოეული ეს მომენტი შევკრიბოთ l_3-თან. გვექნება: $l=2,3,4$; $l=1,2,3,4,5$; $l=0,1,2,3,4,5,6$, ე. ი. სრული მომენტის კვანტური რიცხვის მნიშვნელობები ყოფილა $l=0,1,2,3,4,5,6$.

ბოლოს მოვიყვანოთ ერთი მნიშვნელოვანი ფორმულაც. რადგან $\hat{\mathbf{C}} = \hat{\mathbf{A}} + \hat{\mathbf{B}}$, ამიტომ $(\mathbf{AB})$ სკალარული ნამრავლისათვის შეგვიძლია დავწეროთ

$$(\hat{\mathbf{A}}, \hat{\mathbf{B}}) = \frac{1}{2}\{\hat{\mathbf{C}}^2 - \hat{A}^2 - \hat{\mathbf{B}}^2\}, \tag{49,14}$$

საიდანაც $(\hat{\mathbf{A}}, \hat{\mathbf{B}})$-ს საკუთარი მნიშვნელობებისათვის გვექნება გამოსახულება

$$(\hat{\mathbf{A}}, \hat{\mathbf{B}}) = \frac{\hbar^2}{2}\{c(c+1) - a(a+1) - b(b+1)\}. \tag{49,15}$$

იგივე ფორმულა შეგვიძლია გამოვიყვანოთ (48,33) და (48,35) გამოსახულებების გამოყენებითაც.

§ 50. ორი მომენტის ჯამის კვადრატისა და პროექციის საკუთარი ფუნქციები. კლებშ-ჟორდანის კოეფიციენტები

განვიხილოთ ორი მომენტი **A** და **B**. ეს მომენტები შეიძლება ეკუთვნოდეს ერთსა და იმავე ნაწილაკს ან ორ სხვადასხვა ნაწილაკს. მთავარია, რომ ისინი ერთმანეთთან კომუტატური იყვნენ, ე. ი. შესრულებული იყოს პირობა $[\hat{A}_\alpha, B_\beta]=0$. შემოვიღოთ საჯამო მომენტი

$$\hat{\mathbf{C}}=\hat{\mathbf{A}}+\hat{\mathbf{B}}. \tag{50,1}$$

ჩვენი მიზანია ვიპოვოთ $\hat{\mathbf{C}}^2$ და $\hat{C}_z$ ოპერატორების საერთო საკუთარი ფუნქციები. $\hat{A}^2$, $\hat{A}_z$ ოპერატორების საერთო საკუთარი ფუნქცია აღვნიშნოთ χ_{am_a}-თი, ხოლო $\hat{\mathbf{B}}^2$, $\hat{\mathbf{B}}_z$-ისა χ_{bm_b}-თი. ანალოგიური ფუნქცია $\hat{\mathbf{C}}^2$, $\hat{\mathbf{C}}_z$ ოპერატორებისათვის აღვნიშნოთ, $\mathscr{Y}^{cm_c}_{ab}$, რომელშიაც მივუთითეთ, რომ საჯამო მომენტის c კვანტური რიცხვი მიიღება a და b კვანტური რიცხვების შეკრებით.

ცხადია, $\hat{C}_z=\hat{A}_z+\hat{B}_z$ ოპერატორს დააკმაყოფილებს საკუთარ ფუნქციათა ნამრავლი $\chi_{am_a}\chi_{bm_b}$, იგივე ნამრავლი $\hat{\mathbf{A}}^2$ და $\hat{\mathbf{B}}^2$ ოპერატორების საკუთარი ფუნქციაც არის, მაგრამ იგი არ არის საკუთარი ფუნქცია $(\hat{A}, \hat{B})$ სკალარული ნამრავლის; ამის გამო ცხადია $\chi_{am_a}\chi_{bm_b}$ არ იქნება საკუთარი ფუნქცია $\hat{\mathbf{C}}^2=\hat{A}^2+\hat{\mathbf{B}}^2+2(\hat{\mathbf{A}},\hat{\mathbf{B}})$ ოპერატორისა. ჩვენს მიზანს კი შეადგენს სწორედ ისეთი ფუნქციის მოძებნა, რომელიც ერთდროულად დააკმაყოფილებს ორივე ოპერატორის $\hat{\mathbf{C}}^2$ და $\hat{\mathbf{C}}_z$ საკუთარი ფუნქციებისა და საკუთარი მნიშვნელობების განტოლებას.

მართალია $\chi_{am_a}\chi_{bm_b}$ ნამრავლი არ არის $\hat{\mathbf{C}}^2$-ის საკუთარი ფუნქცია, მაგრამ საძიებელი $\mathscr{Y}^{cm_c}_{ab}$ ფუნქცია შეგვიძლია გავშალოთ ამ ნამრავლების მწკრივად

$$\mathscr{Y}^{cm_c}_{ab} = \sum_{m_a=-a}^{+a}\sum_{m_b=-b}^{+b}\langle abm_am_b|cm_c\rangle\chi_{am_a}\chi_{bm_b}. \tag{50,2}$$

მუდმივ რიცხვებს

$$\underline{\langle abm_am_b|cm_c\rangle} \tag{50,3}$$

ვიგნერის ვექტორული შეკრების კოეფიციენტებს, ან კლებშ-ჟორდანის კოეფიციენტებს უწოდებენ. ტალღური ფუნქციების ფაზური მამრავლი ისე შეგვიძლია შევარჩიოთ, რომ ეს კოეფიციენტები ნამდვილი რიცხვები იყოს. კლებშ-ჟორდანის კოეფიციენტი ნულის ტოლი იქნება, თუ $m_c\neq m_a+m_b$ და a, b, c კვანტური რიცხვები ერთმანეთთან შებმული არ არიან $\Delta(a, b; c)$ სამკუთხედის წესით. ამიტომ (50,2) ფორმულაში ფაქტიურად ერთმაგი ჯამი მონაწილეობს. ერთი ჯამი ეკვივალენტურია $m_a=m_c-m_b$ ან $m_b=m_c-m_a$ პირობის. ნათელია, რომ (50,2) ფუნქცია საკუთარი ფუნქციაა $\hat{\mathbf{A}}^2$, $\hat{A}_z$ და $\hat{\mathbf{B}}^2$, $\hat{\mathbf{B}}_z$, ასევე $\hat{\mathbf{C}}_z$ ოპერატორებისა; კლებშ-ჟორდანის კოეფიციენტები ისე შეგვიძლია შევარჩიოთ, რომ ეს გამოსახულება საკუთარი ფუნქცია იყოს $\hat{\mathbf{C}}^2$ ოპერატორისაც.

მდგომარეობის კვანტური აღწერის მიხედვით კლებშ-ჟორდანის კოეფიციენტის კვადრატი წარმოადგენს a და b მომენტებით განსაზღვრული საჯამო c მომენტის მდგომარეობის განხორციელების ალბათობას.

კლებშ-ჟორდანის კოეფიციენტების გამოსათვლელი ფორმულა მომენტის კვანტური რიცხვების სხვადასხვა მნიშვნელობებისათვის ჯგუფთა თეორიაზე დაყრდნობით გამოყვანილი იყო ე. ვიგნერის მიერ. ამ ფორმულას აქვს შემდეგი სახე:

$$\langle abm_a m_b | cm_c\rangle = \delta_{m_c,\ m_a+m_b}\cdot$$

$$\left[\frac{(c+a-b)!\,(c-a+b)!\,(a+b-c)!\,(c+m_a)!\,(c-m_c)!\,(2c+1)}{(c+a+b+1)!\,(a-m_a)!\,(b-m_b)!\,(a+m_a)!\,(b+m_b)!}\right]^{1/2} \tag{50,4}$$

$$\sum_k \frac{(-1)^{k+b+m_b}(c+b+m_a-k)!\,(a-m_a+k)!}{k!\,(c+m_c-k)!\,(c-a+b-k)!\,(k+a-b-m_c)!}$$

ჯამი აიღება k-ს ისეთი მნიშვნელობებით, სანამ ფაქტორიალი უარყოფითი გახდებოდეს, ამასთან $0!=1$.

(50,4) ფორმულის თანახმად კლებშ-ჟორდანის კოეფიციენტებს ექნებათ სიმეტრიის შემდეგი თვისებები:

$$\langle abm_a m_b | cm_c\rangle = \langle ba-m_b-m_a | c-m_c\rangle, \tag{50,5}$$

$$= (-1)^{c-a-b}\langle bam_b m_a | cm_c\rangle, \tag{50,6}$$

$$= (-1)^{a+b-c}\langle ab-m_a-m_b | c-m_c\rangle, \tag{50,7}$$

$$= (-1)^{a-m_a}\left(\frac{2c+1}{2b+1}\right)^{1/2}\langle acm_a-m_c | b-m_b\rangle, \tag{50,8}$$

$$= (-1)^{b+m_b}\left(\frac{2c+1}{2a+1}\right)^{1/2}\langle cb-m_c m_b | a-m_a\rangle. \tag{50,9}$$

$\mathscr{Y}_{ab}^{cm_c}$ ფუნქციები ერმიტული ოპერატორის საკუთარი ფუნქციებია, ამიტომ ისინი ორთო-ნორმირებული იქნებიან, ე. ი.

$$\langle \mathscr{Y}_{ab}^{c'm'_c} \mid \mathscr{Y}_{ab}^{cm_c}\rangle = \delta_{cc'}\delta_{m_c m'_c}. \tag{50,10}$$

ამ გამოსახულებაში შევიტანოთ (50,2) ფუნქცია; გვექნება

$$\sum_{m_a m_b}\sum_{m'_a m'_b}\langle abm_a m_b | cm_c\rangle\langle abm'_a m'_b \mid c'm'_c\rangle. \tag{50,11}$$

$$\langle \chi_{am_a} | \chi_{am'_a}\rangle\langle \chi_{bm_b} | \chi_{bm'_b}\rangle = \delta_{cc'}\delta_{m_c m'_c}.$$

რადგან χ_{am_a} და χ_{bm_b} ფუნქციებიც ორთო-ნორმირებული ფუნქციებია, ამიტომ საბოლოოდ მივიღებთ

$$\sum_{m_a=-a}^{+a}\sum_{m_b=-b}^{+b}\langle abm_a m_b | cm_c\rangle\langle abm_a m_b | c'm'_c\rangle = \delta_{cc'}\delta_{m_c m'_c}. \tag{50,12}$$

ამ გამოსახულებას უწოდებენ კლებშ-ჟორდანის კოეფიციენტების ორთო-ნორმირების პირობას. ნორმირების ეს პირობა მიუთითებს (50,2) გარდაქმნის უნიტარულ ხასიათზე. რამდენადაც კლებშ-ჟორდანის კოეფიციენტები ნამდვილი რიცხვებია, ამიტომ (50,2)-ის შებრუნებული გარდაქმნა ხორციელდება იგივე გარდაქმნის ფუნქციებით. გავამრავლოთ (50,2) ფორმულა $\langle abm_a m_b | cm_c\rangle$ კოეფიციენტზე და ავკამოთ c და m_c-თი; გვექნება

$$\sum_{c=|a-b|}^{a+b}\sum_{m_c=-c}^{+c}\langle abm_am_b|cm_c\rangle\mathcal{Y}_{ab}^{cm_c}=$$

$$\sum_{cm_c}\sum_{m_am_b}\langle abm_am_b|cm_c\rangle\langle abm_a'm_b'|cm_c\rangle\chi_{am_a'}\chi_{bm_b'}. \tag{50,13}$$

თუ მოვითხოვთ, რომ ადგილი აქვს შემდეგ ორთო-ნორმირების პირობასაც:

$$\sum_{c=|a-b|}^{a+b}\sum_{m_c=-c}^{+c}\langle abm_am_b|cm_c\rangle\langle abm_a'm_b'|cm_c\rangle=\delta_{m_am_a'}\delta_{m_bm_b'}, \tag{50,14}$$

მაშინ (50,13)-დან მივიღებთ შებრუნებული გაშლის შემდეგ ფორმულას:

$$\chi_{am_a}\chi_{bm_b}=\sum_{c=|a-b|}^{a+b}\sum_{m_c=-c}^{+c}\langle abm_am_b|cm_c\rangle\mathcal{Y}_{ab}^{cm_c} \tag{50,15}$$

აღვნიშნოთ, რომ (50,8) და (50,9) თვისებების გამოყენებით, კლებშ-ჟორდანის კოეფიციენტებისათვის შეგვიძლია დავწეროთ კიდევ ორი ასეთი პირობა:

$$\sum_{m_am_c}\langle abm_am_b|cm_c\rangle\langle ab'm_am_b'|cm_c\rangle=\frac{2c+1}{2b'+1}\delta_{bb'}\delta_{m_bm_b'}, \tag{50,16}$$

$$\sum_{m_bm_c}\langle abm_am_b|cm_c\rangle\langle a'bm_a'm_b|cm_c\rangle=\frac{2c+1}{2a'+1}\delta_{aa'}\delta_{m_am_a'}, \tag{50,17}$$

ამ უკანასკნელიდან კერძო შემთხვევაში მიიღება მნიშვნელოვანი შედეგი

$$\sum_{m_c}|\langle ab0m_c|cm_c\rangle|^2=\frac{2c+1}{2a+1}. \tag{50,18}$$

ადვილი საჩვენებელია, რომ კერძო შემთხვევებში:

$$\langle a0m_a0|am_a\rangle=1, \tag{50,19}$$

$$\langle ab\,ab|a+b\;\;a+b\rangle=1, \tag{50,20}$$

ასევე

$$\langle abm-m|00\rangle=(-1)^{b-m}\frac{\delta_{ab}}{\sqrt{2b+1}}. \tag{50,21}$$

როცა a და b ღებულობს მთელ მნიშვნელობებს, მაშინ (50,7) თვისების ძალით $\langle ab00|c0\rangle=0$, თუ $a+b+c$ რიცხვი ლუწი არ არის. როცა $a+b+c\equiv 2n$ ლუწი რიცხვია, მაშინ

$$\langle ab00|c0\rangle=(-1)^{n+c}(2c+{}^1/_2)^{1/2}\frac{n!}{(n-a)!(n-b)!\,(n-c)!}\cdot \tag{50,22}$$

$$\left[\frac{(a+b-c)!\,(a-b+c)!\,(b-a+c)!}{(2n+1)!}\right]^{1/2},$$

ვიპოვოთ $\langle abm_am_b|cm_c\rangle$ კლებშ-ჟორდანის კოეფიციენტის ცხადი სახე, როცა $b={}^1/_2$. ამ შემთხვევაში, მომენტთა შეკრების წესის თანახმად $c=|b-{}^1/_2|$ და $c=b+{}^1/_2$; გვექნება შემდეგი ფორმულები:

$$\langle a^1/_2 m_c — ^1/_2 \, ^1/_2 | a \pm ^1/_2 m_c \rangle = \pm \left[\frac{a \pm m_c + ^1/_2}{2a+1} \right]^{1/2} \tag{50,23}$$

$$\langle a^1/_2 m_c + ^1/_2 — ^1/_2 | a \pm ^1/_2 m_c \rangle = \left[\frac{a \mp m_c + ^1/_2}{2a+1} \right]^{1/2}. \tag{50,24}$$

კლებშ-ჟორდანის კოეფიციენტების მნიშვნელობები სხვადასხვა კერძო შემთხვევებში შეიძლება ვიპოვოთ სპეციალური ცხრილებიდან.

მნიშვნელოვანია (50,2) გამოსახულების იმ კერძო შემთხვევის განხილვა, როცა a გამოხატავს ორბიტალური მომენტის l კვანტურ რიცხვს, ხოლო s იგივე ნაწილაკის—სპინურ კვანტურ რიცხვს. კერძოდ, დიდი პრაქტიკული მნიშვნელობის გამო განვიხილოთ $s = ^1/_2$ მომენტის შემთხვევა. მაშინ ცხადია, რომ $\mathscr{Y}_{ab}^{m_c}$ გამოხატავს $\mathbf{j} = \mathbf{l} + \mathbf{s}$ სრული მომენტის კვადრატისა და მისი z-პროექციის საკუთარ ფუნქციას; მას ექნება შემდეგი გამოხატულება:

$$\mathscr{Y}_{l^1/_2}^{jm_j} = \sum_{m_l=-l}^{+l} \sum_{m_s=-^1/_2}^{+^1/_2} \langle l^1/_2 m_l m_s | j m_j \rangle \, Y_{lm_l}(\theta, \varphi) \chi_{^1/_2 m_s} \tag{50,25}$$

სადაც $Y_{lm_l}(\theta, \varphi)$ ორბიტალური მომენტის კვადრატისა და მისი z-პროექციის საკუთარი ფუნქციაა, $\chi_{^1/_2 m_s}$ კი სპინურ ფუნქციას წარმოადგენს. (50,25) გამოსახულებაში ჯამი m_l-ით შეგვიძლია ამოვაგდოთ, თუ ყველგან m_l-ს შევცვლით $(m_j — m_s)$-ით; ამის შემდეგ ავიღოთ ჯამი m_s-ით და გავითვალისწინოთ (50,23) და (50,24) ფორმულები; გვექნება

$$\begin{aligned}
\mathscr{Y}_{l,^1/_2}^{l+^1/_2 m_j} &= \sqrt{\frac{l+m_j+^1/_2}{2l+1}} Y_{lm_j-^1/_2}(\theta,\varphi)\chi_{^1/_2,\,^1/_2} + \\
&+ \sqrt{\frac{l-m_j+^1/_2}{2l+1}} Y_{lm_j+^1/_2}(\theta,\varphi)\chi_{^1/_2,-^1/_2} \\
\mathscr{Y}_{l^1/_2}^{l-^1/_2 m_j} &= -\sqrt{\frac{l-m_j+^1/_2}{2l+1}} Y_{lm_j-^1/_2}(\theta,\varphi)\chi_{^1/_2,\,^1/_2} + \\
&+ \sqrt{\frac{l+m_j+^1/_2}{2l+1}} Y_{lm_j+^1/_2}(\theta,\varphi)\chi_{^1/_2,-^1/_2}.
\end{aligned} \tag{50,26}$$

ამ ფუნქციებს უწოდებენ სფერულ ფუნქციებს სპინით. რადგან (50,26) ფუნქციები $\hat{\mathbf{j}}^2$-ის საკუთარი ფუნქციებია და, ამავე დროს, წარმოადგენენ $\hat{\mathbf{l}}^2$ და $\hat{\mathbf{s}}^2$-ის საკუთარ ფუნქციებსაც. ამიტომ $\hat{\mathbf{j}}^2 = \hat{\mathbf{l}}^2 + \hat{\mathbf{s}}^2 + 2(\hat{\mathbf{l}}, \hat{\mathbf{s}})$ დამოკიდებულების თანახმად, ისინი საკუთარი ფუნქციები იქნება $(\hat{\mathbf{l}}, \hat{\mathbf{s}})$ ოპერატორისაც. სახელდობრ, თუ გავიხსენებთ $\hat{\mathbf{j}}^2$, $\hat{\mathbf{l}}^2$ და $\hat{\mathbf{s}}^2$ ოპერატორების საკუთარ მნიშვნელობებს, ადვილად ვიჩვენებთ, რომ

$$\begin{aligned}
(\hat{\mathbf{s}}, \hat{\mathbf{l}}) \mathscr{Y}_{l^1/_2}^{jm_j} &= \frac{\hbar^2}{2}(j - ^1/_2)\mathscr{Y}_{l^1/_2}^{jm_j}, \quad l = |j - ^1/_2| \\
(\hat{\mathbf{s}}, \hat{\mathbf{l}}) \mathscr{Y}_{l^1/_2}^{jm_j} &= -\frac{\hbar^2}{2}(j + ^3/_2)\mathscr{Y}_{l^1/_2}^{jm_j}; \quad l = j + ^1/_2
\end{aligned} \tag{50,27}$$

ახლა განვიხილოთ ორი ნახევარსპინიანი ნაწილაკი. ამ შემთხვევაში $a=b=1/2$ და სრულ სპინს ექნება ორი მნიშვნელობა $S=1$ და $S=0$. (50,23) ფორმულიდან შესაბამისი კლებშ-ჟორდანის კოეფიციენტებისათვის მივიღებთ

$$\left\langle \frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\pm\frac{1}{2}\pm\frac{1}{2}\ \middle|\ 1\pm 1\right\rangle = 1, \tag{50,28}$$

$$\left\langle \frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\pm\frac{1}{2}\mp\frac{1}{2}\ \middle|\ 10\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}, \quad \left\langle \frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\pm\frac{1}{2}\mp\frac{1}{2}\ \middle|\ 00\right\rangle = \pm\frac{1}{\sqrt{2}},$$

ხოლო (50,2)-დან გვექნება სპინური ფუნქციები:

$$\mathscr{Y}^{11}_{1/2\,1/2}(1,2)=\alpha(1)\alpha(2),$$

$$\mathscr{Y}^{1-1}_{1/2\,1/2}(1,2)=\beta(1)\beta(2),$$

$$\mathscr{Y}^{10}_{1/2\,1/2}(1,2)=\frac{1}{\sqrt{2}}\{\alpha(1)\beta(2)+\alpha(2)\beta(1)\}, \tag{50,29}$$

$$\mathscr{Y}^{00}_{1/2\,1/2}(1,2)=\frac{1}{\sqrt{2}}\{\alpha(1)\beta(2)-\alpha(2)\beta(1)\}.$$

ამასთან, არგუმენტში $i=1,2$ აღნიშნავს იმას, თუ რომელ ნაწილაკს ეკუთვნის სპინური ფუნქცია. მაგალითად, $\alpha(1)=\chi_{1/2\,1/2}(1)$ აღნიშნავს, რომ პირველი ნაწილაკის სპინის z-პროექცია მიმართულია z-ღერძის გასწვრივ, მაშინ, როცა $\beta(2)=\chi_{1/2-1/2}(2)$ მიუთითებს იმაზე, რომ მეორე ნაწილაკის სპინის z-პროექცია z-ღერძის საწინააღმდეგოდ არის მიმართული.

როგორც ვხედავთ, ორი ნახევარსპინიანი ნაწილაკის სისტემას ახასიათებს ოთხი სპინური ფუნქცია, რომელთაგან სრული სპინის $S=1$ მნიშვნელობას შეესაბამება სამი ფუნქცია, $S=0$-ს კი—ერთი.

სავარჯიშო მაგალითები

1. ვიპოვოთ სამი ნახევარსპინიანი ნაწილაკის სპინური ტალღური ფუნქციები.

ა მ ო ხ ს ნ ა: სამი ნაწილაკის სპინები აღვნიშნოთ s_1, s_2 და s_3-ით. პროექციები შესაბამისად m_1, m_2 და m_3-ით. ჯერ დავწეროთ სპინური ფუნქცია პირველი ორი ნაწილაკისა, რომელთა საერთო სპინი იქნება $S_{12}=s_1+s_2$:

$$\mathscr{Y}^{s_{12}m}_{s_1s_2}(1,2)=\sum_{m_1=-s_1}^{+s_1}\sum_{m_2=-s_2}^{+s_2}\langle s_1s_2m_1m_2\mid s_{12}m\rangle\chi_{s_1m_1}(1)\,\chi_{s_2m_2}(2). \tag{50,30}$$

ამის შემდეგ ადვილად დაიწერება სამი ნაწილაკის სპინური ფუნქცია $S=s_{12}+s_3=s_1+s_2+s_3$ სრული სპინით, გვექნება

$$\mathscr{Y}^{SM_S}_{s_{12}s_3}(1,2,3)=\sum_{m=-s_{12}}^{+s_{12}}\sum_{m_3=-s_3}^{+s_3}\langle s_{12}s_3mm_3\mid SM_S\rangle\,\mathscr{Y}^{s_{12}m}_{s_1s_2}(1,2)\chi_{s_3m_3}(3) \tag{50,31}$$

შევიტანოთ ამ გამოსახულებაში $\mathscr{Y}^{s_{12}m}$-ის მნიშვნელობა (50,30)-დან მივიღებთ

$$\mathscr{Y}^{SM_S}_{s_{12}s_3}(1,2,3)=\sum_{m=-s_{12}}^{+s_{12}}\sum_{m_1=-s_1}^{+s_1}\sum_{m_2=-s_2}^{s_2}\sum_{m_3=-s_3}^{+s_3}\langle s_1s_2m_1m_2\mid s_{12}m\rangle\cdot$$

$$(s_{12}s_3 m m_3 \mid SM_S)\chi_{s_1 m_1}(1)\,\chi_{s_2 m_2}(2)\chi_{s_3 m_3}(3) \qquad (50,32)$$

რადგან $S_{12}=0.1$, ამიტომ გვექნება 8 ფუნქცია: $\mathscr{Y}^{3/2}_{1^1/_2}{}^{M_3/_2}$, $\mathscr{Y}^{1/2}_{1^1/_2}{}^{M_1/_2}$, $\mathscr{Y}^{1/2}_{0^1/_2}{}^{M_1/_2}$. თუ გავითვალისწინებთ კლებშ-ჟორდანის კოეფიციენტების მნიშვნელობებს ამ ფუნქციებისათვის შეგვეძლია დავწეროთ;

$$\mathscr{Y}^{3/2\,3/2}_{1^1/_2}=\alpha(1)\,\alpha(2)\,\alpha(3).$$

$$\mathscr{Y}^{1/2\,-3/2}_{1^1/_2}=\beta(1)\,\beta(2)\,\beta(3),$$

$$\mathscr{Y}^{3/2\,1/2}_{1^1/_2}=\frac{1}{\sqrt{3}}\left\{\alpha(1)\alpha(2)\beta(3)+\alpha(1)\beta(2)\alpha(3)+\beta(1)\alpha(2)\alpha(3)\right\},$$

$$\mathscr{Y}^{3/2\,-1/2}_{1^1/_2}=\frac{1}{\sqrt{3}}\left\{\beta(1)\,\beta(2)\,\alpha(3)+\beta(1)\,\alpha(2)\,\beta(3)+\alpha(1)\,\beta(2)\,\beta(3)\right\}.$$

$$\mathscr{Y}^{1/2\,1/2}_{1^1/_2}=\frac{1}{\sqrt{6}}\left\{\alpha(3)\,\alpha(2)\,\beta(1)+\alpha(1)\,\beta(2)\,\alpha(3)-2\beta(3)\alpha(1)\alpha(2)\right\},$$

$$\mathscr{Y}^{1/2\,-1/2}_{1^1/_2}=\frac{1}{\sqrt{6}}\left\{\beta(3)\beta(2)\alpha(1)+\beta(1)\alpha(2)\beta(3)-2\alpha(3)\beta(1)\beta(2)\right\},$$

$$\mathscr{Y}^{1/2\,1/2}_{0^1/_2}=\frac{\alpha(3)}{\sqrt{2}}\left\{\alpha(1)\,\beta(2)-\beta(1)\,\alpha(2)\right\},$$

$$\mathscr{Y}^{1/2\,-1/2}_{0^1/_2}=\frac{\beta(3)}{\sqrt{2}}\left\{\beta(1)\,\alpha(2)-\alpha(1)\beta(2)\right\}.$$

ცხადია, შეგვეძლო ჯერ შეგვეკრიბა, მაგალითად s_2 და s_3 შემდეგ კი s_{23}-ისათვის დაგვემატებინა s_1 სპინი.

პირველი ოთხი ფუნქცია სიმეტრიულია ნებისმიერი არგუმენტის გადასმის მიმართ, მე-5 და მე-6 ფუნქციები სიმეტრიულია 1 და 2-ის გადასმის მიმართ, ბოლო ორი ფუნქცია კი ანტისიმეტრიულია 1 და 2-ის გადასმის მიმართ.

თავი VIII

შრედინგერის განტოლების ამოხსნა სხვადასხვა მარტივი ამოცანისათვის

ამ თავში შრედინგერის განტოლება ამოხსნილია ზოგიერთი მარტივი ამოცანისათვის. შესწავლილია საკითხი სხვადასხვა სკალაზე ნორმირებულ ტალღურ ფუნქციათა შორის კავშირისა. დეტალურად განხილულია თავისუფალი ნაწილაკის ამოცანა, სხვადასხვა ტიპის პოტენციალური ორმოები და ჯებირი. დაწვრილებითაა განხილული წრფივი ჰარმონიული და სივრცითი ანიზოტროპული ოსცილატორის თვისებები. ოსცილატორის ამოცანა შესწავლილია მატრიცული მეთოდითაც.

§ 51. ზოგადი შენიშვნები

გამოვიყენოთ შრედინგერის განტოლება ზოგიერთი ძირითადი ამოცანის ამოხსნისათვის. როდესაც მოცემული გვაქვს კონკრეტული ამოცანა, საჭიროა წინასწარ გავარკვიოთ, იცვლება თუ არა ამოცანის პირობები დროის მიხედვით. თუ ადგილი აქვს ამოცანის პირობების ცვლილებას დროის მიხედვით, მაშინ უნდა ამოვხსნათ შრედინგერის დროითი განტოლება

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta\psi + V(\mathbf{r}, t)\psi \qquad (51,1)$$

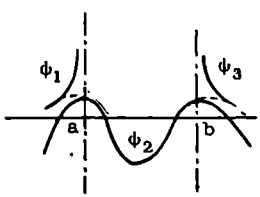
სათანადო საწყისი და სასაზღვრო პირობების გათვალისწინებით; ხოლო, როცა საქმე გვაქვს დროის მიხედვით უცვლელ პირობებთან, საჭიროა ამოიხსნას შრედინგერის სტაციონარულ მდგომარეობათა განტოლება

$$\Delta\psi + \frac{2\mu}{\hbar^2}[E - V(r)]\psi = 0, \qquad (51,2)$$

რომელიც კერძო შემთხვევაა (51,1) განტოლებისა.

შრედინგერის განტოლების ამოხსნის საკითხი დამოკიდებულია პოტენციალური ენერგიის სახეზე. ამ თავში განვიხილავთ მხოლოდ ისეთ ამოცანებს, როცა მოცემული პოტენციალური ენერგიისათვის შრედინგერის განტოლების ამოხსნა შესაძლებელია ზუსტად. კვანტურ მექანიკაში შრედინგერის განტოლების მხოლოდ ისეთი ამოხსნებია საინტერესო, რომლებიც გარკვეულ სასაზღვრო პირობებს აკმაყოფილებენ. სასაზღვრო პირობები დამოკიდებულია ამოცანის თავისებურებებზე. ჩვენ დავინახავთ, რომ, თუ შრედინგერის განტოლება საშუალებას გვაძლევს ვიპოვოთ ტალღური ფუნქცია ψ, სასაზღვრო პირობები განსაზღვრავენ საკუთარ მნიშვნელობებს. საზოგადოდ, როგორც ადრე აღვნიშნეთ, შრედინგერის განტოლების ამოხსნისას მიღებული ტალღურ ფუნქციისაგან მოითხოვენ, რომ იგი აკმაყოფილებდეს ეგრეთწოდებულ სტანდარტულ პირობებს. სახელდობრ, ψ ფუნქცია უნდა

იყოს მთელს სივრცეში სასრულო, ცალსახა, უწყვეტი და უნდა ჰქონდეს უწყვეტი წარმოებულები. ამ პირობების მოთხოვნა საკმარისია იმისათვის, რომ ვიპოვოთ შრედინგერის განტოლების საკუთარი მნიშვნელობები. აღნიშნულ სასაზღვრო პირობებს ψ ფუნქცია უნდა აკმაყოფილებდეს მაშინაც კი, როცა თვით პოტენციალური ენერგია წყვეტას განიცდის. როცა პოტენციალური ენერგია ისეთია, რომ იგი წყვეტას განიცდის, მაშინ თითოეული არსებითი, ე. ი. იქ, სადაც პოტენციალური ენერგია უწყვეტია, უნდა დაიწეროს შესაბამისი შრედინგერის განტოლება, რომლის ამოხსნა მოგვცემს სხვადასხვა ტალღურ ფუნქციას. კერძოდ, ჩვენ გვექნება იმდენი ტალღური ფუნქცია, რამდენიც მოძრაობის არე. რათა ტალღური ფუნქცია მთელს სივრცეში უწყვეტი იყოს და ჰქონდეს უწყვეტი წარმოებული, საჭიროა ამ ფუნქციების „შეკერვა“ წყვეტის წერტილებზე. ასე მაგალითად, როცა პოტენციალური ენერგია ისეთია, რომ მას სხვადასხვა მნიშვნელობა აქვს $(-\infty, a)$, (a, b) და (b, ∞) არეებში, მაშინ ამ სამი არისათვის გვექნება, საზოგადოდ, სამი სხვადასხვა განტოლება, რომელთა ამოხსნა მოგვცემს სამ ψ_1, ψ_2, ψ_3 ტალღურ ფუნქციას. ვთქვათ, ამ ტალღური ფუნქციების სახე ისეთია, რომელიც ნაჩვენებია მე-6 ნახაზზე.



ნახ. 6.

რომ გამოვთვალოთ ნაწილაკის მოხვედრის ალბათობა a წერტილში, მივიღებთ ორ სხვადასხვა მნიშვნელობას, იმის მიხედვით, თუ რომელი ფუნქციით ვითვლით ამ ალბათობას, ψ_1-ით თუ ψ_2-ით. ასეთივე მდგომარეობა გვაქვს b წერტილში. ეს კი უაზრობაა, რადგან არ შეიძლება ერთიდაიმავე წერტილში ალბათობას ორი სხვადასხვა მნიშვნელობა ჰქონდეს. ამიტომაც საჭიროა ამ ფუნქციების შეკერვა a და b წყვეტის წერტილებზე. უნდა მოვითხოვოთ, რომ ფუნქციები და მათი პირველი რიგის წარმოებულები წყვეტის ამ წერტილებზე ერთმანეთს ემთხვეოდნენ. ამრიგად, შეკერვის პირობებს აქვს სახე:

$$\psi_1(a) = \psi_2(a),$$

$$\left(\frac{\partial \psi_1(x)}{\partial x}\right)_{a-0} = \left(\frac{\partial \psi_2(x)}{\partial x}\right)_{a+0}, \tag{51,3}$$

$$\psi_2(b) = \psi_3(b),$$

$$\left(\frac{\partial \psi_2(x)}{\partial x}\right)_{b-0} = \left(\frac{\partial \psi_3(x)}{\partial x}\right)_{b+0} \tag{51,4}$$

ამ პირობების მოთხოვნით სრული ტალღური ფუნქცია უწყვეტია და აქვს უწყვეტი წარმოებული მთელს სივრცეში. შეკერვის შემდეგ ტალღური ფუნქციის სახე მოცემულია იგივე ნახაზზე პუნქტირით.

შრედინგერის განტოლება, სასაზღვრო პირობების გათვალისწინებით ნორმირებასთან ერთად, იძლევა ამოცანის ამოხსნის სრულ სურათს. ამ პირობებში ყველა მუდმივი, რომელიც ამოცანის ამოხსნაში მონაწილეობს, ცალსახად განისაზღვრება[1].

ხშირად, სხვადასხვა ამოცანის ამოხსნის დროს (განსაკუთრებით მაშინ, როცა გვაინტერესებს საკუთარი მნიშვნელობების განსაზღვრა) ხელსაყრელია, რომ ფუნქ-

[1] რა თქმა უნდა, იგულისხმება არა არსებითი ფაზური მამრავლის სიზუსტით.

ციებს, ნაცვლად (51,3) და (51,4) პირობებისა, მოვთხოვოთ ლოგარითმული წარმოებულების ტოლობა წყვეტის a და b წერტილებზე. გვექნება

$$\left(\frac{\psi_1'(x)}{\psi_1(x)}\right)_{a-0} = \left(\frac{\psi_2'(x)}{\psi_2(x)}\right)_{a+0},$$
$$\left(\frac{\psi_2'(x)}{\psi_2(x)}\right)_{b-0} = \left(\frac{\psi_3'(x)}{\psi_2(x)}\right)_{b+0} \qquad (51,5)$$

ნათელია, რომ ამ პირობების მიღება შეიძლება (51,3) და (51,4)-დან, პირიქით კი არა. ზემოთ ნაჩვენამი განსაკუთრებით კარგად გამოჩნდება კონკრეტული მაგალითების განხილვის დროს. ამ თავში ჩვენ ამოვხსნით შრედინგერის განტოლებას მთელი რიგი მნიშვნელოვანი ამოცანებისათვის. წინასწარ კი განვიხილოთ საკითხი იმის შესახებ, თუ რა კავშირი არსებობს სხვადასხვანაირად ნორმირებულ ტალღურ ფუნქციებს შორის.

§ 52. კავშირი სხვადასხვა სიდიდეზე ნორმირებულ ტალღურ ფუნქციებს შორის

ჩვენ ვაჩვენეთ, რომ ერმიტული ოპერატორის საკუთარი ფუნქციები ორთონორმირებულია. იმპულსის ოპერატორის საკუთარი ფუნქციების განხილვის დროს დავინახეთ, რომ ტალღური ფუნქციების ნორმირება შეიძლება იმპულსის სკალაზე. სრულიად ანალოგიურად შეიძლება მოვახდინოთ ტალღური ფუნქციის ნორმირება ენერგიის, ტალღური ვექტორისა და სხვა ფიზიკური სიდიდეების სკალაზე. თუ წყვეტილი სპექტრის შემთხვევაში საკმარისია ერთზე ნორმირება, უწყვეტი სპექტრის შემთხვევაში მთელი რიგი ამოცანების ამოხსნის დროს ჩვენ საქმე გვაქვს ტალღურ ფუნქციებთან, რომლებიც ნორმირებულია სხვადასხვა ფიზიკური სიდიდის შესაბამის ერთეულზე (ე. ი. ამ ფიზიკური სიდიდის შესაბამის დირაკის დელტა ფუნქციაზე). ამიტომაც გასაგებია, რომ ხშირად დაგვჭირდება ნორმირების ერთი სკალიდან მეორეზე გადასვლა. ამ პარაგრაფში გამოვიყვანთ ზოგად ფორმულას, რომელიც ერთი სახის ნორმირებულ ფუნქციას მეორესთან აკავშირებს.

დავუშვათ, რომ გვაქვს რაიმე ტალღური ფუნქცია $\psi_{\mathbf{A}}(\mathbf{r})$, რომელიც ნორმირებულია გარკვეული $\mathbf{A}$ ფიზიკური სიდიდის სკალაზე. ივიეე ფუნქცია, ნორმირებული B ფიზიკური სიდიდის სკალაზე, აღვნიშნოთ $\psi_B(\mathbf{r})$, ამასთან ვიგულისხმოთ, რომ $\mathbf{A}$ და B ფიზიკურ სიდიდეებს შორის არსებობს ურთიერთცალსახა კავშირი $A_i = f_i(B_i)$.

გამოვიდეთ ტალღური ფუნქციების სრულობის პირობიდან

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_{\mathbf{A}}^*(\mathbf{r})\,\psi_{\mathbf{A}}(\mathbf{r}')\,d\mathbf{A} = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_{\mathbf{B}}^*(\mathbf{r})\,\psi_{\mathbf{B}}(\mathbf{r}')\,d\mathbf{B} = \delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}'), \qquad (52,1)$$

სადაც $d\mathbf{A}$ და $d\mathbf{B}$-ს ქვეშ, როგორც ადრე შევთანხმდით, იგულისხმება შესაბამისი სივრცის მოცულობის ელემენტები:

$$d\mathbf{A} = dA_x dA_y dA_z = A^2 dA d\Omega_A, \qquad (52,2)$$
$$d\mathbf{B} = dB_x dB_y dB_z = B^2 dB d\Omega_B. \qquad (52,3)$$

(52,1) ინტეგრალების ტოლობა შეგვიძლია განვიხილოთ როგორც საინტეგრაციო ცვლადების შეცვლის შედეგი. როგორც ვიცით მრავალჯერად ინტეგრალში ცვლადის შესაცვლელად უნდა გამოვიყენოთ ფორმულა

$$dB_x dB_y dB_z = \left| \frac{D(B_x,\ B_y,\ B_z)}{D(A_x,\ A_y,\ A_z)} \right| dA_x dA_y dA_z, \tag{52,4}$$

რადგან A_i და B_i სიდიდეებს შორის პირობის თანახმად არსებობს $A_i = f_i(B_i)$ ტიპის კავშირი, ამიტომ იაკობიანი ტოლი იქნება

$$\frac{D(B_x,\ B_y,\ B_z)}{D(A_x,\ A_y,\ A_z)} = \left(\frac{dB_x}{dA_x} \frac{dB_y}{dA_y} \frac{dB_z}{dA_z} \right), \tag{52,5}$$

ამგვარად,

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_A^*(\mathbf{r})\, \psi_A(\mathbf{r})\, d\mathbf{A} = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_B^*(\mathbf{r}) \psi_B(\mathbf{r}) \frac{d\mathbf{A}}{\left(\frac{dA_x}{dB_x} \frac{dA_y}{dB_y} \frac{dA_z}{dB_z} \right)} \tag{52,6}$$

საიდანაც შეგვიძლია ვიპოვოთ შემდეგი დამოკიდებულება:

$$\psi_A(\mathbf{r}) = \left(\frac{dA_x}{dB_x} \frac{dA_y}{dB_y} \frac{dA_z}{dB_z} \right)^{-1/2} \psi_B(\mathbf{r}). \tag{52,7}$$

ცხადია, რომ კერძო შემთხვევაში, როცა A და B სკალარული სიდიდეებია, გვექნება კავშირი:

$$\psi_A(\mathbf{r}) = \frac{1}{\left(\frac{dA}{dB} \right)^{1/2}} \psi_B(\mathbf{r}). \tag{52,8}$$

როცა A სკალარს წარმოადგენს ხოლო **B** ვექტორია, მაშინ ჩვენ უნდა გამოვიდეთ ტოლობიდან

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_A^*(\mathbf{r})\, \psi_A(\mathbf{r}')\, dA = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_B^*(\mathbf{r})\, \psi_B(\mathbf{r}')\, 4\pi B^2\, dB =$$

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_B^*(\mathbf{r})\, \psi_B(\mathbf{r}') \frac{dA}{\left(\frac{dA}{dB} \frac{1}{4\pi B^2} \right)}, \tag{52,9}$$

საიდანაც

$$\psi_A(\mathbf{r}) = \sqrt{4\pi B^2 \frac{dB}{dA}}\, \psi_B(\mathbf{r}). \tag{52,10}$$

მიღებული ფორმულები დიდ გამოყენებას პოულობენ პრაქტიკული გამოთვლების დროს.

§ 53. თავისუფალი ნაწილაკი განსაზღვრული იმპულსით

განვიხილოთ თავისუფალი ნაწილაკის ამოცანა. თავისუფალი ეწოდება ნაწილაკს, რომელიც სხვა ნაწილაკების ან ველების ურთიერთქმედებას არ განიცდის. ცხადია ასეთი ნაწილაკის შემთხვევაში ურთიერთქმედების პოტენციალური ენერგია ნულის ტოლია. თავისუფალი ნაწილაკის ტალღურ ფუნქციასთან ჩვენ უკვე რამდენჯერმე გვქონდა საქმე, ამიტომ ქვემოთ ჩვენ შევეცდებით შევისწავლოთ თავისუფალი ნაწილაკის სხვა მნიშვნელოვანი თავისებურებანი. კერძოდ, ვიპოვოთ თავისუფალი ნაწილაკის გასაზომ სიდიდეთა სრული კრებული. რადგან თავისუფალი ნაწილაკის თავისუფლების ხარისხთა რიცხვი სამის ტოლია, ამიტომ სრული კრებული სამი სიდიდისაგან უნდა შედგებოდეს. ეს სიდიდეები იქნება თავი-

სუფალი ნაწილაკის ფიზიკური სიდიდეების შესაბამისი კომუტატური ოპერატორების საკუთარი მნიშვნელობები.

თავისუფალი ნაწილაკის ჰამილტონის ოპერატორს აქვს შემდეგი სახე:

$$\hat{H}=\frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2\mu}=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta. \tag{53,1}$$

ამ ოპერატორთან კომუტატურია შემდეგი ოპერატორები: იმპულსის ოპერატორი $\hat{\mathbf{p}}=-i\hbar\nabla$, იმპულსის მომენტის ოპერატორის მდგენელები $\hat{l}_x$, $\hat{l}_y$, $\hat{l}_z$, მომენტის კვადრატის ოპერატორი $\hat{\mathbf{l}}^2$ და ინვერსიის ოპერატორი $\hat{I}$.

მართლაც, ადვილად ვაჩვენებთ, რომ

$$[\hat{H},\ \hat{p}_x]=[\hat{H},\ \hat{p}_y]=[\hat{H},\ \hat{p}_z]=0; \tag{53,2}$$

ასევე

$$[\hat{H},\ \hat{l}_x]=[\hat{H},\ \hat{l}_y]=[\hat{H},\ \hat{l}_z]=[\hat{H},\ \hat{\mathbf{l}}^2]=0 \tag{53,3}$$

და

$$[\hat{H},\ \hat{I}]=0,\ [\hat{l}_x,\ \hat{I}]=0,\quad [\hat{\mathbf{l}}^2,\ \hat{I}]=0. \tag{53,4}$$

იმპულსები ურთიერთკომუტატურია, მაგრამ ისინი კომუტატური არ არიან არც მომენტის პროექციებთან და კვადრატთან და არც ინვერსიის ოპერატორთან, ამიტომ გასაზომ სიდიდეთა სრულ კრებულს ადგენს სიდიდეები:

$$(E,\ p_x,\ p_y,\ p_z); \tag{53,5}$$

აღსანიშნავია, რომ, ამ სიდიდეთაგან დამოუკიდებელი იქნება მხოლოდ სამი, რამდენადაც ამ ოთხ სიდიდეს ედება ერთი პირობა

$$E=\frac{1}{2\mu}(p_x^2+p_y^2+p_z^2). \tag{53,6}$$

გარდა აღნიშნული სრული კრებულისა ჩვენ გვექნება შემდეგი კრებულებიც:

$$(E,\ \mathbf{l}^2,\ l_x,\ I);\quad (E,\ \mathbf{l}^2,\ l_y,\ I);\quad (E,\ \mathbf{l}^2,\ l_z,\ I); \tag{53,7}$$

ამასთან, ინვერსიის ოპერატორის საკუთარი მნიშვნელობა ორბიტალურ მომენტთან დაკავშირებულია ფორმულით $I=(-1)^l$, ასე რომ, (53,7) კრებულებშიაც დამოუკიდებელია მხოლოდ სამ-სამი სიდიდე.

როცა ვირჩევთ (53,5) კრებულს, მაშინ ამბობენ, რომ ვიხილავთ თავისუფალ ნაწილაკს მოცემული იმპულსით, ხოლო როცა ვიხილავთ (53,7)-ის რომელიმე ერთ-ერთ კრებულს, მაშინ ამბობენ, რომ გვაქვს თავისუფალი ნაწილაკი განსაზღვრული მომენტით. ამ ორ შემთხვევაში თავისუფალი ნაწილაკის ტალღური ფუნქციები განსხვავებული იქნება, რამდენადაც (53,5) კრებულის დროს ტალღური ფუნქცია საერთო საკუთარი ფუნქცია უნდა იყოს $\hat{H}$ და $\hat{\mathbf{p}}$ ოპერატორებისა, მეორე შემთხვევაში კი $\hat{H}$, $\hat{l}_\alpha$, $\hat{\mathbf{l}}^2$ და $\hat{I}$ ოპერატორებისა.

ამ პარაგრაფში შევისწავლით თავისუფალ ნაწილაკს განსაზღვრული იმპულსით. მაშასადამე, საჭიროა ვიპოვოთ თავისუფალი ნაწილაკის ისეთი ტალღური ფუნქცია, რომელიც ერთდროულად დააკმაყოფილებს როგორც იმპულსის ოპერატორის საკუთარი ფუნქციებისა და საკუთარი მნიშვნელობების განტოლებას

$$\hat{\mathbf{p}}\psi=\mathbf{p}\psi. \tag{53,8}$$

ისე შრედინგერის განტოლებას

$$i\hbar \frac{\partial \psi (\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \hat{H} \psi (\mathbf{r}, t). \tag{53,9}$$

რამდენადაც თავისუფალი ნაწილაკის ჰამილტონიანი დროზე ცხადად დამოკიდებული არ არის, იმდენად ჩვენ საქმე გვაქვს სტაციონარულ შემთხვევასთან, ამიტომ ამოხსნა ვეძებოთ შემდეგი სახით:

$$\psi (\mathbf{r}, t) = \psi (\mathbf{r})\, e^{-\frac{i}{\hbar} Et} \tag{53,10}$$

მაშინ ამ ფუნქციის (53,9)-ში შეტანით გვექნება განტოლება

$$\Delta \psi (\mathbf{r}) + \frac{2\mu E}{\hbar^2} \psi (\mathbf{r}) = 0, \tag{53,11}$$

რომლის ამოხსნა არ არის ძნელი ცვლადთა განცალების ფურიეს მეთოდის გამოყენებით. ამონახსნი ვეძებოთ შემდეგი ნამრავლის სახით:

$$\psi (\mathbf{r}) = \psi_1 (x)\, \psi_2 (y)\, \psi_3 (z). \tag{53,12}$$

ამ ფუნქციის შეტანით (53,11) განტოლებაში და ამავე ფუნქციაზე გაყოფით მივიღებთ

$$\frac{1}{\psi_1} \frac{d^2\psi_1}{dx^2} + \frac{1}{\psi_2} \frac{d^2\psi_2}{dy^2} + \frac{1}{\psi_3} \frac{d^2\psi_3}{dz^2} + \frac{2\mu E}{\hbar^2} = 0. \tag{53,13}$$

პირველი წევრი მხოლოდ x-ის ფუნქციაა, მეორე y-ის, ხოლო მესამე z-ის; მათი ჯამი მუდმივი მაშინ იქნება, როცა თითოეული მათგანი მუდმივია, ე. ი.

$$\psi_1''(x) + \frac{2\mu E_1}{\hbar^2} \psi_1 (x) = 0, \tag{53,14}$$

$$\psi_2''(y) + \frac{2\mu E_2}{\hbar^2} \psi_2 (y) = 0, \tag{53,15}$$

$$\psi_3''(z) + \frac{2\mu E_3}{\hbar^2} \psi_3 (z) = 0, \tag{53,16}$$

იმ პირობით, რომ

$$E = E_1 + E_2 + E_3. \tag{53,17}$$

მიღებული განტოლებები მარტივად ამოიხსნება. ავიღოთ, მაგალითად, (53,14) განტოლება. მას ექნება ორი კერძო ამონახსნი:

$$\psi_1^{(1)} (x) = A_1 e^{i \frac{\sqrt{2\mu E_1}}{\hbar} x} \qquad \psi_1^{(2)} (x) = B_1 e^{-i \frac{\sqrt{2\mu E_1}}{\hbar} x} \tag{53,18}$$

ეს ფუნქციები უწყვეტებია და აქვთ უწყვეტი წარმოებულები. რადგან E_1 ნამდვილია, ამიტომ ეს ფუნქციები სასრული იქნება ნებისმიერი ისეთი E_1-სათვის, რომელიც აკმაყოფილებს პირობას $0 \leqslant E_1 \leqslant \infty$. ამგვარად, თავისუფალი ნაწილაკის სპექტრი უწყვეტია—ენერგიას შეიძლება ჰქონდეს ნებისმიერი დადებითი მნიშვნელობა (ენერგიის გადანომვრა არ შეიძლება, იგი უწყვეტად იცვლება ნულსა და უსასრულობას შორის). ჩვენ ვხედავთ, რომ ენერგიის ყოველ ერთ მნიშვნელობას შეესაბამება ორი საკუთარი ფუნქცია $\psi_1^{(1)}$ და $\psi_1^{(2)}$, ე. ი. თავისუფალი ნაწილაკის სპექტრი ორჯერადად გადაგვარებულია.

თუ გავიხსენებთ, რომ $p_x = \sqrt{2\mu E_1}$, მაშინ თავისუფალი ნაწილაკის ტალღური ფუნქცია ასეც შეგვიძლია წარმოვადგინოთ:

$$\psi_1^{(1)}(x) = A_1 e^{\frac{i}{\hbar} p_x x} \qquad \psi_1^{(2)}(x) = B_1 e^{-\frac{i}{\hbar} p_x x} \tag{53,19}$$

სრულიად ანალოგიურად ვიპოვით $\psi_2(y)$ და $\psi_3(z)$ ფუნქციებსაც. შედეგად (53,12)-ის გამოყენებით მივიღებთ

$$\psi(\mathbf{r}) = Ae^{\pm \frac{i}{\hbar}(p_x x + p_y y + p_z z)} \tag{53,20}$$

აღსანიშნავია, რომ ეს ფუნქცია არის იმპულსის ოპერატორის საკუთარი ფუნქციაც, რაც ასეც უნდა ყოფილიყო. A-მუდმივი შეგვიძლია ვიპოვოთ ორთო-ნორმირების პირობით.

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(\mathbf{r}, \mathbf{p}) \psi(\mathbf{r}, \mathbf{p}')\, d\mathbf{r} = \delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}'). \tag{53,21}$$

ამ ფორმულაში (53,20) ფუნქციის შეტანით ადვილად მივიღებთ, რომ $A = (2\pi\hbar)^{-3/2}$, ე. ი. ნორმირებულ ტალღურ ფუნქციას ექნება სახე

$$\psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{\pm \frac{i}{\hbar} \mathbf{pr}} \tag{53,22}$$

დაბოლოს, თუ ამ ფუნქციას შევიტანთ (53,10) გამოსახულებაში, გვექნება

$$\psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{\pm \frac{i}{\hbar}(\mathbf{pr} \mp Et)} \tag{53,23}$$

რომელიც წარმოადგენს ჩვენთვის კარგად ცნობილ ბრტყელ ტალღას. ამ ფუნქციას უწოდებენ თავისუფალი ნაწილაკის ტალღურ ფუნქციას განსაზღვრული იმპულსით. (53,23) გამოსახულებას შეგვიძლია მივცეთ ბრტყელი ტალღის ჩვეულებრივი ფორმა, თუ გავითვალისწინებთ დე ბროილის ფორმულებს $\mathbf{k} = \mathbf{p}/\hbar$ და $\omega = E/\hbar$.

ცხადია, რომ თავისუფალი ნაწილაკის მდებარეობის ალბათობის სიმკვრივე მუდმივი სიდიდეა

$$\rho = |\psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}, t)|^2 = (2\pi\hbar)^{-3}. \tag{53,24}$$

რაც შეეხება დენის ვექტორს, (5,12) ფორმულის გამოყენებით, მარტივად მივიღებთ, რომ

$$\mathbf{J} = \frac{\mathbf{p}}{\mu} \frac{1}{(2\pi\hbar)^3}, \tag{53,25}$$

ან (53,24) ფორმულის გათვალისწინებით გვექნება მნიშვნელოვანი გამოსახულება

$$\mathbf{J} = \frac{\mathbf{p}}{\mu} |\psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r})|^2. \tag{53,26}$$

ბრტყელი ტალღის სხვადასხვა ნორმირება. პრაქტიკული მიზნებისათვის მეტად მნიშვნელოვანია ბრტყელი ტალღის ნორმირება სხვადასხვა ფიზიკური სიდიდის სკალაზე. ამისათვის გამოვიყენოთ წინა პარაგრაფში გამოყვანილი ფორმულები. (52,7)-ის თანახმად, (53,23) ტალღური ფუნქციის გამოყენებით, ადვილად

დავწერთ $\mathbf{k}=\mathbf{p}/\hbar$ ტალღური ვექტორის სკალაზე ნორმირებულ ფუნქციას; სახელდობრ, გვექნება

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})=\frac{1}{(2\pi)^{3/2}}e^{\pm i\mathbf{kr}}. \tag{53,27}$$

ენერგიაზე ნორმირებულ ფუნქციას მივიღებთ (52,10) ფორმულის გამოყენებით. ამ შემთხვევაში $A=F$ და $\mathbf{B}=\mathbf{p}=\hbar\mathbf{k}$, ამიტომ

$$\psi_E(\mathbf{r})=\sqrt{\frac{4\pi p^2}{(2\pi\hbar)^3}\frac{dp}{dE}}\,e^{\pm\frac{i}{\hbar}\mathbf{pr}} \tag{53,28}$$

რადგან $E=\mathbf{p}^2/2\mu$. ამიტომ $\frac{dp}{dE}=\frac{\mu}{p}$ და შედეგად გვექნება

$$\psi_E(\mathbf{r})=\sqrt{\frac{4\pi\mu p}{(2\pi\hbar)^3}}\,e^{\pm\frac{i}{\hbar}\mathbf{pr}} \tag{53,29}$$

ხშირად საჭიროა ვიპოვოთ სხვა ტიპის ნორმირებაც. ვთქვათ, მაგალითად, საჭიროა ბრტყელი ტალღის ისეთი ნორმირება, რომელიც შეესაბამება ერთის ტოლ ნაკადს. რადგან დენის ვექტორი ბრტყელი ტალღის შემთხვევაში ტოლია სიდიდის

$$J=\frac{p}{\mu}\,|\,\psi(\mathbf{r})\,|^2, \tag{53,30}$$

ამიტომ თუ მოვითხოვთ, რომ $J=1$, გვექნება

$$1=\frac{p}{\mu}\,|\,A\,|^2, \tag{53,31}$$

საიდანაც $A=(\mu/p)^{1/2}$. ამგვარად, ერთეულის ტოლ ნაკადზე ნორმირებულ ბრტყელ ტალღას ექნება გამოხატულება

$$\psi_{J=1}(\mathbf{r})=\left(\frac{\mu}{p}\right)^{1/2}e^{\pm\frac{i}{\hbar}\mathbf{pr}} \tag{53,32}$$

დაბოლოს, როგორც ეს § 4-ში აღვნიშნეთ, ჩვენ შეგვიძლია განვიხილოთ ბრტყელი ტალღა, რომელიც ნორმირებულია ნებისმიერად დიდ, მაგრამ სასრულო $V=L^3$ მოცულობაზე. ასეთ შემთხვევაზე ამბობენ, რომ ბრტყელი ტალღა ნორმირებულია „ყუთზე“. ცხადია, ამ ნორმირებას შეესაბამება ბრტყელი ტალღა

$$\psi_V(\mathbf{r})=\frac{1}{\sqrt{V}}e^{\pm\frac{i}{\hbar}\mathbf{pr}}. \tag{53,33}$$

ბრტყელი ტალღის ნორმირების საკითხს დიდი მნიშვნელობა აქვს, როცა საჭიროა რომელიმე ატომური პროცესის ალბათობის გამოთვლა.

§ 54. თავისუფალი ნაწილაკი განსაზღვრული მომენტით

ახლა ვიპოვოთ თავისუფალი ნაწილაკის ტალღური ფუნქცია, რომელიც საერთო საკუთარი ფუნქცია იქნება შემდეგი ოპერატორების: $\hat{H}$, $\hat{\mathbf{l}}^2$ და $\hat{\mathbf{l}}_z$. ასეთ შემთხვევაში ამბობენ, რომ თავისუფალ ნაწილაკს განსაზღვრული მომენტი აქვს, რამდენადაც ნაწილაკის ენერგია და მომენტი (უფრო ზუსტად მომენტის z-მდგენელი და მისი კვადრატი) ერთდროულად და ზუსტად იზომება.

ამოცანის ამოხსნა ხელსაყრელია სფერულ კოორდინატებში. ცხადია, რომ ზემოთ აღნიშნული სამი ოპერატორისათვის, სფერულ კოორდინატებში, გვექნება:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\left\{\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{\Delta_{\theta,\varphi}}{r^2}\right\}, \tag{54,1}$$

$$\hat{l}^2 = -\hbar^2\Delta_{\theta,\varphi}, \tag{54,2}$$

$$\hat{l}_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}, \tag{54,3}$$

სადაც $\Delta_{\theta,\varphi}$ ლეჟანდრის ოპერატორია. აშკარად ჩანს, რომ ეს ოპერატორები მართლაც ურთიერთკომუტატური არიან. საჭიროა ვიპოვოთ ისეთი ტალღური ფუნქცია, რომელიც საერთო საკუთარი ფუნქცია იქნება სამივე ოპერატორის, ე. ი.

$$\hat{H}\psi(r,\ \theta,\ \varphi) = E\psi(r,\ \theta,\ \varphi), \tag{54,4}$$

$$\hat{l}^2\psi(r,\ \theta,\ \varphi) = l^2\psi(r,\ \theta,\ \varphi), \tag{54,5}$$

$$\hat{l}_z\psi(r,\ \theta,\ \varphi) = l_z\psi(r,\ \theta,\ \varphi). \tag{54,6}$$

(54,5) და (54,6)-ის ამოხსნა ჩვენ უკვე ვიცით. $\hat{l}^2$ და $\hat{l}_z$-ის საერთო საკუთარი ფუნქცია არის $Y_{lm}(\theta,\ \varphi)$ სფერული ფუნქცია, ხოლო საკუთარი მნიშვნელობები ტოლია

$$l^2 = \hbar^2 l(l+1);\ \ l_z = m_l\hbar \cdot$$
$$(l = 0,\ 1,\ 2,\ldots;\ \ m_l = 0 \pm 1,\ \pm\ldots\pm l) \tag{54,7}$$

ამიტომ, თუ ამონახსნს მოვძებნით შემდეგნაირად:

$$\psi(r,\ \theta,\ \varphi) = R_l(r)\,Y_{lm}(\theta,\ \varphi) \tag{54,8}$$

ბოლო ორი განტოლება, კერძოდ (54,5) და (54,6), დაკმაყოფილებული იქნება.

რადიალური ფუნქცია ჯერ-ჯერობით ნებისმიერია, იგი ისე უნდა შევარჩიოთ, რომ დაკმაყოფილდეს (54,4) განტოლებაც. (54,8) ფუნქცია შევიტანოთ (54,4) განტოლებაში და გავითვალისწინოთ, რომ

$$-\hbar^2\Delta_{\theta,\varphi}Y_{lm}(\theta,\ \varphi) = \hbar^2 l(l+1)\,Y_{lm}(\theta,\ \varphi), \tag{54,8'}$$

მაშინ გვექნება

$$\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial R_l}{\partial r}\right) + \left[k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2}\right]R_l(r) = 0, \tag{54,9}$$

რომელიც წარმოადგენს შრედინგერის რადიალური ფუნქციების განტოლებას თავისუფალი ნაწილაკისათვის. რადგან განტოლება შეიცავს l-კვანტურ რიცხვს, ამიტომ რადიალური ფუნქციაც დამოკიდებული იქნება l-ზე. (54,9)-ში k^2-ით აღვნიშნეთ სიდიდე

$$k^2 = \frac{2\mu E}{\hbar^2}. \quad (E > 0) \tag{54,10}$$

ამგვარად, საკითხი დაიყვანა (54,9) განტოლების ამოხსნაზე. (54,9) განტოლება ეკუთვნის განტოლებათა შემდეგ კლასს:[1]

---

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

$$x^2u''(x)+axu'(x)+(b+cx^m)\,u(x)=0, \tag{54,11}$$

რომელსაც ბესელის განზოგადოებული განტოლება ეწოდება. იგი გარკვეული აღნიშვნებით ბესელის განტოლებაზე დაიყვანება. (54,11) განტოლების ამონახსნი სასაზღვრო პირობების შესაბამისად, შეიძლება იყოს რომელიმე გვარის ბესელის ფუნქცია ამ ფუნქციის არგუმენტი განისაზღვრება გამოსახულებით

$$\frac{2\sqrt{c}}{m}\,x^{m/2} \tag{54,12}$$

ხოლო ინდექსი გამოიხატება ფორმულით

$$p=\frac{\sqrt{(a-1)^2-4b^2}}{m}. \tag{54,13}$$

განხილულ შემთხვევაში $a=2$, $b=-l(l+1)$, $c=k^2$ და $m=2$; ამასთან, ჩვენ გვჭირდება ისეთი ამონახსნი, რომელიც სათავეში სასრულოა. ასეთი კი არის მხოლოდ ბესელის პირველი გვარის ფუნქცია. ამგვარად, ჩვენთვის საინტერესო ამონახსნი იქნება ბესელის სფერული ფუნქცია [1]:

$$R_{lk}(r)=Aj_l(kr); \tag{54,14}$$

A-მუდმივი შეიძლება განისაზღვროს ნორმირების პირობით. (54,14) ამონახსნის სასრულობა მოითხოვს, რომ თავისუფალი ნაწილაკის ენერგია შეიძლება იყოს ნებისმიერი დადებითი სიდიდე $E\geqslant 0$.

განვსაზღვროთ ნორმირების კოეფიციენტი. ჩვენ ვიჩვენეთ, რომ უწყვეტი სპექტრის ამონახსნები შეიძლება ვანორმიროთ პირობით

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\psi^*_{\mathbf{k}'}(\mathbf{r})\,\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})\,d\mathbf{r}=\delta(\mathbf{k}-\mathbf{k}'). \tag{54,15}$$

ახლა გამოვარკვიოთ, რა სახეს მიიღებს ნორმირების პირობა უშუალოდ რადიალური ფუნქციებისათვის. $\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ ფუნქცია დამოკიდებულია ორ ვექტორზე $\mathbf{k}$ და $\mathbf{r}$, ე. ი. $\mathbf{n}_k=\mathbf{k}/k$ და $\mathbf{n}_r=\mathbf{r}/r$ ერთეულოვანი ვექტორების პოლარ კუთხეებზე და k და r სიდიდეებზე. ამიტომ $\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ ფუნქცია შეგვიძლია გავშალოთ მწკრივად $Y_{lm}(\overline{n}_r)\,Y^*_{lm}(\overline{n}_k)$ სფერული ფუნქციების ნამრავლად. ამასთან $\overline{n}_r$-ის ქვეშ იგულისხმება $\mathbf{n}_r$-ვექტორის პოლარ კუთხეები θ და φ, ხოლო $\overline{n}_k$-ქვეშ θ_k და φ_k კუთხეები. ამგვარად,

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})=\sum_{l=0}^{\infty}\sum_{m=-l}^{+l}R_{lk}(r)\,Y^*_{lm}(\overline{n}_r)Y_{lm}(\overline{n}_k). \tag{54,16}$$

ეს ფუნქცია შევიტანოთ (54,15) გამოსახულებაში და მოვახდინოთ ინტეგრაცია $\overline{n}_r$ ორტის შესაბამისი $d\Omega_{n_r}$ სხეულოვანი კუთხით; მივიღებთ:

$$\sum_l\sum_m Y^*_{lm}(\overline{n}_k)\,Y_{lm}(\overline{n}_{k'})\int_0^{\infty}R_{lk'}(r)R_{lk}(r)r^2dr=\delta(\mathbf{k}'-\mathbf{k}) \tag{54,17}$$

---

[1] ბესელის სფერული ფუნქცია განსაზღვრულია შემდეგნაირად

$$j_l(x)=\sqrt{\frac{\pi}{2x}}\,J_{l+1/2}(x),$$

სადაც $J_{l+1/2}(x)$ ბესელის პირველი გვარის ცილინდრული ფუნქციაა.

დირაკის დელტა ფუნქცია შეგვიძლია წარმოვიდგინოთ (11,26) სახით:

$$\delta(k'-k)=\frac{\delta(k'-k)}{kk'}\sum_{l=0}^{\infty}\sum_{m=-l}^{+l}Y_{lm}^{*}(\overline{n_{k'}})\,Y_{lm}(\overline{nk}). \qquad (54,18)$$

თუ ამ გამოსახულებას შევიტანთ (54,17) ფორმულაში, დავინახავთ, რომ ტოლობა დაცული იქნება მაშინ, როცა $R_{lk}(r)$ ფუნქციები აკმაყოფილებენ ნორმირების შემდეგ პირობას:

$$\int_0^{\infty}R_{lk'}(r)R_{lk}(r)r^2dr=\frac{\delta(k-k')}{kk'}. \qquad (54,19)$$

რადიალური ფუნქციების ნორმირების მიზნით ამ უკანასკნელში შევიტანოთ (54,14) ამონახსნი; გვექნება:

$$A^2\int_0^{\infty}j_l(k'r)\,j_l(kr)r^2\,dr=\frac{\delta(k-k')}{kk'}; \qquad (54,20)$$

მეორე მხრივ, ცნობილია, რომ ბესელის სფერული ფუნქციები აკმაყოფილებენ ორთო-ნორმირების შემდეგ პირობას:

$$\frac{2}{\pi}\int_0^{\infty}j_l(k'r)j_l(kr)\,r^2\,dr=\frac{\delta(k-k')}{kk'}; \qquad (54,21)$$

საიდანაც ნორმირების მუდმივისათვის ვპოულობთ

$$A=\left(\frac{2}{\pi}\right)^{1/2}; \qquad (54,22)$$

მაშასადამე, თავისუფალი ნაწილაკის ნორმირებულ რადიალურ ფუნქციას ექნება ასეთი სახე:

$$R_{lk}(r)=\left(\frac{2}{\pi}\right)^{1/2}j_l(kr). \qquad (54,23)$$

ამ ფუნქციას სათავეში ექნება შემდეგი ასიმპტოტური მნიშვნელობა:

$$R_{lk}(r)\approx\left(\frac{2}{\pi}\right)^{1/2}\frac{(kr)^l}{(2l+1)!!}. \quad (kr\to 0) \qquad (54,24)$$

უსასრულობაში კი

$$R_{lk}(r)\approx\left(\frac{2}{\pi}\right)^{1/2}\frac{\sin\left(kr-\frac{l\pi}{2}\right)}{kr}. \quad (kr\to\infty) \qquad (54,25)$$

(54,8) გამოსახულების თანახმად სრული ტალღური ფუნქცია ტოლი იქნება

$$\psi_{klm}(\mathbf{r})=\left(\frac{2}{\pi}\right)^{1/2}j_l(kr)\,Y_{lm}(\theta,\,\varphi); \qquad (54,26)$$

ეს ფუნქცია აღწერს კვანტურ მდგომარეობას, რომელშიაც ერთდროულად და ზუსტად განისაზღვრება სამი ფიზიკური სიდიდე: ენერგია, მომენტის კვადრატი და მომენტის z-პროექცია; მათი მნიშვნელობები მოიძებნება ფორმულებით:

$$E\geqslant 0,\ \ l^2=\hbar^2 l(l+1),\ \ l_z=m\hbar. \qquad (54,27)$$

ამგვარად, ვიპოვეთ ისეთი ამონახსნი, როცა გასაზომ სიდიდეთა სრულ კრებულში შედის: ენერგია, მომენტის კვადრატი და მისი z-პროექცია. აღსანიშნავია, რომ თავისუფალი ნაწილაკისათვის ეს სიდიდეები ინახება. განხილულ კვანტურ მდგომარეობაში შეგვიძლია განვსაზღვროთ სხვა სიდიდეც, მაგრამ იგი დანარჩენებისაგან დამოუკიდებელი არ იქნება. მართლაც, ინვერსიის ოპერატორი კომუტატურია სამივე ზემოთ განხილულ ოპერატორთან, რადგან ისინი კოორდინატებს მხოლოდ კვადრატულად შეიცავენ. ამიტომ (54,26) ფუნქცია საერთო საკუთარი ფუნქცია იქნება $\hat{I}$-ინვერსიის ოპერატორისაც $I=(-1)^l$ საკუთარი მნიშვნელობებით. მაშასადამე, (54,27) კრებულთან ერთად გაიზომება ლუწობაც, მაგრამ, ცხადია, იგი დამოუკიდებელ სიდიდეს არ წარმოადგენს, რადგან ცალსახად განისაზღვრება მომენტით.

§ 55. ბრტყელი ტალღის გაშლა სფერულ ფუნქციებად

ჩვენ ვიპოვეთ თავისუფალი ნაწილაკის ამოცანის ამოხსნა ორ შემთხვევაში. ერთი განსაზღვრული იმპულსით, რომელსაც შეესაბამება ბრტყელი ტალღა და მეორე, განსაზღვრული მომენტით, რომელსაც აქვს (54,26) სახე. თავისთავად ცხადია, რომ ამ ორი ტიპის ამონახსნს შორის უნდა არსებობდეს გარკვეული კავშირი. განვიხილოთ ბრტყელი ტალღა, რომელიც შეესაბამება მოძრაობას z-ღერძის გასწვრივ

$$e^{ikr\cos\theta}, \quad (z=r\cos\theta) \tag{55,1}$$

და გავშალოთ იგი ლეჟანდრის პოლინომებად

$$e^{ikr\cos\theta}=\sum_{l=0}^{\infty}R_l(r)P_l(\cos\theta), \tag{55,2}$$

სადაც $R_l(r)$ ჯერჯერობით უცნობი ფუნქციაა. ამ ფუნქციის საპოვნელად (55,2) ტოლობა გავამრავლოთ $P_{l'}(\cos\theta)$-ზე, და ავიღოთ ინტეგრალი $\sin\theta d\theta$-თი $(0,\ \pi)$ შუალედში. რადგან ლეჟანდრის პოლინომები ორთო-ნორმირებულია პირობით:

$$\int_0^{\pi}P_l(\cos\theta)\,P_{l'}(\cos\theta)\sin\theta d\theta=\frac{2}{2l+1}\delta_{ll'}, \tag{55,3}$$

ამიტომ მივიღებთ

$$R_l(r)=\frac{2l+1}{2}\int_{-1}^{+1}e^{ikr\tau}P_l(\tau)d\tau. \tag{55,4}$$

გავიხსენოთ ბესელის სფერული ფუნქციის ერთ-ერთი ინტეგრალური წარმოდგენა[1]

$$j_l(kr)=\frac{1}{2i^l}\int_{-1}^{+1}e^{ikr\tau}P_l(\tau)d\tau; \tag{55,5}$$

მაშინ ადვილად განვსაზღვრავთ $R_l(r)$ ფუნქციას; სახელდობრ, გვექნება:

$$R_l(r)=i^l(2l+1)\,j_l(kr). \tag{55,6}$$

---

[1] გ. ჯ ი ლ ა შ ვ ი ლ ი, „ორი და სამი ნაწილაკის კვანტური მექანიკა", თბილისის უნივერსიტეტის გამომცემლობა, თ., 1973 წ. გვ. 490.

ამგვარად, ბრტყელი ტალღისათვის მივიღებთ გაშლას

$$e^{ikr\cos\theta} = \sum_{l=0}^{\infty} i^l (2l+1)\, j_l(kr)\, P_l(\cos\theta); \qquad (55,7)$$

საიდანაც ნათლად ჩანს, რომ ბრტყელი ტალღა ყოფილა მოცემული მომენტის მქონე თავისუფალი ნაწილაკის ტალღური ფუნქციების უსასრულო სუპერპოზიცია.

ნებისმიერი მიმართულებით მოძრავი ბრტყელი ტალღის გასაშლელად სფერულ ფუნქციებად საკმარისია გავიხსენოთ შეკრების ფორმულა

$$P_l(\cos\theta) = \frac{4\pi}{2l+1} \sum_{m=-l}^{+l} Y_{lm}(\overline{n_r}) Y^*_{lm}(\overline{n_k}) \qquad (55,8)$$

სადაც $\overline{n_r}$ და $\overline{n_k}$ ორტებია $\mathbf{r}$ და $\mathbf{k}$ ვექტორების შესაბამისად, ხოლო θ არის მათ შორის კუთხე. (55,7)-დან ადვილად მივიღებთ მნიშვნელოვან ფორმულას

$$e^{i\mathbf{kr}} = 4\pi \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^{+l} i^l j_l(kr)\, Y_{lm}(\overline{n_r}) Y^*_{lm}(\overline{n_k}). \qquad (55,9)$$

აღვნიშნოთ, რომ ბრტყელი ტალღის გაშლას სფერულ ფუნქციებად დიდი გამოყენება აქვს თეორიულ ფიზიკაში, განსაკუთრებით კი გაფანტვის კვანტურ თეორიაში.

§ 56. თავისუფალი ნაწილაკის ფუნქცია იმპულსურ წარმოდგენაში

ახლა დავწეროთ თავისუფალი ნაწილაკის ფუნქცია იმპულსურ წარმოდგენაში. ამისათვის საკმარისია კოორდინატული წარმოდგენის ტალღური ფუნქცია გავშალოთ ფურიეს ინტეგრალად იმპულსის ოპერატორის საკუთარი ფუნქციების მიხედვით. სათანადო ფურიეკომპონენტი იქნება ტალღური ფუნქცია იმპულსურ წარმოდგენაში. როგორც ცნობილია, ამ შემთხვევაში ფურიეკომპონენტს აქვს ასეთი სახე:

$$a(\mathbf{p}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_{p'}(\mathbf{r})\, e^{-\frac{i}{\hbar}\mathbf{pr}}\, d\mathbf{r}, \qquad (56,1)$$

სადაც $\psi_{p'}(\mathbf{r})$ არის თავისუფალი ნაწილაკის კოორდინატული წარმოდგენის ტალღური ფუნქცია; როგორც ვიცით, მას აქვს შემდეგი სახე:

$$\psi_{p'}(\mathbf{r}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{\frac{i}{\hbar}\mathbf{p'r}} \qquad (56,2)$$

ამ ფუნქციის შეტანით (56,1) ინტეგრალში მივიღებთ

$$a(\mathbf{p}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p'}-\mathbf{p},\,\mathbf{r})}\, d\mathbf{r}. \qquad (56,3)$$

გავიხსენოთ დირაკის დელტა ფუნქციის (11,16) ფურიეინტეგრალად წარმოდგენა, მაშინ (56,3) მიიღებს გამოხატულებას

$$a(\mathbf{p}) = \frac{1}{\hbar^3}\, \delta\left(\frac{\mathbf{p'}-\mathbf{p}}{\hbar}\right), \qquad (56,4)$$

რადგან დირაკის დელტა ფუნქციის თვისებით $\delta(ax)=\frac{1}{a}\delta(x)$, ამიტომ $\delta(ar)=$

$=\frac{1}{a^3}\delta(r)$, რის გამოც (56,4)-დან საბოლოოდ გვექნება

$$a_{p'}(p)=\delta(p-p'), \tag{56,5}$$

რომელიც წარმოადგენს თავისუფალი ნაწილაკის ტალღურ ფუნქციას იმპულსურ წარმოდგენაში. აშკარაა, რომ ეს ფუნქცია ავტომატურად ნორმირებულია პირობით

$$\int_{-\infty}^{+\infty} a^*_{p'}(p)\,a_{p''}(p)\,dp=\delta(p'-p''). \tag{56,6}$$

რაც უშუალოდ გამომდინარეობს იგივეობიდან

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\delta(p-p')\,\delta(p-p'')\,dp=\delta(p'-p''). \tag{56,7}$$

როგორც ვხედავთ (56,5) ფუნქცია ყველგან ნულია, გარდა $p=p'$ მნიშვნელობისა, სადაც იგი უსასრულობის ტოლია.

§ 57. პოტენციალური ორმო

პოტენციალური ორმოს ამოცანა ერთ-ერთი მნიშვნელოვანი ამოცანაა, რადგან მის შედეგებს ხშირად იყენებენ სხვადასხვა პრაქტიკული საკითხების გადაწყვეტისას. ჩვენ ზემოთ განვიხილეთ თავისუფალი ნაწილაკი, რომელიც დაუბრკოლებლად მოძრაობს მთელს სივრცეში, მაგრამ ხშირად საჭიროა ბმული ნაწილაკის განხილვაც, როცა იგი რაიმე ტიპის მიზიდულობის ძალების არსებობის გამო სასრულო ზომის არეში მოძრაობს (მაგალითად, ელექტრონი ატომის გულის ველში. პროტონი ან ნეიტრონი ატომის გულში და ა. შ.). ხშირად იმის გამო, რომ ამ ძალების ზუსტ ხასიათს არსებითი მნიშვნელობა არა აქვს (ანდა უცნობია ამ ძალების ზუსტი პოტენციალი), ურთიერთქმედების პოტენციალურ ენერგიას სცვლიან უმარტივესი სახის მიზიდვის პოტენციალური ენერგიით, რომლის არსი იმაში გამოიხატება, რომ რაღაც სასრულო არეში გვაქვს გარკვეული სიდიდის მიზიდვის ტიპის ურთიერთქმედება. ამ არის გარეთ კი ურთიერთქმედება ან სწრაფად ისპობა, ან საერთოდ არ არის. ასეთი ტიპის ურთიერთქმედებას უწოდებენ პოტენციალურ ორმოს.

მე-7 ნახაზზე მოცემულია პოტენციალური ორმოს დამახასიათებელი მრუდები. პოტენციალური ორმოს მარტივ შემთხვევას წარმოადგენს სწორკუთხა პოტენციალური ორმო. ასეთი ორმოს გრაფიკი შეიძლება მოცემული იყოს შემდეგი ფორმულით:

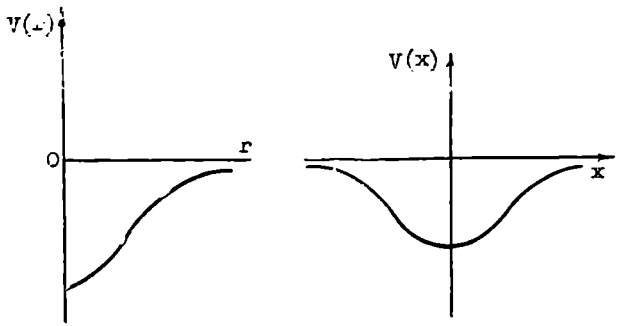
$$\begin{aligned} &V(x)=0, && 0<x<x_0,\\ &V(x)=V_0, && x\geqslant x_0,\ x\leqslant 0. \end{aligned} \tag{57,1}$$

V_0-ს უწოდებენ პოტენციალური ორმოს სიმაღლეს, ხოლო x_0-ს—სიგანეს. სხვადასხვა ამოცანაში ორმოს სიმაღლესა და სიგანეს სხვადასხვანაირად ირჩევენ. განსაკუთრებით მნიშვნელოვანია ის შემთხვევა, როცა ორმოს სიმაღლე უსასრულოდ დიდია. ამ შემთხვევაში ამოხსნები მარტივდება სასაზღვრო პირობების გამო. სა-

ხელდობრ, რადგან $x=0$ და $x=x_0$ წერტილებზე $V=\infty$, ამიტომ ნაწილაკს „ორმოდან ამოსასვლელად“ დასჭირდება უსასრულოდ დიდი კინეტიკური ენერგია, ამიტომ ბუნებრივია მოვითხოვოთ შემდეგი სასაზღვრო პირობა:

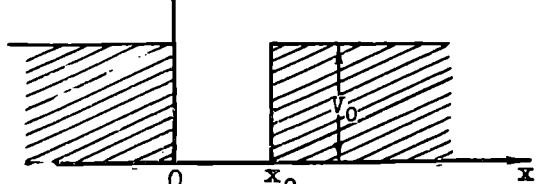
$$\psi(0)=\psi(x_0)=0. \qquad (57,2)$$

ჩვენ განვიხილავთ სასრულო V_0 სიმაღლის პოტენციალურ ორმოს და ზღვრულ შემთხვევაში, როცა $V_0\to\infty$, მივიღებთ შედეგებს უსასრულოდ დიდი სიმაღლის პოტენციალური ორმოსათვის. იმის მიხედვით, ნაწილაკის სრული ენერ-



ნახ. 7.

გია $E>V_0$ თუ $E<V_0$, მოძრაობისათვის გვექნება სულ სხვადასხვა სურათი, რადგან ეს შემთხვევები შეესაბამებიან განსხვავებულ სასაზღვრო პირობებს. როცა $E>V_0$, ნაწილაკი ორმოს ზემოდან მოძრაობს, ამიტომ მას, საზოგადოდ, შეუძლია მოხვდეს სივრცის ნებისმიერ ადგილას. სახელდობრ, მას შეუძლია მოხვდეს უსასრულობაშიაც. ალბათობა იმისა, რომ ნაწილაკი მოხვდეს სივრცის ამა თუ იმ



ნახ. 8.

ადგილას, $|\psi|^2$-ით განისაზღვრება, ამიტომ ბუნებრივია ψ ფუნქციას დავადოთ სასაზღვრო პირობა, რომ იგი უსასრულობაში სასრულო იყოს. ამ სასაზღვრო პირობით კი მივიღებთ, რომ ენერგიის სპექტრი უწყვეტია, ხოლო როცა $E<V_0$, მაშინ ნაწილაკი ორმოში იმყოფება და ალბათობა იმისა, რომ იგი უსასრულობაში მოხვდეს, ნულის ტოლი უნდა იყოს (ე. ი. საჭიროა ψ ფუნქციას დავადოთ სასაზღვრო პირობა, რომ იგი უსასრულობაში ნული ხდებოდეს). ასეთ შემთხვევაში აღმოჩნდება, რომ ენერგიას აქვს დისკრეტული სპექტრი.

ჩვენს ამოცანას წარმოადგენს, ვიპოვოთ პოტენციალურ ორმოში მოძრავი ნაწილაკის ენერგიისა და ტალღური ფუნქციის მნიშვნელობები, როცა $E<V_0$. რადგან (57,1) პოტენციალური ენერგია განმარტებულია სამი არისათვის, ამიტომ საჭიროა დაიწეროს შრედინგერის სამი განტოლება პოტენციალური ენერგიის სამი მნიშვნელობისათვის; გვექნება:

$$\psi_1'' + \frac{2\mu}{\hbar^2}(E-V_0)\psi_1 = 0, \quad x \leqslant 0$$

$$\psi_2'' + \frac{2\mu E}{\hbar^2}\psi_2 = 0, \qquad 0 < x < x_0 \tag{57,3}$$

$$\psi_3'' + \frac{2\mu}{\hbar^2}(E-V_0)\psi_3 = 0. \quad x \geqslant x_0.$$

თუ შემოვიღებთ აღნიშვნებს

$$k^2 = \frac{2\mu E}{\hbar^2}, \quad \alpha^2 = \frac{2\mu(V_0-E)}{\hbar^2}, \tag{57,4}$$

(57,3) განტოლებები მიიღებს სახეს:

$$\begin{aligned} &\psi_1'' - \alpha^2\psi_1 = 0, && x \leqslant 0 \\ &\psi_2'' + k^2\psi_2 = 0, && 0 < x < x_0 \\ &\psi_3'' - \alpha^2\psi_3 = 0. && x \geqslant x_0 \end{aligned} \tag{57,5}$$

ამ განტოლებების ზოგადი ამოხსნები შემდეგნაირად დაიწერება:

$$\begin{aligned} &\psi_1 = ae^{\alpha x} + be^{-\alpha x}, && x \leqslant 0 \\ &\psi_2 = A'e^{ikx} + B'e^{-ikx}, && 0 < x < x_0 \\ &\psi_3 = ce^{\alpha x} + De^{-\alpha x}, && x \geqslant x_0 \end{aligned} \tag{57,5'}$$

რათა დავიცვათ სასაზღვრო პირობები, რომლებიც მოითხოვენ, რომ $\psi(\pm\infty)=0$, უნდა დავუშვათ, რომ $b=0$, $c=0$. გარდა ამისა, ψ_2 შეგვიძლია წარმოვიდგინოთ სინუსის სახით. გვექნება:

$$\begin{aligned} &\psi_1 = ae^{\alpha x}, && x \leqslant 0 \\ &\psi_2 = A\sin(kx+\delta), && 0 < x < x_0 \\ &\psi_3 = De^{-\alpha x}. && x \geqslant x_0 \end{aligned} \tag{57,6}$$

აქ a, A, δ და D ნებისმიერი მუდმივებია. რადგან ტალღური ფუნქცია უნდა იყოს უწყვეტი და ჰქონდეს უწყვეტი წარმოებული, ამიტომ საჭიროა ეს ფუნქციები „შევკეროთ“ $x=0$ და $x=x_0$ წერტილებზე. ჩვენი მიზნებისათვის საკმარისია მოვითხოვოთ ლოგარითმული წარმოებულების ტოლობა:

$$\left(\frac{\psi_1'}{\psi_1}\right)_{0-0} = \left(\frac{\psi_2'}{\psi_2}\right)_{0+0}; \quad \left(\frac{\psi_2'}{\psi_2}\right)_{x_0-0} = \left(\frac{\psi_3'}{\psi_3}\right)_{x_0+0}; \tag{57,7}$$

ამ პირობების გამოყენება (57,6) ფუნქციებისათვის მოგვცემს

$$\alpha = k\operatorname{ctg}\delta; \quad k\operatorname{ctg}(kx_0+\delta) = -\alpha. \tag{57,8}$$

რადგან $\operatorname{ctg} x$ წარმოადგენს პერიოდულ ფუნქციას π პერიოდით, ამიტომ δ და $\delta+kx_0$ სიდიდეები შეგვიძლია წარმოვიდგინოთ შემდეგი სახით:

$$\delta = \arcsin \frac{k\hbar}{\sqrt{2\mu V_0}} + n_1\pi,$$
$$kx_0 + \delta = -\arcsin \frac{k\hbar}{\sqrt{2\mu V_0}} + n_2\pi. \qquad (57,9)$$

ამასთან, არკსინუსის მნიშვნელობები იმყოფება $(0, \pi/2)$ შუალედში, n_1 და n_2 კი მთელი რიცხვებია. (57,9) ფორმულებიდან შეგვეძლია გამოვრიცხოთ δ მუდმივი. მივიღებთ:

$$kx_0 = n\pi - 2\arcsin \frac{k\hbar}{\sqrt{2\mu V_0}}, \qquad (57,10)$$

სადაც n არის მთელი რიცხვი.

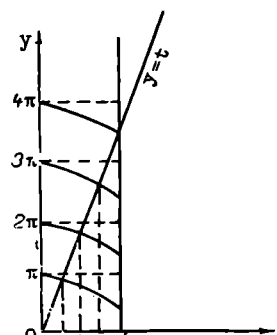
(57,10) წარმოადგენს ტრანსცენდენტულ განტოლებას k-ს მიმართ. ამ განტოლებიდან განისაზღვრება ენერგიის მნიშვნელობები პოტენციალურ ორმოში. მისი ამოხსნა შეიძლება გრაფიკული მეთოდით.

ამისათვის შემოვიღოთ აღნიშვნები:

$$kx_0 = t \quad \text{და} \quad b = \hbar\,(2\mu V_0 x_0^2)^{-1/2}$$

$y0t$ სისტემაში დავხაზოთ ორი მრუდი:

$$y = t$$
$$y = n\pi - 2\arcsin bt. \qquad (57,11)$$



ნახ. 9.

ამ ორი მრუდის გადაკვეთის წერტილები მოგვცემს (57,10) განტოლების ფესვებს. ეს ქვათ, ამ ფესვის მნიშვნელობა არის t_n, მაშინ თანახმად (57,4) ფორმულისა, ენერგიისათვის გვექნება

$$E_n = \frac{\hbar^2}{2\mu x_0^2} t_n^2; \qquad (57,12)$$

მაშასადამე, ორმოში მივიღებთ ენერგიის დონეებს, რომლებიც ერთმანეთისაგან გარკვეული მანძილით იქნება დაცილებული. ამგვარად, დონეებს განსაზღვრავს (57,10) განტოლების ფესვები. ორმოში გვექნება იმდენი ენერგეტული დონე, რამდენი ფესვიც ექნება (57,10) განტოლებას. ამასთან, ფესვები დამოკიდებული იქნება (57,11) განტოლებაში შემავალ b პარამეტრზე, ე. ი. ორმოს გეომეტრიაზე—ორმოს სიგანესა და სიმაღლეზე.

ახლა განვიხილოთ ის მარტივი შემთხვევა, როცა $V_0 = \infty$, მაშინ (57,10) ფორმულა მოგვცემს $kx_0 = n\pi$, საიდანაც (57,4) ფორმულის თანახმად ენერგიისათვის გვექნება

$$E_n = \frac{\pi^2\hbar^2}{2\mu x_0^2} n^2 = Sn^2, \qquad (57,13)$$

სადაც $S = \frac{\pi^2\hbar^2}{2\mu x_0^2}$ მუდმივი სიდიდეა. აშკარაა, რომ სრულიად იგივე შედეგს მივიღებთ, თუ (57,6)-ის მეორე ფუნქციას მოვთხოვთ (57,2) სასაზღვრო პირობის შესრულებას. როგორც ვხედავთ, უსასრულო კედლების მქონე პოტენციალურ ორმოშიც გვაქვს დისკრეტული ენერგეტული დონეები, რომლებიც ხასიათდებიან n კვანტური რიცხვით. ადვილად ვაჩვენებთ, რომ მაკროსკოპული ზომის ორმოსათვის დისკრეტულ დონეებს ვერ მივიღებთ. მართლაც, რომ ავიღოთ $x_0 = 1$ სმ-ის

სიგანის ორმო და ვიპოვოთ ორი მეზობელი ენერგეტული დონის ენერგიების სხვაობა $\Delta E = S(2n+1)$ რაიმე ნაწილაკისათვის, მაგალითად ელექტრონისათვის, მივიღებთ $\Delta E = (2n+1)\,0{,}3 \cdot 10^{-14} eV$, რაც გაზომვის თვალსაზრისით უმნიშვნელოა, ასე რომ, პრაქტიკულად სპექტრი უწყვეტია. ატომური ზომის მქონე (10^{-8} სმ) პოტენციალური ორმოსათვის კი მივიღებთ $\Delta E = (2n+1)\,30 eV$, რაც საკმაოდ შესამჩნევი სიდიდეა. უსასრულოდ დიდი სიმაღლის ორმოს შემთხვევაში (57,6)-ის მეორე განტოლება (57,2) სასაზღვრო პირობების გამოყენებით, როცა $V_0 \to \infty$, მოგვცემს $\delta = 0$ და $kx_0 = n\pi$, მაშასადამე,

$$\psi_n = A \sin \frac{n\pi}{x_0} x; \tag{57,14}$$

ხოლო $(0, x_0)$ შუალედში ნორმირების შემდეგ მივიღებთ

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{x_0}} \sin\left(n\pi \frac{x}{x_0}\right). \tag{57,15}$$

ადვილად დავინახავთ, რომ $\psi_n(x)$ ფუნქცია $(0, x_0)$ შუალედში n-ჯერ ხდება ნულის ტოლი. ამ წერტილებს უწოდებენ ტალღური ფუნქციის ნულებს, ანდა კვანძებს. როცა $n=1$, $(0, x_0)$ შუალედში ტალღურ ფუნქციას კვანძი არა აქვს. ამ დროს ამ შუალედში მოთავსებულია სინუსოიდის ნახევარი ტალღა. მაშასადამე, $n=1$ ძირითად მდგომარეობას განსაზღვრავს. როცა $n=2$, გვექნება ერთი კვანძი, ე. ი. $(0, x_0)$ შუალედში მოთავსდება ერთი ტალღა და ა. შ. რაც მეტია n, მით ნაკლებია დე ბროილის ტალღის სიგრძე λ და, მაშასადამე, მით მეტია ენერგია.

სავარჯიშო მაგალითები

1. ვიპოვოთ ენერგიის დონეები და ტალღური ფუნქცია ნაწილაკისათვის, რომელიც მოძრაობს შემდეგ პოტენციალურ „ყუთში":

$$V(x, y, z) = \begin{cases} 0, \text{ როცა } 0 \leqslant x \leqslant x_0\ 0 \leqslant y \leqslant y_0,\ 0 \leqslant z \leqslant z_0 \\ \infty, \text{ ყუთის გარეთ} \end{cases} \tag{57,16}$$

ამოხსნა: თუ გამოვიყენებთ ფურიეს მეთოდს და სასაზღვრო პირობას $\psi(0, x, y) = \psi(x_0, y, z) = 0$; $\psi(x, 0, z) = \psi(x, y_0, z) = 0$ და $\psi(x, y, 0) = \psi(x, y, z_0) = 0$ ადვილად მივიღებთ

$$E_{n_1 n_2 n_3} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2\mu} \left\{ \frac{n_1^2}{x_0^2} + \frac{n_2^2}{y_0^2} + \frac{n_3^2}{z_0^2} \right\}, \tag{57,17}$$

სადაც $n_1, n_2, n_3 = 1, 2, 3$.

და

$$\psi_{n_1 n_2 n_3}(x, y, z) = \sqrt{\frac{2}{x_0 y_0 z_0}} \sin\left(\frac{n_1\pi}{x_0} x\right) \sin\left(\frac{n_2\pi}{y_0} y\right) \sin\left(\frac{n_3\pi}{z_0} z\right). \tag{57,18}$$

2. ვიპოვოთ იმპულსისა და კოორდინატის საშუალო მნიშვნელობანი ნაწილაკისათვის, რომელიც მოძრაობს x_0 სიგანის უსასრულო კედლების მქონე ერთგანზომილებიან პოტენციალურ ორმოში.

3. რა სახე ექნება (57,15) ფუნქციას იმპულსურ წარმოდგენაში, როცა $n=1$?

§ 58. კვანტურ მდგომარეობათა რიცხვი

ამ პარაგრაფში ჩვენ დავინახავთ, თუ რა დიდი მნიშვნელობა აქვს სასაზღვრო პირობებს საკუთარი მნიშვნელობების ხასიათის გამოსარკვევად. განვიხილოთ ისევ

თავისუფალი ნაწილაკის ამოცანა. როგორც ვნახეთ, შრედინგერის განტოლებას ამ შემთხვევაში აქვს სახე

$$(\Delta + k^2)\,\psi\,(x,\ y,\ z) = 0, \tag{58,1}$$

სადაც

$$k^2 = \frac{2\mu E}{\hbar^2}\,. \tag{58,2}$$

დავუშვათ ახლა, რომ თავისუფალი ნაწილაკი მთელს სივრცეში კი არ მოძრაობს, არამედ იმყოფება L^3 მოცულობის კუბში. მაშინ ცვლადებისათვის გვექნება შემდეგი საზღვრები;

$$0 \leqslant x \leqslant L,\quad 0 \leqslant y \leqslant L,\quad 0 \leqslant z \leqslant L. \tag{58,3}$$

ტალღურ ფუნქციას მოვთხოვოთ პერიოდულობა, L პერიოდით; სახელდობრ, $\psi\,(0,\ y,\ z) = \psi\,(L,\ y,\ z)$, $\psi\,(x,\ 0,\ z) = \psi\,(x,\ L,\ z)$, $\psi\,(x,\ y,\ 0) = \psi\,(x,\ y,\ L)$. (58,4)

(58,1)-ის ამოხსნა. როგორც ვნახეთ, ასეთია

$$\psi = c\exp\left[\pm i\,(\mathbf{kr})\right], \tag{58,5}$$

სადაც k არის ვექტორი კომპონენტებით k_x, k_y, k_z. მოვითხოვოთ, რომ ეს ფუნქცია აკმაყოფილებდეს (58,4) სასაზღვრო პირობას, მაშინ

$$\exp\left(\pm ik_x L\right) = 1,\quad \exp\left(\pm ik_y L\right) = 1,\quad \exp\left(\pm ik_z L\right) = 1.$$

აქედან გამომდინარეობს, რომ $k_i L\,(i = 1,\ 2,\ 3)$ უნდა იყოს 2π-ს მთელი ჯერადი და, მაშასადამე, გვექნება:

$$k_x = \frac{2\pi}{L}\,n_x,\qquad k_y = \frac{2\pi}{L}\,n_y,\ k_z = \frac{2\pi}{L}\,n_z, \tag{58,6}$$

სადაც n_x, n_y, n_z მთელი რიცხვებია. ამრიგად აღნიშნულ სასაზღვრო პირობებში სპექტრი გამოდის დისკრეტული. მართლაც, (58,2) ფორმულის თანახმად, ენერგიისათვის გვექნება

$$E_{n_x n_y n_z} = \left(\frac{2\pi}{L}\right)^2 \frac{\hbar^2}{2\mu}\,(n_x^2 + n_y^2 + n_z^2). \tag{58,7}$$

ამ შემთხვევაში სპექტრი დისკრეტულია. მაგრამ აშკარაა, როცა კუბის ზომას ვადიდებთ, მაშინ საკუთარი მნიშვნელობები ნებისმიერად შეიძლება დაუახლოვდნენ ერთმანეთს; ასე რომ, როცა $L \to \infty$, დისკრეტული სპექტრი გადადის უწყვეტ სპექტრში. იმ შემთხვევაში, როცა L საკმარისად დიდია, ენერგიის მცირე ინტერვალში მოთავსებული იქნება ენერგეტულ დონეთა დიდი რიცხვი. როცა საქმე გვაქვს დონეთა დიდ სიმკვრივესთან, საზოგადოდ, ნაკლებად მნიშვნელოვანია ნაწილაკის ინდივიდუალური მდგომარეობანი; ამ შემთხვევაში საინტერესოა დონეთა ის ჯგუფები, რომლებიც შედგენილია ერთმანეთთან ახლოს მყოფ ცალკეულ მდგომარეობათაგან. ინდივიდუალური მდგომარეობების განსასხვავებლად დაგვჭირდებოდა აბსოლუტურად ზუსტი გაზომვები. ხოლო დადგენა სისტემის არსებობისა გარკვეული ზუსტობით მდგომარეობებისაგან შედგენილ მცირე ჯგუფში, მოითხოვს ნაკლებად ზუსტ გაზომვებს. ჩვენი მიზანია, გამოვთვალოთ კვანტურ მდგომარეობათა რიცხვი ასეთ ჯგუფებში, ე. ი. იმ მდგომარეობათა რიცხვი, რომლებიც მოთავსებულია ენერგიის $(E,\ E + dE)$ ინტერვალში.

ისევე როგორც კლასიკურ ფიზიკაში, ხელსაყრელია p_x, p_y, p_z იმპულსთა სივრცეზე გადასვლა. თითოეული წერტილი ამ სივრცეში შეესაბამება განსაზღვრულ იმპულსის ვექტორს. (58,6) ფორმულიდან გამოდის, რომ კვანტური მეჭა-

ნიკით დასაშვები მომენტის მნიშვნელობები ქმნიან წერტილების მესერს იმპულსთა სივრცეში კოორდინატებით:

$$\frac{2\pi\hbar}{L}n_x,\quad \frac{2\pi\hbar}{L}n_y,\quad \frac{2\pi\hbar}{L}n_z; \tag{58,8}$$

მაშინ ცხადია, რომ ერთეულოვანი უჯრედის მოცულობა, ე. ი. ერთი მდგომარეობის შესაბამისი მოცულობა, იქნება

$$\left(\frac{2\pi\hbar}{L}\right)^3, \tag{58,9}$$

ხოლო მდგომარეობათა რიცხვი, რომელიც მოდის იმპულსთა სივრცის $dp = dp_x dp_y dp_z$ ელემენტარულ მოცულობაზე, განისაზღვრება ფორმულით

$$\rho(p)dp = \left(\frac{L}{2\pi\hbar}\right)^3 dp. \tag{58,10}$$

ან, რადგან $dp = p^2 dp d\Omega$, გვექნება

$$\rho(p)dp = \rho(p)p^2 dp d\Omega = \left(\frac{L}{2\pi\hbar}\right)^3 p^2 dp d\Omega = \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 k^2 dk d\Omega.$$

მდგომარეობათა რიცხვი, მოსული ენერგიის ერთეულზე იმპულსის ყველა მიმართულების ჩათვლით, იქნება

$$\rho(p) = \frac{4\pi L^3}{(2\pi\hbar)^3}\frac{p^2 dp}{dE}; \tag{58,11}$$

რადგან $p = k\hbar$, ამიტომ მდგომარეობათა სიმკვრივე ენერგიის dE ინტერვალში, ტალღური ვექტორის ყველა მიმართულების ჩათვლით, ასე დაიწერება

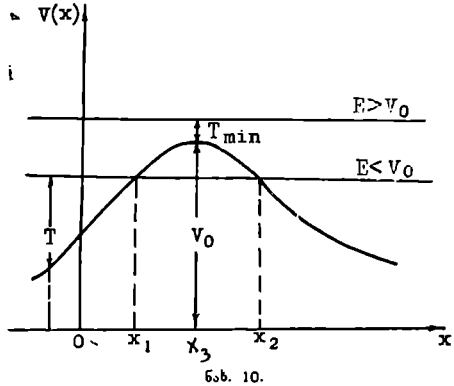
$$\rho(k) = \frac{4\pi L^3}{(2\pi)^3}\frac{k^2 dk}{dE}; \tag{58,12}$$

§ 59. პოტენციალური ჯებირი

პოტენციალური ორმოს საწინააღმდეგო შემთხვევას წარმოადგენს პოტენციალური ჯებირი. იგი იმით ხასიათდება, რომ სივრცის გარკვეულ ადგილას პოტენციალური ენერგია დადებითია, და, მაშასადამე, სრული ენერგიაც ამ ადგილას დადებითია $E > 0$. ამიტომ, პოტენციალური ჯებირის შემთხვევაში აზრი არა აქვს ნაწილაკის დისკრეტულ ენერგეტულ დონეებზე ლაპარაკს. ნაწილაკს პოტენციალური ჯებირის შიგნით არ შეუძლია მდგრადი მდგომარეობის შექმნა. მაგალითად, დადებითად დამუხტული ნაწილაკისათვის პოტენციალურ ჯებირს ქმნის მეორე, აგრეთვე დადებითად დამუხტული ნაწილაკი. ასევე უარყოფითად დამუხტული ნაწილაკით შექმნილი ველი წარმოადგენს პოტენციალურ ჯებირს სხვა რომელიმე უარყოფითი ნაწილაკისათვის და სხვა. განვიხილოთ ერთ განზომილებიანი პოტენციალური ჯებირი (ნახ. 10) და გამოვარკვიოთ ნაწილაკის მოძრაობის საკითხი ამ ჯებირის მახლობლად როგორც კლასიკური, ისე კვანტური მექანიკის თანახმად. პოტენციალური ენერგიის მაქსიმალურ მნიშვნელობას უწოდებენ ჯებირის სიმაღლეს. აღვნიშნოთ იგი V_0-ით. განვიხილოთ ორი შემთხვევა:

1. როცა ნაწილაკის სრული ენერგია E ნაკლებია პოტენციალური ჯებირის სიმაღლეზე, მისი სიჩქარე ჯებირის მარცხნიდან მიახლოებისას კლასიკური მექანიკის თანახმად თანდათან მცირდება (რადგან კინეტიკური ენერგია T თანდათან

მცირდება) და ბოლოს (x_1 წერტილში) სიჩქარე ნულის ტოლი ხდება, რადგან ამ წერტილში $E=V(x_1)$ და, მაშასადამე, $T=0$. x_1-ს ეწოდება მობრუნების წერტილი. x_1 წერტილიდან ნაწილაკი უსათუოდ უკან უნდა დაბრუნდეს, რადგან მისი სიჩქარე ნულია და მასზე კი მოქმედებს საწინააღმდეგოდ მიმართული ძალა. ნაწილაკი ჯებირის შიგნით რომ შესულიყო, მისი სიჩქარე წარმოსახვითი სიდიდე გახდებოდა, რაც უაზრობაა.



ნახ. 10.

2. როცა $E>V_0$, მაშინ კლასიკური მექანიკის თანახმად ნაწილაკის სიჩქარე ჯებირის მარცხნიდან მიახლოებისას თანდათან მცირდება, მაღწევს მინიმუმს იქ სადაც პოტენციალურ ჯებირს აქვს მაქსიმუმი (წერტილი x_3), რის შემდეგაც იგი ჯებირის მეორე მხარეს მოხვდება და მისი სიჩქარე თანდათან მოიმატებს. ამგვარად, კლასიკური მექანიკის თანახმად, ნაწილაკს ჯებირის გადალახვა მხოლოდ მაშინ შეუძლია, როცა მისი სრული ენერგია ჯებირის სიმაღლეზე მეტია.

მაგრამ ექსპერიმენტები გვიჩვენებს, რომ პოტენციალურ ჯებირში ნაწილაკს მაშინაც შეუძლია გავლა, როცა მისი სრული ენერგია ჯებირის სიმაღლეზე ნაკლებია. ამ მოვლენას უწოდეს გვირაბის ეფექტი. იგი ახსნილ იქნა კვანტურ მექანიკაში. ეს უკანასკნელი ჯებირში გავლის მოვლენას სულ სხვანაირად წყვეტს. კვანტურ მექანიკაში ნაწილაკის ტრაექტორიას აზრი არა აქვს; ამიტომ ჩვენ არ შეგვიძლია აღვწეროთ ნაწილაკის მოძრაობა ყოველ შემდგომ მომენტში. კვანტური მექანიკა არკვევს, თუ როგორია ალბათობა იმისა, რომ ნაწილაკი მოცემული ენერგიით, რომელიც იმყოფება ჯებირის მარცხნივ, აღმოჩნდება მის მარჯვნივ. შრედინგერის განტოლების ამოხსნისას მიღებული ტალღური ფუნქცია ჯებირის მარცხნივ მოძრავი ნაწილაკისა ისეთია, რომ იგი არ ისპობა არც ჯებირის მარჯვნივ. ამიტომ, ალბათობა იმისა, რომ ნაწილაკი, რომელიც ჯებირს ეცემოდა მარცხნიდან, აღმოჩნდება მარჯვნივ, ნულის ტოლი არ არის. ასევე, გარკვეული ალბათობით ნაწილაკი შეიძლება აირეკლოს მაშინაც კი, როცა მისი ენერგია ჯებირის სიმაღლეზე მეტია. ამგვარად, წინააღმდეგ კლასიკური მექანიკისა, კვანტური მექანიკიდან გამომდინარეობს, რომ როცა $E<V_0$, არსებობს გარკვეული ალბათობა იმისა, რომ ნაწილაკი მოხვდება ჯებირის მეორე მხარეს, ასევე არსებობს გარკვეული ალბათობა ნაწილაკის პოტენციალური ჯებირიდან არეკლისა მაშინაც კი, როცა სრული ენერგია მეტია პოტენციალური ჯებირის სიმაღლეზე.

შეიძლებოდა გვეფიქრა, რომ კვანტურ მექანიკაშიაც ჯებირის შიგნით მიეღებოდით წარმოსახვით სიჩქარეს, მაგრამ ეს ასე არ არის. მართლაც, საქმე იმაშია, რომ როგორც ზემოთ აღვნიშნეთ, კვანტურ მექანიკაში, წინააღმდეგ კლასიკური მექანიკისა, სრული ენერგია იზომება როგორც ერთი მთლიანი სიდიდე და იგი არ განიზომება როგორც კინეტიკური და პოტენციალური ენერგიების ჯამი.

ამგვარად, კინეტიკური მექანიკის თანახმად, ჯებირზე დაცემული ნაწილაკი შეიძლება აირეკლოს, ან ჯებირის მეორე მხარეზე გაიჟონოს. ნაწილაკთა არეკლას

და გავლას პოტენციალურ ჯებირში, ოპტიკის ანალოგიით, ახასიათებენ არეკვლისა და გაჟონვის კოეფიციენტებით, რომლებიც შესაბამისად ასე განიმარტება:

$$R=\frac{|J_R|}{|J|}, \quad D=\frac{|J_D|}{|J|}, \tag{59,1}$$

სადაც J დაცემულ ნაწილაკთა ნაკადია, J_R და J_D კი არეკვლილი და გასული ნაწილაკთა ნაკადებია სათანადოდ. რათა გასაგები გახდეს ჯებირში გაელის საკითხი, განვიხილოთ კერძო შემთხვევა, როცა პოტენციალურ ჯებირს აქვს შემდეგი სახე:

$$V=\begin{cases} V_0, & x\geqslant 0 \\ 0, & x<0. \end{cases} \tag{59,2}$$

როგორც ვხედავთ, ჯებირს აქვს სასრულო V_0 სიმაღლე და უსასრულო სიგანე (ნახ. 11). განვიხილოთ ის შემთხვევა, როცა ჯებირს დაეცემა ისეთი ნაწილაკები, რომელთა ენერგია მეტია V_0-ზე. ისევე, როგორც პოტენციალური ორმოს შემთხვევაში, აქაც საჭიროა დაიწეროს შრედინგერის განტოლება ორი არისათვის ($-\infty$, 0) და (0, ∞). გვექნება:

$$\begin{aligned} &\psi_1''(x)+k^2\psi_1(x)=0, && -\infty\leqslant x\leqslant 0 \\ &\psi_2''(x)+\beta^2\psi_2(x)=0, && 0<x<\infty \end{aligned} \tag{59,3}$$

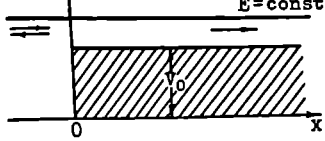
სადაც

$$k^2=\frac{2\mu E}{\hbar^2}, \quad \beta^2=\frac{2\mu(E-V_0)}{\hbar^2}. \tag{59,4}$$

ზოგად ამოხსნებს ექნება შემდეგი სახე:

$$\begin{aligned} &\psi_1(x)=Ae^{ikx}+Be^{-ikx}, && -\infty\leqslant x<0 \\ &\psi_2(x)=Ce^{i\beta x}+De^{-i\beta x}. && 0<x\leqslant\infty \end{aligned} \tag{59,5}$$

$\psi_1(x)$ წარმოადგენს ორი ტალღის ჯამს; პირველი გამოხატავს x ღერძის მიმართულებით მოძრავ ტალღას, მეორე კი—საწინააღმდეგო მიმართულებით მოძრავს. ვთქვათ, ნაწილაკები ეცემა მარცხნიდან მარჯვნივ; მაშინ $\psi=Ae^{ikx}$ შეესაბამება დაცემულ ნაკადს. ექსპერიმენტების პირობები ცალსახად განსაზღვრავს A მუდმივს, რადგან მოცემული უნდა იყოს ნაწილაკთა ის რიცხვი, რომელიც ეცემა ჯებირს. დაცემული ტალღის ნორმირებას ისე ირჩევენ, რომ მოცულობის ერთეულში მოდიოდეს ერთი ნაწილაკი, ე. ი. იღებენ $A=1$. ასევე აშკარაა, რომ $\psi_R=Be^{-ikx}$ იქნება არეკვლილი ტალღა, ხოლო $\psi_D=Ce^{i\beta x}$—გასული ტალღა. გასაგებია, რომ D უნდა იყოს ნულის ტოლი, რადგანაც (0, ∞) შუალედში არეკვლილი ტალღა არ გვექნება; ასე რომ



ნახ. 11.

$$\begin{aligned} &\psi_1(x)=e^{ikx}+Be^{-ikx}, \\ &\psi_2(x)=Ce^{i\beta x}. \end{aligned} \tag{59,5'}$$

ახლა განვსაზღვროთ დაცემული, არეკვლილი და გასული ტალღების ნაკადები. ამ მიზნით გამოვიყენოთ (53,26) ფორმულა. გვექნება

$$J=\frac{p}{\mu}\,|\,\psi\,|^2=\frac{k\hbar}{\mu}, \tag{59,6}$$

$$J_R=-\frac{p}{\mu}\,|\,\psi_R|^2=-\frac{k\hbar}{\mu}\,|\,B|^2. \tag{59,7}$$

$$J_D=\frac{p}{\mu}\,|\,\psi_D|^2=\frac{\beta\hbar}{\mu}\,|\,C\,|^2, \tag{59,8}$$

სადაც $p=\beta\hbar$ ჯებირში გასული ნაწილაკის იმპულსია. მაშასადამე, არეკლისა და გაჟონვის კოეფიციენტებისათვის გვექნება:

$$R=|B|^2;\quad D=\frac{\beta}{k}\,|\,C\,|^2; \tag{59,9}$$

ამგვარად, არეკლისა და გაჟონვის კოეფიციენტების განსასაზღვრავად საკმარისია B და C კოეფიციენტების მოძებნა. ეს კოეფიციენტები განისაზღვრება $x=0$ წერტილზე ψ_1 და ψ_2 ტალღური ფუნქციების შეკერვის პირობიდან. (59,5) ფორმულა მოგვცემს:

$$\begin{aligned}&1+B=C,\\&k-kB=\beta C,\end{aligned} \tag{59,10}$$

საიდანაც

$$C=\frac{2k}{k+\beta},\quad B=\frac{k-\beta}{k+\beta} \tag{59,11}$$

თუ ამ მნიშვნელობებს შევიტანთ (59,9)-ში, მივიღებთ:

$$R=\left(\frac{k-\beta}{k+\beta}\right)^2\qquad D=\frac{4\beta k}{(k+\beta)^2}. \tag{59,12}$$

აშკარაა, რომ $R+D=1$. განვიხილოთ კერძო შემთხვევები. ვთქვათ, $E=V_0$, მაშინ $\beta=0$ და, მაშასადამე, $R=1$ და $D=0$. ეს ასეც უნდა ყოფილიყო; რადგან პოტენციალური ჯებირის სიგანე უსასრულოა, ყველა დაცემული ნაწილაკი აირეკლება. ასევე, როცა $V_0\to\infty$, $R=1$ და $D=0$, რაც აგრეთვე გასაგებია ფიზიკურად.

განხილული შემთხვევიდან ადვილად შეიძლება გადავიდეთ $E<V_0$ შემთხვევაზე, ამისათვის, როგორც ჩანს (59,4) ფორმულებიდან, საკმარისია ზევით მიღებულ გამოსახულებებში მოვახდინოთ შეცვლა $k\to k$, $\beta\to i\beta$. ამ შეცვლის შედეგად (59,11) ფორმულები მიიღებს სახეს:

$$C=\frac{2k}{k+i\beta},\quad B=\frac{k-i\beta}{k+i\beta}, \tag{59,13}$$

ამასთან ცხადია, რომ $|\,B\,|^2=1$; ეს კი იმას ნიშნავს, რომ დაცემული და არეკლილი ნაწილაკების ინტენსივობანი ერთმანეთის ტოლია, ე. ი. ადგილი აქვს სრულ არეკლას. რაც შეეხება გაჟონვის კოეფიციენტს, იგი ნულის ტოლი იქნება. ეს ასეც უნდა ყოფილიყო, რადგან $E<V_0$ შემთხვევაში გასული ტალღა

$$\psi_2=Ce^{-\beta x} \tag{59,14}$$

ნამდვილი ფუნქციაა და, მაშასადამე, გასული ნაწილაკების ნაკადი $J_D=0$. კლასიკური მექანიკით დაუშვებელ არეში, ე. ი. $(0,\ \infty)$ არეში, ალბათობის სიმკვრივე მოიცემა ფორმულით

$$W_D = |\psi_2|^2 = |C|^2 e^{-2\beta x} = \frac{4k^2}{\beta^2 + k^2} e^{-2\beta x} \tag{59,15}$$

ან, თუ შევიტანთ k და β-ს მნიშვნელობებს, მივიღებთ

$$W_D = \left(\frac{4E}{V_0}\right) \exp\left(-\frac{2}{\hbar}\sqrt{2\mu(V_0 - E)}\, x\right). \tag{59,16}$$

როცა $x \to \infty$ ალბათობა ექსპონენციალურად მიისწრაფვის ნულისაკენ. ცხადია, რომ იგივე ფორმულით მოიცემა ფარდობითი ალბათობა $|\psi_2(x)|^2 / |\psi_{\text{ბად}}|^2$.

§ 60. ოსცილატორის ამოცანა

ოსცილატორის ამოცანა დიდ როლს ასრულებს თანამედროვე ფიზიკის სხვადასხვა საკითხების შესწავლის დროს, ამიტომ მას დაწვრილებით განვიხილავთ[1]. ამასთან, ამ ამოცანას ჩვენ ამოვხსნით როგორც შრედინგერის, ისე ჰაიზენბერგის მეთოდით.

მდგრადი წონასწორობის ირგვლივ რხევად ნაწილაკს ეწოდება ოსცილატორი. როგორც მექანიკიდანაა ცნობილი, ერთგანზომილებიანი ოსცილატორის პოტენციალური ენერგია ტოლია

$$V(x) = \frac{\beta x^2}{2}, \tag{60,1}$$

სადაც $\beta = \mu\omega^2$. μ ოსცილატორის მასაა ω კი — კლასიკური სიხშირე. კლასიკური მექანიკის თანახმად, ოსცილატორის სრული ენერგია უდრის

$$E = \frac{\mu a^2 \omega^2}{2}, \tag{60,2}$$

სადაც a რხევის ამპლიტუდაა. ამ ფორმულიდან ჩანს, რომ კლასიკური ოსცილატორის ენერგია შეიძლება იყოს ნებისმიერი სიდიდე.

როცა ოსცილატორის პოტენციალურ ენერგიას (60,1) სახე აქვს, მაშინ ოსცილატორს წრფივ ჰარმონიულს უწოდებენ. ხოლო როცა პოტენციალური ენერგია

$$V(x, y, z) = \frac{1}{2}\{\beta_1 x^2 + \beta_2 y^2 + \beta_3 z^2\}, \tag{60,3}$$

მაშინ ოსცილატორს სივრცით ანიზოტროპული ჰქვია. ასეთ შემთხვევაში ოსცილატორის სიხშირე ყველა ღერძის მიმართ სხვადასხვაა. კერძო შემთხვევაში, როცა $\beta_1 = \beta_2 = \beta_3 \equiv \beta$, მივიღებთ სივრცით იზოტროპულ ოსცილატორს. მისი პოტენციალური ენერგია ტოლია

$$V(r) = \frac{\beta}{2}(x^2 + y^2 + z^2) = \frac{\beta r^2}{2}. \tag{60,4}$$

წრფივი ჰარმონიული ოსცილატორი. ჯერ განვიხილოთ წრფივი ჰარმონიული ოსცილატორი. შრედინგერის განტოლება, ერთგანზომილებიანი ოსცილატორისათვის, რომლის პოტენციალური ენერგია (60,1) ფორმულით განისაზღვრება, ასე ჩაიწერება:

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \frac{2\mu}{\hbar^2}\left(E - \frac{\beta x^2}{2}\right)\psi(x) = 0. \tag{60,5}$$

---

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

რადგან ოსცილატორი სასრულო არეში ირხევა, მისი მოხვედრის ალბათობა $x=\pm\infty$-ში ნულის ტოლი უნდა იყოს; ამიტომ ტალღური ფუნქციისათვის გვექნება შემდეგი სასაზღვრო პირობა:

$$\psi(\pm\infty)=0. \tag{60,6}$$

თუ შემოვიღებთ აღნიშვნებს:

$$k^2=\frac{2\mu E}{\hbar^2}, \quad \alpha^2=\frac{\beta\mu}{\hbar^2}=\left(\frac{\mu\omega}{\hbar}\right)^2, \tag{60,7}$$

მაშინ შრედინგერის (60,5) განტოლება ასე გადაიწერება.

$$\frac{d^2\psi}{dx^2}+(k^2-\alpha^2x^2)\psi=0. \tag{60,8}$$

ჯერჯერობით ვიპოვოთ ამ განტოლების ასიმპტოტური ამონახსნი დიდი x-ებისათვის. დავუშვათ, x იმდენად დიდია, რომ შესრულებულია პირობა

$$\alpha x^2\gg k \text{ ან } x\gg\sqrt{\frac{2E}{\mu\omega^2}}, \tag{60,9}$$

მაშინ მივიღებთ განტოლებას

$$\frac{d^2\psi}{dx^2}-\alpha^2x^2\psi=0, \tag{60,10}$$

რომელსაც (60,9) პირობის გათვალისწინებით აკმაყოფილებს $\psi(x)=\exp\left(\pm\frac{1}{2}\alpha x^2\right)$ ფუნქცია. მაგრამ სასაზღვრო პირობას ვერ დავაკმაყოფილებთ, თუ „+“ ნიშანს ავიღებთ, ამიტომ სწორ ასიმპტოტურ ამონახსნს ექნება სახე

$$\psi(x)=e^{-\frac{1}{2}\alpha x^2} \tag{60,11}$$

(60,8) განტოლების ამონახსნი x-ის ყველა მნიშვნელობებისათვის ვეძებოთ შემდეგნაირად:

$$\psi(x)=CH(x)e^{-\frac{1}{2}\alpha x^2} \tag{60,12}$$

სადაც C მუდმივია, ხოლო $H(x)$ ახალი საძიებელი ფუნქცია. თუ (60,12) ფუნქციას შევიტანთ (60,8)-ში, $H(x)$ ფუნქციისათვის მივიღებთ განტოლებას

$$\frac{d^2H(x)}{dx^2}-2\alpha x\frac{dH(x)}{dx}+(k^2-\alpha)H(x)=0. \tag{60,13}$$

შემოვიღოთ ახალი ცვლადი

$$\xi=\sqrt{\alpha}x, \tag{60,14}$$

მაშინ (60,13) შემდეგნაირად გადაიწერება:

$$\frac{d^2H(\xi)}{d\xi^2}-2\xi\frac{dH(\xi)}{d\xi}+(\rho-1)H(\xi)=0, \tag{60,15}$$

სადაც

$$\rho=\frac{k^2}{\alpha} \tag{60,16}$$

ახალ ცვლადებში (60,12)-ს ექნება სახე

$$\psi(\xi)=CH(\xi)e^{-\frac{1}{2}\xi^2} \tag{60,17}$$

$\xi=0$ წერტილი არ წარმოადგენს (60,15) განტოლების განსაკუთრებულ წერტილს, ამიტომ ამონახსნი შეგვიძლია ვეძებოთ შემდეგი მწკრივის სახით:

$$H(\xi)=\sum_{\nu=0}^{\infty} a_\nu \xi^\nu. \tag{60,18}$$

თუ $H(\xi)$ ამ გამოსახულებას შევიტანთ (60,15)-ში, მივიღებთ

$$\sum_{\nu=0}^{\infty} \nu(\nu-1)\, a_\nu \xi^{\nu-2}+\sum_{\nu=0}^{\infty}(-2\nu+\rho-1)\, a_\nu \xi^\nu=0. \tag{60,19}$$

როცა $\nu=0$ და $\nu=1$, პირველი ჯამი ნულის ტოლია; ასე რომ, აჯამვა ამ წევრში შეგვიძლია დავიწყოთ $\nu=2$-დან; თუ ამის შემდეგ ჯამში ν-ს შევცვლით $(\nu+2)$-ით, გვექნება

$$\sum_{\nu=0}^{\infty}[(\nu+2)(\nu+1)\, a_{\nu+2}+(\rho-2\nu-1)\, a_\nu]\xi^\nu=0. \tag{60.20}$$

ხარისხოვანი მწკრივი ნულის ტოლია, როცა ξ-ს ნებისმიერი ხარისხის კოეფიციენტი ნულს უდრის. ξ^ν-ს კოეფიციენტის ნულთან ტოლობა მოგვცემს შემდეგ რეკურენტულ ფორმულას a_ν კოეფიციენტების განსასაზღვრავად:

$$a_{\nu+2}=\frac{2\nu-\rho+1}{(\nu+2)(\nu+1)}a_\nu. \tag{60,21}$$

ამ ფორმულით ვიპოვით (60,18) მწკრივის კოეფიციენტებს. ამასთან აღსანიშნავია, რომ $H(\xi)$ ფუნქციისათვის ჩვენ ვიპოვით ორ მწკრივს: ერთს, რომელიც შეიცავს ξ-ს მხოლოდ ლუწ ხარისხებს, ამ მწკრივის ყველა კოეფიციენტს განვსაზღვრავთ (60,21) რეკურენტული ფორმულიდან a_0-ის საშუალებით და, მეორეს, რომელიც შეიცავს ξ-ს მხოლოდ კენტ ხარისხებს; ამ უკანასკნელის კოეფიციენტებსაც (60,21) რეკურენტული ფორმულიდან ვიპოვით a_1-ის საშუალებით. a_0 და a_1 კოეფიციენტებს კი განესაზღვრავთ ნორმირების პირობიდან.

როცა $\xi\to\infty$, მაშინ ჩვენს მიერ ნაპოვნი (60,18) მწკრივი ისე უნდა იქცეოდეს, რომ (60,17) ფუნქცია აკმაყოფილებდეს (60,6) სასაზღვრო პირობას. ამისათვის შევისწავლოთ $H(\xi)$ მწკრივის ბუნება, როცა $\xi\to\infty$. გამოვიკვლიოთ ამ მწკრივის დაშორებული წევრების ყოფაქცევა. როცა $\nu\gg 1$ (60,21)-დან მივიღებთ

$$\frac{a_{\nu+2}}{a_\nu}=\frac{2\nu-\rho+1}{(\nu+2)(\nu+1)}\approx\frac{2}{\nu};\quad(\nu\gg 1), \tag{60,22}$$

ახლა განვიხილოთ შემდეგი მწკრივი:

$$e^{\xi^2}=1+\frac{\xi^2}{1!}+\frac{\xi^4}{2!}+\ldots+\frac{\xi^{2\nu}}{\nu!}+\frac{\xi^{2\nu+2}}{(\nu+1)!}+\ldots+ \tag{60,23}$$

ვიპოვოთ (60,22)-ის ანალოგიური ფარდობა ამ მწკრივისათვის; (60,23) მწკრივის შემთხვევაში $a_\nu=1\Big/\left(\frac{\nu}{2}\right)!$, როცა ν ლუწია, ხოლო $a_\nu=0$ კენტი ν-ებისათვის. მაშასადამე,

$$\frac{a_{\nu+2}}{a_\nu}\approx\frac{2}{\nu} \tag{60,24}$$

ჩვენ ვხედავთ, რომ უსასრულობაში (60,18) მწკრივი ისე იქცევა, როგორც e^{ξ^2} ფუნქცია, ხოლო თვით $\psi(\xi)$ ტალღური ფუნქცია (60,17) ფორმულის თანახმად $\xi=\pm\infty$ მნიშვნელობებისათვის მიიღებს სახეს

$$\psi(\xi)\sim e^{-\xi^2/2}\, e^{\xi^2}=e^{\xi^2/2} \tag{60,25}$$

რომელიც არ აკმაყოფილებს სასაზღვრო პირობას.

ამიტომ აშკარაა, აუცილებელია (60,18) მწკრივის ზემოდან ჩამოჭრა და მისი პოლინომად გადაქცევა. მაშინ ξ-ს $\pm\infty$-საკენ მისწრაფებისას $e^{-\xi^2/2}$ მამრავლის გამო (60,17) ფუნქცია ნულს გაუტოლდება და სასაზღვრო პირობა დაკმაყოფილდება. მაშასადამე, დავუშვათ ν-ს რაღაც ზღვრული მნიშვნელობისათვის $\nu=n$, $a_{n+2}=0$, ხოლო $a_n\neq 0$. ცხადია, მაშინ ყველა შემდგომი კოეფიციენტიც ნულს გაუტოლდება და მწკრივი პოლინომად გადაიქცევა. (60,21) რეკურენტული ფორმულიდან $a_{n+2}=0$ და $a_n\neq 0$ პირობების მოთხოვნით გვექნება

$$2n-\rho+1=0. \tag{60,26}$$

თუ ამ უკანასკნელში შევიტანთ $\rho=k^2/\alpha=2E/\hbar\omega$, მივიღებთ

$$E_n=\hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right), \tag{60,27}$$

სადაც $n=0,\ 1,\ 2,\ldots$ მთელი რიცხვია. ჩვენ ვხედავთ, რომ წრფივი ჰარმონიული ოსცილატორის ენერგია იკვანტება. ენერგიას შეუძლია მიიღოს მხოლოდ მკაცრად განსაზღვრული დისკრეტული მნიშვნელობები:

$$\frac{1}{2}\hbar\omega,\ \frac{3}{2}\hbar\omega,\ \frac{5}{2}\hbar\omega,\ \frac{7}{2}\hbar\omega,\ldots \tag{60,28}$$

ენერგიის მნიშვნელობები განლაგებულია ე. წ. ენერგეტიკული დონეების მიხედვით, რომელთა შორის ინტერვალი ერთი და იგივეა და უდრის $\hbar\omega$-ს. n-ს უწოდებენ მთავარ კვანტურ რიცხვს: როცა $n=0$, მაშინ მდგომარეობას უწოდებენ ძირითადს, როცა $n=1$, მაშინ მდგომარეობას ჰქვია პირველი აგზნებული მდგომარეობა და ა. შ.

აღსანიშნავია, რომ წრფივი ჰარმონიული ოსცილატორისათვის (60,27) ფორმულა პოსტულირებული იყო პლანკის მიერ, კვანტურ მექანიკაში კი იგი მიიღება შრედინგერის განტოლების ამოხსნით გარკვეულ სასაზღვრო პირობებში. ახლა ვიპოვოთ ოსცილატორის ტალღური ფუნქცია. ამისათვის გვჭირდება $H(\xi)$ პოლინომის ცხადი სახის დადგენა, რომელიც შეგვიძლია განვახორციელოთ (60,21) რეკურენტული ფორმულის დახმარებით (60,26) პირობის გათვალისწინებით. მაგრამ ეს გზა ჩვენ შეგვიძლია შევცვალოთ უფრო მარტივით. (60,26) პირობის გათვალისწინებით (60,15) დიფერენციალური განტოლება მიიღებს სახეს

$$\frac{d^2H_n(\xi)}{d\xi^2}-2\xi\frac{dH_n(\xi)}{d\xi}+2nH_n(\xi)=0. \tag{60,29}$$

ამ განტოლებას ჩებიშევ-ერმიტის განტოლებას უწოდებენ, $H_n(\xi)$-ს კი—ჩებიშევ-ერმიტის პოლინომს. რადგან განტოლებაში შემოვიდა n-მთელი რიცხვი, ამიტომ ცხადია ამონახსნი ამ რიცხვზე იქნება დამოკიდებული. ქვემოთ ჩვენ მოვიყვანთ ჩებიშევ-ერმიტის განტოლების ამოხსნის ფორმალურ გზას.

განვიხილოთ ფუნქცია $u(\xi)=e^{-\xi^2}$. ვიპოვოთ მისი წარმოებული; გვექნება

$$\frac{du}{d\xi}=-2\xi u(\xi). \tag{60,30}$$

ეს ტოლობა გავაწარმოოთ $(n+1)$-ჯერ. თუ მარჯვენა მხარეში ნამრავლის წარმოებულისათვის გამოვიყენებთ ლაიბნიცის ფორმულას, მივიღებთ

$$\frac{d^{n+2}u}{d\xi^{n+2}} = -2\xi\frac{d^{n+1}u}{d\xi^{n+1}} - 2(n+1)\frac{d^n u}{d\xi^n}, \tag{60,31}$$

ანდა

$$\frac{d^{n+2}u}{d\xi^{n+2}} + 2\xi\frac{d^{n+1}u}{d\xi^{n+1}} + 2(n+1)\frac{d^n u}{d\xi^n} = 0. \tag{60,32}$$

შემოვიღოთ ახალი ფუნქცია $v_n(\xi) = e^{\xi^2}\frac{d^n u}{d\xi^n}$ და ვაჩვენოთ, რომ მისთვის ადგილი აქვს (60,29) განტოლებას. აშკარაა, რომ

$$v_n(\xi) = e^{\xi^2}\frac{d^n}{d\xi^n}e^{-\xi^2} \tag{60,33}$$

არის n რიგის პოლინომი. თუ ახლა

$$\frac{d^n u}{d\xi^n} = e^{-\xi^2}v_n(\xi)$$

გამოსახულებას შევიტანთ (60,32)-ში, მივიღებთ

$$v_n'' - 2\xi v_n' + 2nv_n = 0, \tag{60,34}$$

რომელიც ზუსტად ემთხვევა (60,29) განტოლებას. ამგვარად, (60,33) პოლინომი წარმოადგენს ჩებიშევ-ერმიტის განტოლების ამონახსნს. შეიძლება ჩვენება, რომ (60,29) განტოლების მეორე ამონახსნი არ შეიძლება პოლინომს წარმოადგენდეს და, მაშასადამე, იგი ვერ დააკმაყოფილებს სასაზღვრო პირობას. იმისათვის, რომ (60,33) ამონახსნში უდიდესი ხარისხის წევრი დადებითი იყოს, გავამრავლოთ იგი $(-1)^n$-ზე და ერმიტის პოლინომი განვსაზღვროთ შემდეგი ფორმულით:

$$H_n(\xi) = (-1)^n e^{\xi^2}\frac{d^n}{d\xi^n}e^{-\xi^2}. \tag{60,35}$$

დავწეროთ ერმიტის პოლინომების გამოხატულება n-ის რამდენიმე მნიშვნელობისათვის:

$$\begin{aligned} H_0(\xi) &= 1, \\ H_1(\xi) &= 2\xi, \\ H_2(\xi) &= (2\xi)^2 - 2, \\ H_3(\xi) &= (2\xi)^3 - 12\xi, \\ H_4(\xi) &= (2\xi)^4 - 48\xi^2 + 12. \end{aligned} \tag{60,36}$$

როგორც ვხედავთ, $H_n(\xi)$-ის მაქსიმალური ხარისხი არის $(2\xi)^n$. ამიტომ გვექნება მეტად მნიშვნელოვანი ფორმულა

$$\frac{d^n H_n(\xi)}{d\xi^n} = \frac{d^n}{d\xi^n}(2\xi)^n = 2^n n!. \tag{60,37}$$

ამგვარად, წრფივი ოსცილატორის ტალღურ ფუნქციას ექნება შემდეგი სახე:

$$\psi_n(\xi) = C_n e^{-\xi^2/2}H_n(\xi). \tag{60,38}$$

C_n კოეფიციენტის განსასაზღვრავად გამოვიყენოთ ტალღური ფუნქციის ნორმირების პირობა

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_n^*(\xi)\,\psi_n(\xi)\,d\xi = 1, \tag{60,39}$$

თუ შევიტანთ ტალღური ფუნქციის მნიშვნელობას (60,38)-დან მივიღებთ:

$$C_n^2 \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\xi^2} H_n(\xi)\,H_n(\xi)\,d\xi = 1, \tag{60,40}$$

ამ ინტეგრალში შევიტანოთ ერთ-ერთი პოლინომის გამოხატულება (60,35) ფორმულიდან; გვექნება

$$C_n^2 (-1)^n \int_{-\infty}^{+\infty} H_n(\xi) \frac{d^n}{d\xi^n} e^{-\xi^2} d\xi = 1. \tag{60,41}$$

ჩავატაროთ ნაწილობითი ინტეგრაცია; მივიღებთ

$$C_n^2 (-1)^n \left\{ \left[H_n(\xi) \frac{d^{n-1}}{d\xi^{n-1}} (e^{-\xi^2}) \right]_{-\infty}^{+\infty} - \right.$$

$$\left. - \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dH_n(\xi)}{d\xi} \frac{d^{n-1}}{d\xi^{n-1}} (e^{-\xi^2}) d\xi \right\} = 1. \tag{60,42}$$

რადგან $\xi = \pm\infty$ წერტილზე $H_n(\xi)\,e^{-\xi^2}$ ისპობა, ამიტომ ამ გამოსახულების პირველი წევრი მარცხენა მხარეში ნულის ტოლია. თუ ნაწილობით ინტეგრაციას ჩავატარებთ n-ჯერ და გავითვალისწინებთ, რომ თავისუფალი წევრი ყოველთვის მოისპობა, მივიღებთ

$$C_n^2 \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d^n H_n(\xi)}{d\xi^n} e^{-\xi^2} d\xi = 1, \tag{60,43}$$

ან (60,37) ფორმულის გათვალისწინებით შეგვიძლია დავწეროთ

$$C_n^2\, 2^n n! \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\xi^2} d\xi = 1. \tag{60,44}$$

ეს ინტეგრალი კი პუასონის ცნობილი ინტეგრალია; იგი ტოლია $\sqrt{\pi}$; ასე რომ, ნორმირების კოეფიციენტისათვის საბოლოოდ გვექნება

$$C_n = \frac{1}{\sqrt{2^n n!}\sqrt{\pi}}. \tag{60,45}$$

ამგვარად, წრფივი ჰარმონიული ოსცილატორის ნორმირებულ ტალღურ ფუნქციას ექნება შემდეგი სახე:

$$\psi_n(\xi) = \frac{H_n(\xi)}{\sqrt{2^n n!}\sqrt{\pi}} e^{-\xi^2/2}, \tag{60,46}$$

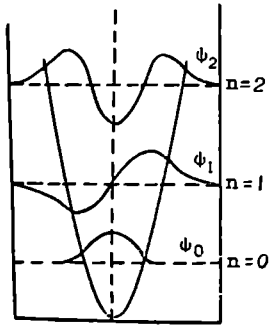
დავწეროთ ფუნქციათა მნიშვნელობა $n = 0,\ 1,\ 2$ შემთხვევაში. (60,36) ფორმულების გათვალისწინებით გვექნება:

$$\psi_0(\xi)=\frac{1}{\sqrt[4]{\pi}}e^{-\xi^2/2},$$

$$\psi_1(\xi)=\frac{\sqrt{2}}{\sqrt[4]{\pi}}\xi e^{-\xi^2/2}, \qquad (60,47)$$

$$\psi_2(\xi)=\frac{\sqrt{2}}{\sqrt[4]{\pi}}(\xi^2-1/2)\,e^{-\xi^2/2}.$$

ნახ. 12-ზე მოცემულია ამ ფუნქციებისა და შესაბამისი ენერგიების გრაფიკები. როგორც ვხედავთ, პირველი ფუნქცია ($n=0$) არსად სასრულო არეში ნული არ ხდება. $\psi_1(\xi)$ კი ნული ხდება, როცა $\xi=0$. $\psi_2(\xi)$ ნული ხდება ორ წერტილში $\xi=\pm 1/\sqrt{2}$ და ა. შ. წერტილებს, სადაც ტალღური ფუნქცია ნული ხდება, უწოდებენ კვანძებს. მაშასადამე, როცა $n=0$ ფუნქციას კვანძი არა აქვს, როცა $n=1$ ტალღურ ფუნქციას ერთი კვანძი აქვს და ა. შ. ზოგადად, რადგან $H_n(\xi)$ პოლინომს აქვს n რაოდენობის ნული, ტალღურ ფუნქციას ექნება n კვანძი. ამგვარად, ოსცილატორის ტალღური ფუნქციის კვანძთა რიცხვი მთავარი კვანტური რიცხვის ტოლია. თანახმად (60.27) ფორმულისა, რაც მეტია კვანძთა რიცხვი მით მეტია ოსცილატორის ენერგია. როგორც აღვნიშნეთ $n=0$ მდგომარეობას ძირითად მდგომარეობას უწოდებენ; მაშასადამე, ძირითად მდგომარეობაში ტალღურ ფუნქციას კვანძი არა აქვს. აღვნიშნოთ, რომ ეს დებულება სამართლიანია ნებისმიერი ერთგანზომილებიანი მოძრაობის შემთხვევაში.



ნახ. 12.

ოსცილატორის ტალღური ფუნქციებით შეგვიძლია ვიპოვოთ ოსცილატორის მდებარეობის განმსაზღვრელი ალბათობები.

დავწეროთ ნორმალური მდგომარეობის ($n=0$) ტალღური ფუნქცია ჩვეულებრივ ცვლადებში ($x=\xi/\sqrt{\alpha}$), გვექნება

$$\psi_0(x)=\sqrt[4]{\frac{\alpha}{\pi}}\,e^{-\frac{\alpha x^2}{2}} \qquad (60,48)$$

(აშკარაა, რომ ეს ფუნქცია ნორმირებულია). ალბათობა იმისა, რომ ნორმალურ მდგომარეობაში მყოფი ოსცილატორის კოორდინატი იყოს $(x,\ x+dx)$ შუალედში, იქნება

$$W_0(x)dx=\sqrt{\frac{\alpha}{\pi}}e^{-\alpha x^2}dx. \qquad (60,49)$$

ეს კი არის გაუსის განაწილების მრუდი. ფლუქტუაციის როლს თამაშობს

$$\overline{(\Delta x)^2}=\frac{1}{2\alpha},\ \text{სადაც}\ \overline{(\Delta x)^2}=\overline{x^2}-\bar{x}^2.$$

დაბოლოს აღვნიშნოთ, რომ $n=0$ შესაბამის ენერგიას $E_0=\frac{\hbar\omega}{2}\neq 0$ ოსცილატორის ნულოვან ენერგიას უწოდებენ.

§ 61. სივრცითი ოსცილატორი

შევისწავლოთ ახლა სივრცითი ოსცილატორის ამოცანა. განვიხილოთ ჯერ სივრცითი ანიზოტროპული ოსცილატორი და შემდეგ მისგან, როგორც კერძო შემთხვევა, მივიღოთ სივრცული იზოტროპული ოსცილატორის შემთხვევა. თანახმად (60,3) ფორმულისა, შრედინგერის განტოლებას ექნება შემდეგი სახე:

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}+\frac{\partial^2\psi}{\partial y^2}+\frac{\partial^2\psi}{\partial z^2}+\frac{2\mu}{\hbar^2}\left\{E-\frac{1}{2}(\beta_1x^2+\beta_2y^2+\beta_3z^2)\right\}\psi=0. \tag{61,1}$$

აქ

$$\beta_i=\mu\omega_i^2,\quad (i=1,\ 2,\ 3). \tag{61,2}$$

ანიზოტროპული ოსცილატორის შემთხვევაში სიხშირე სხვადასხვა ღერძის გასწვრივ სხვადასხვაა. რადგან (61,1) განტოლებაში ყველა ცვლადი სიმეტრიულად შედის, ამიტომ ფურიეს მეთოდით შესაძლებელია ცვლადთა განცალება და სამი ერთი ცვლადის განტოლების მიღება.

(61,1) განტოლების ამოხსნა ვეძებოთ სამი ფუნქციის ნამრავლის სახით, რომელთაგან პირველი მხოლოდ x-ის ფუნქციაა, მეორე—y, მესამე კი z-ის. ე. ი.

$$\psi(x,\ y,\ z)=\psi_1(x)\,\psi_2(y)\,\psi_3(z) \tag{61,3}$$

შევიტანოთ (61,3), (61,1) განტოლებაში და გავყოთ $\psi_1(x)\,\psi_2(y)\,\psi_3(z)$ ნამრავლზე, მივიღებთ

$$\left(\frac{1}{\psi_1}\frac{d^2\psi_1}{dx^2}-\alpha_1^2x^2\right)+\left(\frac{1}{\psi_2}\frac{d^2\psi_2}{dy^2}-\alpha_1^2y^2\right)+$$
$$+\left(\frac{1}{\psi_3}\frac{d^2\psi_3}{dz^2}-\alpha_3^2z^2\right)+\frac{2\mu E}{\hbar^2}=0, \tag{61,4}$$

სადაც

$$\alpha_i=\frac{\sqrt{\mu\beta_i}}{\hbar},\quad i=1,\ 2,\ 3. \tag{61,4'}$$

(61,4) გვიჩვენებს, რომ პირველ ფრჩხილებში მოთავსებული სიდიდე მხოლოდ x-ის ფუნქციაა. მეორე y-ის, მესამე კი z-ის. მათი ჯამი—$\frac{2\mu E}{\hbar^2}$ მუდმივის ტოლი მხოლოდ მაშინ იქნება, როცა თითოეული ფრჩხილებში მოთავსებული სიდიდე მუდმივი იქნება, ე. ი.

$$\begin{aligned}
&\frac{1}{\psi_1}\frac{d^2\psi_1}{dx^2}-\alpha_1^2x^2=c_1,\\
&\frac{1}{\psi_2}\frac{d^2\psi_2}{dy^2}-\alpha_2^2y^2=c_2,\\
&\frac{1}{\psi_3}\frac{d^2\psi_3}{dz^2}-\alpha_3^2z^2=c_3,
\end{aligned} \tag{61,5}$$

სადაც

$$c_1+c_2+c_3=-\frac{2\mu E}{\hbar^2}. \tag{61,5'}$$

მაგრამ, რადგან

$$k^2=\frac{2\mu E}{\hbar^2}=k_x^2+k_y^2+k_z^2 \tag{61,6}$$

წარმოადგენს ტალღური ვექტორის კვადრატს, ამიტომ შეგვიძლია დავასკვნათ:

$$c_1 = -k_x^2,\quad c_2 = -k_y^2,\quad c_3 = -k_z^2,$$

ასე რომ (61,5) მიიღებს შემდეგ სახეს:

$$\frac{d^2\psi_1}{dx^2} + (k_x^2 - \alpha_1^2 x^2)\psi_1 = 0,$$

$$\frac{d^2\psi_2}{dy^2} + (k_y^2 - \alpha_2^2 y^2)\psi_2 = 0, \qquad (61,7)$$

$$\frac{d^2\psi_3}{dz^2} + (k_z^2 - \alpha_3^2 z^2)\psi_3 = 0.$$

თითოეული ამ განტოლებათაგანი კი შეესაბამება წრფივი ჰარმონიული ოსცილატორის ამოცანას. მათი ამონახსნები ნაპოვნი გვაქვს წინა პარაგრაფში, ამიტომ ენერგიისათვის (61,5′) და (60,27) ფორმულების დახმარებით შეგვიძლია დავწეროთ

$$E_{n_1, n_2, n_3} = \hbar\omega_1(n_1 + 1/2) + \hbar\omega_2(n_2 + 1/2) + \hbar\omega_3(n_3 + 1/2). \qquad (61,8)$$

სადაც n_1, n_2, n_3 მთელი დადებითი რიცხვებია.

ანიზოტროპული სივრცითი ოსცილატორის ნორმირებული ტალღური ფუნქციებისათვის (61,3) და (60,46) ფორმულების თანახმად გვექნება

$$\psi_{n_1 n_2 n_3}(\xi, \eta, \zeta) = \frac{H_{n_1}(\xi) H_{n_2}(\eta) H_{n_3}(\zeta)}{\sqrt{2^{n_1+n_2+n_3} n_1! n_2! n_3! \sqrt{\pi^3}}} e^{-\frac{1}{2}(\xi^2+\eta^2+\zeta^2)}, \qquad (61,9)$$

სადაც

$$\xi = \sqrt{\alpha_1}\, x, \quad \eta = \sqrt{\alpha_2}\, y, \quad \zeta = \sqrt{\alpha_3}\, z. \qquad (61,10)$$

სივრცითი იზოტროპული ოსცილატორის შემთხვევაში, სიხშირეები ყველა ღერძის გასწვრივ ტოლია $\omega_1 = \omega_2 = \omega_3 \equiv \omega$, ამიტომ

$$E_n = \hbar\omega\,(n + 3/2), \qquad (61,11)$$

სადაც

$$n = n_1 + n_2 + n_3 \qquad (61,12)$$

მთავარი კვანტური რიცხვია და $n = 0,\ 1,\ 2\ldots$

წრფივი ოსცილატორის შემთხვევაში ყოველ ენერგიას (ე. ი. ყოველ n-ს) შეესაბამებოდა ერთი ტალღური ფუნქცია, ამიტომ სპექტრი მარტივი იყო. იზოტროპული ოსცილატორის შემთხვევაში კი ადგილი აქვს გადაგვარებას, ე. ი. n-ის ერთ მნიშვნელობას (გარდა $n = 0$ ძირითადი მდგომარეობისა) შეესაბამება რამოდენიმე ტალღური ფუნქცია; კერძოდ, იმდენი, რამდენი საშუალებითაც შეგვიძლია $n = (n_1 + n_2 + n_3)$ ის წარმოდგენა n_1, n_2, n_3 მთელი დადებითი რიცხვების საშუალებით. მაგალითად, როცა $n = 0$, მაშინ გვაქვს ერთადერთი წარმოდგენა $n_1 = n_2 = n_3 = 0$. როცა $n = 1$, მაშინ გვექნება სამი წარმოდგენა $n_1 = 1$, $n_2 = n_3 = 0$; $n_1 = n_3 = 0$, $n_2 = 1$; $n_1 = n_2 = 0$, $n_3 = 1$; და ა. შ. ადვილად ვაჩვენებთ, რომ ყოველი მოცემული n-სათვის გვექნება $(n+1)(n+2)/2$ ტალღური ფუნქცია.

დაბოლოს აღვნიშნოთ, რომ სივრცითი იზოტროპული ოსცილატორის ძირითადი მდგომარეობის ტალღურ ფუნქციას (61,9) ფორმულის თანახმად, ექნება შემდეგი სახე:

$$\psi(r) = \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{3/4} e^{-\frac{\alpha r^2}{2}}, \qquad (61,13)$$

სადაც $\alpha = \mu\omega/\hbar$. იზოტროპული ოსცილატორის ენერგიის ფორმულას და ტალღურ ფუნქციებს დიდი გამოყენება აქვთ ატომგულის ფიზიკაში.

§ 62. ოსცილატორის ამოცანა მატრიცული სახით[1]

ჰაიზენბერგის მეთოდის გამოყენებით ვიპოვოთ წრფივი ჰარმონიული ოსცილატორის კოორდინატისა და იმპულსის მატრიცული ელემენტები ენერგეტულ წარმოდგენაში. რადგან ოსცილატორზე მოქმედი დრეკადი ძალა $X = -kx$, ამიტომ, ჰაიზენბერგის თანახმად, საჭიროა გამოვიდეთ ნიუტონის განტოლებიდან, რომელიც უნდა ჩავწეროთ მატრიცული სახით; კერძოდ,

$$\mu \frac{d^2 x_{mn}(t)}{dt^2} = -k x_{mn}(t). \tag{62,1}$$

მეორე მხრივ, რადგან არჩეულ წარმოდგენაში $x_{mn}(t) = x_{mn} \exp(i\omega_{mn} t)$, ამიტომ, თანახმად (26,17) ფორმულისა, გვექნება

$$\mu \frac{d^2 x_{mn}(t)}{dt^2} = -\mu\omega_{mn}^2 x_{mn}(t). \tag{62,2}$$

თუ გავიხსენებთ, რომ $\frac{k}{\mu} = \omega^2$ წარმოადგენს კლასიკურ სიხშირეს, მაშინ (62,1) და (62,2) განტოლების შედარება მოგვცემს

$$\omega_{mn}^2 x_{mn} = \omega^2 x_{mn}. \tag{62,3}$$

მეორე მხრივ, შესაბამისობის პრინციპის ძალით,

$$\omega_{mn} = (m - n)\,\omega; \tag{62,4}$$

ამიტომ (62,3) და (62,4)-ის შედარება გვაძლევს შერჩევის წესს:

$$m = n \pm 1. \tag{62,5}$$

როდესაც ეს პირობა არაა შესრულებული, მაშინ (62,3)-დან გამომდინარეობს, რომ $x_{mn} = 0$. (62,5) შერჩევის პირობა გვიჩვენებს, რომ ოსცილატორის კოორდინატის მხოლოდ ის მატრიცული ელემენტები განსხვავდება ნულისაგან, რომლებიც განლაგებულია დიაგონალის მეზობლად. რადგან

$$p_{mn} = i\mu\omega_{mn} x_{mn}, \tag{62,6}$$

ამიტომ ზუსტად ასეთივე შერჩევის წესი გვაქვს იმპულსისათვისაც. რათა ვიპოვოთ ეს მატრიცული ელემენტები, გამოვიყენოთ ჰაიზენბერგის დაკვანტვის (26,18) პირობა

$$(px - xp)_{mn} = \frac{\hbar}{i}\,\delta_{mn}. \tag{62,7}$$

თუ გავიხსენებთ ნამრავლის მატრიცული ელემენტების ფორმულას, გვექნება

$$\sum_k p_{mk} x_{kn} - \sum_l x_{ml}\, p_{ln} = \frac{\hbar}{i}\,\delta_{mn}. \tag{62,7'}$$

---

1 ოსცილატორის ამოცანა მატრიცული სახით ამოხსნილი იყო ბორნის, ჰაიზენბერგისა და იორდანის მიერ 1925 წელს.

(62,5) პირობის ძალით მივიღებთ

$$p_{n,n+1}x_{n+1,n}+p_{n,n-1}x_{n-1,n}-x_{n,n+1}p_{n+1,n}-x_{n,n-1}p_{n-1,n}=\frac{\hbar}{i}. \quad (62,8)$$

რადგან კოორდინატი ნამდვილი რიცხვია, ამიტომ $x_{n+1,n}=x_{n,n+1}=x^*_{n+1,n}$. გარდა ამისა,

$$p_{n,n\pm1}=i\omega_{n,n\pm1}x_{n,n\pm1}\mu$$

და

$$\omega_{n,n\pm1}=\mp\omega,$$

ამიტომ

$$p_{n,n\pm1}=\mp i\omega x_{n,n\pm1}\cdot\mu. \quad (62,9)$$

ხოლო

$$p_{n\pm1,n}=\pm i\omega x_{n\pm1,n}\cdot\mu$$

(62,9)-ის მიხედვით (62,8) ასე გადაიწერება

$$x^2_{n+1,n}-x^2_{n,n-1}=\frac{\hbar}{2\mu\omega}, \quad (62,10)$$

შემოვიღოთ აღნიშვნა

$$A_n=x_{n+1,n}. \quad (62,11)$$

ამ აღნიშვნებში (62,10) მიიღებს სახეს

$$A^2_n-A^2_{n-1}=\frac{\hbar}{2\mu\omega}. \quad (62,12)$$

ვინაიდან $\frac{\hbar}{2\mu\omega}$ მუდმივია, (62,12) გვიჩვენებს, რომ A^2_n ერთობლიობა წარმოადგენს არითმეტიკულ პროგრესიას, რომლის უკანასკნელი წევრისათვის გვექნება

$$A^2_n=A^2_0+\frac{n\hbar}{2\mu\omega}. \quad (62,13)$$

ვინაიდან $x_{0,-1}=0$[1], ამიტომ (62,12) მოგვცემს

$$A^2_0=x^2_{10}=\frac{\hbar}{2\mu\omega}. \quad (62,14)$$

და, მაშასადამე,

$$A^2_n=\frac{\hbar\,(n+1)}{2\mu\omega}.$$

ამის შემდეგ კოორდინატის მატრიცული ელემენტისათვის შეიძლება დავწეროთ

$$x_{n+1,n}=x_{n,n+1}=x_0\sqrt{n+1}, \quad (62,15)$$

სადაც

$$x_0=A_0=\sqrt{\frac{\hbar}{2\mu\omega}}. \quad (62,16)$$

(62,15) ასეც შეგვიძლია წარმოვიდგინოთ

$$x_{mn}=x_0\{\sqrt{n}\,\delta_{n-1,m}+\sqrt{n+1}\,\delta_{n+1,m}\}. \quad (62,17)$$

---

[1] $x_{0,-1}$ ნელის ტოლია, რამდენადაც კვანტური რიცხვი n უარყოფითი არ შეიძლება იყოს.

ამრიგად, ოსცილატორის კოორდინატის მატრიცას ექნება სახე

$$x=x_0\begin{vmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & 0 & 0\ldots \\ \sqrt{1} & 0 & \sqrt{2} & 0 & 0\ldots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & \sqrt{3} & 0\ldots \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & \ldots\ldots \end{vmatrix}. \tag{62,18}$$

თუ გავითვალისწინებთ (62,9) ფორმულებს, ანალოგიურად მივიღებთ:

$$p_{n+1,n}=ip_0\sqrt{n+1};\quad p_{n,n+1}=-ip_0\sqrt{n+1}, \tag{62,19}$$

სადაც

$$p_0=\sqrt{\frac{\mu\hbar\omega}{2}}. \tag{62,20}$$

მიღებული მატრიცული ელემენტი უფრო სიმეტრიულად ასეც შეგვიძლია ჩაეწეროთ:

$$p_{mn}=ip_0\{-\sqrt{n}\,\delta_{n-1,m}+\sqrt{n+1}\,\delta_{n+1,m}\}. \tag{62,21}$$

ახლა გამოვთვალოთ ოსცილატორის ენერგია. ენერგეტულ წარმოდგენაში ოსცილატორის ენერგია იქნება

$$E_n=H_{nn}, \tag{62,22}$$

სადაც

$$\hat{H}=\frac{\hat{p}^2}{2\mu}+\frac{\mu\omega^2}{2}x^2, \tag{62,23}$$

ამგვარად,

$$E_n=H_{nn}=\frac{1}{2\mu}(p\cdot p)_{nn}+\frac{\mu\omega^2}{2}(x\cdot x)_{nn}, \tag{62,23'}$$

შერჩევის წესის გამო

$$(p^2)_{nn}=\sum_k p_{nk}p_{kn}=p_{n,n+1}\,p_{n+1,n}+p_{n,n-1}\,p_{n-1,n}$$

ასევე

$$(x^2)_{nn}=x_{n,n+1}\,x_{n+1,n}+x_{n,n-1}\,x_{n-1,n}=x^2_{n+1,n}+x^2_{n,n-1}.$$

თუ გავიხსენებთ (62,19), (62,20) და (62,16) ფორმულებს, ენერგიისათვის მივიღებთ ჩვენთვის უკვე ცნობილ გამოსახულებას

$$E_n=\hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right). \tag{62,24}$$

ამ კერძო მაგალითიდან ჩანს, რომ ორივე გზა—შრედინგერისა და ჰაიზენბერგისა—ერთსა და იმავე შედეგს იძლევა.

რადგან ოსცილატორის ტალღური ფუნქციები ცნობილია, ჩვენ შეგვეძლო მატრიცული ელემენტები შემდეგი ფორმულებითაც გვეპოვნა:

$$x_{mn}=\int_{-\infty}^{+\infty}\psi^*_m(x)\,x\psi_n(x)\,dx,\qquad p_{mn}=\int_{-\infty}^{+\infty}\psi^*_m(x)\,\frac{\hbar}{i}\frac{d\psi_n(x)}{dx}dx, \tag{62,25}$$

ამასთან ავტომატურად მივიღებთ, რომ ინტეგრალი ნულია, როდესაც $m\neq n\pm1$.

სავარჯიშო მაგალითები

1. ვიპოვოთ კოორდინატის საშუალო მნიშვნელობა წრფივი ჰარმონიული ოსცილატორის ნორმალურ ($n=0$) მდგომარეობაში.

2. ვიპოვოთ კოორდინატის კვადრატის საშუალო მნიშვნელობა წრფივი ჰარმონიული ოსცილატორის ნორმალურ მდგომარეობაში

პასუხი: $\overline{x^2}=\overline{(\Delta x)^2}=\hbar/2\mu\omega$

3. ვიპოვოთ $\overline{p_x}$, $\overline{p_x^2}, \ldots \overline{p_x^k}$ წრფივი ჰარმონიული ოსცილატორის ნორმალური მდგომარეობისათვის.

4. დაამტკიცეთ, რომ წრფივი ჰარმონიული ოსცილატორის ნორმალური მდგომარეობისათვის $\overline{(\Delta x)^2}\ \overline{(\Delta p_x)^2}=\hbar^2/4$.

5. ვიპოვოთ ენერგიის საშუალო მნიშვნელობა წრფივი ჰარმონიული ოსცილატორის იმ მდგომარეობაში, რომელიც აღიწერება $\psi_0(x)=\left(\frac{a}{\pi}\right)^{1/2} e^{-\frac{ax^2}{2}}$ ფუნქციით. პასუხი შეადარეთ $E_n=\hbar\omega\,(n+1/2)$ ფორმულას $n=0$-ისათვის და ახსენით მიღებული შედეგი.

6. ვიპოვოთ წრფივი ჰარმონიული ოსცილატორის ძირითადი მდგომარეობის ფუნქცია იმპულსურ წარმოდგენაში.

პასუხი: $a(p_x)=\frac{1}{\sqrt[4]{\pi a\hbar^2}}\, e^{-\frac{p_x^2}{2a\hbar^2}}$.

7. გამოვიყენოთ წრფივი ჰარმონიული ოსცილატორის კოორდინატისა და იმპულსის მატრიცული ელემენტების ფორმულები და ვაჩვენოთ, რომ

$$\overline{(\Delta x)^2}=\overline{x^2}=\frac{\hbar}{\mu\omega}\,(n+1/2),$$

$$\overline{(\Delta p_x)^2}=\overline{p_x^2}=\mu\hbar\omega\,(n+1/2).$$

მითითება: განმარტებით

$$\overline{x^2}=\int_{-\infty}^{+\infty}\psi_n(x)\,x^2\,\psi_n(x)dx=\sum_m x_{nm}\,x_{mn};$$

ასევე

$$\overline{p_x^2}=\sum_m (p_x)_{nm}\,(p_x)_{mn}$$

8. დაამტკიცეთ, რომ ერთგანზომილებიანი მოძრაობის შესაბამისი ჰეპელის საშუალო მნიშვნელობა გამოიხატება ფორმულით

$$\overline{p_x}=\mu\int J\,dx,$$

სადაც μ ნაწილაკის მასაა, ხოლო J—დენის ვექტორი.

თავი IX

მოძრაობა ცენტრალურ ველში

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

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

§ 63. შრედინგერის რადიალური ფუნქციების განტოლება

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

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

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

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

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

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

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

სადაც

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

მაშინ მივიღებთ შემდეგ განტოლებას:

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

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

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

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

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

$$l=0,\ 1,\ 2,\ 3,\ 4,\ 5,\ 6,\ldots$$

$$s,\ p,\ d,\ f,\ g,\ h,\ i,\ldots \tag{63,15}$$

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

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

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

$$\int\limits_0^\infty[R_l(r)]^2r^2dr=1. \tag{63,17}$$

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

$$\int\limits_0^\infty|\chi_l(r)|^2dr=1. \tag{63,18}$$

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

$$\int\limits_0^\infty R^*_{lE'}(r)R_{lE}(r)r^2dr=\delta(E-E'). \tag{63,19}$$

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

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

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

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

$$w(r)dr = |R_l(r)|^2 r^2 dr, \qquad (63,21)$$

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

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

§ 64. რადიალური ტალღური ფუნქციების ასიმპტოტური ყოფაქცევა

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

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

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

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

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

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

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

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

რომლის ამოხსნა დამოკიდებულია იმაზე, თუ როგორია სრული ენერგიის ნიშანი.

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

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

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

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

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

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

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

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

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

სადაც

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

$\varepsilon = -E$ ბმის ენერგიას უწოდებენ.

(64,8) განტოლების ზოგადი ამონახსნი ასეთი იქნება

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

სადაც $k^2 = 2\mu E/\hbar^2$.

---

[1] გ. ჰ ო ლ ა შ ე ი ლ ი, „ორი და სამი ნაწილაკის კვანტური მექანიკა". თსუ გამომცემლობა, 1973 წ. გვ. 476.

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

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

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

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

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

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

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

§ 65. წყალბადისებური ატომის პრობლემა[1]

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

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

რადგან ეს ველი ცენტრალური სიმეტრიისაა, ამიტომ ტალღური ფუნქციისათვის გვექნება

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

სადაც

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

შემოვიღოთ ახალი უგანზომილებო ცვლადი

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

მაშინ გვექნება

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

მწკრივს, რომელიც განიმარტება ფორმულით

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

სადაც

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

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

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

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

(65,20) ფორმულა ასე შეგვიძლია გადავწეროთ:

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

სადაც

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

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

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

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

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

სადაც C_{nl} კოეფიციენტი განისაზღვრება ნორმირების შემდეგი პირობიდან:

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

რომელიც (65,23) ფუნქციის შეტანით მოგვცემს

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

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

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

ცნობილია, რომ ამ ინტეგრალს აქვს ამოხსნა:[1]

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

მაშასადამე, ნორმირების კოეფიციენტს ექნება შემდეგი სახე:

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

ხოლო ნორმირებულ რადიალურ ტალღურ ფუნქციას ექნება გამოხატულება

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

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

$$\alpha=\frac{B}{2n}=-\frac{Z}{na_0}. \tag{65,30}$$

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

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

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

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

---

[1] გ. ბ. ბეშელი. „ორი და სამი ნაწილაკის კვანტური მექანიკა", თსუ გამომცემლობა. 1973 წ. გვ. 474.

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

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

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

ძირითად მდგომარეობაში მყოფი ელექტრონის ატომგულში მოხვედრის ალბათობის სიმკვრივე ტოლი იქნება

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

ეს უკანასკნელი შეგვიძლია წარმოვიდგინოთ შემდეგნაირად:

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

ცხადია, რომ

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

სიდიდე

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

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

---

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

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

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

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

$$w_{lm}(0,\varphi)d\Omega = |Y_{lm}(0,\varphi)|^2 d\Omega. \tag{65,48}$$

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

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

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

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

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

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

ამ ალბათობის მაქსიმუმის შესაბამისი რადიუსი მოინახება პირობიდან

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

საიდანაც მივიღებთ, რომ

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

რაც, მართლაც ემთხვევა ბორის წრიული ორბიტების რადიუსს.

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

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

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

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

სავარჯიშო მაგალითები

1. აჩვენეთ, რომ წყალბადის ატომისათვის ნორმალურ მდგომარეობაში

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

2. აჩვენეთ, რომ წყალბადის ატომისათვის ნორმალურ მდგომარეობაში

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

მითითება: გაიხსენოთ, რომ

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

3. გამოიყენეთ წინა ორი მაგალითის შედეგი და აჩვენეთ, რომ

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

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

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

---

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

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

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

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

ა მ ო ხ ს ნ ა: თანახმად (20,2) ფორმულისა, ტალღური ფუნქცია იმპულსურ წარმოდგენაში მოიცემა ფორმულით

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

ინტეგრალების ამოხსნის შემდეგ მივიღებთ

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

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

§ 66. წყალბადისებური ატომების მაგნიტური მომენტი

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

ვთქვათ, წყალბადისებური ატომი მოთავსებულია გარეშე ერთგვაროვან მაგნიტურ ველში. თუ ატომს გააჩნია მაგნიტური მომენტი, მაშინ ველში შეტანისას წყალბადისებური ატომის ენერგიას უნდა დაემატოს ენერგია, რომელიც დაკავშირებული იქნება ატომის მაგნიტურ მომენტთან. თანახმად (36,19) ფორმულისა, ერთგვაროვან მაგნიტურ ველში მოთავსებული წყალბადისებური ატომის ჰამილტონიანს ექნება შემდეგი სახე: $\hat{H}=\hat{H}_0-\frac{e}{c}(\vec{A}\hat{p})$

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

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

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

ამის მიხედვით (66,1) ჰამილტონიანის ბოლო წევრისათვის გვექნება

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

შერეული ნამრავლის თვისებით შეგვიძლია დავწეროთ

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

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

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

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

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

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

სიდიდეს

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

ბორის (ანდა ატომურ) მაგნეტონს უწოდებენ. ამგვარად, გვექნება

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

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

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

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

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

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

$$g_l = +\frac{e}{2\mu c}, \tag{66,9}$$

რომელსაც გირომაგნიტურ ფარდობას უწოდებენ. აშკარაა, რომ

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

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

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

ამ ფორმულებიდან ჩანს, რომ მაგნიტური მომენტიც კვანტურ ვექტორს წარმოადგენს.

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

§ 67. საშვალენტო ელექტრონის მოდელი

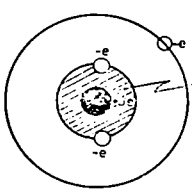
როგორც დავინახეთ, ენერგია წყალბადისებურ ატომში დამოკიდებული აღმოჩნდა მხოლოდ მთავარ კვანტურ რიცხვზე. ეს დამოკიდებულება დამახასიათებელი არ არის ცენტრალური სიმეტრიის ველისათვის. შემთხვევითი გადაგვარება (ე. ი. „l გადაგვარება") დამახასიათებელია მხოლოდ სუფთა კულონური ველისათვის — $\frac{Ze^2}{r}$. ჩვენ ქვემოთ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

---

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

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

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



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

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

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

---

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

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

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

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

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

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

თუ შემოვიღებთ აღნიშვნას

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

მაშინ შრედინგერის რადიალური ფუნქციების განტოლება მიიღებს სახეს

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

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

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

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

სადაც მთავარი კვანტური n' რიცხვი განსაზღვრულია ფორმულით

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

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

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

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

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

ფესვის წინ პლუს ნიშნის აღებით გვექნება

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

---

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

და ამგვარად, (67,6) ფორმულის თანახმად,

$$n' = n_r + l + \Delta(l), \tag{67,9'}$$

სადაც[1]

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

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

$$n' = n + \Delta(l). \tag{67,11}$$

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

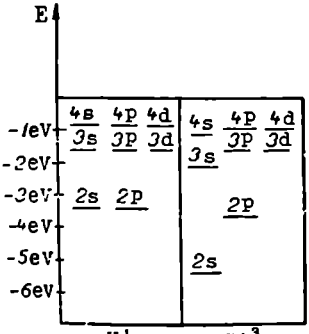
$$E_{nl} = -\frac{e^4\mu}{2[n+\Delta(l)]^2\hbar^2} \tag{67,12}$$

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

ამრიგად, ტუტე მეტალთა ატომებისათვის თერმი განისაზღვრება ფორმულით

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

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



ნახ. 14.

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

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

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

§ 68. უსასრულო სიღრმის პოტენციალური ორმო

შევისწავლოთ უსასრულო სიღრმის ცენტრალური სიმეტრიის პოტენციალური ორმოს ამოცანა; ვთქვათ,

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

r_0-ს პოტენციალური ორმოს სიგანე ეწოდება.

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

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

სადაც $R_l(r)$ რადიალური ფუნქცია განისაზღვრება განტოლებიდან

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

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

$$R_l(r_0)=0. \qquad (68,4)$$

ამგვარად, საჭიროა ამოიხსნას განტოლება

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

სადაც

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

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

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

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

$$R_l(r)=C_l j_l(kr), \qquad (68,8)$$

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

$$j_l(kr_0)=0. \qquad (68,9)$$

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

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

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

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

№ 1 ცხრილში მოტანილია ზოგიერთი ამ მდგომარეობის ფესვების მნიშვნელობანი.

ცხრილი № 1

$j_l(ar_0)=0$ განტოლების ფესვები

მდგომარეობა	t_{ln}
1 s	3,1426
1 p	4,4934
1 d	5.7634
2 s	6,2832
1 f	6,9879
2 p	7,7252
1 g	8,1826
2 d	9,0950
1 h	9,3560
3 s	9,4248
2 f	10,4171

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

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

ცნობილია, რომ

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

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

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

საიდანაც ვღებულობთ

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

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

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

განვიხილოთ კერძო შემთხვევა, როცა ორმოში მოძრაობს ნაწილაკის მომენტი $l=0$, რადგან

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

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

და $Y_{00}(0,\varphi)=(4\pi)^{-1/2}$, ამიტომ (68,16)-დან გვექნება

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

საკუთარი მნიშვნელობები კი განისაზღვრება

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

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

§ 69. სასრულ კედლებიანი პოტენციალური ორმო. დეიტრონი

ახლა განვიხილოთ სასრულო სიმაღლის კედლების მქონე ცენტრალური სიმეტრიის პოტენციალური ორმო

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

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

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

სადაც

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

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

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

სადაც

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

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

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

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

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

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

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

თუ შევიტანთ (69,7) ფუნქციებს, მარტივად მივიღებთ

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

საიდანაც გამომდინარეობს, რომ

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

(69,5) ფორმულის გათვალისწინებით ეს უკანასკნელი მიიღებს სახეს

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

---

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

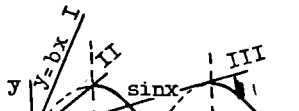
მივიღეთ β მიმართ ტრანსცენდენტული განტოლება. ამ განტოლების ფესვები მოგვცემს სწორედ ε-ის მნიშვნელობებს ორმოს მოცემული V_0 სიმაღლისა და r_0 სიგანისათვის. თუ შემოვიღებთ აღნიშვნებს:

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

გვექნება

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

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



ნახ. 15.

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

საიდანაც

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

ხოლო (69,11) მოგვცემს, რომ

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

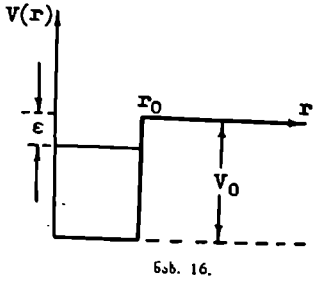
მაშასადამე, V_0-ისათვის მივიღებთ მნიშვნელობას

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

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

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

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



ნახ. 16.

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

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

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

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

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

სავარჯიშო მაგალითები

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

$$\psi(r_p,r_n)=\frac{e^{\frac{i}{\hbar}\mathbf{PR}}}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\left(\frac{\alpha}{2\pi}\right)^{1/2}\frac{e^{-\alpha|r_p-r_n|}}{|r_p-r_n|}, \qquad (69,15)$$

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

$$R=\frac{M_p r_p+M_n r_n}{M_p+M_n}=\frac{r_p+r_n}{2}. \tag{69,16}$$

საბოლოოდ გვექნება

$$\psi(r_p, r_n)=\frac{(\alpha/2\pi)^{1/2}}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\, e^{\frac{i}{\hbar}\left(p\,\frac{r_n+r_p}{2}\right)}\frac{e^{-\alpha|r_n-r_p|}}{|r_n-r_p|} \tag{69,17}$$

2. ვიპოვოთ დეიტრონის ტალღური ფუნქცია იმპულსურ წარმოდგენაში. გვექნება

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

კუთხეებით ინტეგრაციის შემდეგ მივიღებთ

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

ცნობილია, რომ ეს ინტეგრალი ტოლია $\frac{p\hbar}{\alpha^2}\frac{1}{(p/\hbar)^2}$, ამიტომ $a(p)$-სათვის საბოლოოდ შეგვიძლია დავწეროთ

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

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

§ 70. მყარი როტატორი

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

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

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

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

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

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

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

(70,2) ფუნქციის შეტანის შემდეგ მივიღებთ ლაპლასის განტოლებას

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

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

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

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

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

ენერგიისათვის მივიღებთ:

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

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

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

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

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

ახლა მოვითხოვოთ, რომ (70.2) ფუნქცია აკმაყოფილებდეს შემდეგ განტოლებასაც

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

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

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

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

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

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

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

მაშასადამე, მყარი როტატორის საძიებელ ნორმირებულ ფუნქციას ექნება გამოხატულება

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

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

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

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

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

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

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

ხოლო ნორმირებულ საკუთარ ფუნქციას ექნება სახე

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

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

§ 71. ოსცილატორის ამოცანა განსაზღვრული მომენტით

განვიხილოთ ჰარმონიული ოსცილატორი, რომლის პოტენციალური ენერგია განისაზღვრება ფორმულით

$$V(r)=\frac{\mu\omega^2 r^2}{2}. \tag{71,1}$$

ასეთი ამოცანა ჩვენ ამოვხსენით § 61-ში, მაგრამ იქ მიღებული ფუნქციები არ არიან მომენტის კვადრატისა და მისი z-პროექციის საკუთარი ფუნქციები. რამდენადაც (71,1) პოტენციალური ენერგია ცენტრალური სიმეტრიისაა, იმდენად ჩვენ შეგვიძლია ვიპოვოთ ისეთი ტალღური ფუნქციებიც, რომლებიც საერთო საკუთარი ფუნქცია იქნება ენერგიის $\hat{l}^2$ და $\hat{l}_z$-ოპერატორებისა. ამ ფუნქციას ექნება შემდეგი სახე:

$$\psi(r,\theta,\varphi)=R_l(r)Y_{lm}(\theta,\varphi), \tag{71,2}$$

სადაც რადიალური ტალღური ფუნქცია დააკმაყოფილებს განტოლებას

$$\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial R_l}{\partial r}\right)+\left(k^2-\alpha^2r^2-\frac{l(l+1)}{r^2}\right)R_l(r)=0. \tag{71,3}$$

ამ განტოლებაში შემოვიღეთ შემდეგი აღნიშვნები:

$$k^2=\frac{2\mu E}{\hbar^2},\qquad \alpha=\frac{\mu\omega}{\hbar}. \tag{71,4}$$

ფიზიკური მოსაზრებით ნათელია, რომ (71,3) განტოლება უნდა ამოიხსნას სასაზღვრო პირობით

$$R_l(\infty)=0, \tag{71,5}$$

რადგან (71,1) პოტენციალი აკმაყოფილებს (64,2) პირობას, ამიტომ მცირე მანძილებზე ტალღურ ფუნქციას უნდა ჰქონდეს $R_l\sim r^l$ სახე. დიდ მანძილებზე (71,3) განტოლებაში შეგვიძლია უგულებელვყოთ როგორც მუდმივი წევრები, ისე r-ის უკუპროპორციული წევრებიც; შედეგად გვექნება განტოლება

$$\frac{d^2R_l}{dr^2}-\alpha^2r^2R_l(r)=0,\ (r\to\infty), \tag{71,6}$$

რომლის ჩვენთვის საჭირო ამონახსნი იქნება $R_l(r)\sim e^{-\alpha r^2/2}$. ამგვარად, (71,3) განტოლების ამონახსნი, რომელსაც ექნება სწორი ასიმპტოტური ყოფაქცევა როგორც მცირე, ისე დიდ მანძილებზე, ჩაიწერება შემდეგი სახით:

$$R_l(r)=r^l f_l(r)e^{-\alpha r^2/2}, \tag{71,7}$$

ამასთან, $f_l(r)$ ფუნქცია სათავეში მუდმივი იქნება, უსასრულობაში კი არ უნდა მოისწრაფოდეს უსასრულობისაკენ უფრო ჩქარა, ვიდრე r-ის სასრული ხარისხი, ე. ი. $f_l(r)$ უნდა წარმოადგენდეს პოლინომს. თუ (71,7) გამოსახულებას შევიტანთ (71,3)-ში, $f_l(r)$ ფუნქციისათვის მივიღებთ შემდეგ დიფერენციალურ განტოლებას:

$$r\frac{d^2f_l}{dr^2}+(2l+2-2\alpha r^2)\frac{df_l}{dr}+(k^2-3\alpha-2\alpha l)rf_l=0. \tag{71,8}$$

შემოვიღოთ ახალი ცვლადი

$$x=\alpha r^2, \tag{71,9}$$

მაშინ (71,8) დაიყვანება გადაგვარებული ჰიპერგეომეტრიული ფუნქციების განტოლებაზე

$$x\frac{d^2f_l(x)}{dx^2}+\left(l+\frac{3}{2}-x\right)\frac{df_l(x)}{dx}+\left(\frac{E}{2\hbar\omega}-\frac{l}{2}-\frac{3}{4}\right)f_l(x)=0, \quad (71,10)$$

რომლის ამონახსნი იქნება

$$f_l(x)=F\left(-\frac{E}{2\hbar\omega}+\frac{l}{2}+\frac{3}{4},\ l+\frac{3}{2},\ x\right), \quad (71,11)$$

ეს მწკრივი პოლინომად გადაიქცევა, როცა დაცული იქნება პირობა

$$-\frac{E}{2\hbar\omega}+\frac{l}{2}+\frac{3}{4}=-n_r \quad (71,12)$$

სადაც $n_r=0, 1, 2,\ldots$ (71,12)-დან ენერგიისათვის მივიღებთ

$$E_{n_r l}=\hbar\omega(l+2n_r+{}^3/_2). \quad (71,13)$$

შემოვიღოთ აღნიშვნა

$$n=2n_r+l, \quad (71,14)$$

სადაც $n=0, 1, 2,\ldots$ მთავარი კვანტური რიცხვია. მაშინ ენერგიისათვის საბოლოოდ შეგვიძლია დავწეროთ ფორმულა

$$E_n=\hbar\omega(n+{}^3/_2). \quad (17,15)$$

მაშასადამე, იზოტროპული ოსცილატორის ენერგია კვანტებია; ამასთან, ენერგეტული დონეები ერთმანეთზე ტოლი ინტერვალით არიან დაცილებული $E_{n+1}-E_n=\hbar\omega$.

რაც შეეხება რადიალურ ტალღურ ფუნქციას, (71,14) პირობის გათვალისწინებით, მისთვის გვექნება

$$R_{n_r l}(r)=C_{n_r l}\,r^l\,e^{-\alpha r^2/2}F(-n_r,\ l+{}^3/_2,\ \alpha r^2), \quad (71,16)$$

სადაც $C_{n_r l}$ ნორმირების კოეფიციენტია; იგი შეიძლება ვიპოვოთ ნორმირების შემდეგი პირობიდან:

$$\int_0^\infty |R_{n_r l}(r)|^2 r^2 dr=1. \quad (71,17)$$

ამ ფორმულაში (71,16) ფუნქციის შეტანით და ინტეგრალში (71,9) ცვლადის შემოღებით გვექნება

$$\frac{C^2_{n_r l}}{2\alpha^{3/2+l}}J_{n_r l}=1, \quad (71,18)$$

სადაც

$$J_{n_r l}=\int_0^\infty e^{-x}x^{l+1/2}F^2(-n_r,\ l+{}^3/_2,\ x)dx. \quad (71,19)$$

ამ ინტეგრალის მნიშვნელობა ტოლია

$$J_{n_r l}=\frac{\Gamma(l+{}^3/_2)n_r!}{(l+{}^3/_2)(l+{}^5/_2)\ldots(l+n_r+{}^1/_2)},\quad n_r=1, 2,\ldots \quad (71,20)$$

ხოლო, როცა $n_r=0$, მაშინ $F(0, c, x)=1$ და (71,19)-დან $J_{0l}=\Gamma(l+{}^3/_2)$. ამ ფორმულებში $\Gamma(s)$ ეილერის ფუნქციაა.

ამგვარად, ნორმირებული რადიალური ფუნქციისათვის საბოლოოდ გვექნება $(n_r = 1, 2, 3, \ldots)$[1].

$$R_{n_r\, l}(r) = \sqrt{2}\,\alpha^{\frac{(2l+3)}{4}} \left[\frac{(l+3/2)\,(l+5/2)\ldots(l+n_r+1/2)}{\Gamma(l+3/2)\,n_r!}\right]^{1/2} \cdot \tag{71,21}$$
$$\cdot r^l e^{-\alpha r^2/2} F(-n_r,\ l+3/2,\ \alpha r^2).$$

სრული ტალღური ფუნქციის მისაღებად ეს გამოსახულება უნდა შევიტანოთ (71,2)-ში.

იზოტროპული ოსცილატორის ენერგია დამოკიდებულია მხოლოდ ერთ n-კვანტურ რიცხვზე მაშინ, როცა ტალღური ფუნქცია დამოკიდებულია n, l და m კვანტურ რიცხვებზე. ეს იმას ნიშნავს, რომ ადგილი აქვს გადაგვარებას. ადვილად შევამოწმებთ, რომ გადაგვარების ჯერადობა $\frac{1}{2}(n+1)(n+2)$-ის ტოლია.

იზოტროპული ოსცილატორისათვის მდგომარეობის აღსანიშნავად იყენებენ შემდეგ წესს: $l = 0, 1, 2, \ldots$ მომენტის მნიშვნელობებისათვის იყენებენ (63,15) აღნიშვნებს, რომელსაც წინ უწერენ (n_r+1) რიცხვს. როცა $n=0$, მაშინ $n_r = l = 0$; გვექნება $1s$ მდგომარეობა. როცა $n=1$, მაშინ $n_r=0$, $l=1$, მაშასადამე, გვაქვს $1p$ მდგომარეობა და ა. შ. $n=2$-თვის გვექნება $2s$ და $1d$ მდგომარეობანი, $n=3$-თვის $2p$ და $1f$; $n=4$-თვის $3s$, $2d$ და $1g$ და ა. შ.

ამოვწეროთ ზოგიერთი ამ მდგომარეობის რადიალური ტალღური ფუნქცია. რამდენადაც $F(0, c, x)=1$, ხოლო $F(-1, l+3/2, \alpha r^2) = 1 - \frac{2}{3}\alpha r^2$, ამიტომ გვექნება:

$$R_{00}(r) = 2\sqrt[4]{\frac{\alpha^3}{\pi}}\, e^{-\frac{\alpha r^2}{2}}. \qquad 1s \qquad (71,22)$$

$$R_{01}(r) = \sqrt{\frac{8}{3}}\,\frac{\alpha^{5/4}}{\sqrt[4]{\pi}}\, r e^{-\frac{\alpha r^2}{2}}, \qquad 1p \qquad (71,23)$$

$$R_{10}(r) = \sqrt{\frac{8}{3}}\,\frac{\alpha^{3/4}}{\sqrt[4]{\pi}}\left(\frac{3}{2} - \alpha r^2\right) e^{-\frac{\alpha r^2}{2}}, \qquad 2s \qquad (71,24)$$

$$R_{02}(r) = \frac{4}{\sqrt{15}}\,\frac{\alpha^{7/4}}{\sqrt[4]{\pi}}\, r^2 e^{-\frac{\alpha r^2}{2}}, \qquad 1d \qquad (71,25)$$

სრული ფუნქციის მისაღებად საჭიროა ეს ფუნქციები გავამრავლოთ შესაბამის სფერულ ფუნქციაზე. ასე მაგალითად, თუ (71,22)-ს გავამრავლებთ $Y_{00}(\theta,\varphi) = (4\pi)^{-1/2}$-ზე, მაშინ მივიღებთ

$$\psi_{000}(r) = \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{3/4} e^{-\frac{\alpha r^2}{2}} \tag{71,26}$$

რომელიც ემთხვევა ჩვენს მიერ ადრე მიღებულ (61,13) ფუნქციას.

---

[1] როცა $n_r=0$, მაშინ

$$R_{0l}(r) = \sqrt{2}\,\alpha^{\frac{2l+3}{4}} \left[\Gamma(l+3/2)\right]^{-1/2} r^l e^{-\alpha r^2/2}.$$

თავი X

შრედინგერის განტოლების მიახლოებითი ამოხსნის მეთოდები

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

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

§ 72. შეშფოთების თეორია მარტივი სპექტრისათვის

კვანტური მექანიკის მრავალ საკითხთა მიახლოებით მეთოდებს შორის შრედინგერის შეშფოთების თეორიას, თავისი სიმარტივითა და მიღებული შედეგების ნათელი ფიზიკური შინაარსით, განსაკუთრებული ადგილი უჭირავს. იგი წარმოადგენს სტაციონარული ამოცანების შესაბამისი შრედინგერის განტოლების მიახლოებითი ამოხსნის მეთოდს[1].

დავუშვათ, რომ ჩვენთვის ცნობილია შრედინგერის სტაციონარული მდგომარეობების განტოლების

$$H^0 \psi_n^0 = E_n^0 \psi_n^0 \tag{72,1}$$

ამოხსნები.

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

$$\psi_n(x) = \sum_k C_k\, \psi_k^0(x), \tag{72,5}$$

$$f(x) = \sum_m a_m\, \psi_m^0(x), \tag{72,6}$$

სადაც C_k და a_m კოეფიციენტები ცნობილი წესით განისაზღვრება; მაგალითად,

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

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

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

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

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

[1] ქვემოთ x-ის ქვეშ ვიგულისხმებთ ყველა ცვლადს.

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

$$(\hat{H}^0 - E_n^0)\, \psi_n^{(2)} = E_n^{(1)} \psi_n^{(1)} - \hat{H}' \psi_n^{(1)} + E_n^{(2)} \psi_n^0, \qquad (72,11)$$

. . . .

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

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

საიდანაც ენერგიის პირველი შესწორებისათვის გვექნება

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

მაშინ გვექნება

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

ამგვარად, ენერგიის მეორე შესწორებისათვის გვექნება

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

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

$$\begin{aligned} \psi_n(x) &= \psi_n^0(x) + \varepsilon \sum_m{}' \frac{H'_{mn}}{E_n^0 - E_m^0} \psi_m^0(x) + O(\varepsilon^2), \\ E_n &= E_n^0 + \varepsilon H'_{nn} + \varepsilon^2 \sum_m{}' \frac{H'_{mn} H'_{nm}}{E_n^0 - E_m^0} + O(\varepsilon^3), \end{aligned} \tag{72,21}$$

სადაც O ოპერატორი აღნიშნავს მაღალი რიგის უსასრულოდ მცირე წევრებს.

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

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

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

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

$$E_n^0 - E_{n\pm1}^0 = -\frac{Z^2 e^4 \mu}{2\hbar^2}\left\{\frac{1}{n^2} - \frac{1}{(n\pm1)^2}\right\} = \frac{\pm 2n - 1}{n^2(n\pm1)^2}\left(\frac{Z^2 e^4 \mu}{2\hbar^2}\right); \qquad (72,23)$$

მცირე კვანტური რიცხვებისათვის შესაძლებელია (72,22) პირობა დაცული იყოს, დიდი კვანტური რიცხვების დროს კი (72,23) სხვაობა ნულისაკენ მისწრაფვის როგორც $\frac{1}{n^3}$, ამიტომ შეიძლება იმ სხვაობამ გადააჭარბოს $\varepsilon \hat{H}'_{mn}$-ს და, მაშასადამე, (72,22) პირობა დაირღვეს. ამიტომ, შეშფოთების თეორია უფრო კარგ შედეგს მოგვცემს დაბალი ენერგეტული დონეებისათვის.

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

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

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

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

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

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

$$\psi_n(x) = \psi_n^0(x) + \sum_m{}' \frac{H'_{mn}}{E_n^0 - E_m^0}\psi_m^0(x) + \ldots +$$
$$E_n = E_n^0 + H'_{nn} + \sum_m{}' \frac{H'_{mn}H'_{nm}}{E_n^0 - E_m^0} + \ldots +, \qquad (72,26)$$

ხოლო (72,22)-ის პირობა ასე დაიწერება:

$$|H'_{mn}| \ll |E_n^0 - E_m^0|. \qquad (72,27)$$

დაბოლოს აღვნიშნოთ, რომ შეშფოთების თეორია განსაკუთრებით ეფექტურად გამოიყენება იმ შემთხვევაში, როცა გვაინტერესებს ვიპოვოთ ატომის საკუ-

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

სავარჯიშო ამოცანები

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

ა მ ო ხ ს ნ ა: შეშფოთების ენერგია ტოლი იქნება $\hat{H}' = -e\mathcal{E}x$, სადაც $\mathcal{E}$ ელექტრული ველის დაძაბულობაა, ხოლო x ოსცილატორის კოორდინატია.

ენერგიის პირველი შესწორებისათვის გვექნება

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

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

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

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

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

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

მაშასადამე, ოსცილატორის ენერგია ტოლი იქნება

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

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

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

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

სადაც C არის მუდმივი

პ ა ს უ ხ ი: $E^{(1)} = 0$.

§ 73. შეშფოთების თეორია გადაგვარებული სპექტრის შემთხვევაში

წინა პარაგრაფში განვიხილეთ შეშფოთების თეორიის ის სპეციალური შემთხვევა, როცა

$$\hat{H}^0 \psi_n^0 = E_n^0 \psi_n^0 \tag{73,1}$$

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

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

დავუშვათ, რომ ჩვენ გვაინტერესებს

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

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

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

$$\psi_1^0,\ \psi_2^0,\ldots\ \psi_m^0, \tag{73,3}$$

რომლებიც წრფივად დამოუკიდებელნი არიან და შეესაბამებიან ენერგიის ერთ მნიშვნელობას $E_1^0=E_2^0=\ldots=E_m^0$. მაშასადამე, როცა $\varepsilon\to 0$, (73,2) განტოლების ამონახსნი უნდა მიისწრაფოდეს E_1^0 ($=E_2^0=\ldots=E_m^0$) საკუთარი მნიშვნელობის შესაბამის რომელიმე ψ_1^0 ამონახსნისაკენ, ან მათი წრფივი კომბინაციისაკენ

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

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

$$E=E_1^0+\varepsilon E^{(1)}+\ldots+,\qquad \psi=\sum_{i=1}^{m} b_i\,\psi_i^0(x)+\varepsilon\psi^{(1)}+\ldots+. \tag{73,5}$$

[1] იხ. § 12.

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

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

$$(\hat{H}^0 - E_1^0)\psi^{(1)}(x) = \sum_{i=1}^{m} b_i (E^{(1)} - \hat{H}')\psi_i^0(x); \tag{73,6}$$

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

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

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

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

მივიღებთ

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

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

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

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

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

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

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

სადაც

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

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

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

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

$$E_1^{(1)},\ E_2^{(1)},\ldots E_m^{(1)}. \qquad (73,11)$$

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

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \Phi^* \Phi dx = \sum_{i,k} b_i^* b_l \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_k^{0*}(x)\, \psi_i^0(x)\, dx = \sum_{i=1}^{m} b_i^* b_i = 1. \qquad (73,12)$$

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

$$\Phi_\alpha = \sum_{i=1}^{m} b_l\, (E_\alpha^{(1)})\, \psi_i^0(x); \quad (\alpha = 1,\ 2,\ldots\ m). \qquad (73,13)$$

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

$$\psi_\alpha(x) = \sum_{i=1}^{m} b_l\, (E_\alpha^{(1)})\, \psi_i^0(x) + O(\varepsilon)$$
$$E_\alpha = E_i^0 + \varepsilon E_\alpha^{(1)} + O(\varepsilon^2), \qquad (73,14)$$

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

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

უწოდებენ შტარკის ეფექტს, მაგნიტურში კი — ზეემანის ეფექტს. ბოლოს შევნიშნოთ, რომ რადგან შეშფოთების მატრიცული ელემენტი მცირეა, ამიტომ (73,11) ფესვები ერთმანეთთან ისე ახლოს არიან, რომ გახლეჩილი ღონეები ერთმანეთს მცირე მანძილით შორდებიან.

§ 74. წრფივი ანჰარმონიული ოსცილატორი

განვიხილოთ წრფივი ანჰარმონიული ოსცილატორი როგორც მარტივი მაგალითი გადაუგვარებელი მდგომარეობების შეშფოთების თეორიის გამოყენებისა და ეიპოვოთ მისი ენერგიის საკუთარი მნიშვნელობები. როგორც ცნობილია, ოსცილატორის პოტენციალურ ენერგიას აქვს შემდეგი სახე:

$$V(x)=\frac{kx^2}{2}+\varepsilon x^3+\lambda x^4+\cdots \tag{74,1}$$

როდესაც ამ გაწლაში უგულებელყოფილია x^2-ზე უფრო მაღალი ხარისხის წევრები, მაშინ ოსცილატორს ჰარმონიული ეწოდება. ჰარმონიული ოსცილატორის ჰამილტონიანს ექნება შემდეგი სახე:

$$H^0=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2}{dx^2}+\frac{kx^2}{2}; \tag{74,2}$$

ამ ამოცანის შესაბამისი ამოხსნები ჩვენთვის უკვე ცნობილია. სახელდობრ, ვაჩვენეთ, რომ

$$H^0\psi_n^{(0)}=E_n^0\psi_n^{(0)} \tag{74,3}$$

განტოლების საკუთარი მნიშვნელობები ჰარმონიული ოსცილატორისათვის, გამოისახება ფორმულით

$$E_n^0=\hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right), \tag{74,4}$$

$\psi_n^0(x)$ ტალღური ფუნქციები კი — (60,4) ფორმულით. მაგრამ წრფივი ჰარმონიული ოსცილატორის ამოცანა წარმოადგენს საკმარისად გამარტივებულ ამოცანას, სინამდვილეში ოსცილატორის ამოცანაში საქმე გვაქვს რთულ შემთხვევასთან. ბუნებაში არსებული მრავალი მოვლენის ახსნა მოითხოვს (74,1) პოტენციალურ ენერგიაში უფრო მაღალი ხარისხის წევრების გათვალისწინებას. გავითვალისწინოთ პოტენციალურ ენერგიაში x^3 და x^4 ხარისხის წევრები. ამასთან გამოთვლების დროს x^3-ისათვის ავიღებთ პირველ და მეორე მიახლოებას, x^4 წევრისათვის კი — მხოლოდ პირველს. ეს იმიტომ, რომ, როგორც ქვემოთ დავინახავთ, შეშფოთების თეორიაში x^4-ის პირველი მიახლოება სიდიდის რიგით ისეთივეა, როგორც x^3-ის მეორე მიახლოება. ამგვარად, ანჰარმონიული ოსცილატორის ჰამილტონიანს ექნება შემდეგი სახე:

$$\hat{H}=\hat{H}_0+\varepsilon x^3+\lambda x^4; \tag{74,5}$$

თუ ვიგულისხმებთ, რომ ε და λ ძალიან მცირე სიდიდეებია, მაშინ შეგვიძლია გამოვიყენოთ შეშფოთების თეორია, რომელიც საშუალებას მოგვცემს ვიპოვოთ ენერგიის შესწორება, გამოწვეული ოსცილატორის ანჰარმონიულობით (x^3 და x^4 წევრების გათვალისწინებით). თანახმად (72,21) ფორმულისა, გვექნება

$$E_n=E_n^0+\varepsilon(x^3)_{nn}+\varepsilon^2\sum_{n\neq k}\frac{(x^3)_{nk}(x^3)_{kn}}{E_n^0-E_k^0}+\lambda(x^4)_{nn}, \tag{74,6}$$

სადაც E_n^0 წრფივი ჰარმონიული ოსცილატორის ენერგიაა და გამოიხატება (73,4) ფორმულით. ამგვარად, ჩვენი მიზანია $(x^3)_{nn}$ ელემენტების მოძებნა. ჩვენ ვიცით შეშფოთებული მდგომარეობის (ე. ი. ჰარმონიული ოსცილატორის) ψ_n^0 ტალღური ფუნქციები, ამიტომ მატრიცული ელემენტის პოვნა შეიძლება ფორმულით

$$(x^3)_{mn}=\int_{-\infty}^{+\infty}\psi_m^{(0)*}\,x^3\,\psi_n^{(0)}\,dx, \tag{74,7}$$

აქედან აშკარაა, რომ $(x^3)_{nn}=0$, რადგან $m=n$-თვის ინტეგრალქვეშა ფუნქცია კენტია. მაგრამ $(x^3)_{mn}$ მატრიცული ელემენტების მისაღებად მივმართავთ უფრო მარტივ ხერხს. სახელდობრ, ოსცილატორის კოორდინატების მატრიცული ელემენტისათვის გამოვიყენებთ ფორმულას (იხ. § 62)

$$x_{nm}=x_0\{\sqrt{n}\,\delta_{n-1,m}+\sqrt{n+1}\,\delta_{n+1,m}\}, \tag{74,8}$$

სადაც

$$x_0=\sqrt{\frac{\hbar}{2\mu\omega}}. \tag{74,9}$$

აშკარაა, რომ $x_{nm}=x_{mn}$. სამი მატრიცის გამრავლების წესის თანახმად $(x^3)_{mn}$ შემდეგნაირად შეგვიძლია წარმოვიდგინოთ:

$$(x^3)_{kn}=\sum_{l,m}x_{kl}\,x_{lm}\,x_{mn}. \tag{74,10}$$

შევიტანოთ კოორდინატის მატრიცული ელემენტების მნიშვნელობა (74,8) ფორმულიდან. მივიღებთ

$$(x^3)_{kn}=x_0^3\sum_{l,m}\{(\sqrt{k}\,\delta_{k-1,l}+\sqrt{k+1}\,\delta_{k+1,l})(\sqrt{l}\,\delta_{l-1,m}+$$

$$+\sqrt{l+1}\,\delta_{l+1,m})(\sqrt{m}\,\delta_{m-1,n}+\sqrt{m+1}\,\delta_{m+1,n});$$

გადამრავლების შემდეგ კი —

$$(x^3)_{kn}=x_0^3\sum_{l,m}\{(\sqrt{klm}\,\delta_{k-1,l}\,\delta_{l-1,m}\,\delta_{m-1,n}+\sqrt{kl(m+1)}\,\delta_{k-1,l}\,\delta_{l-1,m}\,\delta_{m+1,n}+$$

$$+\sqrt{k(l+1)m}\,\delta_{k-1,l}\,\delta_{l+1,m}\,\delta_{m-1,n}+\sqrt{k(l+1)(m+1)}\,\delta_{k-1,l}\,\delta_{l+1,m}\,\delta_{m+1,n}+$$

$$+\sqrt{(k+1)lm}\,\delta_{k+1,l}\,\delta_{l-1,m}\,\delta_{m-1,n}+\sqrt{(k+1)l(m+1)}\,\delta_{k+1,l}\,\delta_{l-1,m}\,\delta_{m+1,n}+$$

$$+\sqrt{(k+1)(l+1)m}\,\delta_{k+1,l}\,\delta_{l+1,m}\,\delta_{m-1,n}+$$

$$+\sqrt{(k+1)(l+1)(m+1)}\,\delta_{k+1,l}\,\delta_{l+1,m}\,\delta_{m+1,n}\}.$$

δ_{mn}-ის ფილტრაციის თვისების ძალით ჯამები ავტომატურად მოისპობა და დავრჩება

$$(x^3)_{kn}=x_0^3\{\sqrt{k(k-1)(k-2)}\,\delta_{k-3,n}+\sqrt{k(k-1)}\,\delta_{k-1,n}+\sqrt{k^3}\,\delta_{k-1,n}+$$

$$+k\sqrt{k+1}\,\delta_{k+1,n}+\sqrt{k(k+1)^2}\,\delta_{k-1,n}+\sqrt{(k+1)^3}\,\delta_{k+1,n}+$$

$$+\sqrt{(k+1)(k+2)^2}\,\delta_{k+1,n}+\sqrt{(k+1)(k+2)(k+3)}\,\delta_{k+3,n}\}.$$

მსგავსი წევრების შეკრების შემდეგ მივიღებთ

$$(x^3)_{nk}=x_0^3\{\sqrt{n(n-1)(n-2)}\,\delta_{n-3,k}+\sqrt{9n^3}\,\delta_{n-1,k}+\sqrt{9(n+1)^3}\,\delta_{n+1,k}+$$
$$+\sqrt{(n+1)(n+2)(n+3)}\,\delta_{n+3,k}\}. \qquad (74,11)$$

ამ გამოსახულებებიდანაც აშკარად ჩანს, რომ $(x^3)_{nn}=0$. ამიტომ ენერგიის პირველი შესწორება ნულის ტოლია. $(x^3)_{kn}$-ს ნულისაგან განსხვავებული აქვს მხოლოდ ოთხი ელემენტი. ეს ელემენტებია

$$(x^3)_{n,n-3}=x_0^3\sqrt{n(n-1)(n-2)},$$
$$(x^3)_{n,n-1}=x_0^3\sqrt{9n^3},$$
$$(x^3)_{n,n+1}=x_0^3\sqrt{9(n+1)^3}, \qquad (74,12)$$
$$(x^3)_{n,n+3}=x_0^3\sqrt{(n+1)(n+2)(n+3)},$$

ასე რომ (74,6)-ში შემავალ ჯამში გვეკნება მხოლოდ ოთხი წევრი, სახელდობრ

$$\sum_{n\neq k}\frac{(x^3_{nk})^2}{(E_n^0-E_k^0)}=x_0^3\left\{\frac{n(n-1)(n-2)}{E_n^0-E_{n-3}^0}+\frac{9n^3}{E_n^0-E_{n-1}^0}+\right.$$
$$\left.+\frac{9(n+1)^3}{E_n^0-E_{n+1}^0}+\frac{(n+1)(n+2)(n+3)}{E_n^0-E_{n+3}^0}\right\}. \qquad (74,13)$$

გამოვთვალოთ ამ გამოსახულების მნიშვნელები. ნათელია, რომ თანახმად (74,4) ფორმულისა, გვაქვს

$$E_n^0\quad E_{n\pm m}^{\mathcal{O}}=\hbar\omega\,(n+{}^1/_2\mp m-{}^1/_2-n)=\mp m\hbar\omega,$$

ამიტომ (74,13) განტოლება მიიღებს სახეს

$$\sum_{n\neq k}\left\{\frac{(x^3_{nk})^2}{E_n^0-E_k^0}\right\}=x_0^3\left\{\frac{n(n-1)(n-2)}{3\hbar\omega}+\frac{9n^3}{\hbar\omega}-\right.$$
$$\left.-\frac{9(n+1)^3}{\hbar\omega}-\frac{(n+1)(n+2)(n+3)}{3\hbar\omega}\right\} \qquad (74,13')$$

ან, თუ მოვახდენთ ელემენტარულ გარდაქმნებს,

$$\sum_{n\neq k}\frac{(x_{nk})^3}{(E_n^0-E_k^0)}=-\frac{1}{\hbar\omega}\left(\frac{\hbar}{\mu\omega}\right)^3\frac{15}{4}\left(n^2+n+\frac{11}{30}\right). \qquad (74,14)$$

ახლა გამოვთვალოთ $(x^4)_{nn}$. მას შემდეგ, რაც ვიპოვეთ $(x^3)_{nn}$, ამ მატრიცული ელემენტის გამოთვლაც მარტივია. მართლაც, იგი შეგვიძლია ასე წარმოვიდგინოთ:

$$(x^4)_{nn}=\sum_l(x^3)_{nl}\,x_{ln}. \qquad (74,15)$$

(74,12) ფორმულის თანახმად, $(x^3)_{nl}$-ს ნულისაგან განსხვავებული აქვს მხოლოდ ოთხი ელემენტი, ამიტომ

$$(x^4)_{nn}=(x^3)_{n,n-1}\,x_{n-1,n}+(x^3)_{n,n+1}\,x_{n+1,n}+(x^3)_{n,n+3}\,x_{n+3,n}+$$
$$+(x^3)_{n,n-3}\,x_{n-3,n}.$$

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

§ 75. შტარკის ეფექტი

ახლა განვიხილოთ გადაგვარებული სპექტრის შესაბამისი შეშფოთების თეორიის გამოყენების მაგალითი.

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

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

სადაც

$$n = 1, 2, 3, \ldots; \quad l = 0, 1, 2, \ldots n-1; \quad -l \leqslant m_l \leqslant +l;$$

ხოლო ენერგია ტოლია

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

[1] ამის შესახებ დაწვრილებით იხილეთ Д. И. Блохинцев. Основы квантовой механики, 1963, გვ. 272.

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

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

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

$$H' = -(\overline{\mathcal{E}}\overline{r}) = -e\mathcal{E}z, \tag{75,3}$$

სადაც $e\overline{r}$ არის ატომის დიპოლმომენტი. მაშასადამე, $\hat{H}^0$ ჰამილტონიანს, რომელიც გვქონდა ატომის ველში შეტანამდე, დაემატება ოპერატორი $\hat{H}' = -e\mathcal{E}z$, ე. ი. ველში მოთავსებული ატომის ჰამილტონიანს ექნება სახე

$$\hat{H} = \hat{H}^0 + \hat{H}'. \tag{75,4}$$

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

$$\varepsilon_0 = \frac{e}{a_0^2},$$

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

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

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

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

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

რადგან (33,29) ფორმულის თანახმად

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

ამიტომ (75,5) მატრიცული ელემენტი მიიღებს სახეს

$$\langle n'l'm'|\hat{H}'|nlm\rangle=$$
$$=-e\mathscr{E}\langle n'l'|r|nl\rangle\cdot\left\{\left[\frac{(l-m+1)(l+m+1)}{(2l+1)(2l+3)}\right]^{1/2}\delta_{l',l+1}\delta_{m',m}+\right.$$
$$\left.+\left[\frac{(l-m)(l+m)}{(2l-1)(2l+1)}\right]^{1/2}\delta_{l',l-1}\delta_{m',m}\right\},\qquad(75.6)$$

სადაც

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

ამგვარად, (75,7) ფორმულიდან საბოლოოდ გვექნება:

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

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

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

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

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

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

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

თუ გავშლით მინორებად, გვექნება

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

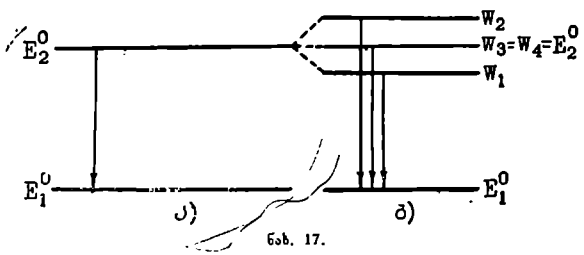
საიდანაც

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

ამგვარად, 4-ჯერადი გადაგვარებული ერთი დონის მაგიერ მივიღეთ ახალი დონეები:

$$W_1 = E_2^0 + A; \quad W_2 = E_2^0 - A; \qquad W_3 = E_2^0; \quad W_4 = E_2^0. \qquad (75,14)$$

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



ნახ. 17.

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

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

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

საიდანაც საბოლოოდ გვექნება

$$\langle 200 \mid H' \mid 210 \rangle = \frac{6}{\sqrt{5}} e\mathcal{E} a_0. \tag{75,17}$$

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

§ 76. დროზე დამოკიდებული შეშფოთების თეორია. გადასვლის ალბათობის ფორმულა

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

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

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

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

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

ამგვარად, საჭიროა ამოიხსნას განტოლება

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

როცა ცნობილია

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

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

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

რომლის ამონახსნია

$$\Psi_n^0(\mathbf{r}, t) = \psi_n^0(\mathbf{r})\, e^{-\frac{i}{\hbar} E_n^0 t} \tag{76,6}$$

სადაც $\psi_n^0(\mathbf{r})$ არის (76,4) შრედინგერის განტოლების ამონახსნი.

ვთქვათ, სისტემა ხასიათდება გარკვეული $E = E_n^0$ ენერგიით და $t = 0$ მომენტში სისტემაზე მოქმედებას იწყებს $\hat{H}'(\mathbf{r}, t)$ შეშფოთება ან, როგორც ამბობენ, მოხდა „შეშფოთების ჩართვა".

შეშფოთების ჩართვის შედეგად მოხდება სისტემის ენერგეტიკული მდგომარეობის ცვლილება. დავუშვათ, შეშფოთება სისტემაზე მოქმედებს მხოლოდ T დროის განმავლობაში; $t \geqslant T$ დროში კი შეშფოთება „ამორთულია". ვიგულისხმოთ, რომ შეშფოთების ამორთვის შემდეგ მდგომარეობა კვლავ სტაციონარულია; იგი დახასიათდება რაღაც ახალი ენერგიით $E = E_m$. ამგვარად, შეშფოთების ჩართვის შედეგად ადგილი ექნება სისტემის E_n^0 მდგომარეობიდან E_m^0 მდგომარეობაში გადასვლას. დროზე დამოკიდებული შეშფოთების თეორიის მიზანია ამ გადასვლის ალბათობის მოძებნა. როგორც ეხედავთ, არასტაციონარულ შემთხვევაში შეშფოთების თეორიის ამოცანა, მართლაც, განსხვავებულად ისმება.

გადასვლის ალბათობის გამოთვლის მიზნით (76,3) განტოლების $\Psi(\mathbf{r}, t)$ ამონახსნი გავშალოთ სტაციონარული მდგომარეობის საკუთარი (76,6) ფუნქციების მწკრივად და ვიგულისხმოთ, რომ გაშლის კოეფიციენტები დროზე დამოკიდებული სიდიდეებია

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \sum_k C_k(t)\, \Psi_k^0(\mathbf{r}, t). \tag{76,7}$$

ეს ფუნქცია შევიტანოთ (76,3) განტოლებაში; გვექნება

$$i\hbar \sum_k \dot{C}_k(t)\, \Psi_k^0 + i\hbar \sum_k C_k(t)\, \frac{\partial \Psi_k^0}{\partial t} = \sum_k C_k(t) \hat{H}^0 \Psi_k^0 + \sum_k C_k(t) \hat{H}' \Psi_k^0 \tag{76,8}$$

პირობის თანახმად Ψ_k^0 აკმაყოფილებს (76,5) განტოლებას, ამიტომ დაგვრჩება

$$i\hbar \sum_k \dot{C}_k(t)\, \Psi_k^0 = \sum_k C_k \hat{H}' \Psi_k^0. \tag{76,9}$$

ეს უკანასკნელი გავამრავლოთ Ψ_m^{0*}-ზე და ავიღოთ ინტეგრალი მთელს სივრცეზე. Ψ_k^0 ფუნქციების ორთო-ნორმირების გამო მივიღებთ:

$$i\hbar \frac{dC_m(t)}{dt} = \sum_k C_k(t) \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_m^{0*}(\mathbf{r}, t) \hat{H}'(\mathbf{r}, t)\, \Psi_k^0(\mathbf{r}, t)\, d\mathbf{r} \tag{76,10}$$

(76,6) გამოსახულების გათვალისწინებით კი შეგვიძლია დავწეროთ

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_m^{0*} \hat{H}' \Psi_k^0\, d\mathbf{r} = H'_{mk}(t)\, e^{i\omega_{mk} t}, \tag{76,11}$$

სადაც

$$H'_{mk}(t) = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_m^{0*}(\mathbf{r})\, \hat{H}'(\mathbf{r}, t)\, \psi_k^0(\mathbf{r})\, d\mathbf{r} \tag{76,12}$$

შეშფოთების ენერგიის მატრიცული ელემენტია სტაციონარული მდგომარეობის ტალღური ფუნქციების მიხედვით, ხოლო

$$\omega_{mk}=\frac{E_m^0-E_k^0}{\hbar} \tag{76,13}$$

ბორის სიხშირეა. (76,10) შეგვიძლია შემდეგი სახით გადავწეროთ:

$$i\hbar\,\frac{dC_m(t)}{dt}=\sum_k C_k(t)\,H'_{mk}(t)\,e^{i\omega_{mk}t} \tag{76,14}$$

ეს განტოლება სხვა წარმოდგენაში ჩაწერილი იგივე (76,3) განტოლებაა. შევუდგეთ მის მიახლოებით ამოხსნას. პირობის თანახმად $H'_{mk}(t)=0$, როცა $t\leqslant 0$, ამიტომ $C_m(t)=\text{const}$. სისტემა $t=0$ მომენტში ხასიათდება $E=E_n^0$ განსაზღვრული მნიშვნელობით. (76,7) ფორმულის ძალით ეს ნიშნავს, რომ $t=0$ მომენტში სისტემა იმყოფება გარკვეულ n მდგომარეობაში, ე. ი. ჩვენ გვექნება შემდეგი საწყისი პირობა:

$$C_k(0)=\delta_{nk}.\quad (k=1,\,2,\ldots) \tag{76,15}$$

(76,14) განტოლების მიახლოებითი ამოხსნის მეთოდი მდგომარეობს შემდეგში: უშვებენ, რომ $C_k(t)$ კოეფიციენტები იმდენად ნელა იცვლება, რომ შეგვიძლია ამ განტოლების მარჯვენა მხარეში ისინი შევცვალოთ იმ მნიშვნელობებით, რომლებიც მათ ჰქონდათ $t=0$ მომენტში, ე. ი. $C_k(t)=\delta_{nk}$-თი. მივიღებთ:

$$i\hbar\,\frac{dC_m^{(1)}(t)}{dt}=H'_{mn}(t)\,e^{i\omega_{mn}t} \tag{76,16}$$

ამ განტოლებიდან ამოხსნილი $C_m^{(1)}(t)$ მოგვცემს პირველ მიახლოებას. შემდეგ, თუ ამ მნიშვნელობას შევიტანთ (76,14) განტოლების მარჯვენა მხარეში და ამოვხსნით, მივიღებთ მეორე მიახლოებას და ა. შ.

ჩვენ შემოვისაზღვრებით მხოლოდ პირველი მიახლოებით. (76,16) განტოლების ინტეგრაცია მოგვცემს:

$$C_m^{(1)}(t)=\frac{1}{i\hbar}\int_0^t H'_{mn}(t)\,e^{i\omega_{mn}t}\,dt,\quad m\neq n \tag{76,17}$$

სადაც გათვალისწინებულია საწყისი პირობა, რომ $m\neq n$-სთვის $C_m(0)=0$.

კვანტური მექანიკის თანახმად $|C_m(t)|^2$ მოგვცემს ალბათობობას იმისა, რომ t მომენტში სისტემა აღმოჩნდება მდგომარეობაში, რომელიც ხასიათდება $E=E_m^0$ ენერგიით. მაგრამ სისტემა $t=0$ მომენტში პირობის თანახმად იყო მდგომარეობაში, რომლის ენერგიაა E_n^0, ამიტომ $w_{mn}=|C_m(t)|^2$ შეგვიძლია განვიხილოთ, როგორც $\hat{H}'(\mathbf{r},\,t)$ შეშფოთების შედეგად სისტემის n მდგომარეობიდან m-მდგომარეობაში გადასვლის ალბათობა.

ამგვარად, n-დან m-მდგომარეობაში გადასვლის ალბათობისათვის გვექნება მნიშვნელოვანი ფორმულა:

$$w_{mn}=\frac{1}{\hbar^2}\left|\int_0^t H'_{mn}(t)\,e^{i\omega_{mn}t}\,dt\right|^2. \tag{76,18}$$

ეს ფორმულა გამოდგება იმ შემთხვევაში, როცა როგორც საწყისი, ისე საბოლოო მდგომარეობა დისკრეტული სპექტრით ხასიათდება. არანაკლებ საინტერესოა ის შემთხვევა, როცა გადასვლა ხდება დისკრეტულიდან უწყვეტ სპექტრში. ამისათვის საჭირო იქნება ზემოთ მიღებული ფორმულების სათანადოდ შესწორება. უწყვეტი სპექტრი ხასიათდება პარამეტრების გარკვეული რაოდენობით, ეს პარა-

მეტრი შეიძლება იყოს იმპულსი, ენერგია და ა. შ. სიმარტივის მიზნით, ამ პარამეტრების ერთობლიობა აღვნიშნოთ ერთი $\varkappa$ ასოთი. მაშინ საბოლოო მდგომარეობის ენერგია ფუნქცია იქნება ამ პარამეტრის $E=E(\varkappa)$. შესაბამისი ტალღური ფუნქციაც დამოკიდებული იქნება იგივე პარამეტრზე, ე. ი. $\psi^0=\psi^0_\varkappa(\mathbf{r})$. მაშინ (76,7) გაშლაში ჯამის ნაცვლად გვექნება ინტეგრალი

$$\Psi(\mathbf{r}, t)=\int\limits_{-\infty}^{+\infty} C_\varkappa(t)\,\Psi^0_\varkappa(\mathbf{r}, t)\,d\varkappa, \tag{76,19}$$

სადაც

$$\Psi^0_\varkappa(\mathbf{r}, t)=\psi^0_\varkappa(\mathbf{r})\,e^{-\frac{i}{\hbar}E(\varkappa)t} \tag{76,20}$$

თუ ჩავთვლით, რომ $\psi^0_\varkappa(\mathbf{r})$ უწყვეტი სპექტრის ფუნქციები ნორმირებულია $\varkappa$ პარამეტრის სკალაზე, ე. ი.

$$\langle\psi^0_{\varkappa'}\,|\,\psi^0_\varkappa\rangle=\delta(\varkappa'-\varkappa), \tag{76,21}$$

მაშინ (76,14) განტოლების ნაცვლად მივიღებთ განტოლებას

$$i\hbar\,\frac{dC_\varkappa(t)}{dt}=\sum_k C_k(t)\,H'_{k\varkappa}(t)\,e^{\frac{i}{\hbar}[E(\varkappa)-E^0_k]t} \tag{76,22}$$

სადაც

$$H'_{k\varkappa}(t)=\int\psi^{0*}_\varkappa(\mathbf{r})\hat{H}'(\mathbf{r}, t)\,\psi^0_k(\mathbf{r})\,d\mathbf{r}, \tag{76,23}$$

ხოლო (76,17) ფორმულის ანალოგიურად გვექნება

$$C^{(1)}_\varkappa(t)=\frac{1}{i\hbar}\int\limits_0^t H'_{\varkappa n}(t)\,e^{\frac{i}{\hbar}[E(\varkappa)-E^0_n]t}\,dt. \tag{76,24}$$

ვინაიდან $\varkappa$ წარმოადგენს უწყვეტი სპექტრის დამახასიათებელ პარამეტრთა ერთობლიობას, ამიტომ შეგვიძლია ვილაპარაკოთ იმ პროცესის ალბათობაზე, რომელიც შეესაბამება სისტემის გადასვლას საწყისი n დისკრეტული მდგომარეობიდან მდგომარეობაში, რომლის დამახასიათებელი $\varkappa$ სიდიდე მოთავსებულია $\varkappa$ და $\varkappa+d\varkappa$ ინტეგრალში; ამასთან, $d\varkappa$ წარმოადგენს საბოლოო მდგომარეობის დამახასიათებელი ყველა პარამეტრის მცირე ინტერვალების ნამრავლს. ამ ალბათობას აღვნიშნავთ შემდეგნაირად:

$$dw_{\varkappa n}=|\,C^{(1)}_{\varkappa n}(t)\,|^2\,d\varkappa.$$

ამრიგად, აღნიშნული ალბათობისათვის გვექნება მნიშვნელოვანი ფორმულა

$$dw_{\varkappa n}=\frac{1}{\hbar^2}\left|\int\limits_0^t H'_{\varkappa n}(t)\,e^{\frac{i}{\hbar}[E(\varkappa)-E^0_n]t}\,dt\right|^2 d\varkappa. \tag{76,25}$$

გამოთვლების შემდგომი კონკრეტიზაცია დამოკიდებულია $\hat{H}'(\mathbf{r}, t)$ შეშფოთების ენერგიის ოპერატორის დროზე დამოკიდებულების ხასიათზე.

§ 77. გადასვლის ალბათობის ფორმულა, როცა შეშფოთების ენერგია დროის პერიოდული ფუნქციაა

განვიხილოთ გადასვლის ალბათობის ფორმულის კერძო, მაგრამ ძალიან მნიშვნელოვანი შემთხვევა, როცა შეშფოთების ენერგია დროზე ჰარმონიულადაა დამოკიდებული. ასეთი სიტუაცია გვხვდება მაშინ, როცა ვიხილავთ სინათლისა და

ატომის ურთიერთქმედებას; სახელდობრ, როცა სინათლის კვანტების ურთიერთქმედების შედეგად ატომი ძირითადი მდგომარეობიდან გადადის აგზნებულ ან უწყვეტი სპექტრის მდგომარეობაში (ფოტოეფექტი). ამავე შემთხვევას მიეკუთვნება პროცესი, როცა ატომი სინათლის კვანტის გამოსხივებით აგზნებული მდგომარეობიდან გადადის ენერგეტულად უფრო დაბალ მდგომარეობაში.

დავუშვათ, რომ შეშფოთების ენერგიის ოპერატორს აქვს სახე

$$\hat{H}'(\mathbf{r}, t) = \hat{H}'(\mathbf{r})\, e^{i\omega t} + \hat{H}''(\mathbf{r})\, e^{-i\omega t}. \tag{77,1}$$

რადგან $\hat{H}'(\mathbf{r}, t)$ ოპერატორი ერმიტული უნდა იყოს, ამიტომ ადვილად ვაჩვენებთ, რომ $\hat{H}''(\mathbf{r}) = \hat{H}'^{*}(\mathbf{r})$; ამგვარად,

$$\hat{H}'(\mathbf{r}, t) = \hat{H}'(\mathbf{r}) e^{i\omega t} + \hat{H}'^{*}(\mathbf{r})\, e^{-i\omega t}. \tag{77,2}$$

ზოგადობის დაურღვევლად შეგვიძლია ვიგულისხმოთ, რომ $\hat{H}'(\mathbf{r})$ ნამდვილია, ე. ი. $\hat{H}'(\mathbf{r}) = \hat{H}'^{*}(\mathbf{r})$; ასე რომ, შეშფოთების ენერგიის ოპერატორისათვის გვექნება შემდეგი გამოსახულება:

$$\hat{H}'(\mathbf{r}, t) = \hat{H}'(\mathbf{r})\, [e^{i\omega t} + e^{-i\omega t}], \tag{77,3}$$

სადაც ω წარმოადგენს შემშფოთებელი ველის საკუთარ სიხშირეს.

დავუშვათ, საწყის მომენტში ატომი იმყოფება ისეთ მდგომარეობაში, რომელიც ხასიათდება E_n^0 ენერგიით, და დროზე ჰარმონიულად დამოკიდებული შეშფოთების გავლენით გადადის ახალ მდგომარეობაში. აქ გვექნება ორი შემთხვევა: პირველი, როცა ელექტრონი დისკრეტული E_n^0 დონიდან გადადის უწყვეტი სპექტრის $E(\varkappa)$ ენერგიის მდგომარეობაში, სადაც $\varkappa$ უწყვეტი სპექტრის დამახასიათებელი პარამეტრია, და მეორე, როცა ელექტრონი ერთი E_n^0 დისკრეტული დონიდან გადადის მეორე E_m^0 დისკრეტულ დონეზე. პრაქტიკულად საქმე გვაქვს როგორც პირველ, ისე მეორე შემთხვევასთან, ამიტომ ორივე შემთხვევას შევისწავლით ცალ-ცალკე. დავიწყოთ პირველი შემთხვევის განხილვით.

წყვეტილიდან უწყვეტ სპექტრში გადასვლის ალბათობის ფორმულა. ვთქვათ, ატომი მონოქრომატული პერიოდული შეშფოთების შედეგად E_n^0 მდგომარეობიდან გადადის უწყვეტი სპექტრის $E(\varkappa)$ მდგომარეობაში. ვიგულისხმოთ, რომ გადასვლის ალბათობისათვის შეგვიძლია შემოვისაზღვროთ მხოლოდ პირველი მიახლოებით. გადასვლის მატრიცული ელემენტისათვის გვექნება

$$H'_{\varkappa n}(t) = H'_{\varkappa n}[e^{i\omega t} + e^{-i\omega t}]. \tag{77,4}$$

მეორე მხრივ, წყვეტილიდან უწყვეტ სპექტრში გადასვლის ალბათობა დაკავშირებული იქნება $C_{\varkappa}^{(1)}(t)$ კოეფიციენტთან, რომელიც გამოიხატება (76,24) ფორმულით

$$C_{\varkappa}^{(1)}(t) = \frac{1}{i\hbar} \int_0^t H'_{\varkappa n}(t)\, e^{\frac{i}{\hbar}[E(\varkappa) - E_n^0]t}\, dt. \tag{77,5}$$

შევიტანოთ ამ გამოსახულებაში (77,4) მატრიცული ელემენტი და მოვახდინოთ მარტივი ინტეგრაცია; მივიღებთ:

$$C_{\varkappa}^{(1)}(t) = \frac{H'_{\varkappa n}}{i\hbar} \left\{ \frac{e^{ia_+ t} - 1}{ia_+} + \frac{e^{ia_- t} - 1}{ia_-} \right\}, \tag{77,6}$$

სადაც

$$a_{\pm}\hbar = E(\varkappa) - E_n^0 \pm \hbar\omega; \tag{77,7}$$

რადგან $C_{\varkappa}^{(1)}(t)$ მცირე სიდიდეა, ამიტომ (77,6)-ში საკმარისია შევინარჩუნოთ ის წევრი, რომელიც უფრო მეტია. რადგან $\omega>0$ და $E(\varkappa)>0$, ამიტომ $a_+>a_-$. ამის გამო, როცა $E(\varkappa)\simeq E_n^0+\hbar\omega$, მაშინ $a_-\approx 0$, ხოლო $a_+=2\omega$; ასე რომ, (77,6)-ში შეგვიძლია პირველი წევრი უგულებელვყოთ და შევინარჩუნოთ მხოლოდ მეორე.

ამგვარად, E_n^0 მდგომარეობიდან უწყვეტი სპექტრის $(\varkappa, \varkappa+d\varkappa)$ მდგომარეობაში გადასვლის ალბათობა დროის t-მომენტისათვის გამოიხატება ფორმულით

$$dw'_{\varkappa n}=\frac{|H'_{\varkappa n}|^2}{\hbar^2}\left|\frac{e^{ia_- t}-1}{ia_-}\right|^2 d\varkappa \tag{77,8}$$

აბსოლუტური მნიშვნელობის ნიშნიდან გამოვიტანოთ $e^{ia_- t/2}$; გვექნება

$$dw'_{\varkappa n}=\frac{|H'_{\varkappa n}|^2}{\hbar^2}\, t\,\frac{\sin^2(a_- t/2)}{(a_-/2)^2\, t}\, d\varkappa. \tag{77,9}$$

გავიხსენოთ დირაკის დელტა ფუნქციის ერთ-ერთი განმარტება

$$\delta(x)=\lim_{t\to\infty}\frac{\sin^2 xt}{\pi x^2 t}, \tag{77,10}$$

მაშინ, თუ დავუშვებთ, რომ საწყისი მომენტიდან გავიდა საკმარისად დიდი დრო, (77,9)-დან მივიღებთ

$$dw'_{\varkappa n}=\frac{|H'_{\varkappa n}|^2}{\hbar^2}\, t\pi\delta\left(\frac{a_-}{2}\right)d\varkappa; \tag{77,11}$$

თუ შევიტანთ a_--ის მნიშვნელობას და გამოვიყენებთ $\delta(ax)=\frac{1}{a}\,\delta(x)$ ფორმულას, გვექნება

$$dw'_{\varkappa n}=\frac{2\pi}{\hbar}\,|H'_{\varkappa n}|^2\,\delta(E(\varkappa)-E_n^0-\hbar\omega)\,d\varkappa t, \tag{77,12}$$

საიდანაც დროის ერთეულში გადასვლის ალბათობისათვის შეგვიძლია დავწეროთ

$$dw_{\varkappa n}=\frac{2\pi}{\hbar}\,|H'_{\varkappa n}|^2\,\delta(E(\varkappa)-E_n^0-\hbar\omega)\,d\varkappa. \tag{77,13}$$

როდესაც უწყვეტი სპექტრის მდგომარეობა ხასიათდება რამდენიმე პარამეტრით, მაგალითად, $\varkappa_1$, $\varkappa_2$, $\varkappa_3$, მაშინ n მდგომარეობიდან $(\varkappa_1, \varkappa_1+d\varkappa_1)$, $(\varkappa_2, \varkappa_2+d\varkappa_2)$, $(\varkappa_3, \varkappa_3+d\varkappa_3)$ მდგომარეობაში გადასვლის ალბათობისათვის დროის ერთეულში გვექნება ფორმულა

$$dw_{\varkappa_1\varkappa_2\varkappa_3;n}=\frac{2\pi}{\hbar}\,|H'_{\varkappa_1\varkappa_2\varkappa_3;n}|^2\,\delta(E(\varkappa_1,\varkappa_2,\varkappa_3)-E_n^0-\hbar\omega)\,d\varkappa_1\,d\varkappa_2\,d\varkappa_3 \tag{77,14}$$

დირაკის დელტა ფუნქციის არსებობა გადასვლის ალბათობის ფორმულაში უზრუნველყოფს ენერგიის შენახვას. მართლაც, გადასვლის ალბათობა ნულის ტოლი არ არის მხოლოდ მაშინ, როცა შესრულებულია ენერგიის შენახვის კანონი

$$E(\varkappa_1,\varkappa_2,\varkappa_3)=E_n^0+\hbar\omega \tag{77,15}$$

იმ შემთხვევაში, როცა დაცულია ენერგიის შენახვის კანონი, გადასვლის ალბათობა, რადგან $\delta(0)=\infty$, უსასრულობის ტოლია. ამიტომ (77,15)-ს ხშირად რეზონანსის პირობას უწოდებენ. სინამდვილეში გადასვლის ალბათობა სასრულო სიდი-

დეა, რამდენადაც რეზონანსის ნებისმიერად მცირე მახლობლობაში, დირაკის ფუნქციის თვისების გამო, გადასვლის ალბათობა ნულის ტოლია. ამიტომ გადასვლის ალბათობა ნებისმიერად მცირე ინტერვალში სასრულო გამოვა. ამაში დასარწმუნებლად საჭიროა $\varkappa_1$, $\varkappa_2$, $\varkappa_3$ პარამეტრების ნაცვლად შემოვიღოთ ისეთი ახალი პარამეტრები, რომელთაგან ერთ-ერთი იქნება ენერგია და შემდეგ ამ ენერგიით მოვახდინოთ ინტეგრაცია.

მეტად მნიშვნელოვანია ის შემთხვევა, როცა $\varkappa_1$, $\varkappa_2$, $\varkappa_3$ პარამეტრები ადგენენ ვექტორს $\varkappa(\varkappa_1, \varkappa_2, \varkappa_3)$. მაშინ საინტერესოა ვიპოვოთ დროის ერთეულში გადასვლის ალბათობა საწყისი n მდგომარეობიდან საბოლოოში, რომლის დამახასიათებელი $\varkappa$ ვექტორის მიმართულება ძევს $d\Omega_\varkappa$ სხეულოვან კუთხეში. ამ მიზნით გადავიდეთ ახალ ცვლადებზე

$$d\varkappa_1 d\varkappa_2 d\varkappa_3 = \varkappa^2 d\varkappa d\Omega_\varkappa = \rho_f(E) dE d\Omega_\varkappa, \tag{77,16}$$

სადაც იგულისხმება, რომ ენერგია დაკავშირებულია $\varkappa$-სთან და

$$\rho_f(E) = \varkappa^2 \frac{d\varkappa}{dE} \tag{77,17}$$

ამ სიდიდეს საბოლოო მდგომარეობის სიმკვრივეს უწოდებენ. $d\Omega_\varkappa$-არის სხეულოვანი კუთხე „$\varkappa$-სივრცეში".

(77,16) შევიტანოთ (77,13)-ში და ავიღოთ ინტეგრალი dE-თი; გვექნება

$$w_{\varkappa,n}\, d\Omega_\varkappa = \frac{2\pi}{\hbar} |H'_{\varkappa,n}|^2 \rho_f(E)\, d\Omega_\varkappa. \tag{77,18}$$

ამასთან, ამ ფორმულაში იგულისხმება ენერგიის ის მნიშვნელობა, რომელიც აკმაყოფილებს ენერგიის შენახვის კანონის $E = E_n^0 + \hbar\omega$; სხვა შემთხვევაში გადასვლის ალბათობა ნულის ტოლია.

როცა გვაქვს კერძო შემთხვევა $\varkappa = \mathbf{p}$, სადაც $\mathbf{p}$ საბოლოო მდგომარეობის იმპულსია, მაშინ (77,17) ფორმულის თანახმად

$$\rho_f(E) = \mu p = \frac{1}{2} (2\mu)^{3/2} E^{1/2}, \tag{77,19}$$

სადაც ჩვენ გამოვიყენეთ $E = p^2/2\mu$ ფორმულა.

საბოლოო მდგომარეობის სიმკვრივის კონკრეტული სახე დამოკიდებულია ტალღური ფუნქციების ნორმირებაზე. $\rho_f(E)$-ს (77,19) გამოხატულება აქვს მაშინ, როცა დისკრეტული სპექტრის ფუნქცია ნორმირებულია ერთზე, უწყვეტი სპექტრისა კი $\delta(\mathbf{p}-\mathbf{p}')$-ზე. როცა დისკრეტული სპექტრის (საწყისი მდგომარეობის) ფუნქცია ნორმირებულია ერთზე, საბოლოო მდგომარეობისა კი — მოცულობაზე, მაშინ

$$\rho_f = \frac{\tau p^2 dp}{(2\pi\hbar)^3 dE} = \frac{\tau \mu p}{(2\pi\hbar)^3}, \tag{77,19'}$$

სადაც τ არის მოცულობა, რომელშიაც იმყოფება ატომი. როცა საბოლოო მდგომარეობის ფუნქცია ნორმირებულია ენერგიაზე, მაშინ $\rho_f = 1$. ამაში ადვილად დავრწმუნდებით, თუ გამოვიყენებთ ერთი ნორმირებიდან მეორეზე გადასვლის ფორმულებს. აშკარაა, რომ (77,19') საბოლოო მდგომარეობის სიმკვრივე ემთხვევა იმ ფორმულას, რომელიც მივიღეთ § 58-ში მდგომარეობათა რიცხვისათვის ენერგიის ინტერვალზე.

როცა საბოლოო მდგომარეობაში გვაქვს სინათლის კვანტი, რომლის ენერგია $E=\hbar\omega$, მაშინ $E=cp$ და გვექნება

$$\rho_f=\frac{\tau E^2}{(2\pi\hbar)^3c^3}=\frac{\tau(\hbar\omega)^2}{(2\pi\hbar c)^3}. \tag{77,20}$$

ამგვარად, რაიმე ამოცანის ამოხსნის დროს ტალღური ფუნქციების შერჩეული ნორმირებისათვის სათანადოდ უნდა შევარჩიოთ საბოლოო მდგომარეობის სიმკვრივეც.

ჩვენ ვხედავთ, რომ გადასვლის ალბათობის საპოვნელად საკმარისია გადასვლის მატრიცული ელემენტის გამოთვლა შეუშფოთებელი მდგომარეობის ტალღური ფუნქციებით.

(77,18) ფორმულას ხშირად ასეც წერენ:

$$w_{if}d\Omega=\frac{2\pi}{\hbar}|\langle\psi_f|\hat{H}'|\psi_i\rangle|^2\rho_f(E)\,d\Omega, \tag{77,21}$$

სადაც

$$\langle\psi_f|\hat{H}'|\psi_i\rangle=\int\limits_{-\infty}^{+\infty}\psi_f^*(\mathbf{r})\hat{H}'(\mathbf{r})\psi_i(\mathbf{r})\,d\mathbf{r} \tag{77,22}$$

წარმოადგენს საწყისი i-დან საბოლოო f-მდგომარეობაში გადასვლის მატრიცულ ელემენტს (i-მიუთითებს საწყისს — initial, f კი — საბოლოოს — final).

იმ შემთხვევაში, როცა გადასვლა ხდება უწყვეტიდან უწყვეტ სპექტრში, გადასვლის ალბათობა დროის ერთეულში ისეთივე ფორმულით გამოიხატება, როგორიცაა (77,18), ოღონდ n ინდექსიც უნდა შეიცვალოს უწყვეტი სპექტრის საწყისი მდგომარეობის დამახასიათებელი პარამეტრებით.

წყვეტილიდან წყვეტილ სპექტრში გადასვლის ალბათობის ფორმულა. ახლა განვიხილოთ მეორე შემთხვევა, როცა გადასვლა ხდება დისკრეტული სპექტრის E_n^0 დონიდან დისკრეტული სპექტრის E_m^0 მდგომარეობაში. ჯერჯერობით დავუშვათ, რომ სისტემაზე მოქმედებს დროზე ჰარმონიულად დამოკიდებული მკაცრად მონოქრომატული შეშფოთება -- (77,3); მაშინ (76,17) ფორმულის გამოყენებით, წინა შემთხვევის ანალოგიურად, მივიღებთ:

$$C_m^{(1)}(t)=\frac{H'_{mn}}{\hbar}\left\{\frac{e^{ia_+t}-1}{ia_+}+\frac{e^{ia_-t}-1}{ia_-}\right\}, \tag{77,23}$$

სადაც

$$a_\pm=\omega_{mn}\pm\omega. \tag{77,24}$$

$|C_m^{(1)}(t)|^2$ გამოხატავს n-დან m-მდგომარეობაში გადასვლის ალბათობას; იგი საზოგადოდ მცირე სიდიდეა. მაგრამ, როგორც (77,23) ფორმულა გვიჩვენებს, იგი შეიძლება საგრძნობლად გაიზარდოს, როცა a_+ და a_- მნიშვნელობიდან ერთერთი ძალიან მცირეა. ამასთან, გასაგებია, რომ არ შეიძლება ორივე ეს სიდიდე ერთდროულად მცირე იყოს, ამიტომ (77,23)-ში პრაქტიკულად ინტერფერენციის ადგილი არ ექნება.

გვექნება ორი შემთხვევა. 1. a_+ მცირეა ($a_+\approx 0$). (77,24) ფორმულის თანახმად, როცა $a_+=\omega_{mn}+\omega\approx 0$, მაშინ $\omega\simeq\omega_{nm}$, ე. ი. შემაშფოთებელი ველის საკუთარი სიხშირე რეზონანსშია გადასვლის ω_{mn} სიხშირესთან. რადგან $\omega\geqslant 0$, ამიტომ $E_n^0\geqslant E_m^0$, ე. ი. ადგილი აქვს სინათლის გამოსხივებას. ამ შემთხვევაში (77,23) გამოსახულების მეორე წევრის მნიშვნელი a_- ტოლი იქნება — 2ω. მაშასადამე, მეორე წევრი სიდიდით გაცილებით მცირეა პირველზე. ამიტომ სინათლის

გამოსხივების შემთხვევაში შეგვიძლია შემოვისაზღვროთ (77,23) გამოსახულების პირველი წევრით 2. a_- მცირეა ($a_- \approx 0$). (77,24) ფორმულის თანახმად, $a_-=0$ მაშინ, როცა $\omega_{mn}=\omega$, ე. ი. როცა ადგილი აქვს სინათლის შთანთქმას ($E_m^0 \geqslant E_n^0$). ამ შემთხვევაში, (77,23) ფორმულაში მხოლოდ მეორე წევრით დავკმაყოფილდეთ, რადგან პირველი წევრის მნიშვნელი 2ω-ს ტოლი იქნება.

მაგალითისათვის განვიხილოთ შთანთქმის შემთხვევა. (77,23)-ში პირველი წევრის უგულებელყოფით გვექნება

$$C_m^{(1)}(t)=\frac{H'_{mn}}{\hbar}\,\frac{e^{ia_-t}-1}{ia_-}. \qquad (77,25)$$

როცა $a_-t \ll 1$, ეს გამოსახულება ალბათობისათვის მოგვცემს

$$|C_m^{(1)}(t)|^2=\frac{1}{\hbar^2}|H'_{mn}|^2 t^2. \qquad (77,26)$$

მივიღეთ პარადოქსალური შედეგი: ალბათობა იზრდება დროის არა პირველი ხარისხის, არამედ კვადრატის პროპორციულად. ეს იმას ნიშნავს, რომ დროის ერთეულში გადასვლის ალბათობა დროის მიხედვით მუდმივი არ არის. გამოვარკვიოთ ასეთი უცნაური შედეგის მიზეზი. ფორმალურად სრულიად ისევე, როგორც ეს გავაკეთეთ დისკრეტულიდან უწყვეტ სპექტრში გადასვლის ალბათობის ფორმულის გამოყვანის დროს, (77,25) ფორმულის შემთხვევაშიც დროის ერთეულში გადასვლის ალბათობისათვის გვექნება

$$w_{mn}=\frac{2\pi}{\hbar}|H'_{mn}|^2\,\delta(E_m^0-E_n^0-\hbar\omega), \qquad (77,27)$$

რომელიც, როცა $E_m^0=E_n^0+\hbar\omega$, ყოველთვის უსასრულობის ტოლია. როცა ვიხილავდით დისკრეტულიდან უწყვეტ სპექტრში გადასვლას, მაშინ დირაკის დელტა ფუნქციაში ერთ-ერთი ენერგია უწყვეტად იცვლებოდა, რაც ინტეგრაციის ჩატარების საშუალებას გვაძლევდა. (77,27) ფორმულაში ინტეგრირება აღარ შეგვიძლია, რადგან E_n^0 და E_m^0 მკაცრად განსაზღვრული სიდიდეებია. როცა შემაშფოთებელი ველი მონოქრომატულია, მაშინ $\hbar\omega$-ც მკაცრად განსაზღვრულია და ინტეგრაცია არც ამ ენერგიით შეიძლება. ამგვარად, დროის ერთეულში გადასვლის ალბათობა მონოქრომატული შეშფოთების გავლენით დროზე დამოკიდებული არ იქნება მხოლოდ მაშინ, როცა საბოლოო მდგომარეობის ენერგია განაწილებულია უწყვეტად ან ქმნის ერთმანეთთან ძალიან ახლოს მდებარე დისკრეტულ დონეთა თანმიმდევრობას.

დისკრეტულიდან დისკრეტულ სპექტრში გადასვლის ალბათობა მუდმივი იქნება მაშინ, როცა შეშფოთების ენერგია მონოქრომატული კი არ არის, არამედ შეიცავს სხვადასხვა სიხშირის ტალღების ერთობლიობას. ამ შემთხვევაში H'_{mn} მატრიცული ელემენტი დამოკიდებული იქნება არა ერთ სიხშირეზე, არამედ სიხშირეთა სპექტრზე, რაც (77,27) ფორმულაში ინტეგრაციის ჩატარებისა და დირაკის დელტა ფუნქციის ჩამოშორების საშუალებას გვაძლევს. ასეთი პროცედურის დროს თუ დისკრეტულიდან უწყვეტ სპექტრში გადასვლის ალბათობის ფორმულაში შემოდიოდა საბოლოო მდგომარეობების სიმკვრივე, განხილულ შემთხვევაში გადასვლის ალბათობის ფორმულაში გაგვიჩნდება ველის ინტენსივობის დამახასიათებელი სიდიდე.

ამგვარად, როცა გადასვლა ხდება განსაზღვრული დისკრეტული E_n^0 დონიდან დისკრეტულ E_m^0 დონეზე, შეშფოთების ენერგიისათვის უნდა ავიღოთ არამონოქრომატული ტალღები.

დავუშვათ, რომ შეშფოთების ენერგია შეგვიძლია წარმოვიდგინოთ როგორც მონოქრომატული ტალღების ფურიეინტეგრალი

$$H'(\mathbf{r}, t)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{+\infty} H'(\mathbf{r}, \omega)\, e^{-i\omega t}\, d\omega. \tag{77,28}$$

აქედან შეშფოთების ენერგიის ფურიეკომპონენტისათვის გვექნება

$$H'(\mathbf{r}, \omega)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{+\infty} H'(\mathbf{r}, t)\, e^{i\omega t}\, dt. \tag{77,29}$$

(77,28) ფორმულის თანახმად n-დან m მდგომარეობაში გადასვლის მატრიცული ელემენტისათვის მივიღებთ:

$$H'_{mn}(t)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{+\infty} d\omega e^{-i\omega t}\int_{-\infty}^{+\infty}\psi_m^*\,\hat{H}'(\mathbf{r}, \omega)\,\psi_n d\mathbf{r}, \tag{77,30}$$

ე. ი.

$$H'_{mn}(t)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-i\omega t}\, H'_{mn}(\omega)\, d\omega, \tag{77,31}$$

სადაც $H'_{mn}(\omega)$ არის შეშფოთების ენერგიის ω სიხშირის შესაბამისი ფურიეკომპონენტის მატრიცული ელემენტი. უკანასკნელი ფორმულიდან შებრუნების თეორემით გვექნება

$$H'_{mn}(\omega)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{+\infty} H'_{mn}(t)\, e^{i\omega t}\, dt. \tag{77,32}$$

გავიხსენოთ (76,17) ფორმულა და ვიგულისხმოთ, რომ შეშფოთება მოქმედებს მხოლოდ $(0, T)$ შუალედში, ე. ი. შეშფოთების ენერგია ნულის ტოლია, როცა $t<0$ და $t>T$. დავუშვათ, $H'_{mn}(t)$ იმდენად მცირეა, რომ შეშფოთების თეორიის პირველი მიახლოება სამართლიანია $t=T$-სათვის, მაშინ $C_m^{(1)}(t)$ ამპლიტუდისათვის გვექნება

$$C_m^{(1)}(t)=\frac{1}{i\hbar}\int_0^t H'_{mn}(\tau)\, e^{i\omega_{mn}\tau}\, d\tau=\frac{1}{i\hbar}\int_{-\infty}^{+\infty} H'_{mn}(\tau)\, e^{i\omega_{mn}\tau}\, d\tau. \tag{77,33}$$

გავითვალისწინოთ (77,32) ფორმულა, მაშინ (77,33) მიიღებს სახეს

$$C_m^{(1)}(t)=\frac{\sqrt{2\pi}}{i\hbar} H'_{mn}(\omega_{mn}), \tag{77,34}$$

ხოლო n-დან m მდგომარეობაში გადასვლის ალბათობისათვის გვექნება

$$w_{mn}=\frac{2\pi}{\hbar^2}\,|\,H'_{mn}(\omega_{mn})\,|^2. \tag{77,35}$$

ეს ფორმულა გვიჩვენებს, რომ n-დან m მდგომარეობაში გადასვლის ალბათობა მხოლოდ და მხოლოდ მაშინ არ არის ნული, როცა შეშფოთების ენერგიის სპექტრში არსებობს $\omega_{mn}=(E_m^0-E_n^0)/\hbar$ სიხშირე, ე. ი. ამ შემთხვევაში გადასვლას აქვს რეზონანსული ხასიათი. მდგომარეობა ისეთია, თითქოს სისტემა წარმოადგენდეს ω_{mn} სიხშირის მქონე ოსცილატორთა ერთობლიობას. გარეშე ურთიერთქმედების

შედეგად აგზნება ხდება მხოლოდ იმ ოსცილატორისა, რომლის რხევის სიხშირე ემთხვევა ველის საკუთარ სიხშირეს.

(77,35) ფორმულიდან ჩანს, რომ გადასვლის ალბათობაში არსებითია არა თვით შეშფოთების ენერგიის მატრიცული ელემენტი, არამედ ამ ელემენტის ω_{mn} სიხშირის შესაბამისი ფურიეკომპონენტი. კონკრეტული ამოცანების განხილვისას გამოჩნდება, რომ (77,35) გადასვლის ალბათობის ფორმულაში დრო მართლაც პირველ ხარისხში შედის.

გადასვლები მუდმივი შეშფოთების შემთხვევაში. ბოლოს განვიხილოთ კერძო შემთხვევა, როცა შეშფოთების ენერგიის ოპერატორი დროზე დამოკიდებული არ არის. ეს იმას ნიშნავს, რომ $0 \leqslant t \leqslant T$ ინტერვალში შეშფოთების ენერგია დროის მიხედვით არ იცვლება, ხოლო ამ ინტერვალის გარეთ იგი ნახტომისებურად ხდება ნულის ტოლი. ასეთი მუდმივი შეშფოთების გავლენით შესაძლებელია სისტემის გადასვლა ერთიდან მეორე მდგომარეობაში. განსაკუთრებით მნიშვნელოვანია გადასვლები უწყვეტიდან უწყვეტ სპექტრში. ვთქვათ, სისტემა საწყის მომენტში იმყოფება უწყვეტი სპექტრის მდგომარეობაში, რომელიც ხასიათდება $\varkappa_0$ პარამეტრით და ვიპოვოთ დროის ერთეულში გადასვლის ალბათობა კვლავ უწყვეტი სპექტრის მდგომარეობაში, რომლის დამახასიათებელი $\varkappa$ პარამეტრი მოთავსებული იქნება $\varkappa$ და $(\varkappa+d\varkappa)$-ს შორის.

სათანადო გადასვლის ალბათობა გამოითვლება (76,25) ფორმულით, რომელიც იმის გამო, რომ მატრიცული ელემენტი $H'_{\varkappa,\varkappa_0}$ დროზე დამოკიდებული არ არის, შემდეგ სახეს მიიღებს:

$$dw_{\varkappa,\varkappa_0} = \frac{|H'_{\varkappa\varkappa_0}|^2}{\hbar^2}\left|\int_0^t e^{\frac{i}{\hbar}[E(\varkappa)-E(\varkappa_0)]t}\,dt\right|^2 d\varkappa \qquad (77{,}36)$$

ამ გამოსახულებაში შემავალი ინტეგრალი, ისევე როგორც (76,13) ფორმულის მიღების დროს ვაჩვენეთ, დირაკის დელტა ფუნქციაზე დაიყვანება; ასე რომ

$$dw_{\varkappa,\varkappa_0} = \frac{2\pi}{\hbar}\,|H'_{\varkappa,\varkappa_0}|^2\cdot\delta(E(\varkappa)-E(\varkappa_0))\,d\varkappa. \qquad (77{,}37)$$

ამ ფორმულიდან კი ჩანს, რომ უწყვეტ სპექტრში გადასვლები დასაშვებია მხოლოდ და მხოლოდ ერთნაირი ენერგიის მქონე მდგომარეობებს შორის $E(\varkappa)=E(\varkappa_0)$.

აღსანიშნავია, რომ (77,37) უშუალოდ გადასვლის ალბათობას არ გამოხატავს, მას არც კი აქვს ალბათობის განზომილება. იგი ჩვენ შეგვიძლია განვიხილოთ როგორც გადასვლათა რიცხვი დროის ერთეულში. ამასთან, მისი განზომილება დამოკიდებულია უწყვეტი სპექტრის ფუნქციების ნორმირებაზე. (77,37) ფორმულა ადრე განხილული მეთოდით შეგვიძლია ჩაეწეროთ საბოლოო მდგომარეობის სიმკვრივის საშუალებით.

დაბოლოს შევნიშნოთ, რომ (77,37) ფორმულის მიღება შესაძლებელია დროზე პარმონიულად დამოკიდებული შეშფოთების შემთხვევაში მიღებული გადასვლის ალბათობის ფორმულებიდანაც, თუ დავუშვებთ, რომ შემაშფოთებელი ველის სიხშირე $\omega=0$.

§ 78. გადასვლის ალბათობის ფორმულა მეორე მიახლოებაში

გამოვიყვანოთ გადასვლის ალბათობის ფორმულა მეორე მიახლოებაში. სიმარტივის მიზნით შემოვისაზღვროთ შემთხვევით, როცა შეშფოთების ენერგიის ოპერატორი დროზე დამოკიდებული არ არის. როგორც წინა პარაგრაფში აღვნიშ-

ნეთ, ასეთმა შეშფოთებამ შეიძლება გამოიწვიოს სისტემის გადასვლა ერთიდან მეორე მდგომარეობაში, ოღონდ ამ შემთხვევაში დასაშვებია გადასვლები ერთნაირი ენერგიების მქონე მდგომარეობებს შორის.

განვიხილოთ მეტად მნიშვნელოვანი შემთხვევა, როცა სისტემა უწყვეტი სპექტრის $E_{\varkappa_0}$ დონიდან გადადის უწყვეტი სპექტრის $E_{\varkappa}$ დონეზე, სადაც $\varkappa_0$ და $\varkappa$ უწყვეტი სპექტრის დამახასიათებელი პარამეტრებია შესაბამისად საწყის და საბოლოო მდგომარეობაში. ცხადია, ასეთი გადასვლის ალბათობა პროპორციული იქნება $H'_{\varkappa,\varkappa_0}$ მატრიცული ელემენტისა. მაგრამ შეიძლება აღმოჩნდეს, რომ $H'_{\varkappa,\varkappa_0}$ ყველა მატრიცული ელემენტი, რომლებიც აკმაყოფილებენ $E_{\varkappa}=E_{\varkappa_0}$ ენერგიის შენახვის კანონს, ნულის ტოლია, ხოლო მატრიცული ელემენტები $H'_{m\varkappa_0}$, რომელთათვისაც $E_{\varkappa_0} \quad E_{\varkappa}$, ნულისაგან განსხვავდებიან; ასეთ შემთხვევაში საჭიროა შეშფოთების თეორიის მიახლოების გაუმჯობესება და მეორე მიახლოების განხილვა.

რადგან საწყისიდან საბოლოო მდგომარეობაში პირდაპირი გადასვლა აკრძალულია, ჯერ უნდა განვიხილოთ გადასვლა საწყისი მდგომარეობიდან რაღაც m-მდგომარეობაში, რომელსაც საშუალედო მდგომარეობას უწოდებენ, შემდეგ კი m-დან საბოლოო $\varkappa$-მდგომარეობაში. ასეთი ტიპის გადასვლებს უწოდებენ არაპირდაპირ გადასვლებს, ანდა გადასვლებს საშუალედო მდგომარეობების გავლით. გასაგებია, რომ ასეთი გადასვლის ალბათობა პროპორციული იქნება $H'_{m\varkappa_0}H'_{\varkappa m}$ მატრიცული ელემენტების ნამრავლისა.

გადასვლის ალბათობის ფორმულის გამოყვანის მიზნით გამოვიდეთ (76,24) განტოლებიდან, რომლიდანაც თუ მარჯვენა მხარეში ჩავსვამთ $C_m^{(1)}(t)$ პირველი მიახლოების კოეფიციენტს, მივიღებთ განტოლებას მეორე მიახლოების $C_{\varkappa}^{(2)}(t)$ კოეფიციენტისათვის. ამგვარად, თუ გარკვეულობის მიზნით ვიგულისხმებთ, რომ საშუალედო მდგომარეობის სპექტრი დისკრეტულია, მაშინ გვექნება[1]

$$i\hbar \frac{dC_{\varkappa}^{(2)}(t)}{dt} = \sum_m C_m^{(1)}(t)\, H'_{\varkappa m}\, e^{i\omega_{\varkappa m}t}, \tag{78,1}$$

სადაც $\hbar\omega_{\varkappa m}=E(\varkappa)-E_m$, ხოლო $H'_{\varkappa m}$ მატრიცული ელემენტი, პირობის თანახმად, დროზე არ არის დამოკიდებული. ცხადია, რომ $C_m^{(1)}(t)$-ს საშუალებით განისაზღვრება საწყისი $\varkappa_0$ მდგომარეობიდან საშუალედო m მდგომარეობაში გადასვლის ალბათობა, მაშინ, როცა $C_{\varkappa}^{(2)}(t)$ კოეფიციენტის აბსოლუტური მნიშვნელობის კვადრატი გამოხატავს საშუალედოდან საბოლოო მდგომარეობაში გადასვლის ალბათობას. ცხადია, რომ $C_{\varkappa_0}^{(1)}(0)=1$, $C_m^{(1)}(0)=0$ და (78,1) განტოლებაც უნდა ამოიხსნას საწყისი პირობით

$$C_{\varkappa}^{(2)}(0)=0.$$

$C_m^{(1)}(t)$ კოეფიციენტი განისაზღვრება (76,24) ფორმულით

$$C_m^{(1)}(t)=\frac{1}{i\hbar}\int_0^t H'_{m\varkappa_0}(\tau)\, e^{i\omega_{m\varkappa_0}\tau}\, d\tau. \tag{78,2}$$

რადგან შეშფოთების ენერგია დროზე დამოკიდებული არ არის, ამიტომ შეგვიძლია დავწეროთ

$$C_m^{(1)}(t)=\frac{H'_{m\varkappa_0}}{i\hbar}\,\frac{e^{i\omega_{m\varkappa_0}t}-1}{i\omega_{m\varkappa_0}}. \tag{78,3}$$

[1] უწყვეტი სპექტრის შემთხვევაში საკმარისია ჯამი შევცვალოთ ინტეგრალით.

შევიტანოთ $C_m^{(1)}(t)$-ს ეს მნიშვნელობა (78,1) განტოლებაში; გვექნება

$$i\hbar\frac{dC_x^{(2)}(t)}{dt}=\sum_m\frac{H'_{mx_0}H'_{xm}}{i\hbar(i\omega_{mx_0})}\{e^{i(\omega_{mx_0}+\omega_{xm})t}-e^{i\omega_{xm}t}\},\qquad(78,4)$$

საიდანაც $C_x^{(2)}(0)=0$ საწყისი პირობის გათვალისწინებით მივიღებთ

$$C_x^{(2)}(t)=\sum_m\frac{H'_{mx_0}H'_{xm}}{(i\hbar)^2i\omega_{mx_0}}\int_0^t\{e^{i\omega_{xx_0}t}-e^{i\omega_{xm}t}\}\,dt;\qquad(78,5)$$

ამასთან, ამ ფორმულის გამოყვანის დროს გამოვიყენეთ დამოკიდებულება

$$\omega_{xm}+\omega_{mx_0}=\frac{1}{\hbar}\{E(x)-E_m+E_m-E_{x_0}\}=\omega_{xx_0}.\qquad(78,6)$$

ამგვარად, (78,5) ტოლობიდან მარტივად მივიღებთ

$$C_x^{(2)}(t)=\frac{1}{\hbar^2}\sum_m\frac{H'_{xm}H'_{mx_0}}{i\omega_{mx_0}}\left\{\frac{e^{i\omega_{xm}t}-1}{i\omega_{xm}}-\frac{e^{i\omega_{xx_0}t}-1}{i\omega_{xx_0}}\right\}.\qquad(78,7)$$

როგორც ვხედავთ, მეორე მიახლოების $C_x^{(2)}(t)$ კოეფიციენტის განხილვას მაშინ აქვს აზრი, როცა პირდაპირი გადასვლა აკრძალულია, ე, ი. როცა

$$H'_{xx_0}=0;\quad(E_x=E_{x_0})$$

$$H'_{mx_0}\neq 0,\quad H'_{xm}\neq 0;\quad(E_m\neq E_{x_0},\ E_x\neq E_m)$$

მაგრამ $E_x=E_{x_0}$ პირობა გვაძლევს $\omega_{xx_0}=0$, მაშინ, როცა $\omega_{xm}\neq 0$ და $\omega_{mx_0}\neq 0$, ამიტომ (78,7) გამოსახულებაში შეგვიძლია პირველი წევრი უგულებელვყოთ, რადგან მისი მნიშვნელი სასრული სიდიდეა და გაცილებით მეტია მეორე წევრის მნიშვნელზე. ამგვარად, (78,7) გამოსახულებიდან დავგრჩება

$$|C_x^{(2)}(t)|^2=\frac{1}{\hbar^2}\left|\sum_m\frac{H'_{xm}H'_{mx_0}}{\hbar\omega_{mx_0}}\right|^2\left|\frac{e^{i\omega_{xx_0}t}-1}{i\omega_{xx_0}}\right|^2.\qquad(78,8)$$

ეს შედეგი ემთხვევა (77,8)-ს, ოღონდ ამ შემთხვევაში შეშფოთების ენერგიის მატრიცული ელემენტის როლს ასრულებს გამოსახულება

$$H'_{il}=\sum_m\frac{H'_{im}H'_{mi}}{E_m-E_i}\ .\qquad(78,9)$$

აქ i აღნიშნავს საწყის მდგომარეობას, f — კი საბოლოოს. თუ ჩავატარებთ იგივე გამოთვლებს, რაც გვქონდა § 77-ში, დროის ერთეულში, საწყისიდან საბოლოო მდგომარეობაში გადასვლის ალბათობისათვის მივიღებთ შემდეგ ფორმულას:

$$w_{if}\,d\Omega=\frac{2\pi}{\hbar}|H'_{if}|^2\rho_f(E)\,d\Omega,\qquad(78,10)$$

სადაც $\rho_f(E)$ საბოლოო მდგომარეობის სიმკვრივეა, H'_{if} კი განისაზღვრება (78,9) ფორმულით. (78,10) ფორმულა გვიჩვენებს, რომ, როცა სისტემის გადასვლა პირდაპირ საწყისიდან საბოლოო მდგომარეობაში შეუძლებელია, მაშინ ჯერ ხდება $i\to m$ გადასვლა, ე. ი. საწყისიდან საშუალედოში, შემდეგ კი საშუალედო მდგომარეობიდან საბოლოოში $m\to f$. ამასთან, აჯამვა ხდება ყველა შესაძლო საშუალედო m-მდგომარეობების მიხედვით.

ადვილია (78,10) ფორმულის განზოგადება მესამე მიახლოებისათვის. საკმაოდ ანალოგიურად მივიღებთ ისევე (78,10) ფორმულას, ოღონდ H'_{if}-ს ახლა ექნება სახე

$$H'_{if} = \sum_m \sum_k \frac{H'_{fm} H'_{mk} H'_{ki}}{(E_i - E_m)(E_i - E_k)}; \qquad (78,11)$$

ასეთ შემთხვევაში გადასვლა ხდება სამსაფეხურიანი სქემით $i \to k \to m \to f$ აჯამვა კი საშუალედო m და k მდგომარეობების მიხედვით. მესამე მიახლოება მნიშვნელოვანია მაშინ, როცა მეორე მიახლოებაში $H'_{if} = 0$.

აღვნიშნოთ ერთი მეტად მნიშვნელოვანი გარემოება; პირდაპირი გადასვლების დროს ენერგიის შენახვის კანონს უზრუნველყოფდა დირაკის დელტა ფუნქცია, რომელიც გადასვლის ალბათობაში ჩნდებოდა მატრიცული ელემენტის კვადრატის გვერდით. მატრიცულ ელემენტში შემავალი ენერგიის ნაცვლად მასში ისმებოდა ენერგიის ის მნიშვნელობა, რომელიც საწყისიდან საბოლოო მდგომარეობაში გადასვლისას განისაზღვრებოდა ენერგიის შენახვის კანონით. იგივეს აქვს ადგილი არაპირდაპირი გადასვლების შემთხვევაშიაც, ოღონდ რადგან ენერგიებს საშუალედო მდგომარეობაში არავითარი პირობა არ ედება, ამიტომ ენერგიის შენახვა საშუალედო მდგომარეობისათვის არ მოითხოვება.

ნამდვილი დონეებისაგან განსხვავების მიზნით, რომელთათვისაც ენერგიის შენახვის კანონი აუცილებელია, საშუალედო დონეებს ვირტუალურ დონეებს უწოდებენ.

როცა საქმე ეხება რადიაციულ გადასვლებს, მაშინ ცხადია, რომ პირდაპირი გადასვლის მატრიცული ელემენტი პროპორციული იქნება ელექტრონის მუხტის პირველი ხარისხისა, ალბათობა კი — e^2-ის[1]. ანალოგიურად, მეორე მიახლოების შესაბამისი გადასვლის ალბათობა პროპორციული იქნება e^4-ის, შესაბამისა — e^6-ის და ა. შ.

აღვნიშნოთ ისიც, რომ, როგორც მტკიცდება, თუ სისტემის გადასვლა წარმოებს გამოსხივებასთან ურთიერთქმედების გამო, მაშინ ეფექტი შეშფოთების თეორიის პირველი რიგისაა, როცა მოვლენაში მონაწილეობს სინათლის ერთი კვანტი (მაგალითად სინათლის გამოსხივება ან შთანთქმა), — მეორე რიგისა, როცა მონაწილეობს ორი კვანტი და ა. შ.

ორსაფეხურიანი პროცესის ნაოელ მაგალითს წარმოადგენს კომპტონის ეფექტი. ამ შემთხვევაში საწყის მომენტში გვაქვს კვანტი $\mathbf{p}$ ($p = \hbar\omega_0/c$) იმპულსით და უძრავი თავისუფალი ელექტრონი $E_0 = mc^2$ ენერგიით. საბოლოო მდგომარეობაში გვაქვს ახალი კვანტი $\mathbf{p}'$ ($p' = \hbar\omega'/c$) იმპულსით და მოძრავი ელექტრონი $\mathbf{p} - \mathbf{p}'$ იმპულსითა და $E_0 + \hbar(\omega - \omega')$ ენერგიით. უშუალო გამოთვლით დავრწმუნდებით, რომ პირდაპირი გადასვლის მატრიცული ელემენტი, რომელიც შეესაბამება ენერგიის შენახვას, ნულის ტოლია[2]. მაშასადამე, კომპტონის ეფექტში პირდაპირი გადასვლა აკრძალულია. კომპტონის ეფექტი კი, რომელშიაც მონაწილეობს ორი ფოტონი, ნებადართულია და გამოითვლება შეშფოთების თეორიის მეორე მიახლოებით. გვექნება ორი საშუალედო მდგომარეობა. 1. ელექტრონი შთანთქავს კვანტს

---

[1] ამის შესახებ იხ. § 36; რადგან რადიაციული პროცესების დროს შეშფოთების ენერგიის ოპერატორი $\hat{H}' = \frac{e}{\mu c}(\hat{\mathbf{A}}\mathbf{p})$, ამიტომ $\hat{H}'$-ს მატრიცული ელემენტი, მართლაც პროპორციული იქნება მუხტის პირველი ხარისხისა.

[2] პირდაპირი გადასვლები, რომლებიც გამოწვეული იქნება $\mathbf{A}^2$-ის პროპორციული წევრით, აკრძალული არ იქნება.

და ძოძრაობს იმპულსით, რომელიც შენახვის კანონით ძალით იქნება $m v = \frac{\hbar \omega}{c}$-ს ტოლი. ენერგია კი ამ შემთხვევაში არ ინახება $\frac{m v^2}{2}$ ჩა. პროცესის მეორე საფეხურზე მოძრავი ელექტრონი გამოასხივებს ახალ კვანტს, რომლის დროსაც შენახულია იმპულსი. ენერგია კი ისე იცვლება, რომ აღდგენილი იქნეს მისი საწყისი მნიშვნელობა. 2. ელექტრონი ჯერ ასხივებს საბოლოო კვანტს, შემდეგ კი შთანთქავს საწყისს. ორივე ამ საშუალედო გადასვლას ერთი და იგივე საბოლოო მდგომარეობამდე მიეყავართ. შეიძლება გამოითვალოს თითოეული ამ გადასვლის მატრიცული ელემენტი და (78,10) ფორმულის გამოყენებით ეიპოვოთ გაფანტვის დიფერენციალური განიკვეთი. კომპტონის ეფექტის შესაბამისი განივკვეთი რელატივისტური ეფექტების გათვალისწინებით ნაპოვნი იყო კლაინისა და ნიშინას მიერ [1].

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

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

§ 79. ვარიაციული მეთოდი

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

$$E_0 \leqslant \int_{-\infty}^{+\infty} \Phi^* \hat{H} \Phi d\tau, \tag{79,1}$$

იმ პირობით, რომ

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

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

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

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

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

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

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

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

და ნებისმიერი ფუნქცია გავშალოთ ამ $\psi_1, \psi_2 \ldots \psi_n$ ორთონორმირებული ფუნქციების მწკრივად

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

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

$$\int \Phi^* \hat{H} \Phi d\tau - E_0 = \sum_m \sum_n a_m^* a_n (E_n - E_0) \int \psi_m^* \psi_n d\tau =$$

$$= \sum_{m,n} a_m^* a_n (E_n - E_0) \delta_{mn} = \sum_n |a_n|^2 (E_n - E_0).$$

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

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

ამ ფორმულის სხვა სახით გამოსახვისათვის უნდა გარდავქმნათ $\langle \Phi | \Delta \Phi \rangle$ სკალარული ნამრავლი, რადგან $\mp i\nabla$ ერმიტული ოპერატორია, ამიტომ გვაქვს

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

(79,5) ფორმულა მიიღებს სახეს

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

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

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

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

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

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

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

$$I(\alpha_{ext}, \beta_{ext}, \ldots) \geqslant E_0 \tag{79,10}$$

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

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

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

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

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

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

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

3. ინტეგრალის გამოთვლით მივიღებთ

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

$$\left.\left.+\frac{2}{r}\,\frac{d}{dr}\right]-\frac{e^2}{r}\right\}e^{-\alpha r}r^2\,dr=\frac{\hbar^2\alpha^2}{2\mu}-e^2\alpha. \qquad (79,13)$$

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

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

ე. ი.

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

ბოლო ფუნქციას ექნება სახე

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

§ 80. რიტცის მეთოდი

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

$$\Phi = \sum_{i=1}^{m} a_i \varphi_i, \tag{80,1}$$

სადაც a_i მუდმივებია, რომლებიც მოითხოვს განსაზღვრას. შევიტანოთ ეს გამოსახულება ფორმულაში

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

გვექნება

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

შემოვიღოთ აღნიშვნები

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

და

$$D_{ik}=\int \varphi_i^* \varphi_k \, d\tau = D_{ki}^*. \tag{80,3}$$

როცა φ_i ფუნქციები ორთონორმირებულია, მაშინ

$$D_{ik}=\int \varphi_i^* \varphi_k \, d\tau = \delta_{ik}; \tag{80,4}$$

ამ აღნიშვნებში (80,2′) მიიღებს სახეს

$$\delta \sum_i \sum_k a_i^* a_k (H_{ik}-\lambda D_{ik}) = 0. \tag{80,5}$$

მოვახდინოთ ვარიაცია a_i^* და a_k კოეფიციენტებით, გვექნება

$$\sum_i \sum_k (\delta a_i^* a_k + a_i^* \delta a_k)(H_{ik}-\lambda D_{ik}) = 0.$$

ეს უკანასკნელი კი, H_{ik} და D_{ik} მატრიცების ერმიტულობის გამო, ასე შეგვიძლია გადავწეროთ:

$$\sum_i \delta a_i^* \sum_k a_k (H_{ik}-\lambda D_{ik}) + \sum_i \delta a_i \sum_k a_k^* (H_{ik}^* - \lambda D_{ik}^*) = 0.$$

თუ განვიხილავთ ორ სპეციალურ შემთხვევას $\delta a_i = \delta a_i^*$, (ე. ი, δa_i ნამდვილია) და $\delta a_i^* = -\delta a_i$ (δa_i წარმოსახვითია), უკანასკნელი განტოლება მოგვცემს

$$\sum_i \delta a_i \left\{ \sum_k a_k (H_{ik} - \lambda D_{ik}) + \sum_k a_k^* (H_{ik}^* - \lambda D_{ik}^*) \right\} = 0$$

და

$$\sum_i \delta a_i \left\{ \sum_k a_k (H_{ik} - \lambda D_{ik}) - \sum_k a_k^* (H_{ik}^* - \lambda D_{ik}^*) \right\} = 0.$$

რადგან δa_i ნებისმიერია, ამიტომ ამ ორი განტოლებიდან მივიღებთ

$$\sum_k a_k (H_{ik} - \lambda D_{ik}) \pm \sum_k a_k^* (H_{ik}^* - \lambda D_{ik}^*) = 0. \tag{80,5′}$$

როცა ვიღებთ „—“ ნიშანს, მაშინ (80,5′) გვეუბნება, რომ

$$Im \left\{ \sum a_k (H_{ik} - \lambda D_{ik}) \right\} = 0, \tag{80,6}$$

(Im ნიშნავს წარმოსახვით ნაწილს), ხოლო, როცა ვიღებთ „+“ ნიშანს, გვექნება

$$Re \left\{ \sum a_k (H_{ik} - \lambda D_{ik}) \right\} = 0 \tag{80,6′}$$

(Re ნიშნავს რეალურ ნაწილს). ამ ორი უკანასკნელი ტოლობიდან კი ვღებულობთ

$$\sum_k a_k (H_{ik} - \lambda D_{ik}) = 0; \quad i = 1, 2, \ldots m. \tag{80,7}$$

მივიღეთ m ერთგვაროვან განტოლებათა სისტემა უცნობი a_k კოეფიციენტებისათვის. ამ სისტემას რომ ჰქონდეს არატრივიალური ამოხსნა, აუცილებელი და საკმარისია სისტემის დეტერმინანტი ტოლი იყოს ნულის, ე. ი.

$$\begin{vmatrix} H_{11}-\lambda D_{11} & H_{12}-\lambda D_{12} & \cdots \\ H_{21}-\lambda D_{21} & H_{22}-\lambda D_{22} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots \\ H_{m1}-\lambda D_{m1} & \cdots & H_{mm}-\lambda D_{mm} \end{vmatrix} = 0. \tag{80,8}$$

მივიღეთ λ პარამეტრების მიმართ m ხარისხის განტოლება. მისი ამოხსნით მოგვეცეშა λ-ს m მნიშვნელობა

$$\lambda_1, \lambda_2, \dots \lambda_m$$

თუ (80,7) სისტემაში შევიტანთ λ-ს მნიშვნელობებს და ამოვხსნით, ვიპოვით $a_k(\lambda)$ კოეფიციენტებს. λ-ს m ფესვს შესაბამისად გვექნება (80,7) ტიპის m სისტემა, საიდანაც ვიპოვით ყველა a_k კოეფიციენტს:

$$a_1(\lambda_1),\ a_2(\lambda_1), \dots a_m(\lambda_1),$$
$$a_1(\lambda_2),\ a_2(\lambda_2), \dots a_m(\lambda_2),$$

$$a_1(\lambda_m),\ a_2(\lambda_m), \dots a_m(\lambda_m).$$

თუ შევიტანთ a_k კოეფიციენტების ამ მნიშვნელობებს (80,1) ფორმულაში, მივიღებთ m ფუნქციას $\lambda=\lambda_k$-სათვის

$$\Phi_k = \sum_{i=1}^{m} a_i(\lambda_k)\,\varphi_i, \quad k=1, 2, \dots m. \tag{80,8'}$$

სწორედ ეს ფუნქციები იქნება საძებნი ფუნქციები. ისინი იმდენად კარგად უახლოვდებიან ნამდვილ ფუნქციებს, რამდენადაც კარგად გვაქვს არჩეული $\varphi_1, \varphi_2, \dots \varphi_m$ ფუნქციები.

იმ შემთხვევაში, როცა φ_i ფუნქციები ორთონორმირებულია, (80,8) განტოლების ნაცვლად გვექნება

$$\begin{vmatrix} H_{11}-\lambda & H_{12} & H_{1m} \\ H_{21} & H_{22}-\lambda \dots & H_{2m} \\ H_{m1} & & H_{mm}-\lambda \end{vmatrix} = 0. \tag{80,8''}$$

საილუსტრაციოდ განვიხილოთ მაგალითი. ვთქვათ, ნაწილაკი მოძრაობს ერთგანზომილებიან პოტენციალურ ორმოში, რომლის სიგანე $x_0=1$, სიმაღლე კი—უსასრულობას, მაშინ შრედინგერის განტოლებას ექნება შემდეგი სახე:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2\mu E}{\hbar^2}\,\psi = 0, \quad (\psi(0)=\psi(1)=0). \tag{80,9}$$

ამ განტოლების ზუსტი ამოხსნა, როგორც ვნახეთ, ასეთია

$$\psi_n(x) = \sqrt{2}\sin n\pi x, \quad (x_0=1). \tag{80,10}$$

ენერგიის საკუთარი მნიშვნელობები კი განისაზღვრება ფორმულიდან

$$\lambda_n = \frac{2\mu E_n}{\hbar^2} = n^2\pi^2.$$

განვიხილოთ შემდეგი საცდელი ფუნქციები;

$$\varphi_1 = c_0 + c_1 x + c_2 x^2,\ \varphi_2 = b_0 + b_1 x + b_2 x^2 + b_3 x^3 \text{ და ა. შ.} \tag{80,11}$$

ეს ფუნქციები ისეთივე სასაზღვრო პირობებს უნდა აკმაყოფილებდეს, რასაც ψ_i, კერძოდ

$$\varphi_1(0) = \varphi_2(0) = \dots = 0$$
და
$$\varphi_1(1) = \varphi_2(1) = \dots = 0, \tag{80,12}$$

ეს სასაზღვრო პირობები გვაძლევს

$$c_0=b_0=\ldots=0,$$

$$c_1+c_2=0,\ b_1+b_2+b_3=0 \text{ და ა. შ.}$$

ამგვარად, φ_1-ს ექნება სახე $\varphi_1=c_1(x-x^2)$. მოვახდინოთ ნორმირება ერთზე (0,1) შუალედში. მივიღებთ $c_1=\sqrt{30}$.

ამგვარად,

$$\varphi_1=\sqrt{30}\,(x-x^2). \tag{80,13}$$

ენერგიის მატრიცულ ელემენტს ექნება სახე

$$H_{1k}=\int_0^1 \frac{d\varphi_1}{dx}\,\frac{d\varphi_k}{dx}\,dx. \tag{80,14}$$

რომ (80,7)-ში ავიღოთ მხოლოდ $m=1$, მაშინ (80,8'') განტოლება დაიყვანება $H_{11}-\lambda=0$ პირობაზე, ე. ი. $\lambda=H_{11}$. (80,14) და (80,13)-ის თანახმად

$$H_{11}=\int_0^1\left(\frac{d\varphi_1}{dx}\right)^2 dx=10.$$

ამგვარად, პირველი მიახლოების საკუთარი მნიშვნელობა არის $\lambda_1=10$ და, მაშასადამე, პირველ მიახლოებაში რიტცის მეთოდი იძლევა

$$\varphi_1=\sqrt{30}\,(x-x^2),\ \lambda_1=\frac{2\mu E_1}{\hbar^2}=10,$$

რომელიც საკმარისად ახლოსაა ნამდვილ მნიშვნელობასთან:

$$\psi_1=\sqrt{2}\sin\pi x \quad \text{და} \quad \lambda_1=\pi^2.$$

რათა მივიღოთ შემდგომი და ამასთან უკეთესი საკუთარი ფუნქციები და მნიშვნელობები, φ_1-ის გარდა, დამატებით უნდა გამოვიყენოთ φ_2-იც.

სამი პირობა

$$b_1+b_2+b_3=0,\quad \int_0^1 \varphi_1\varphi_2\,dx=0 \quad \text{და} \quad \int_0^1 \varphi_2^2\,dx=1$$

მოგვცემს

$$\varphi_2=\sqrt{210}\,(x-3x^2+2x^3).$$

(80,14)-დან მივიღებთ

$$H_{11}=10,\quad H_{12}=H_{21}=0,$$

$$H_{22}=210\int_0^1(1-6x+6x^2)^2\,dx=42.$$

(80,8'') დეტერმინანტს ექნება სახე

$$\begin{vmatrix} 10-\lambda & 0 \\ 0 & 42-\lambda \end{vmatrix}=0,$$

ე. ი. $(10-\lambda)(42-\lambda)=0$, საიდანაც $\lambda_1=10$, $\lambda_2=42$, ეს საკუთარი მნიშვნელობაც ახლოსაა π^2 და $4\pi^2$-თან. თუ შევიტანთ λ-ს ამ მნიშვნელობებს (80,7)-ში, დავინახავთ, რომ φ_1 და φ_2 ფუნქციები ემთხვევიან Φ_1 და Φ_2 (რადგან $c_1(10)=1$, $c_2(10)=0$, $c_1(42)=0$, $c_2(42)=1$).

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

მ ი თ ი თ ე ბ ა: საჭიროა დაიწეროს ისეთი საცდელი ფუნქცია, რომელიც ორთოგონალურია ძირითადი მდგომარეობის $\psi_0(x)=\sqrt[4]{\frac{\alpha}{\pi}}\exp(-\alpha x^2/2)$ ფუნქციასთან. (ასეთი ფუნქცია იქნება, მაგალითად, $\psi_1(x)=c\frac{d}{dx}\psi_0(x)$).

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

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

სადაც α პარამეტრია.

მ ი თ ი თ ე ბ ა. გამოიყენეთ (29,7) ფორმულა. ინტეგრალების ამოხსნის შემდეგ მიღებული გამოსახულების ექსტრემალური მნიშვნელობა α პარამეტრის მიმართ იქნება სწორედ ენერგიის მნიშვნელობა.

პ ა ს უ ხ ი: $\alpha_{ext}=1{,}34$, $E_0<2{,}14\ MeV$.

§ 81. კვაზიკლასიკური მიახლოების მეთოდი

როგორც ოპტიკური ანალოგიის განხილვის დროს დავინახეთ, როცა ნაწილაკის შესაბამისი დე ბროილის ტალღის სიგრძე $\lambda\ll R$, (სადაც R იმ არის ზომაა, რომელშიაც ხდება მოძრაობა), სამართლიანია გეომეტრიული ოპტიკა და, მაშასადამე, საკმარისი მიახლოებით სამართლიანი უნდა იყოს კლასიკური მექანიკის კანონებიც. ამ შემთხვევაში ნაწილაკის მოძრაობა შეგვიძლია განვიხილოთ როგორც კვაზიკლასიკური (თითქმის კლასიკური). არსებობს ასეთი მოძრაობის შესწავლის მიახლოებითი მეთოდი, რომელსაც კვაზიკლასიკური მიახლოების მეთოდს უწოდებენ. ეს მეთოდი დამუშავებული იყო ვენცელის, კრამერსისა და ბრილუენის მიერ, ამიტომაც ამ მეთოდს ხშირად შემოკლებით WKB მეთოდს უწოდებენ [1].

განვიხილოთ შრედინგერის სტაციონარული მდგომარეობების განტოლება

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

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

$$\psi=e^{\frac{i}{\hbar}S} \tag{81,2}$$

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

სადაც x_0 დაფიქსირებული წერტილია.

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

$$\psi_1(x) = C_1 \exp\left(\frac{i}{\hbar}\int_{x_0}^{x}\sqrt{2\mu\,|E - V(x)|}\,dx\right), \tag{81,8}$$

$$\psi_2(x) = C_2 \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\int_{x_0}^{x}\sqrt{2\mu\,|E - V(x)|}\,dx\right), \tag{81,9}$$

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

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

ან, რაც იგივეა

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

რადგან $E=p^2/2\mu+V(x)$, ამიტომ

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

და (81,7) ფორმულის ძალით გვექნება $S_0'(x)=p(x)$; ასე რომ, (81,11) პირობა მიიღებს სახეს

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

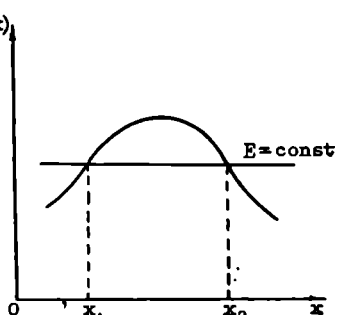
მეორე მხრივ, რადგან

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

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

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

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



ნახ. 18

$$V(x)=E. \tag{81,16}$$

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

$$S_0'S_1'+\frac{1}{2}S_0''=0, \tag{81,17}$$

საიდანაც

$$S_1'=-\frac{1}{2}\frac{S_0''}{S_0'}=-\frac{1}{2}\frac{p'(x)}{p(x)}, \tag{81,18}$$

რომლის ამოხსნა მოგვცემს

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

ხოლო

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

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

$$\psi(x)=\frac{C_1}{\sqrt[4]{(E-V(x))^2\mu}}\exp\left(i\frac{\sqrt{2\mu}}{\hbar}\int_{x_0}^{x}\sqrt{E-V(x)}\,dx\right)+$$

$$+\frac{C_2}{\sqrt[4]{(E-V(x))^2\mu}}\exp\left(-i\frac{\sqrt{2\mu}}{\hbar}\int_{x_0}^{x}\sqrt{E-V(x)}\,dx\right). \qquad (81,21)$$

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

$$\psi(x)=\frac{D_1}{\sqrt[4]{(V(x)-E)^2\mu}}\exp\left(\frac{\sqrt{2\mu}}{\hbar}\int_{x_0}^{x}\sqrt{V(x)-E}\,dx\right)+$$

$$+\frac{D_2}{\sqrt[4]{(V(x)-E)^2\mu}}\exp\left(-\frac{\sqrt{2\mu}}{\hbar}\int_{x_0}^{x}\sqrt{V(x)-E}\,dx\right). \qquad (81,22)$$

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

ადვილად დასანახია, რომ როგორც (81,21), ისე (81,22) ფუნქცია ექსპონენტწინა მამრავლის წყალობით მობრუნების წერტილებში, ე. ი. იქ, სადაც კვაზიკლასიკურობის პირობა დარღვეულია, უსასრულოა ხდება. ამიტომ აუცილებელია ამ ფუნქციების სახის დაზუსტება მობრუნების წერტილების უშუალო მახლობლობაში. ამის მიღწევა შეიძლება აღნიშნულ ფუნქციებში შემავალი ნებისმიერი მუდმივების სათანადო შერჩევით. ამისათვის პოულობენ შრედინგერის განტოლების ზუსტ ამონახსნს მობრუნების წერტილის (ვთქვათ $x=x_1$) უშუალო მახლობლობაში, რისთვისაც პოტენციალურ ენერგიას შლიან მწკრივად და ისაზღვრებიან x-ის პირველი ხარისხით $V(x)=V(x_1)+\left(\frac{\partial V}{\partial x}\right)_{x=x_1}(x-x_1)$. ამ პოტენციალური ენერგიისათვის კი შრედინგერის განტოლებაც ზუსტად ამოიხსნება. ამის შემდეგ ითხოვენ, რომ ზუსტი ფუნქციის მნიშვნელობები მობრუნების წერტილის უშუალო მახლობლობაში მარცხნივ და მარჯვნივ ემთხვეოდეს შესაბამისი არეების კვაზიკლასიკურ ფუნქციებს. ეს პროცედურა საშუალებას გვაძლევს ნებისმიერი მუდმივების სწორად შერჩევისა. ჩვენ არ შევუდგებით ამ ამოცანის გადაწყვეტას და დავკმაყოფილდებით მხოლოდ საბოლოო პასუხების ამოწერით.

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

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

რომელსაც $x>x_1$ არეში შეესაბამება ფუნქცია

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

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

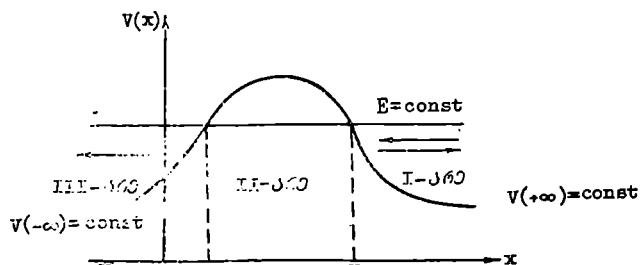
$$\psi(x)=\frac{C}{\sqrt[4]{(E-V(x))2\mu}}\sin\left(\frac{\sqrt{2\mu}}{\hbar}\int_{x_2}^{x}\sqrt{E-V(x)}\,dx+\frac{\pi}{4}\right).\quad x>x_2 \qquad (81{,}25)$$

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

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

§ 82. გაჟონვის კოეფიციენტი ნებისმიერი სახის ერთგანზომილებიანი ჯებირის შემთხვევაში

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



ნახ. 19

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

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

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

$$\psi_2(x)=\frac{1}{\sqrt[4]{E+V(x)}}\left\{b_+\exp\left[\frac{\sqrt{2\mu}}{\hbar}\int_{x_1}^{x}\sqrt{V(x)-E}\,dx\right]+\right.$$

$$\left.+b_-\exp\left[-\frac{\sqrt{2\mu}}{\hbar}\int_{x_1}^{x}\sqrt{V(x)-E}\,dx\right]\right\}\quad x_1<x<x_2 \tag{82,1}$$

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

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

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

ამ გამოსახულებას კი აქვს შემდეგი სახე:

$$\psi_1(x)=Ae^{\frac{i}{\hbar}px}+Be^{-\frac{i}{\hbar}px}, \tag{82,3}$$

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

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

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

გაჟონვის კოეფიციენტი შეიძლება განვსაზღვროთ როგორც შემდეგი ფარდობა:

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

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

გაჟონვის კოეფიციენტისათვის გვექნება

$$D=\frac{v_{+\infty}}{v_{-\infty}}\left|\frac{a_-}{c_-}\right|^2=\left|\frac{c_-}{a_-}\right|^2. \tag{82.6}$$

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

სასაზღვრად გამოვიყენოთ შეკერვის პირობები მობრუნების წერტილებზე. ჯერ შევკეროთ ψ_3 და ψ_3 ფუნქციები $x=x_1$ წერტილზე[1]. ფუნქციების ტოლობა $x=x_1$ წერტილზე მოგვცემს

$$b_+ + b_- = c_- \exp\left\{-i\,\frac{1}{\hbar}\sqrt{2\mu}\int_{x_0}^{x_1}\sqrt{E-V(x)}\,dx\right\}. \qquad (82,7)$$

წარმოებულების გატოლებით $x=x_1$ წერტილზე მივიღებთ[2]

$$b_+ - b_- = -ic_- \exp\left\{-i\,\frac{\sqrt{2\mu}}{\hbar}\int_{x_0}^{x_1}\sqrt{E-V(x)}\,dx\right\}. \qquad (82,8)$$

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

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

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

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

ამავე წერტილზე ფუნქციათა ტოლობა კი იძლევა ტოლობას

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

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

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

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

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

---

[1] მკაცრად რომ ვიმსჯელოთ, მობრუნების წერტილებში ჩვენ მიერ შერჩეული ფუნქციები არ ვარგა, რადგან კვაზიკლასიკური მიახლოების პირობა ამ წერტილებში არ სრულდება. გაჟონვის კოეფიციენტი ამ მიახლოებაში გამოყვანილი იყო გამოვის მიერ. აღსანიშნავია, რომ აღნიშნული უხეშობა საბოლოო შედეგს არ ცვლის.

[2] წარმოებულების გატოლების დროს ექსპონენტწინა $\sqrt[4]{E-V(x)}$ გამოსახულებას შეიძლება ყურადღება არ მივაქციოთ, რადგან იგი საერთოა ორივე ფუნქციისათვის.

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

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

$$D = 4 \frac{v_{+\infty}}{v_{-\infty}} e^{-\frac{2}{\hbar} S} \tag{82,15}$$

სადაც

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

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

$$V(x) = E, \tag{82,17}$$

ე. ი. ფესვქვეშა გამოსახულების ნულებით.

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

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

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

$$D_l = 4 \frac{v_{+\infty}}{v_{-\infty}} e^{-\frac{2}{\hbar} S_l}, \tag{82,19}$$

სადაც

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

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

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

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

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

§ 83. α-დაშლის თეორია

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

$$_{Z}X^{A} \rightarrow {}_{Z-2}X^{A-4} + \alpha, \tag{83,1}$$

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

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

სადაც λ არის პროპორციულობის კოეფიციენტი. ამ განტოლების ინტეგრაცია მოგვცემს

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

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

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

საიდანაც

$$T = \frac{\ln 2}{\lambda}. \tag{83,3}$$

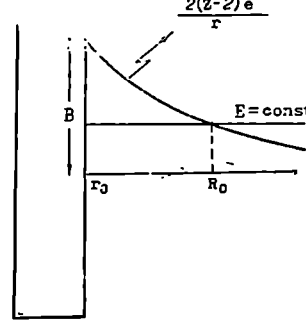
λ-ს უწოდებენ რადიაქტიური დაშლის მუდმივას. იგი დამოკიდებულია გულებიდან გამოტყორცნილი α-ნაწილაკების ენერგიაზე. მოვნახოთ რადიაქტიური ატომგულის სიცოცხლის საშუალო ხანგრძლივობა; იგი უდრის

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

გამოვარკვიოთ, როგორ შეიძლება მივუდგეთ α-დაშლის პრობლემის გადაწყვეტას.

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

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



ნახ. 20

$$V(r) = \begin{cases} -V_0, & \text{როცა } r \leqslant r_0, \\ \dfrac{2(Z-2)e^2}{r}, & \text{როცა } r \geqslant r_0, \end{cases} \tag{83,5}$$

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

რაც, თუ გავითვალისწინებთ, რომ $N(0)=\int_0^R|\chi_0|^2\,dr$, ემთხვევა (83,2) ფორმულას. დამატებითი $\exp(-\lambda/2\,t)$ მამრავლის შემოყვანა ნიშნავს იმას, რომ ნაცვლად $\exp(-iEt/\hbar)$ ჰარმონიული წევრისა შემოგვაქვს წევრი

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

ამ შემთხვევაში ენერგიის როლს ასრულებს $W=E-i\frac{\lambda\hbar}{2}$, ე. ი. ენერგია ფორმალურად განიხილება, როგორც კომპლექსური სიდიდე. ამგვარად, α-ნაწილაკები ზუსტად სტაციონარულ მდგომარეობაში კი არ იმყოფება, არამედ, როგორც ამბობენ, კვაზისტაციონარულ მდგომარეობაში.

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

$$\frac{\partial}{\partial t}\int_0^{R_1} e^{-\lambda t}\,|\chi_0|^2\,dr = -\frac{i\hbar}{2\mu}e^{-\lambda t}\left[\chi_0\frac{d\chi_0^*}{dr_0}-\chi_0^*\frac{d\chi_0}{dr}\right]_{r=R_1}.$$

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

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

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

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

მაშასადამე,

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

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

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

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

სადაც

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

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

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

საიდანაც მოიძებნება ენერგიის საკუთარი მნიშვნელობები

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

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

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

და, ამგვარად,

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

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

ნებთ გაჟონვის კოეფიციენტის (82,19) გამოსახულებას, რადიაქტიური დაშლის მუდმივისათვის გვექნება შემდეგი ფორმულა:

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

სადაც

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

ხოლო v არის α-ნაწილაკის სიჩქარე გულიდან გამოსვლის წინ.

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

$$v=\frac{n\pi\hbar}{\mu r_0}; \tag{83,18}$$

ხოლო λ-სათვის გვექნება

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

ახლა ვიპოვოთ S_0 ინტეგრალი. ამისათვის შემოვიღოთ ახალი ცვლადი

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

სადაც

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

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

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

სადაც

$$a=\arcsin\sqrt{\frac{r_0}{R_0}}, \tag{83,23}$$

ინტეგრალის ამოხსნის შემდეგ მივიღებთ

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

რადგან

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

და

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

ამიტომ გვექნება

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

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

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

ამგვარად, მივიღებთ

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

ან, თუ გავალოგარითმებთ

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

შემოვიღოთ აღნიშვნები:

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

გვექნება

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

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

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

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

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

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

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

თავი XI

სინათლის ურთიერთქმედება ატომებთან

ამ თავში განვიხილავთ ატომებით სინათლის შთანთქმასა და გამოსხივებას. ამასთან, საკითხს შევისწავლით კვაზიკლასიკურად, რაც იმაში გამოიხატება, რომ ატომებს წარმოვიდგენთ როგორც კვანტურ ობიექტებს, ხოლო სინათლის ელექტრომაგნიტურ ველს—როგორც კლასიკურს. ამ საკითხის მკაცრად განხილვა, ე. ი. როცა იგულისხმება, რომ ატომიც და ველიც კვანტურმექანიკური სისტემებია, იგივე შედეგებს იძლევა.

§ 84. ატომის ელექტრული და მაგნიტური მომენტები

განვიხილოთ ერთელექტრონიანი ატომები და შემოვიღოთ მათი ელექტრული და მაგნიტური მომენტები. ჯერ გავიხსენოთ, როგორაა განმარტებული ელექტრული და მაგნიტური მომენტები კლასიკურ ფიზიკაში.

განვიხილოთ სასრული τ-მოცულობა, რომელშიც უწყვეტად არის განაწილებული ელექტრული მუხტი q. კოორდინატთა სისტემა მოვათავსოთ სადმე ამ მოცულობის შიგნით. აღებული მოცულობის ნებისმიერი წერტილის რადიუსვექტორი აღვნიშნოთ $\mathbf{r}(x_1, x_2, x_3)$-ით. $\rho(\mathbf{r})$ იყოს მუხტის სიმკვრივე $\mathbf{r}$-ით განსაზღვრულ წერტილში. ვთქვათ, გვაინტერესებს აღნიშნული მუხტების მიერ შექმნილი ელექტროსტატიკური ველის განსაზღვრა საკმაოდ ძალიან დაშორებულ წერტილში, რომლის რადიუსვექტორია $R(X_1, X_2, X_3)$. ელექტროსტატიკური პოტენციალი, რომელსაც ქმნის მთელი სისტემა R მანძილზე, განისაზღვრება ფორმულით

$$\varphi(\mathbf{R}) = \int \chi(\mathbf{R}-\mathbf{r})\,\rho(\mathbf{r})\,d\mathbf{r}. \tag{84.1}$$

$\chi(\mathbf{R}-\mathbf{r}) = |\mathbf{R}-\mathbf{r}|^{-1}$ ფუნქცია ერთელექტრონი მუხტის პოტენციალია, რამდენადაც $|\mathbf{R}-\mathbf{r}|$ წარმოადგენს მანძილს მუხტიდან იმ წერტილამდე, რომელშიც ვეძებთ ველს. ჩვენ გვინდა პოტენციალის გამოთვლა სისტემიდან ძალიან შორ მანძილზე ($r \ll R$). ამიტომ $\chi(\mathbf{R}-\mathbf{r})$ ფუნქცია შეგვიძლია გავშალოთ მწკრივად r/R მცირე პარამეტრის მიხედვით; რადგან $\chi(\mathbf{R}-\mathbf{r})$ ფუნქცია $r=0$ წერტილში $1/R$-ის ტოლია, ამიტომ

$$\chi(\mathbf{R}-\mathbf{r}) = \frac{1}{R} - \sum_{i=1}^{3} x_i \frac{\partial}{\partial X_i}\left(\frac{1}{R}\right) + \frac{1}{2}\sum_{i,k} x_i x_k \frac{\partial^2}{\partial X_i\,\partial X_k}\left(\frac{1}{R}\right) + \cdots + \tag{84,2}$$

ხელსაყრელია მესამე წევრის გარდაქმნა. კერძოდ, ამ წევრს შეგვიძლია გამოვაკლოთ გამოსახულება

$$\frac{1}{6}\,r^2 \sum_{i,k} \delta_{ik} \frac{\partial^2}{\partial X_i\,\partial X_k}\left(\frac{1}{R}\right),$$

რომელიც ნულის ტოლია იმის გამო, რომ $1/R$ აკმაყოფილებს ლაპლასის განტოლებას $\Delta\frac{1}{R}=0$. მართლაც,

$$\frac{1}{6}r^2\sum_{i,k}\delta_{ik}\frac{\partial^2}{\partial X_i\,\partial X_k}\frac{1}{R}=\frac{1}{6}r^2\sum_{i=1}^{3}\frac{\partial^2}{\partial X_i^2}\frac{1}{R}=\frac{1}{6}r^2\Delta\frac{1}{R}=0.$$

ამგვარად, გვექნება

$$\chi(\mathbf{R}-\mathbf{r})=\frac{1}{R}-\sum_{i=1}^{3}x_i\frac{\partial}{\partial X_i}\left(\frac{1}{R}\right)+$$

$$+\frac{1}{2}\sum_{i,k}\left(x_i x_k-\frac{1}{3}\delta_{ik}r^2\right)\frac{\partial^2}{\partial X_i\,\partial X_k}\frac{1}{R}+\ldots+ \qquad (84,2')$$

თუ ამ გაშლას შევიტანთ (84,1)-ში, პოტენციალისათვის მივიღებთ შემდეგ მწკრივს:

$$\varphi=\frac{q}{R}-\sum_{i=1}^{3}d_i\frac{\partial}{\partial X_i}\left(\frac{1}{R}\right)+\frac{1}{6}\sum_{i,k}Q_{ik}\frac{\partial^2}{\partial X_i\,\partial X_k}\frac{1}{R}+\ldots+ \qquad (84,3)$$

q წარმოადგენს სისტემის სრულ მუხტს

$$q=\int\rho(\mathbf{r})d\mathbf{r} \qquad (84,4)$$

ცხადია, ნეიტრალური სისტემისათვის $q=0$. $\mathbf{d}$-ვექტორს, რომლის კომპონენტები განისაზღვრება ფორმულით

$$d_i=\int x_i\rho(\mathbf{r})\,d\mathbf{r}, \qquad (84,5)$$

უწოდებენ ელექტრულ დიპოლურ მომენტს, ხოლო

$$Q_{ik}=\int(3x_ix_k-\delta_{ik}r^2)\rho(\mathbf{r})\,d\mathbf{r} \qquad (84,6)$$

წარმოადგენს ელექტრული კვადრუპოლური მომენტის ტენზორს. Q_{ik} ტენზორი სიმეტრიულია და მისი შპური ნულის, ამიტომ Q_{ik}-ს მხოლოდ ხუთი დამოუკიდებელი კომპონენტი ექნება. კვადრუპოლური ტენზორის Q_{zz} კომპონენტს უწოდებენ კვადრუპოლურ მომენტს, რომელსაც აღნიშნავენ Q_0-ით. მაშასადამე,

$$Q_0=\int(3z^2-r^2)\rho(\mathbf{r})\,d\mathbf{r}. \qquad (84,7)$$

(84,3) მწკრივს უწოდებენ პოტენციალის გაშლას ელექტრულ მულტიპოლურ მომენტებად.

როცა გვაქვს მოძრავი მუხტების მიერ შექმნილი ველი, მაშინ, როგორც ცნობილია, პოტენციალების ანალოგიურ გაშლაში შემოვა მაგნიტური მულტიპოლებიც, რომელთაგან ჩვენი მიზნებისათვის ყველაზე მნიშვნელოვანია მაგნიტური დიპოლური მომენტი

$$\mathbf{M}=\frac{1}{2\mu c}\int[\mathbf{r}\times\mathbf{p}]\rho(\mathbf{r})\,d\mathbf{r}, \qquad (84,8)$$

სადაც $\mathbf{l}=[\mathbf{r}\times\mathbf{p}]$ იმპულსის მომენტია, μ—მასა, ხოლო c—სინათლის სიჩქარე. ახლა განვიხილოთ ატომის ელექტრული და მაგნიტური მომენტები კვანტური მექანიკის თვალსაზრისით.

ატომის დიპოლური მომენტი. კვანტურ მექანიკაში დიპოლური მომენტი იმავე (84,5) ფორმულით განისაზღვრება, ოღონდ კლასიკური მუხტის სიმკვრივე ρ უნდა შევცვალოთ $\rho = -e\psi^*\psi$ გამოსახულებით, სადაც e ელექტრონის მუხტია, ხოლო ψ—ერთ ელექტრონიანი ატომის ტალღური ფუნქცია. ამგვარად, კვანტურ მექანიკაში გვექნება შემდეგი ფორმულა:

$$\mathbf{d}(t) = -e\int \psi^*(\mathbf{r}, t)\,\mathbf{r}\,\psi(\mathbf{r}, t)d\mathbf{r}, \qquad (84,9)$$

ე. ი. დიპოლმომენტი წარმოადგენს ელექტრონის რადიუსვექტორის კვანტურ-მექანიკურ საშუალოს, გამრავლებულს ელექტრონის მუხტზე. ცხადია, რომ დიპოლმომენტი პოლარული ვექტორია, ე. ი. ინვერსიისას მისი მდგენელები ნიშანს იცვლიან.

ვაჩვენოთ, რომ სტაციონარულ მდგომარეობაში, ე. ი. როცა ატომი ხასიათდება $\psi_n(\mathbf{r}, t) = \psi_n^0(\mathbf{r})\exp(-iE_nt/\hbar)$ ტალღური ფუნქციით, ატომის დიპოლმომენტი ნულის ტოლია. მართლაც, ატომის ტალღურ ფუნქციას ახასიათებს განსაზღვრული ლუწობა (იგი ან ლუწია ან კენტი), ამიტომ $|\psi_n^0(\mathbf{r})|^2$ ლუწია. მეორე მხრივ, $\mathbf{r}$ კენტი ფუნქციაა; აქედან გამომდინარე ინტეგრალქვეშა ფუნქცია კენტი იქნება და, რადგან ინტეგრალი აიღება სიმეტრიულ საზღვრებში, ამიტომ დიპოლმომენტი ნულს გაუტოლდება.

ამგვარად, გვაქვს მნიშვნელოვანი დასკვნა: ატომს სტაციონარულ მდგომარეობაში ელექტრული დიპოლური მომენტი არ გააჩნია.

ატომის კვადრუპოლური მომენტი. კლასიკური ფიზიკის (84,7) ფორმულის ანალოგიით, კვანტურ მექანიკაში ერთელექტრონიანი ატომის კვადრუპოლური მომენტის ტენზორს ექნება სახე

$$Q_{ik} = -e\int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(3x_ix_k - \delta_{ik}\mathbf{r}^2)\psi d\mathbf{r}, \qquad (84,10)$$

სადაც ψ არის ატომის ტალღური ფუნქცია. მაშასადამე, Q_{ik} წარმოადგენს $\nu_{ik} = 3x_ix_k - \delta_{ik}\mathbf{r}^2$ ტენზორის კვანტურმექანიკურ საშუალო მნიშვნელობას. Q_{ik} ტენზორი შერჩეულია ისეთნაირად, რომ მისი შპური ნულის ტოლი იყოს, ე. ი.

$$SpQ_{ik} = Q_{xx} + Q_{yy} + Q_{zz} = 0. \qquad (84,11)$$

ატომის კვადრუპოლურ მომენტს უწოდებენ Q_{ik} ტენზორის Q_{zz} კომპონენტს

$$Q_0 = -e\int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(3z^2 - \mathbf{r}^2)\psi d\mathbf{r}. \qquad (84,12)$$

ადვილი დასანახია, რომ სტაციონარულ მდგომარეობაში, ატომის კვადრუპოლური მომენტი, დიპოლური მომენტისაგან განსხვავებით, საზოგადოდ, ნულის ტოლი არ არის.

ვიპოვოთ წყალბადისებური ატომების კვადრუპოლური მომენტი ცხადი სახით. ამისათვის გავიხსენოთ, რომ წყალბადისებური ატომის ტალღური ფუნქცია მოიცემა შემდეგი გამოსახულებით:

$$\psi_{nlm}(r, \theta, \varphi) = R_{nl}(r)\,Y_{lm}(\theta, \varphi), \qquad (84,13)$$

სფერულ კოორდინატებში Q_{ik} ტენზორის არადიაგონალური კომპონენტებისათვის გვექნება:

$$Q_{xy} = -e\langle nl \mid r^2 \mid nl\rangle \iint 3\sin^2\theta\cos\varphi\sin\varphi \mid Y_{lm}(\theta,\varphi)\mid^2 d\Omega,$$

$$Q_{xz} = -e\langle nl \mid r^2 \mid nl\rangle \iint 3\sin\theta\cos\theta\cos\varphi \mid Y_{lm}(\theta,\varphi)\mid^2 d\Omega, \quad (84,14)$$

$$Q_{yz} = -e\langle nl \mid r^2 \mid nl\rangle \iint 3\sin\theta\sin\varphi\cos\theta \mid Y_{lm}(\theta,\varphi)\mid^2 d\Omega,$$

სადაც

$$\langle nl \mid r^2 \mid nl\rangle = \int_0^\infty R_{nl}(r) r^2 R_{nl}(r) r^2 dr. \quad (84,15)$$

$\mid \psi_{lm}(\theta,\varphi)\mid^2$ ფუნქცია დამოკიდებული არ არის φ კუთხეზე, ამიტომ ინტეგრალები φ-თი 0-დან 2π საზღვრებში ნულის ტოლი იქნება. ეს კი იმას გვიჩვენებს, რომ კვადრუპოლური ტენზორის არადიაგონალური კომპონენტები ნულის ტოლია.

ნულისაგან განსხვავებული იქნება დიაგონალური კომპონენტები:

$$Q_{xx} = -e\langle nl \mid r^2 \mid nl\rangle \iint Y^*_{lm}(\theta,\varphi)(3\sin^2\theta\cos^2\varphi - 1) Y_{lm}(\theta,\varphi) d\Omega, \quad (84,16)$$

$$Q_{yy} = -e\langle nl \mid r^2 \mid nl\rangle \iint Y^*_{lm}(\theta,\varphi)(3\sin^2\theta\sin^2\varphi - 1) Y_{lm}(\theta,\varphi) d\Omega, \quad (84,17)$$

$$Q_{zz} = -e\langle nl \mid r^2 \mid nl\rangle \iint Y^*_{lm}(\theta,\varphi)(3\cos^2\theta - 1) Y_{lm}(\theta,\varphi) d\Omega. \quad (84,18)$$

პირველ ორ გამოსახულებაში ინტეგრალი φ-თი π-ს ტოლია, მესამეში კი 2π-სი, ამიტომ ცხადია, (84,11)-ის გათვალისწინებით გვექნება

$$Q_{zz} = -2Q_{xx} = -2Q_{yy}; \quad (84,19)$$

მაშასადამე, თუ ვიპოვით $Q_0 = Q_{zz}$ კომპონენტს, ამით ტენზორის ყველა კომპონენტი განსაზღვრული იქნება. ვიპოვოთ Q_{zz}. (84,18)-ის თანახმად

$$Q_{zz} = -e\langle nl \mid r^2 \mid nl\rangle \langle lm \mid 3\cos^2\theta - 1 \mid lm\rangle. \quad (84,20)$$

კუთხეებზე დამოკიდებული ინტეგრალის გამოსათვლელად ვისარგებლოთ (33,29) რეკურენტული ფორმულით

$$\cos\theta\, Y_{lm}(\theta,\varphi) = \sqrt{\frac{(l-m+1)(l+m+1)}{(2l+1)(2l+3)}}\, Y_{l+1,m} + \sqrt{\frac{(l-m)(l+m)}{(2l-1)(2l+1)}}\, Y_{l-1,m} \quad (84,21)$$

მაშინ, თუ გამოვიყენებთ სფერული ფუნქციების ორთო-ნორმირების პირობას, მარტივად ვაჩვენებთ, რომ

$$\langle lm \mid \cos^2\theta \mid lm\rangle = \frac{2l(l+1) - 1 - 2m^2}{(2l-1)(2l+3)}, \quad (84,22)$$

ხოლო

$$\langle lm \mid 3\cos^2\theta - 1 \mid lm\rangle = \frac{2l(l+1) - 6m^2}{(2l-1)(2l+3)}. \quad (84,23)$$

ასე რომ, წყალბადისებური ატომის კვადრუპოლური მომენტისათვის გვექნება

$$Q_0 = -e\langle nl \mid r^2 \mid nl\rangle \frac{2l(l+1) - 6m^2}{(2l-1)(2l+3)}. \quad (84,24)$$

ამ გამოსახულებაში შემავალი r^2-ის საშუალო მნიშვნელობა წყალბადისებური ატომის რადიალური ფუნქციებით აგრეთვე შეგვიძლია ვიპოვოთ ზუსტად. ცნობილია, რომ [1]

$$\langle nl \mid r^2 \mid nl \rangle = \frac{n^2}{2\mathscr{Z}^2}\,[5n^2+1-3l\,(l+1)]\,a_0^2, \tag{84,25}$$

სადაც a_0 ბორის პირველი ორბიტის რადიუსია. ამგვარად,

$$Q_0(n,\ l,\ m) = -ea_0^2\,\frac{n^2}{2\mathscr{Z}^2}\,[5n^2+1-3l\,(l+1)]\ \frac{2l\,(l+1)-6m^2}{(2l-1)\,(2l+3)}. \tag{84,26}$$

როგორც ვხედავთ, როცა ატომი იმყოფება s-მდგომარეობაში ($l=0,\ m=0$), მაშინ კვადრუპოლური მომენტი ნულის ტოლია. s-მდგომარეობაში ელექტრული მუხტი ატომში განაწილებულია სფერულად, ამიტომ კვადრუპოლური მომენტი ახასიათებს ისეთ ატომებს, რომლებშიც ელექტრული მუხტი სფერულად არაა განაწილებული. აღსანიშნავია, რომ მოცემული n-ისა და l-ის დროს (84,26) კვადრუპოლური მომენტის საშუალო მნიშვნელობა მაგნიტური კვანტური რიცხვის მიხედვით ნულის ტოლია. მართლაც, რამდენადაც

$$\sum_{m=-l}^{+l} m^2 = \frac{1}{3}\,l\,(l+1)\,(2l+1), \tag{84,27}$$

იმდენად

$$\overline{Q}_0 = \frac{1}{2l+1}\sum_{m=-l}^{+l} Q_0(n, l, m) = 0. \tag{84,28}$$

აღსანიშნავია, რომ წყალბადისებური ატომის კვადრუპოლური მომენტი სიდიდის რიგით $l_0 a_0^2$-ის ტოლია, ე. ი. $Q_0 \sim 10^{-24}$ სმ^2.

დასასრულ აღვნიშნოთ, რომ ჩვენს მიერ ზემოთ შემოღებულ კვადრუპოლურ ტენზორს აქვს შემდეგი თვისებები: 1) იგი არის სიმეტრიული $Q_{ik} = Q_{ki}$, 2) მისი შპური ნულის ტოლია $Sp\,Q_{ik} = 0$ და 3) იგი არის ლუწი ტენზორი, ე. ი. $x_i \to -x_i$ — ინვერსიის დროს ნიშანს არ იცვლის.

ატომის მაგნიტური დიპოლური მომენტი. შევეცადოთ შევიძლია შემოვიღოთ ატომის მაგნიტური მომენტებიც. ჩვენ დავკმაყოფილდებით მხოლოდ მაგნიტური დიპოლური მომენტის განხილვით. ერთელექტრონიანი ატომის მაგნიტური დიპოლური მომენტი (84,8) ფორმულის თანახმად შეიძლება განვსაზღვროთ შემდეგი ფორმულით:

$$\hat{\mathbf{M}} = -\frac{e}{2\mu c}\int_{-\infty}^{+\infty} \psi^* \hat{\mathbf{l}}\,\psi\,d\mathbf{r}, \tag{84,29}$$

სადაც $\hat{\mathbf{l}}$ არის ორბიტალური მომენტის ოპერატორი, μ—ატომის დაყვანილი მასა, ხოლო c—სინათლის სიჩქარე. რადგან $\hat{\mathbf{l}}$ კოორდინატების ლუწი ფუნქციაა, ამიტომ სტაციონარულ მდგომარეობაში $\mathbf{M}$ მომენტი, საზოგადოდ, ნულის ტოლი არ არის. როცა ატომგული შეგვიძლია უძრავად ჩავთვალოთ, მაშინ μ იქნება ელექტრონის მასა. აღსანიშნავია, რომ მაგნიტური დიპოლური მომენტი აქსიალური ვექტორია, ე. ი. ინვერსიის დროს მისი კომპონენტები ნიშანს არ იცვლიან. წყალბადისებური

[1] იხილეთ, გ. ჭილაშვილი, ორი და სამი ნაწილაკის კვანტური მექანიკა, 1973, გვ. 85.

ატომის ტალღურ ფუნქციას აქვს (84,13) სახე და იგი წარმოადგენს $\hat{l}^2$ და $\hat{l}_z$ ოპერატორების საერთო საკუთარ ფუნქციას, ამიტომ, შესაბამისად, M^2 და M_z სიდიდეებიც ერთდროულად და ზუსტად იზომება. კერძოდ, მაგნიტური დიპოლური მომენტის z-პროექციისათვის გვექნება

$$M_z = -\frac{e\hbar}{2\mu c} m = -M_B m, \tag{84,30}$$

სადაც m მაგნიტური კვანტური რიცხვია, $M_B = \frac{e\hbar}{2\mu c}$ კი — ბორის მაგნიტონი. დიპოლმომენტის კვადრატისათვის შეგვიძლია დავწეროთ

$$M^2 = \left(\frac{e\hbar}{2\mu c}\right)^2 l(l+1) = M_B^2 l(l+1). \tag{84,31}$$

საიდანაც ჩანს, რომ s-მდგომარეობაში ($l=0$) ატომებს არც მაგნიტური დიპოლმომენტი გააჩნია.

§ 85. სინათლის გამოსხივება და შთანთქმა

შევისწავლოთ ატომის მიერ სინათლის გამოსხივებისა და შთანთქმის საკითხი. როგორც ცნობილია, სინათლის ელექტრომაგნიტური ველის გავლენით ატომი შეიძლება გადავიდეს აგზნებულ მდგომარეობაში, და, პირიქით, აგზნებულმა ატომმა შეიძლება გამოასხივოს სინათლე. ეს პროცესი ატომის ფიზიკაში ერთ-ერთი მნიშვნელოვანი პროცესია, ამიტომ აუცილებელია მისი დეტალური შესწავლა. ატომის მიერ სინათლის გამოსხივების ან შთანთქმის შესასწავლად საჭიროა გამოვიყენოთ (77,21) ფორმულა, რომლის საშუალებით უნდა გამოვთვალოთ სათანადო გადასვლის ალბათობები.

როგორც ვიცით, გადასვლის ალბათობის გამოთვლა, როცა ატომი მონოქრომატული (განსაზღვრული სიხშირის) პერიოდული შეშფოთების მოქმედებით დისკრეტულიდან უწყვეტი სპექტრის მდგომარეობაში გადადის, შედარებით ადვილია. ასე მაგალითად, როცა შეშფოთების შედეგად ატომი ψ_i საწყისი სტაციონარული მდგომარეობიდან გადადის საბოლოო ψ_f უწყვეტი სპექტრის მდგომარეობაში, სათანადო გადასვლის ალბათობა დროის ერთეულში, თუ უწყვეტი სპექტრის დამახასიათებელი ვექტორი (მაგალითად იმპულსი) ძევს $d\Omega$ სხეულოვან კუთხეში, როგორც ვიცით, განისაზღვრება ფორმულით

$$dw_{if} = \frac{2\pi}{\hbar} \left| \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_f^*(\mathbf{r}) \hat{H}'(\mathbf{r}) \psi_i(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \right|^2 \rho_f(E) d\Omega, \tag{85,1}$$

სადაც $\hat{H}'$ არის შეშფოთების ენერგიის ოპერატორი, ხოლო $\rho_f(E)$ საბოლოო მდგომარეობათა სიმკვრივეა.

ჩვენ მიერ განსახილველ შემთხვევაში გადასვლა ხდება სინათლის ელექტრომაგნიტური ველის მოქმედების შედეგად, ამიტომ $\hat{H}'$ შეშფოთების ოპერატორი დაკავშირებული იქნება სინათლის ელექტრომაგნიტურ ველთან. სინათლე წარმოადგენს ელექტრომაგნიტურ ტალღებს, ამიტომ საქმე გვექნება ატომის ელექტრონის ელექტრომაგნიტურ ტალღებთან ურთიერთქმედებასთან. შეიძლება ვაჩვენოთ, რომ მაგნიტური ურთიერთქმედება ელექტრულთან შედარებით გაცილებით მცირეა.

მართლაც, მაგნიტური ძალა, რომელიც იმოქმედებს ელექტრონზე, იქნება ლორენცის ძალა

$$F_M = \frac{e}{c}[v \times \mathfrak{H}]; \qquad (85,2)$$

თუ გავიხსენებთ, რომ სინათლისათვის ელექტრული და მაგნიტური დაძაბულობის ვექტორები სიდიდით ტოლებია, ე. ი. $|\mathfrak{H}| = |\mathfrak{E}|$, ხოლო ელექტრონზე მოქმედი ელექტრული ძალა $F = e\mathfrak{E}$, მივიღებთ, რომ მაგნიტური ურთიერთქმედების ძალა ელექტრულზე v/c-ჯერ მცირეა, სადაც v ელექტრონის სიჩქარეა ატომში; მსუბუქი ატომებისათვის იგი დაახლოებით 100-ჯერ მცირეა სინათლის სიჩქარეზე და ამიტომ მაგნიტური ურთიერთქმედება ამდენჯერვე მცირე იქნება ელექტრულზე.

როგორც ვიცით, სინათლისათვის ყოველთვის შეგვიძლია ავიღოთ $\operatorname{div} \mathbf{A} = 0$, $\varphi = 0$, მაშინ (36,18) ფორმულის თანახმად, შეშფოთების ენერგიის ოპერატორისათვის შეგვიძლია გამოვიყენოთ გამოსახულება

$$\hat{H}'(\mathbf{r},\ t) = \frac{e}{\mu c}(\mathbf{A},\ \hat{\mathbf{p}}) + \frac{e^2}{2\mu c^2}\mathbf{A}^2. \qquad (85,3)$$

პირველ მიახლოებაში $\mathbf{A}^2$-ის შემცველი წევრი, როგორც უფრო მცირე წევრი, შეგვიძლია გადავაგდოთ. ასე რომ, შეშფოთების ენერგიის ოპერატორს ექნება სახე

$$\hat{H}'(\mathbf{r},\ t) = \frac{e}{\mu c}(\mathbf{A}\hat{\mathbf{p}}). \qquad (85,4)$$

ვექტორული პოტენციალი (36,5) ფორმულის თანახმად შეგვიძლია წარმოვიდგინოთ შემდეგნაირად:

$$\mathbf{A}(\mathbf{r},\ t) = A_0 \mathbf{v} \cos(\mathbf{kr} - \omega t) \qquad (85,5)$$

ან, რაც იგივეა,

$$\mathbf{A}(\mathbf{r},\ t) = \frac{1}{2} A_0 \mathbf{v} e^{-i\mathbf{kr}}\, e^{i\omega t} + \frac{1}{2} A_0 \mathbf{v} e^{i\mathbf{kr}}\, e^{-i\omega t}, \qquad (85,6)$$

სადაც $\mathbf{v}$ არის ელექტრული დაძაბულობის $\mathfrak{E}$-ვექტორის ორტი, ე. ი. აღნიშნავს პოლარიზაციის მიმართულებას; A_0 წარმოადგენს ამპლიტუდას, ხოლო $\mathbf{k}$ ტალღური ვექტორია. ამპლიტუდა ისე ვანორმიროთ, რომ τ-მოცულობაში საშუალოდ გვქონდეს $\hbar\omega$ ენერგიის, $\mathbf{v}$ პოლარიზაციის და $k = \omega/c$ ტალღური რიცხვის მქონე ერთი ფოტონი.

რამდენადაც ელექტრული ველის დაძაბულობა ტოლია გამოსახულების

$$\mathfrak{E}(\mathbf{r},\ t) = -\frac{1}{c}\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} = A_0 \mathbf{v} \frac{\omega}{c} \sin(\mathbf{kr} - \omega t) \qquad (85,7)$$

და ელექტრული ველის ენერგიის სიმკვრივე ტოლია $\overline{\mathfrak{E}^2}/4\pi$, ამიტომ შეგვიძლია დავწეროთ

$$\frac{\hbar\omega}{\tau} = \frac{\overline{\mathfrak{E}^2}}{4\pi}, \qquad (85,8)$$

სადაც ხაზი აღნიშნავს საშუალო მნიშვნელობას ერთი პერიოდის შუალედში. რადგან $\sin^2(\mathbf{kr} - \omega t)$ ფუნქციის საშუალო $1/2$-ის ტოლია, ამიტომ (85,7) ფორმულის გათვალისწინებით შეგვიძლია დავწეროთ

$$A_0 = 2c\sqrt{\frac{2\pi\hbar}{\omega\tau}}. \qquad (85,9)$$

ჩვენ აქ ავარჩიეთ ისეთი ნორმირება, როცა მოცულობის ერთეულში გვაქვს ერთი კვანტი. მაშასადამე, ნორმირებული ვექტორპოტენციალისათვის გვექნება გამოსახულება

$$\mathbf{A}(\mathbf{r},\ t)\quad c\sqrt{\frac{2\pi\hbar}{\omega}}\,\mathbf{v}\left\{e^{-i\mathbf{kr}}\,e^{i\omega t}+e^{i\mathbf{kr}}\,e^{-i\omega t}\right\}. \tag{85,10}$$

ხოლო შეშფოთების ენერგიის ოპერატორისათვის (85,4)-ის თანახმად გვექნება

$$\hat{H}'(\mathbf{r},\ t)=\hat{H}'(\mathbf{r})\,e^{i\omega t}+\hat{H}'^{+}(\mathbf{r})\,e^{-i\omega t}, \tag{85,11}$$

სადაც

$$\hat{H}'(\mathbf{r})=\frac{e}{\mu}\sqrt{\frac{2\pi\hbar}{\omega}}\,e^{-i\mathbf{kr}}\,(\mathbf{v},\,\hat{\mathbf{p}}). \tag{85,12}$$

(85,11) გამოსახულების პირველი წევრი, ე. ი. $e^{i\omega t}$-ს შემცველი წევრი, როგორც ეს § 77-ში გაჩვენეთ, აღწერს პროცესს, რომლის დროსაც გვაქვს სინათლის განთავისუფლება, ხოლო $e^{-i\omega t}$-ს შემცველი წევრი აპირობებს სინათლის შთანთქმას.

რადგან კვანტის შთანთქმის შედეგად ატომი გადადის უწყვეტ სპექტრში, რომლის ენერგია $E(p)=p^2/2\mu$ იმპულსის ფუნქციაა, ამიტომ გადასვლის ალბათობის გამოსათვლელად შეგვიძლია ვისარგებლოთ (85,1) ფორმულით, სადაც საბოლოო მდგომარეობათა სიმკვრივისათვის უნდა გამოვიყენოთ გამოსახულება[1]

$$\rho_f(E)=\frac{\mu p\tau}{(2\pi\hbar)^3}, \tag{85,13}$$

სადაც τ არის ის მოცულობა, რომელშიც ხდება განსილული პროცესი.

თუ საბოლოო მდგომარეობის სიმკვრივის აქ ნაპოვნ მნიშვნელობას და შეშფოთების ენერგიის ოპერატორს შევიტანთ (85,1) ფორმულაში, მაშინ დროის ერთეულში გადასვლის ალბათობისათვის, როცა კვანტის შთანთქმის შედეგად ატომი საწყისი დისკრეტული მდგომარეობიდან გადადის უწყვეტი სპექტრის საბოლოო მდგომარეობაში, გვექნება

$$dw_{if}=\frac{e^2p\tau}{2\pi\omega\hbar^3}\left|\int\limits_{-\infty}^{+\infty}\psi_f^*\,e^{i\mathbf{kr}}\,(\mathbf{v}\,\hat{\mathbf{p}})\,\psi_i\,d\mathbf{r}\right|^2 d\Omega_p; \tag{85,14}$$

ამასთან, იგულისხმება, რომ საბოლოო მდგომარეობის იმპულსის მიმართულება ძევს $d\Omega$-სხივურთავან კუთხეში.

ახლა განვიხილოთ შებრუნებული პროცესი, როცა ატომი აგზნებული E_m ენერგიის მდგომარეობიდან გადადის უფრო დაბალ E_n მდგომარეობაში $\hbar\omega_{mn}=E_m-E_n$ ენერგიის კვანტის გამოსხივებით. ამ შემთხვევაში, საბოლოო მდგომარეობაში გვაქვს ელექტრომაგნიტური ველის კვანტები, ამიტომ კვლავ შეგვიძლია გამოვიყენოთ (85,1) ფორმულა, სადაც $\rho_f(E)$ იქნება გამოსხივებული ელექტრომაგნიტური ველის მდგომარეობათა რიცხვი მოცულობის ერთეულში, ე. ი.

$$\rho_f(E)=\frac{\omega^2}{(2\pi c)^3\hbar}. \tag{85,15}$$

ამგვარად, იმ პროცესის ალბათობა დროის ერთეულში, როცა სისტემა საწყისი ψ_m მდგომარეობიდან გადადის საბოლოო ψ_n მდგომარეობაში და შედე-

---

[1] ამასთან, τ ნებისმიერი ნებისმიერად ნორმირებული უნდა იყოს ერთზე, საბოლოო კოორდინატებზე.

გად გამოსხივდება $\hbar\omega_{mn}$ კვანტი $\mathbf{k}$-ტალღური ვექტორითა და ν პოლარიზაციით, განისაზღვრება ფორმულით

$$dw_{mn} = \frac{e^2}{\hbar c}\left(\frac{\hbar}{\mu c}\right)^2 \frac{\omega_{mn}\, d\Omega_k}{2\pi\hbar^2}\left|\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_n^* e^{-i\mathbf{kr}}(\boldsymbol{\nu}, \hat{\mathbf{p}})\psi_m\, d\mathbf{r}\right|^2. \qquad (85{,}16)$$

ამასთან, იგულისხმება, რომ გამოსხივებული კვანტის ტალღური ვექტორის მიმართულება ძევს $d\Omega_k$ სხეულოვან კუთხეში, ხოლო სიდიდე ω_{mn}/c-ს ტოლია.

როგორც ვხედავთ, სინათლისა და ატომის ურთიერთქმედების გამომხატველ გადასვლის ალბათობის ფორმულაში მონაწილეობას იღებს უნივერსალური მუდმივი

$$\alpha_0 = \frac{e^2}{\hbar c} = \frac{1}{137{,}03}, \qquad (85{,}17)$$

რომელსაც ზომერფელდის ნაზი სტრუქტურის მუდმივს უწოდებენ.

წყვეტილიდან წყვეტილ სპექტრში გადასვლა კვანტის შთანთქმით. ახლა ვიპოვოთ ფორმულა, რომელიც აღწერს გადასვლის ალბათობას—ატომის E_n დისკრეტული ენერგეტული დონიდან მეორე E_m ენერგეტულ დონეზე გადასვლას $\hbar\omega_{mn} = E_m - E_n$ კვანტის შთანთქმის შედეგად. როგორც § 77-ში ვივუთითეთ, ამ შემთხვევაში საჭიროა დაცემული სინათლე მონოქრომატული კი არ იყოს, არამედ შეიცავდეს სიხშირეთა მთელ სპექტრს. საწყის მდგომარეობაში უწყვეტი სპექტრის არსებობა საჭიროა ენერგიის შენახვის კანონის შესასრულებლად. მართლაც, რადგან ხდება კვანტის შთანთქმა, ამიტომ მისი სიცოცხლის $\Delta\tau$ ხანგრძლივობა სასრულოა; განუზღვრელობის $\Delta E\Delta\tau \sim \hbar$ თანაფარდობიდან კი ჩანს, რომ ამ შემთხვევაში კვანტებს არ შეიძლება ჰქონდეს ზუსტად განსაზღვრული ენერგია. ე. ი. დაცემულ სინათლეს უნდა ჰქონდეს სიხშირეთა მთელი სპექტრი.

აღნიშნული პროცესის ალბათობა შეიძლება გამოითვალოს (77,35) ფორმულით

$$w_{mn} = \frac{2\pi}{\hbar^2}\,|H'_{mn}(\omega_{mn})|^2, \qquad (85{,}18)$$

სადაც $H'_{mn}(\omega_{mn})$ შეშფოთების ენერგიის მატრიცული ელემენტის $\hbar\omega_{mn} = E_m - E_n$ სიხშირის შესაბამისი ფურიეკომპონენტია.

შემაშფოთებელი ველის ვექტორპოტენციალი შეგვიძლია წარმოვიდგინოთ შემდეგი სახით:

$$A(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{2\sqrt{2\pi}}\int \mathbf{A}_0(\omega)\, e^{i(\mathbf{kr}-\omega t)}\, d\omega + \\ + \frac{1}{2\sqrt{2\pi}}\int \mathbf{A}_0(\omega) e^{-i(\mathbf{kr}-\omega t)}\, d\omega \qquad (85{,}19)$$

როგორც ვიცით, შთანთქმას აღწერს ამ გამოსახულების პირველი წევრი, ამიტომ შეშფოთების ენერგიის ოპერატორისათვის გვექნება

$$\hat{H}'(\mathbf{r}, t) = \frac{e}{2\sqrt{2\pi}\,\mu c}\left\{\int \mathbf{A}_0(\omega)\, e^{i(\mathbf{kr}-\omega t)}\, d\omega\right\}\hat{\mathbf{p}}. \qquad (85{,}20)$$

n-დან m-მდგომარეობაში გადასვლის მატრიცული ელემენტი ტოლი იქნება

$$H'_{mn}(t) = \frac{e}{2\mu c}\int d\omega e^{-i\omega t}\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_m^* e^{i\mathbf{kr}}(\mathbf{A}_0(\omega)\hat{\mathbf{p}})\psi_n\, d\mathbf{r}, \qquad (85{,}21)$$

საიდანაც ჩანს, რომ

$$H'_{mn}(\omega) = \frac{e}{2\mu c}\int \psi_m^* e^{i\mathbf{kr}} (\mathbf{A}_0(\omega)\hat{\mathbf{p}})\,\psi_n\, d\mathbf{r}. \qquad (85,22)$$

შემოვიღოთ პოლარიზაციის მიმართულება $\mathbf{A}_0(\omega) = A_0(\omega)\,\boldsymbol{\nu}$, მაშინ ω_{mn} სიხშირის შესაბამისი ფურიეკომპონენტისათვის გვექნება

$$H'_{mn}(\omega_{nm}) = \frac{e}{2\mu c} A_0(\omega_{nm}) \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_m^* e^{i\mathbf{kr}} (\boldsymbol{\nu}\hat{\mathbf{p}})\,\psi_n\, d\mathbf{r}, \qquad (85,23)$$

ხოლო გადასვლის ალბათობისათვის მივიღებთ

$$w_{mn} = \frac{\pi e^2}{2\mu^2 c^2 \hbar^2} |A_0(\omega_{nm})|^2 \left| \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_m^* e^{i\mathbf{kr}} (\boldsymbol{\nu}\hat{\mathbf{p}})\psi_n d\mathbf{r} \right|^2. \qquad (85,24)$$

როგორც ვხედავთ, გადასვლის ალბათობაში მონაწილეობს იგივე ინტეგრალი, რაც გვქონდა მონოქრომატული ტალღების განხილვის დროს. განსხვავება გვაქვს მხოლოდ იმაში, რომ (85,24) ფორმულაში შემოვიდა ვექტორპოტენციალის ამპლიტუდის ფურიეკომპონენტი, რომელიც შეესაბამება ω_{nm} გადასვლის სიხშირეს. დავაკავშიროთ ეს სიდიდე დაცემული სინათლის ნაკადთან. როგორც ვიცით, სინათლის ნაკადი განისაზღვრება პოინტინგ-უმოვის ვექტორით, რომელსაც სინათლისათვის აქვს სახე $|\mathbf{S}| = \frac{c}{4\pi}\overline{\mathcal{E}^2}$. გამოვთვალოთ ამ სიდიდის საშუალო ერთი პერიოდის მანძილზე, რადგან $\mathcal{E}(t)$ განისაზღვრება (85,7) ფორმულით, ამიტომ

$$\overline{S} = \frac{\omega^2}{8\pi c} |A_0(\omega)|^2. \qquad (85,25)$$

ეს სიდიდე გამოხატავს სინათლის გავრცელების მიმართულებისადმი მართობულ ერთეულოვან ფართში, ერთ წეკუნდში, გასულ საშუალო ენერგიას, ამიტომ თუ მას გავყოფთ ერთი კვანტის ჩა ენერგიაზე, მივიღებთ დაცემული კვანტების საშუალო ნაკადს. ამგვარად,

$$J(\omega) = \frac{\omega}{8\pi\hbar c} |A_0(\omega)|^2. \qquad (85,26)$$

ერთ წეკუნდში გადასვლის ალბათობისათვის, როცა ადგილი აქვს სინათლის კვანტის შთანთქმის შედეგად ატომის E_n-დან E_m-მდგომარეობაში გადასვლას, საბოლოოდ გვექნება შემდეგი ფორმულა:

$$w_{mn} = \frac{4\pi^2 e^2}{\mu^2\,\omega_{nm}\,c\hbar} J(\omega_{nm}) \left| \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_m^* e^{i\mathbf{kr}} (\boldsymbol{\nu}\hat{\mathbf{p}})\,\psi_n\, d\mathbf{r} \right|^2, \qquad (85,27)$$

სადაც $\mathbf{k}$ ვექტორის აბსოლუტური მნიშვნელობა ტოლია ω_{nm}/c-სი.

როგორც ვხედავთ, განსხვავებით (85,16) ფორმულისაგან, (85,27) ფორმულაში სინათლის საბოლოო მდგომარეობის სიმკვრივის ნაცვლად შემოვიდა დაცემული სინათლის კვანტების საშუალო ნაკადი.

დაბოლოს, აღვნიშნოთ, რომ ამ პარაგრაფში განხილულ გადასვლის ალბათობის ფორმულებში მონაწილეობს ინტეგრალი

$$\Gamma^{(+)} = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_f^* e^{i\mathbf{kr}} (\boldsymbol{\nu}\hat{\mathbf{p}})\,\psi_i d\mathbf{r}; \qquad (85,28)$$

$\hat{\mathbf{p}}$ ოპერატორის ერმიტულობის გამო შეგვიძლია დავწეროთ

$$\Gamma^{(+)} = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_i (\mathbf{v}\hat{\mathbf{p}}) e^{i\mathbf{kr}} \psi_f^* \, d\mathbf{r}. \tag{85,29}$$

რადგან $\mathbf{v}\hat{\mathbf{p}} = \hat{\mathbf{p}}_\mathbf{v}$, ამიტომ $\mathbf{v}\hat{\mathbf{p}}$ არის გრადიენტის მხოლოდ ის კომპონენტი, რომელიც მოქმედებს $\mathbf{A}_0$ ვექტორის მიმართულებით. სინათლის ტალღური ვექტორი $\mathbf{k}$ მართობია $\mathbf{A}_0$ ვექტორისა, ამიტომ $\hat{\mathbf{p}}_\mathbf{v} = -i\hbar \operatorname{grad}_\mathbf{v}$ ოპერატორი არ მოქმედებს ექსპონენტზე, ე. ი. $(\mathbf{v}\hat{\mathbf{p}}) e^{i\mathbf{kr}} = e^{i\mathbf{kr}} (\mathbf{v}\hat{\mathbf{p}})$. შედეგად გვექნება

$$\Gamma^{(+)} = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_i e^{i\mathbf{kr}} \, (\mathbf{v}\hat{\mathbf{p}}) \psi_f^* \, d\mathbf{r}; \tag{85,30}$$

ცხადია, რომ

$$\Gamma^{(+)*} = -\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_i^* \, e^{-i\mathbf{kr}} (\mathbf{v}\hat{\mathbf{p}}) \, \psi_f \, d\mathbf{r}, \tag{85,31}$$

საიდანაც ვხედავთ, რომ შთანთქმისა და გამოსხივების შესაბამისი ალბათობების ფორმულებში შემავალი ინტეგრალები ერთმანეთისაგან მხოლოდ ნიშნით განსხვავდებიან.

§ 86. მულტიპოლური გამოსხივების ფორმულები

წინა პარაგრაფში გამოყვანილი ფორმულები ზოგადია და გამოიყენება ნებისმიერი სისტემისათვის, რომელიც ერთი მდგომარეობიდან მეორეში გადადის სინათლის გამოსხივებით ან შთანთქმით. მიღებული ფორმულები შეგვიძლია საგრძნობლად გავამარტივოთ, როდესაც სინათლის ტალღის სიგრძე გაცილებით მეტია ატომის ზომასთან შედარებით.

დავუშვათ, რომ ატომის ხაზოვანი ზომა a-ს ტოლია და, ვთქვათ, დაცულია პირობა $\lambda \gg a$, სადაც λ არის სინათლის ტალღის სიგრძე, გაყოფილი 2π-ზე. რადგან $\lambda = 1/k$, ამიტომ ეს პირობა ეკვივალენტურია $ka \ll 1$ პირობისა. როცა ეს უკანასკნელი შესრულებულია, მაშინ გადასვლის ალბათობის (85,16) ფორმულაში

$$dw_{nm} = \frac{e^2}{\hbar c} \left(\frac{\hbar}{\mu c} \right)^2 \frac{\omega_{nm}}{2\pi\hbar^2} \left| \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_n^* \, e^{-i\mathbf{kr}} (\mathbf{v}\hat{\mathbf{p}}) \psi_m \, d\mathbf{r} \right|^2 d\Omega_\mathbf{k} \tag{86,1}$$

შეგვიძლია ექსპონენტი გავშალოთ მწკრივად და შევინარჩუნოთ რამდენიმე წევრი

$$e^{-i\mathbf{kr}} = 1 - i(\mathbf{kr}) + \ldots + . \tag{86,2}$$

რადგან $\hat{\mathbf{p}} = \mu\hat{\mathbf{v}} = \mu\dot{\hat{\mathbf{r}}}$ და, გარდა ამისა, $(\mathbf{v}\hat{\mathbf{p}})$ და ექსპონენტი შეგვიძლია გადავსვათ, ამიტომ უფლება გვაქვს დავწეროთ

$$\frac{1}{\mu} (\mathbf{v}\hat{\mathbf{p}}) \, e^{-i\mathbf{kr}} = (\mathbf{vv}) - i \, (\mathbf{vv}) \, (\mathbf{kr}) + \ldots + . \tag{85,3}$$

გარდავქმნათ მეორე წევრი; გადავწეროთ იგი ოგივურად

$$(\mathbf{vv}) \, (\mathbf{kr}) = (\mathbf{vv}) \, (\mathbf{kr}) - \frac{1}{2} \, (\mathbf{vr}) \, (\mathbf{kv}) + \frac{1}{2} \, (\mathbf{vr}) \, (\mathbf{kv}) =$$

$$= \frac{1}{2} \, [\, (\mathbf{vv}) \, (\mathbf{kr}) + (\mathbf{vv}) \, (\mathbf{kr}) - (\mathbf{vr}) \, (\mathbf{kv}) + (\mathbf{vr}) \, (\mathbf{kv})], \tag{86,4}$$

რომელიც ასე შეგვიძლია წარმოვიდგინოთ:

$$(\nu\nu)(\mathbf{kr}) = \frac{1}{2}\left\{(\nu[\nu(\mathbf{kr}) - \mathbf{r}(\mathbf{k}\nu)]) + \frac{d}{dt}(\nu\mathbf{r})(\mathbf{kr})\right\} \tag{86,5}$$

თუ გავიხსენებთ ორმაგი ვექტორული ნამრავლის ცნობილ ფორმულას

$$[\mathbf{A}\times[\mathbf{B}\times\mathbf{C}]] = \mathbf{B}(\mathbf{AC}) - \mathbf{C}(\mathbf{AB}) \tag{86,6}$$

შეგვიძლია დავწეროთ

$$(\nu\nu)(\mathbf{kr}) = \frac{1}{2}\left\{(\nu[\mathbf{k}\times[\nu\times\mathbf{r}]]) + \frac{d}{dt}(\nu\mathbf{r})(\mathbf{kr})\right\}. \tag{86,7}$$

ამგვარად, (86,3) ფორმულა მიიღებს სახეს

$$\frac{1}{\mu}(\nu\hat{\mathbf{p}})\, e^{-i\mathbf{kr}} = (\nu\nu) - \frac{i}{2\mu}\left\{(\nu[\hat{\mathbf{l}}\times\mathbf{k}])\right\} - \frac{i}{2}\frac{d}{dt}(\nu\mathbf{r})(\mathbf{kr})\Big\} + \ldots +, \tag{86,8}$$

სადაც $\hat{\mathbf{l}}$ იმპულსის მომენტის ოპერატორია. ავიღოთ (86,6) გამოსახულების n,m მატრიცული ელემენტი და გავიხსენოთ, რომ მისი დროითი წარმოებულისათვის გვაქვს ფორმულა

$$\frac{dL_{nm}}{dt} = i\omega_{nm}L_{nm}. \tag{86,9}$$

მაშინ

$$\frac{1}{\mu}\{(\nu\hat{\mathbf{p}})\, e^{-i\mathbf{kr}}\}_{nm} = i\omega_{nm}(\nu\mathbf{r})_{nm} + \frac{ic}{e}\{[\mathbf{k}\times\nu]\mathbf{M}\}_{nm} +$$

$$+ \frac{\omega_{nm}}{2}\{(\nu\mathbf{r})(\mathbf{kr})\}_{nm} + \ldots +, \tag{86,10}$$

სადაც

$$\hat{\mathbf{M}} = -\frac{e}{2\mu c}\hat{\mathbf{l}} \tag{86,11}$$

ატომის მაგნიტური დიპოლური მომენტის ოპერატორია. (86,10) წარმოადგენს ურთიერთქმედების მატრიცული ელემენტის გაშლას ელექტრულ და მაგნიტურ მულტიპოლებად. განვიხილოთ ამ მწკრივის თითოეული წევრი ცალ-ცალკე და დავწეროთ მათი შესაბამისი გადასვლის ალბათობის ფორმულები.

დიპოლური გადასვლის ფორმულა. თუ (86,10)-ში შევინარჩუნებთ მხოლოდ პირველ წევრს, მაშინ (86,1) ფორმულა მოგვცემს

$$dw_d = \frac{e^2}{\hbar c}\frac{\omega_{nm}^3}{2\pi c^2}\,|\,(\nu\mathbf{r})_{nm}\,|^2\, d\Omega_{\mathbf{k}}. \tag{86,12}$$

გავიხსენოთ, რომ $\mathbf{d} = -e\mathbf{r}$ ატომის ელექტრული დიპოლური მომენტია, მაშინ ერთ სეკუნდში გადასვლის ალბათობა დიპოლური კვანტის გამოსხივებით განისაზღვრება ფორმულით

$$dw_d = \frac{\omega_{nm}^3}{2\pi\hbar c^3}\,|\,(\nu\mathbf{d}_{nm})|^2\, d\Omega_k, \tag{86,13}$$

სადაც

$$\mathbf{d}_{nm} = -e\int \psi_n^*(\mathbf{r})\,\mathbf{r}\,\psi_m(\mathbf{r})d\mathbf{r} \tag{86,14}$$

m-დან n-მდგომარეობაში გადასვლის დიპოლმომენტის მატრიცული ელემენტია ნებისმიერად აღებული კოორდინატთა სისტემის სათავის მიმართ. ψ_n ფუნქციების ორთოგონალობის გამო $\mathbf{d}_{nm}$ მატრიცული ელემენტი არ შეიცვლება, თუ $\mathbf{r}$-ს დავუმატებთ ნებისმიერ მუდმივ ვექტორს.

როცა სინათლის ტალღა პოლარიზებულია z-ღერძის გასწვრივ, მაშინ $\boldsymbol{\nu}\mathbf{r} = r\cos\theta = z$ და გადასვლის ალბათობისათვის მივიღებთ

$$dw_d = \frac{e^2}{\hbar c}\frac{\omega_{mn}^3}{2\pi c^2}\left|\int \psi_n^* z\psi_m\, d\mathbf{r}\right|^2 d\Omega_{\mathbf{k}}. \qquad (86,15)$$

ახლა, ვთქვათ, გვაინტერესებს დიპოლური კვანტის გამოსხივება არა განსაზღვრული $\boldsymbol{\nu}$ პოლარიზაციით, არამედ ნებისმიერი პოლარიზაციით, ოღონდ $\mathbf{k}$ ვექტორის განსაზღვრული მიმართულებით.

როგორც ვიცით, ნებისმიერი პოლარიზაცია, გამოსხივების გავრცელების მოცემული მიმართულებისათვის, შეგვიძლია წარმოვიდგინოთ, როგორც ორი ურთიერთმართობული $\boldsymbol{\nu}^{(1)}$ და $\boldsymbol{\nu}^{(2)}$ პოლარიზაციის ჯამი. ზოგადობის დაურღვეველად დავუშვათ, რომ $\boldsymbol{\nu}^{(1)}$ პოლარიზაცია მიმართულია დიპოლმომენტის მართობულად, ხოლო $\boldsymbol{\nu}^{(2)}$ ვექტორი ძევს $\mathbf{k}$ და $\mathbf{d}$ ვექტორებზე გამავალ სიბრტყეში. თუ კუთხეს დიპოლმომენტსა და გავრცელების მიმართულებას შორის აღვნიშნავთ θ-თი, მაშინ $\boldsymbol{\nu}^{(2)}$ და $\mathbf{d}$ ვექტორებს შორის კუთხე იქნება $\frac{\pi}{2} - \theta$. თუ $d\Omega$ აღნიშნავს სხეულოვან კუთხეს $\mathbf{k}$-ს მიმართულებით, მაშინ $\mathbf{k}$ მიმართულებით არ გვექნება $\boldsymbol{\nu}^{(1)}$ პოლარიზაციის მქონე სინათლის გამოსხივება $(\mathbf{e}\boldsymbol{\nu})^{(1)} = 0$. ამის გამო, დაგვრჩება $\boldsymbol{\nu}^{(2)}$-ის გასწვრივ პოლარიზებული სინათლე. მაშინ (86,11) ფორმულიდან, ერთ წამში გადასვლის ალბათობისათვის შეგვიძლია დავწეროთ

$$dw_d = \frac{e^2}{\hbar c}\frac{\omega_{mn}^3}{2\pi c^2}|\mathbf{r}_{nm}|^2 \sin^2\theta d\Omega; \qquad (86,16)$$

თუ ამ გამოსახულებას გავაინტეგრალებთ გამოსხივებული კვანტის ყველა მიმართულების მიხედვით, ე. ი. $d\Omega$ სხეულოვანი კუთხით, მივიღებთ

$$w_d = \frac{4}{3}\frac{e^2}{\hbar c}\frac{\omega_{mn}^3}{c^2}|r_{mn}|^2. \qquad (85,17)$$

გადასვლის ალბათობის საშუალებით ადვილად განვსაზღვრავთ დიპოლური გამოსხივების ინტენსივობას. კვანტურ მექანიკაში $\boldsymbol{\nu}$ მიმართულებით პოლარიზებული გამოსხივებული სინათლის ინტენსივობა განისაზღვრება სიდიდით, რომელიც გამოიხატება ერთ წამში გადასვლის ალბათობის ნამრავლით გამოსხივებული სინათლის კვანტის ენერგიაზე, ე. ი.

$$G_{nm}\, d\Omega = \frac{e^2\omega_{mn}^4}{2\pi c^3}|(\boldsymbol{\nu}\mathbf{r})_{nm}|^2\, d\Omega \qquad (86,18)$$

ამ გამოსახულების გასაშუალოებით პოლარიზაციებით და კუთხეებით, (86,17) ფორმულის თანახმად, მივიღებთ

$$G_{nm} = \frac{4\omega_{mn}^4}{3c^3}|\mathbf{d}_{nm}|^2. \qquad (86,19)$$

საინტერესოა გავიხსენოთ, რომ ბორის თეორიაში გამოსხივებული სინათლის ინტენსივობის განსაზღვრა დიდ სიძნელეებთან იყო დაკავშირებული, რამდენადაც ამ თეორიაში შეუძლებელი იყო გადასვლის ალბათობის გამოთვლა.

აღვნიშნოთ, რომ დიპოლური გამოსხივება შეესაბამება იმ შემთხვევას, როცა $e^{ikr} \approx 1$, ე. ი. როცა $ka \simeq 0$ და, მაშასადამე, $\lambda = \infty$. დავუშვათ, ელექტრული ველი ვრცელდება x-ღერძის გასწვრივ, მაშინ (85,7) ფორმულის თანახმად,

$$\overline{\mathcal{E}}(x, t) = \overline{\mathcal{E}}_0 \sin\left(\omega t - \frac{x}{\lambda}\right), \tag{86,20}$$

როცა ატომის შიგნით $x/\lambda \to 0$, მაშინ

$$\overline{\mathcal{E}}(t) = \overline{\mathcal{E}}_0 \sin \omega t. \tag{86,21}$$

რადგან (86,20) გამოსახულების არგუმენტი ასეც წარმოიდგინება

$$\omega t - \frac{x}{\lambda} = \omega\left(t - \frac{x}{\omega\lambda}\right) = \omega\left(t - \frac{x}{c}\right), \tag{86,22}$$

ამიტომ $ka \to 0$ პირობა ეკვივალენტური ყოფილა ატომის შიგნით (a-ზანძილზე) დაგვიანების უგულებელყოფისა.

დაბოლოს აღვნიშნოთ, რომ ატომის E_n მდგომარეობიდან E_m მდგომარეობაში გადასვლის ალბათობა ერთ სეკუნდში, რომელიც გაპოწვეულია ν პოლარიზაციისა და $\hbar\omega_{nm} = E_n - E_m$ სიხშირის კვანტის შთანთქმით $d\Omega$ ხეხულოვანი კუთხიდან, ტოლი იქნება გამოსახულებისა

$$dw_d = \frac{\omega_{nm}^3}{2\pi\hbar c^3} |(\nu \mathbf{d}_{mn})|^2 \, d\Omega; \tag{86,23}$$

$\mathbf{d}_{mn}$ წარმოადგენს n-დან m-მდგომარეობაში გადასვლის დიპოლმომენტის მატრიცულ ელემენტს, სადაც (86,14) ფორმულისაგან განსხვავებით საწყისი და საბოლოო მდგომარეობები გადასმულია.

მაგნიტური დიპოლური გადასვლის ფორმულა. განვიხილოთ მულტიპოლური გაშლის მეორე წევრი. შემოვიღოთ ერთეულოვანი $\varkappa$ ვექტორი $\mathbf{k} = \frac{\omega}{c}\varkappa$ ტალღური ვექტორის მიმართულებით, მაშინ აღნიშნული წევრი მიიღებს სახეს

$$\frac{ick}{e} \{[\varkappa \times \nu]\mathbf{M}\}_{nm}, \tag{86,24}$$

ხოლო სათანადო გადასვლის ალბათობისათვის ერთ სეკუნდში გვექნება

$$dw_m = \frac{\omega_{mn}^3}{2\pi\hbar c^3} |\{[\varkappa \times \nu]\mathbf{M}\}_{nm}|^2 \, d\Omega, \tag{85,25}$$

რადგან ამ ფორმულაში მონაწილეობს ატომის მაგნიტური დიპოლური მომენტი, ამიტომ (86,25)-ს მაგნიტური დიპოლური გამოსხივების ფორმულას უწოდებენ. აღსანიშნავია, რომ ამ ფორმულაში $[\varkappa \times \nu]$ მუდმივი ვექტორია.

ელექტრული კვადრუპოლური გადასვლის ფორმულა. განვიხილოთ (86,10) მწკრივის მესამე წევრი

$$\frac{\omega}{2} \{(\nu\mathbf{r})(\mathbf{kr})\}_{nm}. \tag{82,26}$$

ცხადია, ეს წევრი ელექტრონის მუხტზე გამრავლების შემდეგ ასეც შეგვიძლია წარმოვიდგინოთ:

$$-\frac{e\omega}{2}\left\{\sum_{i=1}^{3}\nu_i x_i\sum_{j=1}^{3}k_j x_j\right\}_{nm}=\frac{\omega^2}{2c}\left\{\sum_{i,j}\Pi_{ij}Q_{ij}\right\}_{nm}, \qquad (86{,}27)$$

სადაც $\Pi_{ij}=\nu_i x_j$ და $Q_{ij}=-ex_ix_j$ მეორე რანგის სიმეტრიული ტენზორებია. ამასთან, Q_{ij} დაკავშირებულია კვადრუპოლურ ტენზორთან. ამის გამო სათანადო პროცესს კვადრუპოლურ გადასვლას უწოდებენ. ამგვარად, კვადრუპოლური გადასვლის ალბათობა ერთ წამში, რომლის დროსაც გამოსხივებული ν პოლარიზაციის კვანტი ძევს $d\Omega$ სხეულოვან კუთხეში, განისაზღვრება შემდეგი ფორმულით:

$$dw_q=\frac{e^2}{\hbar c}\frac{\omega_{nm}^5}{8\pi c^4}\,|\,\{(\nu\mathbf{r})\,(\varkappa\mathbf{r})\}_{mn}\,|^2\,d\Omega. \qquad (86{,}28)$$

ამ ფორმულიდან ჩანს, რომ გადასვლის ალბათობა გარდა პოლარიზაციის მიმართულებისა, როგორც ეს გვქონდა დიპოლური გადასვლის დროს, დამოკიდებულია სინათლის მიმართულებაზეც.

ელექტრულ დიპოლურ, კვადრუპოლურ, ოქტუპოლურ და ა. შ. გადასვლებს, სიმარტივის მიზნით სათანადოდ აღნიშნავენ $E1$, $E2$, $E3$ და ა. შ. მაგნიტურ დიპოლურ, კვადრუპოლურ, ოქტუპოლურ და ა. შ. კი — $M1$, $M2$, $M3$ და ა. შ.

ამ გადასვლებიდან ყველაზე უფრო მნიშვნელოვანია $E1$ გადასვლა. მაგნიტურ მომენტთან დაკავშირებული გამოსხივების ალბათობა შეიცავს v/c ფარდობას, სადაც v ელექტრონის სიჩქარეა ატომში, ამიტომ $M1$ გადასვლის ალბათობა $(v/c)^2$-ჯერ მცირეა $E1$ გადასვლის ალბათობაზე. მსუბუქი ატომებისათვის $(v/c)^2\sim10^{-5}$.

კვადრუპოლური გადასვლის ალბათობა $(a/\lambda)^2$-ჯერ მცირეა დიპოლური გადასვლის ალბათობაზე. ხილული სხივებისათვის $\lambda\sim0{,}5\cdot10^{-4}$ სმ, ატომის ზომა კი $a\sim10^{-8}$ სმ, ამიტომ $E2$ გადასვლის ალბათობა 10^8-ჯერ მცირეა $E1$ გადასვლის ალბათობაზე.

ამგვარად, თუ რაიმე მიზეზით ატომში ელექტრული დიპოლური გადასვლის ალბათობა ნული არ არის, მაშინ $E2$ და $M1$ გადასვლები შეიძლება არ განვიხილოთ. მაგრამ ქვემოთ ჩვენ ვიჩვენებთ, რომ ხშირად $E1$ გადასვლა აკრძალულია შერჩევის წესებით და ამიტომ $E2$ და $M1$ გადასვლები ამ შემთხვევაში მნიშვნელოვან როლს ასრულებს. ეს უკანასკნელი შემთხვევა განსაკუთრებით ხშირად გვხვდება ატომგულებში, სადაც $E1$ გადასვლის აკრძალვის შემთხვევა ჩვეულებრივ მოვლენას წარმოადგენს. მაგალითად, ელექტრული დიპოლმომენტი ნული იქნება ისეთი სისტემისათვის, რომლის შემადგენელ ნაწილაკებს ტოლი აქვთ e/m ფარდობა. მართლაც, განვიხილოთ ორი ნაწილაკის სისტემა, მუხტები და მასები ამ ნაწილაკებისა შესაბამისად იყოს e_1, e_2 და m_1, m_2. მაშინ სისტემის დიპოლმომენტი იქნება $\mathbf{D}=e_1\mathbf{r}_1+e_2\mathbf{r}_2$ ან ინერციის ცენტრის სისტემაში

$$D=\frac{e_1m_2-e_2m_1}{m_1+m_2}\mathbf{r}=\frac{m_1m_2}{m_1+m_2}\left\{\frac{e_1}{m_1}-\frac{e_2}{m_2}\right\}\mathbf{r}, \qquad (86{,}29)$$

სადაც $\mathbf{r}$ ფარდობითი რადიუსვექტორია $\mathbf{r}=\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2$. სისტემის დიპოლმომენტი მართლაც ნულია, როცა $e_1/m_1=e_2/m_2$; ასეთ შემთხვევაში მნიშვნელოვანი იქნება $E2$ გადასვლები.

ატომის სიცოცხლის ხანგრძლივობა. ერთ წამში გადასვლის ალბათობის

შებრუნებულ სიდიდეს აგზნებული ატომის სიცოცხლის ხანგრძლივობას უწოდებენ

$$\tau_{mn} = \frac{1}{w_{mn}} \tag{86,30}$$

მართლაც, თუ დროის t მომენტისათვის გვაქვს N_m ატომი, რომლებიც იმყოფებიან აგზნებულ მდგომარეობაში E_m ენერგიით, მაშინ E_n მდგომარეობაში გადასულ ატომთა საშუალო რიცხვი dt დროში იქნება

$$dN_m(t) = -w_{mn} N_m(t)\, dt, \tag{86,31}$$

საიდანაც

$$N_m(t) = N_m(0) e^{-w_{mn} t} = N_m(0)\, e^{-t/\tau_{mn}}. \tag{86,32}$$

ცხადია, ატომის სიცოცხლის საშუალო ხანგრძლივობისათვის შეგვიძლია დავწეროთ

$$t_{\text{საშ.}} = \frac{\int t dN_m}{\int dN_m} = \frac{\int\limits_0^\infty t e^{-t/\tau_{mn}}\, dt}{\int\limits_0^\infty e^{-t/\tau_{mn}} dt} = \tau_{mn}. \tag{86,33}$$

ამგვარად, τ_{mn} ყოფილა ატომის სიცოცხლის საშუალო ხანგრძლივობა აგზნებულ E_m მდგომარეობაში. უფრო ხშირად შემოჰყავთ სიცოცხლის ნახევარპერიოდი T, რომელიც განსაზღვრავს იმ დროს, რომლის განმავლობაში ატომების ნახევარი ნორმალურ E_n მდგომარეობაში გადადის, ე. ი.

$$\frac{N_m(t)}{N_m(0)} = \frac{1}{2} = e^{-T/\tau_{mn}}, \tag{86,34}$$

საიდანაც $T = \ln 2\ \tau_{mn} = t_{\text{საშ.}} \ln 2$.

§ 87. შერჩევის წესები წყალბადისებური ატომისათვის

წინა პარაგრაფში აღნიშნული იყო, რომ როდესაც გვაქვს დიპოლური გადასვლა, მაშინ იგი გაცილებით საალბათოა, ვიდრე სხვა გადასვლები, მაგრამ ძალიან ხშირად $E1$ გადასვლები, როგორც ამბობენ „აკრძალულია".

განვიხილოთ წყალბადისებური ატომების გამოსხივება. როგორც ვიცით, წყალბადისებური ატომები ხასიათდება ტალღური ფუნქციით

$$\psi_{nlm}(r, \theta, \varphi) = R_{nl}(r)\, Y_{lm}(\theta, \varphi). \tag{87,1}$$

საჭიროა ამ ფუნქციით გამოითვალოს $E1$, $E2$, $M1$,... და ა. შ. გადასვლის მატრიცული ელემენტები. თუ აღმოჩნდა, რომ კვანტური რიცხვების გარკვეული მნიშვნელობებისათვის მატრიცული ელემენტი ნულის ტოლია, მაშინ სათანადო გადასვლა „აკრძალული" იქნება.

შერჩევის წესები დიპოლური გადასვლებისათვის. (86,12) ფორმულის თანახმად $E1$ გადასვლის ალბათობა ნულის ტოლი იქნება მაშინ, როცა ნულია დიპოლმომენტის მატრიცული ელემენტი, ე. ი. $\mathbf{d}_{mn} = -e\mathbf{r}_{mn} = 0$. ამგვარად, საჭიროა გაირკვეს, რა პირობებში ხდება ნულის ტოლი კოორდინატების მატრიცული ელემენტები: x_{mn}, y_{mn}, z_{mn}. გამოთვლების თვალსაზრისით უფრო ხელსაყრელია გამოვარკვიოთ როდის ხდება ნული

$$\xi_{\pm} = x \pm iy = r \sin\theta e^{\pm i\varphi}, \quad z = r\cos\theta \tag{87,2}$$

კომბინაციები. თუ ვიპოვით $\xi_{\pm}$ და z-ის მატრიცულ ელემენტებს, მაშინ ადვილად ვიპოვით x, y, z მატრიცულ ელემენტებსაც.

განვიხილოთ მატრიცული ელემენტები $\xi_{\pm}$ და z-სიდიდეებიდან. მატრიცული ელემენტის განმარტებით ადვილად დავწერთ

$$\langle n'l'm' | \xi_{\pm} | nlm \rangle = \int_0^{\infty}\int_0^{\pi}\int_0^{2\pi} \psi^*_{n'l'm'}(r,\theta,\varphi)\, r\sin\theta e^{\pm i\varphi}\psi_{nlm}(r,\theta,\varphi) r^2 dr d\Omega, \tag{87,3}$$

$$\langle n'l'm' | z | nlm \rangle = \int_0^{\infty}\int_0^{\pi}\int_0^{2\pi} \psi^*_{n'l'm'}(r,\theta,\varphi)\, r\cos\theta\, \psi_{nlm}(r,\theta,\varphi) r^2 dr d\Omega. \tag{87,4}$$

ჯერ გამოვთვალოთ $\xi_{\pm}$-ს მატრიცული ელემენტი. ამისათვის შევიტანოთ ტალღური ფუნქციის მნიშვნელობა (87, 3) ფორმულაში; გვექნება

$$\langle n'l'm' | \xi_{\pm} | nlm \rangle = \int_0^{\infty} R^*_{n'l'}(r) r R_{nl}(r) r^2 dr.$$

$$\int_0^{\pi}\int_0^{2\pi} Y^*_{l'm'}(\theta,\varphi)\sin\theta e^{\pm i\varphi} Y_{lm}(\theta,\varphi)\, d\Omega, \tag{87,5}$$

რადიალური ინტეგრალი წარმოადგენს r-ის მატრიცულ ელემენტს, კუთხეებით ინტეგრალში კი გავითვალისწინოთ (33,30) რეკურენტული ფორმულა; გვექნება

$$\langle n'l'm' | \xi_{\pm} | nlm \rangle = \langle n'l' | r | nl \rangle \int_0^{\pi}\int_0^{2\pi} Y^*_{l'm'}(\theta,\varphi).$$

$$\left\{ \pm \sqrt{\frac{(l\pm m+1)(l\pm m+2)}{(2l+1)(2l+3)}} Y_{l+1,\, m\pm 1} - \right.$$

$$\left. - \sqrt{\frac{(l\mp m)(l\mp m-1)}{(2l-1)(2l+1)}} Y_{l-1, m\pm 1} \right\} d\Omega. \tag{87,6}$$

სფერული ფუნქციები ორთო-ნორმირებული ფუნქციებია, ამიტომ შეგვიძლია დავწეროთ

$$\langle n'l'm' | \xi_{\pm} | nlm \rangle = \langle n'l' | r | nl \rangle \left\{ \pm \sqrt{\frac{(l\pm m+1)(l\pm m+2)}{(2l+1)(2l+3)}} \delta_{l'l+1}\delta_{m'm\pm 1} - \right.$$

$$\left. - \sqrt{\frac{(l\mp m)(l\mp m-1)}{(2l-1)(2l+1)}} \delta_{l'l-1}\delta_{m'm\pm 1} \right\}, \tag{87,7}$$

საიდანაც ჩვენ ვხედავთ, რომ მთავარ კვანტურ რიცხვს არავითარი პირობა არ ედება, l და m კვანტური რიცხვების მნიშვნელობანი კი შეზღუდულია. კერძოდ, $\xi_{\pm}$ მატრიცული ელემენტი ნულისაგან განსხვავდება მხოლოდ და მხოლოდ მაშინ, როცა საწყისი და საბოლოო მდგომარეობის აზიმუტალური და მაგნიტური კვანტური რიცხვები ერთმანეთისაგან ერთით განსხვავდებიან, ე. ი.

$$l' = l \pm 1, \tag{87,8}$$

$$m' = m \pm 1. \tag{87,9}$$

ახლა ვიპოვოთ z-ის მატრიცული ელემენტი, გვაქვნება.

$$\langle n'l'm'|z|nlm\rangle = \langle n'l' \mid r \mid nl\rangle \int_0^{\pi}\int_0^{2\pi} Y^*_{l'm'}(\theta, \varphi)\cos\theta\, Y_{lm}(\theta, \varphi)\, d\Omega. \qquad (87,10)$$

თუ გამოვიყენებთ (33,29) რეკურენტულ ფორმულას, მივიღებთ:

$$\langle n'l'm' \mid z \mid nlm\rangle = \langle n'l' \mid r \mid nl\rangle \int_0^{\pi}\int_0^{2\pi} Y^*_{l'm'}(\theta, \varphi),$$

$$\left\{\sqrt{\frac{(l-m+1)(l+m+1)}{(2l+1)(2l+3)}}\, Y_{l+1,m}(\theta, \varphi) + \right.$$

$$\left. + \sqrt{\frac{(l-m)(l+m)}{(2l-1)(2l+1)}}\, Y_{l-1,m}(\theta, \varphi)\right\} d\Omega. \qquad (87,11)$$

სფერული ფუნქციების ორთო-ნორმირების ძალით, ეს მატრიცული ელემენტი ნულისაგან განსხვავდება მხოლოდ მაშინ, როცა დაცულია პირობები:

$$l' = l \pm 1, \qquad (87,12)$$

$$m' = m. \qquad (87,13)$$

ამდაგვარად, დიპოლური გადასვლისათვის გვექნება შემდეგი შერჩევის წესები:

$$\Delta l = l' - l = \pm 1, \quad \Delta m = m' - m = 0, \pm 1. \qquad (87,14)$$

თუ ეს პირობები დაცული არ არის, მაშინ დიპოლური გადასვლა აკრძალულია, რაც შეეხება მთავარ კვანტურ რიცხვს, როგორც ალვნიშნეთ, მისთვის შერჩევის წესი არა გვაქვს, იგი შეიძლება შეიცვალოს ნებისმიერი სიდიდით. ამგვარად, მივიღებთ, რომ

$$\langle n'l \pm 1 \;\; m \pm 1 \mid x + iy \mid nlm\rangle \neq 0, \qquad (87,15)$$

$$\langle n'l \pm 1 \;\; m \mid z \mid nlm \mid \neq 0. \qquad (87,16)$$

ზუსტად იგივე შერჩევის წესები გვექნება თვით x, y და z-ის მატრიცული ელემენტებისათვისაც.

გადასვლა არ შეიძლება მოხდეს ისეთ ენერგეტულ დონეებს შორის, რომელთაც აქვთ ტოლი მომენტები $l' = l$ $(\Delta l = 0)$. ეს გარემოება კარგად ჩანს სხვა მოსაზრებითაც.

განვიხილოთ დიპოლმომენტის მატრიცული ელემენტი

$$\langle n'l'm' \mid \mathbf{d} \mid nlm\rangle = -e \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*_{n'l'm'}\, \mathbf{r}\, \psi_{nlm}\, d\mathbf{r}. \qquad (87,17)$$

წყალბადისებური ატომის ლუწობა განისაზღვრება $(-1)^l$-ით და, როცა $l' = l$ ტალღური ფუნქციების ლუწობა მატრიცულ ელემენტში იქნება $(-1)^{l+l'} = (-1)^{2l} = 1$. რადგან $\mathbf{r}$ კენტი ფუნქციაა, $E1$ გადასვლის მატრიცული ელემენტი ნულის ტოლი იქნება. ინტეგრალი რომ ნული არ იყოს, საჭიროა l' განსხვავდებოდეს l-ისაგან კენტი რიცხვით.

შერჩევის წესები კვადრუპოლური გადასვლისათვის. დიპოლური გადასვლებისათვის გამოყვანილი შერჩევის წესების გამოყენებით ადვილად დავადგენთ შერჩევის წესებს კვადრუპოლური გადასვლებისათვისაც. მართლაც, $E2$ გადასვლის ალბათობის ფორმულაში მონაწილეობს კოორდინატის კვადრატის მატრიცული

ელემენტი. განვიხილოთ, მაგალითად, $(x^2)_{l,l}$ მატრიცული ელემენტი და გამოვიყვანოთ მატრიცათა გამრავლების წესი

$$\langle l' \mid x^2 \mid l\rangle = \sum_{l''} \langle l' \mid x \mid l''\rangle \langle l'' \mid x \mid l\rangle. \qquad (87{,}18)$$

თუ თითოეული მატრიცისათვის გამოვიყენებთ შერჩევის წესს, დავინახავთ, რომ ჯამი ნულისაგან განსხვავდება მაშინ, როცა ერთდროულად დაცულია ორი პირობა $l''=l'\pm 1$ და $l''=l\pm 1$, საიდანაც გამომდინარეობს, რომ $l'=l$, $l\pm 2$. იგივე წესებს მივიღებთ კვადრუპოლური ტენზორის სხვა კომპონენტებისათვისაც. ადვილად დავრწმუნდებით, რომ კვადრუპოლური გადასვლების დროს მაგნიტური კვანტური რიცხვის ცვლილება $\Delta m=0, \pm 1, \pm 2$; ეს უკანასკნელი გამომდინარეობს მომენტის შენახვის კანონიდან. მაშასადამე, $E2$ გადასვლისათვის გვაქვს შემდეგი შერჩევის წესები:

$$\Delta l=0,\ \pm 2,\ \Delta m=0,\ \pm 1,\ \pm 2, \qquad (87{,}19)$$

შერჩევის წესები მაგნიტური დიპოლური გადასვლებისათვის. ასევე მარტივად დავადგენთ შერჩევის წესებს მაგნიტური დიპოლური გადასვლებისათვის. $M1$ გადასვლის დროს მატრიცული ელემენტი აიღება $([\varkappa\times\nu]\mathbf{M})$ გამოსახულებიდან. $[\varkappa\times\nu]$ მუდმივი ვექტორია, იგი შეგვიძლია დავამთხვიოთ რომელიმე ღერძს. მაშინ ჩვენ საქმე გვექნება $\hat{M}_l$-ს მატრიცულ ელემენტთან. თავის მხრივ $\hat{M}_l$ მატრიცული ელემენტი დაკავშირებულია ორბიტალური $\hat{l}_l$-მომენტის მატრიცულ ელემენტთან, რამდენადაც $\hat{M}_l = -\frac{e}{2\mu c}\hat{l}_l$; ამგვარად,

$$\langle l'm' \mid \hat{M}_l \mid lm\rangle = -\frac{e}{2\mu c}\langle l'm' \mid \hat{l}_l \mid lm\rangle. \qquad (87{,}20)$$

$\hat{l}_x$, $\hat{l}_y$, $\hat{l}_z$ მდგენელების მატრიცული ელემენტები, როგორც ეს ვაჩვენეთ § 48-ში, დიაგონალურია ორბიტალური კვანტური რიცხვის მიმართ და ნულისაგან განსხვავდებიან $\Delta m=0, \pm 1$-სათვის. ასე რომ, გადასვლებისათვის გვექნება შემდეგი შერჩევის წესები

$$\Delta l=0,\ \Delta m=0,\ \pm 1. \qquad (87{,}21)$$

გამოსხივებული კვანტის მომენტი და ლუწობა. შერჩევის წესებს თუ დავაკვირდებით, მაშინ ადვილად დავინახავთ, რომ ერთიდან მეორე მდგომარეობაში გადასვლის დროს ატომი კარგავს გარკვეულ მომენტს, ამიტომ მომენტის შენახვის კანონის თანახმად დაკარგული მომენტი უნდა წაიღოს გამოსხივებულმა კვანტმა. რადგან ატომის ლუწობა $(-1)^l$-ის ტოლია, ამიტომ გამოსხივების დროს ადვილი ექნება ატომის ლუწობის ცვლილებასაც. რამდენადაც იზოლირებული სისტემის (ატომი პლუს გამოსხივებული კვანტი) ლუწობა ინახება, ამიტომ გამოსხივებულმა კვანტმა უნდა წაიღოს ლუწობაც.

ჯერ განვიხილოთ დიპოლური კვანტის გამოსხივება. რადგან $E1$ გადასვლის დროს $\Delta m=0, \pm 1$, ამიტომ მომენტის პროექციის შენახვის გამო დიპოლურ კვანტს ექნება მომენტი, რომლის პროექცია უნდა იყოს $0, \pm 1$. ასეთი პროექცია კი აქვს $\Lambda=1$ მომენტს. მაშასადამე, დიპოლური კვანტის მომენტი ყოფილა $\Lambda=1$. დიპოლური გადასვლის დროს ატომის მომენტი ერთით იცვლება, ე. ი. ადგილი ექნება ატომის ლუწობის შეცვლას საწინააღმდეგოთი; სისტემის საერთო ლუწობა რომ უცვლელი დარჩეს, საჭიროა $E1$ კვანტს ჰქონდეს უარყოფითი

ლუწობა. ამგვარად, დიპოლური კვანტის მომენტი ერთის ტოლია და აქვს უარყოფითი ლუწობა. $E1$ კვანტს რომ უარყოფითი ლუწობა აქვს, ეს გასაგებია, რადგან დიპოლმომენტი პოლარული ვექტორია, რომლის კომპონენტები ინვერსიის დროს ნიშანს იცვლიან. $E2$ გადასვლების დროს ატომის ლუწობა არ შეიცვლება, რამდენადაც ამ შემთხვევაში $\Delta l=0,\ \pm 2$. ამის გამო $E2$ კვანტის ლუწობა დადებითია. რადგან $E2$ გადასვლის დროს $\Delta m=0,\ \pm 1,\ \pm 2$, ამიტომ მომენტის პროექციის შენახვის გამო ასეთივე მდგენელები ექნება ელექტრულ კვადრუპოლური კვანტის მომენტსაც; მაშასადამე, $E2$ კვანტის მომენტი $\Lambda=2$ და აქვს დადებითი ლუწობა.

ცხადია, $M1$ კვანტის ლუწობაც დადებითი იქნება, რადგან ამ შემთხვევაში $\Delta l=0$. ეს ასეც უნდა ყოფილიყო, რადგან $M1$ მომენტი პროპორციულია ორბიტალური მომენტისა, რომლის კომპონენტები ინვერსიის დროს ნიშანს არ იცვლიან. რაც შეეხება $M1$ კვანტის მომენტს, რადგან მაგნიტური დიპოლური გადასვლისათვის $\Delta m=0,\ \pm 1$, ამიტომ მომენტი ერთის ტოლი იქნება $\Lambda=1$. სრულად ანალოგიურად ვაჩვენებთ, რომ $M2$ კვანტის ლუწობა უარყოფითია, მომენტი კი ორის ტოლია $\Lambda=2$. როგორც ვხედავთ, ელექტრული და მაგნიტური მულტიპოლური კვანტების ლუწობანი ერთმანეთის საწინააღმდეგოა. ამასთან, განსხვავებით ჩვეულებრივი ნაწილაკებისაგან კვანტის მომენტის მინიმალური მნიშვნელობა ერთის ტოლია; კვანტის მომენტი არ შეიძლება ნულის ტოლი იყოს. ამის გამო ჩვენს მიერ განხილული ყველა გადასვლის შემთხვევაში აკრძალული იქნება $l=0$ მდგომარეობიდან $l'=0$ მდგომარეობაში გადასვლა. ასეთი გადასვლის დროს უნდა გამოსხივებულიყო კვანტი $\Lambda=0$ მომენტით, ასეთი კვანტი კი არ არსებობს. სინამდვილეში $0\to 0$ გადასვლა აკრძალული არ არის იმის გამო, რომ ელექტრონს გააჩნია ნახევრის ტოლი სპინი. მართლაც, $l'=0$ მდგომარეობიდან $l=0$ მდგომარეობაში გადასვლის დროს შეიძლება სინათლის კვანტის გამოსხივება, რამდენადაც ორი ნახევრის ტოლი სპინის შეკრებით ნულის გარდა მიიღება ერთის ტოლი მომენტის მნიშვნელობაც, რაც უზრუნველყოფს ერთის ტოლი მომენტის მქონე კვანტის გამოსხივებას. აღვნიშნოთ, რომ ზემოთ მიღებული შერჩევის წესები ძალაშია მაშინაც, როცა ხდება სინათლის არა გამოსხივება, არამედ შთანთქმა.

დასკვნულ, ამ პარაგრაფში მიღებული შედეგები მოვიყვანოთ შემდეგი ცხრილის სახით.

ცხრილი 1

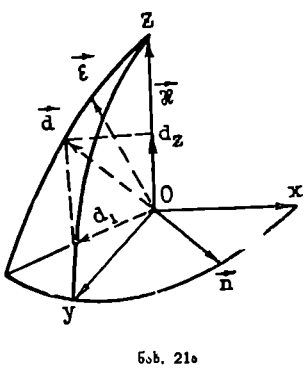
გადასვლის სახე	კვანტის მომენტი λ	კვანტის ლუწობა l	შერჩევის წესები ორბიტალური კვანტური რიცხვისათვის $\Delta l=l'-l$	შერჩევის წესები მაგნიტური კვანტური რიცხვისათვის $\Delta m=m'-m$	იცვლება თუ არა ატომის საწყისი ლუწობა ასეთი გადასვლების დროს
$E1$	1	-1	$\Delta l=\pm 1$	$\Delta m=0,\ \pm 1$	კი
$E2$	2	$+1$	$\Delta l=0,\ \pm 2$	$\Delta m=0,\ \pm 1,\ \pm 2$	არა
$M1$	1	$+1$	$\Delta l=0$	$\Delta m=0,\ \pm 1$	არა

§ 66. გამოსხივებული სინათლის პოლარიზაცია

განვიხილოთ გამოსხივებული სინათლის პოლარიზაციის საკითხი. სიმარტივის მიზნით შევზღუდოთ მხოლოდ დიპოლური გამოსხივების შემთხვევაზე. როგორც ვიცით, სინათლის პოლარიზაციას განსაზღვრავს ელექტრული დაძაბულობის ვექტორის მდებარეობა სივრცეში. ცნობილია აგრეთვე, რომ დიპოლმომენტი ყოველთვის ძევს იმ სიბრტყეში, რომელშიც—ელექტრული დაძაბულობის ვექტორი;

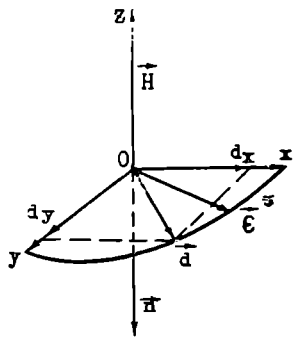
შერჩევის წესების პოლარიზაციასთან დაკავშირების მიზნით, რათა აზრი ჰქონდეს მომენტის პროექციების განხილვას, ჩვენ მოგვიხდება გამოყოფილი მიმართულების შერჩევა. ამისათვის ვიგულისხმოთ, რომ ატომი მოთავსებულია სუსტ მაგნიტურ ველში. ველი იმდენად სუსტი უნდა იყოს, რომ მან ვერ შეძლოს ატომის დეფორმირება. ეს უკანასკნელი იმიტომაა საჭირო, რომ შერჩევის წესები, რომლებიც მიღებული გვაქვს თავისუფალი ატომებისათვის, ძალაში დარჩნენ ველის შემთხვევაშიც. z ღერძი დავამთხვიოთ მაგნიტური ველის მიმართულებას.

ვთქვათ, გამოსხივებას ვაკვირდებით მაგნიტური ველის დაძაბულობის მართობული მიმართულებით. რადგან გამოსხივებული სინათლის გავრცელების მიმარ-



ნახ. 21ა

სინათლე პოლარიზებულია მაგნიტური ველის დაძაბულობის $\vec{\mathcal{H}}$-ვექტორის მართობულ ან ამ ვექტორზე გამავალ სიბრტყეში. შერჩევის წესებია $\Delta m=0, \pm 1$. n-არის გამოსხივებული სინათლის მიმართულება.



ნახ. 21ბ

პოლარიზაციის სიბრტყე მართობია გარეშე მაგნიტური ველის მიმართულების. შერჩევის წესებია $\Delta m=\pm 1$. n არის გამოსხივებული სინათლის მიმართულება.

თულება პერპენდიკულარულია ელექტრული დაძაბულობის ვექტორისა, ელექტრული დაძაბულობა განსაზღვრული იქნება დიპოლმომენტის იმ პროექციებით, რომელთაგან ერთი ემთხვევა z-ღერძს, ხოლო მეორე მისი მართობია. დიპოლმომენტის სამივე პროექცია ნულისაგან განსხვავებული იქნება, ამიტომ გვექნება შერჩევის წესები

$$\Delta l=\pm 1 \text{ და } \Delta m=0, \pm 1.$$

რადგან ნებისმიერი პოლარიზაცია გამოსხივების გავრცელების მოცემული მიმართულებისათვის შეგვიძლია წარმოვიდგინოთ როგორც ორი ურთიერთმართობული პოლარიზაციის ჯამი, ამიტომ განხილულ შემთხვევაში გამოსხივებული სინათლე პოლარიზებული იქნება მაგნიტური ველის დაძაბულობის ვექტორის მართობულ ან ამ ვექტორზე გამავალ სიბრტყეში (ნახ. 21ა).

თუ გამოსხივებას დავაკვირდებით მაგნიტური ველის დაძაბულობის მიმართულებით, მაშინ ელექტრული დაძაბულობის ვექტორი ძევს $x0y$ სიბრტყეში და სინათლე პოლარიზებული იქნება ველის მართობულად. დიპოლმომენტიც მოთავსებული იქნება $x0y$ სიბრტყეში, ამიტომ მას z-მდგენელი არ ექნება, დიპოლმომენტის x და y მდგენელებისათვის კი გვაქვს შერჩევის წესი $\Delta m=\pm 1$ (ნახ. 21 ბ).

როცა $m'=m\pm1$, მაშინ (87,16) ფორმულის თანახმად დიპოლმომენტის z-მდგენელის მატრიცული ელემენტი ნულია. $m'=m+1$ შემთხვევაში ნულისაგან განსხვავებული იქნება $(x+iy)$-ის. ხოლო $m'=m-1$ შემთხვევაში $(x-iy)$-ის მატრიცული ელემენტები. თუ გავიხსენებთ, რომ $\pm i=e^{\pm i\pi/2}$, მაშინ x და y-ის მატრიცულ ელემენტებს შორის მივიღებთ კავშირს:

$$\langle nl'm+1\,|\,y\,|\,nlm\rangle=e^{-i\pi/2}\langle n'l'm'+1|x|nlm\rangle,\quad m'=m+1; \tag{88,1}$$

$$\langle nl'm-1\,|\,y\,|\,nlm\rangle=e^{i\pi/2}\langle n'l'm-1|x|nlm\rangle.\quad m'=m-1, \tag{88,2}$$

x და y მატრიცულ ელემენტებს შორის გვაქვს $\frac{\pi}{2}$-ის ტოლი მუდმივი ფაზათა სხვაობა, მათი აბსოლუტური მნიშვნელობანი კი ერთმანეთის ტოლია. ამიტომ ტალღები, რომლებიც ვრცელდება z-ღერძის გასწვრივ, წრიულად პოლარიზებულია. ამასთან $m'=m+1$ შეესაბამება მარჯვენა პოლარიზაციას, $m'=m-1$ კი — მარცხენას.

§ 89. ფოტოეფექტი

განვიხილოთ ფოტოეფექტის მოვლენა ატომებზე როგორც მარტივი მაგალითი გადასვლის ალბათობის ფორმულის გამოყენებისა. როგორც ცნობილია, ეს მოვლენა იმაში მდგომარეობს, რომ სინათლის კვანტების ატომებზე მოქმედებით ამ უკანასკნელიდან ამოიტყორცნება ელექტრონები. შეიძლება ვთქვათ, რომ სინათლის მოქმედებით ელექტრონი წყვეტილი სპექტრის მდგომარეობიდან ($E<0$) გადადის უწყვეტ სპექტრში ($E>0$). სიმარტივის მიზნით ჩვენ განვიხილავთ იმ შემთხვევას, როცა 1s ელექტრონის ამოტყორცნა ხდება ნორმალურ მდგომარეობაში მყოფი წყალბადისებური ატომიდან. საბოლოო მდგომარეობაში კი ელექტრონს განვიხილავთ როგორც თავისუფალს: ამიტომ მისთვის ავიღებთ ბრტყელ ტალღას. სინამდვილეში საბოლოო მდგომარეობაში ელექტრონი თავისუფალი არ არის, რადგან ადგილი ექნება კულონურ ურთიერთქმედებას განთავისუფლებულ ელექტრონსა და დარჩენილ დადებით იონს შორის. ამიტომ, ზუსტად რომ ვიმსჯელოთ, ელექტრონისათვის საბოლოო მდგომარეობაში უნდა ავიღოთ კულონური ურთიერთქმედების შემთხვევაში დაწერილი შრედინგერის განტოლების ამოხსნა უწყვეტი სპექტრისათვის ($E>0$). მაგრამ ფოტოეფექტის ზოგადი ფაქტების დასადგენად საკმარისია საბოლოო მდგომარეობაში ელექტრონი განვიხილოთ როგორც თავისუფალი ნაწილაკი. ასეთი მიახლოება მით უფრო კარგი იქნება, რაც მეტი იქნება ამოტყორცნილი ელექტრონის ენერგია.

ფოტოეფექტისათვის აინშტაინის ფორმულას, როგორც ვიცით, ასეთი სახე

$$\hbar\omega-I_n=\frac{p^2}{2\mu}, \tag{89,1}$$

სადაც I_n არის იონიზაციის ენერგია n მდგომარეობიდან, ე. ი. ის მინიმალური ენერგია, რომელიც საჭიროა ელექტრონის წყვეტილი სპექტრიდან უწყვეტში გადასაყვანად. ნორმალური მდგომარეობისათვის იონიზაციის ენერგია ტოლი იქნება გამოსახულების

$$I_1=\frac{\mathcal{Z}^2e^4\mu}{2\hbar^2}=\frac{\mathcal{Z}^2}{2\mu}\left(\frac{\hbar}{a_0}\right)^2 \tag{89,2}$$

სადაც a_0 არის ბორის პირველი ორბიტის რადიუსი. (89,1) ფორმულაში p ამოტყორცნილი ელექტრონის იმპულსია, $\hbar\omega$ კი—დაცემული კვანტის ენერგია. ცხადია, (89,1) ფორმულა ენერგიის შენახვის კანონს გამოხატავს. იგი ამოტყორცნილი ელექტრონის სიჩქარეს აკავშირებს დაცემული კვანტის სიხშირესთან.

ჩვენი მიზანია ვაჩვენოთ, თუ როგორი ალბათობით ხდება ფოტოეფექტის მოვლენა. ამ მიზნით საჭიროა გამოვიყენოთ (85,14) ფორმულა

$$dw_{if}=\frac{e^2p\tau}{3\pi\mu\omega\hbar^3}\left|\int\limits_{-\infty}^{+\infty}\psi_f^*\,e^{ikr}\,(\nu\hat{\mathrm{p}})\,\psi_i\,d\mathrm{r}\right|^2 d\Omega_{\mathrm{p}}. \tag{89,3}$$

ეს ფორმულა გამოხატავს გადასვლის ალბათობას ერთ სეკუნდში სინათლის კვანტის შთანთქმის შედეგად ატომიდან ელექტრონის ამოტყორცნისა $d\Omega_{\mathrm{p}}$ სხეულოვან კუთხეში. ექსპერიმენტზე უფრო ხელსაყრელია აღნიშნული პროცესის ეფექტური დიფერენციალური განივკვეთის გაზომვა, ამიტომ (89,3) ფორმულის ნაცვლად შემოვიღოთ განივკვეთი. დიფერენციალური განივკვეთი განისაზღვრება როგორც პროცესის ალბათობა ერთ სეკუნდში, გაყოფილი დაცემულ ნაწილაკთა ნაკადზე, ე. ი.

$$d\sigma_{if}=\frac{dw_{if}}{J}\,. \tag{89,4}$$

ჩვენს შემთხვევაში J არის ფოტონთა ნაკადი. ცხადია, რომ ეფექტური განივკვეთი სმ² განზომილებისაა. (85,26) და (85,9) ფორმულების თანახმად, ვექტორპოტენციალის ჩვენს მიერ შერჩეული ნორმირების შემთხვევაში, ფოტონთა საშუალო ნაკადი $J=c$-ს ტოლი იქნება. ასე რომ, ფოტოეფექტის ეფექტური დიფერენციალური განივკვეთისათვის გვექნება შემდეგი ფორმულა:

$$d\sigma_{if}=\frac{e^2p\tau}{2\pi\mu\omega c\hbar^3}\left|\int\limits_{-\infty}^{+\infty}\psi_f^*e^{ikr}\,(\nu\hat{\mathrm{p}})\,\psi_i\,d\mathrm{r}\right|^2 d\Omega_{\mathrm{p}}. \tag{89,5}$$

ფოტოეფექტის განივკვეთი შეგვიძლია ვიპოვოთ ზოგად შემთხვევაშიაც, მაგრამ სიმარტივის მიზნით შემოვისაზღვროთ შემთხვევით, როცა დაცემული სინათლის ტალღის სიგრძე $\lambda\gg a_0$, სადაც a_0 ატომის ბორის პირველი ორბიტის რადიუსია. ამ შემთხვევაში ატომის შიგნით დაგვიანება შეგვიძლია უგულებელვყოთ და e^{ikr} სიდიდე ერთიანით შევცვალოთ; გვექნება

$$d\sigma_{if}=\frac{e^2p\tau}{2\pi\mu\omega c\hbar^3}\left|\int\limits_{-\infty}^{+\infty}\psi_f^*\,(\nu\hat{\mathrm{p}})\,\psi_i d\mathrm{r}\right|^2 d\Omega_{\mathrm{p}}. \tag{89,6}$$

როგორც აღვნიშნეთ, ჩვენ ვიხილავთ ელექტრონის იონიზაციას $1s$ ($n=1$, $l=0$) მდგომარეობიდან, ამიტომ საწყისი მდგომარეობის ფუნქციას ექნება სახე

$$\psi_i(\mathrm{r})=\left(\frac{Z^3}{\pi a_0^3}\right)^{1/2}e^{-\frac{Zr}{a_0}}, \tag{89,7}$$

რომელიც ნორმირებულია ერთზე. საბოლოო მდგომარეობაში გვაქვს ამოტყორცნილი ელექტრონი და ატომის ბირთვი დადებითი სრული ენერგიით. ჩავთვალოთ, რომ ატომბირთვი უძრავია. მაშინ საბოლოო მდგომარეობის ფუნქციის საპოვნელად საჭიროა ამოიხსნას შრედინგერის განტოლება ელექტრონისათვის, რომელიც ატომბირთვის კულონურ ველში მოძრაობს დადებითი ენერგიის შეხთხვევაში, მაგრამ ჩვენ ამოცანას გავამარტივებთ და ნაცვლად ამ ფუნქციისა ელექტრონისა-

თვის საბოლოო მდგომარეობაში ავიღებთ ბრტყელ ტალღას, ე. ი. ჩვენ ჩავთვლით რომ ამოტყორცნილი ელექტრონი თავისუფლად მოძრაობს ურთიერთქმედების გარეშე. გასავებია, რომ ასეთი მიახლოვება მით უკეთესი იქნება, რაც უფრო მეტი იქნება ელექტრონის ენერგია. ამოტყორცნილი ელექტრონის ენერგია კი, ცხადია, დამოკიდებული იქნება დაცემული სინათლის კვანტის ენერგიაზე. კერძოდ, როცა დაცული იქნება პირობა

$$\frac{\mu v^2}{2} \gg I_1 = \frac{Z^2 e^4 \mu}{2\hbar^2} \tag{89,8}$$

ან

$$\frac{Ze^2}{\hbar v} \ll 1, \tag{89,9}$$

მაშინ იონიზირებული ელექტრონისათვის შეგვიძლია დავწეროთ შემდეგი ტალღური ფუნქცია:

$$\psi_f(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{\tau}} e^{\frac{i}{\hbar}\mathbf{pr}}, \tag{89,10}$$

ამასთან, ბრტყელი ტალღა ნორმირებულია τ-მოცულობაზე. განივკვეთში შემავალი ინტეგრალის გამოთვლის მიზნით გავიხსენოთ, რომ $\hat{\mathbf{p}}$ ერმიტული ოპერატორია და ადგილი ექნება ტოლობას

$$(\mathbf{v}\hat{\mathbf{p}})\,\psi_f^*(\mathbf{r}) = (\mathbf{vp})\,\psi_f^*(\mathbf{r}); \tag{89,11}$$

შედეგად მივიღებთ

$$d\sigma_{if} = \frac{e^2 p\,(\mathbf{vp})^2}{2\pi\mu\omega c\hbar^3} \left| \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_i(\mathbf{r})\, e^{-\frac{i}{\hbar}\mathbf{pr}}\, d\mathbf{r} \right|^2 d\Omega_{\mathbf{p}}. \tag{89,12}$$

მეორე მხრივ,

$$a(\mathbf{p}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_i(\mathbf{r})\, e^{-\frac{i}{\hbar}\mathbf{pr}}\, d\mathbf{r} \tag{89,13}$$

წარმოვადგენს წყალბადისებური ატომის ნორმალური მდგომარეობის ტალღურ ფუნქციას იმპულსურ წარმოდგენაში, ამიტომ

$$d\sigma_{if} = \frac{4\pi^2 e^2 p\,(\mathbf{vp})^2}{\mu\omega c} \mid a(\mathbf{p}) \mid^2 d\Omega_{\mathbf{p}}. \tag{89,14}$$

ვიპოვოთ $a(\mathbf{p})$ ფუნქცია. განმარტების ძალით

$$a(\mathbf{p}) = \frac{(Z^3/\pi a_0^3)^{1/2}}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int_0^{\infty} e^{-\frac{Z}{a_0}r}\, r^2\, dr \int_0^{\pi} e^{-\frac{i}{\hbar}pr\cos\theta} \sin\theta\, d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi. \tag{89,15}$$

კუთხეებით ინტეგრაცია მოგვცემს

$$a(\mathbf{p}) = \frac{(Z^3/\pi a_0^3)^{1/2}}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \frac{4\pi\hbar}{p} \int_0^{\infty} e^{-\frac{Z}{a_0}r} \sin\left(\frac{pr}{\hbar}\right) r\,dr, \tag{89,16}$$

საიდანაც

$$a(p) = \left(\frac{Z^3}{\pi a_0^3}\right) \frac{8\pi(Z/a_0)}{(2\pi\hbar)^{3/2}\left(\frac{p^2}{\hbar^2} + \frac{Z^2}{a_0^2}\right)^2} \tag{89,17}$$

ეს გამოსახულება შევიტანოთ (89,14) ფორმულაში და მოვახდინოთ ინტეგრაცია კუთხეების მიხედვით. თუ პოლარიზაციის მიმართულებასა და ამოტყორცნილი ელექტრონის იმპულსის მიმართულებას შორის კუთხეს აღვნიშნავთ θ-თი, მაშინ $(\mathbf{vp}) = pv\cos\theta$ და, რადგან ინტეგრალი $d\Omega_p$-თი $\cos^2\theta$-დან ტოლია $4\pi/3$-ის, ამიტომ ინტეგრალური განივკვეთისათვის მივიღებთ ფორმულას

$$\sigma_{if} = \frac{128\pi}{3}\left(\frac{e^2}{\hbar c}\right)\left(\frac{\hbar}{\mu\omega}\right)\frac{(a_0 p/\hbar Z)^3}{[1+(a_0 p/\hbar Z)^2]^4}. \tag{89,18}$$

(89,1) და (89,2) ფორმულების თანახმად

$$\hbar\omega = I_1\left\{1+\left(\frac{a_0 p}{\hbar Z}\right)^2\right\}, \tag{89,19}$$

რომლის გათვალისწინებით ინტეგრალური განივკვეთისათვის საბოლოოდ გვექნება

$$\sigma_{if} = \frac{128\pi}{3}\left(\frac{e^2}{\hbar c}\right)\left(\frac{\hbar^2}{\mu I_1}\right)\frac{(\beta-1)^{3/2}}{\beta^5}, \tag{89,20}$$

სადაც

$$\beta = \frac{\hbar\omega}{I_1} \tag{89,21}$$

ადვილად ვიპოვით (89,20) გამოსახულების მაქსიმუმს β-ს მიმართ. სახელდობრ, σ_{if}-ს მაქსიმუმი აქვს მაშინ, როცა $\beta = 10/Z$, ე. ი. როცა დაცემული კვანტის ენერგია $\hbar\omega = 10I_1/Z$. ცხადია, რომ განივკვეთი ნულის ტოლია, როცა $\beta = 1$, ე. ი. როცა $\hbar\omega = I_1$. ამ ენერგიას უწოდებენ რეაქციის ზღურბლს. რეაქცია რომ მოხდეს, კვანტის ენერგია I_1-ზე მეტი უნდა იყოს. ადვილად დავინახავთ, რომ მაქსიმუმში ფოტოეფექტის განივკვეთი $\sigma_{if} = 0{,}084 a_0^2/Z^3$. კერძოდ, წყალბადის ატომისათვის გვექნება $\sigma_{if} = 2\cdot 10^{-18}$ სმ^2.

რადგან ჩვენი მიახლოება სამართლიანია (89,9) პირობით, ამიტომ $a_0 p/\hbar Z \gg 1$ და განივკვეთისათვის გვექნება

$$\sigma_{if} \simeq \frac{128\pi}{3}\,\frac{e^2 Z^5}{\mu\omega c (a_0 k)^5}, \tag{89,22}$$

სადაც k არის ტალღური რიცხვი.

რადგან თითოეული ელექტრონის ამოტყორცნისათვის საჭიროა თითო კვანტის შთანთქმა, ამიტომ ფოტოეფექტის დროს ამოტყორცნილ ელექტრონთა რიცხვი დამოკიდებული იქნება დაცემული სინათლის ინტენსივობაზე. რაც შეეხება ამოტყორცნილი ელექტრონების ენერგიას, იგი, როგორც (89,1) ფორმულიდან ჩანს, დამოკიდებულია დაცემული სინათლის სიხშირეზე.

ამოტყორცნილი ელექტრონების კუთხური განაწილება (89,14) ფორმულის თანახმად პროპორციული იქნება $\cos^2\theta$-სი, სადაც θ არის კუთხე სინათლის პოლარიზაციასა და ამოტყორცნილი ელექტრონის იმპულსის მიმართულებას შორის. საიდანაც ჩანს, რომ ელექტრონების ამოტყორცნა ყველაზე ალბათურია $\theta = 0$ მიმართულებით, ე. ი. სინათლის პოლარიზაციის მართობული მიმართულებით.

ექსპერიმენტში ჩვენ საქმე გვაქვს არა ერთ ატომთან, არამედ ნივთიერებასთან, რომელიც ატომთა დიდ რიცხვს შეიცავს. გამოვარკვიოთ, როგორ ხდება ამ შემთხვევაში ფოტოეფექტის შესწავლა. დავუშვათ, გვაქვს ნივთიერება, რომელიც შეიცავს წყალბადისებურ ატომებს და ვიგულისხმოთ, რომ ამ ნივთიერების ერთეუ-

ლოვანი მოცულობა შეიცავს ატომთა N რიცხვს. ფოტონთა რიცხვი, რომელიც ერთეულოვან მოცულობას ეცემა, იყოს n. ფოტონთა რიცხვი, რომელიც შთაინთქმება ნივთიერების dz მანძილის გავლისას, ტოლი იქნება

$$-dn = nN\sigma_{if}dz = n\delta dz, \tag{89,23}$$

საიდანაც

$$n(z) = n(0)\,e^{-\delta z}. \tag{89,24}$$

$\delta = N\sigma_{if}$ სიდიდეს ეწოდება აბსორბციის კოეფიციენტი. მისი გაზომვა განივკვეთის განსაზღვრის საშუალებას იძლევა.

§ 90. დისპერსიის კვანტური თეორია

დისპერსიის მოვლენა მდგომარეობს ატომებით სინათლის გაბნევაში, როდესაც სინათლე მოქმედებს ნივთიერებაზე, მაშინ შეიძლება ადგილი ჰქონდეს არა მხოლოდ შთანთქმას, არამედ გაფანტვასაც, რის შედეგადაც სინათლის კვანტი იცვლის როგორც მიმართულებას, ისე სიხშირეს.

დისპერსიის თეორიაში ერთ-ერთ მნიშვნელოვან ამოცანას წარმოადგენს გარემოს გარდატეხის მაჩვენებლის განსაზღვრა. ცდა გვიჩვენებს, რომ გარდატეხის მაჩვენებელი დამოკიდებულია სინათლის სიხშირეზე. ღსანიშნავია, რომ მაქსველის თეორიამ სრული კრახი განიცადა დისპერსიის მოვლენის ახსნის დროს. კლასიკურ ფიზიკაში საჭირო შეიქმნა ატომის დეტალური ელექტრონული თეორიის ჩამოყალიბება. მაგრამ ეს თეორია არ იყო მკაცრი, რამდენადაც ეყრდნობოდა ატომში ელექტრონზე მოქმედი დრეკადი ძალის არსებობას. სინამდვილეში კი ატომის შემადგენელ დამუხტულ ნაწილაკებს შორის მოქმედებს არა დრეკადი ძალა, არამედ— კულონური.

როგორც ცნობილია, გარემოს გარდატეხის მაჩვენებელი განისაზღვრება $n = \sqrt{\varepsilon}$ ფორმულით, სადაც ε არის დიელექტრიკული მუდმივა, რომელიც თავის მხრით დაკავშირებულია გარემოს P_1 პოლარიზაციასთან $\varepsilon = 1 + 4\pi P_1$ ფორმულით. თუ N არის ატომთა რიცხვი 1 სმ³-ში, ხოლო P ცალკეული ატომის პოლარიზაცია, მაშინ, ცხადია, $P_1 = NP$ და

$$n^2 - 1 = 4\pi NP. \tag{90,1}$$

განმარტებით ატომური პოლარიზაცია P დიპოლმომენტთან დაკავშირებულია ფორმულით

$$\overline{\mathbf{d}} = P\overline{\mathcal{E}} \tag{90,2}$$

სადაც $\overline{\mathcal{E}}$ არის ელექტრული ველის დაძაბულობის ვექტორი ატომის ცენტრში.

ამგვარად, გარდატეხის მაჩვენებლის გამოთვლა დაიყვანება დიპოლმომენტის გამოთვლაზე. დიპოლმომენტის საშუალო მნიშვნელობა გამოითვლება ფორმულით

$$\overline{\mathbf{d}(t)} = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(\mathbf{r}, t)\,\hat{\mathbf{d}}\,\psi(\mathbf{r}, t)\,d\mathbf{r}, \tag{90,3}$$

სადაც $\psi(\mathbf{r}, t)$ წარმოადგენს ველის მოქმედების შედეგად შეშფოთებული ატომის ტალღურ ფუნქციას. თუ ატომის მდგომარეობა შეშფოთებამდე ხასიათდებოდა $\psi_n^\circ(\mathbf{r}, t)$-თი, მაშინ შეშფოთების შემდეგ მას ექნება ტალღური ფუნქცია

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \psi_n^\circ(\mathbf{r}, t) + \sum_m C_m(t)\,\psi_m^\circ(t)\,e^{-\frac{i}{\hbar}E_m t} \tag{90,4}$$

$C_m(t)$ კოეფიციენტი უნდა განისაზღვროს შეშფოთების თეორიით. როგორც ვიცით, პირველ მიახლოებაში ამ კოეფიციენტს აქვს (76,17) სახე:

$$C_m^{(1)}(t)=\frac{1}{i\hbar}\int H'_{mn}(t)e^{i\omega_{mn}t}\,dt. \qquad (90,5)$$

(90,4) ფუნქცია შევიტანოთ (90,3) განმარტებაში, სადაც $C_m^{(1)}$-ის კვადრატული წევრები, როგორც უფრო მაღალი რიგის მცირე სიდიდეები, უგულებელვყოთ; მივიღებთ

$$\overline{\mathbf{d}}=\int\psi_n^{(0)*}\mathbf{d}\psi_n^{\circ}\,d\mathbf{r}+\sum_m C_m^{(1)}\int\psi_n^{\circ *}(\mathbf{r},t)\,\hat{\mathbf{d}}\,\psi_m^{\circ}(\mathbf{r})\,e^{-\frac{iE_mt}{\hbar}}\,d\mathbf{r}+$$

$$+\sum_m C_m^{(1)*}\int\psi_m^{\circ *}(\mathbf{r})\hat{\mathbf{d}}\,\psi_n^{\circ}(\mathbf{r},\ t)\,e^{\frac{i}{\hbar}E_mt}\,d\mathbf{r}. \qquad (90,6)$$

ვინაიდან სტაციონარულ მდგომარეობაში ატომს დიპოლმომენტი არ გააჩნია, პირველი წევრი ნულია, ხოლო მეორე წევრი მესამის კომპლექსურად შეუღლებულია; რადგან

$$\psi_n^{\circ}(\mathbf{r},\ t)=\psi_n^{\circ}(\mathbf{r})\exp\left(-\frac{iE_nt}{\hbar}\right),$$

ამიტომ მივიღებთ

$$\overline{\mathbf{d}}(t)=2Re\left\{\sum_m C_m^{(1)}(t)\left(\int\psi_n^{\circ *}(\mathbf{r})\,\hat{\mathbf{d}}\,\psi_m^{\circ}(\mathbf{r})\,d\mathbf{r}\right)e^{i\omega_{mn}t}\right\}. \qquad (90,7)$$

თუ დიპოლმომენტის მატრიცულ ელემენტს აღვნიშნავთ $\mathbf{d}_{nm}$-ით, გვექნება

$$\overline{\mathbf{d}}(t)=2Re\sum_m C_m^{(1)}(t)\mathbf{d}_{nm}e^{i\omega_{nm}t}. \qquad (90,8)$$

ამგვარად, საკითხი დაიყვანება $C_m^{(1)}$ სიდიდის მოძებნაზე. (90,5) ფორმულიდან კი ჩანს, რომ ამისათვის საჭიროა H'_{mn} მატრიცული ელემენტის ცოდნა. განვიხილოთ შემთხვევა, როცა დაცემული სინათლის ტალღის სიგრძე გაცილებით მეტია ატომის ზომებთან შედარებით. ამ შემთხვევაში დაგვიანება ატომის შიგნით შეგვიძლია უგულებელვყოთ და ელექტრული დაძაბულობის ვექტორი გამოვხატოთ ფორმულით

$$\vec{\mathcal{E}}(t)=\vec{\mathcal{E}}_0\sin\omega t. \qquad (90,9)$$

ამ შემთხვევაში ვექტორპოტენციალს ექნება სახე

$$\mathbf{A}=\mathbf{A}_0\cos\omega t=\frac{\mathbf{A}_0}{2}\{e^{i\omega t}+e^{-i\omega t}\}, \qquad (90,10)$$

სადაც ω დაცემული სინათლის სიხშირეა.

როგორც ვიცით სინათლისათვის შეშფოთების ენერგიის ოპერატორს აქვს გამოხატულება

$$\hat{H}'=\frac{e}{\mu c}(\mathbf{A}\,\hat{\mathbf{p}}), \qquad (90,11)$$

ამიტომ განხილულ შემთხვევაში გვექნება

$$\hat{H}'(\mathbf{r},\ t)=\frac{e}{2\mu c}(\mathbf{A}_0\,\hat{\mathbf{p}})\{e^{i\omega t}+e^{-i\omega t}\}, \qquad (90,12)$$

ვიპოვოთ H'_{mn} მატრიცული ელემენტი შეუშფოთებელი მდგომარეობის ტალღური ფუნქციებით; გვექნება

$$H'_{mn}(t)=\frac{e}{2\mu c}(\mathbf{A}_0\,\mathbf{p}_{mn})\{e^{i\omega t}+e^{-i\omega t}\} \tag{90,13}$$

იმპულსის $\mathbf{p}_{mn}$ მატრიცული ელემენტი შეგვიძლია დავაკავშიროთ დიპოლმომენტის მატრიცულ ელემენტთან. მართლაც, $\mathbf{p}_{mn}=i\mu\omega_{mn}\mathbf{r}_{mn}$ და, რადგან $\mathbf{d}_{mn}=-e\mathbf{r}_{mn}$, ამიტომ

$$H'_{mn}(t)=-\frac{i\omega_{mn}}{2c}(\mathbf{A}_0\,\mathbf{d}_{mn})\{e^{i\omega t}+e^{-i\omega t}\}. \tag{90,14}$$

თუ შევიტანთ მატრიცული ელემენტის ამ მნიშვნელობას (90,5) ფორმულაში და მოვახდენთ ინტეგრაციას, მივიღებთ

$$C_m^{(1)}(t)=\frac{i\omega_{mn}}{2c\hbar}(\mathbf{A}_0\mathbf{d}_{mn})\left\{\frac{e^{i(\omega_{mn}+\omega)t}}{\omega_{mn}+\omega}+\frac{e^{i(\omega_{mn}-\omega)t}}{\omega_{mn}-\omega}\right\}. \tag{90,15}$$

ამასთან, ინტეგრაციის მუდმივი ნულის ტოლად ჩავთვალეთ, რამდენადაც იგი არ მოგვცემს დამატებით წევრებს, რომლებიც დამოკიდებული იქნებოდა შემაშფოთებელ ველზე.

შევიტანოთ $C_n^{(1)}(t)$-ს მნიშვნელობა (90,8) ფორმულაში და გავითვალისწინოთ $\omega_{mn}=-\omega_{nm}$ ტოლობა; მივიღებთ

$$\bar{\mathbf{d}}=2Re\sum_m\frac{i\omega_{mn}}{2c\hbar}(\mathbf{A}_0\mathbf{d}_{mn})\mathbf{d}_{nm}\left\{\frac{e^{i\omega t}}{\omega_{mn}+\omega}+\frac{e^{-i\omega t}}{\omega_{mn}-\omega}\right\}. \tag{90,16}$$

რადგან $\bar{\mathcal{E}}=-\dot{\mathbf{A}}/c=\frac{\omega\mathbf{A}_0}{c}\sin\omega t$ და $\mathbf{d}_{mn}\mathbf{d}_{nm}=\mathbf{d}_{mn}\mathbf{d}^*_{mn}=|\mathbf{d}_{mn}|^2$, ამიტომ რეალური ნაწილის აღების შემდეგ გვექნება

$$\bar{\mathbf{d}}=\frac{2}{\hbar}\sum_m\frac{\omega_{mn}\,\mathbf{d}_{nm}(\bar{\mathcal{E}}\,\mathbf{d}_{mn})}{\omega_{mn}^2-\omega^2}. \tag{90,17}$$

გარემოს პოლარიზაციის გამოსათვლელად საკმარისია ვიპოვოთ დიპოლმომენტის საშუალო მნიშვნელობა ელექტრული ველის დაძაბულობის გასწვრივ. მაგალითად, თუ დაცემული სინათლის ელექტრული ვექტორი მიმართულია x-ღერძის გასწვრივ (ე. ი. სინათლე პოლარიზებულია x-ღერძის გასწვრივ), მაშინ (90,17) გამოსახულებაში შემოვა დიპოლმომენტის მხოლოდ x-მდგენელი და გვექნება

$$\bar{\mathbf{d}}=\frac{2e^2}{\hbar}\sum_m\frac{\omega_{mn}\,|x_{mn}|^2}{\omega_{mn}^2-\omega^2}\bar{\mathcal{E}}. \tag{90,18}$$

(90,2) ფორმულის თანახმად კი გარემოს პოლარიზაციისათვის მივიღებთ გამოსახულებას

$$P=\frac{e^2}{\mu}\sum_m\frac{f_{mn}}{\omega_{mn}^2-\omega^2}, \tag{90,19}$$

სადაც

$$f_{mn}=\frac{2\mu\omega_{mn}\,|x_{mn}|^2}{\hbar}=\frac{2|\omega_{mn}}{e^2\hbar}\,|\,\mathbf{d}_{mn}|^2, \tag{90,20}$$

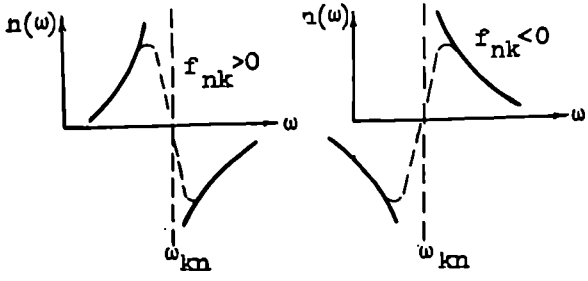
f_{mn}-ს ოსცილატორის ძალას უწოდებენ. (86,19) ფორმულის თანახმად ოსცილატორის ძალა დიპოლური გამოსხივების G_{mn} ინტენსივობასთან დაკავშირებული იქნება ფორმულით

$$f_{mn}=\frac{3\mu c^3}{2e^2\omega_{mn}^2}G_{mn}. \qquad (90,21)$$

ჩვენ ვხედავთ, რომ ოსცილატორის ძალის ნიშანი განსაზღვრულია ω_{mn} სიხშირის ნიშნით, როცა $E_m>E_n$, მაშინ $f_{mn}>0$, ხოლო, როცა $E_m<E_n$, მაშინ $f_{mn}<0$. (90,1) ფორმულის თანახმად დისპერსიის კვანტურ ფორმულას ექნება სახე

$$n^2(\omega)=1+\frac{4\pi Ne^2}{\mu}\sum_m\frac{f_{mn}}{\omega_{mn}^2-\omega}. \qquad (90,22)$$

აღსანიშნავია, რომ დისპერსიის ფორმულა გარეგნულად კლასიკურ ფორმულას ემთხვევა, ოღონდ კლასიკურ ფორმულაში ოსცილატორის ძალა f_m ასრულებდა ω_m საკუთარი სიხშირის მქონე ელექტრონთა რიცხვის როლს და ამიტომაც იგი მთელი რიცხვი იყო. კვანტურ მექანიკაში კი f_{mn} არ წარმოადგენს მთელ რიცხვს. აქ ადგილი აქვს ჯამთა წესს, რომლის თანახმად ყველა ოსცილატორის ძალების ჯამი ერთის ტოლია (იხ. შემდეგი პარაგრაფი), ე. ი.



ნახ. 22

$$\sum_m f_{mn}=1. \qquad (90,23)$$

აღსანიშნავია, რომ f_{mn} ოსცილატორის ძალა შეიძლება უარყოფითიც იყოს. მართლაც, როცა ატომი აგზნებულ მდგომარეობაშია, მაშინ n მდგომარეობებს შორის ისეთიც იქნება, რომლისთვისაც $\omega_{mn}<0$. ასეთ შემთხვევაში დისპერსიის მრუდს აქვს შებრუნებული ფორმა. ამ მოვლენას უწოდებენ უარყოფით დისპერსიას. უარყოფითი დისპერსიის არსებობის შესაძლებლობა ნაწინასწარმეტყველები იქნა კვანტური მექანიკის წყალობით, ხოლო ექსპერიმენტულად აღმოაჩინა ლადენბურგმა.

აღვნიშნოთ, რომ ჩვენს მიერ მიღებული ყველა ფორმულა სამართლიანია მხოლოდ დაცემული სინათლის ისეთი სიხშირეებისათვის, რომლებიც არ ემთხვევა გადასვლის ω_{mn} სიხშირეს.

გარდა დიპოლმომენტის ზემოთ მიღებული საშუალო მნიშვნელობისა, შეგვიძლია გამოვთვალოთ ისეთი გადასვლის მომენტის საშუალო მნიშვნელობებიც, რომლებიც შეესაბამება დაცემული სინათლის სიხშირის ცვლილებას. ასე მაგალი-

თად, შეგვიძლია გამოვთვალოთ ისეთი მომენტები, რომლებიც შეესაბამება დაცემული სინათლის სიხშირის გაზრდას ან შემცირებას. ასეთი ეფექტი ნაწინასწარმეტყველები იქნა თეორიულად, ხოლო ექსპერიმენტულად აღმოჩენილი იყო რამანის და მისგან დამოუკიდებლად ლ. ი. მანდელშტამისა და გ. ს. ლანდსბერგის მიერ. ამ ეფექტს რამანის ეფექტს უწოდებენ. მისი არსი იმაში მდგომარეობს, რომ აგზნებულ მდგომარეობაში მყოფმა ელექტრონმა თავისი ენერგიის ნაწილი შეიძლება დაცემულ კვანტს გადასცეს და მით კვანტის სიხშირე გაზარდოს· ასევე დაცემულმა კვანტმა შეიძლება თავისი ენერგია გადასცეს ატომს, თვითონ კი შემცირებული სიხშირით გაიფანტოს.

§ 91. ჯამთა წესი

როგორც წინა პარაგრაფში ვიჩვენეთ, ოსცილატორის ძალა განისაზღვრება ფორმულით

$$f_{mn}=\frac{2\mu\omega_{mn}}{\hbar e^2}\mid d_{mn}|^2, \tag{91,1}$$

სადაც d_{mn}-ში იგულისხმება დიპოლმომენტის x პროექციის მატრიცული ელემენტი

$$d_{mn}=e\int\psi_m^*(r)\hat{x}\psi_n(r)dr. \tag{91.2}$$

კვანტურ მექანიკაში არსებობს მეტად მნიშვნელოვანი თეორემა, რომლის მიხედვით ყველა ოსცილატორის ძალების ჯამი ერთის ტოლია. ამჟამად ჩვენს მიზანს სწორედ ამ თეორემის დამტკიცება წარმოადგენს. თანახმად (26,15) ფორმულისა,

$$\dot{d}_{mn}=i\omega_{mn}d_{mn}, \tag{91,3}$$

სადაც ω_{mn} არის m-დან n-მდგომარეობაში გადასვლის სიხშირე. ავიღოთ ჯამი (91,1) გამოსახულებიდან m-ით და გავითვალისწინოთ, რომ დიპოლმომენტი ერმიტული მატრიცაა, ე. ი. $d_{mn}=d_{nm}^*=d_{nm}$· გვექნება

$$\sum_m f_{mn}=\frac{2\mu}{\hbar e^2}\sum_m\omega_{mn}\mid d_{mn}|^2=\frac{2\mu}{\hbar e^2}\sum_m\omega_{mn}d_{mn}d_{nm}. \tag{91,4}$$

ან, თუ გავითვალისწინებთ (91,3) ფორმულას,

$$\sum_m f_{mn}=\frac{2\mu}{i\hbar e^2}\sum_m\dot{d}_{mn}d_{nm}. \tag{91,5}$$

რადგან, თანახმად (91,3) ფორმულისა, $\dot{d}_{mn}=\dot{d}_{nm}^*=-\dot{d}_{nm}$, ამიტომ უკანასკნელი ჯამი შეგვიძლია ასე წარმოვადგინოთ

$$\sum_m f_{mn}=\frac{2\mu}{i\hbar e^2}\left\{\frac{1}{2}\left(\sum_m\dot{d}_{mn}d_{nm}-\sum_m\dot{d}_{nm}d_{mn}\right)\right\}. \tag{91,6}$$

მატრიცათა გამრავლების წესის გამოყენებით მივიღებთ

$$\sum_m f_{mn}=\frac{i\mu}{\hbar e^2}(\dot{d}d-d\dot{d})_{nn}=\frac{i}{\hbar}(\dot{x}\hat{p}_x-\hat{p}_x\dot{x})_{nn}. \tag{91,7}$$

ჰაიზენბერგის დაკვანტვის პირობის ძალით $(\hat{x}\hat{p}_x - \hat{p}_x\hat{x})_{nn} = \frac{\hbar}{i}$, ამიტომ

$$\sum_m f_{mn} = \sum_m \frac{2\mu\omega_{mn}}{\hbar e^2} \mid d_{mn}|^2 = 1. \tag{91,8}$$

ამ ფორმულას ხშირად ასეც წერენ:

$$\sum_m (E_m - E_n) \mid d_{mn}|^2 = \frac{\hbar^2 e^2}{2\mu}. \tag{91,9}$$

შევნიშნოთ, რომ შედეგი არ არის დამოკიდებული n-ზე, ე. ი. საბოლოო მდგომარეობაზე.

თეორემა სამართლიანია ჩაკეტილ არეში მოძრავ დამუხტულ ნაწილაკთა ნებისმიერი სისტემისათვისაც. სახელდობრ, Z ელექტრონის მქონე ატომისათვის (91,8) ფორმულა ღებულობს სახეს

$$\sum_m f_{mn} = Z, \tag{91,10}$$

ან, რაც იგივეა,

$$\sum_m (E_m - E_n) \mid d_{mn}|^2 = \frac{\hbar^2 e^2}{2\mu} Z, \tag{91,11}$$

სადაც

$$d_{mn} = \left(e\sum_{i=1}^{Z} x_i \right)_{mn} \tag{91,12}$$

წარმოადგენს ატომის სრული დიპოლმომენტის x მდგენელის მატრიცულ ელემენტს. ჯამთა წესი პირველად მიღებული იყო თომასის, რეიხესა და კუნის მიერ.

თავი XII

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 ენერგეტული 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 ვაჩვენეთ, რომ წყალბადისებური ატომის მაგნიტური მომენტი მექანიკურ მომენტთან დაკავშირებულია ფორმულით

$$M l_z = -\frac{e}{2\mu c} l_z. \tag{92,1}$$

რადგან $l_z = m\hbar$, სადაც m იცვლება $-l$-დან $+l$-მდე, ამიტომ $M l_z = 0$, როცა $l=0$. ამრიგად, წყალბადისებურ ატომს ძირითად მდგომარეობაში მაგნიტური მომენტი არ გააჩნია. ცდები კი ამ გარემოებას არ ადასტურებს. შტერნისა და ჰერლახის მიერ დამტკიცებულ იქნა, რომ ძირითად მდგომარეობაში მყოფი წყალბადისებური ატომების ნაკადი მაგნიტურ ველში გაკვლისას ორად იყოფა, რაც მაჩვენებელია იმისა, რომ წყალბადისებურ ატომს ძირითად მდგომარეობაშიც გააჩნია რალაც 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 აბსოლუტური სიდიდე ბორის მაგნეტონის $M_B = \frac{e\hbar}{2\mu c}$ ტოლია.

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

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

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 თვისებისა და ზემოთ თქმულის თანახმად მას ეკნება სულ $2=(2s+1)$ პროექცია. აქედან კი გამომდინარეობს, რომ $s=1/_2$. ჰაუდსმიტმა და ულენბეკმა აღნიშნული მექანიკური მომენტი ელექტრონს მიაწერეს და მას ელექტრონის საკუთარი მექანიკური მომენტი ან სპინი უწოდეს. სპინი ინგლისური სიტყვაა და ნიშნავს ბზრიალას — ბრუნვას. შემდგომში საკუთარი მექანიკური მომენტის ნაცვლად, შემოკლების მიზნით, ვიხმართ სპინს. თუ სპინური მომენტის ოპერატორს აღვნიშნავთ $\hat{\mathbf{s}}$-ით, მაშინ (92,2) ფორმულის თანახმად, შეგვიძლია დავწეროთ

$$\hat{\mathbf{M}}^s = -\frac{e}{\mu c}\hat{\mathbf{s}}, \tag{92,3}$$

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

$$\hat{\mathbf{s}} = \frac{\hbar}{2}\sigma^0, \tag{92,4}$$

სადაც $\hat{\sigma}^0$ 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 გირომაგნიტური ფარდობა

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

ორბიტალურ გირომაგნიტურ ფარდობაზე ორჯერ მეტია, ე. ი. $g_l = \frac{1}{2}g_s$. შევნიშნოთ, რომ (92,5) თანაფარდობა ცდაზე ჯერ კიდევ 1915 წელს იყო დადგენილი აინშტეინისა და დე-ჰაასის მიერ ფერომაგნეტური ღეროს დამაგნიტების შესწავლისას.

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

პირველყოფილი წარმოდგენა იმის შესახებ, რომ ელექტრონის სპინი წარმოადგენს ელექტრონის საკუთარი ღერძის ირგვლივ ბრუნვის მექანიკურ მომენტს, სინამდვილეს არ შეესაბამება, რადგან ასეთი წარმოდგენა ეწინააღმდეგება ფარდობითობის სპეციალურ თეორიას. მართლაც, იმისათვის, რომ აზრი ჰქონდეს საკუთარი ღერძის ირგვლივ ბრუნვას, ელექტრონს უნდა გააჩნდეს გარკვეული მოცულობა. დავუშვათ, 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 $l=J_0\omega$, სადაც J_0 არის სფეროს ინერციის მომენტი $J_0=\frac{2}{5}\mu R^2$. რადგან როტატორისათვის მომენტის სიგრძე ტოლია $|l|=\hbar\sqrt{\nu(\nu+1)}$, ამიტომ ხაზოვანი სიჩქარისათვის გვექნება

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

თუ შევიტანთ ელექტრონის კლასიკური რადიუსის მნიშვნელობას საძიებელი სიჩქარისათვის მივიღებთ

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

სადაც $\alpha_0=1/137$ არის ზომერფელდის ნაზი სტრუქტურის კოეფიციენტი. ცხადია, რომ ნებისმიერი $\nu\neq 0$ 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. ელექტრონის სპინის ოპერატორი

გამოვარკვიოთ, 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 აღვნიშნოთ $\hat{s}_x$, $\hat{s}_y$, $\hat{s}_z$-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:

$$[\hat{s}_i,\ \hat{s}_k]=-\varepsilon_{ikn}\hat{s}_n \qquad (93,1)$$

ხოლო

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

სადაც $m_s=+1/2$ და $m_s=-1/2$. m_s-ს უწოდებენ სპინურ მაგნიტურ კვანტურ 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 ტოლიაო 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

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

სადაც

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

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

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

რომელიც ეკვივალენტურია შემდეგი ექვსი პირობის:

$$\sigma_x^{0\,2} = 1, \quad \sigma_y^{0\,2} = 1, \quad \sigma_z^{0\,2} = 1 \tag{93,6}$$

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

$$\sigma_x^0 \sigma_z^0 + \sigma_z^0 \sigma_x^0 = 0, \tag{93,7}$$

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

(93,3) ფორმულები შეგვიძლია ჩავწეროთ ვექტორული ტოლობის სახითაც

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

სადაც $\boldsymbol{\sigma}^0(\sigma_x^0, \sigma_y^0, \sigma_z^0)$ წარმოადგენს ვექტორს [1].

σ_x^0, σ_y^0, σ_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 $\mathbf{s}^2$. სადაც $\mathbf{s}^2$ ერის $\hat{\mathbf{s}}^2 = \hat{s}_x^2 + \hat{s}_y^2 + \hat{s}_z^2$ ოპერატორის საკუთარი მნიშვნელობა. ცხადია, რომ

$$\mathbf{s}^2 = \hbar^2 s(s+1), \tag{93,9}$$

რადგან $s = 1/2$, ამიტომ $\mathbf{s}^2$-ისათვის გვექნება

$$\mathbf{s}^2 = \frac{3}{4} \hbar^2. \tag{93,10}$$

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

ელექტრონის სპინურ ფუნქციას, როგორც § 48-ში შეეთანხმდით, აღვნიშნავთ χ_{sm_s}-ით. ამასთან, $\chi_{1/2\,1/2} \equiv \alpha$ გამოხატავს იმ ფაქტს, რომ ელექტრონის სპინის პროექცია z-ღერძის გასწვრივ არის მიმართული, $\chi_{1/2\,-1/2} \equiv \beta$ 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

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

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

[1] იხ. § 138.

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

ან, შემოკლებით, ერთი სვეტის მქონე მატრიცის სახით:

$$\psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix}, \tag{94,3}$$

საიდანაც ψ^+ ფუნქციისათვის გვექნება ერთსტრიქონიანი მატრიცა

$$\psi^+ = (\psi_1^*,\ \psi_2^*) \tag{94,4}$$

ასეთი ტიპის მატრიცებს უწოდებენ სპინორებს[1].

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

$$\hat{\mathbf{M}}^s = -\frac{e}{\mu c}\hat{\mathbf{s}} = -\frac{e\hbar}{2\mu c}\boldsymbol{\sigma}^0, \tag{94,5}$$

ამიტომ ელექტრონი მაგნიტურ ველში ისე იქცევა, როგორც მაგნიტური დიპოლი. ამის გამო იგი იძენს დამატებით პოტენციალურ ენერგიას $-(\hat{\mathbf{M}}^s\,\overline{\mathscr{H}})$, სადაც $\overline{\mathscr{H}}$ მაგნიტური ველის დაძაბულობის ვექტორია. მაშასადამე, ამ ენერგიის შესაბამის ოპერატორს ექნება გამოსახულება

$$\hat{u}_s(\overline{\mathscr{H}}) = \frac{e}{\mu c}(\hat{\mathbf{s}}\,\overline{\mathscr{H}}) = \frac{e\hbar}{2\mu c}\,(\boldsymbol{\sigma}^0,\ \overline{\mathscr{H}}). \tag{94,6}$$

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

$$\hat{H} = \hat{H}_{\text{მ.}} + \frac{e\hbar}{2\mu c}\,(\boldsymbol{\sigma}^0,\ \overline{\mathscr{H}}), \tag{94,7}$$

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

$$\hat{H}_{\text{მ.}} = \frac{1}{2\mu}\left(\hat{\mathbf{p}} + \frac{e}{c}\mathbf{A}\right)^2 + V(\mathbf{r},\ t) - e\varphi =$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta + \frac{e}{\mu c}(\mathbf{A}\hat{\mathbf{p}}) - \frac{ie\hbar}{2\mu c}\operatorname{div}\mathbf{A} + \frac{e^2}{2\mu c^2}\mathbf{A}^2 + V - e\varphi \tag{94,8}$$

(აქ ვიგულისხმებთ, რომ ელექტრონის მუხტი — e-ს ტოლია). შრედინგერის განტოლებას (94,7) ჰამილტონიანით უწოდებენ პაულის განტოლებას. ამრიგად, პაულის განტოლებას ექნება სახე[2]

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\begin{pmatrix}\psi_1 \\ \psi_2\end{pmatrix} = \left\{\frac{1}{2\mu}\left(\hat{\mathbf{p}} + \frac{e}{c}\mathbf{A}\right)^2 - e\varphi + V(\mathbf{r},\ t) + \frac{e\hbar}{2\mu c}\,(\boldsymbol{\sigma}^0\overline{\mathscr{H}})\right\}\begin{pmatrix}\psi_1 \\ \psi_2\end{pmatrix}, \tag{94,9}$$

---

[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 იყო შესწავლილი სპეკტრის ღუბლეტური სტრუქტურა.

რომელიც, თუ შევიტანთ მატრიცების მნიშვნელობებს და მოვახდენთ მათ გადამრავლებას, მოგვცემს შემდეგ სისტემას:

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

სტაციონარული მდგომარეობისათვის პაულის განტოლებას ექნება სახე

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

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

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

სადაც

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

პაულის ჰამილტონიანისათვის კი მივიღებთ გამოსახულებას

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

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

$$
\frac{\partial w}{\partial t} + \operatorname{div}\mathbf{J} = 0, \tag{94,15}
$$

სადაც

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

და

$$
\mathbf{J} = \frac{i\hbar}{2\mu}[\psi\nabla\psi^+ - \psi^+\nabla\psi] - \frac{e}{\mu c}\mathbf{A}\psi^+\psi \tag{94,17}
$$

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 $\psi_2 = 0$ და სპინორს ექნება მხოლოდ ერთი კომპონენტი, ე. ი.

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

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

$$\psi = \begin{pmatrix} 0 \\ \psi_2 \end{pmatrix} = \psi_2 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \tag{94,19}$$

ან, თუ ვისარგებლებთ (48,44) აღნიშვნებით

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

მაშინ ზოგად შემთხვევაში პაულის ორკომპონენტიანი ფუნქცია შემდეგი სახით შეგვიძლია ჩავწეროთ:

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

$|\psi_1|^2$ 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 ჩაიწეროთ ψ^+. ასე მაგალითად, წყუეტილი სპექტრის შემთხვევაში შეგვიძლია დავწეროთ ნორმირების პირობა

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

წყალბადისებური ატომის შემთხვევაში პოტენციალური ენერგია ცენტრალური სიმეტრიისაა, ამიტომ პაულის ტალღური ფუნქცია იქნება ნამრავლი რადიალური და $\mathscr{Y}_{l\,1/2}^{jm_j}$ ფუნქციისა, რომელიც (50,25) ფორმულით განისაზღვრება და რომელსაც ჩვენ ვეწოდეთ 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 მექანიკური მომენტი

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

$$\hat{\mathbf{j}} = \hat{\mathbf{l}} + \hat{\mathbf{s}} \tag{95,1}$$

ან მდგენელებში

$$\hat{j}_x = \hat{l}_x + \hat{s}_x, \quad \hat{j}_y = \hat{l}_y + \hat{s}_y, \quad \hat{j}_z = \hat{l}_z + \hat{s}_z. \tag{95,2}$$

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

კომუტატურია. 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

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

რადგან

$$[\hat{l}_i,\ \hat{l}_k]=-\mathcal{E}_{ikn}\hat{l}_n,\quad [\hat{s}_i,\ \hat{s}_k]=-\mathcal{E}_{ikn}\hat{s}_n, \tag{95,4}$$

ამიტომ

$$[\hat{j}_i,\ \hat{j}_k]=-\mathcal{E}_{ikn}\hat{l}_n-\mathcal{E}_{ikn}\hat{s}_n=-\mathcal{E}_{ikn}(\hat{l}_n+\hat{s}_n). \tag{95,5}$$

საიდანაც საბოლოოდ გვექნება

$$[\hat{j}_i,\ \hat{j}_k]=-\mathcal{E}_{ikn}\hat{j}_n. \tag{95,6}$$

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

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

რაც იმას ნიშნავს, რომ j^2 და j_z შეიძლება გაიზომოს ერთდროულად. კერძოდ, ამ სიდიდეებისათვის გვექნება შემდეგი მნიშვნელობები:

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

$$j_z=m_j\hbar, \tag{95,9}$$

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

$$|l-s|\leqslant j\leqslant l+s. \tag{95,10}$$

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

$$j=l+1/2,\quad j=|l-1/2|; \tag{95,11}$$

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

$$m_j=\pm 1/2,\ \pm 3/2,\ \pm,\ldots\ \pm j. \tag{95,12}$$

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

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

სადაც $j^{\pm}=j_x\pm ij_y$.

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

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

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

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

და

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

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

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

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

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

$$\begin{aligned} (\mathbf{ls}) &= \frac{\hbar^2 l}{2}, & j &= l+1/2 \\ (\mathbf{ls}) &= -\frac{\hbar^2(l+1)}{2}, & j &= |\,l-1/2\,| \end{aligned} \tag{95,19}$$

და

$$\begin{aligned} (\mathbf{js}) &= \frac{\hbar^2(l+3/2)}{2}, & j &= l+1/2 \\ (\mathbf{js}) &= -\frac{\hbar^2(l-1/2)}{2}. & j &= |\,l-1/2\,| \end{aligned} \tag{95,20}$$

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

როგორც წინა პარაგრაფში აღვნიშნეთ წყალბადისებური ატომის ტალღურ ფუნქციას ექნება სახე

$$\psi_{nljm_j}(r, \theta, \varphi) = R_{nl}(r)\mathscr{Y}_{l\,1/2}^{jm_j}(\theta, \varphi), \tag{95,21}$$

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

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

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

$\mathscr{Y}_{l,1/2}^{l\pm1/2,\,m_j}(\theta, \varphi)$ ფუნქციები განისაზღვრება (50,26) ფორმულებით. (95,21) ფუნქცია საერთო საკუთარი ფუნქცია იქნება $\hat{\mathbf{j}}^2$, $\hat{j}_z$ და $\hat{\mathbf{l}}^2$, $\hat{\mathbf{s}}^2$ ოპერატორებისა და პაულის განტოლების შესაბამისი ჰამილტონიანისა. ცხადია, რომ $\mathscr{Y}_{l,1/2}^{jm_j}(\theta, \varphi)$ ფუნქციები საკუთარი ფუნქციებია $(\hat{\mathbf{l}}\,\hat{\mathbf{s}})$, და $(\hat{\mathbf{j}}\,\hat{\mathbf{s}})$ ოპერატორებისაც.

§ 96. სპინ-ორბიტალური ურთიერთქმედება და სპექტრის მულტიპლეტური სტრუქტურა

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

ელექტრონი მოძრაობს რა ატომგულის ირგვლივ ორბიტაზე, ქმნის მაგნიტურ ველს, რომელსაც ხშირად ატომშიგა 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. გამოვითვალოთ სპინ-ორბიტალური ურთიერთქმედებით გამოწვეული ჰამილტონიანის შესწორება. შიგა ელექტრული ველი იქ, სადაც იმყოფება ელექტრონი, იქნება $\vec{\mathcal{E}} = \frac{Ze}{r^3}\mathbf{r}$-ის ტოლი, სადაც Ze ატომგულის მუხტია, r კი — ატომის რადიუსი. ამ ელექტრულ ველთან დაკავშირებული იქნება მაგნიტური ველი, რომლის დაძაბულობა გამოისახება ფორმულით

$$\vec{\mathcal{H}} = \frac{1}{c}[\vec{\mathcal{E}} \times \mathbf{v}]; \tag{96,1}$$

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

$$\vec{\mathcal{H}} = \frac{Ze}{cr^3}[\mathbf{r} \times \mathbf{v}] = \frac{Ze}{\mu c r^3}\mathbf{l}, \tag{96,2}$$

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

$$\hat{H}_{sl} = -\frac{Ze}{\mu c r^3}(\hat{\mathbf{l}}\,\hat{\mathbf{M}}^s), \tag{96,3}$$

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

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

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

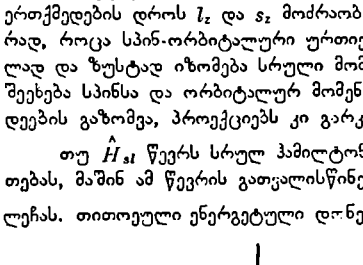
$$\hat{H}_{sl} = \frac{1}{2\mu^2 c^2}\left\{\frac{1}{r}\frac{dV(r)}{dr}\right\}(\hat{l}\,\hat{s}). \qquad (96,5)$$

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

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

ცხადია, რომ $\hat{l}^2$ და $\hat{s}^2$ აგრეთვე კომუტირებენ $\hat{H}$-თან, ხოლო რაც შეეხება $\hat{l}_z$ და $\hat{s}_z$, ისინი $\hat{H}_{sl}$ წევრის გამო კომუტატური აღარ არიან სრულ ჰამილტონიანთან. ამიტომაც სრული ჰამილტონიანის საკუთარი ფუნქციები აღარ იქნება საერთო საკუთარი ფუნქციები $\hat{l}^2$, $\hat{s}^2$, $\hat{l}_z$ და $\hat{s}_z$ ოპერატორებისა. სპინ-ორბიტალური ურთიერთქმედების დროს l_z და s_z მოძრაობის ინტეგრალებს აღარ წარმოადგენენ. ამგვარად, როცა სპინ-ორბიტალური ურთიერთქმედება არსებითია, 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 გარკვეული 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.



ნახ. 23

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

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

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

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

ძირითად და მომდევნო დონეებს შორის მანძილი კი წყალბადისებურ ატომში $\Delta E = E_1 - E_2 \approx 10\ eV$-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 „sl“ ურთიერთქმედებით უწოდებენ დონეების მულტიპლეტურ სტრუქტურას. თუ ვიპოვით შრედინგერის განტოლების ამონახსნს (96,6) ჰამილტონიანით, დავინახავთ, რომ ენერგია j კვანტური რიცხვის ფუნქცია იქნება და რადგან j იღებს ორ მნიშვნელობას $j = l + 1/2$ და $j = |l - 1/2|$, ამი-

ტომ თითოეული დონე, რომელიც გვქონდა $\hat{H}_{sl}$ წევრის გარეშე, გაიხლიჩება ორ დონედ. (გამონაკლისს წარმოადგენს s დონე $l=0$, რომლისთვისაც j-ს აქვს მხოლოდ ერთი მნიშვნელობა $j=1/2$ და რომელიც, მაშასადამე, არ იხლიჩება), ე. ი. ენერგეტული დონეები 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 $(\hat{\mathbf{l}}\,\hat{\mathbf{s}})$ სკალარული ნამრავლი, რომელსაც (95,19) ფორმულის მიხედვით, მინიმალური მნიშვნელობა ექნება მაშინ, როცა $j=|l-1/2|$.

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

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

სადაც

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

ხოლო

$$\overline{(\hat{\mathbf{l}}\,\hat{\mathbf{s}})}=\langle\mathscr{Y}_l^{jmj}\,|\,(\hat{\mathbf{l}}\,\hat{\mathbf{s}})\,|\,\mathscr{Y}_l^{jmj}\rangle. \tag{96,11}$$

თუ გავითვალისწინებთ (50,29) ფორმულებს, ადვილად ვაჩვენებთ, რომ $\overline{(\mathbf{ls})}$ დაემთხვევა (95,19) გამოსახულებას. მეორე მხრივ, ცნობილია რომ [1]

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

სადაც n არის მთავარი კვანტური რიცხვი. ენერგიის შესწორებისათვის მივიღებთ

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

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

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

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

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

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:

$$n=1,\ 2,\ 3,\ldots\ \infty$$
$$l=0,\ 1,\ 2,\ldots\ n-1 \qquad (96,16)$$
$$j=l+1/2,\ j=|l-1/2|,$$

ხოლო

$$-j\leqslant m_j\leqslant +j.$$

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

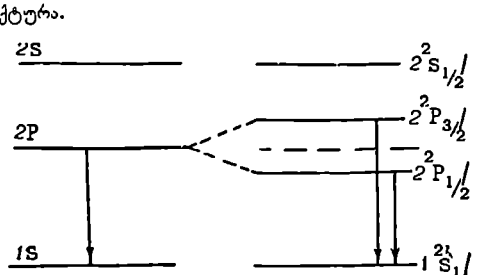
$$\psi_{nlj\,m_j}=\psi_{nlj\,m_j}(r,\ \theta,\ \varphi;\ s_z) \qquad (96,17)$$

ეს იმას ნიშნავს, რომ ადგილი აქვს m_j გადაგვარებას. ყოველი ენერგეტული 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

$$n^{2s+1}l_j, \qquad (96,18)$$

სადაც $l=0,\ 1,\ 2,\ 3,\ldots\ (n-1)$-ს, როგორც ადრე 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 „sl" ურთიერთქმედების შედეგად. ა) შემთხვევა შეესაბამება იმას, როცა დონეების მულტიპლეტობა არაა გათვალისწინებული. ბ) კი შეესაბამება

შემთხვევას, როცა „sl“ ურთიერთქმედების გამო $2p$ დონე გახლეჩილია ორად ($2s$ და $1s$ დონეები არ იხლიჩება). თუ პირველ შემთხვევაში $2p \to 1s$ გადასვლის დროს შესაძლებელია ერთი სპექტრალური ხაზი, მეორე შემთხვევაში გვექნება ორი სპექტრალური ხაზი. რადგან ენერგიათა სხვაობა $2p_{3/2}$ და $2p_{1/2}$ დონეებს შორის, როგორც ზემოთ ვიჩვენეთ, 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 Å-ით განსხვავდება.

დაბოლოს აღვნიშნოთ შემდეგი. როდესაც სპინ-ორბიტალური ურთიერთქმედება საკმარისად ძლიერია, მაშინ $\psi(r, \theta, \varphi; s_z)$ ფუნქციაში სივრცული და სპინური ცვლადების განცალება შეუძლებელია. მაგრამ ხშირად სხვა ურთიერთქმედებებთან შედარებით დასაშვებია „sl“ ურთიერთქმედების უგულებელყოფა. ამ შემთხვევაში შესაძლებელია კოორდინატული და სპინური ცვლადების განცალება. ასე რომ, სრული ფუნქცია შეგვიძლია წარმოვიდგინოთ როგორც ორი ფუნქციის ნამრავლი, რომელთაგან ერთი მხოლოდ კოორდინატების ფუნქციაა, მეორე კი — სპინისა, ე. ი.

$$\psi(\mathbf{r}; s_z) = \psi(\mathbf{r})\,\chi(s_z) \tag{96,19}$$

ამ შემთხვევაში $\chi(s_z)$ „სპინური ფუნქცია“ უბრალო სიმბოლოა, რომელიც მიუთითებს სპინის მდგომარეობაზე.

შერჩევის წესები. ახლა განვიხილოთ შერჩევის წესები ატომების მიერ სინათლის გამოსხივების ან შთანთქმის 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 Λ მომენტით 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 $\Lambda = \mathbf{L} + \mathbf{S}$; მაშასადამე, სინათლის ელექტრო-მაგნიტური კვანტებისათვის დასაშვები ყოფილა ორბიტალური მომენტის სამი მნიშვნელობა

$$L = \Lambda + 1,\ \Lambda,\ \Lambda - 1. \tag{96,20}$$

როგორც ვხედავთ ფოტონის ორბიტალურ მომენტს არ გააჩნია განსაზღვრული მნიშვნელობა. ცნობილია, რომ ფოტონის ლუწობა განისაზღვრება ფორმულით

$$w = (-1)^{L+1} \tag{96,21}$$

სინათლის ელექტრომაგნიტური ველის კვანტები განსაზღვრული მომენტით ორ კლასად იყოფა. ერთს ეწოდება ელექტრული მულტიპოლობის კვანტი და აღინიშნება $E\Lambda$-თი. ამ ტიპის კვანტების ლუწობა ტოლია $w(E\Lambda) = (-1)^{\Lambda}$, ხოლო მეორეს, მაგნიტური მულტიპოლობის კვანტი $M\Lambda$; მათი ლუწობა განისაზღვრება $w(M\Lambda) = (-1)^{\Lambda+1}$ ფორმულით. მაგალითად, ელექტრული დიპოლური $E1$ კვანტის შემთხვევაში სრული მომენტი $\Lambda = 1$, ხოლო ლუწობა $w(E1) = -1$. დიპო-

ლური კვანტის ორბიტალურ მომენტს ეწნება მნიშვნელობები $L=0$ და $L=2$. ელექტრული კვადრუპოლური კვანტის სრული მომენტი $\Lambda=2$, ხოლო ლუწობა $\pi(E2)=1$ და ა. შ. მაგნიტური მულტიპოლების კვანტებს ეწნებათ საწინააღმდეგო ლუწობანი. მართლაც, $M1$ კვანტისათვის $\pi(M1)=+1$, ხოლო $M2$-ისათვის $\pi(M2)=-1$ 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 $d_{3/2} \rightleftarrows p_{3/2}$ 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:

$$|j-1| \leqslant j' \leqslant j+1; \quad \text{ლუწობა იცვლება} \tag{96,22}$$

$E2$ 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.

$$|j-2| \leqslant j' \leqslant j+2; \quad \text{ლუწობა არ იცვლება.} \tag{96,23}$$

$E2$ 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:

$$|j-1| \leqslant j' \leqslant j+1; \quad \text{ლუწობა არ იცვლება} \tag{96,24}$$

რადგან ლუწობა არ იცვლება $M1$ გადასვლა დასაშვები იქნება მაშინ, როცა ატომის ორბიტალური მომენტი არ იცვლება, ე. ი. ამ შემთხვევაში უნდა შეიცვალოს სპინის მიმართულება. როგორც ამბობენ ხოლმე, ადგილი ეწნება სპინის გადაბრუნებას. ასეთი იქნება, მაგალითად, $p_{3/2} \rightleftarrows p_{1/2}$, $d_{3/2} \rightleftarrows p_{1/2}$ გადასვლები და ა. შ.

სრულიად ანალოგიურად $M2$ გადასვლების შემთხვევაში გვექნება შერჩევის წესები

$$|j-2| \leqslant j' \leqslant j+2; \quad \text{ლუწობა იცვლება} \tag{96,25}$$

ასევე ვიპოვით შერჩევის წესებს ნებისმიერი მულტიპოლური გადასვლის შემთხვევაშიაც.

§ 97. ელექტრონის სრული მაგნიტური მომენტი

როგორც აღვნიშნეთ, ელექტრონს გააჩნია ორი მაგნიტური მომენტი, რომელთაგან ერთი — ორბიტალური

$$\hat{M}^l = -\frac{e}{2\mu c}\hat{l} \tag{97,1}$$

გამოწვეულია ელექტრონის ორბიტალური მოძრაობით და მეორე — სპინური

$$\hat{M}^s = -\frac{e}{\mu c}\hat{s} \tag{97,2}$$

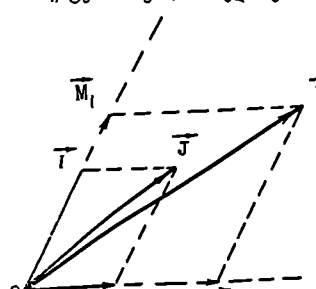
გამოწვეული ელექტრონის საკუთარი მექანიკური მომენტით — სპინით. ამ ორი მომენტის ვექტორულ ჯამს უწოდებენ ელექტრონის სრულ მაგნიტურ მომენტს

$$\hat{M}^j = \hat{M}^l + \hat{M}^s = -\frac{e}{2\mu c}(\hat{l} + 2\hat{s}). \tag{97,3}$$

ან, თუ გავიხსენებთ, რომ ელექტრონის სრული მომენტი $j = l + s$, მაშინ

$$\hat{M}^j = -\frac{e}{2\mu c}(\hat{j} + \hat{s}). \tag{97,4}$$

როგორც ვხედავთ, ელექტრონის სრული მაგნიტური მომენტი, აღარ არის პროპორციული ელექტრონის სრული მექანიკური მომენტისა, როგორც ეს გვქონდა 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 $j = l + s$ არ ემთხვევა სრული მაგნიტური M^j მომენტის მიმართულებას. მიუხედავად ამისა პრაქტიკული გამოთვლების დროს ხელსაყრელია M^j სრული მომენტის ოპერატორი გამოვხატოთ ისეთნაირად, რომ იგი პროპორციული იყოს სრული $\hat{j}$ მომენტის ოპერატორისა. ამ მიზნით შემოვიღოთ ისეთი $\hat{\Gamma}$ ოპერატორი,



ნახ. 25

ნახაზი ესება დაღებითი მუხტის შემთხვევას

რომლის გამრავლებით $\hat{j}$ ოპერატორზე მივიღებთ M^j-ს, ე. ი. შეგვიძლია დავწეროთ

$$\hat{M}^j = \hat{\Gamma}\,\hat{j}. \tag{97,5}$$

$\hat{\Gamma}$ ოპერატორის სახის დადგენა ადვილია. ამისათვის (97,5) ტოლობა სკალარულად გავამრაველოთ $\hat{j}$-ზე; მივიღებთ

$$\hat{\Gamma} = \frac{(\hat{M}^j\hat{j})}{\hat{j}^2} \tag{97,6}$$

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

$$\hat{\Gamma}=-\frac{e}{2\mu c}\left\{1+\frac{\hat{j}^2-\hat{l}^2+\hat{s}^2}{2\hat{j}^2}\right\}, \tag{97,7}$$

ხოლო სრული მაგნიტური მომენტისათვის გვექნება

$$\hat{M}_j=-\frac{e}{2\mu c}\left\{1+\frac{\hat{j}^2-\hat{l}^2+\hat{s}^2}{2\hat{j}^2}\right\}\hat{j}. \tag{97,8}$$

ჰამილტონიანის შესწორება მავნიტურ ველში მოძრავი ელექტრონისათვის, რომელიც გამოწვეულია სრული მაგნიტური მომენტით, ტოლი იქნება

$$\hat{H}'=-(\mathbf{M}^j\vec{\mathscr{H}})=\frac{e}{2\mu c}\{(\hat{\mathbf{l}}\,\vec{\mathscr{H}})+2(\hat{\mathbf{s}}\,\vec{\mathscr{H}})\}. \tag{97,9}$$

ათვლის სისტემის z-ღერძი მივმართოთ მაგნიტური ველის დაძაბულობის გასწვრივ, მაშინ $\vec{\mathscr{H}}(0,\ 0,\ \mathscr{H})$ და ენერგიის შესწორებისათვის მივიღებთ

$$\hat{H}'=\frac{e\mathscr{H}}{2\mu c}(\hat{l}_z+2\hat{s}_z). \tag{97,10}$$

შემოვიღოთ ე. წ. ლარმორის სიხშირე

$$\Omega=\frac{e\mathscr{H}}{2\mu c}, \tag{97,11}$$

მაშინ გვექნება

$$\hat{H}'=\Omega(\hat{l}_z+2\hat{s}_z) \tag{97,12}$$

სრულ ჰამილტონიანს გარეშე მაგნიტურ ველში შეტანილი ატომისა ექნება შემდეგი სახე:

$$\hat{H}=\hat{H}_0+\hat{H}_{sl}+\Omega(\hat{j}_z+\hat{s}_z), \tag{97,13}$$

სადაც $\hat{H}_0$ არის ატომის ჰამილტონიანი ველის გარეშე, ხოლო $\hat{H}_{sl}$ სპინ-ორბიტალური ურთიერთქმედების ოპერატორია. როცა სპინ-ორბიტალური ურთიერთქმედება შეგვიძლია უგულებელვყოთ, მაშინ ატომის ჰამილტონიანი ასე შეიძლება გადავწეროთ:

$$\hat{H}=\hat{H}_0+\Omega(\hat{l}_z+2\hat{s}_z) \tag{97,14}$$

აღვნიშნოთ, რომ (97,3) ფორმულის გათვალისწინებით, z-ღერძის გასწვრივ მიმართულ მაგნიტურ ველში მოძრავი ატომის ჰამილტონიანის შესწორებისათვის შეგვიძლია დავწეროთ

$$\hat{H}'=\Omega\left\{1+\frac{(\hat{j}\,\hat{s})}{\hat{j}^2}\right\}\hat{j}_z. \tag{97,15}$$

პრეცესია. ვაჩვენოთ, რომ, როცა სპინ-ორბიტალური ურთიერთქმედება მცირეა, მაშინ ელექტრონის ორბიტალური მომენტი და სპინი მაგნიტური ველის დაძაბულობის მიმართ პრეცესიას განიცდის. ამისათვის დავწეროთ მოძრაობის კვანტური განტოლებები $\hat{\mathbf{l}}$ და $\hat{\mathbf{s}}$ ვექტორებისათვის. რადგან ეს სიდიდეები დროზე ცხადად დამოკიდებულნი არ არიან, ამიტომ

$$\frac{d\hat{\mathbf{l}}_i}{dt} = [\hat{H},\ \hat{\mathbf{l}}_i]; \quad \frac{d\hat{\mathbf{s}}_i}{dt} = [\hat{H},\ \hat{\mathbf{s}}_i], \tag{97,16}$$

სადაც $\hat{H}$ განისაზღვრება (97,14) ფორმულით. შევიტანოთ (97,14) ჰამილტონიანი და გავითვალისწინოთ, რომ $[\hat{\mathbf{l}}_i,\ \hat{\mathbf{s}}_k] = 0$; მივიღებთ

$$\frac{d\hat{\mathbf{l}}_i}{dt} = \Omega[\hat{\mathbf{l}}_z,\ \hat{\mathbf{l}}_i]; \quad \frac{d\hat{\mathbf{s}}_i}{dt} = 2\Omega[\hat{\mathbf{s}}_z,\ \hat{\mathbf{s}}_i]. \tag{97,17}$$

აქედან მომენტთა მდგენელების კომუტაციის თვისებების გათვალისწინებით გვექნება

$$\frac{d\hat{\mathbf{l}}_i}{dt} = -\Omega\mathcal{E}_{zik}\hat{\mathbf{l}}_k. \tag{97,18}$$

ანალოგიური დამოკიდებულება გვექნება სპინის პროექციებისთვისაც. გადავიდეთ საშუალო სიდიდეებზე. ამისათვის გავითვალისწინოთ, რომ Ω და $\mathcal{E}_{ikn}$ ტენზორი მუდმივებია, მაშინ მივიღებთ:

$$\frac{d\bar{l}_x}{dt} = -\Omega\bar{l}_y, \quad \frac{d\bar{l}_y}{dt} = -\Omega\bar{l}_x, \quad \frac{d\bar{l}_z}{dt} = 0. \tag{97,19}$$

თუ პირველ განტოლებას გავაწარმოებთ დროით და გავითვალისწინებთ მეორე განტოლებას, გვექნება

$$\frac{d^2\bar{l}_x}{dt^2} + \Omega^2\bar{l}_x = 0, \quad \bar{l}_y = -\frac{1}{\Omega}\frac{d\bar{l}_x}{dt}, \quad \bar{l}_z = \text{const} \tag{97,20}$$

ამ განტოლებათა ამოხსნა მოგვცემს:

$$\begin{aligned} \bar{l}_x &= A\cos(\Omega t + \alpha), \\ \bar{l}_y &= A\sin(\Omega t + \alpha), \\ \bar{l}_z &= \text{const}. \end{aligned} \tag{97,21}$$

სპინისათვის სრულიად ანალოგიურად მივიღებთ:

$$\begin{aligned} \bar{s}_x &= B\cos(2\Omega t + \delta), \\ \bar{s}_y &= B\sin(2\Omega t + \delta), \\ \bar{s}_z &= \text{const}. \end{aligned} \tag{97,22}$$

(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 $\mathbf{l}$ 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 ანომალურს), 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

$$\frac{e\mathscr{H}}{2\mu c} l_z$$

წევრი. ამიტომ ატომის სრული ენერგია მაგნიტურ ველში ტოლია

$$W_{nm} = E_n + \frac{e\mathscr{H}}{2\mu c} l_z \tag{98,1}$$

ან, თუ გავითვალისწინებთ, რომ $l_z = m\hbar$, გვექნება

$$W_{nm} = E_n + \frac{e\mathscr{H}}{2\mu c} m\hbar \tag{98,2}$$

როგორც ვხედავთ, ენერგია ფუნქცია იქნება მაგნიტური კვანტური რიცხვისაც. 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.

$$W_{nlm} = E_{nl} + \frac{e\mathscr{H}}{2\mu c} m\hbar. \tag{98,3}$$

ამგვარად, მაგნიტურ ველში შეტანისას ერთელექტრონიანი (გარდა წყალბადისებური ატომებისა) ატომების ენერგია დამოკიდებულია იმდენივე კვანტურ

რიცხვზე, რამდენზეც ტალღური ფუნქცია $\psi = \psi_{nlm}(r, 0, \varphi)$, ამიტომ გადაგვარება ისპობა. მაგნიტურ ველში ენერგია დამოკიდებულია არა მხოლოდ მომენტის სიდიდეზე, არამედ მის ორიენტაციაზედაც მაგნიტური ველის მიმართ[1]. ვნახოთ, როგორ იცვლება სპექტრალური ხაზები ატომის მაგნიტურ ველში შეტანისას. ამისათვის გამოვიყენოთ ბორის სიხშირეთა პირობა. სპექტრალური ხაზის სიხშირე ატომის მაგნიტურ ველში შეტანისას ტოლია

$$\omega_{n'l'm';\ nlm} = \frac{W_{n'l'm'} - W_{nlm}}{\hbar} = \omega_0 + \frac{e\mathscr{H}}{2\mu c}(m' - m), \qquad (98,4)$$

სადაც $\omega_0 = \frac{1}{\hbar}(E_{n'l'} - E_{nl})$ არის სპექტრალური ხაზის სიხშირე მაგნიტური ველის გარეშე. თუ გავიხსენებთ, რომ $\frac{e\mathscr{H}}{2\mu c} = \Omega$ წარმოადგენს ლარმორის სიხშირეს, მაშინ ატომის მაგნიტურ ველში შეტანისას გამოსხივებული სინათლის სიხშირის ცვლილებისათვის მივიღებთ

$$\omega_{n'l'm';\ nlm} = \omega_0 + \Omega\Delta m. \qquad (98\ 5)$$

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:

$$\omega_0 - \Omega,\ \omega_0,\ \omega_0 + \Omega. \qquad (98,6)$$

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

$$\omega_0 - \Omega \text{ და } \omega_0 + \Omega. \qquad (98,7)$$

ამ შემთხვევაში ხაზები წრიულად პოლარიზებულია და ადგილი აქვს სპექტრალური ხაზების ორად გახლეჩას სპექტრალური ხაზების ზემოთ განხილულ გახლეჩას უწოდეს ზეემანის ნორმალური ეფექტი, რადგან მხოლოდ ეს ეფექტი შეესაბამებოდა იმდროინდელ თეორიულ მოსაზრებებს, რომლებიც კლასიკურ მექანიკაში ჩამოყალიბებული იყო ლორენცის მიერ. შევნიშნოთ, რომ ენერგეტულ დონეებს შორის მანძილი ტოლია გამოსახულების

$$\varepsilon = \hbar\Omega = \frac{e\hbar}{2\mu c}\mathscr{H}; \qquad (98,8)$$

ზეემანის რთული ეფექტი. განვიხილოთ ზეემანის ანომალური ეფექტი. კვანტური მექანიკის თვალსაზრისით ამ ეფექტში არაეთარი ანომალობა არა გვაქვს. პირიქით, იგი ცდაზე უფრო ხშირად გვხვდება, ვიდრე ნორმალური ეფექტი. მას ზეემანის რთულ ეფექტსაც უწოდებენ. საქმე ისაა, რომ სინამდვილეში სპექტრალური ხაზების რიცხვი გაცილებით მეტია იმაზე, რასაც იძლევა ზეემანის მარტივი ეფექტი.

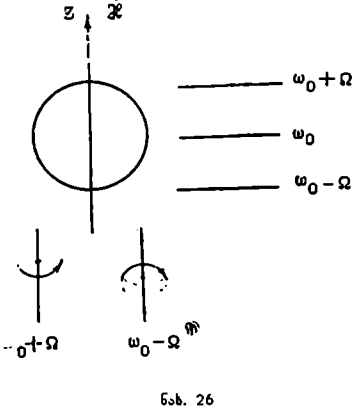
---

[1] წყალბადისებურ ატომებში „l" გადაგვარებას კვლავ ექნება ადგილი, ისე რომ, ამ ატომების ენერგია მაგნიტურ ველში მხოლოდ n-ზე და m-ზეა დამოკიდებული. მაშასადამე, წყალბადისებურ ატომში მოიხსნება ხხოლოდ „m" გადაგვარება.

ამ მოვლენას მარტივად ავხსნით, თუ გავითვალისწინებთ ელექტრონის სპინს და მასთან დაკავშირებულ დონეების მულტიპლეტურ სტრუქტურას. თანახმად (97,7) ფორმულისა, სრულ ჰამილტონიანს (სპინის გათვალისწინებით) ერთელექტრონიანი ატომებისათვის, როცა ისინი მოთავსებულია z-ის მიმართულების მჭონე მაგნიტურ ველში, აქვს სახე

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_{sl} + \Omega\,(\hat{l}_z + \hat{s}_z), \tag{98,9}$$

სადაც $\hat{H}_{sl}$ სპინ-ორბიტალური ურთიერთქმედებით გამოწვეული ენერგიის ოპერატორია. განვიხილოთ ორი შემთხვევა სუსტი და ძლიერი ველებისა. ველს ეწოდება 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



ნახ. 26

$$\Omega\hbar = \frac{e\mathcal{H}}{2\mu c}\,\hbar \gg \varepsilon_{sl}, \tag{98,10}$$

ე. ი.

$$\mathcal{H} \gg \frac{2\mu c}{e\hbar}\,\varepsilon_{sl}. \tag{98,11}$$

სუსტი ველი კი გვექნება მაშინ, როცა

$$\mathcal{H} \ll \frac{2\mu c}{e\hbar}\,\varepsilon_{sl}. \tag{98,12}$$

მაგალითად, როცა საქმე გვაქვს ნატრიუმის ($p_{1/2}$, $p_{3/2}$) დუბლეტთან, $\varepsilon_{sl} \sim 0{,}001\ eV$ და მივიღებთ, რომ გარეშე ველი სუსტია, როცა დაცულია პირობა $\mathcal{H} \ll 50000$ გაუსი. ჯერ განვიხილოთ სუსტი ველის შემთხვევა.

1. რადგან ამ შემთხვევაში „sl"-ბმა გაცილებით ძლიერია, ვიდრე გარეშე ველი, ამიტომ $\mathbf{s}$ და $\mathbf{l}$ ცალ-ცალკე არ ინახება. ამ შემთხვევაში, როგორც წინა პარაგრაფში დავინახეთ, ღნდა განვიხილოთ სრული მომენტი $\mathbf{j} = \mathbf{l} + \mathbf{s}$ და გავითვალისწინოთ, რომ ადგილი აქვს $\mathbf{j}^2$ და j_z-ის ერთდროულად შენახვას. ამის გამო (96,9) ჰამილტონიანში ($\hat{H}_0 + \hat{H}_{sl}$) ჯამი შეგვიძლია განვიხილოთ როგორც შეუშფოთებელი ატომის ჰამილტონიანი. უკანასკნელი წევრი კი თავისი სიმცირის გამო

შეგვიძლია ჩავთვალოთ მცირე შეშფოთებად. მაშასადამე, შეშფოთების ენერგიის ოპერატორს ექნება სახე

$$\hat{H}' = \Omega(\hat{j}_z + \hat{s}_z), \tag{98,13}$$

რომელიც (97,15) ფორმულის თანახმად ეკვივალენტურია გამოსახულების

$$\hat{H}' = \Omega \left\{ 1 + \frac{(\hat{\mathbf{j}}\,\hat{\mathbf{s}})}{\hat{\mathbf{j}}^2} \right\} \hat{j}_z. \tag{98,14}$$

რადგან დავადგინეთ შეშფოთების ენერგიის ოპერატორის გამოსახულება, ატომის მაგნიტურ ველში მოთავსების შედეგად ენერგეტული დონეების ცვლილების საპოვნელად, უნდა გამოვიყენოთ შეშფოთების თეორია, რისთვისაც პირველ მიახლოებაში საკმარისი იქნება ვიპოვოთ (98,14) ოპერატორის დიაგონალური მატრიცული ელემენტები, შეუშფოთებელი ჰამილტონიანის $\hat{H}^0 = \hat{H}_0 + \hat{H}_{sl}$ საკუთარი ψ_{nljm_j} ფუნქციების მიხედვით. მაშასადამე, ენერგიის შესწორებისათვის გვექნება

$$E_{jm_j} = \langle nljm_j | \hat{H}' | nljm_j \rangle. \tag{98.15}$$

რადგან შეშფოთების ოპერატორი დამოკიდებული არ არის რადიალურ მოძრაობაზე და ტალღურ ფუნქციას აქვს (94,21) სახე, ამიტომ

$$E_{jm_j} = \langle \mathscr{Y}_{l\,1/2}^{jm_j} | \hat{H}' | \mathscr{Y}_{l\,1/2}^{jm_j} \rangle \tag{98,16}$$

$\mathscr{Y}_{l\,1/2}^{jm_j}$ წარმოადგენს საკუთარ ფუნქციას $\hat{\mathbf{j}}^2$, $\hat{j}_z$ და აგრეთვე $(\hat{\mathbf{j}}\,\hat{\mathbf{s}})$ სკალარული ნამრავლისა, ამიტომ

$$E_{jm_j} = (\hbar\Omega)\, m_j \left\{ 1 + \frac{j(j+1) - l(l+1) + s(s+1)}{2j(j+1)} \right\}. \tag{98,17}$$

სიდიდეს

$$g = 1 + \frac{j(j+1) - l(l+1) + s(s+1)}{2j(j+1)} \tag{98,18}$$

უწოდებენ ლანდეს მამრავლს. ამგვარად, სუსტ მაგნიტურ ველში ატომის მიერ შეძენილი ენერგია ტოლი იქნება გამოსახულების

$$E_{jm_j} = (\hbar\Omega)\, g m_j, \tag{98,19}$$

სადაც $m_j = \pm 1/2, \pm 3/2, \pm \ldots \pm j$ ატომის სრული ენერგია კი გამოისახება ფორმულით

$$W_{nljm_j} = E_{nl} + (\hbar\Omega)\, g m_j. \tag{98,20}$$

იმის გამო, რომ m_j იღებს $(2j+1)$ მნიშვნელობას, თითოეული ენერგეტული 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 ელექტრონის $m_j \neq 0$.

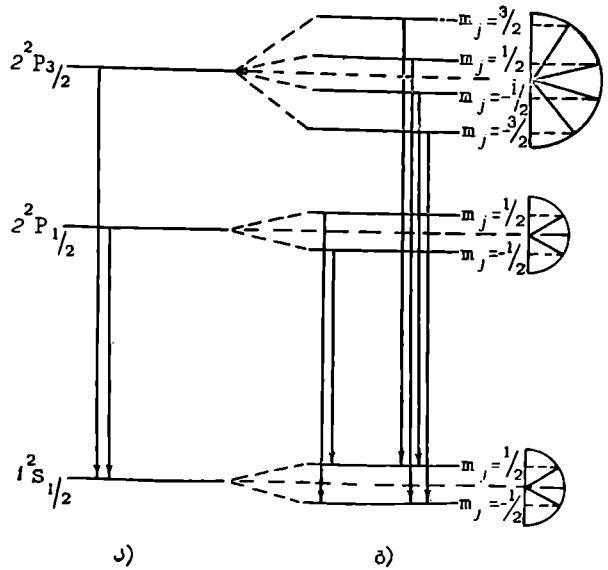
იმის მიხედვით, თუ სპინი როგორაა მიმართული ორბიტალური მომენტის მიმართ პარალელურად თუ ანტიპარალელურად, ლანდეს მამრავლისათვის გვექნება

$$g_+ = \frac{2(l+1)}{2l+1}, \quad j = l + 1/2 \tag{98,20'}$$

და

$$g_{-}=\frac{2l}{2l+1}, \quad j=|l-1/2|$$

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 ($l=1$) გაიხლიჩება 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 დუბლეტს $2^2p_{1/2}$ და $2^2p_{3/2}$, ხოლო $2s$ დონე, რადგან j-სთვის გვაქვს მხოლოდ ერთი შესაძლო მნიშვნელობა $j=0+1/2=1/2$, არ გაიხლიჩება; 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 მოდებული, მაშინ ადგილი აქვს გაუგვარებას, მომენტის ორიენტაციები ერთმანეთს ემთხვევა. ბ) შემთხვევაში კი გარეშე ველი გვაქვს, იგი ურევს ნომენტის ორიენტაციის გაღ-გაურების მიხსნას.

ორი ერთმანეთთან ძალიან ახლოს მდებარე სპექტრალური ხაზი. მოვათავსოთ ატომი სუსტ მაგნიტურ ველში და გამოვარკვიოთ, რამდენი ახალი სპექტრალური ხაზი გაჩნდება. ამ მიზნით წინასწარ გამოვთვალოთ ლანდეს მამრაველი ყველა დონისათვის. თანახმად (9ბ,20) ფორმულისა, გვექნება

$$\left.\begin{aligned} p_{3/2}\ \text{დონე};\ l=1,\ j=1+1/2=3/2,\ g_+=\frac{4}{3} \\ p_{1/2}\ \text{დონე};\ l=1,\ j=1-1/2=1/2,\ g_-=\frac{2}{3} \\ s_{1/2}\ \text{დონე};\ l=0,\ j=0+1/2=1/2,\ g_+=2 \end{aligned}\right\} \tag{98,21}$$

(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 შეუშფოთებელი ატომის ენერგეტიკული დონისაგან შესაბამისად დაშორებული იქნება სიდიდეებით

$$E_{3/2,-3/2}=-2\hbar\Omega,\ E_{3/2,-1/2}=-\frac{2}{3}\hbar\Omega,$$
$$E_{3/2,1/2}=\frac{2}{3}\hbar\Omega,\ E_{3/2,3/2}=2\hbar\Omega \tag{98,22}$$

$p_{1/2}$ დონე გაიხლიჩება ორ დონედ ($m_j=+1/2,\ -1/2$). ენერგიისათვის გვექნება

$$E_{1/2,-1/2}=-\frac{1}{3}\hbar\Omega,\ E_{1/2,1/2}=\frac{1}{3}\hbar\Omega. \tag{98,23}$$

დაბოლოს $s_{1/2}$ დონეც გაიხლიჩება ორად ($j=1/2,\ m_j=\pm 1/2$). ენერგიისათვის გვექნება

$$E_{1/2,-1/2}=-\hbar\Omega,\quad E_{1/2,1/2}=\hbar\Omega. \tag{98,24}$$

ეს უკანასკნელი შეესაბამება, სწორედ, შტერნისა და ჰერლახის s-დონის იმ გახლეჩას, რამაც განაპირობა ელექტრონის სპინის აღმოჩენა. (გავიხსენოთ, რომ $E_{1/2\pm 1/2}=\pm\hbar\Omega=\pm M_B\mathscr{H}$). თუ შევადგენთ სხვადასხვა დონეთა შესაბამის ენერგიათა სხვაობებს და გავუყოფთ $\hbar$ მუდმივზე, ვიპოვით შესაბამისი გადასვლის სპექტრალური ხაზების 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 „sl“ ურთიერთქმედებასთან შედარებით. ამ შემთხვევაში გარეშე ველი სპობს კავშირს $\mathbf{s}$, $\mathbf{l}$ და $\mathbf{j}$ ვექტორებს შორის. როგორც $\mathbf{l}$ ისე $\mathbf{s}$ დამოუკიდებელია და რადგან ამ დროს სპინ-ორბიტალური ურთიერთქმედება შეგვიძლია უგულებელვყოთ, $\mathbf{s}^2$, $\mathbf{l}^2$ და მათი z-პროექციები მოძრაობის ინტეგრალები იქნება. $\mathbf{s}$ და $\mathbf{l}$ ვექტორებს შორის კავშირის გაწყვეტა შეგვიძლია აგხსნათ იმ გარემოებით, რომ $\mathbf{s}$ ვექტორი ორჯერ უფრო სწრაფად ბრუნავს $\mathscr{H}$-ის ირგვლივ, ვიდრე $\mathbf{l}$-ვექტორი. რადგან გარეშე ველი ძლიერია სპინ-ორბიტალურ ურთიერთქმედებასთან შედარებით, ამიტომ $\hat{H}_{sl}$ წევრი (98,9)-ში შეგვიძლია გადავაგდოთ და შეშფოთებად განვიხილოთ (98,13) გამოსახულება, რომელიც იმის გამო, რომ ორბიტალური და სპინური მომენტები ცალ-ცალკე ინახება, ასე უნდა გადავწეროთ:

$$\hat{H}'=\Omega(\hat{l}_z+2\hat{s}_z). \tag{98,25}$$

ენერგიის შესწორების მოსაძებნად საჭიროა ამ გამოსახულების დიაგონალური მატრიცული ელემენტების პოვნა შეუშფოთებელი $\hat{H}_0$ ჰამილტონიანის საკუთარი ფუნქციების მიხედვით. რამდენადაც ინახება როგორც l_z, ისე s_z გვექნება

$$E=\Omega(l_z+2s_z), \tag{98,26}$$

ამგვარად, ენერგია განისაზღვრება ორბიტალური და სპინური მომენტების პროექციებით მაგნიტური ველის გასწვრივ. რადგან $l_z=m\hbar$ და $s_z=m_s\hbar$ ამიტომ

$$\begin{aligned} E&=\hbar\Omega\,(m+1), \quad m_s=1/2.\\ E&=\hbar\Omega\,(m-1). \quad m_s=-1/2. \end{aligned} \tag{98,27}$$

სრული ენერგია კი გამოიხატება ფორმულებით:

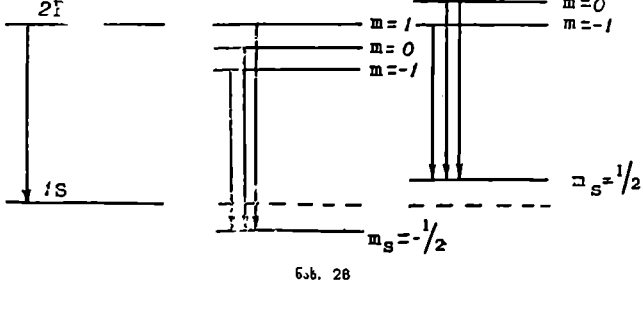
$$\begin{aligned} W_{nlm}&=E_{nl}+\hbar\Omega\,(m+1),\\ W_{nlm}&=E_{nl}+\hbar\Omega\,(m-1). \end{aligned} \tag{98,28}$$

თუ გამოვიყენებთ ბორის სიხშირეთა პირობას, როგორც $m_s=1/2$, ისე $m_s=-1/2$ შემთხვევისათვის, გვექნება

$$\omega_{n'l'm';\,nlm}=\omega_0+\Omega\Delta m. \tag{98,29}$$

$E1$ გადასვლისათვის $\Delta m=0,\ \pm 1$, ამიტომ მივიღებთ

$$\omega_0-\Omega,\ \omega_0,\ \omega_0+\Omega. \tag{98,30}$$



ნახ. 28

სპექტრალურ სიხშირეებს. ე. ი. ჩვენ მივიღეთ ზუსტად ის შემთხვევა, რომელიც გვქონდა ამ პარაგრაფის დასაწყისში. აქედან უნდა დავასკვნათ, რომ ზეემანის ნორმალურ ეფექტს ადგილი 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 — რთულიც და მარტივიც, ერთდროულად ხდებოდეს. ზემოთქმულის თანახმად, თუ მოვახდენთ იმ ველის გაზრდას, რომელიც იწვევს ზეემანის რთულ ეფექტს, მაშინ რთული ეფექტი გადავა მარტივში. ამ მოვლენას პაშენ-ბაკის 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. გამოვარკვიოთ 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 $\mathscr{H}$-ის ტოლია.

გარეშე მაგნიტური ველი ურთიერთქმედებს ატომის მაგნიტურ მომენტებთან. ეს ურთიერთქმედება, როცა სპინ-ორბიტალური წევრი 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

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_{sl} + \Omega(\hat{l}_z + 2\hat{s}_z). \tag{99,1}$$

ამ გამოსახულებაში $\hat{H}_0$ ოპერატორი არ შეიცავს არც სპინსა და არც გარეშე მაგნიტურ ველთან დაკავშირებულ წევრებს. როგორც ვიცით, ერთგვაროვანი მაგნიტური ველის შემთხვევაში $\mathbf{A} = \frac{1}{2}[\vec{\mathscr{H}}\,\mathbf{r}]$, ამიტომ [1]

$$\frac{e}{\mu c}(\hat{\mathbf{A}}\mathbf{p}) = \frac{e\mathscr{H}}{2\mu c}\hat{l}_z \tag{99,2}$$

და, მაშასადამე, (99,1) ჰამილტონიანში $\Omega\hat{l}_z$ წევრი გამოწვეულია $\frac{e}{\mu c}(\hat{\mathbf{A}}\mathbf{p})$ წევრისაგან, რაც შეეხება $\mathbf{A}^2$-ის შემცველ წევრს იგი უგულებელყოფილია. ეს წევრი მართლაც მცირეა (99,2)-თან შედარებით, მაგრამ $\mathbf{A}^2$-ის შემცველი წევრი, როგორც ქვემოთ დავინახავთ, აპირობებს დიამაგნიტიზმის მოვლენას, ამიტომ მისი განხილვა აუცილებელია. რადგან $\mathbf{A} = \frac{1}{2}[\vec{\mathscr{H}} \times \mathbf{r}]$ და $\vec{\mathscr{H}}$ მიმართულია z-ღერძის გასწვრივ, ამიტომ

$$A_x = -\frac{1}{2}y\mathscr{H}, \quad A_y = \frac{1}{2}x\mathscr{H}, \quad A_z = 0 \tag{99,3}$$

და $\frac{e^2}{2\mu c^2}\mathbf{A}^2$ წევრი მიიღებს სახეს

$$\frac{e^2\mathscr{H}^2}{8\mu c^2}(x^2 + y^2). \tag{99,4}$$

ამგვარად, ჰამილტონის ოპერატორს $\mathbf{A}^2$ წევრის გათვალისწინებით ექნება გამოხატულება:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_{sl} + \Omega(\hat{j}_z + \hat{s}_z) + \frac{e^2\mathscr{H}^2}{8\mu c^2}(x^2 + y^2). \tag{99,5}$$

[1] იხ. § 66.

ატომის მაგნიტური მომენტის z-პროექცია განისაზღვრება ფორმულით

$$M_z = -\frac{\partial \hat{H}}{\partial \mathscr{H}}. \tag{99,6}$$

ხოლო მაგნიტური ამთვისებლობა ტოლია გამოსახულების

$$\chi = \frac{\partial \overline{M}_z}{\partial \mathscr{H}}, \tag{99,7}$$

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 $\mathscr{H}$-ის მხოლოდ პირველი ხარისხის შემცველი წევრი. მაშინ ჰამილტონიანი ისეთივე იქნება, რაც გვქონდა ზეემანის რთული ეფექტის განხილვის დროს. ჩვენ ვაჩვენეთ, რომ ზეემანის ეფექტის შედეგად, ატომის ენერგია იცვლება სიდიდით

$$E_{jm_j} = \hbar \Omega g m_j, \tag{99,8}$$

სადაც g არის ლანდეს მამრავლი. რადგან m_j იღებს $(2j+1)$ მნიშვნელობას, ამიტომ გარეშე ველში ატომს ექნება სხვადასხვა ენერგია. თუ გავიხსენებთ, რომ $M_B = \frac{e\hbar}{2\mu c}$ წარმოადგენს ბორის მაგნიტონს და შემოვიღებთ აღნიშვნას

$$\beta = M_B g, \tag{99,9}$$

მაშინ ენერგიისათვის მივიღებთ

$$E_{jm_j} = \beta m_j \mathscr{H}. \tag{99,10}$$

ამგვარად, ატომის მაგნიტური მომენტის z-პროექციის როლს ასრულებს სიდიდე

$$M_z = -\beta m_j = -M_B g m_j. \tag{99,11}$$

ბოლცმანის კანონის თანახმად, ალბათობა იმისა, რომ ატომი T აბსოლუტურ ტემპერატურაზე შეგეხვედება მდგომარეობაში, რომლის მომენტის პროექცია მაგნიტური ველის გასწვრივ ტოლია $m_j\hbar$-ისა, გამოისახება ფორმულით

$$w(m_j) = Ae^{-\frac{\beta m_j \mathscr{H}}{kT}} \tag{99,12}$$

სადაც $k = 1{,}36\ 10^{-16}$ ერგი/გრ წარმოადგენს ბოლცმანის მუდმივს, A კი ნორმირების კოეფიციენტია. ამის შემდეგ ადვილია მომენტის საშუალო მნიშვნელობის მონახვა ველის გასწვრივ; გვექნება

$$\overline{M}_z = -\overline{\beta m_j} = -\frac{\sum_{m_j=-j}^{+j} \beta m_j e^{-\beta m_j \mathscr{H}/kT}}{\sum_{m_j=-j}^{+j} e^{-\beta m_j \mathscr{H}/kT}}, \tag{99,13}$$

რომელიც ასეც შეგვიძლია გადავწეროთ:

$$\overline{M}_z = kT \frac{\partial}{\partial \mathcal{H}} \ln \sum_{m_j=-j}^{+j} e^{-\frac{\beta m_j \mathcal{H}}{kT}} \tag{99,14}$$

მოვახდინოთ აჯამვა. ამ მიზნით შემოვიღოთ აღნიშვნა $\varepsilon = e^{-\beta \mathcal{H}/kT}$, მაშინ გვექნება

$$\sum_{m_j=-j}^{+j} \varepsilon^{m_j} = \varepsilon^{-j} + \varepsilon^{-(j+1)} + \ldots + \varepsilon^{j-1} + \varepsilon^{j} = \frac{\varepsilon^{j+1} - \varepsilon^{-j}}{\varepsilon - 1}, \tag{99,15}$$

რამდენადაც ეს ჯამი წარმოადგენს გეომეტრიულ პროგრესიას ε მნიშვნელით. ამგვარად, თუ დავუბრუნდებით ძველ სიდიდეებს, გვექნება

$$\sum_{m_j=-j}^{+j} \varepsilon^{m_j} = \frac{\operatorname{sh}\left[(2j+1)\frac{\beta \mathcal{H}}{2kT}\right]}{\operatorname{sh}\left(\frac{\beta \mathcal{H}}{2kT}\right)}. \tag{99,16}$$

მაშასადამე, მომენტის საშუალო მნიშვნელობისათვის მივიღებთ

$$\overline{M}_z = kT \frac{\partial}{\partial \mathcal{H}} \ln \frac{\operatorname{sh}\left[(2j+1)\frac{\beta \mathcal{H}}{2kT}\right]}{\operatorname{sh}\left(\frac{\beta \mathcal{H}}{2kT}\right)}, \tag{99,17}$$

გაწარმოების შემდეგ საბოლოოდ გვექნება

$$\overline{M}_z = \frac{\beta}{2}\left\{(2j+1)\operatorname{cth}\left[(2j+1)\frac{\beta \mathcal{H}}{2kT}\right] - \operatorname{cth}\left(\frac{\beta \mathcal{H}}{2kT}\right)\right. \tag{99,18}$$

ეს ფორმულა ასეც გადაიწერება:

$$\overline{M}_z = j g \mu_B B_j\left(\frac{\beta \mathcal{H}}{2kT}\right), \tag{99,19}$$

სადაც

$$B_j(x) = \frac{1}{2j}\left\{(2j+1)\operatorname{cth}\left[(2j+1)\frac{x}{2j}\right] - \operatorname{cth}\left(\frac{x}{2j}\right)\right\}, \tag{99,20}$$

ხოლო

$$x = \frac{\beta \mathcal{H}}{kT} j; \tag{99,21}$$

$B_j(x)$ ს ლანჟევენის კვანტურ 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.

გამოვარკვიოთ რა სახე აქვს ბრილუენის ფუნქციას კონკრეტულ შემთხვევებში. ავიღოთ $j = 1/2$, მაშინ

$$B_{1/2}(x) = 2\operatorname{cth} 2x - \operatorname{cth} x = 2\frac{\operatorname{ch} 2x}{\operatorname{sh} 2x} - \frac{\operatorname{ch} x}{\operatorname{sh} x} = \frac{\operatorname{ch} 2x - \operatorname{ch}^2 x}{\operatorname{sh} x \operatorname{ch} x} = \operatorname{th} x; \tag{99,22}$$

ამგვარად,

$$B_{1/2}(x)=\operatorname{th} x. \tag{99,23}$$

მაქსიმალური მნიშვნელობა j-სი შეიძლება იყოს უსასრულობა; ამ ზღვრულ შემთხვევაში მივიღებთ ლანჟევენის კლასიკურ ფუნქციას

$$B_{\infty}(x)=\operatorname{cth} x-\frac{1}{x}. \tag{99,24}$$

ხოლო, როცა $x\gg 1$, მაშინ $B_j(\infty)=1$. როცა $x\ll 1$, მაშინ $\operatorname{cth} x$ შეგვიძლია გაშალოთ მწკრივად და შევინარჩუნოთ პირველი ორი წევრი

$$\operatorname{cth} x=\frac{1}{x}+\frac{x}{3}+\dots+. \tag{99,25}$$

ამის მიხედვით (99,20) მიიღებს სახეს

$$B_j(x)=\frac{j+3}{3}x. \tag{99,26}$$

პრაქტიკულად ყოველთვის $x=\dfrac{\beta\mathscr{H}}{2kT}\ll 1$ (მცირე გარეშე ველები), ამიტომ (99,19) ფორმულის თანახმად, გვექნება

$$\overline{M}_z=\frac{j(j+1)\beta^2\mathscr{H}}{3kT}=\frac{j(j+1)g^2M_B^2e\mathscr{H}}{3kT} \tag{99,27}$$

როგორც ვხედავთ, $\overline{M}_z$ მიმართულია მაგნიტური ველის გასწვრივ. მაშასადამე, გვაქვს პარამაგნიტიზმის მოვლენა. (99,7) ფორმულის ძალით პარამაგნიტური ამთვისებლობისათვის მივიღებთ

$$\chi_{\text{პარა}}=\frac{j(j+1)M_B^2g^2}{3kT}. \tag{99,28}$$

ატომის მაგნიტური მომენტის როლს ასრულებს სიდიდე

$$M_Bg\sqrt{j(j+1)}=\frac{e\hbar}{2\mu c}\sqrt{j(j+1)}\,g, \tag{99,29}$$

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) ჰამილტონიანის ბოლო წევრი. ამ წევრის შესაბამისი მაგნიტური მომენტი (99,6) განმარტების თანახმად ტოლი იქნება

$$M_d=-\frac{e^2\mathscr{H}}{4\mu c^2}(x^2+y^2). \tag{99,30}$$

ინდუცირებული მომენტის საშუალო მნიშვნელობისათვის გვექნება

$$\overline{M}_d=-\frac{e^2\mathscr{H}}{4\mu c^2}\overline{(x^2+y^2)}. \tag{99,31}$$

როგორც ვხედავთ, ეს მომენტი ყოველთვის ველის საწინააღმდეგოდ არის მიმართული და, მაშასადამე, აპირობებს დიამაგნიტიზმს. დიამაგნიტური ამთვისებლობა კი ტოლი იქნება

$$\chi_d = -\frac{e^2}{4\mu c^2}\overline{(x^2+y^2)}. \qquad (99{,}32)$$

(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 ადგილი აქვს ყველა ატომში. აგვილი დასანახია, რომ სიდიდით დიამაგნიტიზმი გაცილებით მცირეა პარამაგნიტიზმზე. მართლაც, სიდიდის რიგით ინდუცირებული მაგნიტური მომენტი, რომელიც იწვევს პარამაგნიტიზმს, ტოლია $\overline{M} \sim M_\beta = \frac{e\hbar}{2\mu c}$, ხოლო $\overline{M}_d \sim \frac{e^2 \mathscr{H}}{2\mu c^2} a_0^2$, სადაც a_0 ატომის ზომაა. აშკარაა, რომ $\overline{M} \gg M_d$ ყოველთვის, როცა გარეშე ველის დაძაბულობა აკმაყოფილებს პირობას

$$\mathscr{H} \ll \frac{\hbar c}{e^2}\,\frac{e}{a_0^2} = 137\,\frac{e}{a_0^2}. \qquad (99{,}33)$$

რადგან $a_0 \sim 10^{-8}$ სმ, ამიტომ უკანასკნელი ტოლობა პრაქტიკულად ყოველთვის დაცულია. ამგვარად, ერთელექტრონიანი ატომების დიამაგნიტიზმი შეგვიძლია არ განვიხილოთ. სულ სხვა მდგომარეობა გვექნება მრავალელექტრონიანი ატომების შემთხვევაში. შემდგომში დავინახავთ, რომ ელექტრონთა ლეწი რიცხვის მქონე ატომებისათვის პარამაგნიტიზმი შეიძლება არ გვქონდეს, მაშინ დიამაგნიტიზმის მოვლენა არსებით როლს შეასრულებს.

სავარჯიშო მაგალითები

1. ვიპოვოთ წყალბადისებური ატომის კვადრუპოლური მომენტი ელექტრონის სპინის გათვალისწინებით.

ა მ ო ხ ს ნ ა. (84,12) და (84,21) ფორმულებს თანახმად წყალბადისებური ატომის კვადრუპოლური მომენტი ტოლი იქნება

$$Q_0(n, j, m_j) = -e\,\langle nl \mid r^2 \mid nl\rangle\,\langle jm_j \mid 3\cos^2\Theta - 1 \mid jm_j\rangle,$$

სადაც

$$\langle jm_j \mid 3\cos^2\Theta - 1 \mid jm_j\rangle = \int \mathscr{Y}^*_{l\,1/2\,jm_j}(\theta,\varphi)\,[3\cos^2\Theta - 1]\,\mathscr{Y}_{l\,1/2\,jm_j}(\theta,\varphi)\,d\Omega,$$

ხოლო $\langle nl \mid r^2 \mid nl\rangle$ წარმოადგენს r^2-ის საშუალო მნიშვნელობას რადიალური ფუნქციების მიხედვით. მისი ცხადი სახე განისაზღვრება (84,25) ფორმულით.

(50,26) ფორმულის მიხედვით შეგვიძლია დავწეროთ

$$\left|\mathscr{Y}^{l\pm 1/2,\,m_j}_{l,\,1/2}\right|^2 = \frac{1}{2l+1}\left\{\left(l+\frac{1}{2}\pm m_j\right)\left|Y_{l,m_j-1/2}\right|^2 + (l+1/2\mp m_j)\left|Y_{lm_j+1/2}\right|^2\right\}.$$

რადგან (82,23)-ის თანახმად

$$\langle lm \mid 3\cos^2\Theta - 1 \mid lm\rangle = \frac{2l\,(l+1) - 6m^2}{(2l-1)\,(2l+3)},$$

ამიტომ

$$Q_0(n, l\pm 1/2, m_j) = \frac{\langle nl \mid r^2 \mid nl\rangle}{2l+1}\left\{(l+1/2\pm m_j)\,\frac{2l\,(l+1) - 6(m_j - 1/2)^2}{(2l-1)\,(2l+3)} + \right.$$

$$\left. + \left(l+\frac{1}{2}\mp m_j\right)\frac{2l(l+1) - 6(m_j+1/2)^2}{(2l-1)\,(2l+3)}\right\}$$

ეს უკანასკნელი გამარტივების შემდეგ ასეც შეგვეძლია გადავწეროთ:

$$Q_0(n, l\pm 1/2, m_j) = (nl \mid r^2 \mid nl)\,\frac{2l(l+1) - 6(m_j^2+1/4) \pm \dfrac{12}{2l+1}\, m_j^2}{(2l-1)(2l+3)}. \qquad (95,1)$$

ამ გამოსახულებიდან გამოვრიცხოთ l კვანტური რიცხვი j კვანტური რიცხვის საშუალებით, მაშინ მივიღებთ საკმარისად მარტივ გამოსახულებას

$$Q_0(n, j, m_j) = \frac{1}{2}(nl \mid r^2 \mid nl)\left[1 - \frac{3m_j^2}{j(j+1)}\right], \qquad (95,2)$$

როცა $j=1/2$, მაშინ როგორც მოსალოდნელი იყო $Q_0(n, 1/2, \pm 1/2)=0$.

2. ეიპოთ ნახევარსპინიანი თავისუფალი ნაწილაკის ტალღური ფუნქცია განსაზღვრული j^2 და j_z-ით.

ა მ ო ხ ს ნ ა. რადგან $\hat{j}^2$ და $\hat{j}_z$ ოპერატორების საერთო საკუთარ ფუნქციას წარმოადგენს $\mathscr{Y}_l^{jm_j}{}_{1/2}(\theta, \varphi)$ ფუნქცია, ამიტომ საძიებელ ტალღურ ფუნქციას ექნება სახე

$$\psi_l^{jm_j}{}_{1/2}(r) = R_l(r)\,\mathscr{Y}_l^{jm_j}{}_{1/2}(\theta, \varphi). \qquad (95,3)$$

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 შეგვეძლია ვანორმიროთ პირობით

$$\int_0^\infty R_l^*(k', r)\, R_l(k, r)\, r^2\, dr = \frac{\delta(k-k')}{kk'},$$

სრულიად ანალოგიურად იმისა, რაც გვქონდა § 54-ში, მივიღებთ $A_l = \left(\dfrac{2}{\pi}\right)^{1/2}$ ამგვარად, საძიებელ ფუნქციას ექნება სახე

$$\psi_{l,\,1/2}^{jm_j}(r) = \sqrt{\frac{2}{\pi}}\, j_l(kr)\,\mathscr{Y}_{l,\,1/2}^{jm_j}(\theta, \varphi). \qquad (95,4)$$

ან, თუ გამოვიყენებთ (50,26) გამოსახულებას, ეს ფუნქცია ასეც შეგვეძლია გადავწეროთ:

$$\psi_{l,\,1/2}^{l\pm 1/2,\; m_j}(r) = \frac{\sqrt{\dfrac{2}{\pi}}\, j_l(kr)}{\sqrt{2l+1}} \begin{pmatrix} \sqrt{l+1/2 \pm m_j}\; Y_{l,\,m_j-1/2} \\ \mp\sqrt{l+1/2 \mp m_j}\; Y_{l m_j+1/2} \end{pmatrix} \qquad (95,5)$$

ზედა ნიშანი აიღება $j=(l+1/2)$-სათვის ქვედა $j=|l-1/2|$-სათვის.

თავი XIII

მრავალი ნაწილაკისაგან შედგენილი სისტემები

აქამდე ჩვენ ვიხილავდით ერთი ნაწილაკის მოძრაობას, მაგრამ უფრო ხშირად საქმე გვაქვს მრავალი ნაწილაკისაგან შედგენილ მიკროსისტემებთან, ამიტომ მეტად მნიშვნელოვანია ასეთი სისტემების კვანტურ-მექანიკური თვალსაზრისით განხილვა. არჩევენ ორი ტიპის მიკროსისტემებს. ერთია ისეთი სისტემა, რომელიც შედგება იგივური ნაწილაკებისაგან და მეორე, რომელიც შედგება სხვადასხვა ნაწილაკისაგან. იგივურ ნაწილაკთა სისტემას მთელი რიგი პრინციპულად განსხვავებული თვისებები გააჩნია და ამიტომ მას სპეციალურად განვიხილავთ § 102-ში. კვანტური 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 s_k — ამ ნაწილაკის სპინური ცვლადი. როცა ნაწილაკის სპინს მხედველობაში არ ვიღებთ, მაშინ სისტემის ტალღური ფუნქცია N რადიუსვექტორზე იქნება დამოკიდებული. ე. ი.

$$\psi = \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots \mathbf{r}_N; t). \tag{100,1}$$

ეს ფუნქცია წარმოადგენს შრედინგერის განტოლების ამონახსნს. ამასთან, შრედინგერის განტოლებას ექნება სახე

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots \mathbf{r}_N; t) = \hat{H}\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots \mathbf{r}_N; t), \tag{100,2}$$

სადაც $\hat{H}$ არის სისტემის ჰამილტონიანი, რომლის სახის დადგენა, თუ ვისარგებლებთ ნაწილაკთა სისტემის კლასიკური მექანიკის ჰამილტონიანით, არაა ძნელი კვანტური მექანიკის ძირითად ჰიპოთეზაზე დაყრდნობით. კლასიკურ ჰამილტონის ფუნქციას N ნაწილაკის სისტემისათვის აქვს გამოხატულება

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^{N} H_i + \sum_{i \neq k=1}^{N} U_{ik}(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_k), \tag{100,3}$$

სადაც

$$H_i = \frac{\mathbf{p}_i^2}{2m_i} + V_i(\mathbf{r}_i; t). \tag{100,4}$$

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 ჰიპოთეზის 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:

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^{N} \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m_i}\Delta_i + V_i(\mathbf{r}_i, t) \right\} + \sum_{i \neq k=1}^{N} U_{ik}(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_k), \tag{100,5}$$

სადაც

$$\Delta_i = \nabla_i^2 = \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_i^2} + \frac{\partial^2}{\partial z_i^2} \tag{100,6}$$

არის i-ური ნაწილაკის კოორდინატების შესაბამისი ლაპლასის ოპერატორი.

გამოვარკვიოთ ტალღური ფუნქციის ფიზიკური შინაარსი. ამისათვის გამოვიყენოთ უწყვეტობის განტოლება. ავიღოთ (10′,2) განტოლების კომპლექსურად შეუღლებული

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi^*(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots \mathbf{r}_N; t) = \hat{H}\psi^*(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots \mathbf{r}_N; t). \tag{100,7}$$

(100,2) განტოლება მარცხნიდან გავამრავლოთ ψ^*-ზე, (100,7) კი ψ-ზე და პირველს გამოვაკლოთ მეორე. (100,5) გამოსახულების გათვალისწინებით მივიღებთ:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi^*(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots \mathbf{r}_N; t)\, \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N; t) =$$

$$= \frac{\hbar^2}{2} \sum_{i=1}^{N} \frac{1}{m_i} [\psi^* \Delta_i \psi - \psi \Delta_i \psi^*]; \tag{100,8}$$

თუ შემოვიღებთ აღნიშვნებს:

$$w(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N; t) = \psi^*(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots \mathbf{r}_N; t)\, \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots \mathbf{r}_N; t) \tag{100,9}$$

$$\mathbf{J}_k = \frac{i\hbar}{2m_k} [\psi \nabla_k \psi^* - \psi^* \nabla_k \psi], \tag{100,10}$$

მაშინ მივიღებთ უწყვეტობის განტოლებას

$$\frac{\partial w(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots \mathbf{r}_N; t)}{\partial t} + \sum_{i=1}^{N} \operatorname{div}_{(i)} \mathbf{J}_i = 0, \tag{100,11}$$

სადაც (i) ინდექსი მიუთითებს, რომ დივერგენცია აიღება i-ური ნაწილაკის შესაბამისი ცვლადებით. როგორც ვხედავთ $w = \psi^*\psi$ შეგვიძლია განვიხილოთ, როგორც ნაწილაკთა სისტემის მდებარეობის ალბათობის სიმკვრივე. კერძოდ,

$$w(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots \mathbf{r}_N; t)\, d\mathbf{r}_1, \dots d\mathbf{r}_N = |\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots \mathbf{r}_N; t)|^2\, d\mathbf{r}_1\, d\mathbf{r}_2, \dots d\mathbf{r}_N \tag{100,12}$$

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:

$$w(\mathbf{r}_k, t) = \int w(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots \mathbf{r}_N; t)\, d\mathbf{r}_1\, d\mathbf{r}_2, \dots d\mathbf{r}_{k-1}\, d\mathbf{r}_{k+1}, \dots d\mathbf{r}_N \qquad (100,13)$$

თუ (100,12) გამოსახულების ინტეგრაციას მოვახდენთ ყველა ცვლადით, გარდა $d\mathbf{r}_i$ და $d\mathbf{r}_k$-სი, მივიღებთ

$$w(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_k; t)\, d\mathbf{r}_i\, d\mathbf{r}_k =$$

$$= \left\{ \int w(\mathbf{r}_1 \mathbf{r}_2, \dots \mathbf{r}_N; t)\, d\mathbf{r}_1, \dots d\mathbf{r}_{i-1}\, d\mathbf{r}_{i+1}, \dots d\mathbf{r}_{k-1}\, d\mathbf{r}_{k+1}, \dots d\mathbf{r}_N \right\} d\mathbf{r}_i\, d\mathbf{r}_k, \qquad (100,14)$$

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

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots \mathbf{r}_N; t)\, \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots \mathbf{r}_N; t)\, d\mathbf{r}_1\, d\mathbf{r}_2, \dots d\mathbf{r}_N = 1. \qquad (100,15)$$

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 ვიპოვით ყველა იმ ოპერატორის საკუთარ მნიშვნელობებს, რომლებიც გადასმადი არიან $\hat{H}$-თან და ერთმანეთთან. რაც შეეხება არაკომუტატური ოპერატორების შესაბამის ფიზიკურ სიდიდეებს, მათ ψ-თი დახასიათებულ მდგომარეობაში გარკვეული მნიშვნელობები არა აქვთ, მაგრამ ჩვენ შეგვიძლია ვიპოვოთ მათი საშუალო მნიშვნელობები, რომლებიც ასე განისაზღვრებიან:

$$\langle A \rangle = \int \psi^*(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots \mathbf{r}_N; t)\, \hat{A} \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots \mathbf{r}_N; t)\, d\mathbf{r}_1, \dots d\mathbf{r}_N. \qquad (100,16)$$

აღვნიშნოთ, რომ ნაწილაკთა სისტემის შრედინგერის განტოლების ამოხსნის საკითხი დიდ პრინციპულ და ტექნიკურ სიძნელეებს აწყდება. 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. ვიგულისხმოთ, რომ მდგომარეობა სტაციონარულია, მაშინ შრედინგერის განტოლებას ექნება შემდეგი სახე:

$$\hat{H} \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots \mathbf{r}_N) = E \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots \mathbf{r}_N), \qquad (100,17)$$

სადაც E არაურთიერთქმედ ნაწილაკთა სისტემის სრული ენერგიაა, ხოლო ჰამილტონის ოპერატორს აქვს გამოხატულება

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^{N} \hat{H}_i(\mathbf{r}_i) = \sum_{i=1}^{N} \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m_i} \Delta_i + V_i(\mathbf{r}_i) \right\}. \qquad (100,18)$$

რადგან ჰამილტონიანში ცვლადები განცალებულია, ამიტომ (100,17) განტოლების ამოხსნა ადვილია ფურიეს მეთოდით. მართლაც, ამონახსნი ვეძებოთ შემდეგი ნამრავლის სახით:

$$\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots \mathbf{r}_N) = \psi_1(\mathbf{r}_1)\,\psi_2(\mathbf{r}_2), \dots \psi_N(\mathbf{r}_N). \qquad (100,19)$$

შევიტანოთ ეს ნამრავლი (100,17) განტოლებაში და შედეგი გავყოთ ამავე ფუნქციაზე; მივიღებთ

$$\sum_{i=1}^{N} \frac{1}{\psi_i(\mathbf{r}_i)} \left[-\frac{\hbar^2}{2m_i} \Delta_i + V_i(\mathbf{r}_i) \right] \psi_i(\mathbf{r}_i) = E \qquad (100,20)$$

ამ ტოლობას ადგილი მაშინ ექნება, როცა

$$-\frac{\hbar^2}{2m_i} \Delta_i \psi_i(\mathbf{r}_i) + V_i(\mathbf{r}_i)\,\psi_i(\mathbf{r}_i) = E_i\,\psi_i(\mathbf{r}_i) \qquad (100,21)$$

ამასთან, დაცული უნდა იყოს პირობა $E = E_1 + E_2 + \dots + E_N$. (100,21)-დან ჩანს, რომ $\psi_i(\mathbf{r}_i)$ აკმაყოფილებს $V_i(\mathbf{r}_i)$ გარეშე ველში მოძრავი i-ური ნაწილაკის შრედინგერის განტოლებას E_i სრული ენერგიით.

ამგვარად, მივიღეთ ასეთი შედეგი: არაურთიერთქმედ ნაწილაკთა სისტემის ტალღური ფუნქცია წარმოადგენს ცალკეულ ნაწილაკთა ტალღური ფუნქციების ნამრავლს, ენერგია კი — ცალკეულ ნაწილაკთა ენერგიების ჯამს, ე. ი.

$$\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots \mathbf{r}_N) = \prod_{i=1}^{N} \psi_i(\mathbf{r}_i), \qquad (100,22)$$

$$E = \sum_{i=1}^{N} E_i. \qquad (100,23)$$

მართალია, როგორც წესი, არაურთიერთქმედ სისტემებთან ჩვენ საქმე არა გვაქვს, მაგრამ ასეთი სისტემის ჩვენს მიერ ზემოთ ნაპოვნი ამონახსნები ხშირად გამოიყენება, როგორც ურთიერთქმედ ნაწილაკთა სისტემის ჰეშმარიტი 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

$$\hat{\mathbf{P}} = \sum_{k=1}^{N} \hat{\mathbf{p}}_k = -i\hbar \sum_{k=1}^{N} \nabla_k, \qquad (101,1)$$

სადაც ∇_k ოპერატორი აღებულია k-ური ნაწილაკის შესაბამისი კოორდინატების მიხედვით.

ვიპოვოთ იმპულსის ოპერატორის საკუთარი ფუნქციები. ამისათვის დავწეროთ განტოლება

$$\hat{\mathbf{P}}\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots \mathbf{r}_N) = \mathbf{P}\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots \mathbf{r}_N). \qquad (101,2)$$

(101,1) ოპერატორის შეტანით დავინახავთ, რომ განტოლებას ისეთი სახე აქვს, როცა ცვლადების განცალება შეიძლება ფურიეს მეთოდით. მართლაც, ამონახსნი ვეძებოთ შემდეგი ნამრავლის სახით:

$$\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \ldots, \mathbf{r}_N) = \prod_{k=1}^{N} \psi_k(\mathbf{r}_k). \tag{101,3}$$

ამ ფუნქციის შეტანით (101,2) განტოლებაში და ამავე ფუნქციაზე გაყოფით მივიღებთ

$$\sum_{k=1}^{N} \frac{\hat{\mathbf{p}}_k \psi_k(\mathbf{r}_k)}{\psi_k(\mathbf{r}_k)} = \mathbf{P}, \tag{101,4}$$

საიდანაც დავასკვნით, რომ

$$\hat{\mathbf{p}}_k \psi_k(\mathbf{r}_k) = \mathbf{p}_k \psi_k(\mathbf{r}_k) \tag{101,5}$$

იმ პირობით, რომ

$$\mathbf{P} = \sum_{k=1}^{N} \mathbf{p}_k \tag{101,6}$$

(101,5) განტოლება ერთი ნაწილაკის (k-ური ნაწილაკის) იმპულსის ოპერატორის საკუთარი ფუნქციებისა და საკუთარი მნიშვნელობების განტოლებაა, მისი ნორმირებული ამონახსნისათვის გვექნება

$$\psi_k(\mathbf{r}_k) = (2\pi\hbar)^{-3/2} e^{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}_k \mathbf{r}_k)} \tag{101,7}$$

(101,3)-ის თანახმად, მთელი სისტემისათვის გვექნება შემდეგი ამონახსნი:

$$\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \ldots \mathbf{r}_N) = (2\pi\hbar)^{-\frac{3N}{2}} e^{\frac{i}{\hbar}\sum_{k=1}^{N} \mathbf{p}_k \mathbf{r}_k} \tag{101,8}$$

ცხადია, რომ ეს ფუნქცია შეგვიძლია განვიხილოთ როგორც არაურთიერთქმედ 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

$$\hat{H} = \sum_{k=1}^{N} \frac{\hat{\mathbf{p}}_k^2}{2m_k} + \sum_{i \neq k=1}^{N} U_{ik}(\mathbf{r}_{ik}); \tag{101,9}$$

ამასთან, რადგან სისტემა იზოლირებულია, ურთიერთქმედების პოტენციალური ენერგია დამოკიდებული იქნება მხოლოდ ნაწილაკთა შორის არსებულ მანძილზე $\mathbf{r}_{ik} = \mathbf{r}_i - \mathbf{r}_k$. დავწეროთ მოძრაობის განტოლება

$$\frac{d\hat{\mathbf{P}}}{dt} = [\hat{H}, \hat{\mathbf{P}}] = -i\hbar \left[\hat{H}, \sum_{k=1}^{N} \nabla_k\right]. \tag{101,10}$$

შევიტანოთ ჰამილტონიანის მნიშვნელობა (101,9) ტოლობიდან და გავითვალისწინოთ, რომ $\hat{\mathbf{P}}$ კომუტატურია კინეტიკური ენერგიის ოპერატორთან, მაშინ

$$\frac{d\hat{\mathbf{P}}}{dt} = -i\hbar \left[\sum_{k,j}^{N} U_{kj},\ \sum_{k=1}^{N} \nabla_k \right] \tag{101,11}$$

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:

$$[U_{kj},\ \nabla_k + \nabla_j]\psi = -\frac{i}{\hbar}\left[(\nabla_k U_{kj})\psi + (\nabla_j U_{kj})\psi\right] =$$

$$= -\frac{i}{\hbar}\left\{\frac{dU_{kj}}{d\mathbf{r}_{kj}} \nabla_k \mathbf{r}_{kj} + \frac{dU_{kj}}{d\mathbf{r}_{kj}} \nabla_j \mathbf{r}_{kj}\right\}\psi \tag{101,12}$$

ეს გამოსახულება კი ნულის ტოლია რამდენადაც $\nabla_k \mathbf{r}_{kj} = -\nabla_j \mathbf{r}_{kj}$. მაშასადამე,

$$\frac{d\mathbf{P}}{dt} = 0 \tag{101,13}$$

ე. ი. იზოლირებული სისტემის იმპულსი მართლაც ინახება.

სისტემის მომენტი. თუ k-ური ნაწილაკის დეკარტის კოორდინატებს აღვნიშნავთ x_k, y_k, z_k-თი, მაშინ ორბიტალური მომენტის ოპერატორებს, როგორც ვიცით, ექნება სახე:

$$\hat{l}_x^k = \frac{\hbar}{i}\left(y_k \frac{\partial}{\partial z_k} - z_k \frac{\partial}{\partial y_k}\right),$$

$$\hat{l}_y^k = \frac{\hbar}{i}\left(z_k \frac{\partial}{\partial x_k} - x_k \frac{\partial}{\partial z_k}\right), \tag{101,14}$$

$$\hat{l}_z^k = \frac{\hbar}{i}\left(x_k \frac{\partial}{\partial y_k} - y_k \frac{\partial}{\partial x_k}\right).$$

ამ მდგენელებით განსაზღვრული ვექტორი იქნება k-ური ნაწილაკის ორბიტალური მომენტის ვექტოროპერატორი. შემოვიღოთ სამი ახალი ოპერატორი:

$$\hat{L}_x = \sum_{k=1}^{N} \hat{l}_x^k; \quad \hat{L}_y = \sum_{k=1}^{N} \hat{l}_y^k; \quad \hat{L}_z = \sum_{k=1}^{N} \hat{l}_z^k. \tag{101,15}$$

ამ ოპერატორებით განსაზღვრულ ვექტოროპერატორს $\hat{\mathbf{L}}(\hat{L}_x, \hat{L}_y, \hat{L}_z)$ 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

$$\hat{L}_x\hat{L}_y - \hat{L}_y\hat{L}_x = i\hbar\hat{L}_z,$$

$$\hat{L}_y\hat{L}_z - \hat{L}_z\hat{L}_y = i\hbar\hat{L}_x, \tag{101,16}$$

$$\hat{L}_z\hat{L}_x - \hat{L}_x\hat{L}_z = i\hbar\hat{L}_y$$

ანდ, მოკლედ,

$$[\hat{L}_\alpha,\ \hat{L}_\beta] = -\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}\hat{L}_\gamma. \tag{101,17}$$

აღნიშნული სამი ოპერატორიდან ჩვენ შეგვიძლია შევადგინოთ ოპერატორი

$$\hat{\mathbf{L}}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2, \qquad (101,18)$$

რომელსაც სისტემის ორბიტალური მომენტის კვადრატის ოპერატორი ეწოდება. ეს ოპერატორი კომუტატურია ყოველ $\hat{L}_x$, $\hat{L}_y$, $\hat{L}_z$ მდგენელთან

$$[\hat{\mathbf{L}}^2, \hat{L}_\alpha] = 0, \quad (\alpha = 1, 2, 3) \qquad (101,19)$$

რაც იმას ნიშნავს, რომ $\mathbf{L}^2$ და მისი რომელიმე ერთი პროექცია შეიძლება ერთდროულად ზუსტად გაიზომოს. აშკარაა, $\hat{L}_z$ ოპერატორის L_z საკუთარი მნიშვნელობა განისაზღვრება ფორმულით

$$L_z = \hbar M_L, \qquad (101,20)$$

სადაც

$$-L \leqslant M_L \leqslant +L \qquad (101,21)$$

L არის სისტემების ორბიტალური მომენტის კვანტური რიცხვი და განისაზღვრება მომენტთა შეკრების წესით ცალკეული ნაწილაკის l აზიმუტალური რიცხვების საშუალებით. აშკარაა, $L \geqslant 0$. M_L არის სისტემის ორბიტალური მომენტის შესაბამისი მაგნიტური კვანტური რიცხვი. იგი იღებს $(2L+1)$ მნიშვნელობას.

სისტემის ორბიტალური მომენტის კვადრატის საკუთარი მნიშვნელობები გამოისახება ფორმულით

$$\mathbf{L}^2 = \hbar^2 L(L+1). \qquad (101,22)$$

ანალოგიურად შეიძლება შემოვიღოთ სისტემის სპინისა (ანდა სრული სპინის) და მისი მდგენელების ოპერატორები:

$$\hat{S}_x = \sum_{k=1}^{N} \hat{s}_x^k, \quad \hat{S}_y = \sum_{k=1}^{N} \hat{s}_y^k, \quad \hat{S}_z = \sum_{k=1}^{N} \hat{s}_z^k. \qquad (101,23)$$

სისტემის სპინის მდგენელებიც ისეთივე კომუტაციის პირობებს დააკმაყოფილებს, რაც გვქონდა ერთი ნაწილაკის სპინის ოპერატორის მდგენელებისათვის; სახელდობრ,

$$[\hat{S}_i, \hat{S}_k] = -\varepsilon_{ikl} \hat{S}_l. \qquad (101,24)$$

სპინის კვადრატისა და მისი z მდგენელის საკუთარი მნიშვნელობებისათვის გვექნება

$$\mathbf{S}^2 = \hbar^2 S(S+1); \quad S_z = M_s \hbar, \qquad (101,25)$$

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 $[\hat{\mathbf{S}}^2, \hat{S}_z] = 0$. ასევე, $[\hat{\mathbf{L}}^2, \hat{\mathbf{S}}^2] = 0$, რადგან სპინის ოპერატორი კოორდინატების ფუნქცია არაა.

სისტემის ორბიტალური მომენტისა და სისტემის სპინის ვექტორების კვანტური შეკრებით მიიღება სისტემის სრული მომენტი, რომელსაც $\hat{\mathbf{J}}$-თი აღვნიშნავთ, ე. ი.

$$\hat{\mathbf{J}} = \hat{\mathbf{L}} + \hat{\mathbf{S}}. \qquad (101,26)$$

თანახმად (101,17) და (101,24) ფორმულებისა, ადვილად დავრწმუნდებით, რომ $\hat{J}$-ს მდგენელებიც ისეთივე კომუტაციის თვისებებით ხასიათდება, როგორითაც **L** და **S**; სახელდობრ,

$$[\hat{J}_\alpha,\ \hat{J}_\beta] = -\mathfrak{S}_{\alpha\beta\gamma}\hat{J}_\gamma; \tag{101,27}$$

ამიტომ $\hat{J}^2$-სა და $\hat{J}_z$-ის საკუთარი მნიშვნელობისათვის შეიძლება დავწეროთ

$$J^2 = \hbar^2 J(J+1), \tag{101,28}$$

$$J_z = M_J\hbar. \tag{101,29}$$

J არის სრული მომენტის კვანტური რიცხვი, M_J კი წარმოადგენს შესაბამის მაგნიტურ კვანტურ რიცხვს, ამასთან — $J \leqslant M_J \leqslant +J$. 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 სავსებით ისეთივე თვისებები აქვთ, რაც შესაბამის სიდიდეებს ერთი ნაწილაკის შემთხვევაში, ამიტომ $(\hat{\mathbf{J}}\hat{\mathbf{S}})$ და $(\hat{\mathbf{L}}\hat{\mathbf{S}})$ სკალარული ნამრავლების საკუთარი მნიშვნელობებისათვის გვექნება:

$$(\mathbf{LS}) = \frac{\hbar^2}{2}\{J(J+1) - L(L+1) - S(S+1)\}, \tag{101,30}$$

$$(\mathbf{JS}) = \frac{\hbar^2}{2}\{J(J+1) - L(L+1) + S(S+1)\}, \tag{101,31}$$

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 $\mathbf{J}^2$ 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 ინვარიანტული 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 დამოკიდებული არ არის. ნაწილაკთა სისტემის შემთხვევაში მდგომარეობა განსხვავებულია. სიმარტივის მიზნით განვიხილოთ არაურთიერთქმედ ნაწილაკთა სისტემა, რომელზეც მოქმედებს გარეშე ცენტრალური ველი. ჰამილტონიანს, ამ შემთხვევაში, ექნება სახე

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^{N} H_i(\mathbf{r}_i) = \sum_{i=1}^{N}\left\{-\frac{\hbar^2}{2m_i}\Delta_i + V_i(\mathbf{r}_i)\right\}. \tag{101,32}$$

ასეთი ჰამილტონიანის შემთხვევაში ჩვენ შეგვიძლია შემოვიღოთ ცალკეული ნაწილაკის ორბიტალური მომენტი $\mathbf{l}_i$. სისტემის სრული ორბიტალური მომენტი კი ტოლი იქნება $\mathbf{L} = \sum \mathbf{l}_i$ გამოსახულების.

შრედინგერის განტოლების ამონახსნი (100,22) ფორმულის თანახმად ტოლი იქნება

$$\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots \mathbf{r}_N) = \prod_{i=1}^{N} \psi_i(\mathbf{r}_i). \qquad (101,33)$$

ვიპოვოთ ამ ფუნქციის ლუწობა. ამისათვის (101,33)-ზე ვიმოქმედოთ ინვერსიის ოპერატორით და გავიხსენოთ, რომ თითოეული ნაწილაკის ლუწობა განისაზღვრება ორბიტალური მომენტით, მაშინ გვექნება:

$$\hat{I}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots \mathbf{r}_N)\, \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots \mathbf{r}_N) = \hat{I}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots \mathbf{r}_N) \prod_{i=1}^{N} \psi_i(\mathbf{r}_i) =$$

$$= (-1)^{l_1+l_2+\dots+l_N} \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots \mathbf{r}_N); \qquad (101,34)$$

მაშასადამე, სისტემის ლუწობა განისაზღვრება ფორმულით

$$I = (-1)^{l_1+l_2+\dots+l_N}, \qquad (101,35)$$

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 $\mathbf{L}$ მომენტის მისაღებად საჭიროა ცალკეულ ნაწილაკთა მომენტების ვექტორების გეომეტრიული შეკრება $\mathbf{L} = \sum \mathbf{l}_i$.

მართალია (101,35) ფორმულა გამოვიყვანეთ არაურთიერთქმედ ნაწილაკთა სისტემის შემთხვევაში, მაგრამ ამ ფორმულით შეგვიძლია განვსაზღვროთ რთული ატომების ლუწობაც, რადგან ატომებში განიხილება ე. წ. თვითშეთანხმებული ველის 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 შპური ნულის ტოლია. ახლა ვიპოვოთ სისტემის კვადრუპოლური მომენტის ტენზორი, რამდენადაც ატომს სტაციონარულ მდგომარეობაში აქვს ერთადერთი დამახასიათებელი ვექტორი — მომენტი, ამიტომ ეს ტენზორი დაკავშირებული იქნება ატომის სრულ $\mathbf{J}$ მომენტთან. $\mathbf{J}$ ვექტორის საშუალებით შევადგინოთ ისეთი მეორე რანგის ტენზორი, რომელსაც ექნება ზემოთ ჩამოთვლილი თვისებები. აშკარაა, რომ $\hat{J}_i\hat{J}_k + \hat{J}_k\hat{J}_i$ იქნება მეორე რანგის სიმეტრიული ტენზორი, ამ ტენზორის შპური ნულის ტოლი რომ იყოს საჭიროა მას გამოვაკლოთ $\frac{2}{3}\delta_{ik}\hat{J}^2$ ტენზორი. მივიღებთ

$$Q_{ik} = A\left(\hat{J}_i\hat{J}_k + \hat{J}_k\hat{J}_i - \frac{2}{3}\delta_{ik}\hat{\mathbf{J}}^2\right), \qquad (101,36)$$

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

$$Q_0 \equiv Q_{zz}(J) = A\left\{2\hbar^2 J^2 - \frac{2}{3}\hbar^2 J(J+1)\right\}, \qquad (101{,}37)$$

საიდანაც

$$A = \frac{3Q_0}{2J(2J-1)\hbar^2}. \qquad (101{,}38)$$

მაშასადამე, კვადრუპოლური მომენტის ტენზორს ექნება შემდეგი სახე:

$$Q_{ik} = \frac{3Q_0}{2J(2J-1)\hbar^2}\left(\hat{J}_i\hat{J}_k + \hat{J}_k\hat{J}_i - \frac{2}{3}\delta_{ik}\hat{J}^2\right), \qquad (101{,}39)$$

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 J-სა არა აქვს. კერძო შემთხვევაში, როცა ატომის სრული მომენტი $J = 1/2$, მაშინ $\hat{J}_i = \frac{\hbar}{2}\sigma_i^0$, სადაც σ_i^0 პაულის მატრიცებია. რადგან პაულის მატრიცები აკმაყოფილებენ პირობას

$$\sigma_i^0\sigma_k^0 + \sigma_k^0\sigma_i^0 = 2\delta_{ik} \qquad (101{,}40)$$

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 $J \leqslant 1/2$ კვადრუპოლური მომენტი არ გააჩნია.

§ 102. იგივურ ნაწილაკთა სისტემა

ნაწილაკთა სისტემებიდან განსაკუთრებულ შესწავლას მოითხოვს ისეთი სისტემები, რომლებიც იგივური ნაწილაკებისაგან შედგება. იგივური ნაწილაკების კლასიკურ და კვანტურ აღწერას შორის არსებობს მკვეთრი განსხვავება, რაც იმაში მდგომარეობს, რომ კლასიკურ მექანიკაში არის შესაძლებლობა დროის რაიმე მომენტისათვის მოვახდინოთ იგივურ 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 იგივური ნაწილაკი სწორედ ის არის, რომელიც $t = 0$ მომენტისათვის აღნიშნული გვქონდა 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 იგივური ნაწილაკი.

სულ სხვა სურათია კვანტურ მექანიკაში. აქ ნაწილაკის ტრაექტორიაზე ლაპარაკს აზრი არა აქვს; გარკვეული მიახლოებით შეგვიძლია ვიმსჯელოთ მხოლოდ ტალღური პაკეტების მოძრაობაზე სივრცეში. ვთქვათ, $t = 0$ დროის მომენტისათვის ჩავატარეთ იგივურ 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 ღსეთი ორი მდგომარეობა, რომელიც ერთმანეთისაგან იგივურ ნაწილაკთა გადასმით განსხვავდება, ერთი და იგივედ უნდა ჩაითვალოს. ჩვენ ახლა ვნახავთ, კვანტური სისტემის ასეთი განსხვავებული აღწერა მათემატიკურად როგორ გამოიხატება.

შევადგინოთ N იგივური ნაწილაკის სისტემის ჰამილტონიანი. ამ მიზნით x_k-თი აღვნიშნოთ k-ური ნაწილაკის ყველა კოორდინატის ერთობლიობა, ე. ი. სივრცული მდებარეობის განმსაზღვრელი $\mathbf{r}_k$ რადიუსვექტორისა და სპინური კოორდინატების ერთობლიობა $x_k \equiv (r_k, s_k)$. რადგან იგივური ნაწილაკების მასები, მუხტები, სპინები და სხვა ერთნაირებია, ამიტომ ასეთი სისტემის ჰამილტონიანი შემდეგნაირად ჩაიწერება:

$$\hat{H}(x_1, x_2, \dots x_N; t) = \sum_{k=1}^{N} \left\{ -\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta_k + V(x_k, t) \right\} + \sum_{k \neq j=1}^{N} U(x_k, x_j), \qquad (102,1)$$

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 იგივური ნაწილაკისათვის და დამოკიდებულია იგივური ნაწილაკის კოორდინატებზე და, საზოგადოდ, სპინზეც. რაც შეეხება $U(x_k, x_j)$-ს იგი გამოხატავს k და j-ური ნაწილაკების ურთიერთქმედების ენერგიას, რომელიც აგრეთვე არ არის დამოკიდებული არჩეულ იგივურ ნაწილაკთა წყვილზე და დამოკიდებულია მხოლოდ ნაწილაკთა მდებარეობაზე და, ზოგად შემთხვევაში, შესაძლოა სპინებზეც.

აღსანიშნავია, რომ იგივურ ნაწილაკთა ჰამილტონიანს ახასიათებს ერთი მეტად მნიშვნელოვანი ინვარიანტობის თვისება. კერძოდ, (102,1) ოპერატორი ინვარიანტულია ნებისმიერი ორი ნაწილაკის გადასმის მიმართ; ამასთან, ნაწილაკთა გადასმა ეკვივალენტურია x-კოორდინატების გადასმისა, ე. ი. სივრცული და სპინური კოორდინატების ერთდროული გადასმისა. ჰამილტონის ოპერატორის ამ ინვარიანტობასთან დაკავშირებულია ტალღურ ფუნქციათა სიმეტრიის მნიშვნელოვანი საკითხი, რომელსაც შემდეგ პარაგრაფში განვიხილავთ.

რადგან ელექტრონები იგივური ნაწილაკებია, ამიტომ რთული ატომები უნდა აღვწეროთ შრედინგერის განტოლებით, რომელსაც სტაციონარულ მდგომარეობაში ექნება სახე

$$\hat{H}(x_1, x_2, \dots x_N)\, \psi(x_1, x_2, \dots x_N) = E\psi(x_1, x_2, \dots x_N), \qquad (102,2)$$

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

$$\sum_{k \neq j}^{N} \sum^{N} U(x_k, x_j) \qquad (102,3)$$

დაიყვანება $\sum_{k=1}^{N} f(x_k)$ ტიპის გამოსახულებაზე. ფიზიკურად ეს იმას ნიშნავს, რომ

ალებულ ნაწილაკზე ყველა დანარჩენის ურთიერთქმედება დაიყვანება, რაღაც, გარკვეულად შერჩეულ, გარეშე ველის მოქმედებაზე. ამ გარეშე ველს თვითშეთანხმებული ველი ეწოდება. თვითშეთანხმებული ველის მიახლოებაში იგივურ ნაწილაკთა ჰამილტონიანს ექნება შემდეგი სახე:

$$\hat{H}(x_1, x_2, \dots x_N; t) = \sum_{k=1}^{N} \left\{ -\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta_k + V(x_k, t) \right\}, \qquad (102,4)$$

სადაც $V(x_k, t)$ პოტენციალური ენერგია წარმოადგენს ჯამურ ურთიერთქმედებას, რომელიც შეიცავს გარეშე და თვითშეთანხმებული ველის პოტენციალებს.

ამგვარად, თვითშეთანხმებული ველის მეთოდში ყოველი ელექტრონი მოძრაობს დანარჩენი ელექტრონების გასაშუალოებულ ველში, რომელიც ეკვივალენტურია გარკვეულად შერჩეული გარეშე ველისა.

როგორც (102,4) გამოხატულებიდან ჩანს, თვითშეთანხმებული ველის ჰამილტონიანი დაიყვანება არაურთიერთქმედ იგივურ ნაწილაკთა სისტემის ჰამილტონიანზე. შესაბამისი სტაციონარული მდგომარეობის გ ნტოლება კი, როგორც 100-ე პარაგრაფში დავინახეთ, ადვილად ამოიხსნება. კერძოდ, ამონახსნს ექნება (100,22) სახე. ასე რომ,

$$\psi(x_1, x_2, \dots x_N) = \prod_{k=1}^{N} \psi_k(x_k) \qquad (102,5)$$

ენერგია კი ტოლი იქნება

$$E = \sum_{k=1}^{N} E_k, \qquad (102,6)$$

სადაც $\psi_k(x_k)$ აკმაყოფილებს განტოლებას

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta_k + V(x_k) \right\} \psi_k(x_k) = E_k \psi_k(x_k), \qquad (102,7)$$

ე. ი. ψ_k წარმოადგენს $V(x_k)$ ველში მოძრავი 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 იგივურ 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 ანტისიმეტრიული ტალღური ფუნქციები

განვიხილოთ შრედინგერის განტოლება იგივურ ნაწილაკთა სისტემისათვის

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H}\psi, \qquad (103,1)$$

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 იგივურ ნაწილაკთა ჰამილტონიანი არ იცვლება ნაწილაკთა ნებისმიერი გადასმის მიმართ. ამიტომ, თუ შევცვლებთ ორი ნებისმიერი i და k ნაწილაკის გადასმის $\hat{P}_{ik}$ ოპერატორს, გვექნება

$$\hat{P}_{ik}\hat{H}(x_1, x_2, \dots x_i, \dots x_k, \dots x_N, t) = \hat{H}(x_1, x_2, \dots x_i, \dots x_k, \dots x_N, t)\hat{P}_{ik}. \qquad (103,2)$$

ვიმოქმედოთ (103,1) განტოლებაზე მარცხნიდან $\hat{P}_{ik}$ ოპერატორით და გავითვალისწინოთ, რომ $\hat{P}_{ik}\hat{H} = \hat{H}\hat{P}_{ik}$; გვექნება

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}(\hat{P}_{ik}\psi) = \hat{H}(\hat{P}_{ik}\psi), \qquad (103,3)$$

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 იგივურ 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.

$$\hat{P}_{ik}\psi(x_1, \dots x_i, \dots x_k, \dots x_N; t) = \lambda\psi(x_1, \dots x_i, \dots x_k, \dots x_N; t). \qquad (103,4)$$

ეს უკანასკნელი კი ნიშნავს $\hat{P}_{ik}$ 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

$$\hat{P}_{ik}^2\psi(x_1, \dots x_i, \dots x_k, \dots x_N; t) = \lambda\hat{P}_{ik}\psi(x_1, \dots x_i, \dots x_k, \dots x_N; t). \qquad (103,5)$$

თუ გამოვიყენებთ (103,4)-ს და გავითვალისწინებთ, რომ $\hat{P}_{ik}$ ოპერატორის ორჯერ ზედიზედ მოქმედებით მივიღებთ საწყის ფუნქციას, გვექნება

$$\hat{P}_{ik}^2\psi(x_1, \dots x_i, \dots x_k, \dots t) = \psi(x_1, \dots x_i, \dots x_k \dots; t) =$$
$$= \lambda^2\psi(x_1, x_2, \dots x_i, \dots x_k, \dots; t), \qquad (103,6)$$

საიდანაც

$$\lambda^2 = 1. \qquad (103,7)$$

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 ზემოთქმულისა, სიმეტრიული ფუნქციის შემთხვევაში გვაქვს

$$\hat{P}_{ik}\psi(x_1, \dots x_i, \dots x_k, \dots x_N; t) = +\psi(x_1, \dots x_i, \dots x_k, \dots x_N; t), \qquad (103,8)$$

ანტისიმეტრიული ფუნქციის შემთხვევაში კი —

$$\hat{P}_{ik}\psi(x_1, \dots x_i, \dots x_k, \dots x_N; t) = -\psi(x_1, \dots x_i, \dots x_k \dots x_N; t). \qquad (103,9)$$

რადგან $\hat{P}_{ik}$ ოპერატორი დროზე ცხადად არაა დამოკიდებული, ამიტომ

$$\frac{d\hat{P}_{ik}}{dt} = [\hat{H}, \hat{P}_{ik}]. \qquad (103,10)$$

თანახმად (103,2) ფორმულისა, $[\hat{H}, \hat{p}_{ih}]=0$ და, მაშასადამე, λ წარმოადგენს მოძრაობის ინტეგრალს (λ საკუთარი მნიშვნელობა დროში უცვლელია), მაგრამ λ განსაზღვრავს ფუნქციის სიმეტრიულობას და ამიტომ ვასკვნით:

იგივურ 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 მომენტებშიაც.

ადვილად 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

$$\psi(x_1, x_2, x_3) = -\psi(x_1, x_2, x_3),$$

საიდანაც გამომდინარეობს, რომ $\psi(x_1, x_2, x_3)=0$.

§ 104. ფერმისა და ბოზეს ნაწილაკები

როგორც დავინახეთ, იგივურ ნაწილაკთა სისტემის მდგომარეობის აღმწერი ტალღური 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

$$s = n, \tag{104,1}$$

სადაც $n=0, 1, 2\ldots$ აიწერება სიმეტრიული ფუნქციით. ასეთ ნაწილაკებს ბოზეს ნაწილაკებს ან ბოზონებს უწოდებენ. ხოლო ის ნაწილაკები, რომელთა სპინური კვანტური რიცხვი

$$s=\frac{2n+1}{2}, \quad n=0, 1, 2\ldots. \tag{104,2}$$

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.

დავეშვათ, გვაქვს ორი იგივური ატომის გული. როგორც ვიცით, გული შედგება ფერმიონებისაგან — ნეიტრონებისა და პროტონებისაგან. როგორი ტალღური ფუნქციით აიწერება ეს გულები? რათა ეს გულები გადავსვათ, 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 მამრავალი $(-1)^{N_p+N_n}$. მაგრამ $Np+N_n$ არის ატომგულის შემადგენელი ყველა ფერმიონის რიცხვი; მას უწოდებენ მასურ რიცხვს და აღინიშნება A-თი. ამრიგად, ატომგულის ტალღური ფუნქციის სიმეტრიულობას განსაზღვრავს მამრავალი

$$(-1)^A, \tag{104,3}$$

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 იგივურ 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 განზოგადება მრავალი ფერმიონისაგან შედგენილი სისტემისათვის არავითარ სიძნელეს 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 ერთობლიობაა, 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

$$\psi(x_1, x_2, t) = \sum_{n_1}\sum_{n_2} C_{n_1, n_2}(t)\,\psi_{n_1}(x_1)\,\psi_{n_2}(x_2): \tag{105,1}$$

როგორც ვიცით

$$w_{n_1 n_2}(t) = |C_{n_1, n_2}(t)|^2 \tag{105,2}$$

სიდიდე 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:

$$\sum_{n_1}\sum_{n_2} C_{n_1 n_2}(t)\,\psi_{n_1}(x_1)\,\psi_{n_2}(x_2) = -\sum_{n_1}\sum_{n_2} C_{n_1 n_2}(t)\,\psi_{n_1}(x_2)\,\psi_{n_2}(x_1); \qquad (105{,}3)$$

n_1 და n_2 ერთი და იგივე მნიშვნელობებს იღებს, ამიტომ ჯამში n_1 შეიძლება შევცვალოთ n_2-ით და პირიქით; თუ ასეთ შეცვლას მოვახდენთ, ტოლობის მარჯვენა მხარეში გვექნება

$$\sum_{n_1}\sum_{n_2} C_{n_1 n_2}(t)\,\psi_{n_1}(x_1)\,\psi_{n_2}(x_2) = -\sum_{n_1}\sum_{n_2} C_{n_2 n_1}(t)\,\psi_{n_2}(x_2)\,\psi_{n_1}(x_1). \qquad (105{,}4)$$

რადგან $\psi_{n_1}(x_1)$ და $\psi_{n_2}(x_2)$ ფუნქციები ორთონორმირებულია, ამიტომ ეს ტოლობა მხოლოდ მაშინ შეიძლება გვქონდეს, როდესაც

$$C_{n_1 n_2}(t) = -C_{n_2 n_1}(t). \qquad (105{,}5)$$

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

$$w_{n,n}(t) = 0. \qquad (105{,}6)$$

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

რადგან $m_s = \pm\frac{1}{2}$, ამიტომ იმ მდგომარეობაში, რომელიც ხასიათდება n, l,

m_l კვანტური რიცხვებით, შეიძლება მოხვდეს მხოლოდ ისეთი ორი ფერმიონი (ელექტრონი, პროტონი ნეიტრონი და სხვა), რომელთაც აქვთ საწინააღმდეგოდ მიმართული სპინები. პაულის პრინციპის ასეთი ფორმულირება გამოგვადგება 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 იგივურ ნაწილაკთა სისტემის დამახასიათებელი ფუნქციები ნაწილაკების გადასმის მიმართ შეიძლება იყოს მხოლოდ სიმეტრიული ან ანტისიმეტრიული. ამ პარაგრაფში ჩვენი მიზანია ამ ფუნქციების მოძებნა.

მეტი სიცხადის მიზნით განვიხილოთ თვითშეთანხმებული ველის მეთოდი ან ჩავთვალოთ, რომ სისტემის ნაწილაკები იმყოფებიან გარეშე ველში, მაგრამ ერთმანეთთან არ ურთიერთქმედებენ; ასეთი სისტემის ტალღური ფუნქციები ხშირად

განიხილება როგორც ნულოვანი მიახლოების ტალღური ფუნქციები. ჩვენ ვაჩვენეთ, რომ აღნიშნულ მიახლოებაში შრედინგერის განტოლების ამონახსნი წარმოადგენს ცალკეული ნაწილაკების მოძრაობის შესაბამისი ტალღური ფუნქციების ნამრავლს, ენერგია კი — ცალკეული ნაწილაკის ენერგიების ჯამს, ე. ი.

$$\Psi(x_1, x_2, \dots x_N) = \psi_{n_1}(x_1)\,\psi_{n_2}(x_2) \dots \psi_{n_N}(x_N), \tag{106,1}$$

$$E = E_1 + E_2 + \dots + E_N, \tag{106,2}$$

სადაც n_i არის მდგომარეობის დამახასიათებელი ყველა კვანტური რიცხვების ერთობლიობა. ატომში, მაგალითად, n წარმოადგენს n, 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 შრედინგერის განტოლების ამონახსნს, მაგრამ მასში არ არის გათვალისწინებული ის გარემოება, რომ იგივურ ნაწილაკთა სისტემის ტალღური ფუნქცია უსათუოდ უნდა იყოს სიმეტრიული ან ანტისიმეტრიული. სხვანაირად რომ ვთქვათ, ეს ფუნქცია საკუთარი ფუნქცია უნდა იყოს ნაწილაკთა გადასმის ოპერატორისაც. ცხადია, რომ (106,1) ფუნქციას აღნიშნული სიმეტრია არ გააჩნია, მაგრამ ჩვენ შეგვიძლია მოვახდინოთ მისი სიმეტრიზაცია. ამის საშუალებას გვაძლევს ის გარემოება, რომ შრედინგერის განტოლება წრფივია და მას აკმაყოფილებს არა მხოლოდ (106,1), არამედ ამ ფუნქციის ნებისმიერი წრფივი კომბინაცია. ამასთან, ხ წრფივი კომბინაციის წევრებად შეგვიძლია ავიღოთ ნებისმიერად გადანაცვლებული ნაწილაკების შესაბამისი ფუნქციები.

ჯერ განვიხილოთ იგივურ ნაწილაკთა ფერმის სისტემა. ასეთი სისტემის ტალღური ფუნქცია უნდა იყოს ანტისიმეტრიული ნებისმიერი ორი ნაწილაკის გადასმის მიმართ. პირველად შევისწავლოთ ორი ნაწილაკის სისტემა. თვითშეთანხმებული ველის მიახლოებაში სისტემის ტალღური ფუნქცია ტოლი იქნება

$$\psi_1(x_1, x_2) = \psi_{n_1}(x_1)\,\psi_{n_2}(x_2). \tag{106,3}$$

შრედინგერის განტოლებას იგივე ენერგიით აკმაყოფილებს აგრეთვე ტალღური ფუნქცია, რომელიც (106,3)-საგან განსხვავდება ნაწილაკთა გადასმით, ე. ი.

$$\psi_2(x_1, x_2) = \psi_{n_1}(x_2)\,\psi_{n_2}(x_1). \tag{106,3'}$$

ცხადია, რომ შრედინგერის განტოლებას დააკმაყოფილებს შემდეგი ფუნქციაც

$$\Psi(x_1, x_2) = A\left|\psi_{n_1}(x_1)\,\psi_{n_2}(x_2) - \psi_{n_1}(x_2)\,\psi_{n_2}(x_1)\right|, \tag{106,4}$$

რომელიც ანტისიმეტრიულია ნაწილაკთა გადასმის მიმართ. A-ნორმირების კოეფიციენტია. 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 $\mathcal{E}_{i_1, i_2, \dots i_N}$ აქვს შემდეგი თვისებები: ნებისმიერი ორი ინდექსის გადასმისას ნიშანს იცვლის საწინააღმდეგოთი, თუ რომელიმე ორი ინდექსი ტოლია, მაშინ ტენზორი ნულს უდრის, იგი უდრის ერთს, როცა $i_1, i_2, \dots i_N$ ინდექსების დასალაგებლად ნორმალური თანმიმდევრობით (ე. ი. 1. 2, 3 ... N) საჭიროა ტრანსპოზიციათა ლუწი რაოდენობა და უდრის მინუს ერთს, როცა ინდექსების ნორმალური თანმიმდევრობით დასალაგებლად საჭიროა ტრანსპოზიციათა კენტი რიცხვი. განმარტებიდან ცხადია,

რომ ნულისაგან განსხვავებული იქნება $\mathcal{E}_{i_1 i_2 \cdots i_N}$ ტენზორის მხოლოდ $N!$ ელემენტი და თითოეულ ამ ელემენტის მნიშვნელობა ტოლია ან $+1$-ის ან -1-ის. ამიტომ

$$\sum_{i_1 i_2 \ldots i_N} \mathcal{E}^2_{i_1 i_2 \cdots i_N} = N! \tag{106,5}$$

ჩვენ დაგვჭირდება შემდეგი ორი ფორმულაც, რომელთა გამოყვანა საკმარისად ადვილია: [1]

$$\sum_{i_2, \ldots, i_N}^{N} \mathcal{E}_{i_1 i_2 \cdots i_N} \mathcal{E}_{i'_1 i_2, \cdots i_N} = (N-1)!\, \delta_{i_1 i'_1}, \tag{106,5'}$$

$$\sum_{i_3 \ldots i_N} \mathcal{E}_{i_1 i_2 i_3 \cdots i_N} \mathcal{E}_{i'_1 i'_2 i_3 \ldots i_N} = (N-2)!\, [\delta_{i_1 i'_1} \delta_{i_2 i'_2} - \delta_{i_1 i'_2} \delta_{i_2 i'_1}] \tag{106,5''}$$

(106,3) და (106,3')-დან აშკარაა, რომ კოორდინატების გადასმა ეკვივალენტურია კვანტური რიცხვების გადასმისა, ამიტომ თუ განვიხილავთ მეორე რანგის $\mathcal{E}_{i_1 i_2}$ ერთეულოვან ტენზორს, მაშინ ორი ფერმიონის (106,4) ანტისიმეტრიული ფუნქცია შეგვიძლია ჩავწეროთ შემდეგი სახით:

$$\Psi(x_1, x_2) = A \sum_{i_1, i_2 = 1}^{2} \mathcal{E}_{i_1 i_2} \psi_{n i_1}(x_1)\, \psi_{n i_2}(x_2). \tag{106,6}$$

რადგან $\mathcal{E}_{12} = 1$, $\mathcal{E}_{21} = -1$, ხოლო $\mathcal{E}_{11} = \mathcal{E}_{22} = 0$, ამიტომ (106,6) ფუნქცია მართლაც ემთხვევა (106,4)-ს.

მოვახდინოთ (106,6) ფუნქციის ნორმირება, მოვითხოვოთ, რომ

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(x_1, x_2)\, \Psi(x_1, x_2)\, d\tau_1\, d\tau_2 = 1 \tag{106,7}$$

ამასთან, რადგან x-ში შედის დისკრეტული სპინური ცვლადიც, ჩვენ ვიგულისხმებთ, რომ ინტეგრაციაში ჩართულია აგრეთვე სპინური ცვლადების მიხედვით. შევიტანოთ (106,6) ფუნქცია ნორმირების (106,7) ინტეგრალში, გვექნება

$$A^2 \sum_{i_1 i_2} \sum_{i'_1 i'_2} \mathcal{E}_{i_1 i_2} \mathcal{E}_{i'_1 i'_2} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*_{n i_1}(x_1)\, \psi_{n i'_1}(x_1)\, d\tau_1 \cdot$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*_{n i_2}(x_2)\, \psi_{n i'_2}(x_2)\, d\tau_2 = 1 \tag{106,8}$$

ვიგულისხმოთ, 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,

$$A^2 \sum_{i_1 i_2} \sum_{i'_1 i'_2} \mathcal{E}_{i_1 i_2} \mathcal{E}_{i'_1 i'_2} \delta_{i_1 i'_1} \delta_{i_2 i'_2} = 1 \tag{106,9}$$

[1] იხილეთ სავარჯიშო ამ თავის ბოლოს.

ფილტრაციის თვისების გამოყენებით გვექნება

$$A^2 \sum_{i_1 i_2} \mathfrak{S}^*_{i_1 i_2} = 1 \qquad (106,10)$$

რაც (106,5) ფორმულის თანახმად მოგვცემს $A = 1/\sqrt{2!}$. მაშასადამე, ორი ფერმის ნაწილაკის ნორმირებულ ანტისიმეტრიულ ტალღურ ფუნქციას ექნება სახე

$$\Psi(x_1, x_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \{\psi_{n_1}(x_1)\psi_{n_2}(x_2) - \psi_{n_1}(x_2)\psi_{n_2}(x_1)\}. \qquad (106,11)$$

შევნიშნოთ, რომ ეს ფუნქცია შეგვიძლია გამოვხატოთ მეორე რანგის დეტერმინანტის სახითაც; კერძოდ,

$$\Psi(x_1, x_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{vmatrix} \psi_{n_1}(x_1) & \psi_{n_1}(x_2) \\ \psi_{n_2}(x_1) & \psi_{n_2}(x_2) \end{vmatrix}; \qquad (106,12)$$

ეს გასაგებია, რადგან ტალღური ფუნქციის ჩაწერა

$$\Psi(x_1, x_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_{i_1, i_2} \mathfrak{S}_{i_1 i_2} \psi_{n_{i_1}}(x_1)\psi_{n_{i_2}}(x_2) \qquad (106,13)$$

სახით წარმოადგენს მეორე რანგის დეტერმინანტის განმარტებას $\mathfrak{S}_{i_1 i_2}$ 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 $\mathfrak{S}_{i_1 i_2 i_3}$ ტენზორს, მაშინ საძიებელი ფუნქციისათვის გვექნება გამოსახულება

$$\Psi(x_1, x_2, x_3) = A \sum_{i_1 i_2 i_3} \mathfrak{S}_{i_1 i_2 i_3} \psi_{n_{i_1}}(x_1)\psi_{n_{i_2}}(x_2)\psi_{n_{i_3}}(x_3). \qquad (106,14)$$

მოვახდინოთ ამ ფუნქციის ნორმირება. რადგან მესამე რანგის ტენზორის შემთხვევაში (106,5) ჯამი 3!-ის ტოლია, ამიტომ ნორმირებულ ტალღურ ფუნქციას სამი ფერმიონისათვის ექნება სახე

$$\Psi(x_1, x_2, x_3) = \frac{1}{\sqrt{3!}} \sum_{i_1 i_2 i_3} \mathfrak{S}_{i_1 i_2 i_3} \psi_{n_{i_1}}(x_1)\psi_{n_{i_2}}(x_2)\psi_{n_{i_3}}(x_3) \qquad (106,15)$$

გაშლილი სახით (106,15) ასე დაიწერება:

$$\begin{aligned} \Psi(x_1, x_2, x_3) = \frac{1}{\sqrt{6}} \{ & \psi_{n_1}(x_1)\psi_{n_2}(x_2)\psi_{n_3}(x_3) + \psi_{n_1}(x_2)\psi_{n_2}(x_3)\psi_{n_3}(x_1) + \\ & + \psi_{n_1}(x_3)\psi_{n_2}(x_1)\psi_{n_3}(x_2) - \psi_{n_1}(x_1)\psi_{n_2}(x_3)\psi_{n_3}(x_2) - \\ & - \psi_{n_1}(x_2)\psi_{n_2}(x_1)\psi_{n_3}(x_3) - \psi_{n_1}(x_3)\psi_{n_2}(x_2)\psi_{n_3}(x_1) \}, \end{aligned} \qquad (106,16)$$

ცხადია, რომ ეს ფუნქცია ნიშანს იცვლის ნებისმიერი ნაწილაკთა წყვილის გადასმის დროს. (106,16) ფუნქცია წარმოადგენს მესამე რანგის დეტერმინანტს

$$\Psi(x_1, x_2, x_3) = \frac{1}{\sqrt{3!}} \begin{vmatrix} \psi_{n_1}(x_1) & \psi_{n_1}(x_2) & \psi_{n_1}(x_3) \\ \psi_{n_2}(x_1) & \psi_{n_2}(x_2) & \psi_{n_2}(x_3) \\ \psi_{n_3}(x_1) & \psi_{n_3}(x_2) & \psi_{n_3}(x_3) \end{vmatrix}. \qquad (106,17)$$

ახლა განვიხილოთ N ფერმის ნაწილაკის სისტემა. მაშინ საჭიროა სიმეტრიზაცია მოვახდინოთ (106,1) ტალღური ფუნქციისა. ამას ადვილად მოვახერხებთ N-ური რანგის $\mathfrak{S}_{i_1 i_2 \dots i_N}$ ტენზორის დახმარებით. თუ გავიხსენებთ (106,5) ფორმულას, ნორმირებული ანტისიმეტრიული ტალღური ფუნქციისათვის შეგვიძლია დავწეროთ

$$\Psi_a(x_1, x_2, \dots x_N) =$$

$$= \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{i_1 i_2 \dots i_N} \mathfrak{S}_{i_1 i_2 \dots i_N} \psi_{n_{i_1}}(x_1) \psi_{n_{i_2}}(x_2) \dots \psi_{n_{i_N}}(x_N), \qquad (106,18)$$

რომელიც წარმოადგენს შემდეგ დეტერმინანტს

$$\Psi_a(x_1, x_2, \dots x_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \psi_{n_1}(x_1) & \psi_{n_1}(x_2) \dots \psi_{n_1}(x_N) \\ \psi_{n_2}(x_1) & \psi_{n_2}(x_2) \dots \psi_{n_2}(x_N) \\ \dots & \dots \\ \psi_{n_N}(x_1) & \psi_{n_N}(x_2) \dots \psi_{n_N}(x_N) \end{vmatrix}. \qquad (106,19)$$

ამ დეტერმინანტს სლეტერის დეტერმინანტს უწოდებენ. ცხადია, რომ ნებისმიერი 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

$$\Psi(x_1, x_2) = \psi_n(x_1) \psi_n(x_2) \qquad (106,20)$$

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:

$$\Psi(x_1, x_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \{\psi_{n_1}(x_1) \psi_{n_2}(x_2) + \psi_{n_1}(x_2) \psi_{n_2}(x_1)\}. \qquad (106,21)$$

ეს ფუნქცია სიმეტრიულია x_1 და x_2-ის, ე. ი. ნაწილაკთა გადასმის მიმართ. ანალოგიურად დავწერთ ბოზეს ნაწილაკთა სისტემის სიმეტრიულ ტალღურ ფუნქციას იმ შემთხვევაში, როცა თითოეული ბოზონი განსხვავებულ კვანტურ მდგომარეობაში იმყოფება. (106,18) ფუნქციის ანალოგიურად გვექნება

$$\Psi_s(x_1, x_2, \dots x_N) =$$

$$= \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{i_1 i_2 \dots i_N} \mathfrak{S}^2_{i_1 i_2 \dots i_N} \psi_{n_{i_1}}(x_1) x_{n_{i_2}}(x_2) \dots \psi_{n_{i_N}}(x_N) \qquad (106,22)$$

სადაც $\mathfrak{S}_{i_1 i_2 \dots i_N}$ ტენზორის როლი დაიყვანება მხოლოდ იმაზე რომ ყველა ნაწილაკს განსხვავებული კოორდინატები ჰქონდეს. იგი ამ შემთხვევაში შეგვიძლია შევცვალოთ გადანაცვლების ოპერატორით

$$\Psi_s(x_1, x_2, \dots x_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{p}^{N!} \hat{P}\psi_{n_1}(x_1)\,\psi_{n_2}(x_2)\dots\psi_{n_N}(x_N) \qquad (106{,}23)$$

სადაც ჯამება აიღება ყველა შესაძლო $N!$ გადანაცვლებით.

თუ ყველა N ნაწილაკი ერთ n მდგომარეობაში იმყოფება, მაშინ გვექნება მხოლოდ ერთი სიმეტრიული ფუნქცია

$$\Psi_s(x_1, x_2, \dots x_N) = \psi_n(x_1)\,\psi_n(x_2)\dots\psi_n(x_N). \qquad (106{,}24)$$

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

$$\Psi(x_1, x_2, \dots x_N) = [\psi_{n_1}(x_1)\,\psi_{n_1}(x_2)\dots\psi_{n_1}(x_{m_1})]\,[\psi_{n_2}(x_{m_1+1})\cdot$$
$$\psi_{n_2}(x_{m_1+2})\dots\psi_{n_2}(x_{m_1+m_2})]\dots \qquad (106{,}25)$$
$$[\dots\psi_{n_s}(x_N)].$$

თითოეული კვანტური მდგომარეობის შიგნით მოხდენილი გადანაცვლება (106,25) ტალღურ ფუნქციას არ ცვლის. ასეთ გადანაცვლებას არაეფექტური ვუწოდოთ. ყველა ის გადანაცვლება კი, რომლებიც ახდენენ განსხვავებულ კვანტურ მდგომარეობებში მყოფი ნაწილაკების გადანაცვლებას, (106,25) ფუნქციას ცვლის. ასეთ გადანაცვლებებს კი ეფექტური გადანაცვლებები ვუწოდოთ. ადვილი მისახვედრია, რომ ყველა შესაძლო $N!$ გადანაცვლებიდან

$$g = \frac{N!}{m_1!\,m_2!\dots m_s!} \qquad (106{,}26)$$

გადანაცვლება იქნება ეფექტური. გასაგებია ამის გამო, რომ განხილულ შემთხვევაში ნაცვლად (106,23) ფუნქციისა გვექნება შემდეგი სიმეტრიული ფუნქცია

$$\Psi_s(x_1, x_2, \dots x_N) =$$
$$= \frac{1}{\sqrt{g}} \sum_{p}^{g} \hat{P}\psi_{n_1}(x_1)\dots\psi_{n_1}(x_{m_1})\,\psi_{n_2}(x_{m_1+1})\dots\psi_{n_s}(x_N) \qquad (106{,}27)$$

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 გხედავთ, რომ ანტისიმეტრიული ფუნქციები მხოლოდ მაშინ მიიღება, როცა ყველა ნაწილაკი განსხვავებულ მდგომარეობაში იმყოფება, სიმეტრიული კი — ორივე შემთხვევაში.

§ 107. არაურთიერთმოქმედ ნახევარსაინიან 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 იგივური ნაწილაკების სპინებსა და ორბიტალურ მომენტებს შორის ურთიერთქმედება იმდენად მცირეა, რომ იგი შეგვიძლია უგულებელვყოთ. ასეთ შემთხვევაში, მაგალითად, თვითშეთანხმებული ველის მიახლოვების ჰამილტონიანში

$$\hat{H} = \sum_{k=1}^{N} \left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta_k + V(r_k) \right] \tag{107,1}$$

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.

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots \mathbf{r}_N; \mathbf{s}_1, \mathbf{s}_2, \dots \mathbf{s}_N) = \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2 \dots \mathbf{r}_N)\, \mathscr{Y}(\mathbf{s}_1, \mathbf{s}_2, \dots \mathbf{s}_N). \tag{107,2}$$

$\mathscr{Y}(\mathbf{s}_1, \mathbf{s}_2 \dots \mathbf{s}_N)$-ს უწოდებენ სპინურ ფუნქციას. სიმეტრიულობის ან ანტისიმეტრიულობის პირობას უნდა აკმაყოფილებდეს $\psi\mathscr{Y}$ 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.

$$\hat{p}_{ik}(\mathbf{r}, \mathbf{s})\, \Psi = (\hat{p}_{ik}(\mathbf{r})\, \psi)\, (\hat{p}_{ik}(\mathbf{s})\, \mathscr{Y}). \tag{107,3}$$

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

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; \mathbf{s}_1, \mathbf{s}_2) = \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)\, \mathscr{Y}(\mathbf{s}_1, \mathbf{s}_2). \tag{107,4}$$

როცა ნაწილაკებს შორის ურთიერთქმედება არა გვაქვს ან ეს ურთიერთქმედება შეგვიძლია თვითშეთანხმებული ველით შევცვალოთ, წინა პარაგრაფში განხილული მეთოდის გამოყენებით ადვილად დავწერთ კოორდინატულ ტალღურ ფუნქციას

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \{\psi_{n_1}(\mathbf{r}_1)\, \psi_{n_2}(\mathbf{r}_2) \pm \psi_{n_1}(\mathbf{r}_2)\, \psi_{n_2}(\mathbf{r}_1)\}. \tag{107,5}$$

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 (ამ მიმართულებად ავიღოთ z-ღერძის მიმართულება). როგორც ვიცით, სპინური ფუნქციებისათვის შემოღებულია სპეციალური აღნიშვნები α და β. პირველი გვიჩვენებს სპინის პარალელურობას z-ღერძთან, მეორე კი იმას, რომ სპინს z-ღერძის საწინააღმდეგო მიმართულება აქვს. იმ გარემოებას, თუ რომელი ნაწილაკის სპინის პროექციაზეა ლაპარაკი, აღნიშნავენ ასე: $\alpha(1)$, $\beta(2)$ რაც ნიშნავს, რომ პირველი ნაწილაკის სპინი z-ღერძის პარალელურია, მეორესი კი — ანტიპარალელური. მიუხედავად იმისა, რომ სპინურ ოპერატორებს პირველი და მეორე ნაწილაკისათვის საერთო და იგივე სახე აქვს, ისინი მხოლოდ იმ ნაწილაკის სპინურ ფუნქციაზე მოქმედებენ, რომლის შესაბამის სპინურ ოპერატორსაც წარმოადგენენ. ასე მაგალითად, σ_1^x მოქმედებს მხოლოდ პირველი ნაწილაკის სპინურ ფუნქციაზე, σ_2^z კი — მეორე ნაწილაკის სპინურ ფუნქციაზე. სპინური ფუნქციები შეიძლება ასეთი მატრიცების სახით ჩაიწეროს:

$$\chi_{1/2\,1/2}=\alpha, \quad \chi_{1/2,\,-1/2}=\beta, \tag{107,6}$$

სადაც

$$\alpha=\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & 0\end{pmatrix}, \quad \beta=\begin{pmatrix}0 & 0\\ 1 & 0\end{pmatrix}, \quad \alpha^+=\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & 0\end{pmatrix}, \quad \beta^+=\begin{pmatrix}0 & 1\\ 0 & 0\end{pmatrix}. \tag{107,7}$$

ამ ფუნქციების ორთო-ნორმირების პირობა მატრიცულად ასე გამოიხატება:

$$\langle\chi^+_{1/2\,m}\,|\,\chi_{1/2\,m'}\rangle=\delta_{mm'}, \quad (m,\,m'=\pm 1/2) \tag{107,8}$$

ორი ნახევარსპინიანი ნაწილაკის შემთხვევაში სისტემის სპინი $\mathbf{s}$ გამოისახება ფორმულით

$$\mathbf{S}=\mathbf{s}_1+\mathbf{s}_2, \quad M_s=m_{s_1}+m_{s_2}, \quad S_z=M_s\hbar, \tag{107,9}$$

სადაც $\mathbf{s}_1$ და $\mathbf{s}_2$ სათანადოდ პირველი და მეორე ნაწილაკის სპინებია და

$$\hat{\mathbf{s}}_k=\frac{\hbar}{2}\hat{\boldsymbol{\sigma}}_k^0 \quad (k=1,\,2) \tag{107,10}$$

$\boldsymbol{\sigma}_0(\sigma_x^0,\,\sigma_y^0,\,\sigma_z^0)$ პაულის მატრიცებია. ორი ნახევრის ტოლი სპინის შემთხვევაში შესაძლებელია შემდეგი მდგომარეობები:

$$\begin{array}{cccc}
\uparrow\uparrow & \downarrow\downarrow & \uparrow\downarrow & \downarrow\uparrow\\
\alpha(1)\,\alpha(2) & \beta(1)\,\beta(2) & \alpha(1)\,\beta(2) & \beta(1)\,\alpha(2)\\
M_s=1 & M_s=-1 & M_s=0 & M_s=0
\end{array} \tag{107,11}$$

ამ მდგომარეობებიდან შეგვიძლია შევადგინოთ შემდეგი სპინური ფუნქციები:

$$\left.\begin{aligned}
&\mathscr{Y}^{11}_{1/2\,1/2}(1,\,2)=\alpha(1)\,\alpha(2)\\
&\mathscr{Y}^{1-1}_{1/2\,1/2}(1,\,2)=\beta(1)\,\beta(2)\\
&\mathscr{Y}^{10}_{1/2\,1/2}(1,\,2)=\frac{1}{\sqrt{2}}\{\alpha(1)\,\beta(2)+\alpha(2)\,\beta(1)\}
\end{aligned}\right\} S=1.$$

$$\mathscr{Y}^{00}_{1/2\,1/2}(1,\,2)=\frac{1}{\sqrt{2}}\{\alpha(1)\,\beta(2)-\alpha(2)\,\beta(1)\}\quad S=0. \tag{107,12}$$

სპინური ტალღური ფუნქციისათვის შემოვიღეთ აღნიშვნა $\mathscr{Y}^{SM_s}_{s_1 s_2}(1,2)$. ეს ფუნქციები ორთო-ნორმირებულია პირობით

$$\langle \mathscr{Y}^{S'M'_s}_{s_1 s_2} | \mathscr{Y}^{SM_s}_{s_1 s_2} \rangle = \delta_{SS'} \delta_{M_s M'_s}. \tag{107,13}$$

ჩვენ ვხედავთ, რომ ნაწილაკთა სპინების გადასმისას (ე. ი. 1-ის შეცვლით 2-ით) პირველი სამი ფუნქცია არ იცვლება, მეოთხე კი ნიშანს იცვლის, ე. ი. ორი ნახევარსპინიანი ნაწილაკისათვის სულ გვექნება ოთხი ფუნქცია, აქედან სამი სიმეტრიული, ერთი — ანტისიმეტრიული.

რადგან $[\hat{\mathbf{S}}^2, \hat{S}_z]=0$, ამიტომ მიღებული სპინური ფუნქციები საერთო საკუთარი ფუნქციები უნდა იყოს როგორც $\hat{\mathbf{S}}^2$, ისე $\hat{S}_z$ ოპერატორებისა, ე. ი. უნდა დაცული იყოს განტოლებები;

$$\begin{aligned} \hat{S}_z \mathscr{Y}^{SM_s}_{s_1 s_2}(1,2) &= \hbar M_s \mathscr{Y}^{SM_s}_{s_1 s_2}(1,2), \\ \hat{\mathbf{S}}^2 \mathscr{Y}^{SM_s}_{s_1 s_2}(1,2) &= \hbar^2 S(S+1) \mathscr{Y}^{SM_s}_{s_1 s_2}(1,2). \end{aligned} \tag{107,14}$$

პირველ განტოლებაში $\mathscr{Y}^{SM_s}_{s_1 s_2}$ ფუნქციის შეტანით მივიღებთ, რომ $\mathscr{Y}^{11}$ შეესაბამება $M_s=1$ პროექციას, $\mathscr{Y}^{1,-1}$ შეესაბამება $M_s=-1$ პროექციას, ხოლო $\mathscr{Y}^{10}$ და $\mathscr{Y}^{00}$ 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

$$4S(S+1)\mathscr{Y}^{SM_s} = [\sigma_1^{0\,2} + \sigma_2^{0\,2} + 2(\sigma_1^0 \sigma_2^0)]\mathscr{Y}^{SM_s}, \tag{107,15}$$

რადგან $\sigma_1^{0\,2} = \sigma_2^{0\,2} = 3$, ამიტომ

$$2S(S+1)\mathscr{Y}^{SM_s} = [3 + (\sigma_1^0 \sigma_2^0)]\mathscr{Y}^{SM_s} \tag{107,16}$$

როცა $\mathscr{Y}^{SM_s}$-ის ნაცვლად შევიტანთ (107,12) ფუნქციებს, გამოსათვლელი გვექნება $(\sigma_1^0 \sigma_2^0)\,\alpha(1)\,\beta(2)$ და $(\sigma_1^0 \sigma_2^0)\,\alpha(2)\,\beta(1)$ კომბინაციები, ამიტომ გამოვთვალოთ ისინი წინასწარ. გვაქვს:

$$\begin{aligned} \sigma_x^0 \alpha &= \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \beta, \qquad \sigma_x^0 \beta = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \alpha. \\ \sigma_y^0 \alpha &= \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ i \end{pmatrix} = i\beta, \quad \sigma_y^0 \beta = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = -i\alpha, \\ \sigma_z^0 \alpha &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \alpha, \quad \sigma_z^0 \beta = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = -\beta. \end{aligned} \tag{107,17}$$

ამ ფორმულების გამოყენებით ადვილად მივიღებთ, რომ

$$\begin{aligned} (\sigma_1^0 \sigma_2^0)\,\alpha(1)\,\beta(2) &= 2\beta(1)\,\alpha(2) - \alpha(1)\,\beta(2), \\ (\sigma_1^0 \sigma_2^0)\,\alpha(2)\,\beta(1) &= 2\beta(2)\,\alpha(1) - \alpha(2)\,\beta(1). \end{aligned} \tag{107,18}$$

და (107,14)-ის მეორე განტოლება მოგვცემს

$$S(S+1)\mathscr{Y}^{SM_s} = 2\mathscr{Y}^{SM_s}; \quad S(S+1)\mathscr{Y}^{SM_s} = 0, \tag{107,19}$$

საიდანაც $S=1$ სიმეტრიული ფუნქციისათვის და $S=0$ — ანტისიმეტრიულისათვის. რადგან $\mathscr{Y}^{10}$ ფუნქციისათვის $S=1$ და $M_s=0$. ამიტომ იგი შეესაბამება სპინის z-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 ადვილად დაიწერება ორი ნახევარსპინიანი ნაწილაკის სრული ტალღური ფუნქციები:

$$\Psi^{1M_s}_{n_1 n_2}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; s_1, s_2) =$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_{n_1}(\mathbf{r}_1)\psi_{n_2}(\mathbf{r}_2) - \psi_{n_1}(\mathbf{r}_2)\psi_{n_2}(\mathbf{r}_1)]\,\mathscr{Y}^{1M_s}_{1/2\,1/2}(1,2) \qquad (107{,}20)$$

$$\Psi^{00}_{n_1 n_2}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; s_1, s_2) =$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_{n_1}(\mathbf{r}_1)\psi_{n_2}(\mathbf{r}_2) + \psi_{n_1}(\mathbf{r}_2)\psi_{n_2}(\mathbf{r}_1)]\,\mathscr{Y}^{00}_{1/2\,1/2}(1,2) \qquad (107{,}21)$$

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 $\left(2\frac{3}{2}+1\right)+2\left(2\cdot\frac{1}{2}+1\right)=8$ სპინური ფუნქცია. სრული სპინის პროექციებისათვის გვექნება მნიშვნელობები $M_{3/2}=3/2,\ 1/2,\ -1/2,\ -3/2$, $M_{1/2}=\pm 1/2$. ამიტომ შეგვიძლია შევადგინოთ მდგომარეობები:

$$\begin{array}{llll} \uparrow\uparrow\uparrow & \downarrow\uparrow\uparrow & \uparrow\downarrow\uparrow & \uparrow\uparrow\downarrow \\ \alpha(1)\,\alpha(2)\,\alpha(3), & \beta(1)\,\beta(2)\,\beta(3), & \alpha(1)\,\alpha(2)\,\beta(3), & \alpha(1)\,\beta(2)\,\beta(3) \\ \downarrow\downarrow\uparrow & \downarrow\uparrow\downarrow & \uparrow\downarrow\downarrow & \downarrow\downarrow\downarrow \\ \beta(1)\,\alpha(2)\,\alpha(3), & \beta(1)\,\alpha(2)\,\beta(3), & \alpha(1)\,\beta(2)\,\alpha(3), & \beta(1)\,\beta(2)\,\alpha(3) \end{array} \qquad (107{,}22)$$

ამ მდგომარეობებს შეესაბამება ფუნქციები:

$$\begin{aligned}
&\mathscr{Y}^{3/2\,3/2} = \alpha(1)\,\alpha(2)\,\alpha(3), \\
&\mathscr{Y}^{3/2\,-3/2} = \beta(1)\,\beta(2)\,\beta(3), \\
&\mathscr{Y}^{3/2\,1/2} = \frac{1}{\sqrt{3}}\{\alpha(1)\,\alpha(2)\,\beta(3) + \alpha(1)\,\beta(2)\,\alpha(3) + \beta(1)\,\alpha(2)\,\alpha(3)\}, \\
&\mathscr{Y}^{3/2\,-1/2} = \frac{1}{\sqrt{3}}\{\beta(1)\,\beta(2)\,\alpha(3) + \beta(1)\,\alpha(2)\,\beta(3) + \alpha(1)\,\beta(2)\,\beta(3)\}, \\
&\mathscr{Y}^{1/2\,1/2} = \frac{1}{\sqrt{6}}\{\alpha(1)\,\alpha(2)\,\beta(3) + \alpha(1)\,\beta(2)\,\alpha(3) - 2\beta(1)\,\alpha(2)\,\alpha(3)\} \\
&\mathscr{Y}^{1/2\,-1/2} = \frac{1}{\sqrt{6}}\{\beta(1)\,\beta(2)\,\alpha(3) + \beta(1)\,\alpha(2)\,\beta(3) - 2\alpha(1)\,\beta(2)\,\beta(3)\}
\end{aligned} \qquad (107{,}23)$$

$$\mathscr{Y}^{1/2\,1/2} = \frac{\alpha(1)}{\sqrt{2}}\{\alpha(2)\,\beta(3) - \beta(2)\,\alpha(3)\},$$

$$\mathscr{Y}^{1/2-1/2} = \frac{\beta(1)}{\sqrt{2}}\{\beta(2)\,\alpha(3) - \alpha(2)\,\beta(3)\}.$$

პირველი ოთხი ფუნქცია სიმეტრიულია სამიეე 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 შემაერთებელ რადიუსვექტორს ეწინება სახე $\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$. მაშინ ამ ორი ნაწილაკის სივრცული კოორდინატების გადასმა ნიშნავს $(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1)$-ს. ე. ი. $\mathbf{r}$ იცვლება $-\mathbf{r}$-ით. ცენტრალურ ველში ფარდობითი მოძრაობის ტალღურ ფუნქციას აქვს $R_{nl}(r)\,Y_{lm}(\theta, \varphi)$ სახე, ამიტომ $\mathbf{r} \to -\mathbf{r}$ გარდაქმნის დროს $r \to r$, $\theta \to \pi - \theta$ და $\varphi \to \pi + \varphi$. ასეთი გარდაქმნისას სფერულ ფუნქციას წინ უკრდება $(-1)^l$ მამრავლი. 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 ფუნქციაა!) 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 $(-1)^{S+1}$ მამრავლი, ამიტომ ორი ფერმის ნაწილაკის ფარდობითი მოძრაობის სრულ ტალღურ ფუნქციას ნაწილაკთა გადასმის დროს გაუჩნდება $(-1)^{l+S+1}$ ნიშანი. საიდანაც, როცა $S=1$, მაშინ $l=1, 3, 5\ldots$ და, როცა $S=0$, მაშინ $l=0, 2, 4\ldots$ და ა. შ.

სავარჯიშო მაგალითები

1. ვიპოვოთ, რის ტოლია $(\sigma_1^0\,\sigma_2^0)$ გამოსახულების საკუთარი მნიშვნელობები.

ამოხსნა. (107,16) ფორმულიდან აშკარაა, რომ

$$(\sigma_1^0\,\sigma_2^0) = 2S(S+1) - 3. \qquad (107{,}24)$$

საიდანაც მივიღებთ

$$\begin{aligned}(\sigma_1^0\,\sigma_2^0) &= -3, \quad \text{როცა } S=0.\\ (\sigma_1^0\,\sigma_2^0) &= 1, \quad \text{როცა } S=1.\end{aligned} \qquad (107{,}25)$$

ე. ი. ტრიპლეტურ მდგომარეობაში საკუთარი მნიშვნელობა 1-ის ტოლია, სინგლეტური კი—3-ის.

2. $(\sigma_1^0\,\sigma_2^0)$ გამოსახულების საშუალებით შეავდგინოთ ისეთი ოპერატორი, რომელსაც ექნება საკუთარი მნიშვნელობები: $+1$, როცა $S=1$ და -1, როცა $S=0$.

პასუხი:

$$\hat{R}=\frac{1+(\sigma_1^0\,\sigma_2^0)}{2}. \qquad (107,26)$$

3. (107,23) სპინური ფუნქციები ისე ჩაწეროთ, 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. დაამტკიცეთ, რომ თუ $\mathcal{E}_{i_1 i_2 \dots i_N}$ N-რანგის ერთეულოვანი სრულიად ანტისიმეტრიული ტენზორია, მაშინ

$$\sum_{i_2 \dots i_N} \mathcal{E}_{i_1 i_2 \cdots i_N} \mathcal{E}_{i_1' i_2 \cdots i_N} = (N-1)!\,\delta_{i_1 i_1'}. \qquad (107,27)$$

მარცხენა მხარე წარმოადგენს მეორე რანგის ტენზორს. რადგან იგი მიიღება ორი აქსიალური ტენზორის დაქვეითებით, ამიტომ იგი იქნება პოლარული ტენზორი. გარდა ამისა $\mathcal{E}_{i_1 i_2 \cdots i_N}$ ერთეულოვანი ტენზორია, ამიტომ იგი შეიძლება იყოს პროპორციული მხოლოდ $\delta_{i_1 i_1'}$ ტენზორისა, ამიტომ შეგვიძლია დავწეროთ

$$\sum_{i_2 \dots i_N} \mathcal{E}_{i_1 i_2 \cdots i_N} \mathcal{E}_{i_1' i_2 \cdots i_N} = A\delta_{i_1 i_1'}.$$

ტოლობის ორივე მხარე ერთხელ კიდევ დაეაქვეითოთ. ამისათვის გავუტოლოთ i_1 ინდექსი i_1'-ს და ავჯამოთ ერთიდან N-მდე. მარცხნივ მივიღებთ $N!$ მარჯვნივ კი AN; მაშასადამე, $A=(N-1)!$ და მაკიღებთ დასამტკიცებელ ტოლობას.

5. დაეამტკიცოთ, რომ

$$\sum_{i_3 \dots i_N} \mathcal{E}_{i_1 i_2 i_3 \cdots i_N} \mathcal{E}_{i_1' i_2' i_3 \cdots i_N} = (N-2)!\,[\delta_{i_1 i_1'}\delta_{i_2 i_2'} - \delta_{i_1 i_2'}\delta_{i_2 i_1'}]. \qquad (107,28)$$

ამ ტოლობის მარცხენა მხარე წარმოადგენს მეოთხე რანგის პოლარულ ტენზორს ამიტომ იგი პროპორციული იქნება δ_{ik} მეორე რანგის ორი ტენზორისა ნამრავლის; ამასთან, ტენზორი ნაშაის უნდა იყვლიდეს $i_1 = i_2$ და $i_1' = i_2'$ ინდექსების შეცვლისას, ამიტომ

$$\sum_{i_3 \dots i_N} \mathcal{E}_{i_1 i_2 i_3 \cdots i_N} \mathcal{E}_{i_1' i_2' i_3 \cdots i_N} = B[\delta_{i_1 i_1'}\delta_{i_2 i_2'} - \delta_{i_1 i_2'}\delta_{i_2 i_1'}]. \qquad (107,29)$$

ეხ გამოსახულება დაეაქვეითოთ ერთხელ, ამისათვის i_2 გავუტოლოთ i_2'-ს და ავჯამოთ. (107,27) ტოლობის გამოყენებით მივიღებთ $B=(N-2)!$, რაც ამტკიცებს (107,28) ფორმულას.

თავი XIV

მრავალელექტრონიანი 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 შემთხვევაში 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 ჰარტრი-ფოკისა და თომას-ფერმის მეთოდს. შემდეგ შევუდგებით რთული ატომების თვისებების ზოგად დახასიათებას და გავარკვევთ საკითხს, თუ როგორ უდგება 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 ატომგული, ველში მოძრაობს ორი ელექტრონი. ჩვენ შეგვიძლია განვიხილოთ ჰელიუმისებური ატომებიც, ე. ი. ისეთი ატომები, რომელთა გულს $+Ze$ მუხტი აქვს, ელექტრონთა რიცხვი კი ისევ 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.

დავეშვათ, 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.

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; \mathbf{s}_1, \mathbf{s}_2) = \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)\,\mathcal{X}(\mathbf{s}_1, \mathbf{s}_2). \qquad (108{,}1)$$

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

$S=1$, სპინური ფუნქცია სიმეტრიულია (გვაქვს სამი ფუნქცია), ამიტომ $\psi(r_1, r_2)$ იქნება ანტისიმეტრიული. ხოლო, როცა სრული სპინი $S=0$, სპინური ფუნქცია ანტისიმეტრიულია (გვაქვს ერთი ფუნქცია), ამიტომ $\psi(r_1, r_2)$ უნდა იყოს სიმეტრიული. ამგვარად, ჰელიუმის ატომის ენერგეტული დონეები იყოფა ორ კლასად, რომელთაგან ერთი კლასია ის, რომელიც შეესაბამება $S=1$ სპინს, მეორე კი — $S=0$ სპინს. რადგან $S=1$ სპინის შემთხვევაში გვაქვს სამი შესაძლო ორიენტაცია, ამიტომ სპინ-ორბიტალური ურთიერთქმედება გამოიწვევს $S=1$ სპინის შესაბამისი დონის სამად გახლეჩას. ე. ი. მივიღებთ ტრიპლეტს. $S=0$ სპინის შესაბამისი დონე კი ერთმაგი — სინგლეტური იქნება.

რადგან ჰელიუმის ატომის ეს ორი მდგომარეობა აიწერება სხვადასხვა ტიპის სიმეტრიულობის მქონე ტალღური ფუნქციებით, ხოლო სიმეტრიულობის ხასიათი დროის მიხედვით არ იცვლება, ამ ორი ტიპის ჰელიუმს შორის გადასვლა არ უნდა ხდებოდეს, ე. ი. ბუნებაში ურდა არსებობდეს ორი ტიპის ჰელიუმი; ერთი, რომელიც აიწერება სიმეტრიული სპინური ფუნქციით ($S=1$) და მეორე: რომელიც აიწერება ანტისიმეტრიული სპინური ფუნქციით ($S=0$), პირველი ტიპის ჰელიუმს ($S=1$) უწოდებენ ორთოჰელიუმს. მეორე ტიპისას კი — პარაჰელიუმს ($S=0$).

დავამტკიცოთ, რომ ენერგეტულად უფრო დაბალ მდგომარეობას შეესაბამება პარაჰელიუმი. მართლაც, პარაჰელიუმის კოორდინატული ფუნქცია სიმეტრიულია, ორთოჰელიუმისა კი — ანტისიმეტრიული. ამიტომ $r_1=r_2=r$ მნიშვნელობათათვის $\psi_{ორთო}(r, r)=-\psi_{ორთო}(r, r)$, საიდანაც $\psi_{ორთო}=0$, 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 აღვნიშნეთ, რომ ორთოჰელიუმის პარაჰელიუმში გადასვლა შეუძლებელია. მაგრამ ეს მტკიცება სამართლიანია მხოლოდ მაშინ, როცა „ls“ ურთიერთქმედებას არ ვითვალისწინებთ. სინამდვილეში კი „ls“ 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 „ls“ ურთიერთქმედება მცირეა, აღნიშნული გადასვლაც ნაკლებად საალბათო იქნება.

ორთო და პარაჰელიუმის არსებობის დამტკიცებით აიხსნა ყველა ის თავისებურებანი, რომლებიც გააჩნია ჰელიუმის სპექტრს; სახელდობრ, ახსნილ იქნა, თუ რატომ არა აქვს პარაჰელიუმს მულტიპლეტური სტრუქტურა, იმ დროს როცა ორთოჰელიუმის სპექტრალურ ხაზებს ასეთი სტრუქტურა ახასიათებს.

ჰელიუმის ატომის ენერგეტული დონეები. ვიპოვოთ ჰელიუმის ატომის ენერგეტული დონეები და ტალღური ფუნქციები. ჰელიუმის ატომის ამოცანის ბოსახსნელად არსებობს მრავალი მეთოდი. მათგან ჩვენ განვიხილავთ ყველაზე მარტივს — შეშფოთების თეორიას, თუმცა უნდა აღვნიშნოთ, რომ რაოდენობრივად ეს მეთოდი გაცილებით უფრო ცუდ შედეგებს იძლევა, ვიდრე სხვა მიახლოებითი მეთოდები. ამოცანის მიახლოებითი მეთოდებით ამოხსნა გამოწვეულია იმით, რომ ჰელიუმში საქმე გვაქვს სამი სხეულის ამოცანასთან, რომელიც ზუს

ტად არც კლასიკურში და არც კვანტურ მექანიკაში არ იხსნება. ჰელიუმის ატომის ამოცანას ამოვხსნით ორი დაშვებით, სახელდობრ, არ გავითვალისწინებთ: 1) „ss“ და „ls“ ურთიერთქმედებას და 2) რელატივისტურ ეფექტებს: ამ შემთხვევაში ჰელიუმის ატომის ჰამილტონიანს ექნება სახე

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta_1 - \frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta_2 - \frac{2e^2}{r_1} - \frac{2e^2}{r_2} + \frac{e^2}{r_{12}}; \qquad (108,2)$$

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:

$$\hat{H}(r_1, r_2) = \hat{H}_0(r_1) + \hat{H}_0(r_2) + \hat{H}'(r_{12}), \qquad (108,3)$$

სადაც

$$\hat{H}_0(r_i) = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta_i - \frac{2e^2}{r_i} \quad (i=1,\ 2) \qquad (108,4)$$

და

$$\hat{H}'(r_{12}) = \frac{e^2}{r_{12}}, \qquad (108,5)$$

გამოვიყენოთ შეშფოთების თეორია. $\hat{H}'(r_{12})$ განვიხილოთ როგორც მცირე შეშფოთება (თუმცა უნდა აღვნიშნოთ, რომ იგი ძალიან მცირე არ არის დანარჩენ წევრებთან შედარებით). შევარჩიოთ ნულოვანი მიახლოების ტალღური ფუნქციები. როცა $H'(r_{12})=0$, მაშინ ელექტრონებს შორის ურთიერთქმედება არა გვაქვს და ორივე ელექტრონი დამოუკიდებლად მოძრაობს გულის ირგვლივ. ვთქვათ, პირველი ელექტრონის ენერგია E_n-ის ტოლია და ხასიათდება $\psi_n(r_1)$ ტალღური ფუნქციით; მეორე ელექტრონის სათანადო სიდიდეები იყოს E_m და $\psi_m(r_2)$ (E_n, E_m, ψ_n, ψ_m წყალბადისებური ატომის ენერგია და ტალღური ფუნქციები იქნება), მაშინ ნულოვანი მიახლოების ფუნქციად, რომელიც ხასიათდება $E^\circ_{nm} = E_n + E_m$ ენერგიით, შეგვიძლია ავიღოთ

$$\psi_1(r_1, r_2) = \psi_n(r_1)\psi_m(r_2) \qquad (108,6)$$

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 იგივური ნაწილაკებია, ენერგიის $E^\circ_{nm} = E_n + E_m$ მნიშვნელობას შეესაბამება (108,6)-დან ელექტრონების გადასმით მიღებული ფუნქციაც, ე. ი.

$$\psi_2(r_1, r_2) = \psi_n(r_2)\psi_m(r_1), \qquad (108,7)$$

რომელიც აგრეთვე აკმაყოფილებს შრედინგერის შეუშფოთებელ განტოლებას:

$$(H_0(r_1) + H_0(r_2))\,\psi_n(r_2)\psi_m(r_1) = \psi_n(r_2)H_0(r_1)\psi_m(r_1) + \\ + \psi_m(r_1)H_0(r_2)\psi_n(r_2) = (E_n + E_m)\psi_n(r_2)\psi_m(r_1) \qquad (108,8)$$

ამგვარად, ენერგიის ერთ $E^{\circ}_{nm}=E_n+E_m$ 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 ვიჩვენეთ, სწორი ნულოვანი მიახლოების ფუნქციას ექნება სახე:

$$\varphi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)=b_1\psi_1(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)+b_2\psi_2(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2), \tag{108,9}$$

ხოლო b_1, b_2 კოეფიციენტები და ენერგიის საკუთარი მნიშვნელობები უნდა ვიპოვოთ (73,8) განტოლებიდან

$$\sum_{k=1} b_k\{H'_{ik}-E^{(1)}\delta_{ik}\}=0, \tag{108,10}$$

გაშლილად ეს განტოლება შემდეგი სახით გადაიწერება:

$$\begin{aligned}(H'_{11}-E^{(1)})b_1+H'_{12}b_2&=0,\\ H'_{21}b_1+(H'_{22}-E^{(1)})b_2&=0.\end{aligned} \tag{108,11}$$

ცხადია, რომ ჰელიუმის ატომის ენერგია პირველ მიახლოებაში ტოლი იქნება გამოსახულების $E=E^{\circ}_{nm}+E^{(1)}$. (108,10)-ში შემავალი H'_{ik} არის შეშფოთების ენერგიის მატრიცული ელემენტები; სახელდობრ,

$$\begin{aligned}H'_{11}&=\int \psi_1^*(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)\hat{H}'(\mathbf{r}_{12})\psi_1(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)\,d\mathbf{r}_1d\mathbf{r}_2,\\ H'_{12}&=\int \psi_1^*(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)\hat{H}'(\mathbf{r}_{12})\psi_2(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)d\mathbf{r}_1d\mathbf{r}_2,\end{aligned} \tag{108,12}$$

ხოლო $H'_{22}=H'_{11}$ და $H'_{12}=H'_{21}$. მართლაც, მაგალითად, H'_{12} 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:

$$C=e^2\int |\psi_n(\mathbf{r}_1)|^2|\psi_m(\mathbf{r}_2)|^2\frac{d\mathbf{r}_1\,d\mathbf{r}_2}{r_{12}}, \tag{108,13}$$

$$A=e^2\int \psi_m^*(\mathbf{r}_1)\psi_n(\mathbf{r}_1)\psi_n^*(\mathbf{r}_2)\psi_m(\mathbf{r}_2)\frac{d\mathbf{r}_1\,d\mathbf{r}_2}{r_{12}}. \tag{108,14}$$

როგორც ვხედავთ C და A ნამდვილი სიდიდეებია $C^*=C$ და $A^*=A$. (108,11) სისტემის საუკუნებრივ განტოლებას ექნება სახე

$$\begin{vmatrix} C-E^{(1)} & A \\ A & C-E^{(1)}\end{vmatrix}=0, \tag{108,15}$$

რომლის ამონახსნი $E^{(1)}$-სათვის იქნება

$$E^{(1)}=C\pm A. \tag{108,16}$$

ახლა საჭიროა ენერგიის ეს შესწორება შევიტანოთ (108,11) სისტემაში და ვიპოვოთ b_1 და b_2. პირველი ფესვის $E^{(1)}=C+A$ შეტანა მოგვცემს $b_1=b_2$ ხოლო მეორე $E^{(1)}=C-A$ ფესვისათვის განტოლების ამონახსნი იქნება $b_1=-b_2$. განსაკუთრებით საინტერესო დაგვრჩა ერთი შუალედური, რომელსაც ვიპოვით ნორმირების პირობიდან. ამგვარად, ნულოვანი მიახლოების ფუნქციებისათვის, (108,9) ფორმულის თანახმად გვექნება:

$$\varphi_s = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\psi_1 + \psi_2\right) = \frac{1}{\sqrt{2}}\{\psi_n(\mathbf{r}_1)\,\psi_m(\mathbf{r}_2) + \psi_n(\mathbf{r}_2)\,\psi_m(\mathbf{r}_1)\}, \quad S=0 \qquad (108,17)$$

$$\varphi_a = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\psi_1 - \psi_2\right) = \frac{1}{\sqrt{2}}\{\psi_n(\mathbf{r}_1)\,\psi_m(\mathbf{r}_2) - \psi_n(\mathbf{r}_2)\,\psi_m(\mathbf{r}_1)\}, \quad S=1 \qquad (108,18)$$

$\frac{1}{\sqrt{2}}$ არის ნორმირების კოეფიციენტი. ელექტრონების გადასმის მიმართ პირველი ფუნქცია სიმეტრიულია, მეორე კი—ანტისიმეტრიული. (108,16) ფორმულის თანახმად, სიმეტრიულ კოორდინატულ ფუნქციას (პარაჰელიუმი) შეესაბამება ენერგია

$$E_{\text{პარა}} = E_n + E_m + C + A, \qquad (S=0) \qquad (108,19)$$

ხოლო ანტისიმეტრიულ კოორდინატულ ფუნქციას (ორთოჰელიუმი)

$$E_{\text{ორთო}} = E_n + E_m + C - A \qquad (S=1) \qquad (108,20)$$

ამგვარად, თეორია გვიჩვენებს, რომ უნდა არსებობდეს ჰელიუმის ატომის ორი მდგომარეობა. ერთი, რომელიც აიწერება სიმეტრიული კოორდინატული ფუნქციით (პარაჰელიუმი), და მეორე, რომელიც აიწერება ანტისიმეტრიული კოორდინატული ფუნქციით (ორთოჰელიუმი). 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 პარაჰელიუმის—დონედ.

ვაჩვენოთ, რომ ჰელიუმის ნორმალურ მდგომარეობას პარაჰელიუმის მდგომარეობა შეესაბამება. მართლაც, ძირითად მდგომარეობაში $n=1$ და E_1 ენერგიას შეესაბამება მხოლოდ ერთი ტალღური ფუნქცია—წყალბადისებური ატომის ძირითადი მდგომარეობის ფუნქცია $\psi_{100}(\mathbf{r}_1)$. ძირითად მდგომარეობაში $n=m=1$ ე. ი. $\varphi_a=0$, ამიტომ დაგვრჩება φ_s, ე. ი. პარაჰელიუმის მდგომარეობა. მის ტალღურ ფუნქციას ნულოვან მიახლოებაში ექნება სახე

$$\psi(r_1, r_2) = \frac{2^3}{\pi a_0^3}\, e^{-\frac{2}{a_0}(r_1 + r_2)} \qquad (108,21)$$

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 უხეშობის გამო უკეთესი თანხვდენა 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 გამოწვეულია იმით,

რომ ჰელიუმის ატომში გაცვლითი გადაგვარების გარდა იხსნება „l“ გადაგვარებაც. მართლაც, დავუშვათ, რომ გვაქვს წყალბადისებური ატომი. მაშინ, როგორც ვიცით, მისთვის ადგილი აქვს „l“ 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 l-ის ფუნქციაც იქნება, რაც მოგვცემს დამატებით ენერგეტულ დონეებს.

§ 109. გაცვლითი ურთიერთქმედება

ამ პარაგრაფში გამოვარკვიოთ C და A სიდიდეების ფიზიკური არსი. ამ მიზნით შემოვიღოთ აღნიშვნები:

$$\rho_{nn}(\mathbf{r}) = -e \mid \psi_n(\mathbf{r}) \mid^2, \tag{109,1}$$

$$\rho_{mn}(\mathbf{r}) = -e\psi^*_m(\mathbf{r})\,\psi_n(\mathbf{r}). \tag{109,2}$$

$\rho_{nn}(\mathbf{r})$ 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:

$$C = \int \frac{\rho_{nn}(\mathbf{r}_1)\rho_{mm}(\mathbf{r}_2)}{r_{12}} d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \tag{109,3}$$

$$A = \int \frac{\rho_{mn}(\mathbf{r}_1)\rho^*_{mn}(\mathbf{r}_2)}{r_{12}} d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2; \tag{109,4}$$

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 $A=0$. ვიჩვენოთ, რომ გაცვლითი ენერგია გამოწვეულია ψ_1 და ψ_2 ფუნქციების ინტერფერენციით. ამისათვის ვიპოვოთ ენერგიის $E^{(1)}$ შესწორება ჰელიუმის ატომისათვის. როგორც ცნობილია, იგი ტოლია შეშფოთების ენერგიის საშუალო მნიშვნელობისა. ამიტომ

$$E^{(1)} = \overline{\frac{e^2}{r_{12}}} = \int \frac{e^2}{r_{12}} \mid \varphi \mid^2 d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2. \tag{109,5}$$

სადაც

$$\varphi = \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_1 \pm \psi_2). \tag{109,6}$$

შევიტანოთ φ ფუნქცია (109,5) ფორმულაში. მივიღებთ

$$E^{(1)} = \frac{1}{2} \int \frac{e^2}{r_{12}} \{ \mid \psi_1 \mid^2 + \mid \psi_2 \mid^2 \pm (\psi_1\psi^*_2 + \psi^*_1\psi_2) \} d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2; \tag{109,7}$$

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

$$E^{(1)} = C \pm A. \tag{109,8}$$

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 dr_1 მოცულობაში, მეორე კი—dr_2-ში, დამოუკიდებლად იმისა, თუ რომელ მდგომარეობაში იმყოფებიან ეს ელექტრონები, მოცემული იქნებოდა ფორმულით

$$w_1 dr_1 dr_2 = \frac{1}{2}\{|\psi_1|^2 + |\psi_2|^2\}\, dr_1 dr_2. \tag{109,9}$$

1/2 შემოღებულია ალბათობის ერთზე ნორმირებისათვის. ამ შემთხვევაში გამოთვლილი ენერგიის შესწორება $E^{(1)} = \int \frac{e^2}{r_{12}} w_1 dr_1\, dr_2$ მოგვცემდა მხოლოდ კულონურ ენერგიას—C. სინამდვილეში კი ორი ელექტრონის ტალღურ ფუნქციას აქვს (109,5) 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 $dr_1\, dr_2$ მოცულობაში ყოფნის ალბათობა ტოლი იქნება გამოსახულების

$$w_2\, dr_1\, dr_2 = |\varphi|^2 dr_1 dr_2 = \frac{1}{2}\{(|\psi_1|^2 + |\psi_2|^2) \pm$$

$$\pm\, (\psi_1 \psi_2^* + \psi_1^* \psi_2)\}\, dr_1 dr_2. \tag{109,10}$$

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, არამედ იგი ჩნდება ყველგან, სადაც კი საქმე გვაქვს ორ იგივურ 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 იგივურ 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 ჰელიუმის ატომისათვის შესაძლებელია შეშფოთების 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

$$\hat{A} = \sum_{k=1}^{N} \hat{A}(x_k) = \sum_{k=1}^{N} \hat{A}(k). \tag{110,1}$$

ამ ოპერატორს ერთნაწილაკობრივი ოპერატორი ვუწოდოთ, რადგან თითოეული $\hat{A}(1)$, $\hat{A}(2)\ldots$ დამოკიდებულია მხოლოდ ერთი ნაწილაკის კოორდინატებზე. ვიპოვოთ ამ ოპერატორის საშუალო მნიშვნელობა Ψ მდგომარეობაში. რომელიც გამოიხატება სლეტერის დეტერმინანტის სახით

$$\Psi(x_1, x_2, \ldots, x_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{i_1 i_2 \ldots i_N} \mathfrak{E}_{i_1 i_2 \ldots i_N} \psi_{i_1}(x_1)\psi_{i_2}(x_2)\cdots\psi_{i_N}(x_N). \tag{110,2}$$

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

$$\langle \Psi \mid \hat{A} \mid \Psi \rangle = \frac{1}{N!} \sum_{i_1 i_2 \ldots i_N} \sum_{i'_1 i'_2 \ldots i'_N} \mathfrak{E}_{i_1 i_2 \ldots i_N} \mathfrak{E}_{i'_1 i'_2 \ldots i'_N} \cdot$$
$$\langle \psi_{i_1} \psi_{i_2} \ldots \psi_{i_N} \Big| \sum_{k=1}^{N} \hat{A}(x_k) \Big| \psi_{i'_1} \psi_{i'_2} \ldots \psi_{i'_N} \rangle \tag{110,3}$$

ცხადია, რომ $\psi_{i_k}(x_k)$ ფუნქციების ორთო-ნორმირების გამო

$$\begin{aligned}
&\langle \psi_{i_1} \psi_{i_2} \ldots \psi_{i_N} \Big| \sum_{k=1}^{N} \hat{A}(k) \Big| \psi_{i'_1} \psi_{i'_2} \ldots \psi_{i'_N} \rangle = \\
&= \langle \psi_{i_1} \mid \hat{A}(1) \mid \psi_{i'_1} \rangle \delta_{i_2 i'_2} \delta_{i_3 i'_3} \ldots \delta_{i_N i'_N} + \\
&+ \langle \psi_{i_2} \mid \hat{A}(2) \mid \psi_{i'_2} \rangle \delta_{i_1 i'_1} \delta_{i_3 i'_3} \ldots \delta_{i_N i'_N} + \cdots + \\
&+ \langle \psi_{i_N} \mid \hat{A}(N) \mid \psi_{i'_N} \rangle \delta_{i_1 i'_1} \ldots \delta_{i_{N-1} i'_{N-1}}.
\end{aligned} \tag{110,4}$$

ეს გამოსახულება შევიტანოთ (110,3)-ში და დელტა ფუნქციებით ჩავატაროთ ფილტრაცია; გვექნება

$$\langle \Psi \mid \hat{A} \mid \Psi \rangle = \frac{1}{N!} \left\{ \sum_{i_1 i_1'} \langle \psi_{i_1} \mid \hat{A}(1) \mid \psi_{i_1'} \rangle \sum_{i_2 i_3 \ldots i_N} \mathfrak{S}_{i_1 i_2 \ldots i_N} \mathfrak{S}_{i_1' i_2 \ldots i_N} + \right. \tag{110,5}$$

$$\left. + \cdots + \sum_{i_N i_N'} \langle \psi_{i_N} \mid \hat{A}(N) \mid \psi_{i_N'} \rangle \sum_{i_1 i_2 \ldots i_{N-1}} \mathfrak{S}_{i_1 i_2 \ldots i_{N-1} i_N} \mathfrak{S}_{i_1 i_2 \ldots i_{N-1} i_N'} \right\}.$$

ახლა გავიხსენოთ ფორმულა

$$\sum_{i_2 i_3 \ldots i_N} \mathfrak{S}_{i_1 i_2 \ldots i_N} \mathfrak{S}_{i_1' i_2 \ldots i_N} = (N-1)!\, \delta_{i_1 i_1'} \tag{110,6}$$

მაშინ გვექნება, რომ

$$\langle \Psi \mid \hat{A} \mid \Psi \rangle = \frac{(N-1)!}{N!} \left\{ \sum_{i_1=1}^{N} \langle \psi_{i_1} \mid \hat{A}(1) \mid \psi_{i_1} \rangle + \cdots + \right.$$

$$\left. + \sum_{i_N=1}^{N} \langle \psi_{i_N} \mid \hat{A}(N) \mid \psi_{i_N} \rangle \right\} \tag{110,7}$$

რადგან გარე ძალები, რომლებიც (110,1)-ით გამოიხატება ყველა ნაწილაკზე ერთნაირად მოქმედებს, ამიტომ (110,7)-ში შემავალი ჯამები ერთმანეთის ტოლია და საბოლოოდ გვექნება

$$\langle \Psi \mid \hat{A} \mid \Psi \rangle = \sum_{i=1}^{N} \langle \psi_i(x) \mid \hat{A}(x) \mid \psi_i(x) \rangle \equiv \sum_{i=1}^{N} A_{ii}, \tag{110,8}$$

სადაც A_{ii} არის $\hat{A}$ ოპერატორის დიაგონალური მატრიცული ელემენტი. ახლა განვიხილოთ შემდეგი ორნაწილაკობრივი ოპერატორი:

$$\hat{B} = \frac{1}{2} \sum_{k}^{N} \sum_{j=1}^{N}{}' \hat{B}(x_k, x_j) \equiv \frac{1}{2} \sum_{k,j=1}^{N}{}' \hat{B}(k, j). \tag{110,9}$$

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:

$$\langle \Psi \mid \hat{B} \mid \Psi \rangle = \frac{1}{2N!} \sum_{i_1 \ldots i_N} \sum_{i_1' \ldots i_N'} \mathfrak{S}_{i_1 i_2 \ldots i_N} \mathfrak{S}_{i_1' i_2' \ldots i_N'} \cdot$$

$$\langle \psi_{i_1} \ldots \psi_{i_N} \Big| \sum_{k,j}{}' \hat{B}(k, j) \Big| \psi_{i_1'} \ldots \psi_{i_N'} \rangle \tag{110,10}$$

განვიხილოთ წყვილური ურთიერთქმედების მხოლოდ ერთი წევრი; ვთქვათ $k=1$, $j=2$ წევრი. გვექნება

$$\frac{1}{2N!}\sum_{i_1\ldots i_N}\sum_{i'_1\ldots i'_N}\mathcal{E}_{i_1 i_2\quad i_N}\mathcal{E}_{i'_1 i'_2\quad i'_N}\langle\psi_{i_1}\psi_{i_2}|\hat{B}(1,2)|\psi_{i'_1}\psi_{i'_2}\rangle$$

$$\delta_{i_3 i'_3}\ldots\delta_{i_N i'_N}=\frac{1}{2N!}\sum_{i_1 i_2}{}'\sum_{i'_1 i'_2}{}'\langle\psi_{i_1}\psi_{i_2}|\hat{B}(1,2)|\psi_{i'_1}\psi_{i'_2}\rangle$$

$$\sum_{i_3\ldots i_N}\mathcal{E}_{i_1 i_2 i_3\ldots i_N}\mathcal{E}_{i'_1 i'_2 i_3\ldots i_N}. \qquad (110{,}11)$$

ახლა გავიხსენოთ, რომ

$$\sum_{i_3\ldots i_N}\mathcal{E}_{i_1 i_2 i_3\ldots i_N}\mathcal{E}_{i'_1 i'_2 i_3\ldots i_N}=(N-2)!\,|\delta_{i_1 i'_1}\delta_{i_2 i'_2}-\delta_{i_1 i'_2}\delta_{i_2 i'_1}|. \qquad (110{,}12)$$

შედეგად (110,11) ჯამი მიიღებს შემდეგ სახეს:

$$\frac{(N-2)!}{2N!}\Big[\sum_{i_1 i_2}{}'\langle\psi_{i_1}\psi_{i_2}|\hat{B}(1,2)|\psi_{i_1}\psi_{i_2}\rangle-$$

$$-\sum_{i_1 i_2}{}'\langle\psi_{i_1}\psi_{i_2}|\hat{B}(1,2)|\psi_{i_2}\psi_{i_1}\rangle\Big]. \qquad (110{,}13)$$

რადგან ნაწილაკთა N რიცხვის დროს წყვილების რაოდენობა $N(N-1)$-ის ტოლია და ყველა წყვილი ერთნაირად ურთიერთქმედებს, ამიტომ საბოლოოდ გვექნება

$$\langle\Psi|\hat{B}|\Psi\rangle=\frac{1}{2}\sum_{i_1 i_2=1}^{N}\{\langle\psi_{i_1}(x_1)\psi_{i_2}(x_2)|\hat{B}(x_1,x_2)|\psi_{i_1}(x_1)\psi_{i_2}(x_2)\rangle-$$

$$-\langle\psi_{i_1}(x_1)\psi_{i_2}(x_2)|\hat{B}(x_1,x_2)|\psi_{i_2}(x_1)\psi_{i_1}(x_2)\rangle\}. \qquad (110{,}14)$$

ცხადია, x_1 და x_2-ის ნაცვლად ჩვენ შეგვეძლო აგვეღო ნებისმიერი სხვა წყვილი. აქ 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) სლეტერის დეტერმინანტის სახით. ამ ფუნქციებს ჩავთვლით ნულოვანი მიახლოების ფუნქციებად და ვიპოვით სისტემის ენერგიის საშუალო მნიშვნელობას. რთული ატომის ჰამილტონიანი სპინური ურთიერთქმედების გარეშე ასე ჩაიწერება:

$$\hat{H}=\sum_{k=1}^{N}\hat{H}(\mathbf{r}_k)+\frac{1}{2}\sum_{k,l=1}^{N}{}'\frac{e^2}{r_{kl}}, \qquad (110{,}15)$$

სადაც $r_{kl}=|\mathbf{r}_k-\mathbf{r}_l|$, ხოლო

$$\hat{H}(r_k) = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta_k - \frac{Ze^2}{r_k}, \qquad (110,16)$$

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 გავითვალისწინოთ ($r_{kj}=r_{jk}$), ხოლო შტრიხი ჯამის ნიშანზე გამორიცხავს ელექტრონის თავისთავზე მოქმედებას ($k\neq j$).

ვიპოვოთ რთული ატომის ენერგიის საშუალო მნიშვნელობა

$$\langle E\rangle = \langle \Psi \mid \hat{H} \mid \Psi\rangle. \qquad (110,17)$$

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:

$$\langle E\rangle = \sum_{i=1}^{N} \langle \psi_i(r) \mid \hat{H}(r) \mid \psi_i(r)\rangle + \frac{1}{2}\sum_{k,j=1}^{N}{}' \left\{ \langle \psi_k(r)\psi_j(r') \left| \frac{e^2}{|r-r'|} \right| \right.$$

$$\left. \psi_k(r)\psi_j(r')\rangle - \langle \psi_k(r)\psi_j(r') \left| \frac{e^2}{|r-r'|} \right| \psi_j(r)\psi_k(r')\rangle \right\} \qquad (110,18)$$

ცხადია, რომ

$$H_{ii} = \langle \psi_i \mid \hat{H} \mid \psi_i\rangle = \int \psi_i^* \left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta - \frac{Ze^2}{r} \right] \psi_i d\tau. \qquad (110,19)$$

H_{ii} ერთნაწილაკობრივი ჰამილტონიანის დიაგონალური მატრიცული ელემენტია. თუ $\psi_i(r)$ 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

$$\langle E\rangle = \sum_{i=1}^{N} H_{ii} + \frac{e^2}{2}\sum_{k,j}^{N}{}' \left\{ \int \frac{|\psi_k(r)|^2 |\psi_j(r)|^2}{|r-r'|} d\tau\, d\tau' - \right.$$

$$\left. - \int \frac{[\psi_k^*(r)\psi_k(r')][\psi_j(r)\psi_j^*(r')]}{|r-r'|} d\tau\, d\tau' \right\}. \qquad (110,20)$$

თუ შემოვიღებთ აღნიშვნებს:

$$\rho(\mathbf{r}) = -e \sum_{k=1}^{N} |\psi_k(\mathbf{r})|^2, \tag{110,21}$$

$$\rho(\mathbf{r},\mathbf{r}') = -e \sum_{k=1}^{N} \psi_k^*(\mathbf{r})\psi_k(\mathbf{r}'), \tag{110,22}$$

სადაც $\rho(\mathbf{r})$ არის ელექტრონული ღრუბლის სრული სიმკვრივე, ხოლო $\rho(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ — გაცვლითი სიმკვრივე, მაშინ (110,20) ფორმულა ასე გადაიწერება:

$$\langle E\rangle = \sum_{i=1}^{N} H_{ii} + \frac{1}{2}\iint \frac{\rho(\mathbf{r})\rho(\mathbf{r}') - |\rho(\mathbf{r},\mathbf{r}')|^2}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} d\mathbf{r}d\mathbf{r}', \tag{110,23}$$

ენერგიის ეს მნიშვნელობა ნაპოვნი იყო ფოკის მიერ. როცა გაცვლას არ ვითვალისწინებთ $\rho(\mathbf{r}, \mathbf{r}')=0$ და (110,23) გადადის გამოსახულებაში

$$\langle E\rangle = \sum_{i=1}^{N} H_{ii} + \frac{1}{2}\iint \frac{\rho(\mathbf{r})\rho(\mathbf{r}')d\mathbf{r}d\mathbf{r}'}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}. \tag{110,24}$$

ეს ფორმულა მიღებული იყო ჰარტრის მიერ ელექტრონთა იგივეურობის გათვალისწინების გარეშე. ჰარტრი ნაცვლად სლეტერის დეტერმინანტისა იყენებდა შემდეგ ნამრავლს:

$$\Psi(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2,\ldots,\mathbf{r}_N) = \psi_1(\mathbf{r}_1)\psi_2(\mathbf{r}_2),\ldots,\psi_N(\mathbf{r}_N). \tag{110,25}$$

ადვილად შემოწმდება, რომ (110,15) ჰამილტონიანის გასაშუალოებით (110,25) ფუნქციით მართლაც მიიღება (110,24) გამოსახულება[1].

რთული ატომების ენერგიის გამოთვლის ეს მეთოდი გაუმჯობესებულ იქნა ფოკის მიერ, მან, ჰარტრისაგან განსხვავებით, ატომის ტალღური ფუნქციისათვის აიღო სლეტერის 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 მიახლოვებისა, რომელიც საფუძვლად უძევს რთული ატომების ენერგიის გამოთვლის ჰარტრი-ფოკის მეთოდს, ივი, როგორც ნულოვანი მიახლოვება, 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 ისეთსავე შედეგს იძლევა რასაც გასაშუალოება სლეტერის დეტერმინანტით.

$$\int \frac{e^2}{r_{jk}} \mid \psi(\mathbf{r}_j) \mid^2 d\mathbf{r}_j. \qquad (110.26)$$

თუ ელექტრონთა რიცხვი ატომში N-ს უდრის, მაშინ k-ური ნაწილაკის ურთიერთქმედების პოტენციალს გულთან და ელექტრონებთან ექნება სახე

$$V(\mathbf{r}_k) = -\frac{Ze^2}{r_k} + \sum_{j=1}^{N}{}' \int \frac{e^2 \mid \psi(\mathbf{r}_j) \mid^2}{\mid \mathbf{r}_k - \mathbf{r}_j \mid} d\mathbf{r}_j. \qquad (110,27)$$

საჭიროა ამ პოტენციალის შეტანა შრედინგერის განტოლებაში და ამოხსნა. ელექტრონის ტალღური ფუნქცია შედის ინტეგრალში, ამიტომ გვექნება ინტეგრო-დიფერენციალური განტოლება, რომლის ამოხსნა შესაძლებელია მიმდევრობითი მიახლოების მეთოდით. მაგალითად, ნულოვან მიახლოებაში შეგვიძლია ავიღოთ წყალბადისებური ატომის ტალღური ფუნქციები. ამ ფუნქციის საშუალებით ვიპოვოთ (110,27) პოტენციალურ ენერგიას. შემდეგ მას შევიტანთ შრედინგერის განტოლებაში და ამოვხსნით. ვიპოვით ენერგიას და ტალღურ ფუნქციას. ამ ახალი ტალღური ფუნქციით შევადგენთ შესწორებულ $V^{(1)}(\mathbf{r}_k)$ პოტენციალს, შემდეგ კვლავ შევიტანთ შრედინგერის განტოლებაში, ვიპოვით ახალ ტალღურ ფუნქციას და ენერგიას და ა. შ. ამ მეთოდის პრაქტიკული გამოყენება დიდ გამოთვლით სიძნელეებთან არის დაკავშირებული, ამიტომ აქ მასზე არ შევჩერდებით.

§ 111. თომას-ფერმის მეთოდი

მიახლოებითი გამოთვლის სრულიად განსხვავებულ მეთოდს წარმოადგენს თომას-ფერმის მეთოდი[1]. ჰარტრი-ფოკის მეთოდის გამოყენება დაკავშირებულია დიდ ტექნიკურ სიძნელეებთან. ამ მეთოდის გამოყენება მძიმე ატომებისათვის განსაკუთრებით რთულდება, მაგრამ, საბედნიეროდ, სწორედ მძიმე ატომებისათვის გამოიყენება თომას-ფერმის მეთოდი, რომელიც საშუალებას გვაძლევს გამოვთვალოთ მუხტისა და ველის განაწილება ატომში. თომასისა და ფერმის მეთოდი არ მოითხოვს შრედინგერის განტოლების ამოხსნას და ემყარება მხოლოდ კვანტური სტატისტიკის ელემენტებსა და პაულის პრინციპს. ამიტომ ამ მეთოდს ხშირად სტატისტიკურ მეთოდსაც უწოდებენ. მისი საზღვრები გაცილებით ნაკლებია, ვიდრე თვითშეთანხმებული ველის მეთოდისა, სამაგიეროდ, იგი ხასიათდება საგრძნობი სიმარტივით.

თომას-ფერმის მეთოდში იგულისხმება, რომ ელექტრონები რთულ ატომებში, რადგან მათ უმრავლესობას აქვს დიდი კვანტური რიცხვები, შეგვიძლია განვიხილოთ როგორც ისეთი კვაზიკლასიკური ნაწილაკები, რომელთათვისაც აზრი აქვს ფაზური ტალღების 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 ატომის Z ელექტრონის მუხტის ρ სიმკვრივე უწყვეტი სიდიდეა.

დავუშვათ, ელექტრონის განაწილება ატომგულის ირგვლივ რადიალური სიმეტრიისაა, ატომში ელექტრონის სრულ ენერგიას აქვნება სახე

$$E = \frac{p^2}{2\mu} - e\varphi(r). \qquad (111,1)$$

[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 $p \leqslant p_0$, ელექტრონები შეიძლება დაკავებულ იქნას ატომის შიგნით. ჩვენთვის საჭიროა სწორედ ისეთი ელექტრონების განხილვა, რომელთა იმპულსი $p \leqslant p_0$. იმპულსის ზღვრულ მნიშვნელობას მოგვცემს (111,1) ფორმულა. $E=0$ შემთხვევაში მივიღებთ

$$p_0 = \sqrt{2\mu e\varphi(r)}, \tag{111,2}$$

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

$$\left(\frac{L}{2\pi\hbar}\right)^3 p^2 dp d\Omega, \tag{111,3}$$

სადაც $p^2 dp d\Omega = d\mathbf{p}$ წარმოადგენს იმპულსური სივრცის მოცულობის ელემენტს. ჩვენ გვაინტერესებს მდგომარეობათა რიცხვი, რომლისთვისაც $0 \leqslant p \leqslant p_0$. ამისათვის საჭიროა ამ გამოსახულების ინტეგრალი ავიღოთ $(0,\ p_0)$ საზღვრებში. ამგვარად, ფაზურ სივრცეში გვექნება

$$\frac{4\pi p_0^3 L^3}{3(2\pi\hbar)^3} \tag{111,4}$$

უჯრედი. რადგან, პაულის პრინციპის თანახმად, თითოეულ მდგომარეობაში შეიძლება მოთავსდეს ორი ელექტრონი საწინააღმდეგო სპინებით, ამიტომ τ მოცულობაში $0 \leqslant p \leqslant p_0$ იმპულსებით მოთავსებული იქნება ელექტრონთა შემდეგი რიცხვი

$$n = \frac{8\pi p_0^3}{3(2\pi\hbar)^3}, \tag{111,5}$$

(111,2) გამოსახულების თანახმად, ეს რიცხვი იქნება r-ის ფუნქცია

$$n = \frac{[2\mu e\varphi(r)]^{3/2}}{3\pi^2\hbar^3}. \tag{111,6}$$

სათანადო მუხტის სიმკვრივეს კი ექნება სახე

$$\rho(r) = -e\,\frac{[2\mu e\varphi(r)]^{3/2}}{3\pi^2\hbar^3}. \tag{111,7}$$

მეორე მხრივ, პუასონის განტოლების თანახმად, სიმკვრივე პოტენციალურ ენერგიასთან დაკავშირებულია განტოლებით

$$\Delta\varphi = -4\pi\rho(r). \tag{111,8}$$

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

$$\frac{1}{r}\frac{d^2}{dr^2}(r\varphi) = \frac{4e}{3\pi\hbar^3}(2\mu e)^{3/2}\varphi^{3/2}(r). \qquad (111,9)$$

ატომის შიგნით ველის განაწილების მოსაძებნად საჭიროა (111,9) განტოლების ამოხსნა სათანადო სასაზღვრო პირობებში; როცა $r\to 0$, მაშინ პოტენციალური ენერგია, ძირითადად, ატომგულის მიერ არის გამოწვეული და ამიტომ $\varphi(r) \to \frac{Ze^2}{r}$; ხოლო როცა $r \to \infty$, მაშინ სრული მუხტი, რომელიც მოთავსებულია r რადიუსიან სფეროში, ნულის ტოლი უნდა იყოს; ამიტომ $\varphi(r)$ უფრო ჩქარა კლებულობს, ვიდრე $\frac{1}{r}$ და, ამგვარად, $r\varphi(r)\to 0$, როცა $r\to\infty$. მივიღეთ შემდეგი სასაზღვრო პირობები:

$$\begin{aligned} r\varphi &= Ze, \quad \text{როცა} \quad r \to 0, \\ r\varphi &= 0, \quad \text{როცა} \quad r \to \infty. \end{aligned} \qquad (111,10)$$

(111,9) განტოლების გამარტივების მიზნით შემოვიღოთ ახალი აღნიშვნები:

$$\varphi(r) = \frac{Ze}{r}\chi(x), \quad r = xb. \qquad (111,11)$$

b ისე შევარჩიოთ, რომ განტოლებაში არ შემოვიდეს მუდმივები. ახალ ცვლადებში (111,9) განტოლება მიიღებს სახეს

$$x^{1/2}\frac{d^2\chi(x)}{dx^2} = b^{3/2}\frac{4e}{3\pi\hbar^3}(2\mu e)^{3/2}(Ze)^{1/2}\chi^{3/2}(x) \qquad (111,12)$$

ამ განტოლებაში შემავალი b მუდმივი ასე შევარჩიოთ:

$$b = \frac{1}{2}\left(\frac{3\pi\hbar^3}{4e}\right)^{2/3}\frac{1}{\mu e(Ze)^{1/3}}, \qquad (111,13)$$

მაშინ საბოლოოდ მივიღებთ შემდეგ განტოლებას:

$$x^{1/2}\frac{d^2\chi(x)}{dx^2} = \chi^{3/2}(x), \qquad (111,14)$$

რომელსაც თომას-ფერმის განტოლებას უწოდებენ. ახალ აღნიშვნებში (111,10) სასაზღვრო პირობები ასე დაიწერება:

$$\chi(0) = 1; \quad \chi(\infty) = 0. \qquad (111,15)$$

თომას-ფერმის განტოლება და სასაზღვრო პირობები არავითარ პარამეტრებს არ 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

$$b = \frac{1}{2}\left(\frac{3\pi}{4}\right)^{2/3} \frac{a_0}{Z^{1/3}} = 0{,}885\,\frac{a_0}{Z^{1/3}}, \tag{111,16}$$

სადაც a_0 ბორის პირველი ორბიტის რადიუსია.
მანძილს

$$R = 0{,}885\,\frac{a_0}{Z^{1/3}}, \tag{111,17}$$

უწოდებენ ატომის საშუალო რადიუსს.

თუ დავუბრუნდებით ჩვეულებრივ ცვლადებს, $\chi(x)$ ფუნქცია ყოველი Z-ისათვის მოგვცემს პოტენციალის შემდეგი სახის განაწილებას:

$$\varphi(r) = \frac{Ze}{r}\,\chi\left(\frac{Z^{1/3}}{0{,}885}\,\frac{r}{a_0}\right), \tag{111,18}$$

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 $\overline{V} \sim ZZe^2/R = \dfrac{Z^{7/3} e^4 \mu}{0{,}885\hbar^2}$, ე. ი. ატომის საშუალო პოტენციალური ენერგია პროპორციულია $Z^{7/3}$-ის. ელექტრონის სიჩქარის აბსოლუტური მნიშვნელობა იყოს v, მაშინ კინეტიკური ენერგიის საშუალო მნიშვნელობისათვის გვექნება $T \sim Z\mu\overline{v^2}/2$. გამოვიყენოთ ვირიალის თეორემა $2\overline{T} = n\overline{V}$, სადაც კულონური ველის შემთხვევაში $n = -1$. მაშასადამე, $|\overline{V}| = 2\overline{T}$ და $\overline{v}$-სათვის მივიღებთ

$$\overline{v} \sim Z^{2/3}\,\frac{e^2}{\hbar}. \tag{111,19}$$

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 ε ენერგია; ე. ი. ის მინიმალური ენერგია, რომელიც საჭიროა დაიხარჯოს ნეიტრალური ატომიდან ყველა ელექტრონის გასათავისუფლებლად. ვირიალის თეორემის თანახმად, ეს ენერგია ტოლია სიდიდის $\overline{\varepsilon} = \overline{T} + \overline{V} = -\dfrac{1}{2}\overline{V} + \overline{V} = \dfrac{1}{2}\overline{V}$. როგორც ზემოთ დავინახეთ

$$\overline{V} = Z^{7/3}\,\frac{e^4\mu}{0{,}885\hbar^2},$$

ამიტომ

$$\overline{\varepsilon} \sim \frac{Z^{7/3}}{1{,}770}\,\frac{e^4\mu}{\hbar^2}. \tag{111,20}$$

თუ შევიტანთ რიცხვით სიდიდეებს მივიღებთ $\overline{\varepsilon} \simeq 15\, Z^{7/3}\, eV$, რაც კარგად ეთანხმება ექსპერიმენტულ მნიშვნელობებს.

3. 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 $\overline{l}\sim \overline{Rp}$, თუ ამ ფორმულაში შევიტანთ $R\sim a_0/Z^{1/3}$ და $\overline{v}\sim Z^{2/3}e^2/\hbar$ მივიღებთ

$$\overline{l}\sim Z^{1/3}\hbar. \tag{111,21}$$

რადგან დიდი მომენტებისათვის $\overline{l}\sim l\hbar$, ამიტომ აზიმუტალური კვანტური რიცხვი $l\sim Z^{1/3}$. პირიქითაც. ატომში l-ის მოცემული მნიშვნელობა შეგვეხვედება ისეთი Z-ისათვის (ე. ი. ისეთი ატომისათვის) რომელიც აკმაყოფილებს პირობას

$$Z = \text{const}\, l^3. \tag{111,22}$$

უფრო ზუსტი გამოთვლები, რომლებიც ეყრდნობა მომენტის კვაზიკლასიკურ ფორმულას გვაძლევს

$$Z = 0{,}155(2l+1)^3. \tag{111,23}$$

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 ახსნაგენად. 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 ბირთვთან. 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, ამ ამოცანის ასეთნაირად გადაწყვეტა შეუძლებელია. მაგრამ გამოირკვა, რომ ატომებში, ძალიან კარგი მიახლოებით, შეგვიძლია შემოვიღოთ გარკვეული გასაშუალებელი 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 ვეპოვოთ 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 აკიღებთ ცენტრა-

ლური 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^l-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 კვანტურ 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:

$$nl^N, \tag{112,1}$$

სადაც l-ის ნაცვლად უნდა შევიტანოთ მისი ასოითი გამოსახულება

$$\begin{gathered} l=0,\ 1,\ 2,\ 3,\ 4,\ 5,\ 6,\ 7 \\ s,\ p,\ d,\ f,\ g,\ h.\ i,\ k,\ \ldots \end{gathered} \tag{112,2}$$

n წარმოადგენს მთავარ კვანტურ რიცხვს. იგი მიუთითებს, თუ მთავარი კვანტური რიცხვის რომელ ღნიშვნელობას 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 $l=1$.

გამოვარკვიოთ რამდენი ელექტრონი შეიძლება გვქონდეს n და l-ით დახასიათებულ მდგომარეობაში. რადგან მომენტს აქვს $2l+1$ ორიენტაცია ელექტრონის სპინს კი—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

$$\sum_{l=0}^{n-1} 2(2l+1)=2\{1+3+5+\ldots+(2n-1)\}=2n^2. \tag{112,3}$$

ელექტრონთა იმ რიცხვს, რომელიც ავსებს ყველა მდგომარეობას მოცემული n და l-ით, უწოდებენ „ჩაკეტილ გარსს“. მაშასადამე, ჩაკეტილ გარსში ელექტრონთა შესაძლო მაქსიმალური რიცხვი არის $2(2l+1)$.

გამოვარკვიოთ რა წესით უნდა შეიკრიბოს მოცემული გარსის ელექტრონთა მომენტები და გამომდინარე აქედან რომელი კვანტური რიცხვებით უნდა დახასიათდეს ატომის მდგომარეობა. მომენტთა შეკრების მეთოდი არსებითადაა დამოკიდებული ელექტრონთა რიცხვზე. კერძოდ, ატომებში, რომელთა ელექტრონთა რიცხვი არც თუ ისე დიდია გამოიყენება ე. წ. რასელ-საუნდერსის მეთოდი,

მძიმე ატომებში კი განიხილება „jj"-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 $\mathbf{j}=\mathbf{l}+\mathbf{s}$. ამიტომ მდგომარეობის დახასიათებას აზრი აქვს მხოლოდ სრული მომენტის საშუალებით. ატომის სრული მომენტი კი უნდა განვიხილოთ როგორც $\mathbf{J}=\sum\mathbf{j}$. მაგრამ ატომებში, განსაკუთრებით კი მსუბუქ ატომებში, ძალიან კარგი მიახლოებით ცალცალკე ინახება როგორც სპინი, ისე ორბიტალური მომენტი. ამიტომ ატომის სრული მომენტი შეიძლება მივიღოთ სქემით, რომელსაც რასელ-საუნდერსის ან „LS" სქემას უწოდებენ [1]. ამ სქემის მიხედვით ატომის სრული სპინი მიიღება ცალკეულ ელექტრონთა სპინების შეკრებით, ე. ი. $\mathbf{S}=\sum\mathbf{s}_i$. ასევე, ატომის ორბიტალური მომენტი მიიღება თითოეულ ელექტრონის ორბიტალური მომენტების შეკრებით, ე. ი. $\mathbf{L}=\sum\mathbf{l}_i$. ატომის სრული მომენტი კი წარმოადგენს ამ ორი მომენტის ჯამს $\mathbf{J}=\mathbf{L}+\mathbf{S}$. ცხადია, რომ ამ სქემით მიღებული სრული მომენტიც დაემთხვევა $\sum\mathbf{j}_i$ მნიშვნელობას.

როცა რასელ-საუნდერსის სქემაში შესაძლებელია სპინ-ორბიტალური ურთიერთქმედების უგულებელყოფა, 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:

$$\begin{aligned}
\mathbf{J}^2&=\hbar^2J(J+1), & J_z&=M_J\hbar,\\
\mathbf{L}^2&=\hbar^2L(L+1), & L_z&=M_L\hbar,\\
\mathbf{S}^2&=\hbar^2S(S+1), & S_z&=M_S\hbar.
\end{aligned}\tag{112,4}$$

ადვილი საჩვენებელია, რომ რთული ატომის ენერგია დამოკიდებული იქნება როგორც L-ზე, ისე S-ზე. სხვადასხვა 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

$$e^2\int\frac{|\,\psi_{l_1m_1}(\mathbf{r}_1)\,|^2\,|\,\psi_{l_2m_2}(\mathbf{r}_2)\,|^2}{|\,\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2\,|}\,d\mathbf{r}_1d\mathbf{r}_2,\tag{112,5}$$

სადაც $-e\,|\,\psi_{l_1,m_1}(\mathbf{r}_1)\,|^2$ და $-e\,|\,\psi_{l_2m_2}(\mathbf{r}_2)\,|^2$ ელექტრული ღრუბლების სიმკვრივეებია $\mathbf{r}_1$ და $\mathbf{r}_2$ წერტილებში. დავუშვათ, გვაქვს p^2 ელექტრონები, ე. ი. $l_i=1$ ($m_1=0,\pm1$) და $l_2=1$ ($m_2=0,\pm1$) მაშინ, მომენტთა შეკრების წესის თანახმად, სრული ორბიტალური მომენტი შეიძლება იღებდეს მნიშვნელობებს: $L=2,1,0$; ამასთან $L=2$-ს ექნება პროექციები $M=\pm2,\pm1,0$, ხოლო $L=1$-ს $\pm1,0$. განვიხილოთ მაქსიმალური პროექციის მნიშვნელობები. $L=2$-ის შემთხვევაში $M=2$, და გვეუბნება $m_1=m_2=1$, 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.

$$e^2 \int \frac{|\psi_{l_1,1}(\mathbf{r}_1)|^2 |\psi_{l_1,1}(\mathbf{r}_2)|^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} d\mathbf{r}_1, d\mathbf{r}_2; \qquad e^2 \int \frac{|\psi_{l_1,0}(\mathbf{r}_1)|^2 |\psi_{l,0}(\mathbf{r}_2)|^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \qquad (112,6)$$

ეს ორი ინტეგრალი ერთმანეთისაგან განსხვავდება. ამგვარად, აღებული კონფიგურაციის ენერგია, მართლაც, დამოკიდებულია სრულ ორბიტალურ L მომენტზე. იმის გამო, რომ ელექტრონები იგივური 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, ვასკვნით: 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 გადაგვარებას [1].

ახლა ვნახოთ რას მოგვცემს სპინ-ორბიტალური ურთიერთქმედების გათვალისწინება. „LS" ბმის დროს სპინ-ორბიტალური ურთიერთქმედება გაითვალისწინება როგორც მცირე შეშფოთება, როგორც ვიცით, ცალკეული ელექტრონის სპინ-ორბიტალური ურთიერთქმედების ენერგია პროპორციულია სპინური და ორბიტალური მომენტების სკალარული ნამრავლის $(\hat{\mathbf{S}}_i \hat{\mathbf{l}}_i)$. თვითშეთანხმებული ველის მიახლოებაში მთელი ატომისათვის გვექნება შემდეგი გამოსახულება:

$$\sum_{i=1}^{N} a_i(\hat{\mathbf{S}}_i \hat{\mathbf{l}}_i)), \qquad (112,7)$$

სადაც a_i პროპორციულობის კოეფიციენტია. ჩვენი მიზანია (112,7) ურთიერთქმედება გამოვხატოთ სრული ორბიტალური $\mathbf{L}$ და სრული $\mathbf{S}$ სპინის ოპერატორების საშუალებით. მოვახდინოთ (112,7) გამოსახულების გასაშუალოება. ვთქვათ სრული $\mathbf{S}$ სპინი სივრცეში უძრავადაა დამაგრებული და გასაშუალოება მოვახდინოთ ჯამში შემავალი ცალკეულ ელექტრონთა სპინებით. ცხადია, რომ გასაშუალოების შედეგად დაგვრჩება ცალკეული ელექტრონის სპინის პროექცია სრულ $\mathbf{S}$ სპინზე, ე. ი. $\langle \hat{\mathbf{S}}_i \rangle = \gamma \hat{\mathbf{S}}$. რადგან გასაშუალოება მოვახდინეთ დაფიქსირებული სრული სპინისათვის, ამიტომ $\langle \hat{\mathbf{S}}_i \rangle = \gamma \hat{\mathbf{S}}$ უნდა ჩავთვალოთ ოპერატორად. (112,7) გამოსახულების გასაშუალოება სრული დაფიქსირებული $\mathbf{L}$ მომენტისათვის აგრეთვე მოგვცემს. რომ $\langle \hat{\mathbf{l}}_i \rangle \sim \mathbf{L}$. მაშასადამე, რთულ ატომში სპინ-ორბიტალური ურთიერთქმედების შესაბამის ოპერატორს ექნება შემდეგი გამოხატულება:

$$\hat{H}_{SL} = A(\hat{\mathbf{S}}\hat{\mathbf{L}}) \qquad (112,8)$$

[1] ცხადია, რომ ჯამი $(2J+1)$-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 დაემატოს თვითშეთანხმებული ველის ჰამილტონიანს. ისევე როგორც ერთი ელექტრონის განხილვის დროს ვნახეთ, სპინ ორბიტალური ურთიერთქმედების გამო, სრული ჰამილტონიანი კომუტატური იქნება $\hat{J}^2$ $\hat{J}_z$, $\hat{L}^2$, $\hat{S}^2$ ოპერატორებთან, ხოლო L_z და S_z-თან იგი კომუტატური აღარ იქნება. ეს იმას ნიშნავს, რომ J^2, J_z კვლავ მოძრაობის ინტეგრალებია, ხოლო L და S აღარ ინახება, თუმცა L^2 და S^2-ის მუდმივობას ამ შემთხვევაშიაც ექნება ადგილი. რადგან J $L+S$, ამიტომ, (112,4) ფორმულების თანახმად, ($\hat{S}$ $\hat{L}$) ოპერატორის საკუთარ მნიშვნელობებს ექნება სახე

$$(SL)=\frac{\hbar^2}{2}\{J(J+1)-L(L+1)-S(S+1)\}, \qquad (112,9)$$

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 $|L-S|\leqslant J\leqslant L+S$, 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

$$^{2S+1}L_J, \qquad (112,10)$$

სადაც L-ისათვის უნდა ჩაისვას ასოითი გამოსახულება:

$$\begin{gathered} L=0,\ 1,\ 2,\ 3,\ 4,\ 5,\ 6,\ldots \\ S,\ P,\ D,\ F,\ G,\ H,\ J,\ldots \end{gathered} \qquad (112,11)$$

(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 ოღონდ 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 S-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. ქვემოდ შევეხებით ატომის მხოლოდ ნორმალურ ჰგდომარეობებს 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 საჭიროა 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. მაგასადამე, $L=1$, $S=0$ 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, ოღონდ 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 $m_l=0,\pm1$ $m_s=\pm1/2$ მიხედვით, თითოეული ელექტრონისათვის გვექნება ექვსი მდგომარეობა:

$$
\begin{aligned}
&a \div (1,{}^1/_2), && a' \div (1,-{}^1/_2),\\
&b \div (0,{}^1/_2), && b' \div (0,-{}^1/_2)\\
&c \div (-1,{}^1/_2), && c' \div (-1,-{}^1/_2),
\end{aligned}
\qquad (112,12)
$$

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 $6 \cdot {}^5/_2 = 15$ 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 საინტერესონი 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 დავგრჩება 8 მდგომარეობა:

$$
\begin{aligned}
&a+a' \div (2,0), && a+b \div (1,1), && a+c' \div (0,0),\\
&b+a' \div (1.0), && a+c \div (0,1), && b+b' \div (0,0),\\
&c+a' \div (0,0), && a+b' \div (1,0).
\end{aligned}
\qquad (112,13)
$$

ამ 8 მდგომარეობიდან შევარჩიოთ ის, რომელსაც აქვს მაქსიმალური პროექციები, რადგან ისინი განსაზღვრავენ L და S-ის შესაძლო საკუთარ მნიშვნელობებს. $a+a'$ 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 ერთის 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

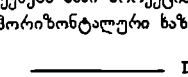
$$(2,0), \quad (1,1) \quad \text{და} \quad (0,0)$$

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 აღგილი ექნება დონეების გახლეჩვას. 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

განხორციელდება 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 მომენტია $J=|1-1|=0$. ამგვარად, p^2-კონფიგურაციის მინიმალური თერმი იქნება $^3P_0$.

ჩვენ შეგვიძლია ელექტრონთა კონფიგურაციების მდგომარეობები ვიპოვოთ უფრო თვალსაჩინო გზით. ამისათვის განვიხილოთ ისევ p^2-ელექტრონები.

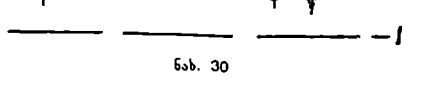
რადგან p-ელექტრონების $l=1$, ამიტომ გვექნება სამი პროექცია $m_l=1, 0, -1$. ეს პროექციები სქემატურად გამოვხატოთ ჰორიზონტალური ხაზების საშუალებით (ნახ. 29). საჭიროა ელექტრონები ამ დონეებზე განვალაგოთ პაულის პრინციპის დაცვით. ე. ი. თუ რომელიმე ეს დონე დაკავებულია ორი ელექტრონით, მაშინ მათ უნდა ჰქონდეთ ურთიერთსაწინააღმდეგო სპინის პროექციები. ამასთან, გავითვალისწინოთ, რომ საჯამო მომენტების შესადგენად საკმარისია შემოვისაზღვროთ სრული მომენტების $M_L \geqslant 0$ და $M_S \geqslant 0$ 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, განსორციელდება ^2S-თერმიც. ამასთან, ჰუნდის წესის თანახმად მინიმალური ენერგია ექნება ^2P-თერმს.



ნახ. 29.

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.

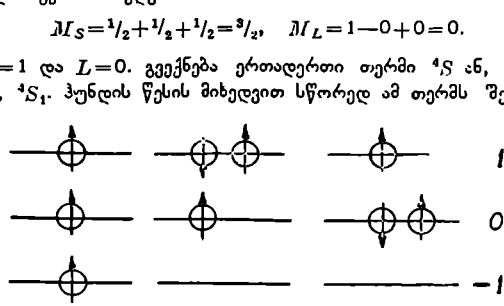
ჰუნდის მეორე ემპირული წესის თანახმად, რადგან p^2 მდგომარეობაში, ელექტრონთა რიცხვი ნაკლებია $(2l+1)=3$-ზე, გვექნება $J=|L-S|=0$, ამიტომ მინიმალური ენერგიის შესაბამისი თერმი იქნება $^3P_0$.

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-

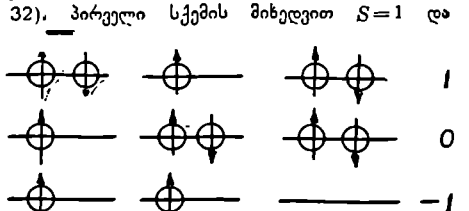


ნახ. 31

მალური 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 $^2P_{1/2}$.

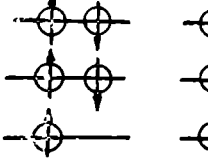
ახლა გამოვარკვიოთ p^4- ელექტრონების მდგომარეობები. კვლავ გვექნება სამი სქემა (ნახ. 32). პირველი სქემის მიხედვით $S=1$ და $L=1$, ამიტომ



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-

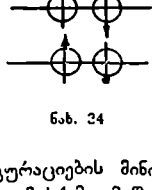
მალური ენერგია შეესაბამება ^3P თერმს. რადგან p^4 კონფიგურაციაში ელექტრონების რიცხვი მეტია $(2l+1)=3$-ზე ამიტომ ჰუნდის მეორე წესის თანახმად, ამ კონფიგურაციის სრული მომენტი $J=L+S=2$, ე. ი. მინიმალური ენერგიის თერმია $^3P_2$. p^5 კონფიგურაციას შეესაბამება მხოლოდ ორი სქემა (ნახ. 33), ორივე შემთხვევაში $S=1/2$. რაც შეეხება ორბიტალურ მომენტს პირველი სქემისათვის $L=1$, მეორესათვის კი $L=0$. ასე რომ, გვექნება თერმები ^2P და ^2S. ხოლო მულტიპლეტურ აღნიშნებში $^2P_{3/2}$, $^2P_{1/2}$ და $^2S_{1/2}$. ჰუნდის წესის მიხედვით მინიმალური ენერგია შეესაბამება $^2P_{3/2}$ თერმს.



ნახ. 33

განსახილველი დაგვრჩა p^6- ელექტრონები. ცხადია, ამ შემთხვევაში ხორციელდება 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 $^1S_0$.

აღსანიშნავია ერთი მნიშვნელოვანი გარემოება. p^6- კომფიგურაციას ზუსტად ისეთივე თერმები აქვს, რაც p^1-ს. p^1-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 $J=L+S$.

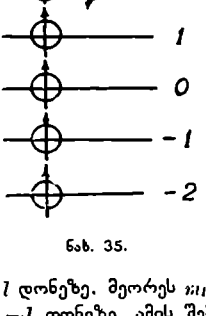


ნახ. 34

სრულიად ანალოგიურად გამოვიყენებთ ზემოთ განხილულ სქემატურ მეთოდს d, f, g, და ა. შ. ელექტრონთა კონფიგურაციების თერმების მოსაძებნად. სიმარტივის მიზნით ჩვენ დავკმაყოფილდებით 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 დავსვათ, როგორც $m_l=2$, ისე $m_l=1$ და 0 დონეებზე. მაგრამ ჰუნდის წესის თანახმად, ელექტრონი (მოცემული $S=1/2$ მნიშვნელობისათვის, რომ გვქონდეს 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^3 კონფიგურაციის მესამე ელექტრონიც 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 კონფიგურაციაც, სოლო სრული მომენტი $9/2$-ის ტოლია.

სრულიად ანალოგიურად d^1-ის მეოთხე ელექტრონი უნდა მოვათავსოთ $m_l=-1$ დონეზე, d^5-ისა კი $m_l=-2$-ზე. შესაბამისად გვექნება თერმები ^6D 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 ხეთ 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. $L=2$. მაშასადამე, მინიმალურ ენერგიას შეესაბამება ^5D თერმი. ამ მდგომარეობის სრული მომენტი იქნება $J=2+2=4$. d^6 კონფიგურაციის თერმი დაემთხვა d^1 კონფიგურაციის თერმს, რაც ასეც უნდა ყოფილიყო. დაგვრჩა 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.



ნახ. 35.

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. კვლავ განვიხილოთ რასელ-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 ერთით 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 $\Delta L=0,\pm1$. ცხადია ასევე, რომ სრული მომენტისათვის გვექნება იგივე შერჩევის წესი $\Delta J=0,\pm1$; ამასთან, მკაცრად აკრძალულია $0\to0$ 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 $\Delta S\neq0$. ეს იმას ნიშნავს, რომ „LS“ ბმა ნაწილობრივ დარღვეულია. ასეთი მდგომარეობა გვაქვს მაგალითად, ვერცხლის წყლის შემთხვევაში, სადაც ადგილი აქვს $^3P_1\to{}^1S_0$ 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-

წინებთ სპინ-ორბიტალურ ურთიერთქმედებას; მაშინ დიპოლური გადასვლა დაშვებული აღმოჩნდება.

„jj“ 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 რასელ-საუნდერსის სქემით ატომების დონეების აგება აღარ შეიძლება[1]. 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 *„jj“* ტიპის სქემას (ან *„jj“*-ბმას). *„jj“*-სქემაც მეორე უკიდურესობას წარმოადგენს და გამოიყენება მძიმე ატომებისათვის. საშუალო წონის ატომებისათვის გამოსადეგია ნაწილობრივ *„LS“* ნაწილობრივ კი *„jj“* 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 $M_s = -\frac{e}{|e|c}\,s$ მაგნიტური მომენტების ურთიერთქმედებით, ამიტომ პროპორციული იქნება $1/c^2$-სა. საიდანაც გამომდინარეობს, რომ აღნიშნული ეფექტი რელატივისტურია მსგავსად *„sl“* ურთიერთქმედებისა.

რთული ატომისათვის სპინ-სპინ ურთიერთქმედება პროპორციული იქნება შემდეგი ჯამისა:

$$\sum_{i=1}^{N} \varkappa_i \,(\hat{s}_i\,\hat{s}_i). \qquad (112{,}14)$$

სადაც $\varkappa_i$ 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 გამოსახულებებია (**SS**) და (**SL**)[2]. პირველის $\frac{2}{3}$საკუთარი მნიშვნელობები არაა დამოკიდებული ატომის სრულ J მომენტზე, ამიტომ დონეების გახლეჩვას არ იწვევს. აქედან შეგვიძლია დავასკვნათ, რომ რთულ ატომში *„ss“* ურთიერთქმედებას აქვს სახე

$$\hat{H}'_{ss} = \mathrm{const}\,(\hat{\mathbf{S}}\,\hat{\mathbf{L}})^2 \qquad (112{,}15)$$

(**LS**) სკალარული ნამრავლის საკუთარი მნიშვნელობები ჩვენთვის ცნობილია. იგი განისაზღვრება (112,9) ფორმულით. მისი კვადრატი ერთი მხრივ შეიცავს J-ზე დამოუკიდებელ წევრებს, რომლებიც ჩვენთვის საინტერესონი 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 დაგვრჩება, 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 ენერგეტიკულ დონეებს. აღნიშნული სპინ ორბიტალური და სპინ-სპინ ურთიერთქმედებანი იწვევენ მხოლოდ დონეების გახლეჩას. ამასთან, აღვილი საჭიროა, რომ დონეების გახლეჩა H_{ss} ურთიერთქმედებით გაცილებით ნაკლებია, ვიდრე სპინ-ორბიტალური ურთიერთქმედებით გამოწვეული დონეების გახლეჩა. სპინის არსებობით გამოწვეული ურთიერთქმედება იწვევს იმას, რომ, ექსპერიმენტზე ძირითად ენერგეტიკულ დონეებს შორის გადასვლებით გამოწვეული 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 $\mathbf{i}$ მომენტისა და ელექტრონთა გარსის, ე. ი. ატომის $\mathbf{J}$ მომენტის ურთიერთქმედებით; რადგან გულის სპინური მაგნიტური მომენტი გაცილებით ნაკლებია ატომის სპინურ მაგნიტურ მომენტზე (ატომური მაგნეტონი გაცილებით მეტია $e\hbar/2M_pc$ ატომგულურ მაგნეტონზე, M_p არის პროტონის მასა), ამიტომ ეს ეფექტი იძლევა ძალიან მცირე გახლეჩას. ამ გახლეჩის შედეგად, დონე, მოცემული J-თი, იხლიჩება სხვადასხვა დონედ, რომლებიც ხასიათდება ატომის სრული მომენტით (ატომგულს პლუს ელექტრონთა გარსი):

$$K=J+i, \quad J+i-1, \qquad |J-i| \tag{112,16}$$

სადაც $\mathbf{K}=\mathbf{J}+\mathbf{i}$ წარმოადგენს ატომის, როგორც მთლიანის, სრულ მომენტს.

§ 113. მენდელეევის ელემენტთა პერიოდული სისტემა

გამოვარკვიოთ, თუ როგორ ახსნა-განმარტებას აძლევს კვანტური 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 თვრამეტ თვრამეტს, 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 ატომწონები 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, გამოსახავს 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. აღვნიშნოთ რომ ელემენტის ქიმიური 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

$$ {}_{Z}X^{A}, \qquad (113,1) $$

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 გვექნება 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 ეწოდეთ, კონფიგურაციის დასახასიათებლად გამოვიყენებთ (112,1) ფორმულას—nl^N, სადაც $l=0, 1, 2, 3, 4$-ის ნაცვლად უნდა შევიტანოთ ასოები s, p, d, f. [1]

მთავარი კვანტური რიცხვია, N კი გამოხატავს ელექტრონთა რიცხვს l მდგომარეობაში. ამ მდგომარეობათა რიცხვი რომლებსაც შეესაბამება n-სა და l-ის თანატოლი მნიშვნელობა, ტოლია $2(2l+1)$. 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.

$$\begin{gathered} n=1,\ \ 2,\ \ 3,\ \ 4,\ \ 5,\ \ 6\ldots \\ K,\ L,\ M,\ N,\ P,\ Q\ldots \end{gathered} \tag{113,2}$$

თითოეულ ამ გარსში გვექნება ელექტრონთა შემდეგი რიცხვი:

$$\begin{gathered} N,\ L,\ M,\ N,\ P,\ Q, \\ 2n^2=2,\ \ 8,\ \ 18,\ \ 32,\ \ 50,\ \ 72, \end{gathered} \tag{113,3}$$

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 ისევ $n=1$, $l=0$, $m_l=0$ 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 $1s^2\ 2s^2\ 2p$. როგორც აღვნიშნეთ, p მდგომარეობაში ($l=1$) შეიძლება მოთავსდეს ექვსი ელექტრონი, ამგვარად, ამ მდგომარეობაში დარჩენილ ხუთ ადგილს შეავსებს ნახშირბადის, აზოტის, ჟანგბადის, ფტორისა და ნეონის ატომების ელექტრონები. სახელდობრ, ამ ატომების ელექტრონთა კონფიგურაციებისათვის გვექნება

$${}_6C\div 1s^22s^22p^2;\quad {}_7N\div 1s^22s^22p^3;\quad {}_8O\div 1s^22s^22p^4\ldots{}_{10}Ne\div 1s^22s^22p^6.$$

ნეონით მთავრდება მეორე პერიოდი. ნეონი, ისევე როგორც ჰელიუმი, ხასიათდება განსაკუთრებული სიმდგრადით. მაგალითად, ელექტრონის ბმის ენერგია ჰელიუმში—24,45eV-ია, ნეონში—21,5eV, მაშინ, როცა ლითიუმის ბმის ენერგია—5.37eV-ის ტოლია, ფტორისა კი—18,6eV. ამგვარად, ჰელიუმისა და ნეონის ჩაკეტილი გარსები ენერგეტულად უფრო ხელსაყრელია, ვიდრე სხვა კონფიგურაციები. შემდეგი ელემენტი არის ნატრიუმი—$_{11}Na$. 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 $1s^2\,2s^2\,2p^6\,3s$ უკანასკნელი $3s$ ელექტრონის ბმის ენერგია ძალიან მცირეა და სიდიდის რიგით ისეთივეა, როგორც Li-ის $2s$ ელექტრონისა. $_{12}Mg$-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 მაქსიმალური ბმის ენერგია და იგი ისეთივე მდგრადობით ხასიათდება, როგორითაც ჰელიუმი და ნეონი.

შემდეგი ელემენტი ($Z=19$) არის კალიუმი—$_{19}K$. 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 ქიმიური, ისე სპექტრალური მონაცემებით (იხ. საველენტო ელექტრონის მოდელი) სავსებით ჰგავს პირველი სვეტის ელემენტებს H, Li, Na..., 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 ელექტრონს 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 $_{28}V$-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 $(Ar)4s3d^5$ კონფიგურაცია, ხოლო მომდევნო ელემენტს $_{25}Mn$-ს აქვს წესიერი კონფიგურაცია $(Ar)4s^2 3d^5$ და ა. შ. N გარსის დარჩენილ ადგილებს ნაწილობრივ ავსებს 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 ეკანტური 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 ატომგულთან გაცილებით უფრო ახლოს თავსდება, ვიდრე ის ელექტრონები, რომლებიც გვქონდა 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 სავსებით კანონზომიერად.

$_{57}La$	$5d,\ 6s$
$_{58}Ce$	$4f^2,\ 6s^2$
$_{59}Pr$	$4f^3\ 6s^2$
$_{60}Nd$	$4f^4\ 6s^2$
$_{61}Pm$	$4f^5,\ 6s^2$
$_{62}Sm$	$4f^6,\ 6s^2$
$_{63}Eu$	$4f^7,\ 6s^2$
$_{64}Cd$	$4f^7,\ 5d6s^2$
$_{65}Tb$	$4f^8,\ 5d6s^2$
$_{66}Dy$	$4f^{10},\ 6s^2$
$_{67}Ho$	$4f^{11}\ 6s^2$
$_{68}Er$	$4f^{12}\ 6s^2$
$_{69}Tu$	$4f^{13}\ 6s^2$
$_{70}Yb$	$4f^{14}\ 6s^2$
$_{71}Lu$	$4f^{14}\ 5d6s^2$

ცხრილში მოცემულია იშვიათმიწათა ელემენტების კონფიგურაციები იმ ელექტრონებისათვის, რომლებიც მოსდევენ ბალიუმის კონფიგურაციას.

დიდი ხნის განმავლობაში Hf ეგონათ იშვიათმიწათა ელემენტი. 1922 წლამდე ეს ელემენტი აღმოჩენილი არ იყო და მის ადგილს ტოვებდნენ იშვიათმიწათა ელემენტებში. მაგრამ ელექტრონთა შევსების თავისებურებებიდან გამომდინარე, ბორმა აჩვენა, რომ ჰაფნიუმი თავისი თვისებებით უნდა ჰგავდეს ცირკონიუმს; მართლაც, სულ მალე, ჰაფნიუმი აღმოჩენილ იქნა ცირკონიუმის მადანში. იშვიათმიწათა ელემენტების ელექტრონთა კონფიგურაციის ცხრილიდან ჩანს, რომ არც ლუტეციუმი (Lu) წარმოადგენს იშვიათმიწათა ელემენტს, რადგან $4f$ გარსი უკვე ითერბიუმშია შევსებული, ამ ელემენტში კი იწყება ახალი $5d$ მდგომარეობის შევსება.

ამგვარადვე შეგვიძლია ვიპოვოთ ყოველი ატომის ელექტრონული გარსის კონფიგურაციები და ავხსნათ ელემენტთა პერიოდული სისტემის ძირითადი თავისებურებანი.

მდგომარეობათა დახასიათება მულტიპლეტური აღნიშვნებით. ატომების მდგომარეობათა სრული დახასიათებისათვის მნიშვნელოვანია მდგომარეობათა აღწერა მულტიპლეტურ აღნიშვნებში. გამოვიყენოთ აღნიშვნა $^{2s+1}L_J$, სადაც S ატომის სპინია; $L=0,\ 1,\ 2,\ \ldots$ მაგიერ უნდა შევიტანოთ სათანადო აღნიშვნები $S,\ P,\ D,\ F,\ G,\ \ldots$ ხოლო $\mathbf{J}=\mathbf{L}+\mathbf{S}$ 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 $l=1$ ($m=0,\pm1$). აშკარაა, რომ $M=\sum m_l=0$, და $L=0,\ J=0$. იგივე მდგომარეობა გვექნება

ყველა ინერტული გაზისათვის. გამომდინარე 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 $1s^22s^2$ 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; მაშასადამე, 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 ვლინდება 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 დიდი აქტიურობა ქიმიურ რეაქციებში. ტუტე მეტალების ატომები, პირიქით, ხასიათდება იმით, რომ მათ ინერტული გაზის ჩაკეტილი კონფიგურაციის შემდეგ აქვთ სუსტად ბმული ერთი ზედმეტი ელექტრონი, რომელსაც ადვილად გასცემენ ქიმიური რეაქციების დროს. ამიტომ როგორც ჰალოგენები, ისე ტუტე მეტალები ერთვალენტიანია.

Be, *Mg*, *Cu*... ჩაკეტილი გარსის შემდეგ აქვთ ორ-ორი ელექტრონი. რადგან მათ აქვთ მისწრაფება იმ ორი ელექტრონის გაცემისა, ამიტომ ისინი ორვალენტიანებია.

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 გაორკეცებული მნიშვნელობა. ცვალებადი ვალენტობა ფიზიკურად გამოწვეულია იმით, რომ ატომს ქიმიურ რეაქციებში მონაწილეობის მიღება შეუძლია როგორც ნორმალურ, ისე აღგზნებულ მდგომარეობაში. ამასთან, სპინის მნიშვნელობა აღგზნებულ მდგომარეობაში საზოგადოდ განსხვავებულია ნორმალურ მდგომარეობაში მყოფი ატომის სპინის მნიშვნელობისაგან. რადგან პირველი ჯგუფის ელემენტების ატომების სპინი ნახევრის ტოლია, ამიტომ ეს ელემენტები ერთვალენტიანია. მეორე ჯგუფის ატომების სპინი არის ნულის ტოლი, რის გამო ნორმალურ მდგომარეობაში ეს ატომები ქიმიურ რეაქციებში მონაწილეობას არ იღებს. მიგრამ ამ ატომებს აქვს აგზნებული მდგომარეობა sp, 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^2p^1 ძირითად მდგომარეობაში აქვს სპინი $S=1/2$,

ამიტომ მათი ვალენტობა ერთის ტოლია. მაგრამ ამ ატომებს აქვთ აგზნებული მდგომარეობაც sp^2-სპინით 3/2, რის გამოც ამ ჯგუფის ელემენტებს გარდა ერთვალენტიანობისა, ახასიათებს სამვალენტიანობაც. მეოთხე ჯგუფის ელემენტებს ძირითადად s^2p^2 მდგომარეობაში აქვთ $S=1$ სპინი. აგზნებულ მდგომარეობას sp^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, $(ns)^2$ $(n's)$-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—$(nsp^3)(n'sp)$ 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 აღგზნების ენერგიით ხასიათდებიან, ამიტომ ისინი ქიმიურ რეაქციებში მონაწილეობას არ იღებენ და მათ აქვთ ნულოვანი ვალენტობა.

იშვიათმიწათა ელემენტებში $4f$ ელექტრონები გულთან ახლოს თავსდებიან. 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 აღგზნებულ მდგომარეობებში, როცა ერთი ელექტრონი $4f$ დონიდან გადასულია s და p მდგომარეობაში. ამით ამ ელემენტების ვალენტობა ერთით გაიზრდება.

ტრანსურანული ელემენტები. თანამედროვე ფიზიკისათვის არ არსებობს პრინციპული სიძნელე 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 გვქონდა 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 (T_c), $Z=61$—პრომეთეუმი (P_m), $Z=85$—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 შეესებულია. 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), $Z=102$-ს —ნობელიუმი (No), $Z=103$ – ლაურეტსენიუმი (Lr), $Z=104$—კურჩატოვიუმი

(Kr)[1]. ყველა ეს ატომი მიიღება მძიმე ატომგულების დაბომბვით. მაგალითად, კალიფორნიუმის იზოტოპები მიიღება ${}_{92}U^{238}$ ატომგულების ციკლოტრონზე აჩქარებული C^{12} გულებით დაბომბვით, შემდეგი რეაქციის მიხედვით

$$ {}_{92}U^{238}+{}_{6}C^{12} \rightarrow \begin{cases} {}_{98}Cf^{246}+4n \\ {}_{98}Cf^{244}+6n \end{cases} . \qquad (113,4) $$

ყველა ამ ელემენტის სიცოცხლის ხანგრძლივობა შეუდარებლად ნაკლებია დედამიწის სიცოცხლის ხანგრძლივობაზე. ამიტომაც ისინი ბუნებაში არ არსებობენ და თავის დროზე კიდევაც რომ არსებულიყვნენ, 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, იშვიათმიწათა ელემენტების ჯგუფის ანალოგიით, ამ ელემენტებს აქტინიდებს უწოდებენ.

იბადება კითხვა, სანამდე შეიძლება გაგრძელდეს ისეთი ახალი ელემენტების მიღება, რომლებსაც ექნება სიცოცხლის შესამჩნევი ხანგრძლივობა? ამ კითხვაზე ამომწურაი პასუხის გაცემა, დღეისათვის არსებული მონაცემებით, შეუძლებელია. ზედა ზღვრისათვის შეგვიძლია მოვიყვანოთ შემდეგი მსჯელობა: დაეშვათ, ხელოვნურად მიღებული ტრანსურანული ელემენტის ატომგულის ზომა შეგვიძლია წერტილოვნად ჩავთვალოთ, მაშინ ბორის თანახმად, პირველ ორბიტაზე მოძრავი ელექტრონისათვის გვექნება სიჩქარე

$$ v=\frac{Ze^2}{\hbar}, \qquad (113,5) $$

საიდანაც

$$ Z=\frac{\hbar v}{e^2}. \qquad (113,6) $$

Z-ს მაქსიმუმი ექნება მაშინ, როცა $v=c$, ე. ი. როცა $Z=\dfrac{\hbar c}{e^2}=\alpha_0^{-1}=137$. ამ შეფასებიდან ჩანს, რომ არ შეიძლება მივიღოთ ელემენტი, რომლისთვისაც $Z \geqslant 137$.

განმეორებით აღვნიშნოთ, რომ ეს შეფასება საკმარისად უხეშია, რადგან ატომგული 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, No (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] ამჟამად დუბნაში, ბირთვულ გამოკვლევათა გაერთიანებულ ინსტიტუტში უკვე მიღებულია 106-ელემენტი.

ერთი ნაწილაკის სრული მომენტი—j სისტემის სრული J მომენტით; ასე მაგალითად, რთული ატომების მაგნიტურ ველში მოთავსებისას, იმის ანალოგიურად, რაც გვქონდა ერთელექტრონიან ატომებში (იხ. ფორმულა (98,19)), ენერგია შეიცვლება სიდიდით (ზეემანის ეფექტი)

$$E_{JM_J} = \Omega\hbar g M_J, \tag{114,1}$$

სადაც

$$M_J = -J,\ (J-1) \ldots J-1,\ J. \tag{114,2}$$

ლანდეს g მამრავლი რთული ატომებისათვის, (98,18) ფორმულის თანახმად, შემდეგნაირად განისაზღვრება:

$$g = 1 + \frac{J(J+1) - L(L+1) + S(S+1)}{2J(J+1)}, \tag{114,3}$$

$\Omega = \dfrac{e\mathscr{H}}{2\mu c}$ 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 გვქონდეს.

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

$$E_{JM_J} = (\hbar\Omega) M_J. \tag{114,4}$$

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

$$\overline{M} = Jg M B_J(x), \tag{114,5}$$

სადაც g არის (114,3) ფორმულით განსაზღვრული ლანდეს მამრავლი, M_B—ბორის მაგნეტონი, ხოლო $B_J(x)$—ბრილუენის ფუნქცია და იგი ერთელექტრონიანი ატომისათვის შემოღებული (99,20) ფუნქციისაგან განსხვავდება იმით, რომ ელექტრონის სრული j მომენტი შეცვლილია ატომის სრული J მომენტით, ე. ი.

$$B_J(x) = \left(1 + \frac{1}{2J}\right) \operatorname{cth}\left\{\left(1 + \frac{1}{2J}\right) x\right\} - \frac{1}{2J} \operatorname{cth}\left(\frac{x}{2J}\right). \tag{114,6}$$

ამასთან

$$x = \frac{\beta\mathscr{H}J}{kT}, \quad \beta = M_B g. \tag{114,7}$$

იმ კერძო შემთხვევაში, როცა $x \ll 1$ (სუსტი გარეშე ველის შემთხვევა), პარამაგნიტური ამთვისებლობისათვის გვექნება

$$\chi_J(T) = \frac{J(J+1) g^2 M_B^2}{3kT}, \tag{114,8}$$

ერთელექტრონიანი ატომებისაგან განსხვავებით, რთული ატომების სრული მომენტი შეიძლება ნულიც იყოს ($J=0$). ამ დროს პარამაგნიტიზმის ეფექტი არა

გვაქვს, ე. ი. $\chi_J(T)=0$. 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 ამთვისებლობა, (99,32)-ის თანახმად, გამოისახება ფორმულით

$$\chi_d=-\frac{e^2}{4\mu c^2}\sum_{i=1}^{N}\overline{(x_i^2+y_i^2)}\,. \tag{114,9}$$

განვიხილოთ ჰელიუმის ატომის შემთხვევა, მისთვის $N=2$, ამიტომ

$$\chi_d=-\frac{e^2}{4\mu c^2}\left(\overline{x_1^2+y_1^2}+\overline{x_2^2+y_2^2}\right). \tag{114,10}$$

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 $\overline{x_1^2}=\overline{y_1^2}=\overline{z_1^2}=\overline{y_2^2}=1/3\,\overline{r^2}$ და, მაშასადამე,

$$\chi_d=-\frac{e^2}{3\mu c^2}\overline{r^2}, \tag{114,11}$$

კლასიკურ მექანიკაში $\overline{r^2}$ განსაზღვრა პრინციპიულად შეუძლებელი იყო. კვანტურ მექანიკაში კი, ვიცით რა ჰელიუმის ატომის ტალღური ფუნქციები, შეგვიძლია $\overline{r^2}$ გამოვთვალოთ $\overline{r^2}=\int\psi_0^*r^2\psi_0 d\tau$ ფორმულით. გამოთვლები დიამაგნიტური ამთვისებლობისათვის იძლევა სიდიდეს, რომელიც კარგად ეთანხმება ექსპერიმენტულ მნიშვნელობას.

§ 115. ატომური ერთეულები

გამოყენებით საკითხებში ხშირად იხმარება ე. წ. ატომური ერთეულები, რომლებიც შემოყვანილი იყო ჰარტრის მიერ[1]. ეს ერთეულები საკმაოდ ამარტივებს იმ ფორმულებს, რომლებიც გეხვდება ატომის თეორიაში.

ამ სისტემაში ერთეულებად აღებულია შემდეგი სიდიდეები:

მუხტის ერთეული—ელექტრონის მუხტი $e=4{,}8\cdot10^{-10}$ $CGSE$,

მასის ერთეული—ელექტრონის მასა $\mu=9.1\ 10^{-28}$ გრ.,

სიგრძის ერთეული—ბორის პირველი ორბიტის რადიუსი $a_0=\dfrac{\hbar^2}{\mu e^2}=0{,}529\times$ $\times\ 10^{-8}$ სმ.

ყველა წარმოებული სიდიდეები შეგვიძლია განვსაზღვროთ ამ ერთეულებით; მაგალითად, ენერგიის ერთეულისათვის გვექნება

$$\frac{e^2}{a_0}=\frac{\mu e^4}{\hbar^2}=4{,}304\cdot10^{-11}\text{ ერგი}=27{,}07\ eV, \tag{115,1}$$

---

[1] D. R. Hartree, Proc. Camb. Phil. Soc. 24,89 (1928).

რომელიც წარმოადგენს წყალბადის ატომის გაორკეცებული იონიზაციის ენერგიას.

სიჩქარის ერთეულისათვის გვექნება

$$v_0 = \frac{e^2}{\hbar} = \frac{c}{137}, \tag{115,2}$$

დროის ერთეული იქნება ტოლი

$$\frac{a_0}{v_0} = \frac{\hbar^3}{\mu e^4}, \tag{115,3}$$

სიხშირის ერთეული მიიღება დროის ერთეულის შებრუნებით

$$\frac{v_0}{a_0} = \frac{\mu e^4}{\hbar^3}, \tag{115,4}$$

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

$$E_n = -\frac{1}{2n^2}, \quad n = 1,2,\ldots \tag{115,5}$$

ხოლო ტალღური ფუნქცია

$$\psi_{100} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} e^{-r}. \tag{115,6}$$

და ა. შ. თუ ატომური ერთეულებიდან გვსურს დავუბრუნდეთ ჩვეულებრივ ერთეულებს, მაშინ საჭიროა სიგრძე გავამრავლოთ სიგრძის ერთეულზე, ე. ი. $0{,}529\ 10^{-8}$ სმ-ზე. ენერგია — ენერგიის ერთეულზე, ე. ი. $27{,}07 eV$-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 $E_1 = -13{,}5 eV$ და ა. შ.

ხშირად, ატომის ფიზიკაში ენერგიას გამოხატავენ რიდბერგებში — Ry. რიდბერგი წარმოადგენს ენერგიის ატომური ერთეულის ნახევარს, ე. ი. იგი ემთხვევა წყალბადის ატომის იონიზაციის ენერგიას $Ry = 13{,}5 eV$, ამასთან, რიცხვით მნიშვნელობას მარჯვნივ უწერენ Ry სიმბოლოს.

დავამყაროთ მნიშვნელოვანი თანაფარდობები სამ უნივერსალურ სიგრძის განზომილების სიდიდეს შორის

$$r_0 = \frac{e^2}{\mu c^2}, \quad \lambda_c = \frac{\hbar}{\mu c}, \quad a_0 = \frac{\hbar}{\mu e^2}, \tag{115,7}$$

პირველი წარმოადგენს ელექტრონის კლასიკურ რადიუსს, მეორე — კომპტონის ტალღის სიგრძეს, ხოლო მესამე — ბორის პირველი ორბიტის რადიუსს.

აშკარაა, რომ

$$\frac{r_0}{\lambda_c} = \frac{e^2}{\hbar c} = \alpha_0. \tag{115,8}$$

ასევე,

$$\frac{\lambda_c}{a_0} = \frac{e^2}{\hbar c} = \alpha_0 \quad \text{და} \quad \frac{r_0}{a_0} = \left(\frac{e^2}{\hbar c}\right)^2 = \alpha_0^2. \tag{115,9}$$

სადაც α_0 არის ზომერფელდის ნაზი სტრუქტურის მუდმივი.

თავი XV

ორატომიანი მოლეკულები

§116. ორატომიანი მოლეკულის კვანტური დონეები

სანამ უშუალოდ მოლეკულის მდგრადობის საკითხს შევისწავლიდეთ, წინასწარ გამოვიდეთ ორატომიანი მოლეკულის არსებობის ფაქტიდან და ვაჩვენოთ, რა მოძრაობების შესრულება შეუძლია მოლეკულის ატომებს და როგორია მათი შესაბამისი კვანტური დონეები.

განვიხილოთ მოლეკულა, რომელიც შედგება ორი ატომისაგან მასებით m_1 და m_2 და გამოვარკვიოთ, როგორ შეიძლება განვსაზღვროთ ასეთი მოლეკულის ენერგეტული დონეები. ორატომიანი მოლეკულის მდგრადობისათვის საჭიროა, რომ პოტენციალურ ენერგიას ჰქონდეს მინიმუმი. მინიმუმის წერტილი აღვნიშნოთ R_0-ით, მაშინ წონასწორობის მახლობლად პოტენციალური ენერგია შეგვიძლია გავშალოთ $(r - R_0)$-ის ხარისხების მიხედვით. თუ შევინარჩუნებთ კვადრატულ წევრებს, გვექნება

$$V(r) = \frac{\mu\omega^2 (r - R_0)^2}{2}, \tag{116,1}$$

სადაც $\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$ სისტემის დაყვანილი მასაა და $\omega = \sqrt{\frac{1}{\mu}\left(\frac{d^2V}{dr^2}\right)_{R_0}}$

იგულისხმება, რომ მოლეკულის შემადგენელი ატომები წონასწორობის ირგვლივ ასრულებენ მცირე ჰარმონიულ რხევებს. ამ შემთხვევაში სათანადო ენერგია იქნება

$$E_N = \hbar\omega\left(N + \frac{1}{2}\right), \tag{116,2}$$

სადაც $N = 0, 1, 2, \ldots$ რხევის (ან ვიბრაციულ) კვანტურ რიცხვს უწოდებენ.

მაგრამ მოლეკულას, რხევითი მოძრაობის გარდა, შეუძლია ბრუნვითი მოძრაობაც. ადვილად მივიღებთ ბრუნვითი მოძრაობის ენერგიას, თუ ჩავთვლით, რომ ორატომიანი მოლეკულა პირველ მიახლოებაში წარმოადგენს მყარ როტატორს, რომლის ენერგიისათვის გვქონდა

$$E_\nu = \frac{\hbar^2 \nu (\nu + 1)}{2J_0}. \tag{116,3}$$

აქ $J_0 = \mu R_0^2$ არის მოლეკულის ინერციის მომენტი, $\nu = 0, 1, 2, 3, \ldots$ უწოდებენ როტაციულ (ან ბრუნვით) კვანტურ რიცხვს. მოლეკულის სრული ენერგიის მისაღებად საჭიროა რხევით და ბრუნვით ენერგიას დავუმატოთ ელექტრონების ენერგია ატომებში — E_n. მაშასადამე, მოლეკულის სრულ ენერგიას პირველ მიახლოებაში ექნება სახე

$$E_{n,N,\nu}=E_n+\hbar\omega\left(N+\frac{1}{2}\right)+\frac{\hbar^2\nu(\nu+1)}{2J_0}. \qquad (116,4)$$

ამ სახით ენერგიის ჩაწერის დროს ვიგულისხმეთ, რომ ელექტრონებისა და ატომების მოძრაობებს შორის კავშირი მოლეკულაში ძალიან მცირეა. ასე რომ, პირველ მიახლოებაში მოლეკულის სრული ენერგია შეგვიძლია წარმოვიდგინოთ როგორც ელექტრონებისა და ატომების ენერგიების ჯამი. მართალია, მოლეკულაში განხორციელებულ მოძრაობებს შორის კავშირი ძალიან მცირეა, მაგრამ იგი მაინც არსებობს და ამიტომ, თუ მოლეკულას ეცემა სინათლის კვანტი, მაშინ კვანტის ენერგიის ნაწილი დაიხარჯება ელექტრული დონის აღგზნებაზე, ნაწილი კი აღიგზნებს ატომურ დონეებს. ასევე, თუ მოლეკულა ასხივებს სინათლის კვანტს, მაშინ ეს ენერგია გამოწვეულია როგორც ატომში ელექტრონების მოძრაობით, ისე თვით ატომების მოძრაობით მოლეკულაში. ამიტომ მოლეკულის მიერ გამოსხივებული სინათლის სიხშირისათვის

$$\omega=\frac{E_{n'N'\nu'}-E_{n\nu}}{\hbar} \qquad (116,5)$$

ფორმულის გამოყენებისას, უნდა ავიღოთ მოლეკულის მთელი ენერგია საბოლოო და საწყის მდგომარეობაში. ამგვარად, მოლეკულის მიერ გამოსხივებული სინათლის სიხშირისათვის გვექნება

$$\omega_{if}=\frac{E_n'-E_n}{\hbar}+\omega(N'-N)+\frac{\hbar}{2J_0}\{\nu'(\nu'+1)-\nu(\nu+1)\}. \qquad (116,6)$$

პირველი წევრი წარმოადგენს სიხშირეს, რომელიც გამოწვეულია ელექტრონული გადასვლებით. აღვნიშნოთ იგი $\omega_{nn'}$-ით. მაშინ (116,6) მიიღებს სახეს

$$\omega_{if}=\omega_{nn'}+\omega(N'-N)+\frac{\hbar}{2J_0}\{(\nu'+1/2)^2-(\nu+1/2)^2\}. \qquad (116,7)$$

ჩვენ ვხედავთ, რომ იმის მიხედვით, ატომი ასხივებს თავისუფალ თუ მოლეკულაში მყოფ მდგომარეობაში, სიხშირეები სულ სხვადასხვა იქნება. თუ თავისუფალი ატომებიდან გამოსხივებული სინათლის სიხშირე განისაზღვრებოდა მხოლოდ ელექტრონული გადასვლებით, მოლეკულური გამოსხივების დროს მას ემატება სიხშირეები, გამოწვეული მოლეკულაში ატომების რხევით და ბრუნვითი მოძრაობებით. ჩვეულებრივად, (116,7) ფორმულაში $\omega_{nn'}$ სიხშირე გაცილებით მეტია ω რხევით სიხშირეზე და, მითუმეტეს, $\frac{\hbar}{2J_0}$-ზე. ამიტომ, სპექტროსკოპით დაკვირვებისას ჩვენთვის ცნობილი ელექტრონული გადასვლებით გამოწვეული სპექტრალური ხაზების გვერდით გვექნება ხაზების უამრავი რიცხვი. ეს ხაზები თითქმის ერთმანეთს ემთხვევა და ქმნის ე. წ. ზოლოვან სპექტრს. ზოლში ხაზები განპირობებულია მოლეკულის ბრუნვითი მოძრაობის ცვლილებით, ამიტომ ამ ზოლებს ხშირად როტაციულ ზოლებსაც უწოდებენ. გარდა იმ ხაზებისა, რომლებიც გამოწვეულია ბრუნვითი მოძრაობის ცვლილებით, სპექტრში გვექნება რხევითი მოძრაობის ცვლილებით გამოწვეული ხაზებიც. ასეთ ხაზებს ვიბრაციულს უწოდებენ.

ამგვარად, განსხვავებით ატომებისაგან, რომლებიც ხასიათდებიან ერთმანეთისაგან შორს მდებარე სპექტრალური ხაზებით, ორატომიან მოლეკულას აქვს ზოლოვანი სპექტრი. როგორც აღვნიშნეთ, ამის მიზეზი არის ის, რომ ენერგიის გამოსხივებაში მონაწილეობას იღებს მთელი მოლეკულა.

ორატომიანი გაზის სითბოტევადობა. ამის შემდეგ ადვილად შეგვიძლია გავარჩიოთ ორატომიანი გაზების სითბოტევადობის საკითხიც. როგორც კლასიკური ფიზიკიდან არის ცნობილი, თავისუფლების თითოეულ ხარისხზე მოდის $\frac{1}{2}kT$ ენერგია, სადაც k არის ბოლცმანის მუდმივი, T კი — აბსოლუტური ტემპერატურა. ამიტომ სითბოტევადობა, რომელიც მოდის ერთ თავისუფლების ხარისხზე, იქნება $\frac{k}{2}$. ორატომიან მოლეკულას აქვს ექვსი თავისუფლების ხარისხი: ორი ბრუნვითი, ერთი რხევითი და სამი გადატანითი, ამიტომ, კლასიკური ფიზიკის თანახმად, ორატომიანი გაზის მოლეკულური სითბოტევადობა უნდა იყოს მუდმივი და ტოლი $6\frac{k}{2}N_0=3R$, სადაც $R=kN_0$, ხოლო N_0 არის ავოგადროს რიცხვი.

ცდა გვიჩვენებს, რომ საშუალო ტემპერატურაზე სითბოტევადობა, მართლაც, მუდმივია, მაგრამ ტოლია არა $3R$-ის, არამედ $\frac{5}{2}R$-ისა, მცირე ტემპერატურებზე კი სითბოტევადობა $\frac{3}{2}R$-ის ტოლია. ეს ექსპერიმენტული ფაქტი მარტივად აიხსნება კვანტური მექანიკით.

თუ T ტემპერატურაზე მოლეკულის გადატანითი ენერგია $\frac{3}{2}kT$ ნაკლებია რხევის ჩω ენერგიაზე, მაშინ მოლეკულის რხევითი მოძრაობა არ აიგზნება. ამ შემთხვევაში, მოლეკულა შეგვიძლია ჩავთვალოთ როგორც აბსოლუტურად მყარი (ატომებს შორის მანძილი უცვლელია), მაშინ მისი თავისუფლების ხარისხი იქნება არა 6, არამედ 5. ამ შემთხვევაში ამბობენ, რომ რხევა „იყინებაო", სითბოტევადობა კი $\frac{5}{2}R$-ის ტოლი იქნება. ამასთან, გაყინვის ტემპერატურა განისაზღვრება $\frac{3}{2}kT_k<$ ჩω ფორმულიდან. ტემპერატურის შემცირებისას დადგება ისეთი მომენტიც, როცა გადატანითი მოძრაობა ბრუნვის ენერგიაზე ნაკლებიც იქნება, ე. ი. $\frac{3}{2}kT<\frac{\hbar^2}{2J_0}$ ამ შემთხვევაში კიდევ „იყინება" ორი თავისუფლების ხარისხი და სითბოტევადობა $\frac{3}{2}R$-ის ტოლია.

§ 117. ჰეტეროპოლარული და ჰომეოპოლარული ბმები

ქიმიაში იხილავენ ორი ტიპის ბმას, რომელიც იძლევა მოლეკულის მდგრად მდგომარეობას. ერთია ჰეტეროპოლარული (იონური) ბმა, ხოლო მეორე — ჰომეოპოლარული (ატომური). ჰეტეროპოლარული ბმის დროს მოლეკულა ორი სხვადასხვა ატომის საწინააღმდეგო ნიშნის მქონე იონისაგან იქმნება. ამ ბმის დამახასიათებელ მაგალითს წარმოადგენს მარილის — NaCl-ის მოლეკულა. როგორც ცნობილია, მარილის მოლეკულა შექმნილია Na-ის დადებითი და Cl-ის უარყოფითი იონისაგან. ჰომეოპოლარული ბმის დროს მოლეკულას ქმნის ნეიტრალური ატომები. ამ ბმის დამახასიათებელია ყველა ორი ერთნაირი ატომის მქონე მოლეკულა H_2, O_2, N_2 და ა. შ. ეს ბმები გავარჩიოთ ცალ-ცალკე.

ჰეტეროპოლარული ბმის არსი კარგად იყო ცნობილი კლასიკურ მექანიკაშიც, ჰეტეროპოლარული ბმა არის ელემენტების მისწრაფების შედეგი — გასცეს

ან შეიერთოს ელექტრონები, ე. ი. ვალენტობის შედეგი. როგორც ქლორი, ისე ნატრიუმი ერთვალენტიანია. ამასთან, რადგან Cl-ს აკლია ერთი ელექტრონი ჩაკეტილი, ინერტული Ne-ის გარსის შესაქმნელად, ამიტომ იგი განსაკუთრებულად აქტიურია. ნატრიუმს კი აქვს ერთი სუსტად ბმული ელექტრონი. ამიტომაც ამ ორი ატომის დაახლოებისას არსებობს მისწრაფება ურთიერთკავშირისათვის. რადგან ჰეტეროპოლარული ბმის დროს საქმე გვაქვს ელექტრულ ძალებთან, ამიტომ ამ ბმის საკითხი რამდენადმე კარგად იყო დამუშავებული კლასიკურ ფიზიკაში. იონებს შორის ურთიერთქმედებას ექნება კულონური სახე

$$V = -\frac{e^2}{r}, \tag{117,1}$$

ცნობილია, რომ მხოლოდ კულონური ძალა არ იძლევა მდგრად მდგომარეობას. ამიტომ ამ პოტენციალს ახლო მანძილებზე უნდა დაემატოს განმზიდი ძალა. კლასიკურ მექანიკაში ირჩევდნენ

$$V(r) = -\frac{e^2}{r} + \frac{\text{const}}{r^m} \tag{117,2}$$

პოტენციალს, სადაც const და m ემპირიულად განისაზღვრებოდა. კვანტურ მექანიკაში, ბორნისა და მეიერის თანახმად, პოტენციალური ენერგია აირჩევა შემდეგნაირად:

$$V(r) = -\frac{e^2}{r} + Be^{-r/\rho}. \tag{117,3}$$

სადაც B და ρ ემპირიული მუდმივებია, ასეთი პოტენციალი იძლევა გაცილებით უკეთეს შედეგებს.

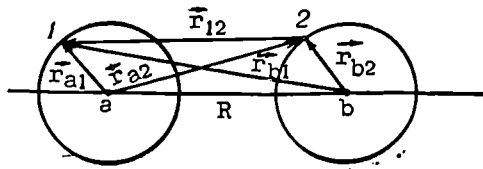
თუ კლასიკურმა ფიზიკამ ჰეტეროპოლარული ბმის შესახებ მოგვცა ასე თუ ისე დამაკმაყოფილებელი შედეგები, მან ვერაფრით ვერ ახსნა ჰომეოპოლარული ბმის მიზეზები. გაუგებარი იყო, რატომ ქმნიდა ბმულ მდგომარეობას ორი ნეიტრალური ატომი და რა ძალები მოქმედებდნენ ამ ატომებს შორის. ჰომეოპოლარული ბმის საკითხი ასევე გაუგებარი დარჩა ელემენტარული კვანტური თეორიისათვისაც. მან ვერ მოახერხა მოეცა უმარტივესი წყალბადის მოლეკულის თეორიაც კი. ჰომეოპოლარული ძალების საკითხი მხოლოდ კვანტურმა მექანიკამ გააშუქა გაცვლითი ურთიერთქმედების თვალსაზრისით. როგორც ტიპიურ მაგალითს ჰომეოპოლარული ბმებისა, განვიხილავთ წყალბადის მოლეკულას და ვაჩვენებთ, თუ როგორ უდგება ამ პრობლემის გადაჭრას კვანტური მექანიკა. ამასთან აღვნიშნოთ, რომ პრობლემის გადასაწყვეტად დამუშავებული იყო ორი მეთოდი: ჰაიტლერ-ლონდონისა, რომელიც შემდგომში გააუმჯობესეს სლეტერმა და პაულინგმა, და ჰუნდ-მილიკენისა. რომელიც შემდგომში გაუმჯობესებულ იქნა ჰერცბერგისა და ლენარდ ჯონსის მიერ. ჩვენ ქვემოთ განვიხილავთ მხოლოდ ჰაიტლერ-ლონდონის მეთოდს, როგორც შედარებით უფრო მარტივს.

§ 118. წყალბადის მოლეკულა

წყალბადის მოლეკულა წარმოადგენს სისტემას, რომელიც შედგება წყალბადის ორი ატომისაგან. ისევე, როგორც ჰელიუმის ატომში, წყალბადის მოლეკულაშიც ორი ელექტრონი გვაქვს, მაგრამ მათი მოძრაობის ხასიათი თითოეულ ამ სისტემაში სხვადასხვაა. ჰელიუმში ელექტრონები მოძრაობს ერთი ატომგულის ცენტრალური სიმეტრიის ველში, ხოლო მოლეკულის შემთხვევაში — ორი ატომ-

გულის ღერძული სიმეტრიის ველში. ამის გამო ელექტრონთა სრული ორბიტალური მომენტი აღარ ინახება. ადგილი ექნება მხოლოდ მოშენტის, ატომგულების შემაერთებელ ღერძზე, პროექციის მუდმივობას. ცხადია, რომ ამ პროექციას ექნება მნიშვნელობები 0, ħ, 2ħ,... და ა. შ.

მიუხედავად აღნიშნული განსხვავებისა, ჰელიუმის ატომისა და წყალბადის მოლეკულის ამოცანას შორის შეგვიძლია მჭიდრო ანალოგია გავატაროთ. ჩვენი მიზანია ვაჩვენოთ, რომ წყალბადის ორი ნეიტრალური ატომი ქმნის სტაბილურ სისტემას.



ნახ. 36

დავწეროთ წყალბადის მოლეკულის ჰამილტონიანი, ამ მიზნით ვიგულისხმოთ, რომ „*sl*“ და „*ss*“ ურთიერთმქმედებანი შეგვიძლია უგულებელვყოთ. თუ ვისარგებლებთ ატომური ერთეულებით ($\hbar = e = \mu = 1$), მაშინ ჰამილტონიანისათვის შეგვიძლია დავწეროთ

$$\hat{H} = -\frac{1}{2M}\Delta_a - \frac{1}{2M}\Delta_b - \frac{1}{2}\Delta_1 - \frac{1}{2}\Delta_2 - \frac{1}{r_{a1}} - \frac{1}{r_{b1}} - \frac{1}{r_{a2}} - \frac{1}{r_{b2}} + \frac{1}{r_{12}} + \frac{1}{R}. \qquad (118{,}1)$$

პირველი და მეორე წევრი ამ ჰამილტონიანში გამოხატავს ატომგულების (პროტონების) კინეტიკური ენერგიის ოპერატორებს, შემდეგი ორი — პირველი და მეორე ელექტრონის კინეტიკურ ენერგიებს. დანარჩენი წევრები გამოხატავს ელექტრონებისა და პროტონების წყვილებს შორის ყველა შესაძლო კულონური ურთიერთქმედების პოტენციალურ ენერგიას (a და b აღნიშნავს პროტონებს 1 და 2 ელექტრონებს იხ. ნახ. 36), ბოლო წევრი შეესაბამება პროტონების კულონურ განზიდვას. ატომგულების კინეტიკური ენერგიები მნიშვნელოვნად შეიცავს პროტონის მასას, ამიტომ ეს წევრები გაცილებით მცირე იქნება ელექტრონის მოძრაობის შესაბამის წევრებთან შედარებით. ამიტომ ელექტრონული მდგომარეობის ტალღური ფუნქციის მოძებნის დროს ჩვენ შეგვიძლია ატომგულების მოძრაობა მხედველობაში არ მივიღოთ და (118,1) ჰამილტონიანში პროტონების კინეტიკური ენერგიის ოპერატორები გადავაგდოთ. ამ მიახლოებას ადიაბატურ მიახლოებას უწოდებენ. მაშასადამე, ადიაბატურ მიახლოებაში მოლეკულის ჰამილტონიანს ექნება გამოხატულება

$$\hat{H} = -\frac{1}{2}\Delta_1 - \frac{1}{2}\Delta_2 - \frac{1}{r_{a1}} - \frac{1}{r_{b1}} - \frac{1}{r_{a2}} - \frac{1}{r_{b2}} + \frac{1}{r_{12}} + \frac{1}{R}. \qquad (118{,}2)$$

ცხადია, რომ მოლეკულის სრული ენერგია და ტალღური ფუნქცია უნდა ვიპოვოთ შრედინგერის სტაციონარული მდგომარეობის განტოლებიდან

$$\hat{H}\psi = E\psi. \qquad (118{,}3)$$

რადგან ამ განტოლებაში პროტონების კინეტიკური ენერგიის ოპერატორები უგულებელყოფილია, ამიტომ მისი ამონახსნი გულებს შორის R მანძილზე მხოლოდ პარამეტრის სახით იქნება დამოკიდებული. (118,3) შრედინგერის განტოლება აღწერს ელექტრონების მოძრაობას დაფიქსირებული გულების ველში. ცხადია, რომ მოლეკულის სრული ენერგია დამოკიდებული იქნება პროტონებს შორის არსებულ მანძილზე, ე. ი. $E=E(R)$. ამიტომ $E(R)$ შეგვიძლია განვიხილოთ როგორც მოლეკულის პოტენციალური ენერგია. თუ აღმოჩნდა, რომ შრედინგერის განტოლებიდან ნაპოვნ $E(R)$ ფუნქციას აქვს მინიმუმი, ეს იმას ნიშნავს, რომ მოცემული ელექტრონული მდგომარეობისათვის, პროტონები იმყოფებიან მდგრად წონასწორობაში და ორი წყალბადის ნეიტრალური ატომი ქმნის წყალბადის მოლეკულას. წყალბადის მოლეკულის ამოცანა ამ სახით გადაწყვეტილი იყო ჰაიტლერისა და ლონდონის მიერ[1]. მათ დაამუშავეს შრედინგერის განტოლების ამოხსნის მიახლოებითი მეთოდი, რომლის თანახმად ნულოვან მიახლოვებად ითვლება ის მდგომარეობა, რომელიც შეესაბამება ერთმანეთისაგან უსასრულოდ დაშორებულ ატომებს, ხოლო ამ ორი ატომის ურთიერთქმედება განიხილება როგორც შეშფოთება. სახელდობრ, შეშფოთების ენერგიას აქვს შემდეგი გამოსახულება:

$$\hat{H}' = \frac{1}{R} - \frac{1}{r_{b1}} - \frac{1}{r_{a2}} + \frac{1}{r_{12}}. \qquad (118,4)$$

როცა $R=\infty$, გვაქვს ნეიტრალური წყალბადის ორი ატომი. ამ შემთხვევაში პირველი ელექტრონი იმყოფება a გულთან, მეორე კი — b-სთან. მაშასადამე, ნულოვანი მიახლოებისათვის შეგვიძლია ავიღოთ ფუნქცია

$$\psi_1 = \psi_a(1)\,\psi_b(2) = \frac{1}{\pi}\, e^{-r_{a1}-r_{b2}}, \qquad (118,5)$$

სადაც $\psi_a(1)$ და $\psi_b(2)$ წარმოადგენს წყალბადის ატომის $1s$ მდგომარეობის ტალღურ ფუნქციებს შესაბამისად პირველი ელექტრონისათვის, რომელიც მოძრაობს a გულის ირგვლივ და მე-2 ელექტრონისათვის, რომელიც მოძრაობს b გულის ირგვლივ (იხ. (115,6) ფორმულა).

რადგან ელექტრონები იგივური ნაწილაკებია, ამიტომ ნულოვანი მიახლოების ფუნქცია იქნება ის ფუნქციაც, რომელიც (118.5)-დან ელექტრონების გადასმით მიიღება, ე. ი.

$$\psi_2 = \psi_a(2)\,\psi_b(1) = \frac{1}{\pi}\, e^{-r_{b1}-r_{a2}} \qquad (118,6)$$

აქაც, ისევე, როგორც ჰელიუმის ატომში, ადგილი აქვს გაცვლით გადაგვარებას. ψ_1 და ψ_2 ფუნქციები ეკუთვნის ერთსა და ინავე E_0 საკუთარ მნიშვნელობას; ასე რომ, როცა $R \gg 1$, წყალბადის მოლეკულის ენერგიისათვის გვექნება $E_0 = 2E_1$ მნიშვნელობა, სადაც E_1 არის წყალბადის ატომის ძირითადი მდგომარეობის ენერგია.

როგორც ვიცით, გადაგვარების შედეგად სისტემის ტალღური ფუნქცია დაიწერება როგორც ψ_1 და ψ_2 ფუნქციების წრფივი კომბინაცია. აგრეთვე აღვნიშნოთ, რომ ψ_1 და ψ_2 ფუნქციები ტალღური ფუნქციის სივრცით ნაწილს წარმოადგენს. ვინაიდან სისტემის სრული ტალღური ფუნქცია (კოორდინატული და სპინური) უნდა იყოს ანტისიმეტრიული, ამიტომ H_2 მოლეკულის ტალღური ფუნქციის სივრცული ნაწილისათვის შეიძლება დავწეროთ

---

[1] Heitler W., London F., Zeits. f. Phys. 44, 455 (1927).

$$\varphi = c\,(\psi_1 \pm \psi_2) = c\,[\psi_a(1)\,\psi_b(2) \pm \psi_a(2)\,\psi_b(1)]. \qquad (118,7)$$

ვიპოვოთ c კოეფიციენტი ნორმირების პირობიდან

$$\int \varphi^2 d\tau = c^2 \int \psi_1^2 d\tau + c^2 \int \psi_2^2 d\tau \pm 2c^2 \int \psi_1 \psi_2\, d\tau = 1. \qquad (118,8)$$

როგორც $\psi_1 = \psi_a(1)\,\psi_b(2)$, ისე $\psi_2 = \psi_a(2)\,\psi_b(1)$ ნორმირებული ფუნქციებია, ამიტომ $\int \psi_1^2\, d\tau = \int \psi_2^2\, d\tau = 1$. ჰელიუმის ატომის შემთხვევაში ψ_1 და ψ_2 ერთსა და იმავე ატომს ეკუთვნოდნენ, ამიტომ ორთოგონალობის ძალით, ჰელიუმისათვის $\int \psi_1 \psi_2\, d\tau = 0$. წყალბადის მოლეკულაში კი ეს ფუნქციები სხვადასხვა ატომს ეკუთვნის, რის გამოც ისინი ორთოგონალური არ არიან.

შემოვიღოთ აღნიშვნა

$$N^2 = \int \psi_1 \psi_2\, d\tau; \qquad (118,9)$$

მაშინ (118,8)-დან მივიღებთ

$$c = [2\,(1 \pm N^2)]^{-1/2}. \qquad (118,10)$$

ამრიგად, ნულოვან მიახლოებაში H_2 მოლეკულის სიმეტრიულ და ანტისიმეტრიულ ნორმირებულ ფუნქციებს ექნება სახე:

$$\left.\begin{aligned} \psi_s &= \frac{1}{\sqrt{2\,(1+N^2)}}\,(\psi_1 + \psi_2), \\ \psi_a &= \frac{1}{\sqrt{2\,(1-N^2)}}\,(\psi_1 - \psi_2). \end{aligned}\right\} \qquad (118,11)$$

ვაჩვენოთ, რომ, როცა $R = \infty$, მაშინ $N^2 = 0$. მართლაც, (118,5) და (118,6)-ის ძალით გვაქვს

$$N^2 = \int \psi_1 \psi_2\, d\tau = \frac{1}{\pi^2} \int e^{(-r_{a1} - r_{b2})}\, e^{(-r_{a2} - r_{b1})}\, d\tau_1\, d\tau_2 =$$

$$= \left(\frac{1}{\pi} \int e^{(-r_{a1} - r_{b1})}\, d\tau_1 \right)^2, \qquad (118,12)$$

საიდანაც

$$N = \frac{1}{\pi} \int e^{(-r_{a1} - r_{b1})}\, d\tau_1; \qquad (118,13)$$

ამ ინტეგრალის ამოსახსნელად შემოვიღოთ ელიპსური კოორდინატები:

$$\mu = \frac{r_{a1} + r_{b1}}{R}, \quad \nu = \frac{r_{a1} - r_{b1}}{R}, \quad \varphi,$$

ამასთან

$$d\tau = \frac{R^3}{8} (\mu^2 - \nu^2)\, d\mu\, d\nu\, d\varphi \qquad (118,14)$$

და

$$1 \leqslant \mu \leqslant \infty, \quad -1 \leqslant \nu \leqslant +1, \quad 0 \leqslant \varphi \leqslant 2\pi.$$

φ არის შემობრუნების კუთხე გულების შემაერთებელი ხაზის ირგვლივ. ამ კოორდინატებში გვექნება

$$N = \frac{R^3}{8\pi} \int_1^\infty e^{-R\mu}\, d\mu \int_{-1}^{+1} (\mu^2 - \nu^2)\, d\nu \int_0^{2\pi} d\varphi = \left(1 + R + \frac{R^2}{3}\right) e^{-R}. \qquad (118,15)$$

მიღებული ფორმულა გვიჩვენებს, რომ, მართლაც, როცა $R \to \infty$, მაშინ $N=0$, ხოლო, როცა $R=0$, მაშინ $N=1$, ე. ი. ψ_1 და ψ_2 ფუნქციები $R=\infty$ შემთხვევაში ორთოგონალურია, $R=0$ შემთხვევაში კი — ნორმირებული. მაშასადამე, N სიდიდე აკმაყოფილებს პირობას

$$0 \leqslant N^2 \leqslant 1 \quad \text{ან} \quad 0 \leqslant N \leqslant 1. \tag{118,16}$$

ამგვარად, ჰელიუმის ატომისაგან განსხვავებით, ψ_1 და ψ_2 ფუნქციები ორთოგონალური არაა და ამის შედეგად H_2-ის (118,10), ნულოვანი მიახლოების ტალღურ ფუნქციებს, ჰელიუმის (108,17) და (108,18) ფუნქციებისაგან განსხვავებით, გაუჩნდა $(1 \pm N^2)^{-1/2}$ მამრავლი. როდესაც ვიცით ნულოვანი მიახლოების ფუნქციები, ადვილად შეიძლება ვიპოვოთ ენერგიის შესწორება. აშკარაა, რომ იგი წარმოადგენს შეშფოთების ენერგიის საშუალო მნიშვნელობას

$$E^{(1)} = \frac{1}{2(1 \pm N^2)} \int (\psi_1 \pm \psi_2)\, \hat{H}'\, (\psi_1 \pm \psi_2)\, d\tau_1\, d\tau_2. \tag{118,17}$$

სადაც $\hat{H}'$ განსაზღვრება (118,4) ფორმულით. § 109-ში ჩატარებული გამოთვლების ანალოგიურად მივიღებთ

$$E^{(1)} = \frac{C(R) \pm A(R)}{1 \pm N^2} \tag{118,18}$$

ამ ფორმულაში შემავალი C და A სიდიდეები განისაზღვრებიან შემდეგი ინტეგრალებით:

$$C(R) = \int \left(\frac{1}{R} - \frac{1}{r_{a_2}} - \frac{1}{r_{b_1}} + \frac{1}{r_{12}} \right) \psi_a^2(1)\, \psi_b^2(2)\, d\tau_1\, d\tau_2 =$$

$$= \frac{1}{R} + \iint \frac{\rho_a(1)\, \rho_b(2)}{r_{12}}\, d\tau_1\, d\tau_2 - \int \frac{\rho_b(2)\, d\tau_2}{r_{a_2}} - \int \frac{\rho_a(1)}{r_{b_1}}\, d\tau_1 \tag{118,19}$$

და

$$A(R) = \int \psi_a(1)\, \psi_b(1)\, \psi_a(2)\, \psi_b(2) \left\{ \frac{1}{R} - \frac{1}{r_{a_2}} - \frac{1}{r_{b_1}} + \frac{1}{r_{12}} \right\} d\tau_1\, d\tau_2, \tag{118,20}$$

ამასთან.

$$\rho_a(1) = \psi_a^2(1) \quad \text{და} \quad \rho_b(2) = \psi_b^2(2). \tag{118,21}$$

(118,18) ფორმულის თანახმად, წყალბადის მოლეკულის ენერგიისათვის გვექნება $(E = 2E_1 + E^{(1)})$

$$E = 2E_1 + \frac{C \pm A}{1 \pm N^2} = 2E_1 + C \pm \frac{A - N^2 C}{1 \pm N^2}. \tag{118,22}$$

როგორც მოსალოდნელი იყო, ენერგიის შესწორება ჰელიუმის ატომის ენერგიის სათანადო შესწორებისაგან $(1 \pm N^2)^{-1}$ სიდიდით განსხვავდება. ამგვარად, იმის მიხედვით, თუ როგორია ტალღური ფუნქცია — სიმეტრიული თუ ანტისიმეტრიული — ენერგიისათვის გვექნებს ორი მნიშვნელობა:

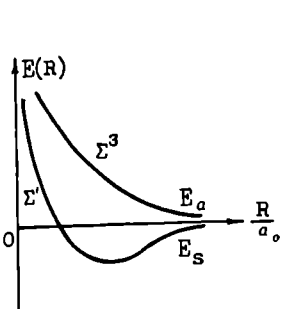
$$\left.\begin{aligned} E_a &= 2E_1 + C(R) - \frac{A(R) - N^2 C(R)}{1 - N^2}, \quad \psi_a = \frac{(\psi_1 - \psi_2)}{\sqrt{2(1 - N^2)}}, \\ E_s &= 2E_1 + C(R) + \frac{A(R) - N^2 C(R)}{1 + N^2}, \quad \psi_s = \frac{(\psi_1 + \psi_2)}{\sqrt{2(1 + N^2)}}. \end{aligned}\right\} \tag{118,23}$$

სანამ გამოვარკვევდეთ, ენერგიების ამ ორი მნიშვნელობიდან რომელი შეესაბამება მდგრად მდგომარეობას. შევისწავლოთ $A(R)$ და $C(R)$ ინტეგრალები. $C(R)$ გამოხატავს ატომგულეების და ელექტრონული ღრუბლების კულონურ ურთიერთქმედებას. $C(R)$-ის გამოსახულების პირველი წევრი შეესაბამება პროტონების ურთიერთქმედებას, მეორე — პირველი და მეორე ელექტრონის ღრუბლების კულონურ განზიდვას. მესამე წევრი იძლევა a გულის ურთიერთქმედებას მე-2 ელექტრონთან, უკანასკნელი წევრი კი გამოხატავს b გულის კულონურ ურთიერთქმედებას პირველ ელექტრონთან. რაც შეეხება $A(R)$-ს, იგი წარმოადგენს გაცვლით ურთიერთქმედებას, რომლის დროსაც ელექტრონი, რომელიც ერთთა გვაქვს აღნიშნული, a გულიდან გადადის b გულთან; ელექტრონი 2 კი, პირიქით, b-დან გადადის a-გულთან.

მხედველობაში, რომ მიგველო მხოლოდ $\psi_1 = \psi_a(1)\,\psi_b(2)$ ან მხოლოდ $\psi_2 = \psi_a(2)\,\psi_b(1)$, მაშინ გვექნებოდა $N=0$ და $A=0$. მაშასადამე, ენერგიის შესწორება მხოლოდ $C(R)$-ით გამოიხატებოდა. გაცვლითი $A(R)$ ენერგიის წარმოქმნა იმის შედეგია, რომ ψ_1-ის გარდა გათვალისწინებულია ψ_2 ფუნქციაც, ე. ი. ნულოვანი მიახლოების ამოხსნად აღებულია მათი წრფივი კომბინაცია. $C(R)$ ინტეგრალის გამოთვლა საკმაოდ მარტივია. თუ $\psi_a(1)$ და $\psi_b(2)$-ის ნაცვლად შევიტანთ წყალბადის ატომის ძირითადი მდგომარეობის ფუნქციებს, მივიღებთ

$$C(R) = e^{-2R}\left\{\frac{1}{R} + \frac{5}{8} - \frac{3R}{4} - \frac{R^2}{6}\right\}. \qquad (118{,}24)$$

აშკარაა, რომ $C(\infty)=0$. დიდი და საშუალო R-თვის $C(R)<0$, რაც შეესაბამება მიზიდვას, როცა $R \ll 1$, მაშინ $C(R) \sim \frac{1}{R}$; ეს უკანასკნელი გამოხატავს ორი პროტონის კულონურ განზიდვას. რიცხვითი გამოთვლები გვიჩვენებს, რომ გაცვლითი ენერგია $A<0$ და სიდიდით მეტია, ვიდრე CN^2. ამიტომ, (118,23) ფორმულების თანახმად, სიმეტრიული ფუნქციის შესაბამისი ენერგია ნაკლებია ანტისიმეტრიული ფუნქციის შესაბამის ენერგიაზე, ე. ი. $E_s < E_a$. რომ ავაგოთ სიმეტრიული და ანტისიმეტრიული მდგომარეობის (118,23) ენერგიების, როგორც R-ის ფუნქციების მრუდები, გვექნება 37-ე ნახაზზე მოცემული სურათი.



ნახ. 37

როგორც ვხედავთ, ანტისიმეტრიული კოორდინატული ფუნქციის დროს, ენერგიას არა აქვს მინიმუმი და ამიტომ მდგრადი მდგომარეობის შექმნა შეუძლებელია, ხოლო რაც შეეხება სიმეტრიულ მდგომარეობას, შესაბამის მრუდს აქვს მინიმუმი და, მაშასადამე, მდგრადი H_2 მოლეკულის შექმნა შესაძლებელია. მეორე მხრივ, რადგან ელექტრონები ფერმიონებია, ამიტომ სრული ფუნქცია (ნამრავლი კოორდინატული და სპინური ფუნქციებისა) უნდა იყოს ანტისიმეტრიული, საიდანაც გამომდინარეობს, რომ H_2 მოლეკულას მდგრადი მდგომარეობა ექნება მაშინ,

როცა სპინური ფუნქცია ანტისიმეტრიულია, რადგან ორი ელექტრონის სპინური ფუნქცია ანტისიმეტრიულია მაშინ, როცა სრული სპინი $S=0$, ამიტომ მიღებული შედეგი შეიძლება ასე ჩამოვაყალიბოთ:

ორი წყალბადის ატომი ერთმანეთს იზიდავს და იძლევა მდგრად მდგომარეობას მაშინ, როცა მათ ელექტრონებს აქვთ ანტიპარალელური სპინები; პარალელური სპინების შემთხვევაში კი ატომები ერთმანეთს განიზიდავს და, მაშასადამე, მდგრად მდგომარეობას არ იძლევა.

H_2-ის მდგომარეობას ახასიათებენ $^{2s+1}\Sigma$ სიმბოლოთი. მოლეკულის მდგომარეობას $S=0$ სპინით უწოდებენ სინგლეტურს, მისთვის გვექნება აღნიშნა $^1\Sigma$, ხოლო მდგომარეობას, რომლის სრული სპინი $S=1$, უწოდებენ ტრიპლეტურს და აღნიშნავენ $^3\Sigma$ სიმბოლოთი; ამგვარად, წყალბადის მოლეკულის მდგრადი მდგომარეობა სიმეტრიულია. რომ ვიპოვოთ R-ის ექსტრემალური მნიშვნელობა, რომლის დროსაც წყალბადის ორი ატომი ქმნის H_2 მოლეკულას, საჭიროა განისაზღვროს $E_s(R)$-ის მინიმუმი. $\left(\frac{dE_s(R)}{dR}\right)=0$ პირობა იძლევა, რომ $R_0=1{,}4$ ან, ჩვეულებრივ ერთეულებში, $R_0=1{,}4\cdot a_0=0{,}74\cdot 10^{-8}$ სმ. რადიუსის ამ მნიშვნელობას შეესაბამება ენერგია $E=30{,}3\,eV$, ასე, რომ, ენერგიის მინიმალური მნიშვნელობა ძევს უფრო ღრმად, ვიდრე თავისუფალი ატომების $2E_1$ ენერგია. განსხვავება უდრის

$$D=2E_1-E=3{,}2\,eV. \qquad (118{,}25)$$

ჩვენ ვხედავთ, რომ ჰომეოპოლარული ძალები (ე. ი. ნეიტრალურ ატომებს შორის მოქმედი ძალები) ატომების ელექტრონებს შორის გაცვლითი ურთიერთქმედების არსებობით აიხსნება. მართლაც, თუ $A=0$, მაშინ დაგვრჩება მხოლოდ $C(R)$, რომელიც სტაბილურ მდგომარეობას არ იძლევა.

შევნიშნოთ, რომ ჰაიტლერისა და ლონდონის მიერ R_0-ისა და დისოციაციის D ენერგიისათვის მიღებული მნიშვნელობები მაინცადამაინც კარგ თანხმობაში არ არიან ექსპერიმენტულ მნიშვნელობასთან: $R_0=0{,}7395\,\text{Å}$ და $D=(4{,}73\pm 0{,}04)\,eV$. ეს განსხვავება გამოწვეულია შეშფოთების თეორიაში ენერგიის მხოლოდ პირველი შესწორების განხილვით. ამ მეთოდში მაღალი მიახლოების გამოყენებას აზრი არა აქვს. რადგან არსებობს გაცილებით უფრო მარტივი მეთოდები, რომლებიც ამავე დროს უკეთეს შედეგებს იძლევა.

აღვნიშნოთ ჰომეოპოლარული ბმების ის მეტად დამახასიათებელი თვისება, რომ მათ გააჩნია ნაჯერობა, თითქოს ჰომეოპოლარული ძალები მთლიანად დაიხარჯა წყალბადის ორი ატომისაგან H_2 მოლეკულის შექმნაზე და რომ მესამე ატომი არავითარ შემთხვევაში H_2 მოლეკულასთან არ მოგვცემს ბმულ მდგომარეობას. გამოთვლები გვიჩვენებს, რომ, თუ ორი წყალბადის ატომის გარდა გვაქვს აგრეთვე მესამე წყალბადის ატომიც, მაშინ ენერგიის გამოსახულებაში გაცვლითი წევრი, რომელიც ბმის პირობებს ბმულ მდგომარეობას, გაჩნდება მხოლოდ ორ ატომს შორის, მესამე ატომისათვის კი შემოვა მხოლოდ კულონური წევრი, რომელიც ბმას არ იძლევა.

ეს გარემოება აშკარად ჩანს შემდეგი მოსაზრებითაც. H_2 მოლეკულის მდგრადი მდგომარეობა იქნება ელექტრონთა ანტიპარალელური სპინებისათვის, როცა წყალბადის მოლეკულს მიუახლოვებთ მესამე ატომს, მაშინ ცხადია, რომ მისი სპი-

ნი რომელიმე ერთ-ერთი ატომის პარალელური იქნება, რაც მოგვცემს განზიდვას და მესამე ატომს ამიტომ მოლეკულა აღარ მიიერთებს.

A და C გამოსახულებიდან აშკარად ჩანს, რომ ისინი მანძილის გაზრდით ექსპონენციალურად მცირდებიან, საიდანაც შეგვიძლია დავასკვნათ, რომ ჰომეოპოლარული ძალები ახლო მოქმედებისა ყოფილა. ამგვარად, ჰომეოპოლარული ძალები ხასიათდება შემდეგი თვისებებით: 1) გაცვლით, 2) ნაჯერობით და 3) ახლო მოქმედებით.

ბოლოს შევნიშნოთ, რომ, თუ ატომებს შორის არ არსებობს არც ჰომეოპოლარული და არც ჰეტეროპოლარული ძალები (მაგალითად, ორი ინერტული გაზის ატომების შემთხვევა). მაშინ მათ შორის მაინც არსებობს ძალიან მცირე მიზიდვის ძალები. სწორედ ამ ძალებით აიხსნება გაზების გადახვევა იდეალურისაგან დაბალ ტემპერატურაზე, რაც კარგად აიწერება ვან-დერ-ვაალსის ცნობილი განტოლებით. ამიტომაც, აღნიშნული მცირე მიზიდვის ძალებს ვან-დერ-ვაალსის ძალებსაც უწოდებენ.

ვან-დერ-ვაალსის ძალების ახსნა, კვანტური მექანიკის თანახმად, მოგვცა ლონდონმა, რომელმაც აჩვენა, რომ, მაგალითად, ჰელიუმის ატომების შემთხვევაში ვან-დერ-ვაალსის ძალები გამოწვეულია ამ ატომების ნორმალური მდგომარეობების შეშფოთებით. ლონდონმა დაამტკიცა, რომ ეს ძალები ატომგულებს შორის მანძილის $\frac{1}{R^6}$ ფუნქციის სახით მცირდებიან. მცირე მანძილებზე კი ადგილი აქვს ძლიერ განზიდვას; ამის გამო, ატომის გულებს შორის არსებული მანძილის საკმარისად დიდი მნიშვნელობებისათვის მიიღება მცირე სიღრმის პოტენციალური ორმო. ამ მიზიდვის ძალებს ლონდონმა დისპერსიული ძალები უწოდა.

მიზიდვის დისპერსიული ძალები მოქმედებს ნებისმიერ ორ მოლეკულას შორის. მაგრამ ეს მოქმედება ჰომეოპოლარულ და ჰეტეროპოლარულ ბმებთან შედარებით შეუმჩნეველია. ისინი მნიშვნელობას იძენენ მაშინ, როცა აღნიშნული ძალები ან სულ არა გვაქვს, ანდა მცირეა. ამას კი ადგილი აქვს მაშინ, როცა ატომებს შორის მანძილი დიდია. დისპერსიის ძალებით აიხსნება, მაგალითად, ის ფაქტი, რომ $\sum^3$ მდგომარეობაში წყალბადის ორი ატომი, რომელიც ჰომეოპოლარული ძალების გაელენით ახლო მანძილებზე საკმაო სიძლიერით განიზიდება, დიდ მანძილებზე მცირე მიზიდვას განიცდის.

§ 110. ორთო- და პარაწყალბადი

ჩვენ აქამდე მხედველობაში არ მიგვიღია წყალბადის მოლეკულის შემადგენელი ატომების გულები — პროტონები. გავარკვიოთ, რა გავლენას ახდენს პროტონების სპინები მოლეკულის მდგომარეობაზე. პროტონები აიწერება ფერმის სტატისტიკით, ამიტომ ისინი უნდა ხასიათდებოდნენ ანტისიმეტრიული ფუნქციით, ე. ი. მათი კოორდინატული ფუნქცია უნდა იყოს სიმეტრიული ან ანტისიმეტრიული, იმის მიხედვით, თუ როგორია პროტონების სრული სპინი. ჰელიუმის ატომის ანალოგიით წყალბადის მოლეკულას, რომლის ატომგულები აიწერება სიმეტრიული კოორდინატული ფუნქციით ($S=0$) უწოდებენ პარაწყალბადის მოლეკულას. ხოლო მოლეკულას, რომლის პროტონების კოორდინატული ფუნქცია ანტისიმეტრიულია ($S=1$) — ორთოწყალბადის მოლეკულას.

რადგან ორი ნახევარსპინიანი ნაწილაკის შემთხვევაში ოთხი შესაძლო მდგომარეობიდან სამი ეკუთვნის $S=1$, ხოლო ერთი $S=0$, ამიტომ ორთოწყალბადის სტატისტიკური წონა 3-ჯერ მეტია პარა მდგომარეობის წონაზე.

§ 116-ში აღვნიშნეთ, რომ პირველ მიახლოებაში ორატომიანი მოლეკულის ენერგია შედგება სამი წევრისაგან, ბრუნვითი, რხევითი და ატომების შინაგანი ენერგიისაგან. ამასთან, მთელი მოლეკულის ტალღური ფუნქცია პირველ მიახლოებაში იქნება ამ მოძრაობების შესაბამისი ტალღური ფუნქციებისა და მოლეკულის ელექტრონული მდგომარეობის ტალღური ფუნქციების ნამრავლი, ე. ი.

$$\Psi = \psi_e(r_1, r_2)\,\varphi_N(R)\,Y_{\nu\mu}(\theta, \varphi)\,\chi(s_1, s_2), \tag{119,1}$$

სადაც $\psi_e(r_1, r_2)$ მოლეკულის ელექტრონული მდგომარეობის ტალღური ფუნქციაა, $\varphi_N(R)$ აღწერს მოლეკულის რხევით მოძრაობას, $Y_{\nu\mu}(\theta, \varphi)$ — ბრუნვითს, $\chi(s_1, s_2)$ კი არის პროტონების სპინური ფუნქცია. მოლეკულის ძირითად მდგომარეობაში $\psi_e(r_1, r_2)$ სიმეტრიული ფუნქციაა, ამიტომ პროტონების გადასმის მიმართ Ψ ტალღური ფუნქციის სიმეტრიას განსაზღვრავს $\varphi_N(R)Y_{\nu\mu}(\theta, \varphi)\chi(s_1, s_2)$ ნამრავლი. რადგან ოსცილატორის ტალღური ფუნქცია $\varphi_N(R)$ დამოკიდებულია პროტონებს შორის გავლებული რადიუსვექტორის მხოლოდ სიდიდეზე R, ამიტომ $\varphi_N(R)$ სიმეტრიული იქნება პროტონების გადასმის მიმართ. მაშასადამე, პროტონების გადასმის მიმართ ტალღური ფუნქციის სიმეტრიას საბოლოოდ განსაზღვრავს $Y_{\nu\mu}(\theta, \varphi)$ და $\chi(s_1, s_2)$ სპინური ფუნქციის ნამრავლი. ამასთან, ჩვენ ვიცით, რომ პროტონების გადასმის დროს $\theta \to \pi - \theta$, $\varphi \to \pi + \varphi$, ე. ი. $Y_{\nu\mu}(\theta, \varphi)$ ფუნქციას წინ დაუჯდება $(-1)^{\nu}$ მამრავლი. როცა პროტონების სრული სპინი $s=0$, მაშინ $\chi(s_1, s_2)$ ანტისიმეტრიულია, ხოლო, როცა $S=1$, მაშინ $\chi(s_1, s_2)$ სიმეტრიული ფუნქციაა. ასე რომ, ძირითად მდგომარეობაში მყოფი მოლეკულის ტალღური ფუნქციის სიმეტრიას პროტონების გადასმის მიმართ განსაზღვრავს $(-1)^{\nu+s+1}$ მამრავლი. სრული ტალღური ფუნქცია Ψ ანტისიმეტრიული უნდა იყოს პროტონების გადასმის მიმართ, ამიტომ, როცა პროტონების სრული სპინი $S=0$, მაშინ დასაშვებია ν-ს მხოლოდ ლუწი მნიშვნელობანი $\nu=0, 2, 4,\ldots$ ხოლო, როცა პროტონების სრული სპინი $S=1$, მაშინ დასაშვებია როტაციული კვანტური რიცხვის მხოლოდ კენტი მნიშვნელობები $\nu=1, 3, 5,\ldots$

ამგვარად, პარაწყალბადისათვის დასაშვებია მხოლოდ ისეთი ბრუნვითი მდგომარეობები, რომლებიც ხასიათდებიან ლუწი როტაციული კვანტური რიცხვებით. ორთო წყალბადის მოლეკულისათვის კი შესაძლებელია მხოლოდ ისეთი ბრუნვითი მდგომარეობები, რომელთათვისაც როტაციული კვანტური რიცხვები კენტია. (70,6) ფორმულის თანახმად როტაციული ენერგიებისათვის ნება დართულია მხოლოდ შემდეგი მნიშვნელობები ($\nu=1, 3, 5\ldots$):

$$E_{\text{ორთო}} = \frac{\hbar^2}{J_0},\ \frac{6\hbar^2}{J_0},\ \frac{15\hbar^2}{J_0},\ldots \tag{119,2}$$

და ($\nu=0, 2, 4,\ldots$)

$$E_{\text{პარა}} = 0,\ \frac{3\hbar^2}{J_0},\ \frac{10\hbar^2}{J_0},\ldots \tag{119,3}$$

ცხადია, რომ წყალბადის მოლეკულისათვის ინერციის მომენტი უდრის

$$J_0 = \frac{MR_0^2}{2} = 0{,}467 \cdot 10^{-40}\ \text{გრ. სმ}^2. \tag{119,4}$$

პარაწყალბადის დონე ენერგეტულად უფრო დაბალია და იგი განსაზღვრავს ძირითად მდგომარეობას. სხვაობა პარა და ორთოწყალბადის ძირითად დონეებს შორის ტოლია

$$\Delta E=\frac{\hbar^2}{J_0}=0{,}013\,eV. \qquad (119{,}5)$$

რადგან ეს ენერგია ძალიან მცირეა, ამიტომ დაბალ ტემპერატურებზე ორთოწყალბადი ხდება არამდგრადი და გადადის პარაწყალბადში. ორთო და პარაწყალბადის განაწილება 3 : 1 ფარდობით გვხვდება მხოლოდ მაღალ ტემპერატურებზე, ე. ი. მაშინ, როდესაც ბრუნვაში ძირითად როლს ასრულებს დიდი როტაციული რიცხვები. მართალია, დაბალ ტემპერატურებზე შესაძლებელია ორთოწყალბადის გადასვლა პარაწყალბადში. მაგრამ ეს გადასვლა ხდება ძალიან მცირე ალბათობით. პროტონის სპინმა მიმართულება რომ შეიცვალოს (რაც ნიშნავს, სწორედ, ორთო-პარაში გადასვლას), საჭიროა სხვადასხვა სპინის მქონე პროტონების გაცვლითი დაჯახება. ეს ურთიერთქმედება პროტონების მცირე მაგნიტური მომენტების გამო იმდენად უმნიშვნელოა, რომ $20^\circ K$-ზე მყოფი ორთოწყალბადის პარა მდგომარეობაში შესამჩნევი რაოდენობით გადასვლისათვის საჭიროა დაახლოებით ერთი თვე. ამიტომ პრაქტიკულად ორთო და პარაწყალბადის მოლეკულები ისე იქცევიან, როგორც სრულიად დამოუკიდებელი ნაწილაკები. მათ აქვთ სხვადასხვა სითბოტევადობა, განსხვავებული მოლეკულარული სპექტრები და ა. შ.

მეტად საინტერესოა წყალბადის გაზის სითბოტევადობის საკითხის განხილვა. აღმოჩნდა, რომ ასეთი გაზის სითბოტევადობა ცვლილებას განიცდის დროის მიხედვით. ეს მოვლენა კვანტურმა მექანიკამ ახსნა თვისობრივად და რაოდენობრივადაც. დავუშვათ, წყალბადის გაზი იმყოფება დაბალ ტემპერატურაზე; დავამყაროთ ისეთი სითბური წონასწორობა, რომ ბრუნვითი მოძრაობა „გაიყინოს“, მაშინ $\nu=0$ და წყალბადის მოლეკულები იქნებიან პარაწყალბადის მდგომარეობაში. ვთქვათ, ამის შემდეგ მოვახდინეთ ასეთი გაზის გათბობა. სითბური მოძრაობების გამო ადგილი ექნება პროტონების ერთმანეთთან დაჯახებას, მაგრამ, როგორც აღვნიშნეთ, პროტონების სპინების მობრუნება ნაკლებად საალბათო იქნება და დაჯახებათა მიუხედავად გაზი ისევ პარაწყალბადის მდგომარეობაში დარჩება, ე. ი. ბრუნვაზე მოსული სითბოტევადობა გამოწვეული იქნება $\nu=0\to 2, 4, 6,\ldots$ გადასვლებით. მაგრამ თუ პარაწყალბადის გაზს დავაცდით რამდენიმე კვირას, პროტონების სპინები მოასწრებენ მობრუნებას და პარაწყალბადთან ერთად წარმოიქმნება ორთოწყალბადიც. მაშინ შესაძლებელი იქნება $\nu=1\to 3, 5, 7$ და ა. შ. გადასვლებიც. § 116-ში მიღებული ფორმულა $\Delta E=\frac{\hbar^2}{2J_0}[(\nu'+1/2)^2-(\nu+1/2)^2]$ კი გვიჩვენებს, რომ იმის მიხედვით, როტაციული კვანტური რიცხვი კენტია თუ ლუწი, ბრუნვითი ენერგეტული დონეების სხვაობა სხვადასხვაა. ამის გამო ორთო და პარაწყალბადის სითბოტევადობა ერთმანეთისაგან განსხვავებული იქნება. აქედან კი გამომდინარეობს, რომ იმ ნელ პროცესს, რომელიც მიმდინარეობს პარაწყალბადის ორთოწყალბადში გადასაყვანად, თან ახლავს სითბოტევადობის ცვლილება.

ბოლოს აღვნიშნოთ, რომ ორი ერთნაირი ატომისაგან შედგენილი მოლეკულის სპექტრების შესწავლა მეტად მნიშვნელოვანია ატომგულების სტატისტიკის დასადგენად. შემჩნეული იყო, რომ როტაციული სპექტრალური ხაზების ინტენსიობები თანამიმდევრობით ცვლილებას განიცდის, რაც იმაში გამოიხატება, რომ ამ ხაზებს აქვს, რიგ-რიგობით, ხან დიდი და ხან მცირე ინტენსიობა. აღმოჩნდა,

რომ, თუ მოლეკულის ატომგულის სპინი განისაზღვრება $S=\frac{2n+1}{2}$ $(n=0, 1, 2,\ldots)$ ფორმულით, მაშინ სპექტრში მეტი ინტენსივობა აქვს იმ როტაციულ ხაზებს, რომლებიც შეესაბამება კენტ როტაციულ კვანტურ რიცხვებს $n=1, 3, 5,\ldots$ ხოლო თუ გულის სპინი n-ის ტოლია, მაშინ სპექტრში ინტენსიურია ის ხაზები, რომლებიც შეესაბამება ლუწ როტაციულ კვანტურ რიცხვებს.

წყალბადის მოლეკულის შემთხვევაში ინტენსივობის ცვლა შეესაბამება პროტონის სპინის კენტ მნიშვნელობას. ამიტომ იგი ეკუთვნის ფერმი-დირაკის სტატისტიკას. თუ შევისწავლით ორი ერთნაირი ატომის მქონე მოლეკულის სპექტრებს, შეგვიძლია დავადგინოთ, შესაბამისი ატომის გული ფერმის ნაწილაკია თუ ბოზესი.

თავი XVI

გაფანტვის კვანტური თეორია

კვანტურ მექანიკას მნიშვნელოვანი გამოყენება აქვს გაფანტვის ამოცანებში, ამასთან, გაფანტვის თეორია გადამწყვეტ როლს ასრულებს ნაწილაკთა ურთიერთქმედების ხასიათისა და მთელი რიგი მნიშვნელოვანი ფიზიკური მახასიათებლების დადგენის საქმეში. გაფანტვის თანამედროვე თეორიამ მკაცრად ჩამოყალიბებული სახე მიიღო. იგი ეყრდნობა მძლავრ მათემატიკურ აპარატს, კარგადაა დამუშავებული გაფანტვის თეორიის პრინციპული საკითხები. ამ თავში ჩვენ დავკმაყოფილდებით გაფანტვის თეორიის მხოლოდ ძირითადი საკითხების გაღმოცემით. ამასთან, ჩვენ უმთავრესად შემოვისაზღვრებით დრეკადი დაჯახების განხილვით, ე. ი. ისეთი პროცესის შესწავლით, როცა დაცემული ნაწილაკის იმპულსის სიდიდე არ იცვლება ან, სხვანაირად რომ ვთქვათ, როცა არ ხდება ურთიერთმოქმედ ნაწილაკთა შინაგანი მდგომარეობების ცვლილება, ანდა ახალი ნაწილაკის წარმოქმნა.

ამ თავში შემოვისაზღვრებით ნაწილაკთა გაფანტვით ცენტრალური ველით, რამდენადაც, როგორც ირკვევა, ყველა, ასე თუ ისე, საინტერესო შემთხვევა ურთიერთქმედებისა, მთლიანად თუ არა ძირითადად მაინც, ცენტრალურ ხასიათს ატარებს.

§ 120. გაფანტვის ამოცანის დასმა კვანტურ მექანიკაში

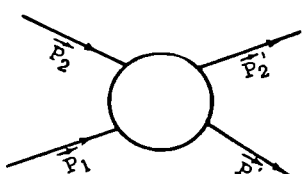
გაფანტვის ამოცანა კვანტური მექანიკის ერთ-ერთი მნიშვნელოვანი ამოცანაა. იგი მეტად დიდ გამოყენებას პოულობს ელემენტარული ნაწილაკების, ატომებისა, მოლეკულების და ატომგულების თვისებების შესწავლისას. ატომგულის ფიზიკაში განსაკუთრებული ღნიშვნელობა ენიჭება გაფანტვის ე. წ. შებრუნებულ ამოცანას, როცა გაფანტვის მონაცემების საშუალებით ხდება ნაწილაკთა ურთიერთქმედების პოტენციალური ენერგიის სახის აღდგენა.

კვანტურ მექანიკაში ნაწილაკს ტრაექტორია არ გააჩნია მაშასადამე, აზრი არა აქვს სამიზნე მანძილის ცნებასაც, ამიტომ გაფანტვის ამოცანის დასმაც იცვლება. სახელდობრ, კვანტურ მექანიკაში საჭიროა გამოითვალოს ალბათობა იმისა, რომ დაჯახების შედეგად ნაწილაკი გაიფანტება ამა თუ იმ კუთხეზე.

დაჯახების ამოცანაში საწყის მომენტში გვაქვს ორი ერთმანეთისაგან უსასრულო მანძილით დაშორებული, $\mathbf{p}_1$ და $\mathbf{p}_2$ იმპულსების მქონე ნაწილაკი, რომლებიც ერთმანეთს ეცემიან. ურთიერთქმედების შედეგად ნაწილაკები გაიფანტებიან და კვლავ უსასრულობაში მიდიან. საბოლოო მომენტში მათი იმპულსები შესაბამისად იქნება $\mathbf{p}_1'$ და $\mathbf{p}_2'$. (ნახ. 38 ა). ექსპერიმენტზე ხელსაყრელია დაჯახების პროცესის შესწავლა იმ პირობებში, როცა დაჯახებამდე ერთ-ერთი ნაწილაკი უძრავია, ხოლო მეორე მას ეცემა გარკვეული მიმართულებით. ამ შემთხვევაში დაცემულ ნაწილაკს უწოდებენ დამჯახებელს, ხოლო გაჩერებულს დასაჯახებელს, კუთხეს და-

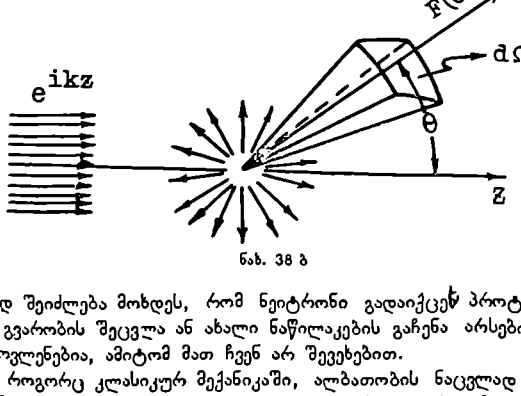
ცემული ნაწილაკის საწყის და საბოლოო იმპულსებს შორის გაფანტვის კუთხეს უწოდებენ და θ-თი აღნიშნავენ.

როცა ორ ნაწილაკს შორის ურთიერთქმედების პოტენციალური ენერგია ფუნქციაა მხოლოდ მათ შორის არსებული $\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$ მანძილისა, მაშინ ორი m_1 და m_2 მასების მქონე ნაწილაკის დაჯახების ამოცანა შეგვიძლია დავიყვანოთ ერთი $\mu = m_1 m_2/m_1 + m_2$ დაყვანილი მასის მქონე ნაწილაკის გაფანტვაზე $V(r)$ ძალთა ცენტრზე. პრაქტიკულად ორი ნაწილაკის დაჯახების განხორციელება შეუძლებელია, ამიტომ იხილავენ ამოცანას, როცა ძალთა ცენტრს ეცემა არა ერთი ნაწილაკი, არამედ გასაფანტ ნაწილაკთა ერთგვაროვანი ნაკადი (ნახ. 38 ბ).



ნახ. 38 ა

კვანტურ მექანიკაშიაც არჩევენ ორი სახის გაფანტვას: დრეკადსა და არადრეკადს. გაფანტვას ეწოდება დრეკადი, თუ დაჯახების შედეგად ნაწილაკთა იმპულსების მხოლოდ მიმართულება იცვლება სიდიდე კი უცვლელი რჩება, ე. ი. როცა გაფანტვისას ერთიდან მეორე ნაწილაკზე ენერგიის გადაცემა არ ხდება. კვანტურ მექანიკაში არადრეკადი გაფანტვის ქვეშ იგულისხმება არა მხოლოდ ის კერძო შემთხვევა, როცა ადგილი აქვს ენერგიის გადაცემას (ე. ი. როცა იცვლება იმპულსის როგორც სიდიდე ისე მიმართულება), არამედ ყველა ისიც, როდესაც ხდება ნაწილაკების გვაროვნების შეცვლა. ასე მაგალითად, პროტონის ნეიტრონზე დაჯახე-



ნახ. 38 ბ

ბის შედეგად შეიძლება მოხდეს, რომ ნეიტრონი გადაიქცეს პროტონად და სხვა. ნაწილაკთა გვაროვნების შეცვლა ან ახალი ნაწილაკების გაჩენა არსებითად რელატივისტური მოვლენებია, ამიტომ მათ ჩვენ არ შევეხებით.

ისევე როგორც კლასიკურ მექანიკაში, ალბათობის ნაცვლად ხელსაყრელია ე. წ. გაფანტვის დიფერენციალური ეფექტური განივკვეთის გამოთვლა.

დროის ერთეულში $d\Omega$ სხეულოვან კუთხეში გაფანტულ ნაწილაკთა რიცხვის შეფარდებას იმ ნაწილაკთა რიცხვთან, რომლებიც დროის ერთეულში ეცემიან ნაწილაკების სიჩქარის ნორმალურად მოთავსებულ ერთეულოვან ფართს, უწოდებენ გაფანტვის დიფერენციალურ ეფექტურ განივკვეთს და აღნიშნავენ $\sigma(\theta)\, d\Omega = \sigma(\theta)\, 2\pi \sin\theta\, d\theta$-თი, სადაც θ არის გაფანტვის კუთხე. ცხადია, რომ გაფანტვას

ახასიათებს ღერძული სიმეტრია ამიტომ განივკვეთი φ-კუთხეზე დამოკიდებული არ იქნება. განივკვეთს აქვს ფართის განზომილება. გაფანტვის დიფერენციალური ეფექტური განივკვეთის ფორმულას ექნება სახე

$$\sigma(\theta)\, d\Omega = \frac{dN(\theta)}{J_{\text{დაც.}}}, \qquad (120{,}1)$$

სადაც $dN(\theta)$ არის დროის ერთეულში $d\Omega$ სხეულოვან კუთხეში გაფანტულ ნაწილაკთა რიცხვი, $J_{\text{დაც.}}$ კი — დაცემულ ნაწილაკთა ნაკადი.

L და C-სისტემები. ისევე როგორც კლასიკურ მექანიკაში, გაფანტვის ამოცანის ამოხსნის მიზნით იყენებენ ორ ათვლის სისტემას. ერთია ის სისტემა, რომელშიაც გამფანტავი ნაწილაკი გაფანტვამდე უძრავია, მეორე კი — რომლის კოორდინატთა სათავე ემთხვევა გამფანტავი და გასაფანტი ნაწილაკის ინერციის ცენტრს. პირველს ლაბორატორიულ, ანდა მოკლედ „L"-სისტემას უწოდებენ, მეორეს კი — ინერციის ცენტრის ანდა „C"-სისტემას. ინერციის ცენტრის სისტემას აქვს ის უპირატესობა, რომ ამ სისტემაში ორი ნაწილაკის ამოცანა დაიყვანება ერთი ნაწილაკის ამოცანაზე. ამიტომ, თითქმის ყოველთვის, თეორიულ გამოთვლებს ატარებენ C-სისტემისათვის შედეგები კი გადაჰყავთ L-სისტემაში, რადგან ექსპერიმენტებთან შედარების აზრი მხოლოდ ამ სისტემაში აქვს. ამ ორ სისტემაში განსაზღვრულ გაფანტვის კუთხეებსა და ენერგიებს შორის კავშირი ისეთივეა, როგორიც კლასიკურ მექანიკაში, ამიტომ ამ კავშირის დამტკიცებას არ შევუდგებით; მოვიყვანთ მხოლოდ საბოლოო შედეგებს:[1]

$$\operatorname{tg}\theta_L = \frac{\sin\theta_c}{a+\cos\theta_c}, \quad (a=m_1/m_2) \qquad (120{,}2)$$

$$E_L = \frac{m_1+m_2}{m_2} E_c \qquad (120{,}3)$$

სადაც E_L და E_c ენერგიებია L და C-სისტემებში; m_1 დაცემული ნაწილაკის მასაა, m_2 კი — გამფანტავი ნაწილაკისა. როცა $m_1=m_2$, მაშინ $a=1$ და მიღებული ფორმულები საგრძნობლად მარტივდება; სახელდობრ,

$$\theta_L = \frac{\theta_c}{2}, \quad E_L = 2E_c. \qquad (120{,}4)$$

ვნახოთ, რა კავშირი არსებობს დიფერენციალურ განივკვეთებს შორის ლაბორატორიულ და ინერციის ცენტრის სისტემებში; ეფექტური განივკვეთის განმარტებიდან აშკარაა, რომ გაფანტულ ნაწილაკთა რიცხვი θ_L მიმართულებით მოთავსებული უსასრულოდ მცირე $d\Omega_L$ სხეულოვან კუთხეში, ტოლია იმ ნაწილაკთა რიცხვისა, რომლებიც გაიფანტებიან θ_c მიმართულებით მოთავსებულ $d\Omega_c$ უსასრულოდ მცირე სხეულოვან კუთხეში, ე. ი.

$$\sigma_L(\theta_L)\, 2\pi \sin\theta_L\, d\theta_L = \sigma_c(\theta_c)\, 2\pi \sin\theta_c\, d\theta_c \qquad (120{,}5)$$

თუ გამოვიყენებთ (120,2) ფორმულას, მივიღებთ

$$\sigma_L(\theta_L) = \frac{(1+a^2+2a\cos\theta_c)^{3/2}}{|1+a\cos\theta_c|}\sigma_c(\theta_c). \qquad (120{,}6)$$

---

[1] კინემატიკური ფორმულები, რომლებიც გაფანტვის თეორიაში გამოიყენება გამომდინარეობენ მხოლოდ შენახვის კანონებიდან, ამიტომ ცხადია ისინი ძალაში დარჩებიან კვანტურ მექანიკაშიაც. იხ. ე. მამასახლისოვი, გ. ჭილაშვილი, თეორიული ფიზიკა, ნაწ. I, 1967, გვ. 88.

ხოლო რაც შეეხება ინტეგრალურ განივკვეთს. მას ორივე სისტემაში ერთი და იგივე სახე ექნება, რადგან გაფანტვის სრული რიცხვი დამოკიდებული არ არის პროცესის აღწერის მეთოდზე. როცა $m_1 = m_2$, მაშინ (120,6) ფორმულა მიიღებს მარტივ სახეს

$$\sigma_L(\theta_L) = 4\cos\frac{\theta_c}{2}\,\sigma_c(\theta_c), \tag{120,7}$$

ხოლო, როცა მეორე ნაწილაკი უძრავად არის დამაგრებული (ან $m_2 \gg m_1$), მაშინ $a \simeq 0$ და $\sigma_L(\theta_L) = \sigma_c(\theta_c)$, ე. ი. ამ შემთხვევაში C და L სისტემები ეკვივალენტურია. ეს გასაგებია, რადგან, როცა $m_2 \gg m_1$, მაშინ ლაბორატორიული და ინერციის ცენტრის სისტემების სათავეები ერთმანეთს ემთხვევა. შემდგომში, სადაც სპეციალურად არ იქნება აღნიშნული, ყველგან ვიგულისხმებთ ინერციის ცენტრის სისტემას, ამიტომ ინერციის ცენტრის აღმნიშვნელ ინდექსებს აღარ მივუთითებთ.

გაფანტვის ამპლიტუდა. როგორ დავაკავშიროთ გაფანტვის განივკვეთი შრედინგერის განტოლების ამონახსნებთან? ამისათვის საჭირო იქნება გაფანტვის ამოცანის შესაბამისი ტალღური ფუნქციებით გამოვთვალოთ (120,1) ფორმულაში შემავალი $dN(\theta)$ და $J_{\text{დაც.}}$ სიდიდეები.

დავუშვათ ვიხილავთ ორი ნაწილაკის დაჯახებას, როცა ამ ნაწილაკებს შორის ურთიერთქმედების პოტენციალურ ენერგიას აქვს ცენტრალური ხასიათი. გაფანტვის ამოცანის შინაარსიდან ნათელია, რომ საჭიროა მოცემული პოტენციალური ენერგიის დროს, ვიპოვოთ ინფინიტური მოძრაობის შესაბამისი ამონახსნები, ე. ი. ამონახსნები, რომლებიც შეესაბამებიან უწყვეტ სპექტრს. სიმძიმის ცენტრის გამოყოფის შემდეგ, ნაწილაკთა ფარდობითი მოძრაობის შესაბამისი შრედინგერის განტოლებას ექნება სახე

$$(\Delta + k^2)\,\psi(\mathbf{r}) = \frac{2\mu}{\hbar^2}\,V(r)\,\psi(\mathbf{r}), \tag{120,8}$$

სადაც $k^2 = 2\mu E/\hbar^2$, ხოლო $\mu = m_1 m_2/(m_1 + m_2)$ დაყვანილი მასაა. საჭიროა ვიპოვოთ ამ განტოლების ამოხსნა გაფანტვის ამოცანისათვის დამახასიათებელ სასაზღვრო პირობით.

როცა დაჯახებამდე ნაწილაკები ერთმანეთზე დიდი მანძილებით არიან დაშორებული, მაშინ $V(r) = 0$ და (120,8) განტოლების თანახმად ნაწილაკთა ფარდობითი მოძრაობა აიწერება ბრტყელი ტალღით

$$\Phi(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} \tag{120,9}$$

ბრტყელი ტალღის ნორმირება ისეა არჩეული, რომ $\mathbf{J}$ ნაკადი ფარდობითი მოძრაობის სიჩქარის ტოლი იყოს: $\mathbf{J} = \frac{\mathbf{k}\hbar}{\mu}\,|\Phi_{\mathbf{k}}|^2 = \mathbf{v}$. დაჯახების შემდეგ, როცა ნაწილაკები ერთმანეთზე კვლავ დიდი მანძილებით არიან დაცილებული, ნაწილაკთა ფარდობითი მოძრაობა აიწერება განშლადი სფერული ტალღით

$$\varphi(r) = F(\mathbf{k}, \mathbf{k}')\,\frac{e^{ik'r}}{r}, \tag{120,10}$$

სადაც $F(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ დამოკიდებულია გაფანტვის θ კუთხეზე და ენერგიაზე. $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$ ფარდობითი იმპულსის საწყისი მნიშვნელობაა, $\mathbf{p}' = \hbar\mathbf{k}'$ კი — საბოლოო მდგომარეობის ფარდობითი იმპულსია. რადგან გაფანტვას აქსიალური სიმეტრია ახასიათებს, ამიტომ $F(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ ფუნქცია φ-კუთხეზე დამოკიდებული არ იქნება.

ამგვარად, შრედინგერის (120,8) განტოლების ამონახსნს დიდ მანძილებზე სჭირია ჰქონდეს შემდეგი ასიმპტოტური სახე:

$$\psi(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{kr}} + F(\mathbf{k}, \mathbf{k}')\frac{e^{ikr}}{r}, \quad (r \to \infty) \tag{120,11}$$

ე. ი. უსასრულობაში გაფანტვის ამოცანის ტალღური ფუნქცია უნდა წარმოადგენდეს ბრტყელი ტალღისა და განშლადი სფერული ტალღის ჯამს. $F(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ ფუნქციას გაფანტვის ამპლიტუდას უწოდებენ.

ახლა უკვე ადვილია $dN(0)$ და $J_{დაც.}$ სიდიდეების გამოთვლა. ამისათვის გამოვიყენოთ დენის ვექტორის ფორმულა

$$\mathbf{J} = \frac{i\hbar}{2\mu}(\psi\nabla\psi^* - \psi^*\nabla\psi). \tag{120,12}$$

როცა გვჭირდება დაცემულ ნაწილაკთა ნაკადის გამოთვლა საჭიროა გამოვიყენოთ თავისუფალი მოძრაობის შესაბამისი (120,9) გამოსახულება. დაცემული ბრტყელი ტალღისათვის (120,12) იღებს სახეს

$$J_{დაც.} = \frac{k\hbar}{\mu}|\Phi_k|^2 = v \tag{120,13}$$

სადაც v ფარდობითი მოძრაობის სიჩქარეა. რაც შეეხება $dN(0)$-ს აშკარაა, რომ $dN(0) = J_{გაფ.}\,dS$, სადაც dS ფართის ელემენტია, ხოლო $J_{გაფ.}$ — გაფანტულ ნაწილაკთა ნაკადი. იგი განისაზღვრება ისევ (120,12) ფორმულით, ოღონდ ψ-ს ქვეშ უნდა ვიგულისხმოთ გაფანტულ ნაწილაკთა შესაბამისი (120,10) განშლადი ტალღა. ამ შემთხვევაშიაც

$$J_{გაფ.} = \frac{k'\hbar}{\mu}|\varphi|^2 = \frac{v'}{r^2}|F(\mathbf{k}, \mathbf{k}')|^2, \tag{120,14}$$

სადაც v' ნაწილაკთა ფარდობითი სიჩქარეა გაფანტვის შემდეგ. ამგვარად,

$$dN(0) = J_{გაფ.}\,dS = v'|F(\mathbf{k}, \mathbf{k}')|^2\,d\Omega, \tag{120,14'}$$

სადაც $d\Omega = dS/r^2$ სხეულოვანი კუთხეა. (120,1)-დან გამომდინარე დიფერენციალური განივკვეთისათვის დავწერთ

$$\sigma(0)\,d\Omega = \frac{v'}{v}|F(\mathbf{k}, \mathbf{k}')|^2\,d\Omega. \tag{120,15}$$

ეს ფორმულა გამოხატავს $d\Omega$ სხეულოვან კუთხეში ნაწილაკთა გაფანტვის ეფექტურ დიფერენციალურ განივკვეთს. დრეკადი გაფანტვის შემთხვევაში $v = v'$ და დიფერენციალური განივკვეთისათვის გვექნება

$$\sigma(0)\,d\Omega = |F(\mathbf{k}, \mathbf{k}')|^2\,d\Omega. \tag{120,16}$$

დრეკადი გაფანტვის ინტეგრალური განივკვეთის მისაღებად საჭიროა (120,16)-ის ინტეგრაცია θ-თი $(0, \pi)$ შუალედში, ე. ი.

$$\sigma = 2\pi\int_0^\pi |F(\mathbf{k}, \mathbf{k}')|^2 \sin\theta\,d\theta. \tag{120,17}$$

ცხადია რომ ინტეგრალური განივკვეთი დამოკიდებული იქნება მხოლოდ ენერგიაზე.

როგორც ვხედავთ, განივკვეთი განისაზღვრება გაფანტვის ამპლიტუდის სა. შუალებით. ამ უკანასკნელის მოსაძებნად კი საჭიროა ვიპოვოთ შრედინგერის განტოლების ამოხსნა, რომელსაც უსასრულობაში ექნება (120,11) ასიმპტოტური სახე. განშლადი სფერული ტალღის კოეფიციენტი იქნება სწორედ გაფანტვის ამპლიტუდა.

ბოლოს შევნიშნოთ, რომ ნებისმიერი კვანტურ მექანიკური პროცესის ეფექტური დიფერენციალური განივკვეთი განისაზღვრება ფორმულით

$$d\sigma = \frac{dw}{J_{\text{დაც.}}}, \tag{120,18}$$

სადაც dw წარმოადგენს სამიზნე ნივთიერების ერთ ნაწილაკზე მოსული პროცესის ალბათობას ერთ სეკუნდში, ხოლო $J_{\text{დაც.}}$ დაცემულ ნაწილაკთა ნაკადია.

§ 121. გაფანტვის ამპლიტუდა. გაფანტვის ფაზა

როგორც წინა პარაგრაფში დავინახეთ, გაფანტვის დიფერენციალური განივკვეთის განსაზღვრა ეკვივალენტურია ერთი $F(E, \cos\theta)$ ფუნქციის მოძებნისა. ამ ფუნქციის საპოვნელად კონკრეტული სახის ურთიერთქმედებისათვის, საჭიროა სათანადო შრედინგერის განტოლების ამოხსნა (120,11) სასაზღვრო პირობით. ამოხსნის ასიმპტოტურ გამოსახულებაში, დიდი r-ებისათვის, განშლადი ტალღის კოეფიციენტი იქნება სწორედ გაფანტვის ამპლიტუდა.

იმის გამო, რომ ცენტრალურ ველში ინახება იმპულსის მომენტი, $F(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$-ის ნაცვლად ხელსაყრელია პარციალური ამპლიტუდის შემოღება, ე. ი. ამპლიტუდისა, რომელიც განსაზღვრულ მომენტის მნიშვნელობას შეესაბამება. ამ მიზნით $F(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ გავშალოთ სფერულ ფუნქციებად

$$F(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = 4\pi \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^{+l} F_l(k)\, Y_{lm}(\bar{k})\, Y^*_{lm}(\bar{k}'), \tag{121,1}$$

სადაც $\bar{k} = \mathbf{k}/k$ და $\bar{k}' = \mathbf{k}'/k$ ორტებია $\mathbf{k}$ და $\mathbf{k}'$ ვექტორების მიმართულებით. $F_l(k)$-ს ეწოდება პარციალური ამპლიტუდა. იმის გამო, რომ გაფანტვას აქვს ღერძული სიმეტრია $F_l(k)$ ამპლიტუდა დამოკიდებული არ იქნება m კვანტურ რიცხვზე. თე გავითვალისწინებთ ფორმულას

$$P_l(\cos\theta) = \frac{4\pi}{2l+1} \sum_{m=-l}^{+l} Y_{lm}(\bar{k})\, Y^*_{lm}(\bar{k}') \tag{121,2}$$

სადაც θ კუთხეა $\mathbf{k}$ და $\mathbf{k}'$ ვექტორებს შორის, (121,1) ასეც შეგვიძლია გადავწეროთ:

$$F(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \sum_{l=0}^{\infty} F_l(k)\,(2l+1)\, P_l(\cos\theta). \tag{121,3}$$

გავიხსენოთ ბრტყელი ტალღის გაშლის (55,9) ფორმულა

$$e^{i\mathbf{kr}} = 4\pi \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^{+l} i^l\, j_l(kr)\, Y_{lm}(\bar{k})\, Y^*_{lm}(\bar{r}); \tag{121,4}$$

ეიპოვოთ ამ გაშლის ასიმპტოტური გამოსახულება დიდი r-ებისათვის. ამისათვის გავითვალისწინოთ, რომ ბესელის $j_l(kr)$ სფერული ფუნქციის ასიმპტოტიკას დიდი r ებისათვის აქვს სახე

$$j_l(kr) = \frac{\sin\left(kr - \frac{l\pi}{2}\right)}{kr}. \quad (kr \gg l). \tag{121,5}$$

ასე რომ, (121,4) ტალღის ასიმპტოტური გამოსახულებისათვის გვექნება

$$e^{ikr} = 4\pi \sum_l \sum_m i^l \left\{ \frac{e^{i\left(kr - \frac{l\pi}{2}\right)}}{2ikr} - \frac{e^{-i\left(kr - \frac{l\pi}{2}\right)}}{2ikr} \right\} Y_{lm}(\bar{k})\, Y^*_{lm}(\bar{r}). \tag{121,6}$$

როცა ნაწილაკებს შორის ურთიერთქმედება არ არის, მაშინ უსასრულობაში, განშლადი და კრებადი ტალღების ამპლიტუდები სწორედ ამ გამოსახულებით იქნება განსაზღვრული; ხოლო, როცა ნაწილაკები ურთიერთქმედებენ, მაშინ მათი შესაბამისი გაფანტვის ტალღური $\psi(r)$ ფუნქციის ასიმპტოტურ გამოსახულებაში განშლად ტალღასთან დაგვიჯდება განსხვავებული ამპლიტუდა. სწორედ ეს, რითაც $\psi(r)$ ამონახსნის ასიმპტოტურ გამოსახულებაში განშლადი ტალღის ამპლიტუდა განსხვავდება (121,6)-ში შემავალი განშლადი სფერული ტალღის ამპლიტუდისაგან, განსაზღვრავს გაფანტვის ამპლიტუდას.

გაფანტვის ამოცანის ამონახსნიც გაეშალოთ სფერულ ფუნქციებად:

$$\psi_k(\mathbf{r}) = 4\pi \sum_{l=1}^{\infty} \sum_{m=-l}^{+l} i^l \frac{\chi_l(kr)}{kr}\, Y_{lm}(\bar{k})\, Y^*_{lm}(\bar{r}); \tag{121,7}$$

მუდმივები ამ გაშლაში შემოვიღეთ ხელსაყრელობის მიზნით.

შევიტანოთ (121,7), (121,6) და (121,1) გამოსახულებები (120,11) ასიმპტოტურ ფორმულაში და გავითვალისწინოთ, რომ საბოლოო იმპულსის მიმართულება ემთხვევა $\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$ ვექტორის მიმართულებას, ე. ი. $\bar{k}' = \bar{r}$. მიღებული შედეგი გადავამრავლოთ $Y^*_{lm}(\bar{k})\, Y_{lm}(\bar{r})$-ზე და ჩავატაროთ ინტეგრაცია კუთხეებით. შედეგად გვექნება

$$\frac{\chi_l(kr)}{kr} = [1 + 2ikF_l(k)] \frac{e^{i\left(kr - \frac{l\pi}{2}\right)}}{2ikr} - \frac{e^{-i\left(kr - \frac{l\pi}{2}\right)}}{2ikr}; \quad r \to \infty \tag{121,8}$$

როგორც ვხედავთ, ბრტყელი ტალღისაგან განსხვავებით, (121,8) გაფანტვის ამოცანის ტალღური ფუნქციის ასიმპტოტურ გამოსახულებაში, განშლად სფერულ ტალღას გაუჩნდა მამრავლი

$$S_l(k) = 1 + 2ik\, F_l(k); \tag{121,9}$$

მაშასადამე, (121,8) რადიალური ტალღური ფუნქცია მიიღებს სახეს

$$\frac{\chi_l(kr)}{kr} = \frac{i}{2kr} \left\{ e^{-i\left(kr - \frac{l\pi}{2}\right)} - S_l(k)\, e^{i\left(kr - \frac{l\pi}{2}\right)} \right\}. \tag{121,10}$$

დრეკადი გაფანტვისათვის $S_l(k)$ სიდიდეს შემდეგნაირად წარმოადგენენ:

$$S_l(k) = e^{2i\delta_l(k)}. \tag{121,11}$$

$S_l(k)$ შეგვიძლია განვიხილოთ როგორც დიაგონალური უნიტარული მატრიცა. მას უწოდებენ S-მატრიცას ცენტრალურ ველში გაფანტვისათვის. $\delta_l(k)$ სიდიდეს ეწო-

დება გაფანტვის ფაზა. დრეკადი გაფანტვისათვის ფაზა ნამდვილი სიდიდეა. რადგან ექსპონენტი პერიოდული ფუნქციაა, ამიტომ გაფანტვის ფაზა ცალსახად არ იქნება განსაზღვრული. თუ მოვითხოვთ, რომ $V(r) \to 0$-სათვის $S_l(k)$ უდრიდეს ერთს, მაშინ ფაზის მნიშვნელობა შეგვიძლია ავარჩიოთ $(0, \pi)$ ინტერვალში.

რადგან (121,9) ფორმულის მიხედვით

$$F_l(k) = \frac{S_l(k) - 1}{2ik} = \frac{e^{2i\delta_l} - 1}{2ik}, \qquad (121,12)$$

ამიტომ (121,1) ამპლიტუდა შეგვიძლია ასეც გადავწეროთ:

$$F(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = 4\pi \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^{+l} \frac{S_l(k) - 1}{2ik} Y_{lm}(\bar{k}) Y^*_{lm}(\bar{k}') \qquad (121,13)$$

ან, (121,2) ფორმულის გათვალისწინებით, ამპლიტუდას შეიძლება მიეცეთ შემდეგი ფორმაც:

$$F(\vartheta) = \frac{1}{2ik} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1)(e^{2i\delta_l} - 1) P_l(\cos\vartheta). \qquad (121,14)$$

როგორც ვხედავთ, დრეკადი გაფანტვის ამპლიტუდა განისაზღვრება გაფანტვის δ_l პარციალური ფაზების საშუალებით[1].

შევნიშნოთ, რომ (121,10) ასიმპტოტური ფუნქცია შეგვიძლია შემდეგი სახითაც გადავწეროთ:

$$\chi_l(kr) = \sin\left(kr - \frac{l\pi}{2}\right) + \frac{S_l(k) - 1}{2i} e^{i\left(kr - \frac{l\pi}{2}\right)}. \quad (r \to \infty) \qquad (121,15)$$

ან, რაც იგივეა, დრეკადი გაფანტვის შემთხვევაში

$$\chi_l(kr) = e^{i\delta_l} \sin\left(kr - \frac{l\pi}{2} + \delta_l\right); \quad (r \to \infty). \qquad (121,16)$$

როცა $\delta_l = 0$, მაშინ ეს ფუნქცია ემთხვევა თავისუფალი მოძრაობის $kr j_l(kr)$ ფუნქციის ასიმპტოტურ გამოსახულებას. δ_l წარმოადგენს სწორედ ურთიერთქმედების შედეგად გამოწვეული თავისუფალი მოძრაობის შესაბამისი $\left(kr - \frac{l\pi}{2}\right)$ ფაზის წანაცვლებას.

ზოგჯერ, ნაცვლად (121,10) ასიმპტოტური ფორმისა, ხელსაყრელია შემდეგი ასიმპტოტური გამოსახულების განხილვა:

$$\chi_l(kr) = \sin\left(kr - \frac{l\pi}{2}\right) + \operatorname{tg}\delta_l \cos\left(kr - \frac{l\pi}{2}\right). \quad r \to \infty \qquad (121,17)$$

ადვილი დასანახია, რომ, ეს უკანასკნელი ეკვივალენტურია ფუნქციისა

$$\chi_l(kr) = \frac{1}{\cos\delta_l} \sin\left(kr - \frac{l\pi}{2} + \delta_l\right). \quad (r \to \infty) \qquad (121,18)$$

ცხადია, სხვადასხვა სასაზღვრო პირობა ერთსა და იმავე შედეგებს მოგვცემს შევნიშნოთ, რომ (121,10) პირობისაგან განსხვავებით (121,18) სასაზღვრო პირობა

---

[1] ამ ამპლიტუდის ეს ფორმულა მიღებული იყო გ. ფაქსენისა და ი. პოლტსმარკის მიერ იხ. Zeits. f. Phys. 45, 307, (1927).

ნამდვილია, ამიტომ მისი $e^{-i\omega t}$-ზე გამრავლებით მივიღებთ ტალღას, რომლის კვანძები სივრცეში უძრავად არიან განლაგებული, რაც ნიშნავს, რომ (121,18) სასაზღვრო პირობა შეესაბამება მდგარ ტალღას.

(121,12) ფორმულიდან ჩანს, რომ პარციალური $F_l(k)$ ამპლიტუდა გაფანტვის ფაზასთან შემდეგნაირად არის დაკავშირებული:

$$F_l(k)=\frac{1}{k}\,e^{i\delta_l(k)}\sin\delta_l(k)=\frac{1}{k\operatorname{ctg}\delta_l-ik}. \tag{121,19}$$

ახლა ვიპოვოთ ინტეგრალური განივკვეთი. როგორც ვიცით, ინტეგრალური განივკვეთი განისაზღვრება ფორმულით

$$\sigma(E)=2\pi\int_0^{\pi}|F(\theta)|^2\sin\theta\,d\theta \tag{121,20}$$

სადაც, (121,13) და (121,2) ფორმულების თანახმად,

$$F(\theta)=\frac{1}{2ik}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\,[S_l(k)-1]\,P_l(\cos\theta). \tag{121,21}$$

ეს გამოსახულება შევიტანოთ (121,20) ფორმულაში და გავითვალისწინოთ ლეჟანდრის პოლინომების ორთო-ნორმირების პირობა

$$\int_0^{\pi}P_l(\cos\theta)\,P_{l'}(\cos\theta)\sin\theta\,d\theta=\frac{2}{2l+1}\delta_{ll'}. \tag{121,22}$$

შედეგად გვექნება

$$\sigma(E)=\frac{\pi}{k^2}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\,|S_l(E)-1|^2. \tag{121,23}$$

ან, თუ გავიხსენებთ S_l-მატრიცის (121,11) გამოხატულებას, მივიღებთ ინტეგრალური განივკვეთის ფორმულას, განსაზღვრულს ფაზის საშუალებით

$$\sigma(E)=\frac{4\pi}{k^2}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\sin^2\delta_l, \tag{121,24}$$

როგორც ვხედავთ, გაფანტვის ინტეგრალურ განივკვეთს აქვს მაქსიმალური მნიშვნელობა, როცა $\sin^2\delta_l=1$; თუ $\delta_l=0$, მაშინ. როგორც მოსალოდნელი იყო, განივკვეთი ისევე, როგორც ამპლიტუდა ნულის ტოლია.

არადრეკადი გაფანტვის განივკვეთიც შეგვიძლია $S_l(k)$ სიდიდეს დავუკავშიროთ. მართლაც, (121,10) ფორმულის თანახმად, ყოველ პარციალურ ტალღაში ადგილი აქვს განშლადი ტალღის ინტენსიობის $|S_l(k)|^2$-ჯერ შემცირებას კრებადი ტალღის ინტენსიობასთან შედარებით. ინტენსიობის ეს შემცირება მთლიანად მიეკუთვნება არადრეკად გაფანტვას. ამიტომ არადრეკადი გაფანტვის სრული განივკვეთისათვის გვექნება

$$\tilde{\sigma}_c(E)=\pi\lambda^2\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\,(1-|S_l(E)|^2). \tag{121,25}$$

რადგან $\sigma_c(E)\geqslant 0$, ამიტომ $|S_l|^2\leqslant 1$, სიდიდეს

$$\xi_l(E)=1-|S_l(E)|^2 \tag{121,26}$$

ეწოდება მიწებების კოეფიციენტი. როგორც (121,23), ისე (121,25) ფორმულაში ჯამის თითოეული წევრი შეგვიძლია განვიხილოთ, როგორც განივკვეთები ისეთი ნაწილაკების გაფანტვისა, რომლებიც გამფანტავ ცენტრს ეცემა $\hbar\sqrt{l(l+1)}$ მომენტით:

$$\sigma_{sl}=\pi\lambda^2(2l+1)\,|\,1-S_l(E)\,|^2, \tag{121,27}$$

$$\sigma_{cl}=\pi\lambda^2(2l+1)\,(1-|\,S_l(E)\,|^2). \tag{121,28}$$

S_l სიდიდის ზღვრული მნიშვნელობებისათვის განივკვეთები უდრიან

$$|\,S_l\,|^2=1,\quad 0\leqslant\sigma_{sl}\leqslant 4\pi\lambda^2(2l+1),\quad \sigma_{cl}=0.$$

$$S_l=1,\quad \sigma_{sl}=\sigma_{cl}=0, \tag{121,29}$$

$$S_l=0,\quad \sigma_{sl}=\sigma_{cl}=\pi\lambda^2(2l+1).$$

ამ ფორმულებიდან ჩანს, რომ არადრეკად გაფანტვას ყოველთვის თან ახლავს დრეკადი გაფანტვაც.

როცა არადრეკადი გაფანტვა არა გვაქვს, მაშინ როგორც აღვნიშნეთ $S_l=e^{2i\delta_l}$, სადაც δ_l ნამდვილი სიდიდეა. როცა გაფანტვა არადრეკადია მაშინ S_l კვლავ შეიძლება $e^{2i\eta_l}$ სახით წარმოვიდგინოთ. ოღონდ η_l ახლა უკვე კომპლექსური სიდიდე იქნება $\eta_l=\eta_l'+i\eta_l''$.

ამგვარად, დრეკადი გაფანტვის, როგორც დიფერენციალური, ისე ინტეგრალური განივკვეთი განიმარტება გაფანტვის ფაზის საშუალებით. გაფანტვის δ_l ფაზა არის ენერგიის ფუნქცია და დამოკიდებულია ნაწილაკთა შორის არსებულ ურთიერთქმედების პოტენციალურ ენერგიაზე. ფაზის მოძებნის ამოცანა წარმოადგენს რთულ ამოცანას. იგი უნდა მოიძებნოს შრედინგერის რადიალური განტოლების ისეთი ამონახსნების საშუალებით, რომლებიც უწყვეტია მთელს სივრცეში, აქვთ უწყვეტი პირველი რიგის წარმოებული და უსასრულობაში აკმაყოფილებენ გაფანტვის ამოცანის სასაზღვრო პირობას, ე. ი. $r\to\infty$-თვის აქვთ (121,10) სახე.

ნაწილაკთა გაფანტვა აბსოლუტურად შეუღწევად სფეროზე. მარტივი მაგალითის სახით განვიხილოთ ნაწილაკთა გაფანტვა აბსოლუტურად შეუღწევად პოტენციალურ სფეროზე:

$$V(r)=0,\quad \text{როცა } r>R_0,$$

$$V(r)=\infty,\quad \text{როცა } r\leqslant R_0, \tag{121,30}$$

სადაც R_0 შეუღწევადი სფეროს რადიუსია. კლასიკური მექანიკა ასეთ სფეროზე გაფანტვის განივკვეთისათვის იძლევა $\sigma=\pi R_0^2$ მნიშვნელობას, რომელიც სფეროს გეომეტრიული განივკვეთის ფართის ტოლია.

კვანტურმექანიკური მეთოდით ამოცანის ამოსახსნელად განვიხილოთ $l=0$ შემთხვევა. შრედინგერის განტოლებას ექნება სახე

$$\frac{d^2\chi}{dr^2}+k^2\chi=0,$$

$$R=\frac{\chi}{r},\quad k=\frac{\sqrt{2\mu E}}{\hbar}. \tag{121,31}$$

საჭიროა ვიპოვოთ ამ განტოლების ისეთი ამონახსნი, რომელსაც უსასრულობაში ექნება (121,16) ასიმპტოტური სახე და რომელიც ნული გახდება $r=R_0$ ზედაპირზე. ასეთი ამონახსნი იქნება

$$R(r)=c\,\frac{\sin(kr+\delta_0)}{kr}, \tag{121,32}$$

$$\delta_0 = -kR_0. \tag{121,33}$$

თანახმად (121,24) ფორმულისა, ინტეგრალური განივკვეთისათვის გვექნება

$$\sigma = \frac{4\pi}{k^2}\sin^2 kR_0. \tag{121,34}$$

ნელი ნაწილაკების შემთხვევაში, ე. ი. როცა $kR_0 \ll 1$, მივიღებთ

$$\sigma = 4\pi R_0^2, \tag{121,35}$$

ე. ი. ამ შემთხვევაში ინტეგრალური განივკვეთის მნიშვნელობა კლასიკურზე ოთხჯერ მეტია. საინტერესოა აღინიშნოს, რომ დიდი ენერგიების დროსაც კი, როცა $\lambda \ll R_0$, განივკვეთი კი არ მიისწრაფვის πR_0^2 კლასიკური მნიშვნელობისაკენ, არამედ მასზე ორჯერ მეტია. ამის მიზეზი არის ის, რომ ალგილი აქვს დამატებით დიფრაქციულ გაფანტვას, რომლის განივკვეთი, როცა $\lambda \ll R_0$, ტოლია πR_0^2[1].

§ 122. იგივურ ნაწილაკთა გაფანტვა

როგორც ვიცით, კვანტური მექანიკის იგივურობის პრინციპი მოითხოვს სრული ტალღური ფუნქციის სიმეტრიულობას ან ანტისიმეტრიულობას, იმის მიხედვით, თუ როგორია ნაწილაკის სპინი. ამიტომ იგივურ ნაწილაკთა ერთმანეთზე გაფანტვის დროს სრული ტალღური ფუნქცია უნდა გავხადოთ სიმეტრიული ან ანტისიმეტრიული ნაწილაკთა გადასმის მიმართ. ამასთან, ცხადია ნაწილაკთა გადასმა ეკვივალენტურია მათი შემაერთებელი რადიუს-ვექტორის ნიშნის ცვლილებისა $\mathbf{r} \to -\mathbf{r}$. C-სისტემაში ეს ნიშნავს, რომ ნაწილაკთა გადასმისას r-ის სიდიდე არ იცვლება $r \to r$, ხოლო $\theta \to \pi - \theta$. ამის გამო, გაფანტვის ტალღური ფუნქციის ასიმპტოტური გამოხატულება შემდეგნაირად გადაიწერება:

$$\psi = (e^{ikr} \pm e^{-ikr}) + [F(\theta) \pm F(\pi - \theta)]\frac{e^{ikr}}{r}. \tag{122,1}$$

ამასთან, ზედა ნიშანი აიღება სიმეტრიული კოორდინატული მდგომარეობისათვის, ქვედა კი — ანტისიმეტრიულისათვის. როცა ვიხილავთ ნახევარსპინიანი ნაწილაკების გაფანტვას, მაშინ სიმეტრიული კოორდინატული ფუნქცია უნდა ავიღოთ იმ მდგომარეობაში, როცა სრული სპინი $S = 0$ (სინგლეტური მდგომარეობა), ანტისიმეტრიული კოორდინატული ფუნქცია კი აიღება $S = 1$ მდგომარეობაში (ტრიპლეტური მდგომარეობა).

ნაწილაკთა იგივურობის ძალით ჩვენ არ შეგვიძლია იმის დადგენა, თუ რომელი ნაწილაკია გამფანტავი და რომელი გასაფანტი. C-სისტემაში, ერთმანეთს ეცემა ერთმანეთის საწინააღმდეგოდ მიმართული ბრტყელი ტალღები, განწლადი სფერული ტალღა კი ითვალისწინებს ორივე ნაწილაკის გაფანტვას.

რადგან დაცემულ ნაწილაკთა ნაკადი კვლავ ფარდობითი სიჩქარით განისაზღვრება, ამიტომ დრეკადი გაფანტვის დიფერენციალური განივკვეთი, რომელიც შეესაბამება რომელიმე ნაწილაკის გაფანტვას $d\Omega$ სხეულოვან კუთხეში, ტოლი იქნება შემდეგი გამოსახულებისა:

$$d\sigma_{\pm} = |F(\theta) \pm F(\pi - \theta)|^2 d\Omega. \tag{122,2}$$

---

[1] ამის შესახებ დაწვრილებით იხილეთ წიგნში Теоретическая ядерная физика. Дж. Блатт и В. Вайскопф, § 2, თავი VIII, გვ. 256. ასევე, Н. Мотт и Г. Месси, Теория атомных столкновений, § 5, თავი II, გვ. 56.

პლუს ნიშანი აიღება სინგლეტური გაფანტვისათვის მინუსი კი — ტრიპლეტურისათვის. განივკვეთის (122,2) ფორმულაში იგულისხმება, რომ ნაწილაკთა სრული სპინი გარკვეული მნიშვნელობისაა. ექსპერიმენტზე ამას ხშირად ადგილი არა აქვს. ამიტომ განივკვეთში გარკვეული წონებით გვხვდება როგორც $d\sigma_+$ ისე $d\sigma_-$. კერძოდ, ნახევარ სპინიანი ნაწილაკების შემთხვევაში გვექნება

$$d\sigma=\frac{3}{4}\,d\sigma_-+\frac{1}{4}\,d\sigma_+. \tag{122,3}$$

ამ გამოსახულებაში (122,2) ფორმულის შეტანით მივიღებთ:

$$d\sigma=\Big\{|F(0)|^2+|F(\pi-\theta)|^2- \\ -\frac{1}{2}\,[F(\theta)F^*(\pi-\theta)+F^*(0)F(\pi-\theta)]\Big\}\,d\Omega. \tag{122,4}$$

როგორც მოსალოდნელი იყო, განივკვეთში გაჩნდა ინტერფერენციული წევრები, რომლებიც დაკავშირებულია გაცვლით ურთიერთქმედებასთან. მიღებული ფორმულიდან ჩანს, რომ განივკვეთის მნიშვნელობა არ შეიცვლება თუ θ-კუთხეს შევცვლით $(\pi-\theta)$-თი. ეს კი ნიშნავს, რომ C-სისტემაში იგივეურ ნაწილაკთა გაფანტვის დიფერენციალური განივკვეთი სიმეტრიულია $\theta=\pi/2$ კუთხის მიმართ.

§ 123. გრინის ფუნქცია. გაფანტვის ინტეგრალური განტოლება

ხელსაყრელია გაფანტვის ამოცანის შესაბამისი შრედინგერის განტოლების ჩაწერა ინტეგრალური განტოლების სახით. ამისათვის კი დაგვჭირდება გრინის ფუნქციის შემოღება. (120,8) შრედინგერის განტოლება გადავწეროთ შემდეგნაირად:

$$(E-\hat{H}_0)\,\psi(\mathbf{r})=V(r)\,\psi(\mathbf{r}), \tag{123,1}$$

სადაც $\hat{H}_0=-\dfrac{\hbar^2}{2\mu}\,\Delta$ ფარდობითი მოძრაობის კინეტიკური ენერგიის ოპერატორია. (123,1) განტოლების მარჯვენა მხარე ფორმალურად ცნობილ ფუნქციად ჩავთვალოთ და შემოვიღოთ აღნიშვნა $A(\mathbf{r})=V(r)\,\psi(\mathbf{r})$, მაშინ გვექნება

$$(E-\hat{H}_0)\,\psi(\mathbf{r})=A(\mathbf{r}). \tag{123,2}$$

ჩვენი მიზანია ამ განტოლების შესაბამისი ინტეგრალური განტოლების დაწერა, რომელშიაც გათვალისწინებული იქნება გაფანტვის ამოცანის სასაზღვრო პირობა; სახელდობრ, პირობა, რომლის მიხედვით $r\to\infty$-თვის $\psi(\mathbf{r})$ ფუნქციას ექნება (120,11) სახე. (123,2) გადავწეროთ იგივურად

$$(E-\hat{H}_0)\,\psi(\mathbf{r})=\int\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\,A(\mathbf{r}')\,d\mathbf{r}'; \tag{123,3}$$

საიდანაც ფორმალურად შეგვიძლია ამოვხსნათ $\psi(\mathbf{r})$ ფუნქცია

$$\psi(\mathbf{r})=\int(E-\hat{H}_0)^{-1}\,\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\,A(\mathbf{r}')\,d\mathbf{r}'. \tag{123,4}$$

ეს უკანასკნელი ასე შეგვიძლია წარმოვიდგინოთ:

$$\psi(\mathbf{r})=\int G_0(\mathbf{r},\mathbf{r}')\,A(\mathbf{r}')\,d\mathbf{r}', \tag{123,5}$$

სადაც

$$G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = (E - \hat{H}_0)^{-1} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \tag{123,6}$$

$G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$-ს უწოდებენ თავისუფალი მოძრაობის გრინის ფუნქციას. ცხადია იგი აკმაყოფილებს შემდეგ დიფერენციალურ განტოლებას:

$$(E - \hat{H}_0)\, G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \tag{123,7}$$

თუ დირაკის დელტა ფუნქციას წარმოვიდგენთ ფურიეინტეგრალად და გავითვალისწინებთ, რომ

$$(E - \hat{H}_0)^{-1} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} = \left(E - \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu}\right)^{-1} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}, \tag{123,8}$$

მაშინ (123,6) ფორმულიდან მივიღებთ

$$G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{-i\mathbf{k}'\mathbf{r}'} e^{i\mathbf{k}'\mathbf{r}}\, d\mathbf{k}'}{E - E(k')}, \tag{123,9}$$

სადაც

$$E(k) = \frac{k^2 \hbar^2}{2\mu}. \tag{123,10}$$

შრედინგერის განტოლების ზოგადი ამონახსნის მისაღებად (123,5) კერძო ამონახსნს უნდა დავმატოთ (123,3) განტოლების შესაბამისი ერთგვაროვანი განტოლების ამონახსნი. ერთგვაროვანი განტოლება მიიღება, როცა ურთიერთქმედება არა გვაქვს, ამიტომ, ამ შემთხვევაში, ამონახსნი წარმოადგენს $\Phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ ბრტყელ ტალღას. ამგვარად, გვექნება

$$\psi(\mathbf{r}) = \Phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) + \int G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}')\, V(\mathbf{r}')\, \psi(\mathbf{r}')\, d\mathbf{r}'. \tag{123,11}$$

მაგრამ ეს განტოლება არაა ინტეგრალური განტოლება, რამდენადაც მასში ჯერ კიდევ გათვალისწინებული არ არის გაფანტვის ამოცანის სასაზღვრო პირობა. (123,11)-ში ვიგულისხმოთ, რომ $\Phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ არის დაცემული ბრტყელი ტალღა, მაშინ მეორე წევრი უსასრულობაში უნდა იყოს განშლადი სფერული ტალღა. ამისათვის კი აუცილებელია გრინის ფუნქციის სათანადოდ განსაზღვრა. მაშასადამე, სასაზღვრო პირობის ჩართვა შესაძლებელია გრინის ფუნქციის სათანადოდ არჩევით. გრინის ფუნქციის შერჩევა კი დამოკიდებულია (123,9) ინტეგრალის განმარტებაზე. ამ მიზნით (123,9) გამოსახულება ასე გადავწეროთ:

$$G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{1}{(2\pi)^3} \frac{2\mu}{\hbar^2} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{i\mathbf{k}'\mathbf{R}}}{k^2 - k'^2}\, d\mathbf{k}', \tag{123,12}$$

სადაც

$$\mathbf{R} = \mathbf{r} - \mathbf{r}'. \tag{123,13}$$

კუთხეებით ინტეგრაციის შემდეგ მარტივად მივიღებთ

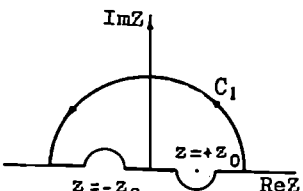
$$G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{\mu}{2\pi^2 \hbar^2 R} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{k' \sin(k'R)}{k^2 - k'^2} dk'. \tag{123,14}$$

სასაზღვრო პირობის ნათლად წარმოსადგენად ხელსაყრელია ამ ინტეგრალის ამოხსნა ნაშთთა თეორიის გამოყენებით. k' ნამდვილი ცვლადის ნაცვლად შემოვიღოთ z კომპლექსური სიბრტყე და ჩვენი ინტეგრალი ამ სიბრტყეზე კონტურული სახით წარმოვიდგინოთ. შემოვიტანოთ ახალი ცვლადი $z = k'R$, მაშინ

$$G_0(r, r') = \frac{\mu}{2\pi^2\hbar^2 R} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{z \sin z\, dz}{z^2 - z_0^2}, \qquad (123.15)$$

სადაც $z_0 = kR$ დადებითი რიცხვია.

წინასწარ ნათელია, რომ (123,11)-ში (120,11) გაფანტვის სასაზღვრო პირობის დასაკმაყოფილებლად გრინის ფუნქციას უნდა ჰქონდეს e^{ikR} სახე ეს კი იმას ნიშნავს რომ (123,15) ინტეგრალი პროპორციული უნდა იყოს e^{iz_0}-ისა. ამიტომ, როცა ამ ინტეგრალს კომპლექსურ სიბრტყეზე განვიხილავთ, როგორც კონტურულ ინტეგრალს $z = \pm z_0$ პოლუსების შემოვლის წესი ისე უნდა ავირჩიოთ, რომ ინტეგრალი მართლაც e^{iz_0}-ის პროპორციული გამოვიდეს.

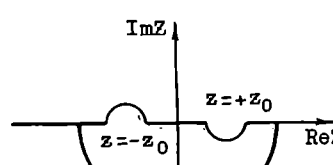


ნახ. 39

ინტეგრალქვეშა გამოსახულებას ნამდვილ ღერძზე აქვს ორი პოლუსი $z = z_0$ და $z = -z_0$. ქვემოთ ჩვენ ვაჩვენებთ, რომ ინტეგრალის დამოკიდებულება z_0-ზე განისაზღვრება კონტურის შერჩევით პოლუსების უშუალო მახლობლობაში. ვთქვათ, კონტური ისეა შერჩეული, რომ კონტური $z = -z_0$ პოლუსს უვლის ზევიდან, ხოლო $z = z_0$ პოლუსს — ქვემოდან (ნახ. 39 და 40). საძიებელი ინტეგრალი შემდეგნაირად გადავწეროთ:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{z \sin z\, dz}{z^2 - z_0^2} = \frac{1}{2i} \left(\int_{C_1} \frac{z e^{iz}\, dz}{z^2 - z_0^2} - \int_{C_2} \frac{z e^{-iz}\, dz}{z^2 - z_0^2} \right). \qquad (123,16)$$

პირველი ინტეგრალი შეგვიძლია გამოვთვალოთ, თუ კონტურს ჩავკეტთ ზედა ნახევარსიბრტყეში უსასრულო რადიუსის ნახევარწრით (ნახაზზე C_1 კონტური), ხოლო მეორე ინტეგრალის გამოსათვლელად საჭიროა კონტურის ჩაკეტვა ქვედა ნახევარსიბრტყეში. ეს იმიტომ, რომ ჟორდანის ლემა პირველი ინტეგრალისათვის კმაყოფილდება z-ის დადებითი ვითარსი ნაწილის შემთხვევაში (ზედა ნახევარსიბრტყე), მეორისათვის კი — უარყოფითი ვითარსი ნაწილისათვის (ქვედა ნახევარსიბრტყე). C_1 კონტურის შიგნით მოთავსებულია მხოლოდ $z = z_0$ პოლუსი, ამიტომ პირველი ინტეგრალი ტოლია $2\pi i r_1$, სადაც r_1 არის ინტეგრალქვეშა გამოსახულების ნაშთი $z = z_0$ წერტილში. ამგვარად, პირველი ინტეგრალი ტოლი იქნება $\pi i e^{iz_0}$-ისა. მეორე ინტეგრალის საინტეგრაციო C_2 კონტურის შიგნით გვაქვს აგრეთვე ერთი $z = -z_0$ პოლუსი, ამიტომ, რადგან შემოვლის დროს კონტური ხელმარჯვნივ რჩება, მეორე ინტეგრალი ტოლი იქნება $-2\pi i r_2$-ისა.



ნახ. 40

r_2 არის ინტეგრალქვეშა გამოსახულების ნაშთი $z = -z_0$ პოლუსში. ინტეგრალი კი ტოლი იქნება $-\pi e^{iz_0}$-ისა. ასე რომ, (26,16) ინტეგრალი πe^{iz_0}-ის ტოლი აღმოჩნდა. ამგვარად, გრინის ფუნქციას ექნება გამოსახულება

$$G_0^{(+)}(r, r') = -\frac{2\mu}{\hbar^2}\frac{e^{ikR}}{4\pi R}. \quad R = |\mathbf{r} - \mathbf{r}'| \tag{123,17}$$

გრინის ეს ფუნქცია კი, როგორც ქვემოთ დავინახავთ, უზრუნველყოფს გაფანტვის სასაზღვრო პირობას; ამგვარად, გაფანტვის სასაზღვრო პირობის დასაკმაყოფილებლად (123,14) ინტეგრალი ისე უნდა განვმარტოთ, რომ კონტური მარცხენა პოლუსს უვლიდეს ზემოდან, ხოლო მარჯვენას — ქვემოდან. თუ საინტეგრაციო კონტურს ისე შევარჩევთ, რომ იგი, პირიქით, მარცხენა პოლუსს ქვემოდან უვლიდეს, მარჯვენას კი ზემოდან. სრულიად ანალოგიური მსჯელობით, გრინის ფუნქციისათვის მივიღებთ:

$$G_0^{(-)}(r, r') = -\frac{2\mu}{\hbar^2}\frac{e^{-ikR}}{4\pi R}. \quad R = |\mathbf{r} - \mathbf{r}'| \tag{123,18}$$

ადვილად შემოწმდება, რომ გრინის ასეთი ფუნქცია (123,11) განტოლებაში უზრუნველყოფს გაფანტული ტალღის ასიმპტოტიკას — ბრტყელი ტალღა პლუს კრებადი სფერული ტალღა.

ახლა, თუ (123,17) გრინის ფუნქციას შევიტანთ (123,11) განტოლებაში, მივიღებთ გაფანტვის ინტეგრალურ განტოლებას

$$\psi_k^{(+)}(\mathbf{r}) = \Phi_k(\mathbf{r}) - \frac{2\mu}{4\pi\hbar^2}\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{e^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}V(\mathbf{r}')\psi_k^{(+)}(\mathbf{r}')\,d\mathbf{r}', \tag{123,19}$$

რომელიც წარმოადგენს შრედინგერის განტოლებას გაფანტვის ამოცანის სასაზღვრო პირობით. (123,19)-ში (120,11) სასაზღვრო პირობის შესაბამისი ტალღური ფუნქცია $\psi_k^{(+)}(\mathbf{r})$-ით აღვნიშნეთ.

ვიპოვოთ (123,19) განტოლების ასიმპტოტური სახე დიდი r-ებისათვის; კერძოდ, როცა $r \gg r'$-ზე ცხადია, რომ

$$|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| = r - r'\cos\theta + \dots + \tag{123,20}$$

სადაც θ არის კუთხე $\mathbf{r}$ და $\mathbf{r}'$ ვექტორებს შორის; ამასთან, $\mathbf{r}$ ვექტორის მიმართულება ემთხვევა გაფანტული ტალღის $\mathbf{k}'$ ვექტორის მიმართულებას, ე. ი. $\mathbf{k}' = k\frac{\mathbf{r}}{r}$; ამგვარად,

$$kR = kr - kr'\cos\theta = kr - (\mathbf{k}'\mathbf{r}'), \tag{123,21}$$

ამ ფორმულის გამოყენებით (123,19) განტოლება დიდი r-ებისათვის მიიღებს შემდეგ სახეს:

$$\psi_k^{(+)}(\mathbf{r}) = \Phi_k(\mathbf{r}) - \frac{e^{ikr}}{r}\left\{\frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\int e^{-i\mathbf{k}'\mathbf{r}'}V(r')\psi_k^{(+)}(\mathbf{r}')d\mathbf{r}'\right\}, \tag{123,22}$$

საიდანაც გაფანტვის ამპლიტუდისათვის შეგვიძლია დავწეროთ

$$F(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = -\frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\int e^{-i\mathbf{k}'\mathbf{r}}V(r)\psi_k^{(+)}(\mathbf{r})\,d\mathbf{r}. \tag{123,23}$$

რადგან

$$\Phi_{k'}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}'\mathbf{r}} \tag{123,24}$$

შეგვიძლია განვიხილოთ როგორც საბოლოო მდგომარეობის, ფარდობით სიჩქარეზე ნორმირებული, ბრტყელი ტალღა. ამიტომ (123,23) ფორმულა ასე შეგვიძლია გადავწეროთ:

$$F(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = -\frac{\mu}{2\pi\hbar^2} \langle \psi_{\mathbf{k}'} | V | \psi_{\mathbf{k}}^{(+)} \rangle, \qquad (123,25)$$

სადაც $\psi_{\mathbf{k}}^{(+)}(\mathbf{r})$ წარმოადგენს (123,19) ინტეგრალური განტოლების ამონახსნს.

§ 124. სასაზღვრო პირობის გათვალისწინება ფორმალური მეთოდით

როგორც წინა პარაგრაფში დავინახეთ, გრინის ფუნქციის სახე დამოკიდებულია პოლუსების შემოვლის წესზე. იმისათვის, რომ პოლუსების შემოვლის წესი უფრო ნათლად დავაკავშიროთ სასაზღვრო პირობებთან, ხელსაყრელია პოლუსებს დავუმატოთ მცირე $\pm i\varepsilon$ წარმოსახვითი სიდიდე, სადაც ε უსასრულოდ მცირე სიდიდეა და ამით პოლუსები ან ნამდვილ ღერძიდან ქვედა და ზედა ნახევარსიბრტყეში გადავიტანოთ. რადგან $z_0 \pm i\varepsilon$ პოლუსები ღერძზე აღარ იმყოფებიან, ამიტომ პოლუსის შერჩევა (ე. ი. ავიღებთ $z_0 + i\varepsilon$ თუ $z_0 - i\varepsilon$) ავტომატურად განსაზღვრავს შემოვლის წესს. ამასთან, ნაშთები უნდა ავიღოთ $z_0 \pm i\varepsilon$ პოლუსებში და შემდგომ მიღებულ პასუხში გადავიდეთ ზღვარზე, როცა $\varepsilon \to 0$.

როგორც ვიცით, გრინის თავისუფალი ფუნქცია განისაზღვრება შემდეგი ოპერატორით:

$$G_0(E) = (E - \hat{H}_0)^{-1}, \quad \hat{H}_0 = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta \qquad (124,1)$$

ამ ოპერატორის ნაცვლად, ზემოთ აღნიშნულის თანახმად, განვიხილოთ ოპერატორი

$$G_0^{(\pm)}(E) = (E - \hat{H}_0 \pm i\varepsilon)^{-1} \qquad (124,2)$$

ცხადია, რომ კოორდინატულ წარმოდგენაში

$$G_0^{(\pm)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \equiv \langle \mathbf{r} | G_0^{(\pm)}(E) | \mathbf{r}' \rangle = \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-i\mathbf{k}'\mathbf{r}'} \frac{1}{E - \hat{H}_0 \pm i\varepsilon} e^{i\mathbf{k}'\mathbf{r}'} d\mathbf{k}' \qquad (124,3)$$

ამ გამოსახულებას (123,15)-ის ანალოგიურად შეიძლება მიეცეთ შემდეგი სახე:

$$G_0^{(\pm)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = -\frac{\mu}{2\pi^2\hbar^2 R} J^{(\pm)}(z_0), \qquad (124,4)$$

სადაც

$$J^{(\pm)}(z_0) = -\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{z \sin z\, dz}{z_0^2 - z^2 \pm i\varepsilon} \qquad (z_0 = k'R) \qquad (124,5)$$

განვიხილოთ, მაგალითად, $J^{(+)}(z_0)$ ინტეგრალი. იგი შემდეგი სახით წარმოვადგინოთ:

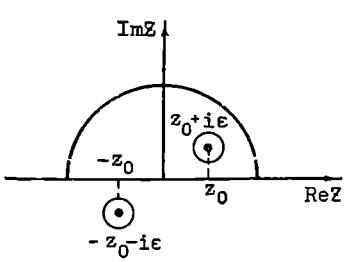
$$2iJ^{(+)}(z_0) = \int_{C_1} \frac{ze^{iz}\,dz}{[z - (z_0 + i\varepsilon)]\,[z + (z_0 + i\varepsilon)]} - \int_{C_2} \frac{ze^{-iz}\,dz}{[z - (z_0 + i\varepsilon)]\,[z + (z_0 + i\varepsilon)]}. \qquad (124,6)$$

ცხადია, რომ პირველი ინტეგრალის საინტეგრაციო კონტური უნდა ჩაიკეტოს ზედა ნახევარსიბრტყეში, სადაც პოლუსი არის $z=z_0+i\varepsilon$. მეორე ინტეგრალის საინტეგრაციო კონტური კი გარს უვლის $z=-z_0-i\varepsilon$ პოლუსს და იკეტება ქვედა ნახევარსიბრტყეში (ნახ. 41). შედეგად ε-ის ნულთან მისწრაფების შემდეგ მივიღებთ

$$J^{(+)}(z_0)=\pi e^{iz_0}. \tag{124,7}$$

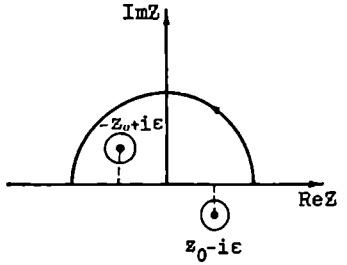
სრულიად ანალოგიურად გამოითვლება $J^{(-)}(z_0)$ ინტეგრალი. ეს ინტეგრალი (124,6) გამოსახულებიდან მიიღება ε-ის ნიშნის შეცვლით. ამიტომ C_1 კონტური, რომელიც უნდა ჩავკეტოთ ზედა ნახევარსიბრტყეში შემოუვლის $z=-z_0+i\varepsilon$ პოლუსს, C_2 კი, რომელიც იკეტება ქვედა ნახევარსიბრტყეში შემოუვლის $z=z_0-i\varepsilon$ პოლუსს (ნახ. 42). შედეგად, ε-ის ნულთან მისწრაფების შემდეგ, მივიღებთ

$$J^{(-)}(z_0)=\pi e^{-iz_0}. \tag{124,8}$$



ნახ. 41

$J^{(+)}$-ში შემავალ პირველ ინტეგრალში $z=z_0+i\varepsilon$ პოლუსის შემოვლა ხდება ზედა ნახევარსიბრტყეში, მეორე ინტეგრალში კი $z=-z_0-i\varepsilon$ პოლუსს ვეცლით ქვედა ნახევარსიბრტყეში.



ნახ. 42

$J^{(-)}$-ში შემავალ პირველ ინტეგრალში კონტური უნდა ჩაიკეტოს ზედა ნახევარსიბრტყეში, სადაც პოლუსია $z=-z_0+i\varepsilon$. მეორე კი ქვედანახევარსიბრტყეში, სადაც პოლუსია $z=z_0-i\varepsilon$

ამგვარად, (124,4) გრინის ფუნქციისათვის მივიღებთ წინა პარაგრაფში უკვე მიღებულ მნიშვნელობას

$$G_0^{(\pm)}(\mathbf{r},\mathbf{r}')=-\frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\,\frac{e^{\pm ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}. \tag{124,9}$$

ამასთან, პლუს ნიშანი შეესაბამება (120,11) სასაზღვრო პირობას, მინუსი კი სასაზღვრო პირობას, რომლის დროსაც გაფანტვის ტალღური ფუნქცია უსასრულობაში წარმოადგენს ბრტყელი ტალღისა და კრებადი სფერული ტალღის ჯამს. მაშასადამე, გრინის ფუნქციის (124,2) სახით ჩაწერა ავტომატურად უზრუნველყოფს გაფანტვის ამოცანის შესაბამის სასაზღვრო პირობებს.

ბოლოს შევნიშნოთ, რომ ხშირად იხილავენ გრინის ფუნქციასაც, რომელიც შეესაბამება კომბინაციას

$$J(z_0)=\frac{1}{2}\,[J^{(+)}(z_0)+J^{(-)}(z_0)]. \tag{124,10}$$

შესაბამისი გრინის ფუნქცია

$$g(\mathbf{r},\mathbf{r}')=-\frac{2\mu}{\hbar^2}\,\frac{\cos(k|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|)}{4\pi|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} \tag{124,11}$$

უზრუნველყოფს მდგარი ტალღის (121,18) სასაზღვრო პირობებს.

§ 125. ლიპმან-შვინგერის განტოლება

ახლა გამოვიყვანოთ გაფანტვის ინტეგრალური განტოლება ფორმალური მეთოდით. დავწეროთ შრედინგერის განტოლება დირაკის აბსტრაქტულ სივრცეში

$$(E-\hat{H}_0)\,|\psi\rangle = V\,|\psi\rangle. \tag{125,1}$$

ამ განტოლებიდან ფორმალურად განვსაზღვროთ $|\psi\rangle$ კეტ-ვექტორი. ამისათვის (125,1) გავამრავლოთ $(E-\hat{H}_0)^{-1}$ ოპერატორზე; გვექნება

$$|\psi\rangle = \frac{1}{E-\hat{H}_0}\,V\,|\psi\rangle. \tag{125,2}$$

ამ კერძო ამონახსნს უნდა დავუმატოთ (125,1) განტოლების შესაბამისი ერთგვაროვანი განტოლების ამონახსნი, რომელიც წარმოადგენს თავისუფალი ნაწილაკის მდგომარეობის $|\Phi\rangle$ ვექტორს. ასე რომ, (125,1) განტოლების ფორმალურ ამონახსნს ექნება შემდეგი სახე:

$$|\psi\rangle = |\Phi\rangle + \frac{1}{E-\hat{H}_0}\,V\,|\psi\rangle. \tag{125,3}$$

$(E-\hat{H}_0)^{-1} = G_0(E)$ წარმოადგენს გრინის ფუნქციას, ამიტომ სასაზღვრო პირობების გათვალისწინების მიზნით საჭიროა $E-\hat{H}_0$ ოპერატორს დავუმატოთ $\pm i\varepsilon$ სიდიდე. როცა, მაგალითად, გვაინტერესებს გაფანტვის ამოცანის (120,11) სასაზღვრო პირობა, მაშინ საბოლოოდ გვექნება ინტეგრალური განტოლება

$$|\psi^{(+)}\rangle = |\Phi\rangle + \frac{1}{E-\hat{H}_0+i\varepsilon}\,V\,|\psi^{(+)}\rangle \tag{125,4}$$

სადაც იგულისხმება, რომ საბოლოო შედეგებში ε-უნდა მივასწრაფოდ ნულისაკენ. ამ განტოლებას, რომელიც მკაცრად გამოყვანილი იყო ლიპმანისა და შვინგერის მიერ ლიპმან-შვინგერის განტოლებას უწოდებენ.

ვიჩვენოთ, რომ კოორდინატულ წარმოდგენაში (125,4) განტოლება ემთხვევა გაფანტვის თეორიის (123,19) ინტეგრალურ განტოლებას. ამ მიზნით (125,4) განტოლება მარცხნიდან გავამრავლოთ ბრა $\langle \mathbf{r}|$ ვექტორზე და გავითვალისწინოთ, რომ

$$\int_{-\infty}^{+\infty} d\mathbf{r}\,|\,\mathbf{r}\rangle\,\langle\mathbf{r}\,| = 1; \tag{125,5}$$

მაშინ გვექნება

$$\langle \mathbf{r}\,|\,\psi_{\mathbf{k}}^{(+)}\rangle = \langle \mathbf{r}\,|\,\Phi_{\mathbf{k}}\rangle + \int \langle \mathbf{r}\,|\,G_0^{(+)}(E)\,|\,\mathbf{r}'\rangle\,\langle \mathbf{r}'\,|\,V\,|\,\mathbf{r}''\rangle\,\langle \mathbf{r}''\,|\,\psi_{\mathbf{k}}^{(+)}\rangle\,d\mathbf{r}'\,d\mathbf{r}'' \tag{125,6}$$

რადგან

$$\langle \mathbf{r}\,|\,\psi_{\mathbf{k}}^{(+)}\rangle = \psi_{\mathbf{k}}^{(+)}(\mathbf{r}),\quad \langle \mathbf{r}\,|\,\Phi_{\mathbf{k}}\rangle = \Phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}),$$

ხოლო

$$\langle \mathbf{r}\,|\,G_0^{(+)}(E)\,|\,\mathbf{r}'\rangle = -\frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\,\frac{e^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} \tag{125,7}$$

და კოორდინატულ წარმოდგენაში

$$\langle \mathbf{r}'\,|\,V\,|\,\mathbf{r}''\rangle = V(\mathbf{r}')\,\delta(\mathbf{r}'-\mathbf{r}''), \tag{125,8}$$

ამიტომ საბოლოოდ მივიღებთ

$$\psi_k^{(+)}(\mathbf{r}) = \Phi_k(\mathbf{r}) - \frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\int \frac{e^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} V(r')\,\psi_k^{(+)}(\mathbf{r}')\,d\mathbf{r}', \qquad (125,9)$$

რომელიც მართლაც ემთხვევა (123,19) ინტეგრალურ განტოლებას.

ლიპმან-შვინგერის განტოლების ჩაწერა ასევე ადვილია p-ტალღური ვექტორის წარმოდგენაში. ამისათვის გავიხსენოთ, რომ $\langle \mathbf{p}\,|\,\Phi_k\rangle = \langle \mathbf{p}\,|\,\mathbf{k}\rangle = \delta(\mathbf{p}-\mathbf{k})$, მაშინ (125,4) განტოლების გამრავლებით $\langle \mathbf{p}|$ ვექტორზე და ერთეულოვანი

$$\int_{-\infty}^{+\infty} d\mathbf{p}\,|\,\mathbf{p}\rangle\,\langle\mathbf{p}\,| = 1 \qquad (125,10)$$

ოპერატორის ჩასმით, მივიღებთ

$$\psi_k^{(+)}(\mathbf{p}) = \delta(\mathbf{p}-\mathbf{k}) + \int \langle \mathbf{p}\,|\,G_0^{(+)}(E)\,|\,\mathbf{p}''\rangle\,\langle \mathbf{p}''\,|\,V\,|\,\mathbf{p}'\rangle\,\psi_k^{(+)}(\mathbf{p}')\,d\mathbf{p}'\,d\mathbf{p}''. \qquad (125,11)$$

ცხადია, რომ

$$\langle \mathbf{p}\,|\,G_0^{(+)}(E)\,|\,\mathbf{p}''\rangle = \frac{1}{(2\pi)^3}\int e^{-i\mathbf{p}\mathbf{r}}\,\frac{1}{E - \frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta + i\varepsilon}\,e^{i\mathbf{p}''\mathbf{r}}\,d\mathbf{r} =$$

$$= \frac{1}{(2\pi)^3}\int \frac{e^{i(\mathbf{p}''-\mathbf{p},\,\mathbf{r})}}{E - E(p'') + i\varepsilon}\,d\mathbf{r} = \frac{\delta(\mathbf{p}''-\mathbf{p})}{E - E(p'') + i\varepsilon}, \qquad (125,11)$$

სადაც $E(p) = p^2\hbar^2/2\mu$. მაშასადამე, საბოლოოდ გვექნება

$$\psi_k^{(+)}(\mathbf{p}) = \delta(\mathbf{p}-\mathbf{k}) + \frac{1}{E - E(p) + i\varepsilon}\int_{-\infty}^{+\infty} \langle \mathbf{p}\,|\,V\,|\,\mathbf{p}'\rangle\,\psi_k^{(+)}(\mathbf{p}')\,d\mathbf{p}'. \qquad (125,12)$$

ამ ინტეგრალური განტოლების გული განისაზღვრება ფორმულით

$$\langle \mathbf{p}\,|\,V\,|\,\mathbf{p}'\rangle = \frac{1}{(2\pi)^3}\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-i\mathbf{p}\mathbf{r}}\,V(r)\,e^{i\mathbf{p}'\mathbf{r}}\,d\mathbf{r}, \qquad (125,13)$$

ე. ი. წარმოადგენს პოტენციალური ენერგიის მატრიცულ ელემენტს ბრტყელი ტალღების მდგომარეობების მიხედვით.

§ 126. გაფანტვის რადიალური ფუნქციების ინტეგრალური განტოლება. ფაზის გამოსათვლელი ფორმულა

ცენტრალურ ველში მნიშვნელოვანია გაფანტვის რადიალური ფუნქციების ცოდნა, ამიტომ შევეცადოთ (123,19) ინტეგრალური განტოლების დაწერა $\chi_l(kr) = kr\,R_l(kr)$ რადიალური ფუნქციებისათვის. ამ მიზნით ჩვენ დაგვჭირდება გრინის ფუნქციის რადიალური ნაწილის პოვნა. გავშალოთ გრინის ფუნქცია სფერულ ფუნქციებად. რადგან $G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ დამოკიდებულია ორ რადიუს-ვექტორზე, ამიტომ შეგვიძლია დავწეროთ

$$G_0^{(+)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \sum_{l=0}^{\infty}\sum_{m=-l}^{+l} \frac{G_{0l}^{(+)}(r, r')}{rr'}\,Y_{lm}^*(\bar{r})\,Y_{lm}(\bar{r}') \qquad (126,1)$$

მეორე მხრივ, მათემატიკაში ცნობილია შემდეგი ფორმულა:[1]

$$\frac{e^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{ik\,|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} = 4\pi \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^{+l} h_l^{(1)}(kr_>)\, j_l(kr_<)\, Y_{lm}^*(\bar{r})\, Y_{lm}(\bar{r}'), \qquad (126{,}2)$$

სადაც $r_>$ ნიშნავს უდიდესს r და r'-ს შორის, ხოლო $r_<$ უმცირესს r და r'-ს შორის. $j_l(kr)$ ბესელის სფერული ფუნქციაა, $h_l^{(1)}(kr)$ კი წარმოადგენს ჰანკელის პირველი გვარის სფერულ ფუნქციას

$$h_l^{(1)}(kr) = \sqrt{\frac{\pi}{2kr}}\, H_{l+1/2}^{(1)}(kr). \qquad (126{,}3)$$

ეს ფუნქცია წარმოადგენს ბესელის (54,11) განტოლების ამონახსნს, რომელიც განშლადია სათაოებში უსასრულობაში კი აქვს ასიმპტოტური სახე

$$h_l^{(1)}(kr) = \frac{e^{i\left(kr-\frac{l\pi}{2}\right)}}{ikr}. \quad kr \to \infty \qquad (126{,}4)$$

რადგან (123,17) ფორმულის თანახმად

$$G_0^{(+)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = -\frac{2\mu}{\hbar^2}\, \frac{e^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}, \qquad (126{,}5)$$

ამიტომ (126,1) და (126,2) ფორმულების შედარებით გრინის რადიალური ფუნქციისათვის მივიღებთ

$$\frac{G_{0l}^{(+)}(r, r')}{rr'} = -\frac{2\mu}{\hbar^2}\, ikj_l(kr_<)\, h_l^{(1)}(kr_>). \qquad (126{,}6)$$

ამის შემდეგ ადვილია გაფანტვის ინტეგრალური განტოლების ჩაწერა რადიალური ფუნქციებისათვის. ამ მიზნით ინტეგრალურ განტოლებაში

$$\psi_{\mathbf{k}}^{(+)}(\mathbf{r}) = \Phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) + \int_{-\infty}^{+\infty} G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}')\, V(r')\, \psi_{\mathbf{k}}^{(+)}(\mathbf{r}')\, d\mathbf{r}' \qquad (126{,}7)$$

შევიტანოთ ბრტყელი $\Phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ ტალღის (121,4), $\psi_{\mathbf{k}}^{(+)}(\mathbf{r})$ ფუნქციის (121,7) და გრინის ფუნქციის (126,1) გაშლა სფერულ ტალღებად. შედეგად სფერული ფუნქციების ორთო-ნორმირების გამო დაგვრჩება

$$\chi_l^{(+)}(kr) = krj_l(kr) + \int_0^{\infty} G_{0l}^{(+)}(r, r')\, V(r')\, \chi_l^{(+)}(kr')\, dr', \qquad (126{,}8)$$

რომელიც წარმოადგენს გაფანტვის ინტეგრალურ განტოლებას რადიალური $\chi_l(kr)$ ფუნქციისათვის შემდეგი სასაზღვრო პირობით:

$$\chi_l^{(+)}(kr) = \sin\left(kr - \frac{l\pi}{2}\right) + \frac{S_l(k)-1}{2i}\, e^{i\left(kr-\frac{l\pi}{2}\right)}. \quad (r \to \infty) \qquad (126{,}9)$$

ან, დრეკადი გაფანტვის შემთხვევაში

$$\chi_l^{(+)}(kr) = e^{i\delta_l} \sin\left(kr - \frac{l\pi}{2} + \delta_l\right). \quad (r \to \infty) \qquad (126{,}10)$$

[1] იხილეთ გ. ჯიღაშვილი, ორი და სამი ნაწილაკის კვანტური მექანიკა, 1973 წ. გვ. 124,

დავაკავშიროთ გაფანტვის ფაზა (126,8) განტოლების $\chi_l^{(+)}(kr)$ ამონახსნთან. ამ მიზნით (126,8) გადავწეროთ შემდეგი სახით:

$$\chi_l^{(+)}(kr) = krj_l(kr) + \int_0^r G_{0l}(r, r')\, V(r')\, \chi_l^{(+)}(r')\, dr' +$$

$$+ \int_r^\infty G_{0l}(r, r')\, V(r')\, \chi_l^{(+)}(r')\, dr'. \qquad (126,11)$$

შევიტანოთ გრინის ფუნქციის მნიშვნელობა (126,6) ფორმულიდან. გვექნება

$$\chi_l^{(+)}(kr) = krj_l(kr) - \frac{2\mu}{\hbar^2} ikr \left(h_l^{(1)}(kr) \int_0^r r'\, j_l(kr')\, V(r')\, \chi_l^{(+)}(kr')\, dr' + \right.$$

$$\left. + j_l(kr) \int_r^\infty r'\, h_l^{(1)}(kr')\, V(r')\, \chi_l^{(+)}(kr')dr' \right) \qquad (126,12)$$

ვიპოვოთ ამ განტოლების ასიმპტოტური სახე დიდი r-ებისათვის. გავიხსენოთ, რომ დიდი r-ებისათვის ბესელის ფუნქციას აქვს გამოხატულება

$$j_l(kr) = \frac{\sin\left(kr - \frac{l\pi}{2}\right)}{kr}, \qquad (126,13)$$

ხოლო $h_l^{(1)}(kr)$-ს აქვს (126,4) ფორმა. მაშინ $r = \infty$-თვის გვექნება

$$\chi_l^{(+)}(kr) = \sin\left(kr - \frac{l\pi}{2}\right) +$$

$$+ \left\{ -\frac{2\mu}{\hbar^2} \int_0^\infty r j_l(kr)\, V(r)\, \chi_l^{(+)}(kr)\, dr \right\} e^{i\left(kr - \frac{l\pi}{2}\right)}, \qquad (126,14)$$

რომლის შედარებით (126,9) ასიმპტოტურ გამოსახულებასთან მივიღებთ

$$\frac{S_l(k) - 1}{2i} = -\frac{2\mu}{\hbar^2} \int_0^\infty r j_l(kr)\, V(r)\, \chi_l^{(+)}(r)\, dr \qquad (126,15)$$

ამგვარად, გაფანტვის პარციალური $S_l(k)$ მატრიცა განიმარტება გაფანტვის ინტეგრალური განტოლების $\chi_l^{(+)}(r)$ ამონახსნის საშუალებით. დრეკად გაფანტვის შემთხვევაში $S_l = e^{2i\delta_l}$, ამიტომ

$$e^{i\delta_l} \sin\delta_l = -\frac{2\mu}{\hbar^2} \int_0^\infty r j_l(kr)\, V(r)\, \chi_l^{(+)}(kr)\, dr. \qquad (126,16)$$

მაშასადამე, ამ ფორმულით განისაზღვრება გაფანტვის ფაზა ინტეგრალური განტოლების $\chi_l^{(+)}(kr)$ ამოხსნის საშუალებით.

§ 127. გაფანტვის $T(E)$-მატრიცა

როგორც დავინახეთ, ნაწილაკთა გაფანტვის ამპლიტუდა განისაზღვრება ფორმულით

$$F(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = -\frac{\mu}{2\pi\hbar^2} \langle \Phi_{\mathbf{k}'} | V | \psi_{\mathbf{k}}^{(+)} \rangle, \qquad (127,1)$$

სადაც $\Phi_{k'} = e^{ik'r}$ ნორმირებულია ფარდობითი სიჩქარის ტოლ ნაკადზე, $\psi_k^{(+)}(r)$ კი წარმოადგენს გაფანტვის ინტეგრალური განტოლების ამონახსნს. ხშირად უფრო ხელსაყრელია გაფანტვის ამპლიტუდის ისეთნაირი განმარტება, როცა (127,1) გამოსახულებაში მხოლოდ ბრტყელი ტალღები მონაწილეობენ. ცხადია, სამაგიეროდ პოტენციალური ენერგია შეიცვლება სხვა რაღაც უფრო რთული ოპერატორით. ეს ოპერატორი აღვნიშნოთ $T(E)$-თი. მისთვის გვექნება განმარტება

$$V|\psi_k^{(+)}\rangle = T^{(+)}(E)|\Phi_k\rangle, \tag{127,2}$$

ხოლო გაფანტვის ამპლიტუდისათვის მივიღებთ ფორმულას

$$F(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = -\frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\langle\Phi_{k'}|T^{(+)}(E)|\Phi_k\rangle. \tag{127,3}$$

$T^{(+)}(E)$-ს უწოდებენ გაფანტვის T-მატრიცას. პლუსი მიუთითებს (120,11) სასაზღვრო პირობის არჩევაზე.

(127,3) გამოსახულებაში შემავალი ბრტყელი ტალღები საწყისს და საბოლოო მდგომარეობაში ნორმირებული არიან ისე რომ მათი საშუალებით გამოთვლილი ნაკადი ფარდობითი სიჩქარის სიდიდეს ემთხვეოდეს, ე. ი პირობით

$$\langle\Phi_{k'}|\Phi_k\rangle = (2\pi)^3\,\delta(\mathbf{k}'-\mathbf{k}) \tag{127,4}$$

ყველგან სხვაგან კი ჩვენ ვიყენებდით ბრტყელი ტალღების ნორმირებას $\delta(\mathbf{k}-\mathbf{k}')$-ზე $(2\pi)^3$ კოეფიციენტის გარეშე. ამიტომ ხელსაყრელია (127,3) გამოსახულებაში გიგულისხმოთ, რომ ბრტყელი ტალღები, როგორც ყველგან, ნორმირებულია პირობით

$$\langle\Phi_{k'}|\Phi_k\rangle = \delta(\mathbf{k}'-\mathbf{k}) \tag{127,5}$$

მაშინ ამპლიტუდისათვის მივიღებთ

$$F(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = -\frac{4\pi^2\mu}{\hbar^2}\langle\mathbf{k}'|T^{(+)}(E)|\mathbf{k}\rangle. \tag{127,6}$$

ამასთან, ჩვენ გამოვიყენეთ აღნიშვნები $\langle\Phi_k| \equiv \langle\mathbf{k}|$ და $|\Phi_k\rangle \equiv |\mathbf{k}\rangle$. ასე რომ, ბრტყელ ტალღას აქვს სახე

$$\langle\mathbf{r}|\mathbf{k}\rangle = \Phi_k(\mathbf{r}) = (2\pi)^{-3/2}e^{i\mathbf{kr}}. \tag{127,7}$$

ამპლიტუდა დამოკიდებულია ერთ ენერგიაზე, ამიტომ (127,6) ფორმულაში იგულისხმება, რომ ამპლიტუდის მისაღებად საჭიროა ადგილი ჰქონდეს პირობას

$$E = \frac{\mathbf{k}^2\hbar^2}{2\mu} = \frac{\mathbf{k}'^2\hbar^2}{2\mu}. \tag{127,8}$$

ასეთ შემთხვევაში ამბობენ, რომ $T(E)$-მატრიცა განმარტებულია ენერგეტულ ზედაპირზე, რაც შეესაბამება ენერგიის შენახვას. როცა (127,8) პირობა დაცული არ არის, მაშინ ამბობენ, რომ $T(E)$-მატრიცა განმარტებულია ენერგეტული ზედაპირის გარეთ. $T(E)$-მატრიცას ენერგეტული ზედაპირის გარეთ არავითარი ფიზიკური შინაარსი არა აქვს. ფიზიკური მნიშვნელობა $T(E)$-მატრიცას მიეცემა, თუ მასში გადავალთ ენერგეტულ ზედაპირზე. მაშინ იგი გაფანტვის ამპლიტუდას ემთხვევა

$$F(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = -\frac{4\pi^2\mu}{\hbar^2}\langle\mathbf{k}'|T^{(+)}(E)|\mathbf{k}\rangle \qquad 2\mu E = \mathbf{k}^2\hbar^2 = \mathbf{k}'^2\hbar^2 \tag{127,9}$$

კარგი იქნებოდა ჩვენ რომ შეგვეძლოს უშუალოდ გაფანტვის ამპლიტუდისათვის ინტეგრალური განტოლების დაწერა, მაგრამ სამწუხაროდ ეს არ შეიძლება. სამა-

გიეროდ, თურმე შესაძლებელია ინტეგრალური განტოლების დაწერა გაფანტვის $\langle \mathbf{k}' | T^{(+)}(E) | \mathbf{k} \rangle$ მატრიცისათვის. თუ ვიპოვით ამ განტოლების ამონახსნს, მაშინ ენერგეტულ ზედაპირზე გადასვლით (ფორმულა (127,9)) ვიპოვით ამპლიტუდასაც. ამიტომ მეტად მნიშვნელოვანია გაფანტვის $T(E)$ მატრიცის ინტეგრალური განტოლების გამოყვანა. ამ განტოლების გამოყვანა შეიძლება მრავალი გზით. ჩვენ მას გამოვიყვანთ ლიპმან-შვინგერის განტოლებიდან $\psi^{(+)}(\mathbf{r})$ ფუნქციისათვის. ამ განტოლებას, (125,4)-ის თანახმად, აქვს სახე

$$|\psi_{\mathbf{k}}^{(+)}\rangle = |\Phi_{\mathbf{k}}\rangle + \frac{1}{E - \hat{H}_0 + i\varepsilon} V |\psi_{\mathbf{k}}^{(+)}\rangle, \qquad (127,10)$$

სადაც უკვე ვგულისხმობთ, რომ $\Phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ ბრტყელი ტალღა ნორმირებულია (127,5) პირობით. ეს განტოლება გავამრავლოთ მარცხნიდან V-ზე და გავითვალისწინოთ (127,2) განმარტება; გვექნება

$$T^{+}(E) |\Phi_{\mathbf{k}}\rangle = V |\Phi_{\mathbf{k}}\rangle + V \frac{1}{E - \hat{H}_0 + i\varepsilon} T^{+}(E) |\Phi_{\mathbf{k}}\rangle \qquad (127,11)$$

ან ოპერატორული სახით

$$T^{(+)}(E) = V + V \frac{1}{E - \hat{H}_0 + i\varepsilon} T^{(+)}(E). \qquad (127,12)$$

ამ განტოლებას უწოდებენ ლიპმან-შვინგერის განტოლებას $T^{(+)}(E)$ მატრიცისათვის. (127,12)-ში, ისევე როგორც ყველგან, იგულისხმება, რომ საბოლოო შედეგებში უნდა გადავიდეთ ზღვარზე, როცა $\varepsilon \to 0$. (127,12) განტოლება შეგვიძლია წარმოვადგინოთ შემდეგი სახითაც:

$$T^{(+)}(E) = V + V G_0^{(+)}(E)\, T^{(+)}(E). \qquad (127,13)$$

ახლა ეს განტოლება ჩავწეროთ ცხადი სახით. ამისათვის გავამრავლოთ იგი მარცხნიდან $\langle \mathbf{k}' |$-ვექტორზე მარჯვნიდან კი $|\mathbf{k}\rangle$-ზე და გამოვიყენოთ ერთეულოვანი ოპერატორების ჩასმა; გვექნება

$$\langle \mathbf{k}' | T^{(+)}(E) | \mathbf{k} \rangle = \langle \mathbf{k}' | V | \mathbf{k} \rangle + \int \langle \mathbf{k}' | V | \mathbf{k}'' \rangle \cdot$$
$$\langle \mathbf{k}'' | G_0^{(+)}(E) | \mathbf{q} \rangle \langle \mathbf{q} | T^{(+)}(E) | \mathbf{k} \rangle \, d\mathbf{k}'' \, d\mathbf{q}. \qquad (127,14)$$

ცხადია, რომ (125,11) ფორმულის თანახმად

$$\langle \mathbf{k}'' | G_0^{(+)}(E) | \mathbf{q} \rangle = \frac{\delta(\mathbf{k}'' - \mathbf{q})}{E - E(q) + i\varepsilon},$$

ამიტომ საბოლოოდ გვექნება ინტეგრალური განტოლება

$$\langle \mathbf{k}' | T^{(+)}(E) | \mathbf{k} \rangle = \langle \mathbf{k}' | V | \mathbf{k} \rangle + \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\langle \mathbf{k}' | V | \mathbf{q} \rangle \langle \mathbf{q} | T^{(+)}(E) | \mathbf{k} \rangle \, d\mathbf{q}}{E - E(q) + i\varepsilon}, \qquad (127,15)$$

სადაც $\langle \mathbf{k}' | V | \mathbf{k} \rangle$ მატრიცული ელემენტი განისაზღვრება (125,13) ფორმულით, ხოლო $E(q) = \hbar^2 q^2 / 2\mu$. (127,15) წარმოადგენს ინტეგრალურ განტოლებას $T(E)$ მატრიცისათვის ენერგეტული ზედაპირის გარეთ. მისი ამოხსნით ვიპოვით $\langle \mathbf{k}' | T^{(+)}(E) | \mathbf{k} \rangle$ მატრიცას, რომლის მნიშვნელობა ენერგეტულ ზედაპირზე განსაზღვრავს გაფანტვის ამპლიტუდას.

გაფანტვის ამოცანის გადაწყვეტა მოითხოვს (123,19) ინტეგრალური განტოლების ამოხსნას. ჩვენ შეგვიძლია გამოვიდეთ ლიპმან-შვინგერის (127,15) განტოლების ამოხსნიდანაც. მაგრამ, ზოგად შემთხვევაში, ორივე ამ განტოლების ზუსტად ამოხსნა შეუძლებელია. ამის გამო მიმართავენ გაფანტვის ინტეგრალური განტოლების მიახლოებითი ამოხსნის მეთოდებს. ერთ-ერთ ასეთ მიახლოებას წარმოადგენს ბორნის მიახლოება[1]. ბორნის მეთოდი მდგომარეობს მიმდევრობითი მიახლოებებს, ან როგორც მას უწოდებენ, იტერაციის მეთოდის გამოყენებაში. მაგალითად, $T(E)$-მატრიცისათვის, (127.12) განტოლების თანახმად, იტერაციით მივიღებთ მწკრივს

$$T^{(+)}(E)=V+V\frac{1}{E-\hat{H}_0+i\varepsilon}V+$$

$$+V\frac{1}{E-\hat{H}_0+i\varepsilon}V\frac{1}{E-\hat{H}_0+i\varepsilon}V+\ldots+ \qquad (128,1)$$

როცა პოტენციალური ენერგია მცირეა ეს მწკრივი შეიძლება რამოდენიმე წევრზე შევწყვიტოთ. როცა $T^{(+)}(E)$-სთვის ვისაზღვრებით პირველი წევრით, ე. ი., როცა

$$T_1^{(+)}(E)=V, \qquad (128,2)$$

მაშინ ამ მიახლოებას ბორნის პირველ მიახლოებას ან, უბრალოდ, ბორნის მიახლოებას უწოდებენ. მაშინ (127,6) ფორმულის თანახმად, ამპლიტუდისათვის მივიღებთ

$$f^{(1)}(\mathbf{k},\mathbf{k}')=-\frac{4\pi^2\mu}{\hbar^2}\langle\mathbf{k}'|V|\mathbf{k}\rangle. \qquad (128,3)$$

ცხადია, რომ ბორნის პირველ მიახლოებას, (123,19) ინტეგრალური განტოლების თანახმად, შეესაბამება ამოხსნა $\psi_{\mathbf{k}}^{(+)}(\mathbf{r})=\Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$, ე. ი. ბრტყელი ტალღა. ამის გამო (127,3) ფორმულა ბორნის პირველ მიახლოებაში მოგვცემს (128,3) გამოსახულებას.

ცხადია, რომ ბორნის მიახლოებაში დრეკადი გაფანტვის ეფექტურ განივკვეთს ექნება შემდეგი სახე:

$$\sigma(\vartheta)\,d\Omega=\left(\frac{4\pi^2\mu}{\hbar^2}\right)^2\left|\int\limits_{-\infty}^{+\infty}\Psi_{\mathbf{k}'}^{*}(\mathbf{r})\,V(r)\,\Phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})\,d\mathbf{r}\right|^2 d\Omega \qquad (128,4)$$

ბორნის მიახლოების ფიზიკური შინაარსის გასარკვევად (128,4) ფორმულა გამოვაყვანოთ სხვა მეთოდითაც. კერძოდ, გამოვთვალოთ საწყისიდან საბოლოო მდგომარეობაში გადასვლის ალბათობა ერთ სეკუნდში, როცა საბოლოო მდგომარეობის იმპულსი ძევს $d\Omega$ სხეულოვან კუთხეში. ეს ალბათობა გამოითვლება ფორმულით

$$w\,d\Omega=\frac{2\pi}{\hbar}\left|\int\limits_{-\infty}^{+\infty}\psi_f^{*}(\mathbf{r})\hat{H}'\psi_i(\mathbf{r})\,d\mathbf{r}\right|^2\rho_f(E)\,d\Omega; \qquad (128,5)$$

აქ $\rho_f(E)=\mu p'$-ს (იხ. 77.19) ფორმულა, სადაც p' არის საბოლოო მდგომარეობის ფარდობითი მოძრაობის იმპულსი. ავიღოთ (128,5) ფორმულაში შემავალ ტალღურ ფუნქციებად ბრტყელი ტალღები:

[1] M. Born, Zeits. f. Phys. 38, 803, (1926).

$$\psi_f(\mathbf{r}) = (2\pi\hbar)^{-3/2} e^{\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}'\mathbf{r}} \qquad \psi_i(\mathbf{r}) = e^{\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}\mathbf{r}} \tag{128,6}$$

ხოლო $\hat{II}'$ შეშფოთების ენერგიად განვიხილოთ მთელი პოტენციალური ენერგია, თუ, გარდა ამისა, (128,5) ფორმულას გავყოფთ დაცემულ ნაწილაკთა ნაკადზე, რომელიც არჩეული ნორმირების დროს p/μ-ს ტოლია, (120,18) ფორმულის თანახმად, მივიღებთ გაფანტვის დიფერენციალურ განიკვეთს, რომელიც დრეკადი გაფანტვისათვის ($p = p'$) ზუსტად დაემთხვევა განივკვეთის ფორმულას ბორნის მიახლოებაში, ე. ი. (128,4) გამოსახულებას.

მაშასადამე, ბორნის მიახლოება წარმოადგენს შეშფოთების თეორიის სპეციალურ შემთხვევას. ამ მიახლოებაში იგულისხმება, რომ ურთიერთქმედების პოტენციალური ენერგია შეიძლება განხილული იქნეს როგორც შეშფოთება. როგორც ურთიერთქმედებამდე ისე ურთიერთქმედების შემდეგ, ამ მიახლოებაში, ნაწილაკისათვის შეგვიძლია ავიღოთ ბრტყელი ტალღები. ე. ი. ნაწილაკი როგორც საწყისს, ისე საბოლოო მდგომარეობაში მოძრაობს თავისუფლად.

ახლა შევისწავლოთ გაფანტვის (128,4) განივკვეთი უფრო დეტალურად. ცხადია, რომ ეს ფორმულა შეგვიძლია გადავწეროთ შემდეგი სახითაც:

$$\sigma(0)\, d\Omega = \left(\frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\right)^2 \left| \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}}\, V(\mathbf{r})\, d\mathbf{r} \right|^2 d\Omega, \tag{128,7}$$

სადაც

$$\mathbf{q} = \mathbf{k} - \mathbf{k}' \tag{128,8}$$

ვექტორს უწოდებენ დაჯახების ვექტორს. დრეკადი გაფანტვის დროს $\mathbf{k}^2 = \mathbf{k}'^2$, ამიტომ

$$q = 2k \sin\frac{\theta_c}{2} \tag{128,9}$$

სადაც θ_c გაფანტვის კუთხეა C-სისტემაში.

როცა პოტენციალური ენერგია ცენტრალურია, ე. ი. $V(\mathbf{r}) = V(r)$, მაშინ ამპლიტუდისათვის გვექნება

$$F^{(1)}(q) = -\frac{\mu}{2\pi\hbar^2} 2\pi \int_0^{\infty} V(r)\, r^2\, dr \int_{-1}^{+1} e^{iqrx}\, dx. \tag{128,10}$$

შედეგად მივიღებთ

$$F^{(1)}(q) = -\frac{2\mu}{\hbar^2} \int_0^{\infty} \frac{\sin qr}{qr} V(r)\, r^2\, dr. \tag{128,11}$$

გაფანტვის განივკვეთისათვის კი შეგვიძლია დავწეროთ ფორმულა

$$\sigma(\theta)\, d\Omega = \left(\frac{2\mu}{\hbar^2}\right)^2 \left| \int_0^{\infty} V(r) \frac{\sin qr}{qr} r^2\, dr \right|^2 d\Omega. \tag{128,12}$$

განვიხილოთ კერძო შემთხვევები; ვთქვათ $kr \ll 1$, მაშინ $e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}}$ შეგვიძლია შევცვალოთ ერთიანით; შესაბამისად $\frac{\sin qr}{qr} \sim 1$ და გვექნება

$$\sigma(\theta)\, d\Omega = \left(\frac{2\mu}{\hbar^2}\right)^2 \left| \int_0^{\infty} V(r)\, r^2\, dr \right|^2 d\Omega. \tag{128,13}$$

ახლა ვთქვათ ვიხილავთ შემთხვევას $q \to \infty$, ე. ი. როცა დაცემული ნაწილაკის სიჩქარე დიდია და გაფანტვის კუთხე არც ისე მცირე. მაშინ $\sin qr/qr$ ოსცილირებადი ფუნქციაა. პოტენციალური ენერგია, როგორც წესი, ნელა იცვლება, ამიტომ ამპლიტუდა და, მაშასადამე, განივკვეთიც მისწრაფის ნულისაკენ. დიდ ენერგიებზე გაფანტვა მცირე კუთხეებზე ხდება, ამიტომ $q \approx k\theta$, რის გამოც ინტეგრალურ განივკვეთს დიდ ენერგიებზე ექნება შემდეგი გამოსახულება:

$$\sigma(E) = 2\pi \int_0^{\pi} \theta \, d\theta \, | F^{(1)}(k\theta) |^2. \tag{128,14}$$

ინტეგრალი კუთხეების მიხედვით ძალიან სწრაფად იკრიბება, ამიტომ ზედა საზღვარი ∞-მდე შეგვიძლია გავავრცელოთ. თუ შემოვიღებთ ახალ ცვლადს $x = k\theta$ მივიღებთ

$$\sigma(E) = \frac{\text{const}}{E}. \tag{128,15}$$

როგორც ვხედავთ, ბორნის მიახლოებაში დიდ ენერგიებზე ინტეგრალური განივკვეთი ენერგიის უკუპროპორციულია.

გაფანტვის ფაზა ბორნის მიახლოებაში. ვიპოვოთ ფაზის გამოსათვლელი ფორმულა ბორნის მიახლოებაში. ამისათვის გამოვიყენოთ (126,16) ფორმულა. ბორნის მიახლოებაში (126,8) განტოლების ამონახსნს ექნება სახე

$$\chi_l^{(+)}(kr) = kr j_l(kr). \tag{128,16}$$

შევიტანოთ ეს გამოსახულება (126,16) ფორმულაში და გავითვალისწინოთ, რომ ბორნის მიახლოებაში ფაზა მცირე სიდიდეა, მაშინ გვექნება

$$\delta_l(E) = -\frac{2\mu k}{\hbar^2} \int_0^{\infty} V(r) \, j_l^2(kr) \, r^2 \, dr. \tag{128,17}$$

ჩვენ ვხედავთ, რომ მიზიდვის პოტენციალური ენერგიის შემთხვევაში $\delta_l > 0$ განზიდვის შემთხვევაში კი $\delta_l < 0$.

ბორნის მიახლოების გამოყენების საზღვრები. ახლა დავადგინოთ ბორნის მიახლოების სამართლიანობის საზღვრები. საზოგადოდ ეს საკითხი ძალზე რთულია და დამოკიდებულია პოტენციალური ენერგიის კონკრეტულ სახეზე, ამიტომ ჩვენ დავკმაყოფილდებით თვისობრივი ანალიზით.

ვთქვათ, ველის ეფექტური მოქმედების არის ხაზოვანი ზომაა R, მაშინ პოტენციალური ენერგიის, როგორც მცირე შეშფოთების, განხილვა შეგვიძლია, როცა დაცულია პირობა

$$| V | \ll E = \frac{\hbar^2}{2\mu \lambda^2}. \tag{128,18}$$

თუ დაცემული ნაწილაკის ტალღის სიგრძე $\lambda \gg R$-ზე, მაშინ

$$| V | \ll \frac{\hbar^2}{2\mu R^2}. \tag{128,19}$$

ახლა, ვთქვათ, ამ არეში, სადაც პოტენციალური ენერგია შესამჩნევად განსხვავდება ნულისაგან. მოძრაობის პერიოდი T-ს უდრის. იგი სიდიდის რიგით $\hbar/|V|$-ს ტოლი იქნება. მეორე მხრივ, დრო, რომელსაც დაცემული ნაწილაკი ანდომებს R მანძილის გავლას, ტოლი იქნება $\tau \sim R/v$ სიდიდისა, სადაც v ნაწილაკის ფარ-

დობითი სიჩქარეა. ფიზიკური მოსაზრებით ნათელია, რომ ბორნის მიახლოება დიდ ენერგიებზე სამართლიანი იქნება, როცა $\tau \ll T$, ე. ი. როცა ნაწილაკები ისე სწრაფად ჩაუვლიან ერთმანეთს, რომ „პოტენციალური ენერგია ვერ ასწრებს ურთიერთქმედებას“ და ბრტყელი ტალღის შესამჩნევ ეშფოთებას. ადვილად დავინახავთ, რომ $\tau \ll T$ პირობა ეკვივალენტურია პირობის

$$|V| \ll \frac{\hbar v}{R}. \tag{128,20}$$

როცა ბორნის პირველი მიახლოების გამოყენების პირობები დაცული არ არის, მაშინ ბუნებრივია შემდგომი მიახლოებების განხილვა.

§ 129. რეზერფორდის ფორმულა

როგორც მარტივი მაგალითი ბორნის მიახლოების გამოყენებისა, გამოვიყვანოთ რეზერფორდის ფორმულა, რომელიც გამოხატავს $Z_1 e$ მუხტის მქონე ნაწილაკის გაფანტვას $Z_2 e$ მუხტის ნაწილაკზე კულონური ველით

$$V(r) = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r}. \tag{129,1}$$

(128,20) ფორმულის თანახმად, ბორნის მიახლოება კულონური ველისათვის სამართლიანი იქნება, როცა

$$\xi = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{\hbar v} \ll 1; \tag{129,2}$$

ξ-ს უწოდებენ ბორნის პარამეტრს. (128,11) ფორმულის თანახმად, ამპლიტუდისათვის გვექნება

$$F^{(1)}(q) = -\frac{2\mu Z_1 Z_2 e^2}{\hbar^2 q} \int_0^\infty \sin qr\, dr. \tag{129,3}$$

ამ ინტეგრალის ამოხსნა შეიძლება ე. წ. „რეგულარიზაციის“ მეთოდით; სახელდობრ, ეს ინტეგრალი შეგვიძლია შემდეგნაირად განვიხილოთ:

$$\int_0^\infty \sin qr\, dr = \lim_{\alpha \to 0} \int_0^\infty e^{-\alpha r} \sin qr\, dr = \lim_{\alpha \to 0} \frac{q}{\alpha^2 + q^2} = \frac{1}{q}. \tag{129,4}$$

ამგვარად,

$$F^{(1)}(q) = -\frac{2\mu Z_1 Z_2 e^2}{\hbar^2 q^2}. \tag{129,5}$$

მეორე მხრივ, (128,9) ფორმულის თანახმად, $q^2 = 4k^2 \sin^2 \frac{\theta_c}{2}$, ე. ი.

$$F^{(1)}(\theta_c) = -\left(\frac{Z_1 Z_2 e^2}{4E_c}\right) \frac{1}{\sin^2 \frac{\theta_c}{2}}, \tag{129,6}$$

ამიტომ გაფანტვის დიფერენციალური განივკვეთისათვის მივიღებთ რეზერფორდის ცნობილ ფორმულას

$$\sigma(\theta_c)\, d\Omega_c = \left(\frac{Z_1 Z_2 e^2}{4E_c}\right)^2 \frac{d\Omega_c}{\sin^4 \frac{\theta_c}{2}}, \tag{129,7}$$

თუ გვაინტერესებს განივკვეთის მნიშვნელობა „I-სისტემაში", საჭიროა გამოვიყენოთ (120,6) ფორმულა.

როგორც ვხედავთ, ბორნის მიახლოება კულონური გაფანტვისათვის იძლევა იმავე ფორმულას, რასაც კლასიკური მექანიკა. აღსანიშნავია, რომ კვანტური მექანიკის ზუსტი მეთოდებით გამოთვლა კულონური გაფანტვისათვის იგივე შედეგებს იძლევა. ეს უცნაური შედეგი შეიძლება აიხსნას კულონური ველის მანძილზე დამოკიდებულებით; კერძოდ იმით, რომ იგი უსასრულობაში საკმარისად ნელა მიისწრაფის ნულისაკენ.

ახლა ვთქვათ, ნაწილაკები იგიურებია და მათ აქვთ ნახევრის ტოლი სპინი. მაშინ (122,4) ფორმულის თანახმად, გაფანტვისათვის ბორნის მიახლოებაში გვექნება ფორმულა:

$$\sigma(\theta_c)\,d\Omega_c = \left(\frac{Zc^2}{4E_c}\right)^2 \left\{ \frac{1}{\sin^4\frac{\theta_c}{2}} + \frac{1}{\cos^4\frac{\theta_c}{2}} - \frac{1}{\sin^2\frac{\theta_c}{2}\cos^2\frac{\theta_c}{2}} \right\} d\Omega_c. \quad (129{,}8)$$

ამ ფორმულისათვის დამახასიათებელია ინტერფერენციული წევრების გაჩენა, რაც ყოველთვის თან ახლავს იგივური ნაწილაკების ურთიერთქმედებას.

აღსანიშნავია, რომ (129,8) ფორმულა განსხვავდება ზუსტი ფორმულისაგან, რომელსაც მოტტის ფორმულას უწოდებენ. ეს განსხვავება გამოიხატება იმაში, რომ ინტერფერენციულ წევრს აქვს დამატებითი მამრავლი

$$\cos\left(\xi \ln \operatorname{tg}^2\frac{\theta_c}{2}\right), \quad (129{,}9)$$

რომელიც იმის გამო, რომ ბორნის მიახლოებაში $\xi \ll 1$ შეცვლილია ერთიანით.

სავარჯიშო მაგალითები

1. აჩვენეთ, რომ ჯამი დრეკადი და არადრეკადი გაფანტვის განივკვეთებისა ტოლია

$$\sigma = \sigma_s + \sigma_c = 2\pi\lambda^2 \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1)\,[1 - Re\, S_l].$$

2. აჩვენეთ, რომ ინტეგრალური განივკვეთი ტოლია

$$\sigma = \frac{4\pi}{k^2} F(0),$$

სადაც $F(0)$ გაფანტვის ამპლიტუდის მნიშვნელობაა $\Theta = 0$ კუთხეზე (ე. წ. ოპტიკური თეორემა).

3. აჩვენეთ, რომ ბორნის მიახლოებაში გაფანტვის ამპლიტუდა აკმაყოფილებს სიმეტრიის შემდეგ პირობას:

$$F(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = F^*(\mathbf{k}', \mathbf{k}).$$

4. იპოვეთ ინტეგრალური განივკვეთი ბორნის მიახლოებაში ნაწილაკისათვის, რომელიც იფანტება $V(r) = V_0 \dfrac{e^{-\alpha r}}{r}$ ველით (იუკავას პოტენციალი), სადაც V_0 და α პარამეტრებია.

პასუხი:

$$\sigma(\Theta)\,d\Omega = \frac{4\mu^2 |V_0|^2}{\hbar^4} \frac{d\Omega}{(\alpha^2+q^2)^2},$$

საიდანაც

$$\sigma = \frac{16\pi\mu^2 |V_0|^2}{\hbar^4 \alpha^2 (\alpha^2 + 4k^2)},$$

ამ გამოსახულებებში $q = 2k \sin\dfrac{\theta_c}{2}$. როცა α/k მცირეა, მაშინ დიფერენციალური განივკვეთი მიისწრაფვის სიდიდისაკენ

$$\sigma(\Theta)d\Omega \sim \left(\frac{V_0}{4E_c}\right)^2 \frac{d\Omega}{\sin^4\frac{\theta_c}{2}}$$

თავი XVII

დირაკის განტოლება

ამ ნაწილში ჩვენ განვიხილავთ რელატივისტურ კვანტურ მექანიკას. რელატივისტური კვანტური მექანიკა ჩამოყალიბებული იყო დირაკის მიერ. ეს მექანიკა სამართლიანია ნაწილაკის ნებისმიერი სიჩქარეებისათვის, ამასთან გათვალისწინებულია, რომ ბუნებაში არსებული ნაწილაკების სიჩქარე არ შეიძლება სინათლის სიჩქარეზე მეტი იყოს. დღეისათვის არსებული რელატივისტური კვანტური მექანიკა გამოიყენება მხოლოდ ელექტრონისა და პოზიტრონისათვის. ჯერ-ჯერობით ვერ მოხერხდა ისეთი განტოლების გამოყვანა, რომელიც სავსებით დაახასიათებდა ყველა ნახევარსპინიანი ნაწილაკის მოძრაობას.

§ 130. მეორე რიგის რელატივისტური განტოლება

როგორც ვიჩვენეთ, კვანტური მექანიკის ძირითადი განტოლება შეიძლება ასე დაიწეროს:

$$i\hbar\frac{\partial\psi(\mathbf{r},t)}{\partial t}=\hat{H}\psi(\mathbf{r},t), \tag{130,1}$$

რომელიც, როცა[1]

$$\hat{H}=\frac{1}{2m}\left(\hat{\mathbf{p}}+\frac{e}{c}\mathbf{A}\right)^2+V(\mathbf{r},t)-e\varphi, \tag{130,2}$$

წარმოადგენს შრედინგერის განტოლებას, ხოლო, როცა

$$\hat{H}=\frac{1}{2m}\left(\hat{\mathbf{p}}+\frac{e}{c}\mathbf{A}\right)^2+V(\mathbf{r},t)-e\varphi+\frac{e\hbar}{2mc}(\sigma\mathcal{H}), \tag{130,3}$$

გამოხატავს პაულის განტოლებას. პაულის განტოლების შემთხვევაში ტალღური ფუნქცია შედგება ორი კომპონენტისაგან

$$\psi=\begin{pmatrix}\psi_1\\ \psi_2\end{pmatrix}; \tag{130,4}$$

პაულის განტოლებას შრედინგერის განტოლებასთან შედარებით ის უპირატესობა აქვს, რომ მასში გათვალისწინებულია სპინი. ორივე განტოლებას კი აქვს საერთო ნაკლი — ისინი რელატივისტურად ინვარიანტული არ არიან, ე. ი. არ გამოდგებიან ისეთი ნაწილაკებისათვის, რომლებიც მოძრაობენ დიდი, სინათლის სიჩქარესთან ახლო, სიჩქარეებით. რელატივისტური ინვარიანტობის მოთხოვნა კი,

[1] ვიხილავთ უარყოფითი მუხტის მქონე ელექტრონს.

როგორც ვიცით, არსებითია ბუნების კოელენათა სწორად აღწერისათვის. ფიზიკურად გასაგებია, რომ მოძრაობის განტოლებას ერთი და იგივე სახე უნდა ჰქონდეს ლორენცის სხვადასხვა ათვლის სისტემაში.

ამგვარად, აღნიშნული ორი განტოლების გარდა უნდა არსებობდეს მესამე განტოლება, რომელიც რელატივისტურად ინვარიანტული იქნება და რომლიდანაც, როგორც კერძო შემთხვევა, მიიღება როგორც შრედინგერის, ისე პაულის განტოლება.

ასეთი რელატივისტურად ინვარიანტული განტოლების მოძებნა კვანტური მექანიკის ჩამოყალიბების პირველი დღეებიდანვე დაიწყო. მრავალი განტოლება იყო დაწერილი, მაგრამ არც ერთი მათგანი არ იყო თავისუფალი მთელი რიგი პრინციპული სიძნელეებისაგან. უველაზე უფრო ბუნებრივი გზით ასეთი განტოლება მიღებული იყო კლაინისა და გორდონის, აგრეთვე შრედინგერის მიერ. ამ განტოლებას კლაინ-გორდონის განტოლებას უწოდებენ.

კლაინ-გორდონის განტოლება. ვნახოთ, როგორ გამოიყვანება ეს განტოლება. ჯერ განვიხილოთ თავისუფალი ელექტრონის შემთხვევა. (130,1) განტოლება რომ ინვარიანტული არ არის ლორენცის გარდაქმნების მიმართ

$$x=\frac{x'+vt'}{\sqrt{1-\beta^2}};\ y=y';\ z=z';\ t=\frac{t'+\frac{v}{c^2}x'}{\sqrt{1-\beta^2}}\qquad \left(\beta=\frac{v}{c}\right) \tag{130,5}$$

იქიდანაც ჩანს, რომ ამ გარდაქმნებში დრო და სივრცე შედის ეკვივალენტურად, იმ დროს, როდესაც (130,1) განტოლება დროითი წარმოებულის მიმართ პირველი რიგისაა, კოორდინატთა წარმოებულის მიმართ კი — მეორე რიგისა.

(130,1) განტოლება არც უნდა იყოს რელატივისტურად ინვარიანტული, რადგან მისი მიღების დროს ჩვენ გამოვედით ენერგიის არარელატივისტური ფორმულიდან

$$E=\frac{\mathbf{p}^2}{2m}+V(\mathbf{r},t). \tag{130,6}$$

თუ გვინდა გავითვალისწინოთ რელატივისტური ეფექტები, მაშინ ენერგიისათვის უნდა ავიღოთ არა (130,6), არამედ აინშტაინის რელატივისტური ფორმულა

$$\frac{E^2}{c^2}=m^2c^2+p^2 \tag{130,7}$$

და გადავიდეთ კვანტურ მექანიკაზე, რისთვისაც საჭიროა ენერგია და იმპულსი შევცვალოთ სათანადო ოპერატორებით

$$\hat{\mathbf{p}}=-i\hbar\nabla,\quad \hat{E}=i\hbar\frac{\partial}{\partial t} \tag{130,8}$$

თუ ამის შემდეგ ვიმოქმედებთ ტალღურ ფუნქციაზე მივიღებთ

$$\left\{\Delta-\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2}-\left(\frac{mc}{\hbar}\right)^2\right\}\psi=0. \tag{130,9}$$

სიდიდე $\frac{\hbar}{mc}=\lambda\!\!\!^{-}_c$ კომპტონის ტალღის სიგრძეა. მისი შებრუნებული სიდიდე აღვნიშნოთ $\varkappa$-თი, ე. ი.

$$\varkappa=\frac{1}{\lambda\!\!\!^{-}_c}=\frac{mc}{\hbar}. \tag{130,10}$$

(130,9) განტოლება მიიღებს სახეს

$$(\square - \varkappa^2)\psi = 0, \tag{130,11}$$

სადაც $\square$ არის დალამბერის ოპერატორი. მიღებულ განტოლებას ეწოდება კლაინ-გორდონის განტოლება[1]. რადგან ამ განტოლებაში დრო და სივრცე შედის ეკვივალენტურად, ამიტომ იგი აკმაყოფილებს რელატივისტური ინვარიანტობის პირობას. მიუხედავად ამისა, ეს განტოლება მაინც არ წარმოადგენს ელექტრონის მოძრაობის განტოლებას. ელექტრონს გააჩნია ნახევრის ტოლი სპინი, რის გამოც ტალღური ფუნქცია ორკომპონენტიანი უნდა იყოს იმ დროს, როდესაც (130,11) განტოლებაში გვაქვს მხოლოდ ერთი ტალღური ψ ფუნქცია. უფრო მეტიც, ამ განტოლებიდან გამოთვლილი სიმკვრივე არც კი აკმაყოფილებს იმ აუცილებელ პირობას, რომ იგი ყველგან დადებითი სიდიდე იყოს. მართლაც, ვიპოვოთ უწყვეტობის განტოლება და დავადგინოთ ალბათობის სიმკვრივის სახე. მოვითხოვოთ, რომ უწყვეტობის განტოლებას ჰქონდეს (31,5) გამოსახულება. ავიღოთ (130,9)-ის კომპლექსურად შეუღლებული განტოლება

$$\left(\Delta - \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2} - \varkappa^2\right)\psi^* = 0. \tag{130,12}$$

(130,9) მარცხნიდან გავამრავლოთ ψ^*-ზე, (130,12) კი — ψ-ზე და ავიღოთ მათი სხვაობა. მივიღებთ

$$\frac{1}{c^2}\left\{\psi\frac{\partial^2\psi^*}{\partial t^2} - \psi^*\frac{\partial^2\psi}{\partial t^2}\right\} + \{\psi^*\Delta\psi - \psi\Delta\psi^*\} = 0. \tag{130,13}$$

ეს უკანასკნელი შეგვიძლია შემდეგნაირად გადავწეროთ:

$$\frac{1}{c^2}\frac{\partial}{\partial t}\left\{\psi\frac{\partial\psi^*}{\partial t} - \psi^*\frac{\partial\psi}{\partial t}\right\} + \operatorname{div}\{\psi^*\nabla\psi - \psi\nabla\psi^*\} = 0. \tag{130,14}$$

ამ გამოსახულების $-\frac{i\hbar}{2m}$ სიდიდეზე გამრავლების შემდეგ გვექნება

$$\frac{\partial}{\partial t}\left\{\frac{i\hbar}{2mc^2}\left(\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial t} - \psi\frac{\partial\psi^*}{\partial t}\right)\right\} + \operatorname{div}\left\{\frac{i\hbar}{2m}(\psi\nabla\psi^* - \psi^*\nabla\psi)\right\} = 0. \tag{130,15}$$

დენის ვექტორი ისევე განვმარტოთ, როგორც შრედინგერის თეორიაში, ე. ი.

$$\mathbf{J} = \frac{i\hbar}{2m}(\psi\nabla\psi^* - \psi^*\nabla\psi). \tag{130,16}$$

მაშინ (130,15) განტოლება შეგვიძლია დავწეროთ (31,5) უწყვეტობის განტოლების სახით

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} + \operatorname{div}\mathbf{J} = 0, \tag{130,17}$$

სადაც

$$\rho = \frac{i\hbar}{2mc^2}\left(\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial t} - \psi\frac{\partial\psi^*}{\partial t}\right). \tag{130,18}$$

---

[1] O. Klein, Zeits. f. phys. 37, 895, (1926); W. Gordon, Zeits. f. Phys. 40, 117, (1926). იგივე განტოლება მიღებული იყო ვ. ფოკის მიერაც. В. А. Фок, Zeits. f. Phys. 38, 242, (1926), 39, 226 (1926).

ასრულებს ალბათობის სიმკვრივის როლს. (130,18) გამოსახულებიდან ჩანს, რომ იგი შეიძლება იყოს როგორც დადებითი, ისე უარყოფითი. მართლაც, კლაინ გორდონის განტოლება დროის მიმართ მეორე რიგის განტოლებაა, ამიტომ საწყისი პირობებით უნდა განისაზღვროს როგორც ψ, ისე $\frac{\partial \psi}{\partial t}$. ამ ორი ნებისმიერი სიდიდის შერჩევით კი ρ შეგვიძლია გავხადოთ როგორც დადებითი, ისე უარყოფითი. ამიტომაც შეუძლებელია ρ განხილულ იქნეს როგორც ალბათობის სიმკვრივე. ამასთან, აღნიშნულ გარემოებას ადგილი ექნება მაშინაც კი, თუ შევცვლით დენის ვექტორის განმარტებას. ρ-ში ყოველთვის შევა როგორც ψ, ისე $\frac{\partial \psi}{\partial t}$ და, ამიტომ იგი ყოველთვის არ იქნება დადებითი სიდიდე. ეს გარემოება გვიჩვენებს, რომ მოძრაობის განტოლებაში არ შეიძლება შედიოდეს დროის პირველზე მეტი რიგის წარმოებული. ეს გამომდინარეობს კვანტური მექანიკის ძირითადი მოთხოვნიდანაც, რომ ψ ფუნქციის მნიშვნელობა $t=0$ მომენტში უნდა განსაზღვრავდეს ფუნქციის მნიშვნელობას $t>0$ მომენტებში. კლაინ-გორდონის განტოლებაში კი გვაქვს დროის მეორე რიგის წარმოებული; ამიტომ გარდა $\psi(0)$-ისა მოცემული უნდა იყოს აგრეთვე $\left(\frac{\partial \psi}{\partial t}\right)_{t=0}$ მნიშვნელობაც.

ამგვარად, სასურველი განტოლება წრფივი უნდა იყოს დროითი წარმოებულის მიმართ. მეორე მხრივ, რელატივისტური ინვარიანტობის პირობა მოითხოვს, რომ განტოლებაში დრო და სივრცე შედიოდეს სიმეტრიულად; მაშასადამე, რელატივისტური განტოლება წრფივი უნდა იყოს როგორც დროის, ისე კოორდინატების წარმოებულების მიმართ. აქედან გამომდინარეობს, რომ მოძრაობის განტოლების დროითი და სივრცითი წარმოებულების მიმართ სიმეტრიზაციის მიზნით დროითი წარმოებულის რიგი კი არ უნდა ავამაღლოთ არამედ, პირიქით, სივრცული წარმოებულის რიგი უნდა დავწიოთ; გარდა ამისა, თუ გვინდა სპინის გათვალისწინებაც, მდგომარეობა უნდა დავახასიათოთ რამდენიმე ტალღური ფუნქციით. ასეთნაირად იყო ამოცანა დასმული და გადაწყვეტილი დირაკის მიერ 1928 წელს [1].

§ 131. დირაკის განტოლება თავისუფალი ელექტრონისათვის

დირაკის მატრიცები. ამგვარად დირაკის მიზანს შეადგენდა მოეხდინა

$$\left(\frac{\hat{E}^2}{c^2} - \hat{p}_x^2 - \hat{p}_y^2 - \hat{p}_z^2 - m^2 c^2\right)\psi = 0 \qquad (131,1)$$

მეორე რიგის განტოლების გაწრფივება.

ცხადია, საკითხი დაიყვანება ისეთი ორი $\hat{D}_1$ და $\hat{D}_2$ წრფივი ოპერატორის მოძებნაზე, რომ მათი ნამრავლი გაუტოლდეს

$$\hat{D}_1 \hat{D}_2 = \frac{\hat{E}^2}{c^2} - \hat{p}_x^2 - \hat{p}_y^2 - \hat{p}_z^2 - m^2 c^2; \qquad (131,2)$$

[1] P. A. M. Dirac, Proc. Roy. Soc. A 117, 610, (1928).

ამ ტოლობას ადვილად დავაკმაყოფილებთ, თუ დავწერთ:

$$\hat{D}_1\hat{D}_2=\left(\frac{\hat{E}}{c}-\alpha_1\hat{p}_x-\alpha_2\hat{p}_y-\alpha_3\hat{p}_z-\alpha_4 mc\right)\left(\frac{\hat{E}}{c}+\alpha_1\hat{p}_x+\alpha_2\hat{p}_y+\alpha_3\hat{p}_z+\alpha_4 mc\right),$$

სადაც α_1, α_2, α_3, α_4 დროსა და კოორდინატებს არ შეიცავს და ამიტომ კომუტატურებია როგორც $\hat{E}$, ისე $\hat{p}_x$, $\hat{p}_y$, $\hat{p}_z$ ოპერატორებთან. ამასთან, ეს სიდიდეები ისე უნდა შევარჩიოთ, რომ დაცული იყოს (131,2) პირობა. ამგვარად, α_1, α_2, α_3, α_4 ოპერატორების განსასაზღვრავად გვაქვს განტოლება

$$\left(\frac{\hat{E}}{c}-\alpha_1\hat{p}_x-\alpha_2\hat{p}_y-\alpha_3\hat{p}_z-\alpha_4 mc\right)\left(\frac{\hat{E}}{c}+\alpha_1\hat{p}_x+\alpha_2\hat{p}_y+\alpha_3\hat{p}_z+\alpha_4 mc\right)=$$

$$=\frac{\hat{E}^2}{c^2}-\hat{p}_x^2-\hat{p}_y^2-\hat{p}_z^2-m^2c^2.$$

ამ გამოსახულების გადამრავლებით და მარცხნივ და მარჯვნივ შესაბამისი კოეფიციენტების გატოლებით მივიღებთ:

$$\alpha_1^2=\alpha_2^2=\alpha_3^2=\alpha_4^2=1, \tag{131,3}$$

$$\alpha_1\alpha_2+\alpha_2\alpha_1=0,\quad \alpha_2\alpha_3+\alpha_3\alpha_2=0,$$

$$\alpha_1\alpha_3+\alpha_3\alpha_1=0,\quad \alpha_2\alpha_4+\alpha_4\alpha_2=0, \tag{131,4}$$

$$\alpha_1\alpha_4+\alpha_4\alpha_1=0,\quad \alpha_4\alpha_3+\alpha_3\alpha_4=0.$$

სულ გვექნება ათი პირობა. ეს ტოლობები მოკლედ შეიძლება ასე დავწეროთ:

$$\alpha_i\alpha_k+\alpha_k\alpha_i=2\delta_{ik},\quad (i,\ k=1,\ 2,\ 3,\ 4). \tag{131,5}$$

იმ შემთხვევაში, როცა $i=k$, მივიღებთ (131,3) პირობას, ხოლო, როცა $i\neq k$, გვექნება (131,4) ტოლობები. (131,5) გამოსახულებას ხშირად დირაკის პირობებსაც უწოდებენ. (131,4) პირობები გვიჩვენებს, რომ α სიდიდეები ერთმანეთთან ანტიკომუტატურებია, ე. ი. $\alpha_i\alpha_k=-\alpha_k\alpha_i$ $(i\neq k)$. დირაკის პირობებს უბრალო რიცხვები ვერ დააკმაყოფილებს. ამ პირობების დაკმაყოფილება მხოლოდ მატრიცებით შეიძლება. ჩვენი მიზანია ამ მატრიცების მონახვა. § 93-ში განხილული პაულის მატრიცები

$$\sigma_x^0=\begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix},\quad \sigma_y^0=\begin{pmatrix}0 & -i\\ i & 0\end{pmatrix},\quad \sigma_z^0=\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix} \tag{131,6}$$

(131,5) პირობებს აკმაყოფილებს (იხ. ფორმულა (93,5)), მაგრამ ჩვენ გვჭირდება ოთხი მატრიცა, პაულის მატრიცები კი სულ სამია. მეოთხე მატრიცად შეგვეძლო აგვეღო ერთეულოვანი მატრიცა, მაგრამ ამ შემთხვევაში დაცული იქნებოდა მხოლოდ (131,3) პირობა; (131,4) პირობებს კი ვერ დავაკმაყოფილებდით, რადგან ერთეულოვანი მატრიცა კომუტატურია ნებისმიერ მატრიცასთან. მტკიცდება[1], რომ პაულის სამი მატრიცა და ერთეულოვანი მატრიცა წრფივად დამოუკიდებელია და ადგენს სრულ სისტემას, ე. ი. ნებისმიერი მეოთხე რანგის მატრიცა შეგვეძლია წარმოვიდგინოთ როგორც ამ ოთხი მატრიცის წრფივი კომბინაცია. ამიტომ

[1] ამის შესახებ იხილეთ § 138 და ამოცანა ამ პარაგრაფის ბოლოს.

შეუძლებელია ისეთი სხვა მეორე რანგის მატრიცის მონახვა, რომელიც ანტიკომუტატური იქნება პაულის მატრიცებთან, ხოლო მისი კვადრატი მოგვცემს ერთს. ამგვარად, დირაკის პირობების დაკმაყოფილება მეორე რანგის მატრიცებით შეუძლებელია. შეიძლება ჩვენება, რომ დირაკის პირობებს დაკმაყოფილებს მხოლოდ მეოთხე რანგის მატრიცები [1]. განვიხილოთ შემდეგი მეოთხე რანგის მატრიცები:

$$\sigma_1=\begin{pmatrix}\sigma_x^0 & 0\\ 0 & \sigma_x^0\end{pmatrix},\quad \sigma_2=\begin{pmatrix}\sigma_y^0 & 0\\ 0 & \sigma_y^0\end{pmatrix},\quad \sigma_3=\begin{pmatrix}\sigma_z^0 & 0\\ 0 & \sigma_z^0\end{pmatrix} \tag{131,7}$$

ან, მოკლედ,

$$\sigma=\begin{pmatrix}\sigma^0 & 0\\ 0 & \sigma^0\end{pmatrix}. \tag{131,8}$$

ჩვენ აქ შემოვიღეთ აღნიშვნები $\sigma=(\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3)$ და $\sigma^0=(\sigma_x^0, \sigma_y^0, \sigma_z^0)$. ამ ფორმულებში σ_x^0, σ_y^0, σ_z^0 პაულის მეორე რანგის მატრიცებია და 0-იც ისევე უნდა განვიხილოთ როგორც მეორე რანგის ნულოვანი მატრიცა. ასე რომ σ_1, σ_2, σ_3 მატრიცებს ექნება შემდეგი სახე:

$$\sigma_1=\begin{pmatrix}0&1&0&0\\1&0&0&0\\0&0&0&1\\0&0&1&0\end{pmatrix},\quad \sigma_2=\begin{pmatrix}0&-i&0&0\\i&0&0&0\\0&0&0&-i\\0&0&i&0\end{pmatrix},\quad \sigma_3=\begin{pmatrix}1&0&0&0\\0&-1&0&0\\0&0&1&0\\0&0&0&-1\end{pmatrix}; \tag{131,8'}$$

ამ მატრიცებს სპინურ მატრიცებს უწოდებენ. შემოვიღოთ კიდევ სამი მეოთხე რანგის მატრიცა ρ_1, ρ_2, ρ_3, რომლებიც შემდეგნაირად არიან განმარტებული:

$$\rho_1=\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix},\quad \rho_2=\begin{pmatrix}0&-i\\i&0\end{pmatrix},\quad \rho_3=\begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix}. \tag{131,9}$$

ეს მატრიცები გარეგნულად იგივე პაულის მატრიცებია, ოღონდ თითოეული ელემენტის მაგიერ უნდა შევიტანოთ ამ ელემენტის წარმოდგენა მეორე რანგის დიაგონალური მატრიცის სახით. ამიტომ ρ მატრიცებისათვის გვექნება

$$\rho_1=\begin{pmatrix}0&0&1&0\\0&0&0&1\\1&0&0&0\\0&1&0&0\end{pmatrix},\quad \rho_2=\begin{pmatrix}0&0&-i&0\\0&0&0&-i\\i&0&0&0\\0&i&0&0\end{pmatrix},\quad \rho_3=\begin{pmatrix}1&0&0&0\\0&1&0&0\\0&0&-1&0\\0&0&0&-1\end{pmatrix}. \tag{131,10}$$

ადვილად შემოწმდება, რომ σ და ρ მატრიცები აკმაყოფილებს დირაკის პირობებს, ერთმანეთთან კი კომუტატური არიან, ე. ი.

$$\rho_i\rho_k+\rho_k\rho_i=2\delta_{ik},\quad \sigma_i\sigma_k+\sigma_k\sigma_i=2\delta_{ik}, \tag{131,11}$$

$$\sigma_i\rho_k=\rho_k\sigma_i. \tag{131,12}$$

ასევე ადვილად ვაჩვენებთ, რომ დირაკის პირობებს აკმაყოფილებს არა მხოლოდ σ_1, σ_2, σ_3 და ρ_1, ρ_2, ρ_3 მატრიცები, არამედ ამ მატრიცებისაგან შედგენილი $\sigma_i\rho_k$ ($i, k=1, 2, 3$) ნამრავლებიც. ერთეულოვან მატრიცასთან ერთად σ_1, σ_2, σ_3, ρ_1, ρ_2, ρ_3 და $\sigma_i\rho_k$ ნამრავლის ტიპის თხუთმეტი მატრიცა ადგენს სრულ სისტემას.

---

[1] ის გარემოება, რომ ამ მატრიცების რანგი უსათუოდ ლუწია, დამტკიცებულია ამ პარაგრაფის ბოლოს განსხილულ მაგალითში.

ამგვარად, ჩვენ შეგვიძლია იმ თხუთმეტი მატრიციდან ავარჩიოთ ჩვენთვის საჭირო ოთხი მატრიცა. მატრიცების ამ შერჩევას წარმოდგენის შერჩევას უწოდებენ. მეტად ხელსაყრელია ისეთი წარმოდგენის შერჩევა, რომელშიაც α_4 მატრიცა დიაგონალურია. ასეთია, მაგალითად, დირაკის წარმოდგენა, რომელშიაც α_1, α_2, α_3, α_4 მატრიცები შემდეგნაირად განისაზღვრება:

$$\alpha_1=\rho_1\sigma_1;\ \alpha_2=\rho_1\sigma_2;\ \alpha_3=\rho_1\sigma_3;\ \alpha_4=\rho_3 \tag{131,13}$$

ან, მოკლედ,

$$\alpha=\rho_1\sigma;\quad \alpha_4=\rho_3, \tag{131,13′}$$

სადაც $\alpha=(\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3)$[1]. ასეთნაირად შერჩეული დირაკის მატრიცები აკმაყოფილებს (131,5) პირობებს. მართლაც, ρ და σ მატრიცების თვისებების გამოყენებით გვაქვს

$$\alpha_i^2=\rho_1\sigma_i\rho_1\sigma_i=\rho_1^2\sigma_i^2=1.\quad (i=1,\ 2,\ 3),$$

$$\alpha_4^2=\rho_3^2=1.$$

ასევე, როცა $i\neq k$ $(i,\ k=1,\ 2,\ 3)$, მივიღებთ

$$\alpha_i\alpha_k+\alpha_k\alpha_i=\rho_1\sigma_i\rho_1\sigma_k+\rho_1\sigma_k\rho_1\sigma_i=\rho_1^2(\sigma_i\sigma_k+\sigma_k\sigma_i)=0$$

და

$$\alpha_i\alpha_4+\alpha_4\alpha_i=\rho_1\sigma_i\rho_3+\rho_3\rho_1\sigma_i=(\rho_1\rho_3+\rho_3\rho_1)\sigma_i=0.$$

ამგვარად, ჩვენს მიერ შერჩეული α მატრიცები, მართლაც აკმაყოფილებს დირაკის პირობებს.

მატრიცათა გამრავლების წესის გამოყენებით ადვილად დავადგენთ α მატრიცების კონკრეტულ სახეს; სახელდობრ,

$$\alpha_1=\begin{pmatrix}0&0&0&1\\0&0&1&0\\0&1&0&0\\1&0&0&0\end{pmatrix},\quad \alpha_2=\begin{pmatrix}0&0&0&-i\\0&0&i&0\\0&-i&0&0\\i&0&0&0\end{pmatrix},\quad \alpha_3=\begin{pmatrix}0&0&1&0\\0&0&0&-1\\1&0&0&0\\0&-1&0&0\end{pmatrix},$$

$$\alpha_4=\begin{pmatrix}1&0&0&0\\0&1&0&0\\0&0&-1&0\\0&0&0&-1\end{pmatrix} \tag{131,14}$$

შევნიშნოთ, რომ α_4-ს (ან, რაც იგივეა, ρ_3) ხშირად β მატრიცასაც უწოდებენ. $\alpha(\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3)$ მატრიცები ფორმალურად ასე შეგვიძლია წარმოვადგინოთ:

$$\alpha=\begin{pmatrix}0&\sigma^0\\\sigma^0&0\end{pmatrix}. \tag{131,15}$$

ადვილად შევამოწმებთ, რომ ყველა ჩვენს მიერ შემოღებული მატრიცა ერმიტულია და მათი საკუთარი მნიშვნელობები ±1-ის ტოლია.

ცხადია, რომ α მატრიცების შერჩევამ ფიზიკურ შედეგებზე არავითარი გავლენა არ უნდა მოახდინოს. თუ ავიღებთ α მატრიცების სხვა წარმოდგენას, ფიზიკური სიდიდეების მნიშვნელობები ამ შერჩევაზე დამოკიდებული არ უნდა იყოს. ამ საკითხს შემდგომში განვიხილავთ.

---

1 § 138-ში ვაჩვენებთ, რომ σ, α, σ^0 სიდიდეები, მართლაც, ვექტორებს წარმოადგენს.

დირაკის განტოლება. ამგვარად, ჩვენ მოვახდინეთ (131,1) განტოლების გაწრფივება და მივიღეთ ორი ოპერატორი:

$$D_1 = \frac{\hat{E}}{c} - (\alpha \hat{\mathbf{p}}) - \alpha_4 mc, \tag{131,16}$$

$$D_2 = \frac{\hat{E}}{c} + (\alpha \hat{\mathbf{p}}) + \alpha_4 mc. \tag{131,17}$$

სადაც შემოვიღეთ შემოკლებული ჩაწერა $(\alpha\hat{\mathbf{p}}) = \alpha_1 \hat{p}_x + \alpha_2 \hat{p}_y + \alpha_3 \hat{p}_z$. ეს ორი ოპერატორი ერთმანეთზე დაიყვანება $\alpha_\mu \to -\alpha_\mu$ შეცვლით ($\mu = 1, 2, 3, 4$). ასეთი შეცვლის დროს კი დირაკის (131,5) პირობა არ იცვლება. ამიტომ ორივე ოპერატორი D_1 და D_2 ეკვივალენტურ ფიზიკურ შედეგებს მოგვცემს. ჩვენ ავირჩიოთ D_1 ოპერატორი და დირაკის განტოლება თავისუფალი ელექტრონისათვის ვუწოდოთ $D_1\psi = 0$ განტოლებას, ე. ი.

$$\left\{ \frac{\hat{E}}{c} - (\alpha\hat{\mathbf{p}}) - \alpha_4 mc \right\} \psi = 0 \tag{131,18}$$

განტოლებას, თუმცა ზოგჯერ ირჩევენ $D_2\psi = 0$ განტოლებასაც. თუ გავიხსენებთ, რომ $\hat{E} = i\hbar \dfrac{\partial}{\partial t}$, მაშინ (131,18) განტოლება შეიძლება შემდეგი სახითაც ჩავწეროთ:

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H}\psi, \tag{131,19}$$

სადაც

$$\hat{H} = c(\alpha\hat{\mathbf{p}}) + \alpha_4 mc^2 \tag{131,20}$$

წარმოადგენს თავისუფალი ელექტრონის რელატივისტურ ჰამილტონიანს.

რადგან α_1, α_2, α_3, α_4 მატრიცები მეოთხე რანგის მატრიცებია, ამიტომ ψ ფუნქციაც ოთხი კომპონენტისაგან უნდა შედგებოდეს, რის გამოც ψ ფუნქცია შეგვიძლია განვიხილოთ როგორც ერთსვეტიანი მატრიცა

$$\psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix}. \tag{131,21}$$

დაგვჭირდება აგრეთვე ψ^+ ფუნქციაც, რომელიც შეუღლებული მატრიცის განმარტების თანახმად, განისაზღვრება ერთსტრიქონიანი მატრიცით

$$\psi^+ = (\psi_1^* \; \psi_2^* \; \psi_3^* \; \psi_4^*). \tag{131,22}$$

ამ ოთხკომპონენტიან ფუნქციას ბისპინორს უწოდებენ. ცხადია, რომ $\psi^+\psi$ ნამრავლი მატრიცათა გამრავლების წესის თანახმად ასე გამოიხატება:

$$\psi^+\psi = \psi_1^*\psi_1 + \psi_2^*\psi_2 + \psi_3^*\psi_3 + \psi_4^*\psi_4 = \sum_{i=1}^{4} |\psi_i|^2 \tag{131,23}$$

ამგვარად, დირაკის განტოლებას გაშლილად ექნება სახე

$$\left\{\begin{pmatrix}1&0&0&0\\0&1&0&0\\0&0&1&0\\0&0&0&1\end{pmatrix} i\hbar\frac{\partial}{\partial t}+i\hbar c\left[\begin{pmatrix}0&0&0&1\\0&0&1&0\\0&1&0&0\\1&0&0&0\end{pmatrix}\frac{\partial}{\partial x}+\begin{pmatrix}0&0&0&-i\\0&0&i&0\\0&-i&0&0\\i&0&0&0\end{pmatrix}\frac{\partial}{\partial y}+\right.\right.$$

$$\left.\left.+\begin{pmatrix}0&0&1&0\\0&0&0&-1\\1&0&0&0\\0&-1&0&0\end{pmatrix}\frac{\partial}{\partial z}\right]-mc^2\begin{pmatrix}1&0&0&0\\0&1&0&0\\0&0&-1&0\\0&0&0&-1\end{pmatrix}\right\}\begin{pmatrix}\psi_1\\\psi_2\\\psi_3\\\psi_4\end{pmatrix}=0. \quad (131,24)$$

თუ ამ მატრიცებს შევკრებთ (სათანადო ელემენტების შეკრებით), მივიღებთ მეოთხე რანგის ერთ მატრიცას. იგი მრავლდება ოთხი ელემენტისაგან შემდგარ სვეტზე. გამრავლების ოპერაციის ჩატარების შემდეგ მივიღებთ მატრიცას, რომელიც შედგება ერთი სვეტისაგან. რადგან მიღებული მატრიცა უდრის ნულს, ამიტომ ყოველი მისი ელემენტი უნდა უდრიდეს ნულს. აქედან ჩვენ მივიღებთ შემდეგ ოთხ განტოლებას:

$$\begin{aligned}
&i\hbar\frac{\partial\psi_1}{\partial t}+i\hbar c\frac{\partial\psi_4}{\partial x}+\hbar c\frac{\partial\psi_4}{\partial y}+i\hbar c\frac{\partial\psi_3}{\partial z}-mc^2\psi_1=0,\\
&i\hbar\frac{\partial\psi_2}{\partial t}+i\hbar c\frac{\partial\psi_3}{\partial x}-\hbar c\frac{\partial\psi_3}{\partial y}-i\hbar c\frac{\partial\psi_4}{\partial z}-mc^2\psi_2=0,\\
&i\hbar\frac{\partial\psi_3}{\partial t}+i\hbar c\frac{\partial\psi_2}{\partial x}+\hbar c\frac{\partial\psi_2}{\partial y}+i\hbar c\frac{\partial\psi_1}{\partial z}+mc^2\psi_3=0,\\
&i\hbar\frac{\partial\psi_4}{\partial t}+i\hbar c\frac{\partial\psi_1}{\partial x}-\hbar c\frac{\partial\psi_1}{\partial y}-i\hbar c\frac{\partial\psi_2}{\partial z}+mc^2\psi_4=0.
\end{aligned} \quad (131,24')$$

ამგვარად, დირაკის განტოლება ეკვივალენტური ყოფილა პირველი რიგის ოთხი განტოლებისაგან შედგენილი სისტემისა; § 142-ში გამოვარკვევთ, თუ რა ფიზიკური აზრი შეესაბამება თითოეულ ψ_1, ψ_2, ψ_3, ψ_4 კომპონენტს.

ვაჩვენოთ, რომ დირაკის განტოლება შეიძლება წარმოვადგინოთ ორი ორკომპონენტიანი განტოლების სახითაც. მართლაც, რადგან α მატრიცები შეგვიძლია განვიხილოთ როგორც ორკომპონენტიანი მატრიცები, ამიტომ გვექნება

$$\left\{\hat{E}\begin{pmatrix}1&0\\0&1\end{pmatrix}-c\begin{pmatrix}0&(\sigma^0\hat{\mathbf{p}})\\(\sigma^0\hat{\mathbf{p}})&0\end{pmatrix}-mc^2\begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix}\right\}\begin{pmatrix}\Phi\\\chi\end{pmatrix}=0, \quad (131,25)$$

სადაც

$$\Phi=\begin{pmatrix}\psi_1\\\psi_2\end{pmatrix} \quad \text{და} \quad \chi=\begin{pmatrix}\psi_3\\\psi_4\end{pmatrix} \quad (131,26)$$

წარმოადგენს სპინორებს. თუ გაეშლით ამ განტოლებას, მივიღებთ სისტემას:

$$i\hbar\frac{\partial\Phi}{\partial t}=c(\sigma^0\hat{\mathbf{p}})\chi+mc^2\Phi, \quad (131,27)$$

$$i\hbar\frac{\partial\chi}{\partial t}=c(\sigma^0\hat{\mathbf{p}})\Phi-mc^2\chi. \quad (131,28)$$

კანონიკური გარდაქმნები. დაეუშვათ, რომ ავარჩიეთ α_1, α_2, α_3, α_4 მატრიცები. შემოვიღოთ S უნიტარული მატრიცა $S^+S = SS^+ = 1$ და განვისილოთ გარდაქმნები $S\alpha_i S^+$. ასეთი გარდაქმნის შედეგად მივიღებთ რაღაც ახალ მატრიცას, რომელსაც აღვნიშნავთ α_i'-ით. ამგვარად,

$$\alpha_i' = S\alpha_i S^+ = S\alpha_i S^{-1}. \qquad (131{,}29)$$

ასეთი ტიპის გარდაქმნას კანონიკურ ანდა მსგავს გარდაქმნას უწოდებენ. ვაჩვენოთ, რომ დირაკის მატრიცები კანონიკური გარდაქმნების შემდეგ კვლავ დირაკის მატრიცებია, ე. ი. კვლავ აკმაყოფილებს (131,5) პირობას. მართლაც, S მატრიცის უნიტარულობისა და (131,29) ფორმულის ძალით გვექნება

$$\alpha_i'\alpha_k' + \alpha_k'\alpha_i' = S\alpha_i S^+ S\alpha_k S^+ + S\alpha_k S^+ S\alpha_i S^+ =$$
$$= S(\alpha_i\alpha_k + \alpha_k\alpha_i)S^+ = S\,2\delta_{ik}\,S^+ = 2\delta_{ik}\,SS^+ = 2\delta_{ik}.$$

ამგვარად, დირაკის პირობებს აკმაყოფილებს არა მხოლოდ α_i მატრიცები, არამედ მათგან კანონიკური გარდაქმნებით მიღებული მატრიცებიც.

სავარჯიშო მაგალითები

1. ვაჩვენოთ, რომ შეუძლებელია ისეთი მეორე რანგის მატრიცის მონახვა, რომელიც ანტიკომუტატური იქნებოდა პაულის σ_x^0, σ_y^0, σ_z^0 მატრიცებთან.

ამოხსნა. რადგან მეორე რანგის მატრიცას აქვს ოთხი ელემენტი, ამიტომ გვექნება მხოლოდ ოთხი წრფივად დამოუკიდებელი მატრიცა. აქედან, სამი არის პაულის σ_x^0, σ_y^0, σ_z^0 მატრიცა; ერთეულოვანი მატრიცა ასევე წრფივად დამოუკიდებელია ამ მატრიცებისაგან. რადგან სულ დამოუკიდებელი უნდა იყოს ოთხი მატრიცა, ამიტომ ერთეულოვანი მატრიცა წარმოადგენს ერთადერთ მეორე რანგის მატრიცას, რომელიც წრფივად დამოუკიდებელია σ_i^0-ზე. მაგრამ ერთეულოვანი მატრიცა კომუტატურია ნებისმიერ მატრიცასთან და, მაშასადამე, σ_x^0, σ_y^0, σ_z^0-თანაც, აქედან გამომდინარეობს, რომ მეოთხე ანტიკომუტატური მატრიცის პოვნა შეუძლებელია.

2. ვაჩვენოთ, რომ დირაკის მატრიცების რანგი უსათუოდ ლუწი უნდა იყოს.

ამოხსნა. გამოვიყენოთ დირაკის პირობა $\alpha_4\alpha_k$ მატრიცებისთვის

$$\alpha_4\alpha_k = -\alpha_k\alpha_4 = -I\alpha_k\alpha_4.$$

I არის ერთეულოვანი მატრიცა. ავიღოთ ამ ტოლობის დეტერმინანტები და გავითვალისწინოთ რომ ასინი რიცხვებია და შევგვძლია მათი გადასმა. მივიღებთ (რადგან $\det(-I) = (-1)^n$)

$$(\det\alpha_4)(\det\alpha_k) = (-1)^n(\det\alpha_k)(\det\alpha_4) = (-1)^n(\det\alpha_4)(\det\alpha_k);$$

აქ n მატრიცის რანგია. ამ ტოლობიდან კი გვაქვს $(-1)^n = 1$, რაც გვიჩვენებს, რომ n უნდა იყოს ლუწი რიცხვი. ამიტომ აშკარაა, რომ დირაკის პირობებს მესამე რანგის მატრიცები ვერ დააკმაყოფილებს.

3. ვაჩვენოთ, რომ კლაინ-გორდონის ალბათობის სიმკვრივიდან არარელატივისტურ ზღვარში მიიღება შრედინგერის თეორიაში განმარტებული $\rho = \psi^*\psi$ სიმკვრივე.

ამოხსნა. შევეხანოთ (130,18)-ში $i\hbar\dfrac{\partial}{\partial t} = \hat{E}$. გვექნება

$$\rho = \frac{E}{mc^2}\psi^*\psi,$$

სადაც E სრული ენერგიაა. არარელატივისტურ შემთხვევაში $E \simeq mc^2$ და მივიღებთ $\rho = \psi^*\psi$.

4. ვაჩვენოთ, რომ დირაკის განტოლებას აკმაყოფილებს არა მხოლოდ ψ, არამედ ფუნქციაც

$$F = \left(\frac{\hat{E}}{c} + (\alpha\hat{p}) + \alpha_4 mc\right)\psi.$$

5. დაწეროთ კლაინ-გორდონის განტოლება ველში მოძრავი ნაწილაკისათვის.

§ 132. დირაკის განტოლება ველში მოძრავი ელექტრონისათვის

დავუშვათ, ელექტრონი თავისუფალი კი არ არის, არამედ მოძრაობს ველში, რომელიც ხასიათდება $V(\mathbf{r}, t)$ პოტენციალური ენერგიით. ადვილად შეიძლება დირაკის განტოლება ამ შემთხვევისათვისაც განზოგადდეს ისევე, როგორც შრედინგერის განტოლების შემთხვევაში (იხ. § 36). ამისათვის საკმარისი იქნება $\hat{E}$ ოპერატორის შეცვლა $\hat{E} - V(\mathbf{r}, t)$ გამოსახულებით. ამგვარად, ურთიერთქმედების შემთხვევაში, დირაკის განტოლება დაიწერება სახით

$$\left\{\frac{\hat{E}}{c} - \frac{V(\mathbf{r}, t)}{c} - (\alpha\hat{\mathbf{p}}) - \alpha_4 mc\right\}\psi = 0. \qquad (132{,}1)$$

აქ E წარმოადგენს ელექტრონის სრულ ენერგიას. სათანადო ჰამილტონიანისათვის გვექნება

$$\hat{H} = c(\alpha\hat{\mathbf{p}}) + \alpha_4 mc^2 + V(\mathbf{r}, t). \qquad (131{,}2)$$

ახლა დავუშვათ, რომ ელექტრონი $\mathbf{A}$ და φ პოტენციალებით დახასიათებულ გარეშე ელექტრომაგნიტურ ველშიც იმყოფება. ამ შემთხვევაში დირაკის განტოლების დასაწერად საჭიროა $\hat{\mathbf{p}}$ იმპულსი შევცვალოთ $\left(\hat{\mathbf{p}} + \frac{e}{c}\mathbf{A}\right)$-თი, პოტენციალური ენერგია კი $V(r, t) \to V(r, t) - e\varphi$, ასე რომ, ჰამილტონიანისათვის მივიღებთ

$$\hat{H} = c\left(\alpha, \hat{\mathbf{p}} + \frac{e}{c}\mathbf{A}\right) + mc^2\alpha_4 + V(\mathbf{r}, t) - e\varphi, \qquad (132{,}3)$$

ხოლო დირაკის განტოლება ასე დაიწერება:

$$\left\{\left(\frac{\hat{E}}{c} + \frac{e}{c}\varphi - \frac{V(\mathbf{r}, t)}{c}\right) - \left(\alpha, \hat{\mathbf{p}} + \frac{e}{c}\mathbf{A}\right) - mc\alpha_4\right\}\psi = 0, \qquad (132{,}4)$$

თუ ელექტრონი მხოლოდ გარეშე ელექტრომაგნიტურ ველში იმყოფება, მაშინ $V(r, t) = 0$, და დირაკის განტოლებისათვის გვექნება

$$\left\{\left(\frac{\hat{E}}{c} + \frac{e}{c}\varphi\right) - \left(\alpha, \mathbf{p} + \frac{e}{c}\mathbf{A}\right) - mc\alpha_4\right\}\psi = 0; \qquad (132{,}5)$$

სათანადო ჰამილტონიანი კი შემდეგნაირად დაიწერება

$$\hat{H} = c\left(\alpha, \hat{\mathbf{p}} + \frac{e}{c}\mathbf{A}\right) + mc^2\alpha_4 - e\varphi. \qquad (132{,}6)$$

როგორც ცნობილია, ვექტორ და სკალარ პოტენციალები განსაზღვრულია გრადიენტის სიზუსტით, სახელდობრ,

$$A_i' = A_i + \frac{\partial f}{\partial x_i} \quad (i = 1, 2, 3, 4), \qquad (132{,}7)$$

სადაც f კოორდინატებისა და დროის ნებისმიერი ფუნქციაა, A_i პოტენციალის ოთხვექტორია $A_i = (\mathbf{A}, i\varphi)$, ხოლო $x_4 = ict$. (132,7) გაშლილად შემდეგნაირად დაიწერება

$$\mathbf{A}' = \mathbf{A} + \operatorname{grad} f \quad \text{და} \quad \varphi' = \varphi - \frac{1}{c}\frac{\partial f}{\partial t}; \qquad (132{,}7')$$

ასეთი გარდაქმნისას არ შეიცვლება არც ელექტრული და არც მაგნიტური ველის დაძაბულობა:

$$e\vec{\mathscr{H}} = \mathrm{rot}\,\mathbf{A},\quad \vec{\mathscr{E}} = -\,\mathrm{grad}\,\varphi - \frac{1}{c}\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t}. \tag{132,8}$$

ამიტომ არც დირაკის თეორიიდან გამომდინარე შედეგები უნდა იყოს დამოკიდებული φ და $\mathbf{A}$ პოტენციალების შერჩევაზე, ე. ი. დირაკის განტოლება ინვარიანტული იქნება (132,7′) გარდაქმნების მიმართ, ანდა, როგორც ამბობენ, დირაკის განტოლება უნდა იყოს გრადიენტულად ინვარიანტული. დირაკის განტოლების ინვარიანტობას (132,7) გარდაქმნის მიმართ შემდგომში დავამტკიცებთ.

§ 133. ალბათობისა და ალბათობის დენის სიმკვრივე

ვნახოთ, რა სახე აქვს უწყვეტობის განტოლებას დირაკის თეორიაში. იმ მიზნით დავწეროთ დირაკის განტოლება (j არის მუნჯი ინდექსი, ამ ინდექსით იგულისხმება აჯამვა)

$$i\hbar\frac{\partial \psi}{\partial t} + i\hbar c\alpha_j\frac{\partial \psi}{\partial x_j} - \alpha_4 mc^2\psi = 0,\quad (j = 1,\ 2,\ 3).$$

გავყოთ ეს განტოლება $i\hbar$-ზე

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} + c\alpha_j\frac{\partial \psi}{\partial x_j} + i\alpha_4\frac{mc^2}{\hbar}\psi = 0 \tag{133,1}$$

და ავიღოთ ამ განტოლების ერმიტულად შეუღლებული; გავიხსენოთ, რომ

$$(\hat{A}\,\hat{B})^+ = \hat{B}^+\,\hat{A}^+ \quad \text{და} \quad \alpha_j^+ = \alpha_j;$$

მივიღებთ

$$\frac{\partial \psi^+}{\partial t} + c\frac{\partial \psi^+}{\partial x_j}\alpha_j - i\frac{mc^2}{\hbar}\psi^+\alpha_4 = 0. \tag{133,2}$$

აქ გამოვიყენეთ $i^+ = i^* = -i$. (133,1) განტოლება მარცხნიდან გავამრავლოთ ψ^+-ზე, (133,2) კი — მარჯვნიდან ψ-ზე და შევკრიბოთ; გვექნება

$$\frac{\partial}{\partial t}(\psi^+\psi) + c\frac{\partial}{\partial x_j}(\psi^+\alpha_j\psi) = 0. \tag{133,3}$$

შემოვიღოთ აღნიშვნები

$$\rho = \psi^+\psi = \psi_1^*\psi_1 + \psi_2^*\psi_2 + \psi_3^*\psi_3 + \psi_4^*\psi_4 = \sum_{i=1}^{4}|\psi_i|^2 \tag{133,4}$$

და

$$\mathbf{J} = c\psi^+\alpha\psi. \tag{133,5}$$

ამ აღნიშვნებში (133.3) განტოლება მიიღებს სახეს

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \mathrm{div}\,\mathbf{J} = 0. \tag{133,6}$$

რომელიც უწყვეტობის განტოლებას წარმოადგენს. ჩვენ ვხედავთ, რომ დირაკის თეორიაში ალბათობის სიმკვრივე განისაზღვრება (133,4) ფორმულით, ალბათობის დენის სიმკვრივე კი — (133,5)-ით.

ამგვარად, ელექტრონის ერთეულოვან მოცულობაში მოხვედრის ალბათობა განისაზღვრება $\psi^+\psi$ გამოსახულებით. როგორც ვხედავთ, შრედინგერის თეორიი-

საგან განსხვავებით, დირაკის თეორიაში კომპლექსურად შეუღლებული ფუნქციის ნაცვლად გვაქვს ერმიტულად შეუღლებული ფუნქცია. თუ (133,4) და (133,5) ფორმულებს გავამრავლებთ ელექტრონის — e მუხტზე, სათანადოდ მივიღებთ მუხტის სიმკვრივესა და ელექტრული დენის სიმკვრივის ვექტორს.

აღსანიშნავია, რომ დენის ვექტორს, როცა ელექტრონი მოძრაობს ელექტრო-მაგნიტურ ველში, ფორმალურად სავსებით ისეთივე სახე ექნება, როგორიც თავისუფალი ნაწილაკისათვის, ე. ი. (133,5). განსხვავება იმაშია, რომ ელექტრო-მაგნიტურ ველში მოძრავი ელექტრონის შემთხვევაში ტალღური ψ ფუნქცია იქნება ამოხსნა დირაკის (132,5) განტოლებისა.

სავარჯიშო მაგალითები

1. გამოიყენეთ α მატრიცების ცხადი სახე და იპოვეთ, როგორი ფორმულებით განისაზღვრება დენის ვექტორის მდგენელები J_x, J_y და J_z.

§ 134. დირაკის განტოლება γ მატრიცებში

დავწეროთ დირაკის განტოლება თავისუფალი ელექტრონისათვის

$$\left\{ i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} + i\hbar c\,(\alpha \nabla \psi) - \alpha_4 mc^2\,\psi \right\} = 0. \qquad (134,1)$$

ჩვენ ვხედავთ, რომ ამ განტოლებაში დროითი წარმოებული მატრიცაზე არ მრავლდება[1], იმ დროს, როდესაც სივრცითი წარმოებული გამრავლებულია დირაკის მატრიცაზე. სრული სიმეტრიის მიზნით ეს განტოლება ისე გადავწეროთ, რომ ყოველი წარმოებულის წინ იჯდეს მატრიცა. ამისათვის განტოლება ჯერ გავყოთ $\hbar c$-ზე, მივიღებთ

$$-\frac{1}{ic}\frac{\partial \psi}{\partial t} + i\alpha_j \frac{\partial \psi}{\partial x_j} - \alpha_4 \frac{mc}{\hbar}\,\psi = 0, \quad (j = 1,\ 2,\ 3), \qquad (134,2)$$

სადაც j წარმოადგენს მუნჯ ინდექსს. თუ შემოვიღებთ აღნიშვნას

$$x_4 = ict \quad \text{და} \quad \varkappa = \frac{mc}{\hbar} = \frac{1}{\lambda\!\!\!^{-}_c}, \qquad (134,3)$$

მაშინ (134,2) განტოლება ასე გადაიწერება:

$$-\frac{\partial \psi}{\partial x_4} + i\alpha_j \frac{\partial \psi}{\partial x_j} - \alpha_4 \varkappa \psi = 0. \qquad (134,3')$$

გავამრავლოთ ეს განტოლება მარცხნიდან $(-\alpha_4)$-ზე და გავითვალისწინოთ, რომ $\alpha_4^2 = 1$. გვექნება

$$\alpha_4 \frac{\partial \psi}{\partial x_4} - i\alpha_4 \alpha_j \frac{\partial \psi}{\partial x_j} + \varkappa \psi = 0. \qquad (134,4)$$

შემოვიღოთ ახალი მატრიცები

$$\gamma_4 = \alpha_4\ (= \beta = \rho_3), \quad \gamma_j = -i\alpha_4 \alpha_j = -i\rho_3 \rho_1 \sigma_j \qquad (134,5)$$

ან, ვექტორულად,

$$\gamma_4 = \beta, \quad \boldsymbol{\gamma} = -i\beta\boldsymbol{\alpha}. \qquad (134,5')$$

[1] იგულისხმება ერთეულოვანისაგან განსხვავებული მატრიცა.

ამ აღნიშვნებში დირაკის განტოლება მიიღებს სიმეტრიულ სახეს

$$\gamma_\nu \frac{\partial \psi}{\partial x_\nu} + \varkappa \psi = 0, \tag{134,6}$$

სადაც მუნჯი ინდექსი $\nu = 1, 2, 3, 4$.

γ მატრიცების ერმიტულობა გამომდინარეობს დირაკის α მატრიცების ერმიტულობიდან:

$$\gamma_4^+ = \alpha_4^+ = \alpha_4, \quad \gamma_j^+ = -i^+ \alpha_j^+ \alpha_4^+ = i\alpha_j \alpha_4 = -i\alpha_4 \alpha_j = \gamma_j. \tag{134,6'}$$

ვაჩვენოთ, რომ γ მატრიცებიც დირაკის პირობებს აკმაყოფილებს. გვაქვს

$$\gamma_4^2 = \alpha_4^2 = 1, \quad \gamma_j^2 = (-i\alpha_4 \alpha_j)(-i\alpha_4 \alpha_j) = 1. \tag{134,7}$$

ასევე, თუ გავითვალისწინებთ, რომ α_4 და α_j მატრიცები ერთმანეთთან ანტიჯამუტატურია, მივიღებთ

$$\gamma_j \gamma_k + \gamma_k \gamma_j = (-i\alpha_4 \alpha_j)(-i\alpha_4 \alpha_k) + (-i\alpha_4 \alpha_k)(-i\alpha_4 \alpha_j) =$$
$$= -\alpha_4 \alpha_j \alpha_4 \alpha_k - \alpha_4 \alpha_k \alpha_4 \alpha_j = \alpha_j \alpha_k + \alpha_k \alpha_j = 2\delta_{jk}$$

და

$$\gamma_4 \gamma_j + \gamma_j \gamma_4 = -i\alpha_j^2 \alpha_j - i\alpha_4 \alpha_j \alpha_4 = -i\alpha_j + i\alpha_j = 0.$$

ამგვარად დამტკიცებულია, რომ

$$\gamma_i \gamma_k + \gamma_k \gamma_i = 2\delta_{ik}, \quad (i, k = 1, 2, 3, 4). \tag{134,8}$$

ადვილი საჩვენებელია, რომ α მატრიცებიც, თავის მხრივ, შეიძლება განვსაზღვროთ γ მატრიცების საშუალებით, სახელდობრ,

$$\beta = \gamma_4; \quad \alpha_j = i\alpha_4 \gamma_j = i\gamma_4 \gamma_j. \tag{134,9}$$

γ მატრიცები შეგვიძლია აგრეთვე პაულის მატრიცების საშუალებითაც წარმოვიდგინოთ; მართლაც,

$$\gamma = \begin{pmatrix} 0 & -i\sigma^0 \\ i\sigma^0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \gamma_4 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \tag{134,10}$$

ალბათობის დენის ვექტორისა და ალბათობის სიმკვრივისათვის γ მატრიცებში გვექნება

$$\rho = \psi^+ \psi \quad \text{და} \quad \mathbf{J} = c\psi^+ \alpha \psi = ic\psi^+ \gamma_4 \gamma \psi. \tag{134,11}$$

შემდეგ პარაგრაფში ვაჩვენებთ, რომ $ic\rho$ და $\mathbf{J}$ ადგენს ოთხვექტორს, ე. ი. ისე გარდაიქმნება, როგორც კოორდინატები. დენის ეს ოთხვექტორი აღვნიშნოთ J_μ (J, $ic\rho$)-თი. აშკარაა, რომ

$$J_\mu = ic(\psi^+ \gamma_4 \gamma_\mu \psi), \quad (\mu = 1, 2, 3, 4). \tag{134,12}$$

მართლაც, $\mathbf{J}$-სათვის გვაქვს $ic(\psi^+ \gamma_4 \gamma \psi)$, ხოლო $j_4 = ic\psi^+ \psi = ic\rho$. (134,12) ფორმულის დახმარებით უწყვეტობის განტოლება ასე დაიწერება:

$$\frac{\partial J_\mu}{\partial x_\mu} = 0. \tag{134,13}$$

აქ $x_4 = ict$, $x_1 = x$, $x_2 = y$ და $x_3 = z$.

როცა დირაკის განტოლება ჩაწერილი გვაქვს (134,6) სახით, მაშინ ψ^+-ის ნაცვლად ხელსაყრელია ახალი $\bar{\psi}$ ფუნქციის შემოღება, რომელიც განმარტებულია შემდეგნაირად:

$$\bar{\psi} = \psi^+ \gamma_4, \tag{134,14}$$

ან, პირიქით,

$$\psi^+ = \psi\gamma_4. \qquad (134,14')$$

მაშინ (134,11) ფორმულები მიიღებს სახეს

$$\rho = \overline{\psi}\gamma_4\psi \quad \text{და} \quad \mathbf{J} = ic\overline{\psi}\boldsymbol{\gamma}\psi. \qquad (134,15)$$

დენის ოთხვექტორისათვის კი გვექნება

$$J_\mu = ic\,(\overline{\psi}\gamma_\mu\psi), \qquad (134,12')$$

$\overline{\psi} = \psi^+\gamma_4$ ფუნქცია აღარ დააკმაყოფილებს დირაკის იმავე განტოლებას, რასაც აკმაყოფილებდა ψ ფუნქცია. ვნახოთ, რა სახე ექნება დირაკის განტოლებას $\overline{\psi}$ ფუნქციისათვის. ამ მიზნით ავიღოთ (134,6) განტოლების ერმიტულად შეუღლებული განტოლება

$$\left(\frac{\partial\psi}{\partial x_\nu}\right)^+\gamma_\nu + \varkappa\psi^+ = 0, \qquad (134,16)$$

გავამრავლოთ მარჯვნიდან γ_4 მატრიცაზე და გავიხსენოთ, რომ $x_4^* = (ict)^+ = -x_4$. მივიღებთ

$$\frac{\partial\psi^+}{\partial x_k}\gamma_k\gamma_4 - \frac{\partial\psi^+}{\partial x_4}\gamma_4\gamma_4 + \varkappa\psi^+\gamma_4 = 0. \quad (k = 1, 2, 3). \qquad (134,16')$$

თუ გავითვალისწინებთ, რომ $\gamma_k\gamma_4 = -\gamma_4\gamma_k$ და $\overline{\psi} = \psi^+\gamma_4$. ვნახავთ, რომ $\overline{\psi}$ ფუნქცია დააკმაყოფილებს განტოლებას

$$\frac{\partial\overline{\psi}}{\partial x_\nu}\gamma_\nu - \varkappa\overline{\psi} = 0. \qquad (134,17)$$

დავწეროთ γ მატრიცებში დირაკის განტოლება ელექტრომაგნიტური ველისათვის. თუ მოვახდენთ შეცვლას $\hat{\mathbf{p}} \to \hat{\mathbf{p}} + \frac{e}{c}\mathbf{A}$ და $\frac{\hat{E}}{c} \to \frac{\hat{E}}{c} + \frac{e}{c}\varphi$, მაშინ დირაკის განტოლება ელექტრომაგნიტურ ველში მოძრავი ელექტრონისათვის ასე გადაიწერება:

$$\left[\frac{\hat{E}}{c} - (\boldsymbol{\alpha}\hat{\mathbf{p}}) - \alpha_4 mc\right]\psi = -\frac{e}{c}\,[\varphi - (\boldsymbol{\alpha}\mathbf{A})]\,\psi. \qquad (134,18)$$

გავიმეოროთ იგივე გარდაქმნები, რაც დაგვჭირდა γ მატრიცებზე გადასვლისათვის, ე. ი. ეს განტოლება გავყოთ $\hbar$-ზე, მარცხნიდან გავამრავლოთ α_4-ზე და შემოვიღოთ (134,5) აღნიშვნები. მივიღებთ

$$\gamma_\nu\frac{\partial\psi}{\partial x_\nu} + \varkappa\psi = \frac{e}{\hbar c}\left[\gamma_4\varphi + \frac{1}{i}(\boldsymbol{\gamma}\mathbf{A})\right]\psi. \qquad (134,18')$$

თუ გავიხსენებთ, რომ პოტენციალები ადგენს ოთხვექტორს $A_\nu = (\mathbf{A}, i\varphi)$, მაშინ საბოლოოდ გვექნება

$$\gamma_\nu\frac{\partial\psi}{\partial x_\nu} + \varkappa\psi = -\frac{ie}{\hbar c}(\gamma_\nu A_\nu)\,\psi. \qquad (134,19)$$

აქ ν მუნჯი ინდექსია ($\nu = 1, 2, 3, 4$).

ანალოგიურად იმისა, როგორც მივიღეთ (134,19) განტოლება, (134,17)-დან ადვილად გამოიყვანება განტოლება $\overline{\psi}$ ფუნქციისათვის

$$\frac{\partial\overline{\psi}}{\partial x_\nu}\gamma_\nu - \varkappa\overline{\psi} = \frac{ie}{\hbar c}\overline{\psi}\gamma_\nu A_\nu, \tag{134,20}$$

შენიშვნა. ხშირად $x_4 = ict$-ს ნაცვლად შემოაქვთ აღნიშვნა $x_0 = ct$, ხოლო γ მატრიცებს ასე განმარტავენ:

$$\gamma^0 = \alpha_4, \quad \gamma = \beta\alpha, \quad \text{ე. ი.} \quad \gamma = \begin{pmatrix} 0 & \sigma^0 \\ -\sigma_0 & 0 \end{pmatrix}. \tag{134,21}$$

ცხადია, რომ γ_0 ერმიტულია, ხოლო $\gamma_l^+ = -\gamma_l$ $(l = 1, 2, 3)$ — ანტიერმიტული. ასევე $\gamma_l^2 = -1$ $(l = 1, 2, 3)$, ხოლო $\gamma_4^2 = 1$. ამ აღნიშვნებში დირაკის განტოლებას ψ ფუნქციისათვის ექნება სახე

$$-i\gamma_\nu\frac{\partial\psi}{\partial x_\nu} + \varkappa\psi = 0, \tag{134,22}$$

ხოლო $\overline{\psi} = \psi^+\gamma^0$-სათვის —

$$i\frac{\partial\overline{\psi}}{\partial x_\nu}\gamma_\nu + \varkappa\overline{\psi} = 0, \quad \overline{\psi} = \psi^*\gamma^0. \tag{134,23}$$

დენის ვექტორი და ალბათობის სიმკვრივე კი განისაზღვრება ფორმულებით:

$$J = c\overline{\psi}\gamma\psi \quad \text{და} \quad \rho = \overline{\psi}\gamma^0\psi. \tag{134,24}$$

სავარჯიშო მაგალითები

1. აჩვენეთ, რომ $\gamma_5 = \gamma_1\gamma_2\gamma_3\gamma_4$ მატრიცა ტოლია $-g_1$ მატრიცის, ე. ი. რომ

$$\gamma_5 = -\begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad \text{და} \quad \gamma_5^2 = 1,$$

2 აჩვენეთ, რომ γ_5 მატრიცა გადასვამს ტალღური ფუნქციის კომპონენტებს და პირველი ორი და მეორე ორი კომპონენტის ღუწობას სცელის საწინააღმდეგოთი.

3. აჩვენეთ, რომ $\gamma_5 = i\alpha_1\alpha_2\alpha_3$.

4. გამოარკვიეთ, რა თვისებები ექნება $G = \frac{1+\gamma_5}{\sqrt{2}}$ მატრიცას.

5. დაამტკიცეთ, რომ γ_5 მატრიცა დირაკის მატრიცებიდან ერთადერთი მატრიცაა, რომელიც γ მატრიცების ნამრავლთან კომუტატური ან ანტიკომუტატურია, იმის მიხედვით, γ მატრიცების რიცხვი ლუწია თუ კენტი, ე. ი. $\gamma_1\gamma_2\gamma_3\gamma_4 \cdots \gamma_3\gamma_5 \ldots = (-1)^n\gamma_5\gamma_1\gamma_2\gamma_3\gamma_4 \cdots \gamma_3 \ldots$, სადაც n არის γ მატრიცების რიცხვი.

§ 135. დირაკის განტოლების ინვარიანტობა

დირაკის განტოლებიდან მიღებულ შედეგებს ფიზიკური აზრი რომ ჰქონდეს, საჭიროა იგი ინვარიანტობის რამდენიმე პირობას აკმაყოფილებდეს. კერძოდ, დირაკის განტოლება უნდა იყოს ინვარიანტული: ლორენცის, გრადიენტული და კანონიკური გარდაქმნების მიმართ. თითოეული ამ გარდაქმნის მიმართ დირაკის განტოლების ინვარიანტობა ქვემოთ დამტკიცებულია ცალ-ცალკე.

გრადიენტული ინვარიანტობა. დავწეროთ დირაკის განტოლება ელექტრომაგნიტურ ველში მოძრავი დაღებითად დამუხტული ნაწილაკისათვის

$$\gamma_\mu\frac{\partial\psi}{\partial x_\mu} + \varkappa\psi = -\frac{ie}{\hbar c}(\gamma_\mu A_\mu)\psi. \tag{135,1}$$

როგორც აღვნიშნეთ, ამ განტოლებაში შემავალი პოტენციალები ცალსახად არ განისაზღვრება. კერძოდ, $A_\mu\,(\mathbf{A},\, i\varphi)$ ოთხპოტენციალს ნაცვლად ჩვენ შეგვიძლია განვიხილოთ პოტენციალი:

$$A'_\mu = A_\mu + \frac{\partial f(\mathbf{r},\, t)}{\partial x_\mu}\,, \tag{135,2}$$

სადაც f კოორდინატებისა და დროის ნებისმიერი ფუნქციაა, რომლისათვისაც ელექტრული და მაგნიტური ველის დაძაბულობებს ზუსტად იგივე მნიშვნელობა ექნებათ. ამის შესახებ ამბობენ, ელექტრომაგნიტური ველის პოტენციალები გრადიენტულად ინვარიანტები არიანო. ცხადია, დირაკის განტოლებიდან გამომდინარე, ფიზიკური შედეგები არ უნდა შეიცვალოს პოტენციალების (135,2) გარდაქმნის მიმართ, ე. ი. დირაკის განტოლება უნდა იყოს გრადიენტულად ინვარიანტული.

დირაკის (135,1) განტოლებაში შევიტანოთ A_μ პოტენციალი განსაზღვრული (135,2) გარდაქმნიდან; გვექნება

$$\gamma_\mu \frac{\partial \psi}{\partial x_\mu} + \varkappa\psi = -\frac{ie}{\hbar c}\,\gamma_\mu A'_\mu \psi + \frac{ie}{\hbar c}\,\gamma_\mu \frac{\partial f}{\partial x_\mu}\,\psi. \tag{135,3}$$

ψ ფუნქციაზე მოვახდინოთ იგივური გარდაქმნა

$$\psi = e^{i\delta f}\,\psi', \tag{135,4}$$

საიდანაც

$$\psi' = e^{-i\delta f}\,\psi, \tag{135,5}$$

ხოლო δ-ჯერჯერობით განუსაზღვრელი ნამდვილი რიცხვია. შევიტანოთ (135,4) ფუნქცია (135,3) განტოლებაში, $e^{i\delta f}$ მამრავლი ოპერატორის მარცხნივ გადავიტანოთ და შევკვეცოთ; მივიღებთ

$$i\delta\gamma_\mu \frac{\partial f}{\partial x_\mu}\,\psi' + \gamma_\mu \frac{\partial \psi'}{\partial x_\mu} + \varkappa\psi' = \left\{-\frac{ie}{\hbar c}\,\gamma_\mu A'_\mu + \frac{ie}{\hbar c}\,\gamma_\mu \frac{\partial f}{\partial x_\mu}\right\}\psi'. \tag{135,6}$$

თუ δ-მუდმივს ისე შევარჩევთ, რომ იგი $e/\hbar c$-ს ტოლი იყოს, მაშინ დირაკის განტოლება მიიღებს სახეს:

$$\gamma_\mu \frac{\partial \psi'}{\partial x_\mu} + \varkappa\psi' = -\frac{ie}{\hbar c}\,\gamma_\mu A'_\mu \psi', \tag{135,7}$$

რომელსაც მართლაც ინვარიანტული ფორმა აქვს; ამავე დროს, ტალღური ფუნქციის ახალი გამოსახულება

$$\psi' = e^{-\frac{ie}{\hbar c}f}\,\psi \tag{135,8}$$

ფიზიკურ სიდიდეებს არ შეცვლის, რამდენადაც $\psi'^{+}\psi' = \psi^{+}\psi$. კერძოდ, უცვლელი დარჩება როგორც ალბათობის სიმკვრივე, ისე დენის ვექტორი.

კანონიკური ინვარიანტობა. დირაკის განტოლებაში შემავალი მატრიცები განსაზღვრული არიან კანონიკური (მსგავსი) გარდაქმნების სიზუსტით, კერძოდ, დირაკის პირობებს აკმაყოფილებენ არა მხოლოდ ჩვენს მიერ შემოღებული γ_μ-მატრიცები, არამედ მატრიცებიც, რომლებიც მიიღებიან γ_μ მატრიცებზე კანონიკური გარდაქმნების ჩატარებით, ე. ი. მატრიცები

$$\gamma'_\mu = S\gamma_\mu S^{+}, \tag{135,9}$$

სადაც S უნიტარული მატრიცაა

$$SS^{+} = S^{+}S = 1. \tag{135,9'}$$

მართლაც, გვექნება

$$\gamma'_\mu \gamma'_\nu + \gamma'_\nu \gamma'_\mu = S\gamma_\mu S^+ S\gamma_\nu S^+ + S\gamma_\nu S^+ S\gamma_\mu S^+ = S\, 2\delta_{\mu\nu} S^+ = 2\delta_{\mu\nu}. \quad (135,10)$$

მაშასადამე, γ'_μ მატრიცებიც დირაკის პირობებს აკმაყოფილებენ.

γ_μ-მატრიცების შერჩევის ასეთი არაცალსახობა დირაკის განტოლებიდან გამომდინარე ფიზიკურ შედეგებზე არ უნდა მოქმედებდეს, ე. ი. დირაკის განტოლება ინვარიანტული უნდა იყოს კანონიკური გარდაქმნების მიმართ.

კანონიკური ინვარიანტობის დასამტკიცებლად დირაკის განტოლება მარცხნიდან გავამრავლოთ უნიტარულ S მატრიცაზე. ხოლო ψ ფუნქცია წარმოვიდგინოთ იგივურად

$$\psi = S^+ S\psi; \quad (135,11)$$

გვექნება

$$\gamma'_\mu \frac{\partial \psi'}{\partial x_\mu} + \varkappa \psi' = -\frac{ie}{\hbar c} \gamma'_\mu A_\mu \psi', \quad (135,12)$$

სადაც γ'_μ განისაზღვრება (135,9) ფორმულით, ხოლო

$$\psi' = S\psi, \quad \psi = S^+ \psi'. \quad (135,13)$$

როგორც ვხედავთ, დირაკის განტოლებამ მიიღო ინვარიანტული სახე. ამასთან, ახალი ψ' ფუნქციით განსაზღვრული ფიზიკური სიდიდეები უცვლელი დარჩებიან. მართლაც, დენის ვექტორისათვის გვექნება

$$J_\mu = ie\psi^+ \gamma_4 \gamma_\mu \psi = ie\psi'^+ S\gamma_4 S^+ S\gamma_\mu S^+ \psi' = ie\psi'^+ \gamma'_4 \gamma'_\mu \psi'; \quad (135,14)$$

საიდანაც

$$J_\mu = ie\overline{\psi'} \gamma'_\mu \psi' = J'_\mu. \quad (135,14')$$

ამგვარად, დირაკის განტოლების კანონიკურად ინვარიანტობა დამტკიცებულია.

რელატივისტური ინვარიანტობა. წერის გაძარტივების მიზნით განვიხილოთ თავისუფალი ნაწილაკის დირაკის განტოლება

$$\gamma_\mu \frac{\partial \psi}{\partial x_\mu} + \varkappa \psi = 0, \quad (135,15)$$

იმისათვის, რომ ყველა ინერციულ სისტემაში ერთი და იგივე ფიზიკური მოვლენა ერთნაირად აიწერებოდეს, საჭიროა ამ განტოლებას ახასიათებდეს ინვარიანტობა ლორენცის გარდაქმნების მიმართ.

ვაჩვენოთ, რომ დირაკის განტოლება ინვარიანტულია კოორდინატთა შემდეგი წრფივი ორთოგონალური გარდაქმნის დროს;

$$x'_\mu = a_{\mu\nu} x_\nu, \quad (\mu, \nu = 1, 2, 3, 4) \quad (135,16)$$

რომლის შებრუნებული გარდაქმნა განისაზღვრება ფორმულით

$$x_\nu = a_{\mu\nu} x'_\mu. \quad (\mu, \nu = 1, 2, 3, 4) \quad (135,17)$$

გარდაქმნის მატრიცა აკმაყოფილებს ორთო-ნორმირების შემდეგ პირობებს:

$$a_{\rho\mu} a_{\rho\nu} = \delta_{\mu\nu}; \quad a_{\mu\rho} a_{\nu\rho} = \delta_{\mu\nu}. \quad (135,18)$$

(135,16) წრფივი გარდაქმნა შეიცავს კოორდინატთა სისტემის ღერძების მობრუნებას და სარკისებურ არეკვლას — ინვერსიას სათავის მიმართ. ამასთან, პირობრუნებას $x_1 0 x_4$ სიბრტყეში შეესაბამება ლორენცის ცნობილი გარდაქმნები

$$x_1 = \frac{x'_1 - i\beta x'_4}{\sqrt{1-\beta^2}}, \quad x_2 = x'_2, \quad x_3 = x'_3, \quad x_4 = \frac{x'_4 + i\beta x'_1}{\sqrt{1-\beta^2}}, \quad (135,19)$$

სადაც $v=\beta c$ მოძრავი სისტემის სიჩქარეა უძრავის მიმართ. თუ შემოვიღებთ ალნიშნას $\operatorname{th}\psi=i\beta$ (ψ — წმინდა წარმოსახვითი კუთხეა), მაშინ

$$\sin\theta=\frac{i\beta}{\sqrt{1-\beta^2}},\quad \cos\theta=\frac{1}{\sqrt{1-\beta^2}} \tag{135,20}$$

და ლორენცის ფორმულები დაიყვანება შემდეგ წრფივ გარდაქმნაზე:

$$\begin{aligned} x_1&=x_1'\cos\theta-x_4'\sin\theta,\\ x_2&=x_2'\\ x_3&=x_3'\\ x_4&=x_1'\sin\theta+x_4'\cos\theta. \end{aligned} \tag{135,21}$$

რომელიც (135,17)-ს თანახმად, მართლაც იქნება მობრუნება წარმოსახვით θ-კუთხეზე x_1Ox_4 სიბრტყეში შემდეგი გარდაქმნის მატრიცით:

$$a=\begin{pmatrix} \cos\theta & 0 & 0 & -\sin\theta\\ 0 & 1 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 1 & 0\\ \sin\theta & 0 & 0 & \cos\theta \end{pmatrix} \tag{135,22}$$

ზემოთ განხილულ (135,17) წრფივ გარდაქმნებში შედის აგრეთვე მობრუნება x_1Ox_2 სიბრტყეში რაიმე φ-კუთხეზე. ცნობილია, რომ ეს მობრუნება განისაზღვრება ფორმულებით:

$$\begin{aligned} x_1&=x_1'\cos\varphi-x_2'\sin\varphi,\\ x_2&=x_1'\sin\varphi+x_2'\cos\varphi,\\ x_3&=x_3',\\ x_4&=x_4'. \end{aligned} \tag{135,23}$$

შესაბამის გარდაქმნის მატრიცას ექნება სახე

$$a=\begin{pmatrix} \cos\varphi & -\sin\varphi & 0 & 0\\ \sin\varphi & \cos\varphi & 0 & 0\\ 0 & 0 & 1 & 0\\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \tag{135,24}$$

დაბოლოს, სივრცითი კოორდინატების ინვერსიას შეესაბამება ფორმულები

$$x_\alpha=-x_\alpha',\quad x_4=x_4'\quad(\alpha=1,\ 2,\ 3) \tag{135,25}$$

ინვერსიის შესაბამისი გარდაქმნის მატრიცა, ცხადია, განისაზღვრება გამოსახულებით

$$a=\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 & 0\\ 0 & -1 & 0 & 0\\ 0 & 0 & -1 & 0\\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \tag{135,25'}$$

ამგვარად, კოორდინატთა სისტემის ყველა შესაძლო წრფივი გარდაქმნა თავმოყრილია (135,17) გამოსახულებაში, ამიტომ ვიჩვენოთ, რომ დირაკის განტო-

ლება ინვარიანტულია ამ გარდაქმნების მიმართ. რადგან $\frac{\partial}{\partial x_\mu}$ ოთხგრადიენტია, ამიტომ მისთვის გვექნება შემდეგი გარდაქმნის კანონი:

$$\frac{\partial}{\partial x_\mu} = a_{\nu\mu} \frac{\partial}{\partial x'_\nu}; \tag{135,26}$$

მიღებული გამოსახულება შევიტანოთ დირაკის (135,15) განტოლებაში; გვექნება

$$a_{\nu\mu} \gamma_\mu \frac{\partial \psi}{\partial x'_\nu} + \varkappa \psi = 0. \tag{135,27}$$

ეს განტოლება მარცხნიდან გავამრავლოთ Ω-მატრიცაზე და ψ ფუნქცია წარმოვიდგინოთ იგივურად

$$\psi = \Omega^{-1} \Omega \psi = \Omega^{-1} \psi', \tag{135,28}$$

სადაც $\Omega\Omega^{-1} = \Omega^{-1}\Omega = 1$ და

$$\psi' = \Omega \psi. \tag{135,29}$$

Ω-მატრიცები ჯერჯერობით ცნობი მატრიცებია. (135,26) განტოლება მიიღებს ასეთ ფორმას:

$$\Omega a_{\mu\nu} \gamma_\mu \Omega^{-1} \frac{\partial \psi'}{\partial x'_\nu} + \varkappa \psi' = 0 \tag{135,30}$$

ახლა საკმარისია დავუშვათ, რომ

$$\Omega a_{\nu\mu} \gamma_\mu \Omega^{-1} = \gamma_\nu \tag{135,31}$$

ან, რაც ეკვივალენტურია,

$$a_{\mu\nu} \gamma_\nu = \Omega^{-1} \gamma_\mu \Omega, \tag{135,32}$$

რომ დირაკის განტოლებამ მიიღოს ინვარიანტული სახე

$$\gamma_\nu \frac{\partial \psi'}{\partial x'_\nu} + \varkappa \psi' = 0, \tag{135,33}$$

ოღონდ საჭიროა დამტკიცდეს, რომ შესაძლებელია ისეთი Ω-მატრიცის მოძებნა, რომლისთვისაც სამართლიანია (135,32) დაშვება.

ხელსაყრელია Ω-მატრიცა მოვძებნოთ ლორენცის კერძო გარდაქმნებისათვის.

ჯერ განვიხილოთ სისტემის მობრუნება რაიმე φ-კუთხეზე $x_1 O x_2$ სიბრტყეში. ადვილად შევამოწმებთ, რომ აღნიშნული მობრუნების შემთხვევაში (135,32) განტოლებას აკმაყოფილებს მატრიცა[1]

$$\Omega = e^{-\gamma_1\gamma_2\varphi/2}; \quad \Omega^{-1} = e^{\gamma_1\gamma_2\varphi/2}. \tag{135,34}$$

$\gamma_1\gamma_2$ ისე იქცევა, როგორც i მამრავლი. მართლაც, $(\gamma_\mu\gamma_\nu)^2 = \gamma_\mu\gamma_\nu\gamma_\mu\gamma_\nu = -1$; $(\mu \neq \nu)$; $(\gamma_\mu\gamma_\nu)^3 = -\gamma_\mu\gamma_\nu$ და ა. შ., ამიტომ (135,34) გაშლილად ასე შეგვიძლია წარმოვიდგინოთ:

---

[1] ამ ოპერატორის ქვეშ უნდა გავიგოთ ექსპონენტის მწკრივად გაშლა

$$\Omega^{-1} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(\frac{\gamma_1\gamma_2\varphi}{2}\right)^n = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{(2k)!} \left(\frac{\gamma_1\gamma_2\varphi}{2}\right)^{2k} + \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{(2k+1)!} \left(\frac{\gamma_1\gamma_2\varphi}{2}\right)^{2k+1}$$

რადგან $(\gamma_1\gamma_2)^{2k} = (\gamma_1\gamma_2\gamma_1\gamma_2)^k = (-1)^k$; $(\gamma_1\gamma_2)^{2k+1} = (-1)^k \gamma_1\gamma_2$. ამიტომ

$$\Omega^{-1} = \cos\frac{\varphi}{2} + \gamma_1\gamma_2 \sin\frac{\varphi}{2}.$$

$$\Omega=\cos\frac{\varphi}{2}-\gamma_1\gamma_2\sin\frac{\varphi}{2};\quad \Omega^{-1}=\cos\frac{\varphi}{2}+\gamma_1\gamma_2\sin\frac{\varphi}{2}. \qquad (135,35)$$

ეს მატრიცები შევიტანოთ (135,32) გამოსახულებაში, სადაც $a_{\mu\nu}$ ელემენტების ნაცვლად ჩავსვათ (135,24) სიდიდეები; გვექნება

$$\gamma_1\cos\varphi-\gamma_2\sin\varphi=$$

$$=\left(\cos\frac{\varphi}{2}+\gamma_1\gamma_2\sin\frac{\varphi}{2}\right)\gamma_1\left(\cos\frac{\varphi}{2}-\gamma_1\gamma_2\sin\frac{\varphi}{2}\right), \qquad (135,36)$$

$$\gamma_1\sin\varphi+\gamma_2\cos\varphi=$$

$$=\left(\cos\frac{\varphi}{2}+\gamma_1\gamma_2\sin\frac{\varphi}{2}\right)\gamma_2\left(\cos\frac{\varphi}{2}-\gamma_1\gamma_2\sin\frac{\varphi}{2}\right), \qquad (135,37)$$

$$\gamma_3=\Omega\gamma_3\Omega^{-1}, \qquad (135,38)$$

$$\gamma_4=\Omega\gamma_4\Omega^{-1}. \qquad (135,39)$$

ბოლო ორი ტოლობის სამართლიანობა აშკარაა, რამდენადაც Ω კომუტატურია როგორც γ_3-თან, ისე γ_4-თან; დანარჩენი ორი ტოლობიდან შევამოწმოთ ერთ-ერთი. განვიხილოთ (135,36)-ის მარჯვენა მხარე; გვექნება

$$\Omega^{-1}\gamma_1\Omega=\gamma_1\cos^2\frac{\varphi}{2}-\gamma_2\cos\frac{\varphi}{2}\sin\frac{\varphi}{2}-\gamma_2\cos\frac{\varphi}{2}\sin\frac{\varphi}{2}-$$

$$-\gamma_1\sin^2\frac{\varphi}{2}=\gamma_1\cos\varphi-\gamma_2\sin\varphi, \qquad (135,40)$$

რომელიც. მართლაც ემთხვევა (135,36) გამოსახულების მარცხენა მხარეს. ასევე მარტივად შემოწმდება (135,37) ტოლობაც.

ამგვარად, (135,35) მატრიცა x_1Ox_2 სიბრტყეში მობრუნების მართლაც აკმაყოფილებს (135,32) განტოლებას. აღვნიშნოთ, რომ φ-კუთხეზე მობრუნების შემთხვევაში Ω-მატრიცის ერმიტულად შეუღლებული ტოლია

$$\Omega^+=\cos\frac{\varphi}{2}-\gamma_2\gamma_1\sin\frac{\varphi}{2}=\Omega^{-1}, \qquad (135,41)$$

ე. ი. $\Omega(\varphi)$ წარმოადგენს უნიტარულ მატრიცას.

სრულიად ანალოგიურად ვიპოვით Ω-მატრიცებს x_1Ox_3 და x_2Ox_3 სიბრტყეებში მობრუნებისათვისაც. Ω მატრიცებს შესაბამისად ექნებათ სახე

$$\Omega=e^{-\gamma_1\gamma_3\varphi/2};\quad \Omega=e^{-\gamma_2\gamma_3\varphi/2}. \qquad (135,42)$$

ახლა ვიპოვოთ Ω-მატრიცა ლორენცის (135,21) გარდაქმნებისათვის. (135,22) გარდაქმნის მატრიცის თანახმად (135,32) ტოლობიდან შეგვიძლია დავწეროთ:

$$\gamma_1\cos\theta-\gamma_4\sin\theta=\Omega^{-1}\gamma_1\Omega, \qquad (135,43)$$

$$\gamma_2=\Omega^{-1}\gamma_2\Omega, \qquad (135,44)$$

$$\gamma_3=\Omega^{-1}\gamma_3\Omega, \qquad (135,45)$$

$$\gamma_1\sin\theta+\gamma_4\cos\theta=\Omega^{-1}\gamma_4\Omega. \qquad (135,46)$$

როგორც ვხედავთ, Ω კომუტატურია γ_2 და γ_3 მატრიცებთან. რადგან ლორენცის გარდაქმნები შეესაბამება წარმოსახვით θ-კუთხეზე მობრუნებას, ამიტომ (135,35) მატრიცის ანალოგიით შეგვიძლია დავწეროთ

$$\Omega(\theta)=e^{-\gamma_1\gamma_4\theta/2};\quad \Omega^{-1}(\theta)=e^{\gamma_1\gamma_4\theta/2}. \tag{135,47}$$

ან, რამდენადაც $\gamma_1\gamma_4$ ნამრავლსაც i-მამრავლის თვისებები აქვს, გვექნება

$$\Omega(\theta)=\cos\frac{\theta}{2}-\gamma_1\gamma_4\sin\frac{\theta}{2};\quad \Omega^{-1}(\theta)=\cos\frac{\theta}{2}+\gamma_1\gamma_4\sin\frac{\theta}{2}. \tag{135,48}$$

ამ მატრიცების გამოყენებით ადვილად შევამოწმებთ, რომ (135,43) — (135,46), ფორმულები დაცულია. მაშასადამე, ლორენცის გარდაქმნების შესაბამისი $\Omega(\theta)$ მატრიცაც ვიპოვეთ. საინტერესოა აღვნიშნოთ, რომ რადგან $\theta^+=-\theta$, ამიტომ

$$\Omega^+(\theta)=\Omega(\theta),\quad [\Omega^{-1}(\theta)]^+=\Omega^{-1}(\theta), \tag{135,49}$$

ე. ი. სისტემის გადატანის შესაბამისი $\Omega(\theta)$ მატრიცა ერმიტულია.

ბოლოს ვიპოვოთ ინვერსიის შესაბამისი Ω-მატრიცაც. ამ მატრიცის (135,32) და (135,25′) ფორმულებიდან განსასაზღვრავად გვექნება:

$$\Omega\gamma_k+\gamma_k\Omega=0,\quad (k=1,\ 2,\ 3) \tag{135,50}$$

$$\Omega\gamma_4=\gamma_4\Omega. \tag{135,51}$$

მაშასადამე, Ω-მატრიცა კომუტატურია γ_4-თან, დანარჩენ γ-მატრიცებთან კი — ანტიკომუტატური, ამიტომ, ცხადია Ω-მატრიცა შეგვიძლია ავირჩიოთ შემდეგი სახით:[1]

$$\Omega=\Omega^{-1}=\gamma_4. \tag{135,52}$$

ამგვარად, დირაკის განტოლების ინვარიანტობა ლორენცის ზოგადი გარდაქმნების მიმართ დამტკიცებულია.

აღსანიშნავია, რომ განხილული წრფივი გარდაქმნების დროს იცვლება დირაკის ბისპინორიც, ამიტომ დამატებით საჭიროა დამტკიცდეს, რომ ტალღური ფუნქციით განმარტებულ ფიზიკურ სიდიდეებს კოორდინატთა (135,17) გარდაქმნისას ექნებათ ტრანსფორმაციის სწორი თვისებები. სახელდობრ, ვექტორს უნდა ჰქონდეს ვექტორისათვის დამახასიათებელი გარდაქმნის თვისება, სკალარს — სკალარისა და ა. შ. ამისათვის საკმარისი იქნება ვაჩვენოთ, რომ დენის ვექტორი $\mathbf{J}$ და $ic\rho$ სიდიდე, სადაც ρ ალბათობის სიმკვრივეა, გარდაიქმნებიან როგორც კოორდინატები, ე. ი. ადგენენ ოთხვექტორს.

როგორც ვიცით, დენის ოთხვექტორი ასე განიმარტება:

$$J_\mu=ic\bar{\psi}\gamma_\mu\psi. \tag{135,53}$$

(135,29) ფორმულის თანახმად, $\psi=\Omega^{-1}\psi'$, ხოლო $\psi^+=\psi'^+(\Omega^{-1})^+$. საჭიროა ვიპოვოთ $\bar{\psi}=\psi^+\gamma_4$, ამიტომ წინა ტოლობის მარჯვნიდან γ_4-ზე გამრავლებით, გვექნება

$$\bar{\psi}=\psi'^+(\Omega^{-1})^+\gamma_4=\psi'^+\gamma_4^2(\Omega^{-1})^+\gamma_4, \tag{135,54}$$

საიდანაც მივიღებთ

$$\bar{\psi}=\bar{\psi}'\gamma_4(\Omega^{-1})^+\gamma_4. \tag{135,55}$$

ადვილად დავამტკიცებთ, რომ

$$\gamma_4(\Omega^{-1})^+\gamma_4=\Omega. \tag{135,56}$$

მართლაც, ნამდვილი მობრუნების დროს Ω უნიტარულია, ამიტომ $(\Omega^{-1})^+=\Omega$; გარდა ამისა, ნამდვილი მობრუნების შესაბამისი Ω-მატრიცა კომუტატურია γ_4-თან;

[1] Ω-მატრიცა შეგვიძლია ავიღოთ $c\gamma_4$ სახითაც, სადაც c-ნებისმიერი რიცხვია.

მაშასადამე, (135,56)-ის სამართლიანობა ამ შემთხვევაშიაც დამტკიცებულია. წარმოსახვით კუთხეზე მობრუნებისას $\Omega^+ = \Omega$, ამიტომ $(\Omega^{-1})^+ = \Omega^{-1}$ და

$$\gamma_4 \Omega^{-1} \gamma_4 = \gamma_4 \left(\cos \frac{\theta}{2} + \gamma_1 \gamma_4 \sin \frac{\theta}{2} \right) \gamma_4 = \cos \frac{\theta}{2} - \gamma_1 \gamma_4 \sin \frac{\theta}{2} = \Omega, \quad (135,57)$$

დაბოლოს, არეკლის დროს $\Omega = \gamma_4$, ამიტომ $\Omega^{-1} = \gamma_4$ და $(\Omega^{-1})^+ = \gamma_4$. ამგვარად, (135,56) ფორმულის სამართლიანობა ზოგად შემთხვევაში დამტკიცებულია.

$\bar{\psi}$-ფუნქციისათვის საბოლოოდ გვაქვს შემდეგი გარდაქმნის კანონი:

$$\bar{\psi} = \bar{\psi}' \Omega. \quad (135,58)$$

დენის ვექტორი სათანადოდ გარდაიქმნება შემდეგი ფორმულით:

$$J_\mu = ic \bar{\psi}' \Omega \gamma_\mu \Omega^{-1} \psi' \quad (135,59)$$

თუ (135.31) გამოსახულებას გავამრავლებთ $a_{\nu\rho}$ კოეფიციენტზე, ავჯამავთ ν-თი და გავითვალისწინებთ (135,18) ორთო-ნორმირების პირობებს, მივიღებთ

$$\Omega \gamma_\mu \Omega^{-1} = a_{\nu\mu} \gamma_\nu. \quad (135,60)$$

ამ გამოსახულების (134,59) ფორმულებში შეტანით საბოლოოდ გვექნება

$$J_\mu = a_{\nu\mu} (ic \bar{\psi}' \gamma_\nu \psi') = a_{\nu\mu} J'_\nu, \quad (135,61)$$

რაც წარმოადგენს ოთხვექტორის გარდაქმნის კანონს, ამგვარად, ჩვენ დავამტკიცეთ, რომ ლორენცის ზოგადი გარდაქმნებისას დირაკის განტოლება ინვარიანტული დარჩება, ხოლო ტალღური ფუნქცია ისე იცვლება, რომ მისი საშუალებით განსაზღვრულ ფიზიკურ სიდიდეებს ტრანსფორმაციის სწორი თვისებები გააჩნიათ.

საინტერესოა აღვნიშნოთ, რომ ინვერსიის დროს $a_{\nu\mu} = -\delta_{\nu\mu}$, $(\nu, \mu \neq 4)$ და (135,61) ტოლობიდან დენის ვექტორისათვის გვექნება $J' = -J$, ე. ი. $\nu(\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3)$ შეგვიძლია განვიხილოთ როგორც პოლარული ვექტორ; ცხადია, იგივე ეხება $\alpha(\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3)$-ვექტორსაც.

არეკლის დროს ტალღური ფუნქცია შეიცვლება კანონით

$$\psi' = \gamma_4 \psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ -\psi_3 \\ -\psi_4 \end{pmatrix}. \quad (135,62)$$

მაშასადამე, ინვერსიის დროს ბისპინორის ორი ზედა კომპონენტი ნიშანს არ იცვლის, მაშინ როცა ქვედა ორის ნიშანი იცვლება საწინააღმდეგოთი. ამგვარად, ჩვენს მიერ შემოღებულ (131,26) გამოსახულებაში Φ ყოფილი ნამდვილი სპინორი, χ კი — ფსევდოსპინორი.

დროის ინვერსია. დროის ინვერსია შრედინგერის განტოლებაში, სადაც ვგულისხმობდით, რომ ჰამილტონიანი ნამდვილი სიდიდეა ($\hat{H}^* = \hat{H}$) ეკვივალენტური იყო კომპლექსურად შეუღლებულ ფუნქციაზე გადასვლისა. დირაკის განტოლებაში კი $t \to -t$ გარდაქმნა ეკვივალენტური აღარ არის ψ ფუნქციის ψ^*-თი შეცვლისა. ეს იმის შედეგია, რომ დირაკის თეორიაში ჰამილტონიანი არ წარმოადგენს ნამდვილ სიდიდეს. მართლაც, განტოლებას

$$-i\hbar \frac{\partial \psi^*(\mathbf{r}, -t)}{\partial t} = \hat{H}^* \psi^*(\mathbf{r}, -t) \quad (135,63)$$

აღარ აქვს ინვარიანტული სახე. დირაკის წარმოდგენაში α_2-მატრიცა წმინდა წარმოსახვითია და. რადგან $\hat{p}_i^* = -\hat{p}_i$, ამიტომ

$$\hat{H}^* = c\{-\alpha_1 \hat{p}_x + \alpha_2 \hat{p}_y - \alpha_3 \hat{p}_z + \alpha_4 mc\}, \tag{135,64}$$

რომელიც, მართლაც, არ უდრის $\hat{H}$-ს. მოვითხოვოთ, რომ ჰამილტონიანი თავისი კომპლექსურად შეუღლებული ოპერატორისაგან განსხვავდებოდეს დროზე დამოუკიდებული უნიტარული S გარდაქმნით. ე. ი.

$$\hat{H} = S\hat{H}^* S^{-1}, \quad (SS^+ = S^+ S = 1) \tag{135,65}$$

მაშინ, თუ (135,63)-ს მარცხნიდან გავამრავლებთ $\hat{S}$-ზე, ხოლო ψ^*-ს წარმოვიდგენთ $S^{-1}S\psi^*$-სახით, განტოლება ინვარიანტული გახდება

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}[S\psi^*(\mathbf{r}, -t)] = \hat{H}[S\psi^*(\mathbf{r}, -t)]. \tag{135,66}$$

მაშასადამე, $t \to -t$ გარდაქმნას შეესაბამება ფუნქცია

$$\psi_-(\mathbf{r}, t) = S\psi^*(\mathbf{r}, -t). \tag{135,67}$$

ადვილად ვიპოვით S-მატრიცის სახეს. (135,64) და (135,65) ფორმულების თანახმად გვექნება

$$S\alpha_1 = -\alpha_1 S, \; S\alpha_2 = \alpha_2 S, \; S\alpha_3 = -\alpha_3 S, \; S\alpha_4 = \alpha_4 S. \tag{135,68}$$

ამ ტოლობებს კი აკმაყოფილებს, მაგალითად, $S = S^{-1} = \pm i\alpha_1\alpha_3$. ამგვარად, დირაკის წარმოდგენაში $t \to -t$ გარდაქმნას შეესაბამება $\psi_- = \pm i\alpha_1\alpha_3\psi^*(\mathbf{r}, -t)$ ფუნქცია. ადვილად ვაჩვენებთ, რომ პაულის განტოლების შემთხვევაში

$$\psi_- = \sigma_y \psi^*(\mathbf{r}, -t).$$

§ 136. დირაკის ფუნქციის თვისებები კოორდინატთა წრფივი ორთოგონალური გარდაქმნის დროს

შევისწავლოთ, თუ როგორ გარდაიქმნება დირაკის ფუნქცია

$$\psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix} \tag{136,1}$$

კოორდინატთა სისტემის გარდაქმნისას. როგორც ვიცით ამ გარდაქმნის დროს მიიღება ახალი ψ' ფუნქცია, რომელიც ძველთან დაკავშირებულია ფორმულით

$$\psi' = \Omega\psi \tag{136,2}$$

Ω-ოპერატორის სახე ნებისმიერი კერძო სახის გარდაქმნისათვის ჩვენ წინა პარაგრაფში ვიპოვეთ. მაგალითად, y-ღერძის მიმართ რაიმე φ კუთხეზე მობრუნებისას Ω_y მატრიცას ექნება სახე

$$\Omega_y = \cos\frac{\varphi}{2} - \gamma_1\gamma_3 \sin\frac{\varphi}{2}. \tag{136,3}$$

ადვილად ვაჩვენებთ, რომ $\gamma_1\gamma_3 = -\sigma_2$, ამიტომ მატრიცულად Ω_y ასეთ სახეს ღებულობს

$$\Omega_y(\varphi)=\begin{vmatrix} \cos\frac{\varphi}{2} & -\sin\frac{\varphi}{2} & 0 & 0 \\ \sin\frac{\varphi}{2} & \cos\frac{\varphi}{2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \cos\frac{\varphi}{2} & -\sin\frac{\varphi}{2} \\ 0 & 0 & \sin\frac{\varphi}{2} & \cos\frac{\varphi}{2} \end{vmatrix}. \qquad (136,4)$$

z-ღერძის ირგვლივ მობრუნება ხორციელდება მატრიცით

$$\Omega_z=\cos\frac{\varphi}{2}-\gamma_1\gamma_2\sin\frac{\varphi}{2}. \qquad (136,5)$$

რადგან $\gamma_1\gamma_2=i\sigma_z$, ამიტომ Ω_z მატრიცას ექნება სახე

$$\Omega_z(\varphi=\begin{vmatrix} e^{-i\varphi/2} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & e^{i\varphi/2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & e^{-i\varphi/2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e^{i\varphi/2} \end{vmatrix}. \qquad (136,6)$$

დაბოლოს, x-ღერძის ირგვლივ მობრუნებისას

$$\Omega_x=\cos\frac{\varphi}{2}-\gamma_2\gamma_3\sin\frac{\varphi}{2} \qquad (136,7)$$

ან, რადგან $\gamma_2\gamma_3=i\sigma_1$, ამიტომ

$$\Omega_x(\varphi)=\begin{vmatrix} \cos\frac{\varphi}{2} & i\sin\frac{\varphi}{2} & 0 & 0 \\ i\sin\frac{\varphi}{2} & \cos\frac{\varphi}{2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \cos\frac{\varphi}{2} & i\sin\frac{\varphi}{2} \\ 0 & 0 & i\sin\frac{\varphi}{2} & \cos\frac{\varphi}{2} \end{vmatrix}. \qquad (136,8)$$

როგორც ვხედავთ ამ მატრიცებს კვაზიდიაგონალური ფორმა აქვთ.

ვიპოვოთ (136,2) გარდაქმნა, როცა ადგილი აქვს სისტემის მობრუნებას x-ღერძის ირგვლივ. თუ შევიტანთ $\Omega_x(\varphi)$ მატრიცის (136,8) მნიშვნელობას და მოვახდენთ გამრავლებას, გვექნება

$$\left.\begin{aligned} \psi_1'&=\cos\frac{\varphi}{2}\,\psi_1+i\sin\frac{\varphi}{2}\,\psi_2, \\ \psi_2'&=i\sin\frac{\varphi}{2}\,\psi_1+\cos\frac{\varphi}{2}\,\psi_2, \end{aligned}\right\} \qquad (136,9)$$

$$\left.\begin{aligned}\psi'_3 &= \cos\frac{\varphi}{2}\,\psi_3 + i\sin\frac{\varphi}{2}\,\psi_4,\\ \psi'_4 &= i\sin\frac{\varphi}{2}\,\psi_3 + \cos\frac{\varphi}{2}\,\psi_4.\end{aligned}\right\} \tag{136,10}$$

ჩვენ ვხედავთ, რომ კოორდინატთა სისტემის მობრუნებისას (x-ღერძის ირგვლივ) ψ ფუნქციის პირველი ორი ψ_1 და ψ_2 კომპონენტი გარდაიქმნება ახალ ψ'_1 და ψ'_2 კომპონენტებად, ისევე როგორც ψ_3 და ψ_4 კომპონენტი გარდაიქმნება ψ'_3 და ψ'_4 კომპონენტად.

ისეთ ორ ψ_1 და ψ_2 სიდიდეს, რომელიც კოორდინატთა სისტემის მობრუნებისას გარდაიქმნება კანონით:

$$\left.\begin{aligned}\psi'_1 &= \alpha\psi_1 + \beta\psi_2,\\ \psi'_2 &= \gamma\psi_1 + \delta\psi_2,\end{aligned}\right\} \tag{136,11}$$

უწოდებენ სპინორს. α, β, γ, δ გარკვეულ პირობებს აკმაყოფილებენ და მათ კეილი-კლეინის პარამეტრებს უწოდებენ. როცა $\varphi = 2\pi$, ე. ი. როცა სისტემა ერთ სრულ ბრუნს ასრულებს, მაშინ $\psi' = \Omega(\varphi)\,\psi = \left(\cos\frac{2\pi}{2} - \gamma_i\gamma_k\sin\frac{2\pi}{2}\right)\psi = -\psi$, ე. ი. სისტემის 2π კუთხეზე შემობრუნებისას სპინორი იცვლის ნიშანს.

ამგვარად, დირაკის განტოლების ამონახსნი ყოფილა ორი სპინორის ერთობლიობა. ვნახოთ, რა განსხვავებაა არსებობს ამ ორ სპინორს შორის. ამისათვის განვიხილოთ სისტემის ღერძების ინვერსია. როგორც ვიცით, ასეთი გარდაქმნის დროს $\Omega = \gamma_4$. მაშასადამე,

$$\psi' = \gamma_4\psi = \begin{pmatrix}\psi_1\\ \psi_2\\ -\psi_3\\ -\psi_4\end{pmatrix}. \tag{136,12}$$

აქედან უნდა დავასკვნათ, რომ პირველი სპინორი ინვერსიისას არ იცვლება, მეორე კი იცვლის ნიშანს. პირველს ნაზდვილ სპინორს უწოდებენ, მეორეს — ფსევდოსპინორს. ისეთი ოთხი სიდიდის ერთობლიობას, რომელთაგან ორი ნამდვილ სპინორს ადგენს; ორი კი ფსევდოსპინორს, უწოდებენ ბისპინორს. შემდგომში სპინორს აღვნიშნავთ Φ-თი ფსევდოსპინორს კი χ-თი. მათთვის დირაკის განტოლება ჩაიწერება შემდეგი სახით:

$$\left.\begin{aligned}i\hbar\frac{\partial\Phi}{\partial t} &= c\,(\sigma^0\,\hat{\mathbf{p}})\,\chi + mc^2\Phi,\\ i\hbar\frac{\partial\chi}{\partial t} &= c\,(\sigma^0\,\hat{\mathbf{p}})\,\Phi - mc^2\chi.\end{aligned}\right\} \tag{136,13}$$

დირაკის განტოლებას ამ სახით ხშირად იყენებენ კონკრეტული ამოცანების განხილვის დროს.

საინტერესოა ვიპოვოთ მატრიცა, რომელიც შეესაბამება ერთი კოორდინატთა სისტემის მეორეს მიმართ სათავის ირგვლივ ნებისმიერ მობრუნებას. როგორც ცნობილია ეს მობრუნება ხორციელდება ეილერის კუთხეების საშუალებით. კერძოდ, ნებისმიერი ორიენტაცია კოორდინატთა სისტემებისა ერთმანეთის მიმართ შეიძლება განვახორციელოთ სამი მობრუნებით. პირველია მობრუნება z-ღერძის ირგვლივ Φ-კუთხეზე, მეორე კვლძთა ღერძის ირგვლივ Θ-კუთხეზე, ხოლო მესამე

უკანასკნელი მობრუნებისას მიღებული ახალი სისტემის z-ღერძის ირგვლივ — ψ კუთხეზე. რადგან თანმიმდევრული მობრუნებების დროს მატრიცები მრავლდება, ამიტომ საერთო გარდაქმნას შეესაბამება მატრიცათა ნამრავლი $\Omega_3(\psi)\Omega_2(\vartheta)\Omega_1(\varphi)$, ე. ი.

$$\begin{vmatrix} e^{-i\psi/2} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & e^{i\psi/2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & e^{-i\psi/2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e^{i\psi/2} \end{vmatrix} \cdot \begin{vmatrix} \cos\frac{\theta}{2} & i\sin\frac{\vartheta}{2} & 0 & 0 \\ i\sin\frac{\theta}{2} & \cos\frac{\vartheta}{2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \cos\frac{\theta}{2} & i\sin\frac{\theta}{2} \\ 0 & 0 & i\sin\frac{\theta}{2} & \cos\frac{\theta}{2} \end{vmatrix} \cdot$$

$$\cdot \begin{vmatrix} e^{-i\varphi/2} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & e^{i\varphi/2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & e^{-i\varphi/2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e^{i\varphi/2} \end{vmatrix} \qquad (136,14)$$

მატრიცათა გამრავლების წესის გამოყენებით მივიღებთ

$$\Omega(\varphi, \theta, \psi) =$$

$$= \begin{vmatrix} e^{-\frac{i}{2}(\varphi+\psi)}\cos\frac{\theta}{2} & ie^{\frac{i}{2}(\varphi-\psi)}\sin\frac{\vartheta}{2} & 0 & 0 \\ ie^{-\frac{i}{2}(\varphi-\psi)}\sin\frac{\vartheta}{2} & e^{\frac{i}{2}(\varphi+\psi)}\cos\frac{\theta}{2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & e^{-\frac{i}{2}(\varphi+\psi)}\cos\frac{\theta}{2} & ie^{\frac{i}{2}(\varphi-\psi)}\sin\frac{\vartheta}{2} \\ 0 & 0 & ie^{-\frac{i}{2}(\varphi-\psi)}\sin\frac{\theta}{2} & e^{\frac{i}{2}(\varphi+\psi)}\cos\frac{\theta}{2} \end{vmatrix}. \qquad (136,15)$$

ამ მატრიცით გარდაქმნილი დირაკის ფუნქცია (ψ_1', ψ_2') და (ψ_3', ψ_4') სპინორებისათვის მოგვცემს (136,11) ტიპის გარდაქმნას, სადაც

$$\alpha = e^{-\frac{i}{2}(\varphi+\psi)}\cos\frac{\vartheta}{2}, \quad \beta = ie^{\frac{i}{2}(\varphi-\psi)}\sin\frac{\theta}{2},$$
$$\gamma = ie^{-\frac{i}{2}(\varphi-\psi)}\sin\frac{\vartheta}{2}, \quad \delta = e^{\frac{i}{2}(\varphi+\psi)}\cos\frac{\theta}{2}. \qquad (136,16)$$

მაშასადამე, კეილი-კლეინის პარამეტრები გამოვხატეთ ეილერის კუთხეებით.

§ 137. დირაკის მატრიცების სხვადასხვა წარმოდგენა

არსებობს დირაკის მატრიცების სხვადასხვა არჩევის შესაძლებლობა ან, როგორც ამბობენ, სხვადასხვა წარმოდგენა, ამასთან დირაკის განტოლებიდან გამომდინარე შედეგები საბოლოო ჯამში ამ წარმოდგენაზე დამოკიდებული არ არის. სხვადასხვა წარმოდგენის მატრიცებს მოეთხოვება მხოლოდ ის, რომ ისინი დირაკის პირობებს აკმაყოფილებდნენ, სხვა მხრივ ისინი ნებისმიერია და შეიძლება ერმიტულებიც არ იყვნენ. სხვადასხვა სახელმძღვანელოში ხშირად სხვადასხვა წარ-

მოდგენის მატრიცებით სარგებლობენ, ამიტომ სასარგებლოა ამ წარმოდგენათა განხილვა.

დირაკის წარმოდგენა. ჩვენს მიერ შერჩეული წარმოდგენა

$$\alpha=\rho_1\sigma, \quad \alpha_4=\rho_3, \tag{137,1}$$

სადაც ρ_1, ρ_2, ρ_3 და σ მატრიცები განისაზღვრება (131,8′) და (131,10) ფორმულებით, ცნობილია დირაკის წარმოდგენის სახელწოდებით. დირაკის წარმოდგენას ის უპირატესობა აქვს, რომ მასში α მატრიცები უნიტარულებიცაა და ერმიტულებიც. როგორც ვნახეთ, ამ წარმოდგენაში γ მატრიცებს

$$\gamma=-i\beta\alpha, \quad \gamma_4=\alpha_4, \quad \gamma_5=\gamma_1\gamma_2\gamma_3\gamma_4 \tag{137,2}$$

აქვს შემდეგი სახე:

$$\gamma=\begin{pmatrix}0 & -i\sigma^0\\ i\sigma^0 & 0\end{pmatrix}, \quad \gamma_4=\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}, \quad \gamma_5=-\begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix}=-\rho_1. \tag{137,3}$$

ამასთან მატრიცების თითოეული ელემენტი წარმოადგენს მეორე რანგის მატრიცას.

მაიორანას წარმოდგენა. ხშირად ხელსაყრელია ისეთი წარმოდგენის არჩევა, როცა α_1, α_2. α_3 ნამდვილი მატრიცებია, α_4 კი — წმინდა წარმოსახვითი. ასეთი წარმოდგენა იქნება მაგალითად,

$$\alpha_1=\rho_1\sigma_1, \quad \alpha_2=\rho_3, \quad \alpha_3=\rho_1\sigma_3, \quad \alpha_4=\rho_1\sigma_2. \tag{137,4}$$

ამ წარმოდგენაში γ მატრიცებს ექნება სახე ($\gamma=-i\alpha_4\alpha$, $\gamma_4=\alpha_4$)

$$\begin{aligned}\gamma_1&=-i\sigma_2\sigma_1=-\sigma_3\\ \gamma_2&=-i\rho_1\rho_3\sigma_2=-\rho_2\sigma_2\\ \gamma_3&=-i\sigma_2\sigma_3=\sigma_1\\ \gamma_4&=\rho_1\sigma_2.\end{aligned} \tag{137,5}$$

აშკარაა, რომ γ_5 მატრიცა მაიორანას წარმოდგენაში იქნება

$$\gamma_5=\gamma_1\gamma_2\gamma_3\gamma_4=+i\alpha_1\alpha_2\alpha_3=-\rho_3\sigma_2 \tag{137,6}$$

ლი და იანგის წარმოდგენა. ლიმ და იანგმა შემოიღეს ახალი წარმოდგენა. ამ წარმოდგენაში α მატრიცები კვლავინდებურად შემდეგი ფორმულებით განისაზღვრება:

$$\alpha=\rho_1\sigma \quad \text{და} \quad \alpha_4=\rho_3\,(=\beta), \tag{137,7}$$

ρ მატრიცებისათვის კი შემოღებულია წარმოდგენა

$$\rho_1=\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}, \quad \rho_2=\begin{pmatrix}0 & i\\ -i & 0\end{pmatrix}, \quad \rho_3=\begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix}. \tag{137,8}$$

ამიტომ

$$\alpha=\begin{pmatrix}\sigma^0 & 0\\ 0 & -\sigma^0\end{pmatrix}, \quad \alpha_4=\begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix}. \tag{137,9}$$

ამ წარმოდგენაში γ მატრიცისათვის გვექნება

$$\begin{aligned}\gamma=-i\beta\alpha&=\begin{pmatrix}0 & i\sigma^0\\ -i\sigma^0 & 0\end{pmatrix}, \quad \gamma_4=\rho_3=\begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix},\\ \gamma_5=\gamma_1\gamma_2\gamma_3\gamma_4&=-\rho_1=\begin{pmatrix}-1 & 0\\ 0 & 1\end{pmatrix}.\end{aligned} \tag{137,10}$$

შემდეგში, სადაც სპეციალურად არ იქნება აღნიშნული, ყველგან ვისარგებლებთ დირაკის წარმოდგენით.

§ 138. დირაკისა და პაულის მატრიცების ზოგადი თვისებები

ამ პარაგრაფში ჩვენ განვიხილავთ დირაკისა და პაულის მატრიცების იმ ზოგად თვისებებს, რომლებიც დიდ როლს ასრულებენ სხვადასხვა კონკრეტული ამოცანების განხილვის დროს.

ვიპოვოთ, რის ტოლია $\alpha_l \alpha_k$ ნამრავლი. ჯერ განვიხილოთ $\alpha_1 \alpha_2$ სიდიდე. თანახმად (131,14)-ისა, გვექნება:

$$\alpha_1 \alpha_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & i & 0 \\ 0 & -i & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} i & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & i & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -i \end{pmatrix} = i\sigma_3. \qquad (138,1)$$

ასევე შეიძლება ვაჩვენოთ, რომ

$$\alpha_2 \alpha_3 = i\sigma_1, \quad \alpha_1 \alpha_3 = -i\sigma_2 \quad \text{და ა, შ,} \qquad (138,1')$$

ეს ნამრავლები შეგვიძლია ჩავწეროთ მესამე რანგის სრულიად ანტისიმეტრიული ერთეულოვანი $\mathcal{E}_{jkl}$ ტენზორის საშუალებით; სახელდობრ,

$$\alpha_j \alpha_k = i\mathcal{E}_{jkl}\sigma_l. \quad (j \neq k = 1, 2, 3). \qquad (138,2)$$

რადგან $\alpha_j = \rho_1 \sigma_j$, ხოლო $\alpha_k = \rho_1 \sigma_k$, ამიტომ (138,2) ფორმულის თანახმად გვექნება:

$$\alpha_j \alpha_k = \rho_1 \sigma_j \rho_1 \sigma_k = \rho_1 \sigma_j \sigma_k = \sigma_j \sigma_k = i\mathcal{E}_{jkl}\sigma_l. \qquad (138,3)$$

ასევე, რადგან $\gamma_j = -i\alpha_4 \alpha_j$ და $\gamma_k = -i\alpha_4 \alpha_k$, მივიღებთ

$$\gamma_j \gamma_k = i\mathcal{E}_{jkl}\sigma_l \quad (j \neq k = 1, 2, 3). \qquad (138,4)$$

როცა $j = k$, მაშინ $\gamma_j^2 = \alpha_j^2 = \sigma_j^2 = 1$ და, მაშასადამე, ზოგადად შეიძლება დავწეროთ (გავიხსენოთ, რომ, როცა რომელიმე ორი ინდექსი ერთმანეთის ტოლია, $\mathcal{E}_{jkl} = 0$):

$$\alpha_j \alpha_k = \delta_{jk} + i\mathcal{E}_{jkl}\sigma_l, \qquad (138,5)$$

$$\sigma_j \sigma_k = \delta_{jk} + i\mathcal{E}_{jkl}\sigma_l, \qquad (138,6)$$

$$\gamma_j \gamma_k = \delta_{jk} + i\mathcal{E}_{jkl}\sigma_l. \qquad (138,7)$$

ახლა ვიპოვოთ, რის ტოლია $(\alpha_j \alpha_k - \alpha_k \alpha_j)$ კომუტატორი. რადგან $\delta_{jk} = \delta_{kj}$, ხოლო $\mathcal{E}_{jkl} = -\mathcal{E}_{kjl}$; (138,5) ფორმულა მოგვცემს

$$\alpha_j \alpha_k - \alpha_k \alpha_j = 2i\mathcal{E}_{jkl}\sigma_l. \qquad (138,8)$$

ანალოგიურად გვექნება

$$\sigma_j \sigma_k - \sigma_k \sigma_j = \gamma_j \gamma_k - \gamma_k \gamma_j = 2i\mathcal{E}_{jkl}\sigma_l. \qquad (138,9)$$

პუასონის ფრჩხილებისათვის კი მივიღებთ

$$[\alpha_j, \alpha_k] = [\sigma_j, \sigma_k] = [\gamma_j, \gamma_k] = -\frac{2}{\hbar}\mathcal{E}_{jkl}\sigma_l. \qquad (138,10)$$

(138,5) ფორმულიდან გამომდინარეობს, რომ

$$\alpha_j \alpha_k + \alpha_k \alpha_j = 2\delta_{jk}, \qquad (138,11)$$

რაც ემთხვევა დირაკის პირობას.

ზემოთ მიღებული ფორმულები სამართლიანი იქნება პაულის σ_x^0, σ_y^0, σ_z^0 მატრიცებისათვისაც. კერძოდ,

$$\left.\begin{aligned} &\sigma_j^0\,\sigma_k^0 = \delta_{jk} + i\varepsilon_{jkl}\,\sigma_l^0, \\ &\sigma_j^0\,\sigma_k^0 - \sigma_k^0\,\sigma_j^0 = 2i\varepsilon_{jkl}\,\sigma_l^0, \\ &[\sigma_j^0,\ \sigma_k^0] = -\frac{2}{\hbar}\,\varepsilon_{jkl}\,\sigma_l^0. \end{aligned}\right\} \qquad (138{,}12)$$

ვაჩვენოთ, რომ პაულის σ_x^0, σ_y^0, σ_z^0 სამი მატრიცა, ისევე როგორც დირაკის α_1, α_2, α_3 მატრიცები, ვექტორის კომპონენტებს წარმოადგენს. ამისათვის საჭიროა ვაჩვენოთ, რომ ისინი სისტემის მობრუნებისას ისევე გარდაიქმნებიან, როგორც კოორდინატები[1], ე. ი. როგორც

$$x_i' = a_{ik}\,x_k. \quad (i = 1,\ 2,\ 3), \qquad (138{,}13)$$

სადაც გარდაქმნის a_{ik} კოეფიციენტები აკმაყოფილებენ პირობებს

$$a_{ki}\,a_{mi} = a_{ik}\,a_{im} = \delta_{km}. \qquad (138{,}13')$$

პაულის და დირაკის მატრიცების ვექტორული ხასიათის დასადგენად საკმარისია ვაჩვენოთ, რომ ახალ სისტემაშიაც ამ მატრიცებს ისეთივე თვისებები აქვს, რაც ძველში. დავამტკიცოთ, რომ ახალ სისტემაშიაც დაცულია დირაკის პირობა

$$\alpha_i'\,\alpha_k' + \alpha_k'\,\alpha_i' = 2\delta_{ik}.$$

დავწეროთ გარდაქმნის კანონები α_i' და α_k'-სათვის:

$$\alpha_i' = a_{im}\,\alpha_m, \quad \alpha_k' = a_{kn}\,\alpha_n.$$

შევიტანოთ ეს მნიშვნელობები წინა ტოლობაში და გავითვალისწინოთ (138,13') ფორმულა. გვექნება

$$\alpha_i'\,\alpha_k' + \alpha_k'\,\alpha_i' = a_{im}\,a_{kn}\,\alpha_m\,\alpha_n + a_{kn}\,a_{im}\,\alpha_m\,\alpha_n = a_{im}\,a_{kn}\,(\alpha_m\,\alpha_n + \alpha_n\,\alpha_m) =$$

$$= a_{im}\,a_{kn}\cdot 2\delta_{mn} = 2a_{im}\,a_{km} = 2\delta_{ik}.$$

ამგვარად, $\alpha\,(\alpha_1,\ \alpha_2,\ \alpha_3)$ წარმოადგენს ვექტორს. სრულიად ანალოგიურად ვაჩვენებთ, რომ $\sigma^0\,(\sigma_x^0,\ \sigma_y^0,\ \sigma_z^0)$-იც ვექტორია. რადგან σ^0 ვექტორი დაკავშირებულია სპინთან, ეს უკანასკნელი კი, როგორც ყოველი მომენტის გამომხატველი ვექტორი, არის აქსიალური, ამიტომ აქსიალური იქნება σ^0 ვექტორიც (ე. წ. ფსევდოვექტორი), ე. ი საკოორდინატო ღერძების ინვერსიისას მისი კომპონენტები ნიშანს არ შეიცვლის, რაც შეეხება α ვექტორს, ღერძების არეკვლისას p_x, p_y, p_z ნიშანს იცვლის, ამიტომ α_x. α_y, α_z კომპონენტებიც ნიშანს უნდა იცვლიდეს, რადგან (αp) სიდიდე, რომელიც დირაკის განტოლებაში შედის, ნამდვილი სკალარი უნდა იყოს. ამგვარად, α ყოფილა პოლარული ვექტორი. ასევე ვაჩვენებთ, რომ დირაკის $(\sigma_1,\ \sigma_2,\ \sigma_3)$ სპინური მატრიცები ადგენს აქსიალურ ვექტორს.

შეიძლება ჩვენება, რომ 1, σ_x^0, σ_y^0, σ_z^0 წარმოადგენს სრულ სისტემას, ე. ი. ნებისმიერი მეორე რანგის მატრიცა წარმოვიდგინოთ ამ ოთხი მეორე რანგის მატრიცის წრფივი კომბინაციის საშუალებით. ამ წარმოდგენას აქვს შემდეგი სახე:

---

[1] ჯველ. მაშრალში, სადაც კი ორი ერთნაირი ინდექსი შეგვხვდება, იგულისხმება ჯამება ამ ინდექსის ნი:ართ.

$$\begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{pmatrix} = \frac{1}{2}\left\{ (A_{11}+A_{22}) \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (A_{12}+A_{21})\,\sigma_x^0 + \right.$$
$$\left. + (A_{11}-A_{22})\,\sigma_z^0 + i\,(A_{12}-A_{21})\,\sigma_y^0 \right\}. \qquad (138,14)$$

ერთეულოვანი მატრიცისა და დირაკის მატრიცების საშუალებით შეიძლება შედგეს თექვსმეტი მატრიცა, რომელიც ქმნის სრულ სისტემას. ამ მატრიცებად შეგვიძლია ავარჩიოთ:

$$1,\ \sigma_1,\ \sigma_2,\ \sigma_3,\ \rho_1,\ \rho_2,\ \rho_3 \qquad (138,15)$$
$$\rho_1\sigma_1,\ \rho_1\sigma_2,\ \rho_1\sigma_3,\ \rho_2\sigma_1,\ \rho_2\sigma_2,\ \rho_2\sigma_3,\ \rho_3\sigma_1,\ \rho_3\sigma_2,\ \rho_3\sigma_3.$$

უფრო ხშირად იღებენ შემდეგ მატრიცებს[1]

$$1,\ \gamma_1,\ \gamma_2,\ \gamma_3,\ \gamma_4,$$
$$i\gamma_1\gamma_2,\ i\gamma_1\gamma_3,\ i\gamma_1\gamma_4,\ i\gamma_2\gamma_3,\ i\gamma_2\gamma_4,\ i\gamma_3\gamma_4 \qquad (138,15')$$
$$i\gamma_1\gamma_2\gamma_3,\ i\gamma_1\gamma_2\gamma_4,\ i\gamma_1\gamma_3\gamma_4,\ i\gamma_2\gamma_3\gamma_4.$$
$$\gamma_1\gamma_2\gamma_3\gamma_4 = \gamma_5$$

დირაკის ამ მატრიცებიდან ყოველთვის შეგვიძლია შევარჩიოთ ისეთი ოთხი მატრიცა, რომლებიც დირაკის პირობებს აკმაყოფილებენ. დირაკის ოთხი მატრიცის ასეთ შერჩევას, როგორც ვიცით, წარმოდგენის შერჩევას უწოდებენ. აღვნიშნოთ, რომ წარმოდგენა შეგვიძლია შევარჩიოთ სხვადასხვა გზით. ამასთან, თითოეულ წარმოდგენაში არსებობს მეხუთე მატრიცაც, რომელიც აგრეთვე დირაკის პირობებს აკმაყოფილებს. ეს მეხუთე მატრიცა მიიღება წარმოდგენის ოთხივე მატრიცის გადამრავლებით. ასე მაგალითად, დირაკის წარმოდგენაში გვაქვს ოთხი მატრიცა γ_1, γ_2, γ_3, γ_4, ხოლო მეხუთე დირაკის მატრიცა ტოლი იქნება $\gamma_5 = \gamma_1\gamma_2\gamma_3\gamma_4$. აღსანიშნავია, რომ დირაკის γ-მატრიცებიდან სულ შეგვიძლია შევადგინოთ 6 დამოუკიდებელი წარმოდგენა. ეს წარმოდგენებია: (γ_1, γ_2, γ_3, γ_4, γ_5); (γ_1, γ_{12}, γ_{13}, γ_{14}, γ_{234}); (γ_2, γ_{12}, γ_{23}, γ_{24}, γ_{134}); (γ_3, γ_{13}, γ_{23}, γ_{34}, γ_{124}); (γ_4, γ_{14}, γ_{24}, γ_{34}, γ_{123}); (γ_5, γ_{123}, γ_{124}, γ_{134}, γ_{234}), სადაც $\gamma_{ikl\cdots m} \equiv \gamma_i\,\gamma_k\,\gamma_l \cdots \gamma_m$.

ზოგიერთი მნიშვნელოვანი ფორმულა. ვიპოვოთ, რის ტოლია $[\sigma\times\sigma]$ ვექტორული ნამრავლი. რადგან σ_l მატრიცები არაკომუტატური მატრიცებია, ამიტომ ეს ვექტორული ნამრავლი ნულის ტოლი არ არის. ვექტორული ნამრავლის განმარტებით $[\mathbf{A}\times\mathbf{B}]_l = \mathcal{E}_{ikl} A_k B_l$, სადაც $\mathcal{E}_{ikl}$ მესამე რანგის ანტისიმეტრიული ერთეულოვანი ტენზორია, გვექნება

$$[\sigma\times\sigma]_j = \mathcal{E}_{jkl}\,\sigma_k\,\sigma_l; \qquad (138,16)$$

$\sigma_k\,\sigma_l$ ნამრავლისათვის გამოვიყენოთ (139,6) ფორმულა, მივიღებთ

$$[\sigma\times\sigma]_j = \mathcal{E}_{jkl}\,[\delta_{kl} + i\mathcal{E}_{klm}\,\sigma_m] = i\mathcal{E}_{jkl}\,\mathcal{E}_{mkl}\sigma_m \qquad (138,17)$$

აქ ჩვენ გავითვალისწინეთ, რომ $\mathcal{E}_{jkl}$ ტენზორის ანტისიმეტრიულობის გამო $\mathcal{E}_{jkl}\,\delta_{kl} = \mathcal{E}_{jkk} = 0$ და $\mathcal{E}_{klm} = \mathcal{E}_{mkl}$. ახლა გავიხსენოთ, რომ

$$\mathcal{E}_{jkl}\,\mathcal{E}_{mkl} = 2\delta_{jm}, \qquad (138,18')$$

[1] i-მამრავლი შემოღებულია იმ მიზნით, რომ ყველა მატრიცა ერმიტული იყოს. γ მატრიცების ორმაგ და სამმაგ ნამრავლებს ხშირად ასე აღნიშნავენ:

$$\gamma_{kj} = i\gamma_k\,\gamma_j, \quad (k<j=1,\ 2,\ 3,\ 4)$$
$$\gamma_{klj} = i\gamma_k\,\gamma_j\,\gamma_l. \quad (k<j<l=1,\ 2,\ 3,\ 4)$$

მაშინ (138,17)-დან σ_m-ით ფილტრაციის ჩატარების შედეგად დაგვრჩება

$$[\sigma\times\sigma]_j = 2i\sigma_j \tag{138,18}$$

ან, თვით ვექტორისათვის

$$[\sigma\times\sigma] = 2i\sigma. \tag{138,19}$$

ამ ტოლობას თუ $\rho_1^2 = 1$-ზე გავამრავლებთ და გავიხსენებთ, რომ $\rho_1\sigma = \alpha$ მივიღებთ

$$[\alpha\times\alpha] = 2i\sigma. \tag{138,20}$$

რადგან $\alpha = i\gamma_4\gamma$, ამიტომ გვექნება

$$[\gamma\times\gamma] = 2i\sigma. \tag{138,21}$$

იგივე ფორმულას პაულის σ^0 მატრიცებისათვის ექნება სახე

$$[\sigma^0\times\sigma^0] = 2i\sigma^0. \tag{138,22}$$

ახლა გამოვიყვანოთ მეტად მნიშვნელოვანი ფორმულა $(\sigma\mathbf{A})(\sigma\mathbf{B})$ ნამრავლისათვის, სადაც $\mathbf{A}$ და $\mathbf{B}$ ვექტორების მდგენელები კომუტატურია σ_l მატრიცებთან, სხვა შეზღუდვა $\mathbf{A}$ და $\mathbf{B}$ ვექტორის მდგენელებს არ ედება. ცხადია, რომ

$$(\sigma\mathbf{A})(\sigma\mathbf{B}) = (\sigma_j A_j)(\sigma_k B_k) = \sigma_j\sigma_k A_j B_k. \tag{138,23}$$

გამოვიყენოთ (138,6) ფორმულა; მივიღებთ

$$(\sigma A)(\sigma B) = (\delta_{jk} + i\mathfrak{E}_{jkl}\sigma_l) A_j B_k = A_j B_j + i\mathfrak{E}_{ljk}\sigma_l A_j B_k =$$

$$= (\mathbf{AB}) + i\sigma_l [\mathbf{A}\times\mathbf{B}]_l. \tag{138,24}$$

მაშასადამე,

$$(\sigma A)(\sigma B) = (\mathbf{AB}) + i(\sigma[\mathbf{A}\times\mathbf{B}]). \tag{138,25}$$

სრულიად ანალოგიურად დამტკიცდება შემდეგი ფორმულების სამართლიანობა:

$$(\alpha A)(\alpha\mathbf{B}) = (\mathbf{AB}) + i(\sigma[\mathbf{A}\times\mathbf{B}]), \tag{138,26}$$

$$(\gamma\mathbf{A})(\gamma\mathbf{B}) = (\mathbf{AB}) + i(\sigma[\mathbf{A}\times\mathbf{B}]), \tag{138,27}$$

$$(\sigma^0\mathbf{A})(\sigma^0\mathbf{B}) = (\mathbf{AB}) + i(\sigma^0[\mathbf{A}\times\mathbf{B}]). \tag{138,28}$$

ამ კერძო შემთხვევაში, როცა $\mathbf{A} = \mathbf{B}$ გვექნება

$$(\sigma\mathbf{A})^2 = \mathbf{A}^2 + i(\sigma[\mathbf{A}\times\mathbf{A}]), \tag{138,29}$$

როცა $\mathbf{A}$ ვექტორის კომპონენტები ერთმანეთთან კომუტატურია, მაშინ

$$(\sigma\mathbf{A})^2 = \mathbf{A}^2. \tag{138,30}$$

ასევე,

$$(\alpha\mathbf{A})^2 = (\gamma\mathbf{A})^2 = \mathbf{A}^2;\ (\sigma^0\mathbf{A})^2 = \mathbf{A}^2. \tag{138,31}$$

როცა $\mathbf{n} = \mathbf{A}$ ერთეულოვანი ვექტორია, მაშინ

$$(\sigma\mathbf{n})^2 = (\alpha\mathbf{n})^2 = (\gamma\mathbf{n})^2 = 1,\ (\sigma^0\mathbf{n})^2 = 1. \tag{138,32}$$

ვთქვათ $\mathbf{A} = \hat{\mathbf{l}}$ და $\mathbf{B} = \hat{\mathbf{p}}$, სადაც $\hat{\mathbf{l}}$ ორბიტალური მომენტის ოპერატორია $\hat{\mathbf{p}}$ კი იმპულსის. რადგან $(\hat{\mathbf{l}}\,\hat{\mathbf{p}}) = ([\mathbf{r}\times\hat{\mathbf{p}}]\,\hat{\mathbf{p}}) = 0$, ამიტომ

$$(\alpha\hat{\mathbf{l}})(\alpha\hat{\mathbf{p}}) = i(\sigma[\hat{\mathbf{l}}\times\hat{\mathbf{p}}]) \tag{138,33}$$

ზოგიერთი გამოსახულების შპურის გამოთვლა. მთელ რიგ თეორიულ გამოთვლებში ხშირად საჭიროა ზემოთ განხილული მატრიცებისა და მათი ნამრავლების შპურების (კვლების) პოვნა. ამასთან, გავიხსენოთ, რომ შპური ეწოდება დიაგონალური ელემენტების ჯამს. აშკარაა

$$\mathrm{Sp}\,\sigma_l = \mathrm{Sp}\,\alpha_l = \mathrm{Sp}\,\gamma_l = 0,\ \ \mathrm{Sp}\,\sigma_l^2 = 0. \quad (l=1,\ 2,\ 3) \tag{138,34}$$

აგრეთვე ცხადია, რომ ერთეულოვანი მატრიცის შპური ტოლია მატრიცის რანგისა. ასე რომ, მეორე რანგის ერთეულოვანი მატრიცის შპური ტოლი იქნება 2-ის, მეოთხე რანგისა კი 4-ის, ამიტომ

$$\mathrm{Sp}\,\sigma_x^{0\,2} = \mathrm{Sp}\,\sigma_y^{0\,2} = \mathrm{Sp}\,\sigma_z^{0\,2} = 2, \tag{138,35}$$

$$\mathrm{Sp}\,\sigma_1^2 = \mathrm{Sp}\,\sigma_2^2 = \mathrm{Sp}\,\sigma_3^2 = \mathrm{Sp}\,\alpha_1^2 = \ldots = \mathrm{Sp}\,\gamma_1^2 = 4. \tag{138,36}$$

ახლა განვიხილოთ შპური პაულის მატრიცების ნამრავლებიდან. (138,12) ფორმულის თანახმად

$$\mathrm{Sp}\,\sigma_j^0\,\sigma_k^0 = \mathrm{Sp}\,(\delta_{jk} + i\mathfrak{E}_{jkl}\,\sigma_l^0) = \delta_{jk}\,\mathrm{Sp}\,1 + i\mathfrak{E}_{jkl}\,\mathrm{Sp}\,\sigma_l = \delta_{jk}\,\mathrm{Sp}\,1$$

მაშასადამე,

$$\mathrm{Sp}\,\sigma_j^0\,\sigma_k^0 = 2\delta_{jk}. \tag{138,37}$$

ადვილად ვიპოვით $(\sigma^0\,\mathbf{A})\,(\sigma^0\,\mathbf{B})$ ნამრავლის შპურს. ცხადია, რომ

$$\mathrm{Sp}\,(\sigma^0\,\mathbf{A})\,(\sigma^0\,\mathbf{B}) = \mathrm{Sp}\,\sigma_j^0\,\sigma_k^0\,A_j\,B_h = \mathrm{Sp}\,(\sigma_j^0\,\sigma_k^0)\,A_j\,B_h =$$

$$= 2\delta_{jk}\,A_j\,B_k = 2(\mathbf{AB}); \tag{138,38}$$

მაშასადამე,

$$\mathrm{Sp}\,(\sigma^0\,\mathbf{A})\,(\sigma^0\,\mathbf{B}) = 2\,(\mathbf{AB}). \tag{138,39}$$

ვიპოვოთ $\mathrm{Sp}\,(\sigma_j^0\,\sigma_k^0\,\sigma_l^0)$. (138,12) ფორმულის გამოყენებით შეგვიძლია დავწეროთ

$$\mathrm{Sp}\,(\sigma_j^0\,\sigma_k^0\,\sigma_l^0) = \mathrm{Sp}\,(\delta_{jk} + i\mathfrak{E}_{jkn}\,\sigma_n^0)\,\sigma_l^0 = i\mathfrak{E}_{jkn}\,\mathrm{Sp}\,\sigma_n^0\,\sigma_l^0,$$

თუ გავითვალისწინებთ, რომ $\mathrm{Sp}\,(\sigma_n^0\,\sigma_l^0) = 2\delta_{nl}$, მივიღებთ

$$\mathrm{Sp}\,(\sigma_j^0\,\sigma_k^0\,\sigma_l^0) = 2i\mathfrak{E}_{jkl}. \tag{138,40}$$

ამის შემდეგ ადვილად ვიპოვით, რომ

$$\mathrm{Sp}\,(\sigma^0\,\mathbf{A})\,(\sigma^0\,\mathbf{B})\,(\sigma^0\,\mathbf{C}) = A_j\,B_h\,C_l\,\mathrm{Sp}\,(\sigma_j^0\,\sigma_k^0\,\sigma_l^0) = 2i\mathfrak{E}_{jkl}\,A_j\,B_h\,C_l$$

თუ გავიხსენებთ $\mathbf{B}$ და $\mathbf{C}$ ვექტორების ვექტორული ნამრავლის $\mathfrak{E}_{jkl}$ ტენზორით წარმოდგენას, გვექნება

$$\mathrm{Sp}\,(\sigma^0\,\mathbf{A})\,(\sigma^0\,\mathbf{B})\,(\sigma^0\,\mathbf{C}) = 2iA_j\,\mathfrak{E}_{jkl}\,B_h\,C_l = 2iA_j\,[\mathbf{B}\times\mathbf{C}]_j,$$

საიდანაც

$$\mathrm{Sp}\,(\sigma^0\,\mathbf{A})\,(\sigma^0\,\mathbf{B})\,(\sigma^0\,\mathbf{C}) = 2i\,(\mathbf{A}\,[\mathbf{B}\times\mathbf{C}]), \tag{138,41}$$

ახლა განვიხილოთ შპური $\sigma_j^0\,\sigma_k^0\,\sigma_l^0\,\sigma_m^0$ ნამრავლიდან. გვექნება

$$\mathrm{Sp}\,(\sigma_j^0\,\sigma_k^0\,\sigma_l^0\,\sigma_m^0) = \mathrm{Sp}\,(\delta_{jk} + i\mathfrak{E}_{jk\nu}\,\sigma_\nu^0)\,(\delta_{lm} + i\mathfrak{E}_{lm\mu}\,\sigma_\mu^0) =$$

$$= 2\delta_{jk}\,\delta_{lm} - \mathfrak{E}_{jk\nu}\,\mathfrak{E}_{lm\mu}\,\mathrm{Sp}\,(\sigma_\nu^0\,\sigma_\mu^0).$$

(138,37) ფორმულის თანახმად $\mathrm{Sp}\,(\sigma_\nu^0\,\sigma_\mu^0) = 2\delta_{\nu\mu}$, ამიტომ თუ გავითვალისწინებთ, რომ

$$\mathfrak{E}_{jk\mu}\,\mathfrak{E}_{lm\mu} = \delta_{jl}\,\delta_{km} - \delta_{jm}\,\delta_{kl}, \tag{138,42}$$

გვექნება

$$\mathrm{Sp}\,(\sigma_j^0\,\sigma_k^0\,\sigma_l^0\,\sigma_m^0) = 2\delta_{jk}\,\delta_{lm} + 2\delta_{jm}\,\delta_{kl} - 2\delta_{jl}\,\delta_{km}. \tag{138,43}$$

ამ ფორმულის გამოყენებით ადვილად ვაჩვენებთ, რომ

$$\mathrm{Sp}\,[\sigma^0\,(\sigma^0\,\mathbf{A})\,(\sigma^0\,\mathbf{B})\,(\sigma^0\,\mathbf{C})] = 2\mathbf{A}\,(\mathbf{BC}) + 2\mathbf{C}\,(\mathbf{AB}) - 2\mathbf{B}\,(\mathbf{AC}). \tag{138,44}$$

ანალოგიურ ფორმულებს ადგილი აქვთ σ, α და γ-მატრიცებისათვისაც. მაგალითად,

$$\mathrm{Sp}\,\alpha_j\,\alpha_k = \mathrm{Sp}\,(\delta_{jk} + i\mathfrak{E}_{jkl}\,\sigma_l) = 4\delta_{jk}. \tag{138,45}$$

თუ **A** და **B** ვექტორები კომუტატურია α-მატრიცებთან, მაშინ

$$\mathrm{Sp}\,(\alpha A)\,(\alpha B) = 4\,(AB). \tag{138,46}$$

ასევე

$$\mathrm{Sp}\,(\gamma_j \gamma_k) = 4\delta_{jk} \tag{138,47}$$

$$\mathrm{Sp}\,(\gamma A)\,(\gamma B) = 4\,(AB). \tag{138,48}$$

განვიხილოთ $\mathrm{Sp}\,(\alpha_j \alpha_k \alpha_l)$. ამ სიდიდის გამოხატვა $\mathfrak{E}_{jkl}$ ტენზორით აღარ შეიძლება, რადგან სამი პოლარული ვექტორის ნამრავლი პოლარული ტენზორია, მაშინ როცა $\mathfrak{E}_{jkl}$ აქსიალურია. (138,5) ფორმულის გამოყენებით ადვილად დავინახავთ, რომ $\mathrm{Sp}\,(\alpha_j \alpha_k \alpha_l) = 0$, ხოლო

$$\mathrm{Sp}\,(\alpha_j \alpha_k \alpha_l \alpha_m) = 4\delta_{jk}\,\delta_{lm} + 4\delta_{jm}\,\delta_{kl} - 4\delta_{jl}\,\delta_{km}. \tag{138,49}$$

ამ ფორმულის გამოყენებით ადვილად მივიღებთ

$$\mathrm{Sp}\,|\alpha\,(\alpha A)\,(\alpha B)\,(\alpha C)| = 4A\,(BC) - 4B\,(AC) + 4C\,(AB). \tag{138,50}$$

ასევე ადვილად ვაჩვენებთ, რომ

$$\mathrm{Sp}\,(\alpha_j \alpha_k \sigma_l) = 4i\mathfrak{E}_{jkl}, \tag{138,51}$$

საიდანაც

$$\mathrm{Sp}\,(\alpha A)\,(\alpha B)\,(\sigma C) = 4i\,(A\,[B \times C]) \tag{138,52}$$

ძნელი არ არის დამტკიცება, რომ $\mathrm{Sp}\,(\alpha_j \alpha_k \alpha_m \alpha_l) = \mathrm{Sp}\,(\alpha_j \alpha_k \sigma_m \sigma_l)$, ამიტომ (138,49) ფორმულა სამართლიანი იქნება $\mathrm{Sp}\,(\alpha_j \alpha_k \sigma_m \sigma_l)$-ისთვისაც.

§ 139. რელატივისტური ინვარიანტები

დირაკის მატრიცების საშუალებით რელატივისტური ინვარიანტების შედგენას დიდი მნიშვნელობა აქვს β-დაშლის თეორიაში, ელემენტარულ ნაწილაკთა ფიზიკაში და ატომბირთვის თეორიაში. ინვარიანტული სიდიდის ქვეშ ვგულისხმობთ სკალარულ სიდიდეს, რომელიც არ იცვლება კოორდინატთა სისტემის არც მობრუნებისა და არც ინვერსიის დროს. სკალარული სიდიდე კი შეგვიძლია შევადგინოთ სხვადასხვა რანგის ტენზორების საშუალებით. ასე მაგალითად, თუ ჩვენ გვაქვს მეორე რანგის ორი ტენზორი T_{ik} და A_{lm}, მაშინ ამ ტენზორთა გადამრავლებით და ორჯერ დაქვეითებით მივიღებთ სკალარს $T_{ik} A_{ik}$. სადაც i და k-თი იგულისხმება აჯამვა. ამიტომ რელატივისტური ინვარიანტების მოსაძებნად საჭიროა დირაკის მატრიცების საშუალებით შევადგინოთ სხვადასხვა რანგის ტენზორები. ვისარგებლოთ დირაკის γ-მატრიცებით, ხოლო დირაკის ტალღური ფუნქციისათვის $\overline{\psi} = \psi^+ \gamma_4$ გამოსახულებით.

როგორც ვიცით, ოთხვექტორი ეწოდება ისეთი ოთხი A_μ სიდიდის ერთობლიობას, რომლებიც კოორდინატთა სისტემის მობრუნებისას გარდაიქმნებიან როგორც კოორდინატები, ე. ი. კანონით

$$A_\mu = a_{\nu\mu} A'_\nu, \tag{139,1}$$

სადაც $\mu = 1, 2, 3, 4$ თავისუფალი ინდექსია, $\nu = 1, 2, 3, 4$ კი მუნჯი. ასევე მეორე და მესამე რანგის ტენზორები ოთხგანზომილებიან სივრცეში განისაზღვრებიან ფორმულებით:

$$T_{\mu\nu} = a_{j\mu}\, a_{l\nu}\, T'_{jl} \tag{139,2}$$

$$\Lambda_{\mu\nu\eta} = a_{j\mu}\, a_{l\nu}\, a_{s\eta}\, \Lambda'_{jls} \tag{139,3}$$

სადაც $a_{\mu\nu}$ კოეფიციენტები მიმართულების კოსინუსებია.

დავამტკიცოთ, რომ დირაკის მატრიცებიდან შეგვიძლია შევადგინოთ შემდეგი ხუთი სხვადასხვა რანგის ტენზორი:

$$A_0 = \bar{\psi}\psi, \tag{139,4}$$

$$A_\mu = i\bar{\psi}\gamma_\mu\psi, \tag{139,5}$$

$$A_{\mu\nu} = i\bar{\psi}\gamma_\mu\gamma_\nu\psi, \quad (\mu \neq \nu) \tag{139,6}$$

$$A_{\mu\nu\eta} = i\bar{\psi}\gamma_\mu\gamma_\nu\gamma_\eta\psi, \quad (\mu \neq \nu \neq \eta \neq \mu) \tag{139,7}$$

$$A_0^{ps} = \bar{\psi}\gamma_5\psi. \tag{139,8}$$

სადაც A_0 არის ნულოვანი რანგის ტენზორი, ე. ი. სკალარი, A_μ — პირველი რანგის ტენზორი, ე. ი. ოთხვექტორი; $A_{\mu\nu}$ — მეორე რანგის ანტისიმეტრიული ტენზორია, $A_{\mu\nu\eta}$ კი — მესამე რანგისა და ბოლოს A_0^{ps} ფსევდოსკალარია.

თავდაპირველად აღვნიშნოთ, რომ ყველა აქ დაწერილი სიდიდე ერმიტულია, ხოლო $\gamma_5 = \gamma_1\gamma_2\gamma_3\gamma_4$. მივუთითოთ აგრეთვე, რომ უფრო მაღალი რანგის ტენზორების შედგენა დირაკის ოთხი γ-მატრიციდან შეუძლებელია, რადგან ასეთი ტენზორები წინა პარაგრაფში განხილული ფორმულების გამოყენებით დაიყვანება ზემოთ დაწერილ გამოსახულებებზე. უფრო მეტიც, მესამე რანგის (139,7) ტენზორი დაიყვანება გამოსახულებაზე $i\bar{\psi}\gamma_5\gamma_\mu\psi$, რომელიც, როგორც ქვევით ვაჩვენებთ, წარმოადგენს ფსევდოვექტორს. მართლაც, მაგალითად, $A_{123} = i\bar{\psi}\gamma_5\gamma_4\psi$, $A_{234} = -i\bar{\psi}\gamma_5\gamma_1\psi$ და ა. შ.

მაშასადამე, ზემოთ მოტანილი გამოსახულების ნაცვლად შეგვიძლია განვიხილოთ ტენზორები:

$$A_0 = \bar{\psi}\psi, \ -\text{სკალარი} \tag{139,9}$$

$$A_0^{ps} = \bar{\psi}\gamma_5\psi, \ -\text{ფსევდოსკალარი} \tag{139,10}$$

$$A_\mu = i\bar{\psi}\gamma_\mu\psi, \ -\text{ვექტორი} \tag{139,11}$$

$$A_\mu^{ps} = i\bar{\psi}\gamma_5\gamma_\mu\psi, \ -\text{ფსევდოვექტორი} \tag{139,12}$$

$$A_{\mu\nu} = i\bar{\psi}\gamma_\mu\gamma_\nu\psi \ -\text{მეორე რანგის ანტისიმეტრიული ტენზორი} \tag{139,13}$$

საჭიროა დავამტკიცოთ ამ გამოსახულებების სამართლიანობა. დირაკის განტოლების ინვარიანტობის საკითხის შესწავლის დროს ჩვენ ვაჩვენეთ, რომ $J_\mu = ic\bar{\psi}\gamma_\mu\psi$ წარმოადგენს ოთხვექტორს; მაშასადამე, A_μ სიდიდე, რომელიც პროპორციულია დენის ოთხვექტორისა $J_\mu = cA_\mu$, წარმოადგენს ოთხვექტორს.

(135,58) და (135,60) ფორმულების თანახმად $\bar{\psi}$ ფუნქციისა და γ_μ მატრიცებისათვის, წრფივი გარდაქმნების დროს, გვაქვს შემდეგი ფორმულები:

$$\bar{\psi} = \bar{\psi}'\Omega; \ \psi = \Omega^{-1}\psi' \tag{139,14}$$

$$\Omega\gamma_\mu\Omega^{-1} = a_{\nu\mu}\gamma_\nu. \tag{139,15}$$

ვაჩვენოთ, რომ $A_0 = \bar{\psi}\psi$ სკალარია. გვექნება

$$A_0 = \bar{\psi}\psi = \bar{\psi}'\Omega\Omega^{-1}\psi' = \bar{\psi}'\psi' = A_0'; \tag{139,16}$$

ამგვარად, A_0 მართლაც სკალარი ყოფილა; ამასთან, იგი იქნება ნამდვილი სკალარი, რამდენადაც კოორდინატთა ღერძების ინვერსიისას ნიშანს არ იცვლის. მთლიანობისათვის ერთხელ კიდევ ვაჩვენოთ, რომ A_μ ოთხვექტორია; გვექნება

$$A_\mu = i\bar{\psi}\gamma_\mu\psi = i\bar{\psi}'\Omega\gamma_\mu\Omega^{-1}\psi'$$

გამოვიყენოთ (139,15) გარდაქმნა; მივიღებთ

$$A_\mu = i\bar{\psi}' a_{\nu\mu} \gamma_\nu \psi' = a_{\nu\mu} (i\bar{\psi}' \gamma_\nu \psi') = a_{\nu\mu} A'_\nu; \qquad (139,17)$$

რაც, მართლაც, ოთხვექტორის გარდაქმნის კანონს წარმოადგენს. ახლა დავამტკიცოთ, რომ $A_{\mu\nu}$ მეორე რანგის ტენზორია. მართლაც,

$$A_{\mu\nu} = i\bar{\psi}\gamma_\mu \gamma_\nu \psi = i\bar{\psi}' \Omega\gamma_\mu \Omega^{-1} \Omega\gamma_\nu \Omega^{-1} \psi'$$

ან, (139,15) გარდაქმნის გამოყენებით, გვექნება

$$A_{\mu\nu} = a_{\rho\mu} a_{\rho\nu} (i\bar{\psi}' \gamma_\rho \gamma_\rho \psi') = a_{\rho\mu} a_{\rho\nu} A'_{\rho\rho}, \qquad (139,18)$$

რაც წარმოადგენს მეორე რანგის ტენზორის გარდაქმნის კანონს.

ახლა განვიხილოთ A_0^{ps} სიდიდე. რადგან γ_5 კომუტატურია $\gamma_\mu \gamma_\nu$ ნამრავლთან, ამიტომ იგი კომუტატურია Ω და Ω^{-1} მატრიცებთანაც; რის გამო გვექნება

$$A_0^{ps} = \bar{\psi}\gamma_5\psi = \bar{\psi}' \Omega\gamma_5 \Omega^{-1} \psi' = \bar{\psi}' \gamma_5 \psi' = A_0^{ps'}, \qquad (139,19)$$

ე. ი. ეს სიდიდე სკალარია სისტემის მობრუნების მიმართ. რაც შეეხება ინვერსიას, რადგან ინვერსიის დროს $\Omega = \gamma_4$, ამიტომ

$$A_0^{ps} = \bar{\psi}' \gamma_4 \gamma_5 \gamma_4 \psi' = -A_0^{ps'}, \qquad (139,20)$$

ე. ი. A_0^{ps} უოფილა ფსევდოსკალარი.

რადგან A_μ^{ps} სიდიდე A_μ ოთხვექტორისაგან განსხვავდება γ_5 მამრავლით, ამიტომ იგი ფსევდოვექტორი იქნება,

ამგვარად, ყველა ზემოთ ჩამოწერილი გამოსახულების სამართლიანობა დამტკიცებულია. ხშირად, $\gamma_\mu \gamma_\nu$ ნამრავლის ნაცვლად (139,13) ფორმულაში იხილავენ ტენზორს

$$\varkappa_{\mu\nu} = \frac{1}{2} (\gamma_\mu \gamma_\nu - \gamma_\nu \gamma_\mu), \qquad (139,21)$$

რომელიც, თავისთავად ცხადია, ანტისიმეტრიულია.

ამის შემდეგ ადვილია ინვარიანტული სიდიდეების შედგენა. დავუშვათ, რომ (139,9) — (139,13) სიდიდეები დაწერილი გვაქვს ორი სხვადასხვა ნაწილაკისათვის, რომელთა ტალღური ფუნქციებია ψ და φ. რომ მივიღოთ ინვარიანტული გამოსახულებები, საკმარისია ერთმანეთზე გავამრავლოთ ერთი და იმავე ტიპის (რანგის) გამოსახულებანი. მივიღებთ ხუთ ინვარიანტულ სიდიდეს (ნამდვილ სკალარს). ამ ინვარიანტებს ექნებათ შემდეგი სახე:

$$(\bar{\psi}\psi)(\bar{\varphi}\varphi), \qquad (139,22)$$

$$(\bar{\psi}\gamma_5\psi)(\bar{\varphi}\gamma_5\varphi), \qquad (139,23)$$

$$(\bar{\psi}\gamma_\mu\psi)(\bar{\varphi}\gamma_\mu\varphi), \qquad (139,24)$$

$$(\bar{\psi}\gamma_5\gamma_\mu\psi)(\bar{\varphi}\gamma_5\gamma_\mu\varphi), \qquad (139,25)$$

$$(\bar{\psi}\gamma_\mu\gamma_\nu\psi)(\bar{\varphi}\gamma_\mu\gamma_\nu\varphi). \qquad (139,26)$$

ერთხელ კიდევ მივუთითოთ, რომ ამ გამოსახულებებში გამეორებული ინდექსით იგულისხმება აჯამვა ერთიდან ოთხამდე.

უკანასკნელი ფორმულები წარმოადგენენ ყველა შესაძლო ინვარიანტებს, რომელთა შედგენაც კი შეიძლება დირაკის მატრიცების საშუალებით.

1. დაიწეროთ დირაკის განტოლება

$$\gamma_\mu \frac{\partial \psi}{\partial x_\mu} + \varkappa \psi = 0$$

ნაწილაკისათვის, რომლის მასა $m=0$ და გაერკვნეთ: აკმაყოფილებს თუ არა ამ განტოლებას $\psi = \gamma_5 \psi$ და $\varphi = (1 \pm \gamma_5)\psi$ ფუნქციები.

2. რომელ განტოლებას დააკმაყოფილებს $\Phi = \gamma_5 \psi$ ტალღური ფუნქცია, ან შემთხვევაში, როცა მასა არ უდრის ნულს?

3. ვაჩვენოთ, რომ $A_{klm} = i\bar{\psi}\gamma_k \gamma_l \gamma_m \psi$ აქსიალური ვექტორია.

4. დავამტკიცოთ, რომ 1, β, σ და $\beta\sigma$ მატრიცები (ე. წ. ლუწი მატრიცები) ტალღური ფუნქციის კომპონენტებს არ გადასვამენ, ე. ი. ზედა ორ და ქვედა ორ კომპონენტებს ერთმანეთში არ ურევენ, ხოლო α $\beta\alpha$, $\gamma_5 = -i\alpha_1\alpha_2\alpha_3$ და $\beta\gamma_5$ მატრიცები (ე. წ. კენტი მატრიცები) გადასვამენ ტალღური ფუნქციის კომპონენტებს.

5. აჩვენეთ, რომ ϱ-მატრიცებისათვის სამართლიანია ფორმულა.

$$\varrho_j \varrho_k = \delta_{jk} + i\varepsilon_{jkl}\varrho_l.$$

6. დაამტკიცეთ, რომ

$$(\gamma A)(\gamma B) + (\gamma B)(\gamma A) = 2(AB),$$

$$(\gamma A)(\gamma B) - (\gamma B)(\gamma A) = 2i(\sigma[A \times B]).$$

7. იპოვეთ $(\sigma p)(\sigma l)$, $(\sigma r)(\sigma l)$ და $(\sigma r)(\sigma p)$ ნამრავლები, სადაც $\hat{l} = [r \times \hat{p}]$ იმპულსის მომენტის ოპერატორია.

8. აჩვენეთ, რომ პაულის მატრიცების ნამრავლი, ასევე დირაკის სიგმა და ϱ მატრიცების ნამრავლი ტოლია i-სი, ე. ი.

$$\sigma_x^0 \sigma_y^0 \sigma_z^0 = i, \quad \sigma_1 \sigma_2 \sigma_3 = i, \quad \varrho_1 \varrho_2 \varrho_3 = i.$$

9. აჩვენეთ, რომ $\sigma_j \sigma_k$ ნამრავლისათვის სამართლიანია შემდეგი ცხრილი:

	1	σ_1	σ_2	σ_3
1	1	σ_1	σ_2	σ_3
σ_1	σ_1	1	$i\sigma_3$	$-i\sigma_2$
σ_2	σ_2	$-i\sigma_3$	1	$i\sigma_1$
σ_3	σ_3	$-i\sigma_2$	$-i\sigma_1$	1

სადაც σ_1, σ_2, σ_3 დირაკის ან პაულის მატრიცებია. $\sigma_j \sigma_k$ ნამრავლის პირველი მატრიცა აიღება პირველი სვეტიდან, მეორე კი პირველი სტრიქონიდან.

10. დაამტკიცეთ, რომ $\gamma_j \gamma_k$ ნამრავლისათვის სამართლიანია შემდეგი ცხრილი:

	1	γ_1	γ_2	γ_3	γ_4	γ_5
1	1	γ_1	γ_2	γ_3	γ_4	γ_5
γ_1	γ_1	1	$i\sigma_3$	$i\sigma_2$	$i\varrho_1\sigma_1$	$\gamma_2\gamma_3\gamma_4$
γ_2	γ_2	$-i\sigma_3$	1	$i\sigma_1$	$i\varrho_1\sigma_2$	$\gamma_3\gamma_1\gamma_4$
γ_3	γ_3	$-i\sigma_2$	$-i\sigma_1$	1	$i\varrho_1\sigma_3$	$\gamma_1\gamma_2\gamma_4$
γ_4	γ_4	$-i\varrho_1\sigma_1$	$-i\varrho_1\sigma_2$	$-i\varrho_1\sigma_3$	1	$\gamma_3\gamma_1\gamma_3$
γ_5	γ_5	$\gamma_3\gamma_2\gamma_4$	$\gamma_1\gamma_3\gamma_4$	$\gamma_2\gamma_1\gamma_4$	$\gamma_1\gamma_2\gamma_3$	1

სადაც σ_1, σ_2, σ_3 დირაკის „სიგმა“ მატრიცებია. ხოლო ϱ_1, ϱ_2, ϱ_3 — „რო“ მატრიცები. $\gamma_j\gamma_k$ ნამრავლში პირველი მატრიცა აღებულია პირველი სექტიდან, მეორე კი — პირველი სტრიქონიდან; $\gamma_j\gamma_k$ მოთავსებულია შესაბამისი სტრიქონისა და სვეტის გადაკვეთაზე.

11. ვაჩვენოთ, რომ

$$(\sigma_1^0\,\sigma_2^0)^2=3-2(\sigma_1^0\,\sigma_2^0),$$

სადაც იგულისხმება, რომ σ_{1i}^0 მატრიცები კომუტატურია σ_{2k}^0 მატრიცებთან.

ა მ ო ხ ს ნ ა: თუ გამოვიყენებთ (138,12) ფორმულას, გვექნება

$$(\sigma_1^0\,\sigma_2^0)^2=\sigma_{1j}^0\,\sigma_{2j}^0\,\sigma_{1k}^0\,\sigma_{2k}^0=(\sigma_{1j}^0\,\sigma_{1k}^0)\,(\sigma_{2j}^0\,\sigma_{2k}^0)=$$

$$=(\delta_{jk}+i\varepsilon_{jkl}\,\sigma_{1l}^0)\,(\delta_{jk}+i\varepsilon_{jkm}\,\sigma_{2m}^0)=\delta_{jj}-\varepsilon_{jkl}\,\varepsilon_{jkm}\,\sigma_{jl}^0\,\sigma_{2m}^0.$$

გავიხსენოთ, რომ $\varepsilon_{jkl}\,\varepsilon_{jkm}=2\delta_{lm}$ და $\delta_{jj}=3$, მაშინ

$$(\sigma_1^0\,\sigma_2^0)^2=3-2\delta_{lm}\,\sigma_{jl}^0\,\sigma_{2l}^0=3-2(\sigma_1^0\,\sigma_2^0),$$

ე. ი. მივიღეთ დასამტკიცებელი ტოლობა.

12. დავამტკიცოთ, რომ ნებისმიერი მთელი დადებითი n-ისათვის სამართლიანია ტოლობა

$$(\sigma_1^0\,\sigma_2^0)^n=a_n+b_n\,(\sigma_1^0\,\sigma_2^0),$$

სადაც

$$a_n=\frac{3+(-3)^n}{4},\qquad b_n=\frac{1-(-3)^n}{4}.$$

ა მ ო ხ ს ნ ა: რადგან $(\sigma_1^0\,\sigma_2^0)^2=3-2\,(\sigma_1^0\,\sigma_2^0)$, ამიტომ $(\sigma_1^0\,\sigma_2^0)$ ნებისმიერი ხარისხი მართლაც გამოხატული იქნება დასამტკიცებელი ტოლობის სახით. ვიპოვოთ a_n და b_n კოეფიციენტები. ამისათვის გავიხსენოთ, რომ $(\sigma_1^0\,\sigma_2^0)$-ის საკუთარი მნიშვნელობა ტრიპლეტურ მდგომარეობაში ერთის ტოლია, სინგლეტურში კი — 3-ის. ამიტომ გვექნება ორი ტოლობა

$$1=a_n+b_n,\quad (-3)^n=a_n-3b_n$$

საიდანაც $a_n=\frac{1}{4}\,[3+(-3)^n]$ და $b_n=\frac{1}{4}\,[1-(-3)^n]$. ამგვარად,

$$(\sigma_1^0\,\sigma_2^0)^n=\frac{3+(-3)^n}{4}+\frac{1-(-3)^n}{4}\,(\sigma_1^0\,\sigma_2^0).$$

თავი XVIII

დირაკის განტოლების გამოყენებანი

აქამდე ჩვენ ვიხილავდით დირაკის განტოლებასთან დაკავშირებულ ზოგად საკითხებს; ამ თავში კი განვიხილავთ იმ შედეგებს, რომლებიც დირაკის განტოლებიდან გამომდინარეობს; სახელდობრ, ჩვენ ვაჩვენებთ, რომ დირაკის განტოლებიდან გამომდინარეობს ელექტრონის სპინისა და მასთან დაკავშირებული მაგნიტური მომენტის არსებობა. გავარკვევთ საკითხს იმის შესახებ, თუ რასთანაა დაკავშირებული ელექტრონის ოთხკომპონენტიანი ტალღური ფუნქციით აღწერა. ამავე თავში განვიხილავთ პოზიტრონის პრობლემას და მასთან დაკავშირებულ საკითხებს. ვაჩვენებთ, რომ არარელატივისტურ ზღვარში დირაკის განტოლება დაიყვანება პაულის განტოლებაზე. ამოეხსნით თავისუფალი ნაწილაკის და წყალბადისებური ატომის ამოცანებს.

§ 140. სტაციონარული მდგომარეობების განტოლება

როგორც ვიცით, თუ ელექტრონი იმყოფება გარეშე ველში, რომლის პოტენციალური ენერგიაა $V(r, t)$, მაშინ დირაკის განტოლებას ექნება სახე

$$\left(\hat{E} - V(r, t) - c(\hat{\alpha p}) - \alpha_4 mc^2\right)\Psi = 0. \quad \left(\hat{E} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\right). \tag{140,1}$$

როცა პოტენციალური ენერგია დროზე ცხადად არაა დამოკიდებული, მაშინ საქმე გვაქვს სტაციონარულ მდგომარეობასთან. ამ შემთხვევაში ამოხსნა შეგვიძლია ვეძებოთ ორი ფუნქციის ნამრავლის სახით, ე. ი.

$$\Psi(r, t) = \psi(r)\varphi(t). \tag{140,2}$$

ანალოგიურად იმისა, რაც გვქონდა შრედინგერის განტოლების განხილვისას, ცვლადთა განცალება $\varphi(t)$ ფუნქციისათვის მოგვცემს

$$\varphi(t) = e^{-iEt/\hbar}, \tag{140,3}$$

ხოლო $\psi(r)$ ფუნქციის განსასაზღვრავად გვექნება განტოლება

$$\left(E - V(r) - c(\hat{\alpha p}) - \alpha_4 mc^2\right)\psi(r) = 0. \tag{140,4}$$

ეს განტოლება შეგვიძლია გადავწეროთ როგორც ენერგიის ოპერატორის საკუთარი ფუნქციებისა და საკუთარი მნიშვნელობების განტოლება

$$\hat{H}\psi = E\psi, \tag{140,5}$$

სადაც ენერგიის ოპერატორი განისაზღვრება ფორმულით

$$\hat{H} = c(\hat{\alpha p}) + \alpha_4 mc^2 + V(r), \tag{140,6}$$

ხოლო E ენერგიის საკუთარი მნიშვნელობაა. α_i-მატრიცების ერმიტულობის გამო ადვილი საჩვენებელია, რომ $\hat{H}$ ერმიტული ოპერატორია, ე. ი. $\hat{H}^{\dagger}=\hat{H}$. ერმიტული ოპერატორის საკუთარი ფუნქციები კი ორთონორმირებულია. ასე მაგალითად, თუ (140,6) ოპერატორის სპექტრი დისკრეტულია, მაშინ დირაკის საკუთარი ფუნქციების გადანომვრა შესაძლებელია და შეგვიძლია Ψ ფუნქციას მივუწეროთ n ინდექსი, სადაც $n=1, 2, 3,\ldots$ ე. ი.

$$\Psi_n=\begin{pmatrix}\psi_{1n}\\ \psi_{2n}\\ \psi_{3n}\\ \psi_{4n}\end{pmatrix} \tag{140,7}$$

ამ ფუნქციების ორთო-ნორმირების პირობას ექნება სახე

$$\int \Psi_n^*(\mathbf{r})\,\Psi_m(\mathbf{r})\,d\mathbf{r}=\delta_{nm}. \tag{140,8}$$

თუ შევიტანთ ბისპინორის (140,7) გამოხატულებას, მაშინ (140,8) პირობა ასეც შეგვიძლია გამოვხატოთ:

$$\sum_{j=1}^{4}\int_{-\infty}^{+\infty}\Psi_{jn}^*(\mathbf{r})\,\Psi_{mj}(\mathbf{r})\,d\mathbf{r}=\delta_{nm}. \tag{140,9}$$

ორთო-ნორმირების (140,8) პირობა შრედინგერის თეორიაში განხილული ორთონორმირების პირობისაგან იმით განსხვავდება, რომ კომპლექსურად შეუღლებული ფუნქციის ნაცვლად გვაქვს ერმიტულად შეუღლებული. თუ (140,5) განტოლებას უწყვეტი სპექტრი აქვს, მაშინ ბისპინორები შეიძლება ვანორმიროთ დირაკის დელტა ფუნქციაზე. მაგალითად, როცა უწყვეტი სპექტრი ხასიათდება $\varkappa$ პარამეტრით, მაშინ

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\Psi_{\varkappa'}^*(\mathbf{r})\,\Psi_{\varkappa}(\mathbf{r})\,d\mathbf{r}=\delta(\varkappa'-\varkappa). \tag{140,10}$$

დირაკის თეორიაში სრულიად ანალოგიურად განისაზღვრება სხვა სიდიდეებიც. მაგალითად, მატრიცული ელემენტისათვის შეგვიძლია დავწეროთ

$$A_{mn}=\int \Psi_m^*\hat{A}\,\Psi_n d\mathbf{r}, \tag{140,11}$$

ხოლო საშუალო მნიშვნელობა განიმარტება ფორმულით

$$\langle A\rangle=\int \Psi^+\hat{A}\,\Psi\,d\mathbf{r}. \tag{140,12}$$

ანალოგიურად განისაზღვრება სხვა სიდიდეებიც.

§ 141. მოძრაობის განტოლება. შენახვის კანონები

მოძრაობის განტოლება დირაკის მექანიკაში ისევე იწერება, როგორც შრედინგერის თეორიაში; სახელდობრ,

$$\frac{d\hat{A}}{dt}=\frac{\partial\hat{A}}{\partial t}+[\hat{H},\ \hat{A}], \tag{141,1}$$

სადაც $\hat{H}$ ჰამილტონიანი განისაზღვრება (140,6) ფორმულით. როცა

$$\frac{d\hat{A}}{dt}=\frac{\partial\hat{A}}{\partial t}+[\hat{H},\ \hat{A}]=0, \tag{141,2}$$

მაშინ $\hat{A}$ ოპერატორის შესაბამისი ფიზიკური A-სიდიდე მოძრაობის ინტეგრალს წარმოადგენს. კერძოდ, როცა $\hat{A}$ დროზე ცხადად არ არის დამოკიდებული პირობა იმისა, რომ A სიდიდე მოძრაობის ინტეგრალი იყოს, მიიღება სახეს

$$\frac{d\hat{A}}{dt} = [\hat{H}, \hat{A}] = 0, \tag{141,3}$$

ე. ი. ამისათვის საჭიროა $\hat{A}$ ოპერატორი კომუტატური იყოს ჰამილტონიანთან.

სტაციონარულ მდგომარეობაში $\hat{H}$ დროზე ცხადად დამოკიდებული არ არის, ამიტომ

$$\frac{d\hat{H}}{dt} = [\hat{H}, \hat{H}] = 0, \tag{141,4}$$

საიდანაც დავასკვნით, რომ ადგილი აქვს ენერგიის შენახვის კანონს.

თავისუფალი ნაწილაკის ჰამილტონიანს აქვს შემდეგი სახე:

$$\hat{H} = c(\alpha \hat{\mathbf{p}}) + \alpha_4 mc^2 \tag{141,5}$$

ამიტომ თავისუფალი ელექტრონისათვის

$$\frac{d\hat{p}_j}{dt} = [\hat{H}, \hat{p}_j] = 0; \tag{141,6}$$

მაშასადამე, ადგილი ექნება იმპულსის შენახვის კანონს: $\mathbf{p} = \text{const}$. ასევე შეინახება ლუწობაც, რადგან ინვერსიის დროს (141,5) ჰამილტონიანი ნიშანს არ იცვლის (გავიხსენოთ, რომ $(\alpha \mathbf{p})$ ნამდვილი სკალარია).

შრედინგერის თეორიაში ცენტრალურ ველში მოძრაობის დროს (ისევე, როგორც იზოლირებული სისტემისათვის) ადგილი ჰქონდა იმპულსის მომენტის კვადრატისა და მისი z-პროექციის შენახვას. დირაკის თეორიაში კი ეს სიდიდეები თავისუფალი ელექტრონისთვისაც კი არ ინახება. ამაში ადვილად დავრწმუნდებით თუ ვიპოვით $\frac{d\hat{l}_z}{dt}$ გამოსახულებას. ცხადია, რომ

$$\frac{d\hat{l}_z}{dt} = [\hat{H}, \hat{l}_z]. \tag{141,7}$$

შევიტანოთ ჰამილტონიანის მნიშვნელობა (141,5)-დან და გავითვალისწინოთ, რომ $\hat{l}_z$ კომუტატურია დირაკის მატრიცებთან, რამდენადაც ისინი არ შეიცავენ არც კოორდინატებს და არც იმპულსებს. ამიტომ

$$\frac{d\hat{l}_z}{dt} = c\alpha_1[\hat{p}_x, \hat{l}_z] + c\alpha_2[\hat{p}_y, \hat{l}_z]; \tag{141,8}$$

$\hat{l}_j$ და $\hat{p}_k$ ოპერატორების კომუტაციის თვისებით $[\hat{p}_x, \hat{l}_z] = \hat{p}_y$ და $[\hat{p}_y, \hat{l}_z] = -\hat{p}_x$; ასე რომ,

$$\frac{d\hat{l}_z}{dt} = c(\alpha_1 \hat{p}_y - \alpha_2 \hat{p}_x). \tag{141,9}$$

ეს გამოსახულება კი ნულს არ უდრის; მაშასადამე, თავისუფალი ელექტრონისთვისაც კი $\hat{l}_z$ მოძრაობის ინტეგრალი არ არის. ასევე არ შეინახება l^2 სიდიდეც. მიზეზს იმისა, თუ დირაკის თეორიაში რატომ არ ინახება ორბიტალური მომენტი, შემდეგ პარაგრაფში გამოვარკვევთ.

§ 142. ელექტრონის სპინი

ვაჩვენოთ, რომ დირაკის განტოლებაში გაოვალისწინებულია ელექტრონის ისეთი დამახასიათებელი სიდიდე, როგორიც არის მისი სპინი. განვიხილოთ თავისუფალი ნაწილაკი. მისი ჰამილტონის ოპერატორი განისაზღვრება ფორმულით

$$\hat{H} = c(\boldsymbol{\alpha}\hat{\mathbf{p}}) + \alpha_4 mc^2. \tag{142,1}$$

წინა პარაგრაფში ვაჩვენეთ, რომ ორბიტალური მომენტის z-პროექციის წარმოებული დროთი

$$\frac{d\hat{l}_z}{dt} = c(\alpha_1 \hat{p}_y - \alpha_2 \hat{p}_x) \tag{142,2}$$

ნულის ტოლი არ არის, რაც იმას ნიშნავს, რომ თავისუფალი ელექტრონის ორბიტალური მომენტის z-პროექცია არ ინახება. მაშასადამე, თავისუფალი ნაწილაკი, თუმცა იგი იზოლირებულია, მაინც რაღაც ურთიერთქმედებას განიცდის, რაც ხელს უშლის ორბიტალური მომენტის მუდმივობას. რადგან გარეშე სხეულები არა გვაქვს, ამიტომ თვით თავისუფალ ნაწილაკს უნდა ჰქონდეს გარკვეული სიდიდე, რომელიც ურთიერთქმედებს თავისივე ორბიტალურ მომენტთან. სწორედ ეს ურთიერთქმედება არღვევს ორბიტალური მომენტის შენახვას. ბუნებრივია ვიფიქროთ, რომ ეს უცნობი სიდიდე ნაწილაკის სპინია. თუ სპინს დავუმატებთ ორბიტალურ მომენტს, მაშინ ყველა ურთიერთქმედება გათვალისწინებული იქნება და ეს საჯამო სიდიდე მოძრაობის ინტეგრალი გახდება. მაშასადამე, შემოვიღოთ ელექტრონის სრული მომენტის ოპერატორი

$$\hat{\mathbf{j}} = \hat{\mathbf{l}} + \hat{\mathbf{s}}, \tag{142,3}$$

სადაც

$$\hat{\mathbf{s}} = \frac{\hbar}{2}\boldsymbol{\sigma}; \tag{142,4}$$

$\boldsymbol{\sigma}(\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3)$ დირაკის σ-მატრიცებია. σ_3 მატრიცის საკუთარი მნიშვნელობები ± 1-ის ტოლია, ამიტომ $s_z = \pm\hbar/2$. ვიპოვოთ $\frac{d}{dt}\hat{j}_z$. ცხადია, რომ

$$\frac{d\hat{j}_z}{dt} = [\hat{H},\ \hat{j}_z] = \frac{d\hat{l}_z}{dt} + \frac{d\hat{s}_z}{dt}. \tag{142,5}$$

ბოლო წევრი ნაპოვნი გვაქვს, ვიპოვოთ—მეორე; გვექნება

$$\frac{d\hat{s}_z}{dt} = [\hat{H},\ \hat{s}_z] = \frac{c\hbar}{2}\{[\alpha_1, \sigma_3]\hat{p}_x + [\alpha_2, \sigma_3]\hat{p}_y + [\sigma_3, \sigma_3]\hat{p}_z\} \tag{142,6}$$

α-მატრიცები გამოვხატოთ σ-მატრიცებით, როგორც ვიცით, $\alpha = \rho_1\sigma$, ამიტომ

$$\frac{d\hat{s}_z}{dt} = \frac{\hbar c}{2}\rho_1([\sigma_1, \sigma_3]\hat{p}_x + [\sigma_2, \sigma_3]\hat{p}_y). \tag{142,7}$$

გამოვიყენოთ (138,10) ფორმულა, რომლის მიხედვით

$$[\sigma_l, \sigma_k] = -\frac{2}{\hbar}\mathcal{E}_{ikl}\sigma_l, \tag{142,8}$$

მაშინ

$$\frac{d\hat{s}_z}{dt} = c\rho_1(\sigma_2\hat{p}_x - \sigma_1\hat{p}_y). \tag{142,9}$$

ან, თუ დავუბრუნდებით ისევ α-მატრიცებს, გვექნება

$$\frac{d\hat{s}_z}{dt} = c\,(\alpha_2 \hat{p}_x - \alpha_1 \hat{p}_y). \tag{142,10}$$

როგორც ვხედავთ, არც ეს სიდიდე არ არის ნული. მაშასადამე, ცალკე არც სპინი წარმოადგენს მოძრაობის ინტეგრალს. სამაგიეროდ, (142,2) და (142,10) ფორმულების (142,5) ტოლობაში შეტანით მივიღებთ

$$\frac{d\hat{j}_z}{dt} = 0, \quad j_z = \text{const}. \tag{142,11}$$

მაშასადამე, ადგილი აქვს სრული მომენტის z-პროექციის შენახვას. ადვილი საჩვენებელია, რომ $\hat{j}^2 = (\hat{j}_x^2 + \hat{j}_y^2 + \hat{j}_z^2)$-იც კომუტატურია $\hat{H}$-თან. გარდა ამისა, $\hat{j}^2$ აგრეთვე კომუტატურია $\hat{j}_z$-თან. ასე რომ, თავისუფალი ელექტრონისათვის ინახება j^2 და j_z. ამასთან, როგორც მომენტთა თეორიიდან ვიცით:

$$j^2 = \hbar^2 j(j+1), \tag{142,12}$$

$$j_z = \hbar m_j, \tag{142,13}$$

სადაც m_j იცვლება $-j$-დან $+j$-მდე, ხოლო $j = 1/2,\ 3/2,\ 5/2, \ldots$

ამგვარად, ჩვენ დავინახეთ, რომ დირაკის განტოლება ავტომატურად შეიცავს სპინს. ამასთან, რელატივისტური მოძრაობის შემთხვევაში სპინი ცალკე გამოყოფილი არ არის. დირაკის თეორიაში, ნაცვლად სპინური და ორბიტალური მომენტებისა, შემოდის ელექტრონის სრული მომენტი, რომელიც მოძრაობის ინტეგრალს წარმოადგენს.

საინტერესოა დირაკის ერთგანზომილებიანი განტოლების განხილვა. ვთქვათ, მოძრაობა ხდება z-ღერძის გასწვრივ, მაშინ ჰამილტონიანს ექნება სახე

$$\hat{H} = c\alpha_3 \hat{p}_z + \alpha_4 mc^2, \tag{142,14}$$

რომელიც იმის გამო, რომ $\alpha_3 = \rho_1\sigma_3$ და $\alpha_4 = \rho_3$, კომუტატური იქნება $\hat{s}_z = \frac{\hbar}{2}\sigma_3$ ოპერატორთან. ცხადია, l^2, l_z და s^2-იც კომუტატურები იქნებიან ჰამილტონიანთან. ასე რომ, მოძრაობის ამ კერძო შემთხვევაში ინახება როგორც ორბიტალური, ისე სპინური მომენტი.

ტალღური ფუნქციის ფიზიკური შინაარსი. ჩვენ ვხედავთ, რომ ელექტრონს აქვს ოთხი თავისუფლების ხარისხი, რომელთაგან სამი ჩვეულებრივი კოორდინატია, მეოთხე კი წარმოადგენს სპინს. ამასთან, სპინური s_z-კოორდინატი იღებს მხოლოდ ორ მნიშვნელობას $+\hbar/2$ და $-\hbar/2$-ს, ამიტომ ψ ფუნქცია ფაქტიურად ორკომპონენტიანი უნდა იყოს

$$\psi(\mathbf{r},\ s_z;\ t) = \begin{pmatrix} \psi_1\left(\mathbf{r},\ \frac{\hbar}{2};\ t\right) \\ \psi_2\left(\mathbf{r},\ -\frac{\hbar}{2};\ t\right) \end{pmatrix}. \tag{142,15}$$

გარდა ამისა, რელატივისტურ მექანიკაში თავისუფალი ნიწილაკის ენერგიასა და იმპულსს შორის გვაქვს დამოკიდებულება

$$E = \pm\sqrt{p^2c^2 + m^2c^4}, \tag{142,16}$$

სადაც m უძრაობის მასაა. კლასიკურ მექანიკაში ფესვის წინ აღება დადებითი ნიშანი, რადგან კინეტიკური ენერგია არ შეიძლება უარყოფითი იყოს.

როგორც (142,16) ფორმულიდან ჩანს, ენერგია აბსოლუტური მნიშვნელობით არ შეიძლება mc^2-ზე ნაკლები აღმოჩნდეს, ამიტომ არსებობს ენერგიის $2mc^2$ ინტერვალი, რომელშიაც მოხვედრა ენერგიას საზოგადოდ არ შეუძლია. კლასიკურ მექანიკაში ყველა სიდიდე უწყვეტად იცვლება, ამიტომ ენერგია, რომელიც ერთხელ განსაზღვრულია დადებითი ნიშნით, არ შეიძლება უარყოფითი გახდეს, რადგან მან ამისათვის $2mc^2$ ნახტომი უნდა გააკეთოს, რაც მისი უწყვეტობის გამო შეუძლებელია. აქედან უნდა დავასკვნათ, რომ კლასიკურ მექანიკაში კინეტიკური ენერგია ყოველთვის დადებითი რჩება. კვანტურ მექანიკაში კი შესაძლებელია ნახტომისებური გადასვლები. მაგალითად, ელექტრონს, რომლის ენერგია მეტია mc^2-ზე, შეუძლია გამოასხივოს სათანადო ენერგიის γ-კვანტი და აღმოჩნდეს ისეთ მდგომარეობაში, რომელშიაც მისი ენერგია ნაკლები იქნება—mc^2-ზე. ამის გამო, კვანტურ მექანიკაში საჭიროა ენერგიის ორივე ნიშნის გათვალისწინება. შედეგად, დირაკის თეორიაში მდგომარეობა უნდა დახასიათდეს ოთხი ტალღური ფუნქციით.

სიდიდე $\rho=\psi^+\psi$ წარმოადგენს ალბათობის სიმკვრივეს, ე. ი. იგი არის ალბათობა იმისა, რომ ელექტრონი მოხვდება სივრცის ერთეულოვან მოცულობაში $+\hbar/2$ ან $-\hbar/2$ სპინის პროექციითა და $E>0$ ან $E<0$ ენერგიით.

§ 143. დირაკის განტოლების არარელატივისტური ზღვარი, მაგნიტური მომენტი, პაულის განტოლება

ჩვენ ზემოთ დავინახეთ, რომ დირაკის განტოლება შეიცავს ელექტრონის ისეთ მახასიათებელ სიდიდეს, როგორიც არის სპინი. ნახევრის ტოლი სპინი გააჩნია სხვა ნაწილაკებსაც, მაგალითად: პროტონს, ნეიტრონს, ელექტრონს, პოზიტრონს, ნეიტრინოს და სხვა. საინტერესოა გაირკვეს ყველა ამ ნაწილაკისათვის შეგვიძლია თუ არა ვისარგებლოთ დირაკის განტოლებით. რადგან დირაკის განტოლება შეიცავს სპინს, იმიტომ ბუნებრივია იგი შეიცავდეს სპინურ მაგნიტურ მომენტსაც. მაგნიტურ მომენტში კი შედის ნაწილაკის მასა, ამიტომ თუ ვიპოვით მაგნიტურ მომენტს და მასში შევიტანთ ნაწილაკის მასის რიცხობრივ სიდიდეს, მივიღებთ მაგნიტური მომენტის თეორიულ მნიშვნელობას. ამ მნიშვნელობის შედარებით ექსპერიმენტულ მაგნიტურ მომენტთან ნათელი გახდება აღებული ნაწილაკი ემორჩილება თუ არა დირაკის განტოლებას.

დავწეროთ დირაკის განტოლება ელექტრომაგნიტურ ველში მოძრავი ელექტრონისათვის

$$\left\{\frac{\hat{E}-V+e\varphi}{c}-\left(\alpha,\ \hat{\mathbf{p}}+\frac{e}{c}\mathbf{A}\right)-\alpha_4 mc\right\}\psi(\mathbf{r},\ t)=0. \qquad (143,1)$$

გადავიდეთ არარელატივისტურ ზღვარზე. ამასთან, არარელატივისტურ ზღვარზე გადასვლა საჭიროა იმიტომ, რომ რელატივისტურ შემთხვევაში, როგორც ვაჩვენეთ, სპინი ცალკე არ არის გამოყოფილი.

როგორც ცნობილია, კლასიკური მექანიკის კინეტიკური ენერგია არარელატივისტურ ზღვარში მიღებული ენერგიისაგან mc^2 უძრაობის ენერგიით განსხვავდება

$$E=mc^2\left\{1+\frac{p^2}{2m}\right\}^{1/2}=mc^2+\frac{p^2}{2m}+\ldots+, \qquad (143,2)$$

ამიტომ ხელსაყრელია ეს განსხვავება წინასწარ მოვიცილოთ ტალღური ფუნქციის ინვარიანტული გარდაქმნით

$$\psi = \psi' e^{-\frac{i}{\hbar} mc^2 t} \tag{143,3}$$

გავიხსენოთ, რომ $\hat{E} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$ და ეს ფუნქცია შევიტანოთ დირაკის განტოლებაში; ექსპონენციალური მამრავლი გადმოვიტანოთ ოპერატორის მარცხნივ და შემდეგ შევკვეცოთ; მივიღებთ:

$$\left\{ (\hat{E} + mc^2 - V + e\varphi) - c\left(\alpha, \hat{\mathbf{p}} + \frac{e}{c}\mathbf{A}\right) - \alpha_4 mc^2 \right\} \psi' = 0; \tag{143,4}$$

ψ' ფუნქცია წარმოვიდგინოთ ორი სპინორის სახით

$$\psi' = \begin{pmatrix} \Phi \\ \chi \end{pmatrix}, \tag{143,5}$$

ბაშინ α-მატრიცების (131,14) მეორე რანგის მატრიცებით წარმოდგენაში დირაკის განტოლება დაიყვანება შემდეგ სისტემაზე:

$$\begin{aligned} (\hat{E} + e\varphi - V)\Phi - c\left(\sigma^0, \hat{\mathbf{p}} + \frac{e}{c}\mathbf{A}\right)\chi = 0, \\ (\hat{E} + 2mc^2 + e\varphi - V)\chi - c\left(\sigma^0, \hat{\mathbf{p}} + \frac{e}{c}\mathbf{A}\right)\Phi = 0. \end{aligned} \tag{143,6}$$

მეორე განტოლებიდან განვსაზღვროთ χ სპინორი

$$\chi = c(\hat{E} + 2mc^2 + e\varphi - V)^{-1}\left(\sigma^0, \hat{\mathbf{p}} + \frac{e}{c}\mathbf{A}\right)\Phi \tag{143,7}$$

და (143,6) სისტემის პირველ განტოლებაში შევიტანოთ; გვექნება

$$\begin{aligned} (\hat{E} + e\varphi - V)\Phi = c^2\left(\sigma^0, \hat{\mathbf{p}} + \frac{e}{c}\mathbf{A}\right)(\hat{E} + 2mc^2 + e\varphi - V)^{-1} \times \\ \times \left(\sigma^0, \hat{\mathbf{p}} + \frac{e}{c}\mathbf{A}\right)\Phi \end{aligned} \tag{143,8}$$

უკანასკნელი გამოსახულება შეგვიძლია გადავწეროთ იგივეურად

$$\begin{aligned} \hat{E}\Phi = \frac{1}{2m}\left(\sigma^0, \hat{\mathbf{p}} + \frac{e}{c}\mathbf{A}\right)\left[1 + \frac{\hat{E} + e\varphi - V}{2mc^2}\right]^{-1} \times \\ \times \left(\sigma^0, \hat{\mathbf{p}} + \frac{e}{c}\mathbf{A}\right)\Phi - e\varphi\Phi + V\Phi. \end{aligned} \tag{143,9}$$

ეს განტოლება ჯერჯერობით ზუსტია. გადავიდეთ არარელატივისტურ ზღვარზე, როცა $v/c \to 0$. როცა კინეტიკური ენერგია, $(E - V + e\varphi) \ll mc^2$, მაშინ კვადრატულ ფრჩხილებში მოთავსებული გამოსახულება შეგვიძლია გავშალოთ მწკრივად v/c ფარდობის ხარისხებად. ამ გაშლას ექნება ასეთი სახე:

$$\left\{1 + \frac{\hat{E} + e\varphi - V}{2mc^2}\right\}^{-1} = 1 - \frac{\hat{E} + e\varphi - V}{2mc^2} + \ldots + \tag{143,10}$$

ამ მწკრივში შევინარჩუნოთ პირველი წევრი, მაშინ გვექნება

$$\hat{E}\Phi = \frac{1}{2m}\left(\sigma^{\circ}, \hat{\mathbf{p}} + \frac{e}{c}\mathbf{A}\right)^2 \Phi - e\varphi\Phi + V\Phi \tag{143,11}$$

გამოვთვალოთ $(\sigma^{\circ}\hat{\mathbf{P}})^2$ წევრი, სადაც დროებით შემოვიღეთ აღნიშვნა

$$\hat{\mathbf{P}} = \hat{\mathbf{p}} + \frac{e}{c}\mathbf{A}. \tag{143,12}$$

გამოვიყენოთ (138,28) ფორმულა, რომლის მიხედვით შეგვიძლია დავწეროთ

$$(\sigma^{\circ}\mathbf{P})^2 = \mathbf{P}^2 + i(\sigma^{\circ}[\mathbf{P}\times\mathbf{P}]). \tag{143,13}$$

გამოვთვალოთ (143,13)-ში შემავალი ვექტორული ნამრავლი. გავიხსენოთ ვექტორული ნამრავლის განმარტება $\mathcal{E}_{ikl}$ ტენზორის საშუალებით; მივიღებთ

$$[\hat{\mathbf{P}}\times\hat{\mathbf{P}}]_j = \mathcal{E}_{jmn}\hat{P}_m\hat{P}_n = \mathcal{E}_{jmn}\left(\hat{p}_m + \frac{e}{c}A_m\right)\left(\hat{p}_n + \frac{e}{c}A_n\right) =$$

$$= \mathcal{E}_{jmn}\left(\hat{p}_m\hat{p}_n + \frac{e^2}{c^2}A_mA_n\right) + \frac{e}{c}\mathcal{E}_{jmn}(\hat{p}_m\hat{A}_n + \hat{A}_m\hat{p}_n). \tag{143,14}$$

ამ გამოსახულების პირველი წევრი ნულის ტოლია, რადგან იგი წარმოადგენს კომუტატური მდგენელების მქონე ვექტორ-ოპერატორების ვექტორულ ნამრავლს. ამგვარად, დაგვრჩება

$$[\hat{\mathbf{P}}\times\hat{\mathbf{P}}]\psi = \frac{e\hbar}{ic}\mathcal{E}_{jmn}\left(\frac{\partial}{\partial x_m}A_n + A_m\frac{\partial}{\partial x_n}\right)\psi =$$

$$= \frac{e\hbar}{ic}\mathcal{E}_{jmn}\left\{\frac{\partial A_n}{\partial x_m} + A_n\frac{\partial}{\partial x_m} + A_m\frac{\partial}{\partial x_n}\right\}\psi. \tag{143,15}$$

თუ ბოლო წევრის ორმაგ ჯამში m-ს შევცვლით n-ით და გავიხსენებთ, რომ $\mathcal{E}_{jmn} = -\mathcal{E}_{jnm}$, მაშინ ბოლო ორი წევრი ერთმანეთს მოსპობს და საბოლოოდ მივიღებთ

$$[\hat{\mathbf{P}}\times\hat{\mathbf{P}}]_j = \frac{e\hbar}{ic}\mathcal{E}_{jmn}\frac{\partial A_n}{\partial x_m}. \tag{143,16}$$

ცხადია, რომ

$$\mathcal{E}_{jmn}\frac{\partial A_n}{\partial x_m} = [\nabla\times\mathbf{A}]_j = \mathrm{rot}_j\,\mathbf{A}. \tag{143,17}$$

მეორე მხრივ $\mathrm{rot}\,\mathbf{A} = \vec{\mathscr{H}}$, სადაც $\vec{\mathscr{H}}$ მაგნიტური ველის დაძაბულობის ვექტორია; ასე რომ, საძიებელი ვექტორული ნამრავლისათვის საბოლოოდ შეგვიძლია დავწეროთ

$$[\hat{\mathbf{P}}\times\hat{\mathbf{P}}] = \frac{e\hbar}{ic}\vec{\mathscr{H}} \tag{143,18}$$

მაშასადამე, (143,13)-დან მივიღებთ

$$\left(\sigma^{\circ}, \hat{\mathbf{p}} + \frac{e}{c}\mathbf{A}\right)^2 = \left(\hat{\mathbf{p}} + \frac{e}{c}\mathbf{A}\right)^2 + \frac{e\hbar}{c}(\sigma^{\circ}\vec{\mathscr{H}}). \tag{143,19}$$

თუ ამ გამოსახულებას შევიტანთ (143,11) ფორმულაში, გვექნება

$$i\hbar\frac{\partial\Phi}{\partial t} = \hat{H}\Phi, \tag{143,20}$$

სადაც

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}\left(\hat{\mathbf{p}} + \frac{e}{c}\mathbf{A}\right)^2 - e\varphi + V(\mathbf{r}, t) + \frac{e\hbar}{2mc}(\sigma^\circ, \vec{\mathscr{H}}). \qquad (143,21)$$

ჩვენს მიერ მიღებული არარელატივისტური განტოლება შრედინგერის განტოლებისაგან განსხვავდება

$$\frac{e\hbar}{2mc}(\sigma^\circ \vec{\mathscr{H}}) \qquad (143,22)$$

წევრით და ერთკომპონენტიანი ფუნქციის ნაცვლად განტოლებაში გაჩნდა ორკომპონენტიანი სპინორი. მაშასადამე, (143,20) განტოლება შრედინგერის განტოლებისაგან იმით განსხვავდება, რომ ამ უკანასკნელში ჩართულია ნაწილაკის $\mathbf{s} = \frac{\hbar}{2}\sigma^\circ$ სპინი. როგორც ვიცით, (143,20) განტოლება პირველად მიღებული იყო პაულის მიერ ფორმალურ მოსაზრებებზე დაყრდნობით [1].

ამგვარად, დირაკის განტოლების მიხედვით m-მასის ნაწილაკს უნდა გააჩნდეს მაგნიტური მომენტი, რომლის სიდიდე განისაზღვრება ფორმულით

$$M_B = \frac{e\hbar}{2mc} \qquad (143,23)$$

თუ ამ გამოსახულებაში შევიტანთ ელექტრონის მასას, მივიღებთ სიდიდეს, რომელიც კარგ თანხმობაშია ელექტრონის მავნიტური მომენტის ექსპერიმენტულ მნიშვნელობასთან. M_B-ს, როგორც ვიცით, უწოდებენ ატომურ ან ბორის მაგნიტონს.

იმავე მოსაზრებით პროტონის მაგნიტური მომენტის სიდიდე ტოლი უნდა ყოფილიყო გამოსახულების

$$\mu = \frac{e\hbar}{2m_p c}, \qquad (143,24)$$

სადაც m_p პროტონის მასაა, ხოლო μ-ს ბირთვულ მაგნიტონს უწოდებენ. მაგრამ აღმოჩნდა, რომ (143,24) ფორმულით გამოთვლილი პროტონის მაგნიტური მომენტი ექსპერიმენტულზე 2,7-ჯერ ნაკლებია. რადგან ნეიტრონს მუხტი არა აქვს, ამიტომ ნეიტრონის მაგნიტური მომენტი დირაკის თეორიით უნდა უდრიდეს ნულს, მაშინ, როცა ექსპერიმენტზე გაზომილი ნეიტრონის მაგნიტური მომენტი—1,9 μ-ს ტოლია.

ამგვარად, მართალია, პროტონი და ნეიტრონი, როგორც ნახევარსპინიანი ნაწილაკები, დირაკის განტოლებით უნდა აიწერებოდნენ, მაგრამ მათი მაგნიტური მომენტები განსხვავდება დირაკის თეორიით განსაზღვრული სპინური მაგნიტური მომენტებისაგან. როგორც ჩანს, ნუკლონების მაგნიტური მომენტები დაკავშირებულია ბირთვულ ურთიერთქმედებასთან, რომელიც დირაკის განტოლებაში გათვალისწინებული არ არის. დღეს არსებობს აზრი, რომ ბირთვული ნაწილაკები, მართალია, დირაკის განტოლებით, ზუსტად არ აიწერებიან, მაგრამ ამ ნაწილაკების მთელი რიგი ფიზიკური ასპექტები დირაკის განტოლებაში ჩაქსოვილია.

---

[1] შეიძლება გვეფიქრა, რომ რადგან პაულის განტოლება დირაკის განტოლების ზღვრული შემთხვევაა, პაულის განტოლების განხილვა საჭირო აღარ არის. მაგრამ ეს ასე არაა. ჯერ ერთი, დირაკის განტოლების ამოხსნა ბევრად ძნელია და მეორეც, ორი ელექტრონისათვის დირაკის განტოლების დაწერა არ ხერხდება, ამიტომ ზოგჯერ იძულებული ვართ პაულის განტოლებით ვისარგებლოთ.

ამგვარად, მკაცრად რომ ვიმსჯელოთ, დირაკის განტოლება წარმოადგენს მხოლოდ ელექტრონის რელატივისტური მოძრაობის კვანტურ განტოლებას. შემდეგში ვაჩვენებთ, რომ დირაკის განტოლებით ზუსტად აიწერება აგრეთვე პოზიტრონიც—ნაწილაკი, რომელიც ელექტრონისაგან მხოლოდ მუხტით განსხვავდება.

§ 144. სპინ-ორბიტალური ურთიერთქმედების ოპერატორი

ვაჩვენოთ, რომ დირაკის განტოლება შეიცავს წევრს, რომელიც გამოხატავს სპინ-ორბიტალურ ურთიერთქმედებას. როგორც ვიცით, ეს ურთიერთქმედება გამოწვეულია ელექტრონის ორბიტალური და სპინური მოძრაობების შესაბამისი მაგნიტური ველების ურთიერთქმედებით. განვიხილოთ ისევ არარელატივისტური ზღვარი და (143,10)-ში შევინარჩუნოთ მწკრივად გაშლის პირველი ორი წევრი. ამასთან, წერის გამარტივების მიზნით, დავუშვათ, რომ გარეშე ელექტრომაგნიტური ველი არა გვაქვს, ე. ი. $A=\varphi=0$. ამგვარად, გამოვდივართ შემდეგი განტოლებიდან:

$$\hat{E}\Phi=\frac{1}{2m}(\sigma^0\hat{p})\left\{1+\frac{\hat{E}-V}{2mc^2}\right\}^{-1}(\sigma^0\hat{p})\Phi+V\Phi. \qquad (144,1)$$

ზემოთქმულის თანახმად, ფიგურულ ფრჩხილებში მოთავსებული გამოსახულებისათვის გვექნება

$$\left\{1+\frac{\hat{E}-V}{2mc^2}\right\}^{-1}\simeq 1-\frac{\hat{E}-V}{2mc^2}+\dots \qquad (144,2)$$

ამ გამოსახულების (244,1)-ში შეტანის შემდეგ მივიღებთ

$$\hat{E}\Phi=\frac{1}{2m}\left\{(\sigma^0\hat{p})^2-\frac{\hat{E}}{2mc^2}(\sigma^0\hat{p})^2+\frac{(\sigma^0\hat{p})V(\sigma^0\hat{p})}{2mc^2}\right\}\Phi+V\Phi. \qquad (144,3)$$

გარდავქმნათ მესამე წევრის მრიცხველი, რადგან

$$\hat{p}V-V\hat{p}=-i\hbar\nabla V, \qquad (144,4)$$

ამიტომ

$$(\sigma^0\hat{p})V(\sigma^0,\hat{p})=[V(\sigma^0\hat{p})-i\hbar(\sigma^0\nabla V)](\sigma^0\hat{p})=V(\sigma^0\hat{p})^2-i\hbar(\sigma^0\nabla V)(\sigma^0\hat{p}). \qquad (144,5)$$

ამის გათვალისწინებით (144,3) განტოლება მიიღებს სახეს

$$\hat{E}\Phi=\left\{1-\frac{\hat{E}-V}{2mc^2}\right\}\frac{(\sigma^0\hat{p})^2}{2m}\Phi+V\Phi-i\hbar\frac{(\sigma^0\nabla V)(\sigma^0,\hat{p})}{4m^2c^2}\Phi. \qquad (144,6)$$

მეორე მხრივ, თანახმად (138,28) და (138,31) ფორმულებისა, გვექნება

$$(\sigma^0\nabla V)(\sigma^0\hat{p})=(\nabla V\hat{p})+i(\sigma^0[\nabla V\times\hat{p}]) \qquad (144,7)$$

და

$$(\sigma^0\hat{p})^2=p^2.$$

მაშასადამე

$$\hat{E}\Phi=\left\{1-\frac{\hat{E}-V}{2mc^2}\right\}\frac{\hat{p}^2}{2m}\Phi+V\Phi-\frac{\hbar^2}{4m^2c^2}(\nabla V\nabla\Phi)+$$
$$+\frac{\hbar}{4m^2c^2}(\sigma^0[\nabla V\times\hat{p}]\Phi. \qquad (144,8)$$

დავუშვათ, პოტენციალურ ენერგიას ახასიათებს ცენტრალური სიმეტრია, მაშინ

$$\nabla V = \frac{dV}{dr}\frac{\mathbf{r}}{r} \tag{144,9}$$

და

$$(\nabla V\ \nabla\Phi) = \frac{1}{r}\frac{dV}{dr}(\mathbf{r}\nabla\Phi) = \frac{dV}{dr}\frac{d\Phi}{dr}.$$

გარდა ამისა, გავითვალისწინოთ, რომ არარელატივისტურ ზღვარში $\hat{E}-V \simeq \frac{\hat{p}^2}{2m}$; მაშინ (144,8) განტოლება, თუ მივიღებთ მხედველობაში ელექტრონის სპინს $s = \frac{\hbar}{2}\sigma^\circ$, ასე დაიწერება:

$$\hat{E}\Phi = \left\{\frac{\hat{p}^2}{2m} - \frac{\hat{p}^4}{8m^3c^2} + V - \frac{\hbar^2}{4m^2c^2}\frac{dV}{dr}\frac{d}{dr} + \right.$$
$$\left. + \frac{1}{2m^2c^2}\frac{1}{r}\frac{dV}{dr}(\mathbf{s}[\mathbf{r}\times\hat{\mathbf{p}}])\right\}\Phi. \tag{144,10}$$

როგორც ცნობილია, $\hat{\mathbf{l}} = [\mathbf{r}\times\hat{\mathbf{p}}]$ წარმოადგენს მოძრაობის რაოდენობის (ორბიტალურ) მომენტს, ამიტომ მიღებული განტოლება შეგვიძლია შემდეგნაირად გადავწეროთ:

$$i\hbar\frac{\partial\Phi}{\partial t} = \hat{H}\Phi, \tag{144,11}$$

სადაც

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}'; \tag{144,12}$$

ამასთან $\hat{H}_0$ წარმოადგენს არარელატივისტური მოძრაობის შესაბამის ჰამილტონიანს

$$\hat{H}_0 = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(r), \tag{144,13}$$

ხოლო

$$\hat{H}' = -\frac{\hat{p}^4}{8m^3c^2} - \frac{\hbar^2}{4m^2c^2}\frac{dV}{dr}\frac{d}{dr} + \frac{1}{2m^2c^2}\frac{1}{r}\frac{dV}{dr}(\hat{\mathbf{s}},\hat{\mathbf{l}}) \tag{144,14}$$

—რელატივისტურ შესწორებას. განვიხილოთ ამ შესწორების თითოეული წევრი ცალ-ცალკე. პირველი წევრი წარმოადგენს კინეტიკური ენერგიის კლასიკურ რელატივისტურ შესწორებას. მართლაც, იგი შეგვიძლია მივიღოთ ენერგიის მწკრივად გაშლით

$$\hat{E} = \sqrt{c^2p^2 + m^2c^4} - mc^2 \simeq \frac{\hat{p}^2}{2m} - \frac{\hat{p}^4}{8m^3c^2} + \cdots \tag{144,15}$$

(144,14)-ის მეორე წევრი გამოხატავს პოტენციალური ენერგიის რელატივისტურ შესწორებას. მას კლასიკური ანალოგი არა აქვს.

ბოლო წევრი

$$\hat{H}_{sl} = \frac{1}{2m^2c^2}\frac{1}{r}\frac{dV}{dr}(\hat{\mathbf{s}},\hat{\mathbf{l}}) \tag{144,16}$$

წარმოადგენს სპინ-ორბიტალური ურთიერთქმედების ენერგიის ოპერატორს; ამრიგად, დირაკის განტოლებიდან გამომდინარეობს ასეთი ურთიერთქმედების არსებობის აუცილებლობა; ამასთან, როგორც ვხედავთ, იგი პროპორციულია სპინის და ორბიტალური მომენტის ოპერატორების შიგა ნამრავლის; აღსანიშნავია, რომ (144,10) განტოლება დირაკის თეორიის შექმნამდის მიღებული იყო დარვინის მიერ, ოღონდ მისი განტოლება არ შეიცავდა სპინორბიტალური ურთიერთქმედების პროპორციულ წევრს.

შევნიშნოთ, რომ დირაკის განტოლებაში მხოლოდ არარელატივისტურ ზღვარში გამოიყოფა ცალ-ცალკე სპინი და ორბიტალური მომენტები.

რადგან

$$[(\hat{\mathbf{l}}\,\hat{\mathbf{s}}),\ \hat{\mathbf{s}}^2]=0,\quad [(\hat{\mathbf{l}}\,\hat{\mathbf{s}}),\ \hat{\mathbf{l}}^2]=0,$$
$$[(\hat{\mathbf{l}}\,\hat{\mathbf{s}}),\ \hat{l}_z]\neq 0,\quad [(\hat{\mathbf{l}}\,\hat{\mathbf{s}}),\ \hat{s}_z]\neq 0, \tag{144,17}$$

ამიტომ არარელატივისტურ ზღვარში, $\hat{H}_{sl}$ ურთიერთქმედების გამო, ერთდროულად და ზუსტად იზომება $\mathbf{l}^2$ და $\mathbf{s}^2$, მაშინ, როცა l_z და s_z-ს გარკვეული მნიშვნელობა არა აქვს. მეორე მხრივ.

$$[(\hat{\mathbf{l}}\,\hat{\mathbf{s}}),\ \hat{\mathbf{j}}^2]=0,\quad [(\hat{\mathbf{l}}\,\hat{\mathbf{s}}),\ \hat{j}_z]=0; \tag{144,18}$$

მაშასადამე, არარელატივისტურ ზღვარში ერთდროულად და ზუსტად შეიძლება გაიზომოს $\mathbf{j}^2$, j_z, $\mathbf{l}^2$ და $\mathbf{s}^2$. რაც შეეხება რელატივისტურ შემთხვევას, როგორც ადრე ვიჩვენეთ, ერთდროულად და ზუსტად გაიზომება ელექტრონის მხოლოდ $\mathbf{j}^2$ და j_z მნიშვნელობები.

სავარჯიშო მაგალითები

1. ვიპოვოთ $V=-\dfrac{Ze^2}{r}$ კულონური ველისათვის ენერგიის ის შესწორება, რომელსაც იძლევა წევრი

$$\hat{H}'=-\frac{\hbar^2}{4m^2c^2}\frac{dV}{dr}\frac{d}{dr}; \tag{144,19}$$

ამოხსნა: შემფოთების თეორიის პირველ მიახლოებაში გვექნება

$$\Delta E=4\pi\int_0^\infty R_{nl}(r)\,\hat{H}'\,R_{nl}(r)\,r^2dr=-\frac{4\pi\hbar^2e^2Z}{4m^2c^2}\int_0^\infty R_{nl}(r)\frac{1}{r^2}\frac{dR_{nl}}{dr}r^2dr,$$

ე. ი.

$$\Delta E=-\frac{4\pi\hbar^2e^2Z}{8m^2c^2}\int_0^\infty\frac{dR_{nl}^2(r)}{dr}dr=-\frac{4\pi\hbar^2e^2Z}{8m^2c^2}[R_{nl}^2(\infty)-R_{nl}^2(0)].$$

მაგრამ ატომისათვის $R(\infty)=0$ და ამიტომ

$$\Delta E=\frac{Ze^2\hbar^2}{8m^2c^2}R_{nl}^2(0)\,4\pi. \tag{144,20}$$

ჩვენ კი ვიცით, რომ $R(0)\neq 0$ მხოლოდ s ელექტრონებისათვის ($l=0$), მაშასადამე, აღნიშნული წევრი იწვევს მხოლოდ s დონის მცირედით წანაცვლებას.

მაგალითად, წყალბადისებური ატომის $1s$ მდგომარეობისათვის, თანახმად (65,34) ფორმულისა, გვექნება

$$\Delta E=Z^4E_1\alpha_0^2, \tag{144,21}$$

სადაც $E_1 = -13{,}5eV$ წყალბადის ატომის 1s დონის ენერგიაა, $a_0 = \frac{e^2}{\hbar c}$ კი—ზომერფელდის მუდმივი. როგორც ვხედავთ, ΔE რაღაბრიჯად ძალიან მცირე სიდიდეა $\Delta E = 0{,}0008Z^4$. ეს წანაცვლება, რომელიც ექსპერიმენტულად დაკვირვებადია, პაულის თეორიით არ აიხსნება.

§ 145. სიჩქარის ოპერატორები

გამოვარკვიოთ, როგორი სახე აქვს სიჩქარის ოპერატორებს და როგორაა მათი საკუთარი მნიშვნელობები. ამისათვის გამოვიყენოთ ოპერატორის დროითი გაწარმოების ფორმულა. რადგან კოორდინატები დროზე ცხადად არ არიან დამოკიდებული, ამიტომ ამ ფორმულას ექნება (141,3) სახე. იგი კოორდინატების წარმოებულებისათვის მოგვცემს

$$\frac{d\hat{x}}{dt} = [\hat{H}, x]; \quad \frac{d\hat{y}}{dt} = [\hat{H}, y]; \quad \frac{d\hat{z}}{dt} = [\hat{H}, z]. \tag{145,1}$$

განვიხილოთ თავისუფალი ნაწილაკის შემთხვევა. მაშინ, როგორც ვიცით, ჰამილტონიანი იქნება $\hat{H} = c(\hat{\alpha p}) + \alpha_4 mc^2$ და, რადგან $[\hat{p}_l, \hat{x}_k] = \delta_{lk}$, ამიტომ

$$\frac{d\hat{x}}{dt} = [c\alpha_1 p_x, x] = c\alpha_1 [p_x, x] = c\alpha_1. \tag{145,2}$$

ანალოგიურად მივიღებთ, რომ

$$\frac{d\hat{y}}{dt} = c\alpha_2 \quad \text{და} \quad \frac{d\hat{z}}{dt} = c\alpha_3. \tag{145,3}$$

ეს ფორმულები ვექტორულად ასეც შეიძლება გადავწეროთ[1]

$$v = c\alpha. \tag{145,4}$$

ამ უკანასკნელი ფორმულიდან ვხედავთ, რომ დირაკის α მატრიცა დაკავშირებულია ელექტრონის სიჩქარესთან. რადგან α_x, α_y, α_z ოპერატორების საკუთარი მნიშვნელობები ± 1-ის ტოლია, ამიტომ, თანახმად (145,2) და (145,3) ფორმულებისა, სიჩქარის ოპერატორის მდგენელებს ექნებათ $\pm c$ საკუთარი მნიშვნელობები. ამგვარად, რელატივისტურ კვანტურ თეორიაში თავისუფალი ნაწილაკის სიჩქარის კომპონენტების მნიშვნელობები შეიძლება იყოს მხოლოდ $\pm c$, ე. ი.

$$v_x = \pm c, \quad v_y = \pm c \quad \text{და} \quad v_z = \pm c. \tag{145,5}$$

გარდა ამისა, რადგან α მატრიცები ერთმანეთთან არაკომუტატურებია, ამიტომ სიჩქარის ორი რომელიმე კომპონენტის ერთდროულად ზუსტად გაზომვა შეუძლებელია. შევნიშნოთ, რომ იგივე შედეგს მივიღებთ ველში მოძრავი ნაწილაკისათვისაც. მართლაც ამ შემთხვევაში $p_x \to p_x + \frac{e}{c} A_x$ და, რადგან A_x კომუტატურია კოორდინატთან, ამიტომ ყველა ზემოთ თქმული ამ შემთხვევაშიც ძალაში დარჩება.

მიღებული შედეგი ერთი შეხედვით დაუშვებელია, რადგან ბუნებაში ჩვენ გვხვდება მხოლოდ ისეთი ელექტრონები, რომელთა სიჩქარე ნაკლებია c-ზე.

---

[1] როგორც ვხედავთ დირაკის თეორიაში, შრედინგერის თეორიისაგან განსხვავებით, იმპულსისა და სიჩქარის ოპერატორები ერთმანეთის საშუალებით არ განიმარტებიან.

მაგრამ ეს პარადოქსი შეიძლება აეხსნათ განუზღვრელობის თანაფარდობით. (145,5) იძლევა სიჩქარის მნიშვნელობას რომელიმე მოცემულ მომენტში, მაშინ, როცა ექსპერიმენტზე დაკვირვებული სიჩქარე წარმოადგენს სიჩქარის საშუალო მნიშვნელობას დროის გარკვეულ შუალედში. მყისი სიჩქარის ძალიან ზუსტად გაზომვა მოითხოვს კოორდინატის გაზომვას ორ, ერთმანეთისაგან მცირედ განსხვავებულ, მომენტში. ასეთი გაზომვა კი განუზღვრელობის თანაფარდობის ძალით გამოიწვევს იმპულსის მნიშვნელობის გაზომვის შეუძლებლობას; ამ შემთხვევაში იმპულსის მნიშვნელობა აუცილებლად უსასრულობა იქნება. მაგრამ $p_x = mv_x / \sqrt{1 - v_x^2/c^2}$ ფორმულის თანახმად, იმპულსის უსასრულო სიდიდეს შეესაბამება სიჩქარის სწორედ $v_x = \pm c$ მნიშვნელობა.

რამდენადაც დამაკმაყოფილებლად უნდა გვეჩვენოს ეს ახსნა, აშკარაა, რომ იგი არაა მკაცრი. ამ საკითხს ჩვენ ქვემოთ კიდევ დავუბრუნდებით; ახლა კი აღვნიშნოთ, რომ ალბათობის დენის სიმკვრივის ვექტორი შეგვიძლია გამოვხატოთ სიჩქარის ოპერატორებით. მართლაც, თანახმად (133,5) და (145,4) ფორმულებისა, მივიღებთ

$$\mathbf{J} = \psi^+ \mathbf{v} \psi, \tag{145,6}$$

ხოლო ელექტრული დენის სიმკვრივის ვექტორს ექნება შემდეგი სახე:

$$\mathbf{J} = -e\psi^+ \mathbf{v} \psi. \tag{145,7}$$

მიუხედავად იმისა, რომ სიჩქარის მნიშვნელობისათვის მივიღეთ პარადოქსალური შედეგი, დენის სიმკვრივის დამოკიდებულება სიჩქარეზე სწორი აღმოჩნდა.

§ 146. ერენფესტის განტოლებები

შრედინგერის თეორიაში ჩვენ ვაჩვენეთ, რომ ადგილი აქვს ერენფესტის განტოლებებს

$$m\frac{d^2\overline{x}}{dt^2} = \overline{F}_x, \quad m\frac{d^2\overline{y}}{dt^2} = \overline{F}_y, \quad m\frac{d^2\overline{z}}{dt^2} = \overline{F}_z, \tag{146,1}$$

რომლებიც გამოხატავს იმ მეტად მნიშვნელოვან ფაქტს, რომ კვანტური მექანიკის საშუალო მნიშვნელობები ისეთივე კავშირშია ერთმანეთთან, როგორი კავშირიც არსებობს ამ სიდიდეებს შორის კლასიკურ მექანიკაში. როცა ნაწილაკი თავისუფალია, ე. ი. როცა $\mathbf{F} = 0$, მაშინ

$$m\frac{d\overline{x}}{dt} = \text{const}, \quad m\frac{d\overline{y}}{dt} = \text{const}, \quad m\frac{d\overline{z}}{dt} = \text{const}. \tag{146,2}$$

ამის შესახებ ამბობენ, რომ „ველის გარეშე ალბათობის სიმძიმის ცენტრი მოძრაობს სწორხაზობრივად და თანაბრად". ეს არის ინერციის კანონის ერთგვარი გადატანა კვანტურ მექანიკაში.

გამოვარკვიოთ, როგორი მდგომარეობა გვაქვს რელატივისტურ კვანტურ მექანიკაში. წინასწარ შევნიშნოთ, რომ სიდიდის საშუალო მნიშვნელობა ისეთივე ფორმულით განისაზღვრება, როგორიც გვქონდა შრედინგერის თეორიაში (იხ. § 140 ფორმულა 12). ვიპოვოთ აჩქარების ოპერატორი. თანახმად (145,2) ფორმულისა, გვექნება

$$\frac{d^2x}{dt^2} = c\frac{d\alpha_1}{dt} \tag{146,3}$$

ან, თუ გავიხსენებთ, რომ

$$\frac{d\alpha_1}{dt}=[\hat{H},\alpha_1]=\frac{i}{\hbar}\ (\hat{H}\alpha_1-\alpha_1\hat{H}),$$

$$\frac{d^2x}{dt^2}=\frac{i}{\hbar}\ (\hat{H}\alpha_1-\alpha_1\hat{H})\,c. \tag{146,4}$$

α მატრიცები არაა კომუტატური ჰამილტონიანთან $(\hat{H}\alpha_1-\alpha_1\hat{H})\neq 0$, და საზოგადოდ, თავისუფალი ნაწილაკისთვის $\frac{d^2x}{dt^2}\neq 0$. ამგვარად, თავისუფალი ნაწილაკის „ალბათობის სიმძიმის ცენტრი არ მოძრაობს თანაბრად და სწორხაზობრივად". ამიტომ რელატივისტურ კვანტურ მექანიკაში ერენფესტის განტოლებებს, საზოგადოდ, ადგილი არა აქვს. რომ გამოვარკვიოთ, თუ რა უშლის ხელს „ალბათობის სიმძიმის ცენტრს, იმოძრაოს სწორხაზობრივად და თანაბრად", განვიხილოთ ე. წ. „ელექტრონის კანკალის" საკითხი,

§ 147. ელექტრონის „კანკალი"

ამ პარაგრაფში ჩვენ გამოვარკვევთ იმ თავისებურებებს, რომლებიც ახასიათებენ ელექტრონის მოძრაობას რელატივისტურ კვანტურ მექანიკაში და შევისწავლით მიზეზს, რომლის გამოც, საზოგადოდ ერენფესტის განტოლებები დირაკის თეორიაში სამართლიანი არ არის. ამასთანავე ვაჩვენებთ, თუ რატომ არ ემთხვევა სიჩქარის მდგენელების გაზომილი მნიშვნელობა $\pm c$-ს.

ამ მიზნით განვიხილოთ თავისუფალი ნაწილაკის შემთხვევა და გამოვარკვიოთ. როგორი სახე აქვს კოორდინატისა და სიჩქარის საშუალო მნიშვნელობებს რელატივისტურ კვანტურ მექანიკაში.

წინა პარაგრაფში ვაჩვენეთ, რომ $\ddot{x}=c\dot{\alpha}_1$, სადაც

$$\frac{d\alpha_1}{dt}=[\hat{H},\alpha_1], \tag{147,1}$$

პუასონის ფრჩხილების განმარტების გამოყენებით მივიღებთ

$$i\hbar\dot{\alpha}_1=\alpha_1\hat{H}-\hat{H}\alpha_1. \tag{147,2}$$

რადგან თავისუფალი ნაწილაკის ჰამილტონიანი განისაზღვრება ფორმულით

$$\hat{H}=c\,(\boldsymbol{\alpha}\hat{\mathbf{p}})+\alpha_4 mc^2, \tag{147,3}$$

ამიტომ ცხადია, რომ

$$\alpha_1\hat{H}=c\hat{p}_x+\alpha_1\alpha_2 c\hat{p}_y+\alpha_1\alpha_3 c\hat{p}_z+\alpha_1\alpha_4 mc^2, \tag{147,4}$$

$$\hat{H}\alpha_1=c\hat{p}_x+\alpha_2\alpha_1 c\hat{p}_y+\alpha_3\alpha_1 c\hat{p}_z+\alpha_4\alpha_1 mc^2. \tag{147,5}$$

α-მატრიცების ანტიკომუტატურობის გამო გვექნება

$$2c\hat{p}_x=\alpha_1\hat{H}+\hat{H}\alpha_1. \tag{147,6}$$

(147,2) განტოლება შევკრიბოთ (147,6) განტოლებასთან; მივიღებთ

$$i\hbar\dot{\alpha}_1=-2c\hat{p}_x+2\alpha_1\hat{H}, \tag{147,7}$$

რადგან თავისუფალი ნაწილაკის შემთხვევაში $\hat{p}_x$ და $\hat{H}$ დროზე არ არიან დამოკიდებული და ერთმანეთთან კომუტირებენ, ამიტომ (147,7) განტოლების გაწარმოება მოგვცემს

$$i\hbar\ddot{\alpha}_1 - 2\dot{\alpha}_1\hat{H} = 0. \tag{147,8}$$

α_1-მატრიცის მიმართ მივიღეთ მეორე რიგის განტოლება. ამ განტოლების ამოხსნა შეიძლება ჩვეულებრივი წესით, ოღონდ უნდა დავიცვათ ოპერატორთა თანმიმდევრობის რიგი; სახელდობრ, ამ განტოლების ამოხსნის დროს α_1-მატრიცა ყოველთვის $\hat{H}$-ის მარცხნივ უნდა დაეწეროთ. მაშასადამე, (147,8) განტოლების ამონახსნს ექნება სახე

$$\dot{\alpha}_1 = \dot{\alpha}_1(0)e^{-\frac{2i\hat{H}t}{\hbar}} \tag{147,9}$$

სადაც $\dot{\alpha}_1(0)$ არის ოპერატორის მნიშვნელობა $t=0$ მომენტში. ამ გამოსახულებაში $\dot{\alpha}_1(0)$ ექსპონენტის მარცხნივ წერია, რადგან განტოლებაშიაც ადგილი აქვს α_1 და $\hat{H}$ ოპერატორების ასეთივე თანმიმდევრობას.

ახლა გამოვიყენოთ (147,7) გამოსახულება და (147,9) ფორმულის დახმარებით ვიპოვოთ α_1. გვექნება

$$2\alpha_1\hat{H} = 2c\hat{p}_x + i\hbar\dot{\alpha}_1(0)e^{-\frac{2i\hat{H}t}{\hbar}} \tag{147,10}$$

ახლა ვაჩვენოთ, რომ $\hat{H}$ ჰამილტონიანს აქვს შებრუნებული ოპერატორი. რამდენადაც (147,3) ფორმულის ძალით თავისუფალი ნაწილაკის შემთხვევაში $\hat{H}^2 = c^2p^2 + m^2c^4 = E^2$, იმდენად $\hat{H}^{-1}$ ტოლი იქნება $\hat{H}^{-1} = \hat{H}/E^2$ გამოსახულების, საიდანაც $\hat{H}^{-1}$-ის საკუთარი მნიშვნელობა ტოლი იქნება E^{-1}-ის. (147,10)-ის მარჯვნიდან $\hat{H}^{-1}$-ზე გამრავლებით ვიპოვით

$$\alpha_1 = c\hat{p}_x\hat{H}^{-1} + \frac{1}{2}i\hbar\dot{\alpha}_1(0)e^{-\frac{2i\hat{H}t}{\hbar}}\hat{H}^{-1}. \tag{147,11}$$

მეორე მხრივ, $\dot{x} = \alpha_1 c$, ამიტომ ამ გამოსახულებაში α_1-ის შეტანით და იმის გათვალისწინებით, რომ $\hat{H}$ დროზე ცხადად დამოკიდებული არ არის, დროის მიხედვით ინტეგრაცია მოგვცემს

$$x = c^2\hat{p}_x\hat{H}^{-1}t - \frac{c\hbar^2}{4}\dot{\alpha}_1(0)e^{-\frac{2i\hat{H}t}{\hbar}}\hat{H}^{-2} + \text{const}. \tag{147,12}$$

ვაჩვენოთ, რომ ამ გამოსახულებაში შემავალი ყველა ოპერატორი: $\hat{H}$, $\hat{p}_x$ და $\dot{\alpha}_1(0)$ ერმიტული და ერთმანეთთან გადასმადია. $\hat{H}$ და $\hat{p}_x$ ოპერატორების ერმიტულობა ცხადია; ვაჩვენოთ, რომ $\dot{\alpha}_1$-იც ერმიტულია. ეს უკანასკნელი აშკარაა (147,2) ტოლობიდან, საიდანაც $\dot{\alpha}_1^+ = \dot{\alpha}_1$; მაშასადამე, ერმიტული იქნება ამ ოპერატორის მნიშვნელობა $t=0$ მომენტშიც, ე. ი. $\dot{\alpha}_1^+(0) = \dot{\alpha}_1(0)$. რადგან $\dot{\alpha}_1(0)$ მატრიცა დროზე აღარ არის დამოკიდებული, ამიტომ $\frac{d}{dt}\dot{\alpha}_1(0) = [\hat{H}, \dot{\alpha}_1(0)] = 0$, საი-

დანაც ჩანს, რომ $\dot{\alpha}_1(0)$ კომუტატურია $\hat{H}$-თან და, მაშასადამე, H^{-1}-თან და $\exp\left(-\frac{2i\hat{H}t}{\hbar}\right)\hat{H}^{-2}$-თანაც. თავისუფალი ნაწილაკის იმპულსი $\hat{p}_x$ კომუტატურია $\hat{H}$-თან და α_1 მატრიცასთან, ამიტომ თუ ავიღებთ (147,7) გამოსახულების მნიშვნელობას $t=0$ მომენტში და მას ჯერ მარცხნიდან შემდეგ კი მარჯვნიდან გავამრავლებთ $\hat{p}_x$-ზე, დავინახავთ. რომ $\dot{\alpha}_1(0)$ კომუტატური ყოფილა $\hat{p}_x$-თანაც. მაშასადამე, (147,12) გამოსახულების მარჯვენა მხარეში შეგვიძლია ერთჯროულად ვიპოვოთ ყველა წევრის საკუთარი მნიშვნელობები, ამიტომ თავისუფალი ნაწილაკის კოორდინატის საშუალო მნიშვნელობისათვის შეგვიძლია დავწეროთ

$$x=\frac{c^2p_x}{E}t-\frac{c\hbar^2}{4E^2}\dot{\alpha}_1(0)\,e^{-\frac{2iEt}{\hbar}}+\text{const}, \qquad (147,13)$$

სადაც α_1-ის საკუთარი მნიშვნელობები აღებულია $t=0$-მომენტში. (147,13) გამოსახულებაში პირველი წევრი გამოხატავს კლასიკური (რელატივისტური) მექანიკის ცნობილ v_xt-წევრს, სადაც $v_x=\frac{c^2p_x}{E}$ რელატივისტური სიჩქარეა. მეორე წევრი დაკავშირებულია რხევით მოძრაობასთან. ამ რხევის შესაბამისი სიხშირე ცხადია ტოლი იქნება $\omega=2E/\hbar$ გამოსახულების. ეს სიხშირე ძალიან დიდია და სულ მცირე $2mc^2/\hbar$-ის ტოლია.

როდესაც ვზომავთ თავისუფალი ნაწილაკის საშუალო სიჩქარეს იმ დროის განმავლობაში, რომელიც გაცილებით მეტია $\hbar/2mc^2$-ზე, მაშინ პრაქტიკულად ვაკვირდებით სიჩქარის მხოლოდ მუდმივ ნაწილს $\frac{c^2p_x}{E}$. რხევის შესაბამისი წევრი კი იძლევა სიჩქარის მყის მნიშვნელობას $v_x=\pm c$.

(147,13) ფორმულა გვიჩვენებს, რომ თავისუფალი ელექტრონის კოორდინატის საშუალო მნიშვნელობა შედგება ორი წევრისაგან. ერთია ელექტრონის რხევადი მოძრაობა $2E/\hbar$ სიხშირით. ელექტრონის ამ რხევით მოძრაობას უწოდებენ „ელექტრონის კანკალს". ელექტრონის კანკალი უარყოფითი ენერგიების არსებობით აიხსნება, იგი გამოწვეულია დადებითი და მისი ტოლი უარყოფითი ენერგიის შესაბამისი რხევების ძგერით. როგორც ცნობილია, ძგერის სიხშირე ძგერადი ტალღების სიხშირეთა სხვაობას უდრის, ე. ი. სწორედ, $\omega=\frac{E-(-E)}{\hbar}=\frac{2E}{\hbar}$-ის ტოლია.

ნაწილაკის ამ რხევითი მოძრაობის გამო ელექტრონის „ალბათობის სიმძიმის ცენტრის" გადაადგილება სივრცეში ინერციის კანონს არ ემორჩილება. ამიტომაც არის დარღვეული ერენფესტის თეორემა.

ზოგჯერ, კონკრეტულ ამოცანებში, მნიშვნელოვანია ტალღური ფუნქციები, რომლებიც მხოლოდ დადებით ენერგიებს შეესაბამებიან. აშკარაა. რომ ამ სპეციალურ შემთხვევაში ერენფესტის თეორემა დაცული იქნება.

§ 148. პოზიტრონის თეორია

ჩვენ აღვნიშნეთ, რომ დირაკის თეორიაში საჭიროა ელექტრონის კინეტიკური ენერგიის ორივე ნიშნის გათვალისწინება. ნაწილაკს შეუძლია გადავიდეს უარყოფითი ენერგიის მდგომარეობიდან დადებითში და პირიქით; განგებ უყურად-

ღებოდ დავტოვეთ საკითხი, შეუძლია თუ არა არსებობა უარყოფითი ენერგიის თავისუფალ ელექტრონს. ასეთი ნაწილაკები რომ მართლაც არსებობდნენ, მაშინ მათ ექნებოდათ მთელი რიგი უცნაური თვისებები. ასე მაგალითად, სინათლის უწყვეტად გამოსხივების შედეგად მათი ენერგია შეიძლებოდა შემცირებულიყო ისე, რომ გამხდარიყო—∞-ის ტოლი. ასეთი ენერგიები ექნებოდა ჩვენი სამყაროს ყველა ელექტრონს საკმარისად მცირე დროის განმავლობაში. რაც სინამდვილეში ასე არ არის. ამგვარად, ჩვენ აღმოვჩნდებით ასეთი წინააღმდეგობის წინაშე: ერთი მხრივ, ელექტრონს შეუძლია დადებითი ენერგიის მდგომარეობიდან გადახტეს უარყოფითი ენერგიის მდგომარეობაში, მეორე მხრივ, ელექტრონი $E=-\sqrt{p^2c^2+m^2c^4}$ ენერგიით არ უნდა არსებობდეს, ეს წინააღმდეგობა თავის დროზე ახსნილი იყო დირაკის მიერ [1].

განვიხილოთ ელექტრომაგნიტურ ველში მოძრავი ელექტრონის განტოლება

$$\left\{\left(\frac{\hat{E}}{c}+\frac{e}{c}\varphi\right)-\left(\alpha,\ \hat{\mathbf{p}}+\frac{e}{c}\mathbf{A}\right)-\alpha_4 mc\right\}\psi=0 \qquad (148{,}1)$$

და დაწვრილებით შევისწავლოთ ის შემთხვევა, როცა კინეტიკური ენერგია, ე. ი. $E+e\varphi$, უარყოფითია. ამ მიზნით α მატრიცებისათვის ავირჩიოთ მაიორანას წარმოდგენა, ე. ი. ვიგულისხმოთ, რომ α_1, α_2, α_3 ნამდვილებია, $\alpha_4=\beta$ კი—წმინდა წარმოსახვითი. ამგვარად, ვიგულისხმოთ, რომ (148,1) განტოლება ჩაწერილი გვაქვს მაიორანას წარმოდგენაში და გადავიდეთ კომპლექსურად შეუღლებულ განტოლებაზე. რადგან $\hat{E}^*=\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\right)^*=-\hat{E}$ და $\hat{\mathbf{p}}^*=-\hat{\mathbf{p}}$, ამიტომ

$$\left\{\left(-\frac{\hat{E}}{c}+\frac{e}{c}\varphi\right)-\left(\alpha,\ -\hat{\mathbf{p}}+\frac{e}{c}\mathbf{A}\right)+\alpha_4 mc\right\}\psi^*=0 \qquad (148.2)$$

ან, თუ გავამრავლებთ (—1)-ზე,

$$\left\{\left(\frac{\hat{E}}{c}-\frac{e}{c}\varphi\right)-\left(\alpha,\ \hat{\mathbf{p}}-\frac{e}{c}\mathbf{A}\right)-\alpha_4 mc\right\}\psi^*=0. \qquad (148{,}3)$$

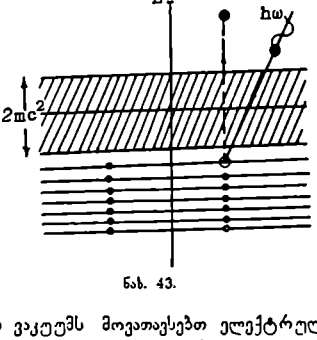
ეს კი ზუსტად დირაკის განტოლებაა $+|e|$ მუხტის მქონე ნაწილაკისათვის. ამგვარად, უარყოფითი ენერგიების განხილვა იმის ეკვივალენტურია, რომ ბუნებაში არსებობდეს ნაწილაკი $+e$ მუხტით. ამგვარად, უარყოფითი ენერგიის დონეები შეესაბამება ახალი ტიპის ნაწილაკის მოძრაობას. ამ ნაწილაკის მასა ელექტრონის მასის ტოლი უნდა იყოს, მუხტი კი—ელექტრონის მუხტისა. ოღონდ საწინააღმდეგო ნიშნის; თუ ნამდვილად აზრი აქვს უარყოფითი ენერგიის დონეების განხილვას. მაშინ განტოლებიდან გამომდინარეობს, რომ ბუნებაში ასეთი ნაწილაკი უნდა არსებობდეს. ამგვარი ნაწილაკი, მართლაც, აღმოჩენილი იყო ანდერსონის მიერ და მას პოზიტრონი უწოდეს. ამგვარად, (148,3) ფორმულის თანახმად, თუ ψ აღწერს ელექტრონს, მაშინ ψ^* აღწერს პოზიტრონს ანდა. უფრო ზოგადად, თუ ψ ფუნქცია აღწერს რომელიმე ნიშნის ნაწილაკს, მაშინ მაიორანას წარმოდგენაში მუხტურად შეუღლებული ნაწილაკი აიწერება კომპლექსურად შეუღლებული ფუნქციით.

მაგრამ პოზიტრონის აღმოჩენით ზევით აღნიშნული წინააღმდეგობა უბრალოდ არ ისპობა. პოზიტრონს რომ ჰქონდეს უარყოფითი კინეტიკური ენერგია,

[1] P. A. M. Dirac, Proc. Roy, Soc. A126, 360 (1930)

მაშინ მისი ყოფაქცევა იმის საწინააღმდეგო იქნებოდა, რასაც ცდა იძლევა. ასე მაგალითად, ძალის გაზრდით აჩქარება შემცირდებოდა, რაც სინამდვილეში არ ხდება. ამიტომ დირაკის მიერ პოზიტრონის თეორია აგებულ იქნა სულ სხვანაირად და მეტად ორიგინალურად.

დირაკის თანახმად, უარყოფითი კინეტიკური ენერგიის ყველა დონე დაკავებულია ელექტრონებით. ვაკუუმი დირაკის განმარტებით ეწოდება სწორედ ისეთ მდგომარეობას, როცა დადებითი ენერგიის ყველა დონე თავისუფალია, ენერგიის ყველა უარყოფითი დონე კი დაკავებულია ელექტრონებით. ამასთან, პაულის პრინციპის ძალით, თითოეულ უარყოფით დონეზე იმყოფება ორი ელექტრონი საწინააღმდეგო სპინებით, უარყოფითი ენერგიის დონეებზე მსხდომი ელექტრონები ერთგვაროვნად ავსებს მთელ სივრცეს, ამიტომ ისინი არავითარ ველს არ ქმნიან. როგორც ვხედავთ, დირაკის ვაკუუმის განმარტება სრულიად საწინააღმდეგოა ვაკუუმის იმ განმარტებისა, რასაც მიჩვეული ვიყავით აქამდე.



ნახ. 43.

დავუშვათ, რომ უარყოფითი ენერგიის დონეებიდან ამოვარდა ერთი ელექტრონი, მაშინ ელექტრონის ძველ ადგილას დარჩება „ხვრელი". ეს ხვრელი ისე მოიქცევა, როგორც დადებითი ენერგიის დადებითი ელექტრონი. მართლაც, იმისათვის, რომ ეს ხვრელი კვლავ მოისპოს, საჭიროა იგი „ამოიესოს" უარყოფითი კინეტიკური ენერგიის მქონე ელექტრონით. მეორეს მხრივ, თუ დირაკის ვაკუუმს მოვათავსებთ ელექტრულ ველში, მაშინ ყველა ელექტრონი ამოძრავდება ერთი გარკვეული მიმართულებით. ასეთი მოძრაობა ტოლფასი იქნება ხვრელის მოძრაობის საწინააღმდეგო მიმართულებით, ე. ი. ხვრელის ყოფაქცევა ისეთია, თითქოს მას ჰქონდეს დადებითი მუხტი. თუკი ხვრელი ისპობა უარყოფითი ენერგიის ელექტრონით, მაშასადამე, მას უნდა ჰქონდეს დადებითი ენერგია. რადგან ხვრელი უარყოფითი ენერგიების დონეებში ისევე იქცევა, როგორც დადებითი ენერგიისა და დადებითი მუხტის მქონე ელექტრონი, ამიტომ, ასკენის დირაკი, იგი უნდა გავაიგივოთ პოზიტრონთან. ამგვარად, პოზიტრონი წარმოადგენს უარყოფითი კინეტიკური ენერგიის დონეებში გაჩენილ ხვრელს. პოზიტრონის ამ თეორიას დირაკის ხვრელის თეორიას უწოდებენ.

ამ თეორიის თანახმად, ძალიან ადვილად ახსნება ელექტრონის და პოზიტრონის გარდაქმნა სინათლედ (ე. წ. ანიჰილაცია) და მისი შებრუნებული მოვლენა—სინათლისაგან ელექტრონ-პოზიტრონის წყვილის გაჩენა[1]. დავუშვათ, რომ სივრცეში გვაქვს ერთი ელექტრონი და ერთი პოზიტრონი, ეს იმას ნიშნავს, რომ დადებითი ენერგიის დონეებში გვაქვს ერთი ელექტრონი, უარყოფითი ენერგიის დონეებში კი—ერთი ხვრელი. ელექტრონს შეუძლია ჩახტეს ხვრელში, რის შედეგადაც ხვრელი ამოივსება და შეიქნება ვაკუუმი, ნაპარბი ენერგია კი გამოსხივდება სინათლის სახით. ნახაზიდან აშკარაა, რომ კვანტის მინიმალური ენერგია

[1] საინტერესოა შევნიშნოთ, რომ წყვილის გაჩენა და ანიჰილაცია, სანამ შემჩნეული იქნებოდა პრაქტიკულად, ნაწინასწარმეტყველები იყო დირაკის მიერ ხვრელის თეორიაზე დაყრდნობით.

$2mc^2$-ის ტოლია. რადგან ელექტრონისათვის $mc^2 = 0.51\,MeV$, ამიტომ ანიჰილაციის დროს გამოსხივებული კვანტის ენერგია $\hbar\omega \geqslant 1\,MeV$. სავსებით ანალოგიურად, ოცა კვანტის ენერგია $\hbar\omega \geqslant 1\,MeV$-ზე, მას შეუძლია ვაკუუმთან ურთიერთქმედებისას უარყოფითი ენერგიის დონიდან ამოაგდოს ელექტრონი. შედეგად მივიღებთ ერთ ელექტრონს დადებითი ენერგიით და ერთ ხვრელს, ე. ი. პოზიტრონს. მაშასადამე, გაჩნდება ელექტრონ-პოზიტრონის წყვილი.

შევნიშნოთ: წყვილის გაჩენისას რომ დაცული იქნეს ენერგიისა და იმპულსის მუდმივობის კანონი, საჭიროა კიდევ მესამე სხეული, ე. ი. $\hbar\omega$ კვანტს ცარიელ სივრცეში არ შეუძლია წყვილის გაჩენა. საჭიროა კიდევ დამატებითი გარეშე ველი. მართლაც, ენერგიის მუდმივობის კანონს აქვს სახე

$$-\sqrt{m^2c^4 + p^2c^2} + \hbar\omega = \sqrt{m^2c^4 + c^2p_1^2}, \qquad (148,4)$$

სადაც p არის ელექტრონის იმპულსი უარყოფითი ენერგიის მდგომარეობაში, p_1 ელექტრონის იმპულსია დადებითი ენერგიის მდგომარეობაში. იმპულსის შენახვის კანონის თანახმად კი

$$p + \hbar k = p_1, \qquad (148,5)$$

სადაც $\hbar k$ კვანტის იმპულსია, თუ შევიტანთ p_1-ს (148,4)-ში, დავინახავთ, რომ იგი არ კმაყოფილდება.

თანამედროვე ფიზიკაში ელექტრონს ჩვეულებრივი ნაწილაკი ეწოდება, პოზიტრონს კი—ანტინაწილაკი; ხვრელის თეორიიდან გამომდინარეობს, რომ რადგან დადებითი ენერგიის ელექტრონს დიდი ალბათობით შეუძლია ჩახტეს ხვრელში, პოზიტრონის სიცოცხლის ხანგრძლივობა ძალიან მცირე უნდა იყოს, გაჩნდება თუ არა პოზიტრონი, იგი სწრაფად უნდა გაქრეს ანიჰილაციის გამო. მართლაც, აღმოჩნდა, რომ პოზიტრონები ბუნებაში გაცილებით ცოტაა, ვიდრე ელექტრონები.

ხვრელის თეორიის სამართლიანობას ადასტურებს მთელი რიგი მოვლენებისა. ასე მაგალითად, გარეშე ველის მოქმედებისას ადგილი აქვს ვაკუუმის „პოლარიზაციას". ამ შემთხვევაში წყვილი ჩნდება მაშინაც, როცა $\hbar\omega < 2mc^2$. ელექტრულ ვაკუუმს რომ ველი მოვდოთ, ადგილი ექნება წყვილების გაჩენას, ე. ი. ზოგიერთი ელექტრონი გადავა დადებითი ენერგიის მდგომარეობაში. გაჩენილი წყვილები მოქმედებენ როგორც დიპოლები და ვაკუუმი აღმოჩნდება პოლარიზებული.

ადგილი აქვს აგრეთვე ე. წ. „ვაკუუმურ ფლუქტუაციებს". მართალია, ელექტრული ვაკუუმის სრული მუხტი ნულია, მაგრამ ეს როდი ნიშნავს, თითქოს მუხტი ნებისმიერად მცირე მოცულობაში ყოველთვის ნულია. შეიძლება ჩვენება: ალბათობა იმისა, რომ ელექტრონი ან პოზიტრონი აღმოვაჩინოთ სივრცის ნებისმიერ ადგილას დროის ნებისმიერ მომენტში, ნული არ არის, ე. ი. ადგილი აქვს „ვაკუუმურ ფლუქტუაციებს" და სხვ.

§ 149. ანტინაწილაკები. მუხტურად შეუღლების ოპერატორი და მუხტურად შეუღლებული ფუნქცია

მკაცრად რომ ვიმსჯელოთ, დირაკის განტოლებას ემორჩილება მხოლოდ ელექტრონი და მისი ანტინაწილაკი—პოზიტრონი. ამ ორი ნაწილაკისათვის დირაკის თეორიიდან მიიღება როგორც სპინის, ისე მაგნიტური მომენტის სწორი მნიშვნელობა. რაც შეეხება ნუკლონებს—ნეიტრონსა და პროტონს, როგორც ჩანს, მათი ყველა თვისება დირაკის განტოლებაში არ არის ჩაქსოვილი, მიუხედავად

ამისა, არსებობს საფუძველი ვიფიქროთ, რომ დირაკის განტოლება აღნიშნული ნაწილაკების მთელ რიგ თავისებურებებს მაინც სწორად გადმოსცემს. ეს განსაკუთრებით ეხება დირაკის განტოლებიდან გამომდინარე ფუნდამენტურ შედეგს— ანტინაწილაკების არსებობას. დირაკის განტოლება უშვებს ინვარიანტობას, რომელიც გვიჩვენებს, რომ თუკი ბუნებაში არსებობს პროტონი, ნეიტრონი, და სხვა ნახევარსპინიანი ნაწილაკი, უნდა არსებობდეს მათი შესაბამისი ანტინაწილაკებიც. ამასთან, მაგალითად, პროტონ-ანტიპროტონის წყვილის შესაქმნელად საჭიროა ენერგია, რომელიც მეტი უნდა იყოს პროტონის გაორკეცებული უძრაობის ენერგიაზე, ე. ი. $2mc^2$ სიდიდეზე, რომელიც რიცხობრივად $2 \cdot 931\,MeV$-ის ტოლია. ასეთი დიდი ენერგიების მიღება დირაკის თეორიის ჩამოყალიბების დროს შეუძლებელი იყო. მხოლოდ 1955 წელს მოხერხდა ანტიპროტონის აღმოჩენა. კერძოდ, მაღალი ენერგიების პროტონების გაფანტვის ექსპერიმენტზე ე. სეგრესა და თანამშრომლების მიერ აღმოჩენილი იქნა პროტონ-ანტიპროტონის წყვილის გაჩენა[1]. სულ მალე პროტონებისა და ანტიპროტონების ურთიერთქმედების შესწავლის დროს აღმოაჩინეს ანტინეიტრონიც. ამასთან, ანტიპროტონის მასა ემთხვევა პროტონის მასას, მუხტი კი უარყოფითი აქვს. რაც შეეხება ანტინეიტრონს, ცხადია, მას მუხტი არა აქვს, მაგრამ აქვს მაგნიტური მომენტი, რომელიც ნეიტრონის მაგნიტური მომენტისაგან ნიშნით განსხვავდება; ამასთან, ანტინეიტრონს აქვს ნეიტრონისაგან განსხვავებული შინაგანი ლუწობა. ნუკლონი და ანტინუკლონი ანიჰილირდებიან მეზონების გაჩენით. ნაწილაკებისაგან განსხვავებით ანტინაწილაკების აღმნიშვნელ ასოებს თავზე ხაზებს უკეთებენ; მაგალითად, ანტიპროტონს აღნიშნავენ $\bar{p}$-თი, ანტინეიტრონს $\bar{n}$-ით, ხოლო პოზიტრონს $\bar{e}$-თი.

როგორც დავინახეთ, როდესაც ელექტრონი აიწერება ψ ფუნქციით, მაშინ მისი მუხტურად შეუღლებული ნაწილაკი—პოზიტრონი აიწერება ψ^* ფუნქციით, მაგრამ ამას ადგილი აქვს მაშინ, როცა α-მატრიცებისათვის არჩეულია მაიორანას წარმოდგენა. ვნახოთ, რა სახე აქვს, ზოგადად, მუხტურად შეუღლებული ნაწილაკის ტალღურ ფუნქციას ნებისმიერ წარმოდგენაში. ამ მიზნით ელექტრომაგნიტურ ველში e მუხტის მქონე ნაწილაკისათვის დავწეროთ დირაკის განტოლება (134, 19) სახით

$$\gamma_\mu \frac{\partial \psi_e}{\partial x_\mu} + \varkappa \psi_e = -\frac{ie}{\hbar c}(\gamma_\mu A_\mu)\psi_e, \quad (\mu = 1,\ 2,\ 3,\ 4) \tag{149,1}$$

ხოლო $\overline{\psi}_e = \psi_e^* \gamma_4$ ფუნქციისათვის გვექნება (134, 20) განტოლება:

$$\frac{\partial \overline{\psi}_e}{\partial x_\mu}\gamma_\mu - \varkappa \overline{\psi}_e = \frac{ie}{\hbar c}\overline{\psi}_e(\gamma_\mu A_\mu). \tag{149,2}$$

დავუშვათ, ვიპოვეთ ისეთი უნიტარული C-მატრიცა, რომ ადგილი აქვს ტოლობას

$$\breve{\gamma}_\mu = -C^{-1}\gamma_\mu C, \tag{149,3}$$

სადაც $\breve{\gamma}_\mu$ აღნიშნავს ტრანსპონირებულ მატრიცას. თუ ავიღებთ (149,2) განტოლების ტრანსპონირებულს (გავიხსენოთ რომ $\widetilde{AB} = \widetilde{B}\widetilde{A}$) და გამოვიყენებთ (149,3)-ს, გვექნება

$$-C^{-1}\gamma_\mu C \frac{\partial \breve{\overline{\psi}}_e}{\partial x_\mu} - \varkappa \breve{\overline{\psi}}_e = -\frac{ie}{\hbar c}(C^{-1}\gamma_\mu C A_\mu)\breve{\overline{\psi}}_e \tag{149,4}$$

---

[1] O. Chamberlain, E. Segre, C. Wiegand, T. Ypsilantis; Nature, 177, 11 (1956); Phys. Rev., 100, 947 (1955).

ან მარცხნიდან $-C$-ზე გამრავლებით,

$$\gamma_\mu \frac{\partial \psi_c^-}{\partial x_\mu} + \varkappa \psi_c^- = \frac{ic}{\hbar c} (\gamma_\mu A_\mu) \psi_c^-, \tag{149,5}$$

სადაც

$$\psi_c^- = \widetilde{C\psi} = C\gamma_4 \psi^*. \tag{149,6}$$

(149,5) განტოლება კვლავ დირაკის განტოლებაა, ოღონდ საწინააღმდეგო მუხტის ნაწილაკისათვის. ამიტომ ψ_c^- წარმოადგენს მუხტურად შეუღლებული ნაწილაკის ტალღურ ფუნქციას.

ახლა საჭიროა იმის ჩვენება, რომ (149,3) ტოლობა ყოველთვის ძალაშია, ე. ი. ყოველთვის მოიძებნება ისეთი C მატრიცა, რომელიც აკმაყოფილებს (149,2) პირობას. ეს აშკარაა, რადგან $-\widetilde{\gamma_\mu}$ აგრეთვე აკმაყოფილებს დირაკის პირობებს; იგი მიიღება γ_μ მატრიცაზე კანონიკური გარდაქმნის ჩატარებით.

ვნახოთ, რა სახე ექნება ψ_c^--ს სხვადასხვა წარმოდგენაში.

დირაკის წარმოდგენა. ამ წარმოდგენაში, როგორც ვიცით.

$$\alpha = \begin{pmatrix} 0 & \sigma^0 \\ \sigma^0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \alpha_4 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}: \tag{149,7}$$

ადვილად ვაჩვენებთ, რომ მატრიცა C, რომელიც (149,3) პირობას აკმაყოფილებს, იქნება α_2, ე. ი.

$$C = \alpha_2 = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_2^0 \\ \sigma_2^0 & 0 \end{pmatrix}, \tag{149,8}$$

მეორე მხრივ, დირაკის წარმოდგენაში γ მატრიცებს აქვს სახე

$$\gamma = \begin{pmatrix} 0 & -i\sigma^0 \\ i\sigma^0 & 0 \end{pmatrix}. \quad \gamma_4 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \tag{146,9}$$

საიდანაც გამომდინარეობს, რომ

$$\widetilde{\gamma_1} = \gamma_1^* = -\gamma_1; \quad \widetilde{\gamma_2} = \gamma_2 = \gamma_2^*; \quad \widetilde{\gamma_3} = \gamma_3^* = -\gamma_3. \quad \widetilde{\gamma_4} = \gamma_4 = \gamma_4^*, \tag{149,10}$$

ამ ტოლობების გამოყენებით ადვილად შევამოწმებთ (149,3) განტოლების სამართლიანობას. $C = \alpha_2$ მატრიცას ექნება შემდეგი თვისებები:

$$C^+ = C = C^{-1} = -C^*; \quad C^+ C = CC^+ = 1; \quad \widetilde{C} = -C. \tag{149,11}$$

მუხტურად შეუღლებული ფუნქციისათვის შეიძლება დავწეროთ

$$\psi_c^- = \alpha_2 \widetilde{\psi} = \alpha_2 \beta \psi^*. \tag{149,12}$$

მაიორანას წარმოდგენა. მაიორანას წარმოდგენაში, როგორც ვნახეთ, α მატრიცა შემდეგნაირად შეირჩევა:

$$\alpha_1 = \rho_1 \sigma_1, \quad \alpha_2 = \rho_3, \quad \alpha_3 = \rho_1 \sigma_3, \quad \alpha_4 = \rho_1 \sigma_2. \tag{149,13}$$

γ მატრიცებს ამ წარმოდგენაში ექნება სახე ($\gamma = -i\alpha_4 \alpha$, $\gamma_4 = \alpha_4$).

$$\gamma_1 = -\sigma_3,$$
$$\gamma_2 = \begin{pmatrix} 0 & i\sigma_2^0 \\ -i\sigma_2^0 & 0 \end{pmatrix}, \tag{149,14}$$
$$\gamma_3 = \sigma_1, \quad \gamma_4 = \alpha_4 = \rho_1 \sigma_2$$

აშკარაა, რომ $\widetilde{\gamma}_i=\gamma_i=\gamma_i^*$ $(i=1,\ 2,\ 3)$ და $\widetilde{\gamma}_4=\gamma_4^*=-\gamma_4$, ამიტომ (149,3) განტოლებას დააკმაყოფილებს $C=\gamma_4$ მატრიცა. მაშასადამე,

$$\psi_c=C\gamma_4\psi_c^*=\gamma_4^2\psi_c^*=\psi_c^*, \tag{149,15}$$

რაც სხვა გზითაც გვქონდა მიღებული.

აღვნიშნოთ, რომ (149,3) ფორმულა დაცული იქნება მაშინაც, თუ C-ს ნაცვლად ავიღებთ $Ce^{i\varphi}$-ს. ასე რომ, ზუსტურად შეუღლების ოპერატორი განსაზღვრულია $e^{i\varphi}$-ს სიზუსტით. ეს განუზღვრელობა ტალღური ფუნქციის შინაარსს არა ცვლის.

§ 150. თავისუფალი ნაწილაკი ნახევრის ტოლი სპინით

ამოვხსნათ თავისუფალი ნახევარსპინიანი ნაწილაკის ამოცანა რელატივისტურ კვანტურ მექანიკაში. თავისუფალი ნაწილაკის ჰამილტონიანი

$$\hat{H}=c(\alpha\hat{\mathrm{p}})+\alpha_4mc^2 \tag{150,1}$$

კომუტატურია იმპულსის ოპერატორთან, ამიტომ ამ ორ ოპერატორს საერთო საკუთარი ფუნქცია ექნება. ვიპოვოთ ეს ფუნქცია. დავწეროთ დირაკის განტოლება. რადგან ნაწილაკი თავისუფალია, ამიტომ მდგომარეობა სტაციონარული იქნება. ამის გამო, დირაკის განტოლება ასე დაიწერება:

$$\{E-c(\alpha\hat{\mathrm{p}})-\alpha_4mc^2\}\Psi(\mathrm{r})=0, \tag{150,1'}$$

სადაც E სრული ენერგიაა. როგორც ვიცით, მას შეუძლია მიიღოს როგორც დადებითი, ისე უარყოფითი მნიშვნელობები. სრული ტალღური ფუნქცია კი განისაზღვრება ფორმულით

$$\Psi(\mathrm{r},\ t)=\psi(\mathrm{r})\,e^{-\frac{i}{\hbar}Et} \tag{150,2}$$

$\psi(\mathrm{r})$ საკუთარი ფუნქცია უნდა აკმაყოფილებდეს განტოლებასაც

$$\hat{\mathrm{p}}\psi(\mathrm{r})=\mathrm{p}\psi(\mathrm{r}), \tag{150,3}$$

რომელსაც, როგორც ვიცით, აქვს ამონახსნი

$$\psi(\mathrm{r})=e^{\frac{i}{\hbar}\mathrm{pr}} \tag{150,4}$$

ბუნებრივია, ამიტომ (150,1') დირაკის განტოლების ამონახსნი ვეძებოთ შემდეგი სახით:

$$\psi(\mathrm{r})=Ue^{\frac{i}{\hbar}\mathrm{pr}} \tag{150,5}$$

სადაც U არის საძიებელი ბისპინორი

$$U=\begin{pmatrix}u_1\\u_2\\u_3\\u_4\end{pmatrix}. \tag{150,6}$$

(150,5) ფუნქციის შეტანით (150,1') განტოლებაში იგი ალგებრულ სისტემად გადაიქცევა

$$\{E-c(\alpha\mathrm{p})-\alpha_4mc^2\}U=0 \tag{150,7}$$

შევიტანოთ α-მატრიცების გამოსახულებანი (131,14) ფორმულებიდან და მოვახდინოთ მატრიცათა შეკრება; შედეგად გვექნება

$$\sum_{k=1}^{4} T_{ik} u_k = 0 \quad (i = 1,\ 2,\ 3,\ 4), \tag{150,8}$$

სადაც T_{ik} ელემენტები ადგენენ შემდეგ მატრიცას:

$$T = \begin{pmatrix} E - mc^2 & 0 & -cp_z & -cp_- \\ 0 & E - mc^2 & -cp_+ & cp_z \\ -cp_z & -cp_- & E + mc^2 & 0 \\ -cp_+ & cp_z & 0 & E + mc^2 \end{pmatrix} \tag{150,9}$$

ხოლო $p_\pm$-ით აღვნიშნოთ შემდეგი კომბინაცია $p_\pm = p_x \pm i p_y$.

(150,8) წარმოადგენს ერთგვაროვან ალგებრულ განტოლებათა სისტემას, გაშლილად მას შემდეგი სახე ექნება:

$$\begin{aligned} &(E - mc^2)\, u_1 - cp_z u_3 - cp_- u_4 = 0, \\ &(E - mc^2)\, u_2 - cp_+ u_3 + cp_z u_4 = 0, \\ &-cp_z u_1 - cp_- u_2 + (E + mc^2)\, u_3 = 0. \\ &-cp_+ u_1 + cp_z u_2 + (E + mc^2) u_4 = 0. \end{aligned} \tag{150,10}$$

ამ სისტემას არატრივიალური ამონახსნი მაშინ ექნება, როცა (150,9) მატრიცის დეტერმინანტი ნულის ტოლია. ეს დეტერმინანტი კი მართლაც ნულია. სახელდობრ, (150,9) მატრიცის დეტერმინანტის ნულთან ტოლობით მივიღებთ, რომ

$$\frac{E^2}{c^2} - m^2 c^2 - p_x^2 - p_y^2 - p_z^2 = 0, \tag{150,11}$$

რაც წარმოადგენს ენერგიასა და იმპულსს შორის ცნობილ რელატივისტურ დამოკიდებულებას. აღვილად შემოწმდება, რომ ნულის ტოლია ყველა მესამე რანგის დეტერმინანტიც. ნულისაგან განსხვავდება მხოლოდ მეორე რანგის დეტერმინანტები, აქედან კი გამომდინარეობს, რომ ოთხი u_1, u_2, u_3, u_4 უცნობი სიდიდიდან ორი შეგვიძლია ნებისმიერად ავირჩიოთ; ამასთან, საჭიროა განვიხილოთ ორი შემთხვევა. ერთი, როცა ენერგია დადებითია ($E \geqslant 0$) და მეორე, როცა ენერგია უარყოფითია ($E < 0$).

1. ენერგია დადებითია, ე. ი. $E \geqslant 0$ და ნებისმიერად ვირჩევთ u_1 და u_2-ს. ავიღოთ $u_1 = A_1$ და $u_2 = B_1$. სადაც A_1 და B_1 ნებისმიერი რიცხვებია. მაშინ (150,10) სისტემის ბოლო ორი განტოლება მოგვცემს:

$$u_1 = A_1, \quad u_2 = B_1, \quad u_3 = \frac{B_1 p_- + A_1 p_z}{a}, \quad u_4 = \frac{A_1 p_+ - B_1 p_z}{a}, \tag{150,12}$$

სადაც a-თი აღვნიშნეთ შემდეგი გამოსახულება:

$$a = \frac{|E|}{c} + mc \tag{150,13}$$

2. ენერგია უარყოფითია, ე. ი. $E = -|E| < 0$ და ვიგულისხმოთ, რომ $u_3 = A_2$ და $u_4 = B_2$. მაშინ (150,10) სისტემის პირველი ორი განტოლებიდან მივიღებთ:

$$u_1 = -\frac{B_2 p_- + A_2 p_z}{a}, \quad u_2 = -\frac{A_2 p_+ - B_2 p_z}{a}, \quad u_3 = A_2, \quad u_4 = B_2, \quad (150,14)$$

ამგვარად, ენერგიის ორი ნიშნის შესაბამისად ჩვენ ვიპოვეთ ორი ბისპინორი:

$$U^{(+)} = \begin{vmatrix} A_1 \\ B_1 \\ \frac{1}{a}(B_1 p_- + A_1 p_z) \\ \frac{1}{a}(A_1 p_+ - B_1 p_z) \end{vmatrix}, \quad U^{(-)} = \begin{vmatrix} -\frac{1}{a}(B_2 p_- + A_2 p_z) \\ -\frac{1}{a}(A_2 p_+ - B_2 p_z) \\ A_2 \\ B_2 \end{vmatrix}. \quad (150,15)$$

თუ ამ ბისპინორებს შესაბამისად გავამრავლებთ $\exp\left\{\frac{i}{\hbar}(\mathrm{pr} - |E|t)\right\}$ და $\exp\left\{\frac{i}{\hbar}(\mathrm{pr} + |E|t)\right\}$ ვიპოვით თავისუფალი ნაწილაკის ამონახსნებს განსაზღვრული იმპულსით. მოვახდინოთ ამ ფუნქციების ნორმირება დირაკის დელტა ფუნქციაზე იმპულსებიდან

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_{\mathbf{p}'}^{*}(\mathbf{r})\,\psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r})\,d\mathbf{r} = \delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}'). \quad (150,16)$$

ამ ინტეგრალში შევიტანოთ მუდმივზე გამრავლებული (150,5) ფუნქცია, რომელშიაც ვიგულისხმოთ, რომ U ბისპინორი განსაზღვრულია (150,15) ფორმულით; გვექნება

$$c^2 \sum_{i=1}^{4} u_i^{*}(\mathbf{p}')\,u_i(\mathbf{p}) \int_{-\infty}^{+\infty} e^{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}-\mathbf{p}')\mathbf{r}}\,d\mathbf{r} = \delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}'), \quad (150,17)$$

საიდანაც

$$c^2 (2\pi\hbar)^3 \sum_{i=1}^{4} u_i^{*}(\mathbf{p})\,u_i(\mathbf{p}')\,\delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}') = \delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}'). \quad (150,18)$$

აქედან კი

$$c^2 (2\pi\hbar)^3 \sum_{i=1}^{4} |u_i(\mathbf{p})|^2 = 1; \quad (150,19)$$

მაშასადამე, ნორმირების მუდმივი განისაზღვრება ფორმულით

$$c = (2\pi\hbar)^{-3/2} \left\{ \sum_{i=1}^{4} |u_i(\mathbf{p})|^2 \right\}^{-1/2} \quad (150,20)$$

ამ გამოსახულებაში შემავალი ჯამის გამოსათვლელად გამოვიყენოთ U-ბისპინორის ცხადი სახე. (150,15) ფორმულით განსაზღვრული კომპონენტების გამოყენებით ადვილად ვაჩვენებთ, რომ

$$\sum_{i=1}^{4} |u_i(\mathbf{p})|^2 = (|A_1|^2 + |B_1|^2)\,\frac{2|E|}{ac}. \quad (E \geqslant 0) \quad (150,21)$$

$E<0$ შემთხვევის შესაბამისი ბისპინორის კომპონენტების გამოყენებით იგივე ნიშნელობას მივიღებთ. ამგვარად, თავისუფალი ნაწილაკის ნორმირებულ ამონახსნებს დირაკის თეორიაში ექნებათ შემდეგი სახე:

$$\psi_p^{(+)}(\mathbf{r})=\left\{\frac{ac}{2|E|\,(|A_1|^2+|B_1|^2)}\right\}^{1/2} U_p^{(+)}\,\frac{e^{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{pr}-|E|t)}}{(2\pi\hbar)^{3/2}}, \tag{150,22}$$

$$\psi_p^{(-)}(\mathbf{r})=\left\{\frac{ac}{2|E|(|A_2|^2+|B_2|^2)}\right\}^{1/2} U_p^{(-)}\frac{e^{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{pr}+|E|t)}}{(2\pi\hbar)^{3/2}}. \tag{150,23}$$

ეს ფუნქციები, ზოგად შემთხვევაში, სპინის z-პროექციის ოპერატორის საკუთარი ფუნქციები არ არის. A_1 და B_1 ნებისმიერი მუდმივები ისე შევარჩიოთ, რომ არარელატივისტურ ზღვარში ან, როცა თავისუფალი ნაწილაკი z—ღერძის გასწვრივ მოძრაობს, აღნიშნული ფუნქციები $\hat{s}_z$ ოპერატორის საკუთარი ფუნქციებიც იყოს. ავიღოთ $A_1=1$, $B_1=0$ და პირიქით, მივიღებთ შემდეგ ფუნქციებს:

$$\left.\begin{aligned}\psi_p(\mathbf{r})&=\left(\frac{ac}{2|E|}\right)^{1/2}\begin{pmatrix}1\\0\\p_z/a\\p_+/a\end{pmatrix}\frac{e^{-\frac{i}{\hbar}(\mathbf{pr}-|E|t)}}{(2\pi\hbar)^{3/2}},\\ \psi_p(\mathbf{r})&=\left(\frac{ac}{2|E|}\right)^{1/2}\begin{pmatrix}0\\1\\p_-/a\\-p_z/a\end{pmatrix}\frac{e^{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{pr}-|E|t)}}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\end{aligned}\right\}\ E>0 \tag{150,24}$$

$$\left.\begin{aligned}\psi_p(\mathbf{r})&=\left(\frac{ac}{2|E|}\right)^{1/2}\begin{pmatrix}p_z/a\\p_+/a\\1\\0\end{pmatrix}\frac{e^{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{pr}+|E|t)}}{(2\pi\hbar)^{3/2}},\\ \psi_p(\mathbf{r})&=\left(\frac{ac}{2|E|}\right)^{1/2}\begin{pmatrix}p_-/a\\-p_z/a\\0\\1\end{pmatrix}\frac{e^{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{pr}+|E|t)}}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\end{aligned}\right\}\ E<0 \tag{150,25}$$

დირაკის თეორიაში სპინი ცალკე არ იზომება, ამიტომ ეს ფუნქციები $\hat{s}_z$ ოპერატორის საკუთარი ფუნქციები არ იქნება. მაგრამ, როცა ნაწილაკი მოძრაობს z-ღერძის გასწვრივ, ეს ფუნქციები სპინის z-პროექციის ოპერატორის

$$\hat{s}_z=\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}1&0&0&0\\0&-1&0&0\\0&0&1&0\\0&0&0&-1\end{pmatrix} \tag{150,26}$$

საკუთარი ფუნქციებიც იქნება. ამ შემთხვევაში $p_\pm=p_x\pm ip_y=0$ და (150,24) და (150,25) ამონახსნებში, სათანადოდ დაგვიჯდება შემდეგი ბისპინორები:

$$X_1=\begin{pmatrix}1\\0\\p_z/a\\0\end{pmatrix},\quad X_2=\begin{pmatrix}0\\1\\0\\-p_z/a\end{pmatrix},\quad X_3=\begin{pmatrix}p_z/a\\0\\1\\0\end{pmatrix},$$

$$X_4=\begin{pmatrix}0\\-p_z/a\\0\\1\end{pmatrix} \tag{150,27}$$

რომლებიც მართლაც $\hat{s}_z$ ოპერატორის საკუთარი ფუნქციებია

$$\hat{s}_z X_1=\frac{\hbar}{2}X_1,\ \hat{s}_z X_2=-\frac{\hbar}{2}X_2,\ \hat{s}_z X_3=\frac{\hbar}{2}X_3,\ \hat{s}_z X_4=-\frac{\hbar}{2}X_4. \tag{150,28}$$

გარდა ამისა, არარელატივისტურ ზღვარში, როცა $\frac{v}{c}\to 0$ გვექნება ბისპინორები:

$$Y_1=\begin{pmatrix}1\\0\\0\\0\end{pmatrix},\quad Y_2=\begin{pmatrix}0\\1\\0\\0\end{pmatrix},\quad Y_3=\begin{pmatrix}0\\0\\1\\0\end{pmatrix},\quad Y_4=\begin{pmatrix}0\\0\\0\\1\end{pmatrix}, \tag{150,29}$$

რომლებიც, როგორც მოსალოდნელი იყო, სპინის z-პროექციის ოპერატორის საკუთარ ფუნქციებს წარმოადგენენ.

ამგვარად, ჩვენს მიერ ნაპოვნი (150,24) და (150,25) თავისუფალი ნაწილაკის დირაკის ფუნქციები სპინის z-პროექციის საკუთარი ფუნქციები არ არიან; ისინი სპინის საკუთარი ფუნქციები გახდებიან ორ კერძო შემთხვევაში, ერთი, როცა მოძრაობა ხდება z-ღერძის გასწვრივ და მეორე, არარელატივისტური მოძრაობის დროს.

არარელატივისტურ ზღვარში ენერგია შეგვიძლია წარმოვიდგინოთ როგორც $E=E'+mc^2$, სადაც E' მოძრაობის ენერგიაა. ამიტომ $ca=(E+mc^2)$ სულ მცირე $2mc^2$ ის ტოლი იქნება. შედეგად (150,15) სპინორებისათვის გვექნება:

$$U^{(+)}=\begin{pmatrix}A\\B\\0\\0\end{pmatrix},\quad U^{(-)}=\begin{pmatrix}0\\0\\A\\B\end{pmatrix}; \tag{150,30}$$

მაშასადამე, არარელატივისტურ ზღვარში დადებითი ენერგიის დროს მნიშვნელოვანია ბისპინორის ორი ზედა კომპონენტი, უარყოფითი ენერგიის დროს კი პირიქით—ქვედა ორი. ამიტომ ზედა კომპონენტებს, დადებითი ენერგიის შემთხვევაში, უწოდებენ დიდ კომპონენტებს, ქვედას კი—მცირეს. უარყოფითი ენერგიის დროს სურათი შებრუნებულია. ამასთან, დიდი კომპონენტების ფარდობა მცირესთან რიგით a/p-ს ტოლია, რომელიც უდრის c/v-ს, ამგვარად, არარელატივისტურ ზღვარში დირაკის ბისპინორი ფაქტიურად პაულის ფუნქციას (სპინორს) ემთხვევა. უძრავი ნაწილაკისათვის $p_x=p_y=p_z=0$, როცა $E>0$, ქვედა ორი კომპონენტი ზუსტად ნულის ტოლია. ტალღური ფუნქციის ზედა ორი კომპონენტი კი $e^{-imc^2t/\hbar}$-ის პროპორციული იქნება.

თავისუფალი ნაწილაკის ალბათობისა და ალბათობის დენის სიმკვრივე. გვპოვოთ ალბათობის სიმკვრივისა და ალბათობის დენის სიმკვრივის ვექტორის გამოსახულებები თავისუფალი ნახევარსპინიანი ნაწილაკისათვის.

ავიღოთ დადებითი ენერგიის შესაბამისი ნორმირებული ბრტყელი ტალღა

$$\psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}) = \left(\frac{ac}{2|E|}\right)^{1/2} U(p)\, \frac{e^{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{pr}-|E|t)}}{(2\pi\hbar)^{3/2}}, \tag{150,31}$$

სადაც $U(\mathbf{p})$ ბისპინორისათვის შეგვიძლია ავიღოთ გამოსახულება

$$U(p) = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ p_z/a \\ p_+/a \end{pmatrix}, \qquad a = \frac{|E| + mc^2}{c}. \tag{150,32}$$

ალბათობის სიმკვრივე განისაზღვრება $\rho = \psi_{\mathbf{p}}^{+}\psi_{\mathbf{p}}$ ფორმულით. ასე რომ,

$$\rho = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3}\left(\frac{ac}{2|E|}\right)\sum_{i=1}^{4} |u_i(\mathbf{p})|^2. \tag{150,33}$$

თუ გავითვალისწინებთ (150,21) ფორმულას $A_1 = 1$, და $B_i = 0$-სათვის მივიღებთ

$$\rho = \psi_{\mathbf{p}}^{+}\psi_{\mathbf{p}} = (2\pi\hbar)^{-3}, \tag{150,34}$$

ე. ი. ალბათობის სიმკვრივე მუდმივი სიდიდეა.

დენის ვექტორი ასე განიმარტება:

$$\mathbf{J} = e\psi_{\mathbf{p}}^{+}\boldsymbol{\alpha}\psi_{\mathbf{p}}. \tag{150,35}$$

(150,31) ფუნქციის გათვალისწინებით მივიღებთ

$$\mathbf{J} = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3}\,\frac{ac^2}{2|E|}\,(U^{+}\boldsymbol{\alpha}U). \tag{150,36}$$

შევიტანოთ (150,32) ბისპინორის მნიშვნელობა და გამოვიყენოთ მატრიცათა გამრავლების წესი. გვექნება

$$(U^{+}\boldsymbol{\alpha}U) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \frac{p_z}{a} & \frac{p_-}{a} \end{pmatrix}\boldsymbol{\alpha}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ p_z/a \\ p_+/a \end{pmatrix} = \frac{2\mathbf{p}}{a}. \tag{150,37}$$

მაშასადამე, (150,36)-ში შეტანით მივიღებთ

$$\mathbf{J} = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3}\,\frac{c^2\mathbf{p}}{|E|}. \tag{150,38}$$

ცხადია, რომ ეს გამოსახულება ასეც შეგვიძლია გადავწეროთ:

$$\mathbf{J} = \frac{c^2\mathbf{p}}{|E|}\,\psi_{\mathbf{p}}^{+}\psi_{\mathbf{p}}. \tag{150,39}$$

რადგან რელატივისტური სიჩქარე $v = c^2\mathbf{p}/|E|$, ამიტომ დენის ვექტორს კვლავ $\rho\mathbf{v}$ სახე ექნება.

§ 151. ელექტრონის მოძრაობა ცენტრალური სიმეტრიის ველში

განვიხილოთ ელექტრონის მოძრაობა $V = V(r)$ ცენტრალური სიმეტრიის ველში. ამ შემთხვევაში ჰამილტონიანს ექნება სახე

$$\hat{H} = c(\boldsymbol{\alpha}\hat{\mathbf{p}}) + \alpha_4 mc^2 + V(r). \tag{151,1}$$

ისევე, როგორც შრედინგერის განტოლებაში, აქაც ხელსაყრელია სფერულ კოორდინატებზე გადასვლა. მაგრამ იმის გამო, რომ დირაკის თეორიაში მოძრაობის ინტეგრალია არა l, არამედ სრული მომენტი j, ეს გადასვლა საკმარისად რთულ ამოცანას წარმოადგენს[1]. ამიტომ ხშირად მიმართავენ, მართალია, ერთობ ხელოვნურ, მაგრამ სამაგიეროდ, შედარებით მარტივ გზას. ამ პარაგრაფში ცენტრალური სიმეტრიის ველისათვის ჰამილტონიანის ჩასაწერად რადიალურ კოორდინატებში, სწორედ, ამ გზას გამოვიყენებთ. როგორც (151,1) ფორმულიდან ჩანს, ამისათვის საკმარისია ($\alpha\,\hat{p}$) სკალარული ნამრავლის გამოხატვა რადიალურ კოორდინატებში.

მოძრაობის რაოდენობის სრული მომენტი უდრის

$$\hat{\mathbf{j}} = \hat{\mathbf{l}} + \hat{\mathbf{s}} = \hat{\mathbf{l}} + \frac{\hbar}{2}\,\sigma. \tag{151,2}$$

შემოვიღოთ ახალი სიდიდე $\hat{k}$ და მოვითხოვოთ, რომ იგი სრულ მომენტთან დაკავშირებული იყოს გამოსახულებით

$$\hat{k}^2\hbar^2 = \hat{j}_x^2 + \hat{j}_y^2 + \hat{j}_z^2 + \frac{1}{4}\hbar^2 \tag{151,3}$$

და წარმოადგენდეს მოძრაობის ინტეგრალს. ამ მიზნით საკმარისია დავუშვათ, რომ

$$\hat{\mathbf{k}}\hbar = \alpha_4\{(\sigma\hat{\mathbf{l}}) + \hbar\}. \tag{151,4}$$

მართლაც, მაშინ გვექნება

$$\hat{k}^2\hbar^2 = \alpha_4\{(\sigma\hat{\mathbf{l}}) + \hbar\}\alpha_4\{(\sigma\hat{\mathbf{l}}) + \hbar\} = (\sigma\hat{\mathbf{l}})^2 + 2\hbar\,(\sigma,\hat{\mathbf{l}}) + \hbar^2.$$

მეორე მხრივ, (138,29) ფორმულის თანახმად,

$$(\sigma\hat{\mathbf{l}})^2 = \hat{\mathbf{l}}^2 + i(\sigma[\hat{\mathbf{l}}\times\hat{\mathbf{l}}]) \tag{151,4'}$$

გარდა ამისა, ჩვენ ვიცით, რომ

$$[\hat{\mathbf{l}}\times\hat{\mathbf{l}}] = i\hbar\hat{\mathbf{l}}.$$

თუ გავითვალისწინებთ იმასაც, რომ $\sigma^2 = \sigma_1^2 + \sigma_2^2 + \sigma_3^2 = 3$, გვექნება

$$(\sigma\hat{\mathbf{l}})^2 = \hat{\mathbf{l}}^2 - \hbar(\sigma\hat{\mathbf{l}}) = \left(\hat{\mathbf{l}} + \frac{1}{2}\sigma\hbar\right)^2 - 2\hbar\,(\sigma\mathbf{l}) - \frac{3\hbar^2}{4},$$

ამიტომ

$$\hat{\mathbf{k}}^2\hbar^2 = \left(\hat{\mathbf{l}} + \frac{\hbar}{2}\,\sigma\right)^2 + \frac{\hbar^2}{4} = \hat{\mathbf{j}}^2 + \frac{\hbar^2}{4}. \tag{151,5}$$

(138,29) ფორმულის გამოყენებით ასევე მარტივად ვაჩვენებთ, რომ $[\hat{H},\ \hat{\mathbf{k}}\hbar] = 0$. მართლაც, (151,4) და (151,1) ფორმულებიდან გამომდინარეობს:

$$\frac{\hbar}{i}\,[\hat{H},\ \hat{\mathbf{k}}\hbar] = \frac{\hbar}{i}\,\{[c(\alpha\hat{\mathbf{p}}),\ \alpha_4(\sigma\hat{\mathbf{l}})] + [c(\alpha\hat{\mathbf{p}}),\ \alpha_4\hbar]\}.$$

თუ მარჯვენა მხარეში გავხსნით პუასონის ფრჩხილებს და გავითვალისწინებთ α მატრიცების თვისებებს, გვექნება

---

[1] იხ. В. Фок „Начала квантовой механики"; „Наука", (1976). დირაკის განტოლების სხვე მრუდწირულ კოორდინატებში, ზოგადად, მოცემულია წიგნში Волновая механика Я. И. Френкель, часть II, გვ. 492, § 37, (1935).

$$\frac{\hbar}{i}[\hat{H},\ \hat{k}\hbar]=c\{(\alpha\hat{p})\alpha_4(\sigma\hat{l})-\alpha_4(\sigma\hat{l})(\alpha\hat{p})+\hbar(\alpha\hat{p})\alpha_4-\alpha_4\hbar(\alpha\hat{p})\}=$$

$$=-c\alpha_4\rho_1^3\{(\alpha\hat{p})(\sigma\hat{l})+(\sigma\hat{l})(\alpha\hat{p})+2\hbar(\alpha\hat{p})\}=$$

$$=-c\alpha_4\rho_1\{(\alpha\hat{p})(\alpha\hat{l})+(\alpha\hat{l})(\alpha\hat{p})+2\hbar(\sigma\hat{p})\}, \qquad (151,5')$$

(138,33) ფორმულის ძალით—

$$(\alpha\hat{p})(\alpha\hat{l})=i(\sigma[\hat{p}\times\hat{l}]);\ (\alpha\hat{l})(\alpha\hat{p})=i(\sigma[\hat{l}\times\hat{p}]); \qquad (151,5'')$$

გარდა ამისა, ადვილად დავრწმუნდებით, რომ

$$[\hat{p}\times\hat{l}]+[\hat{l}\times\hat{p}]=2i\hbar\hat{p}. \qquad (151,6)$$

ამიტომ

$$(\alpha\hat{p})(\alpha\hat{l})+(\alpha\hat{l})(\alpha\hat{p})=-2\hbar(\sigma\hat{p}). \qquad (151,6')$$

და, (151,5')-ის ძალით, $[\hat{H},\ \hat{k}\hbar]=0$. აქედან გამომდინარეობს, რომ $k\hbar$ არის მოძრაობის ინტეგრალი. ამგვარად, (151,4) გამოსახულება აკმაყოფილებს ჩვენს მიერ წაყენებულ პირობებს. ვიპოვოთ $\hat{k}^2$-ის საკუთარი მნიშვნელობები. რადგან $j^2=\hbar^2j(j+1)$, ამიტომ, (151,5)-ის შედეგად—

$$k^2\hbar^2=\hbar^2\left\{j(j+1)+\frac{1}{4}\right\}=\hbar^2\left(j+\frac{1}{2}\right)^2 \qquad (151,7)$$

აქედან, თუ გავიხსენებთ, რომ j ყოველთვის დადებითი და ნახევრის კენტი ჯერადია, დავასკვნით, რომ k მთელი რიცხვია (ნულის გარდა), ე. ი.

$$k=\pm1,\ \pm2,\ \pm3,\ \pm\dots \qquad (151,7')$$

(αp) რომ გამოვხატოთ სფერულ კოორდინატებში, განვიხილოთ ოპერატორი

$$\alpha_r=\frac{1}{r}(\alpha r)=(\alpha,\mathrm{n}),\quad \left(\mathrm{n}=\frac{r}{r}\right). \qquad (151,8)$$

(ეს ოპერატორი იქნება სიჩქარის რადიალური მდგენელის ოპერატორი). თანახმად (138,32) ფორმულისა, გვაქვს

$$\alpha_r^2=(\alpha\mathrm{n})^2=1, \qquad (151,9)$$

გავიხსენოთ აგრეთვე იმპულსის რადიალური მდგენელის (34,12) გამოსახულება, რომელსაც შემდეგნაირად გადავწერთ:

$$\hat{p}_r=\frac{1}{r}\{(r\hat{p})-i\hbar\}, \qquad (151,10)$$

ამის შემდეგ, (138,26) ფორმულის გამოყენებით ადვილად მივიღებთ

$$(\alpha\hat{p})(\alpha r)=(\hat{p}r)+i(\sigma[r\times\hat{p}])=(\hat{p}r)+i(\sigma\hat{l}). \qquad (151,11)$$

თუ (151,4) ტოლობას ძირცხენიდან გავამრავლებთ α_4-ზე, შეგვიძლია განვსაზღვროთ $(\sigma\hat{l})$, სახელდობრ,

$$(\sigma\hat{l})=\alpha_4\hat{k}\hbar-\hbar. \qquad (151,12)$$

ამის გამო, წინა ფორმულა მიიღებს სახეს

$$(\alpha\hat{p})(\alpha r)=(\hat{p}r)+i\alpha_4\hat{k}\hbar-i\hbar. \qquad (151,13)$$

შევიტანოთ $(\hat{\mathbf{r}}\hat{\mathbf{p}})$-ის მნიშვნელობა (151,10)-დან, $(\boldsymbol{\alpha}\,\mathbf{r})$-ისა კი (151,8)-დან და გავითვალისწინოთ, რომ $\alpha_r^2=1$- მივიღებთ

$$(\boldsymbol{\alpha}\,\hat{\mathbf{p}})=\alpha_r\hat{p}_r+\frac{i\hbar}{r}\alpha_r\alpha_4\hat{\mathbf{k}}. \tag{151,14}$$

ამგვარად, $(\hat{\boldsymbol{\alpha}}\mathbf{p})$ ნამრავლი გამოსახულია რადიალურ კოორდინატებში, ამის შემდეგ ჰამილტონიანი ცენტრალური სიმეტრიის ველში მიიღებს სახეს

$$\hat{H}=c\alpha_r\hat{p}_r+\frac{i\hbar c}{r}\alpha_r\alpha_4\hat{\mathbf{k}}+\alpha_4mc^2+V(r). \tag{151,15}$$

როგორც ვხედავთ, ჰამილტონიანში მხოლოდ ორი მატრიცა მონაწილეობს α_r და α_4. როგორც (151,8)-დან გამომდინარეობს, $\alpha_4^2=1$. გარდა ამისა,

$$\alpha_r\alpha_4+\alpha_4\alpha_r=(\boldsymbol{\alpha}\mathbf{n})\,\alpha_4+\alpha_4\,(\boldsymbol{\alpha}\mathbf{n})=(\boldsymbol{\alpha}\alpha_4+\alpha_4\boldsymbol{\alpha},\,\mathbf{n})=0, \tag{151,16}$$

ამგვარად, α_r და α_4 დირაკის პირობებს აკმაყოფილებს. ადვილად შევამოწმებთ, რომ

$$[\alpha_r,\,\hat{\mathbf{k}}]=[\alpha_4,\,\hat{\mathbf{k}}]=[\hat{p}_r,\;\;\hat{\mathbf{k}}]=0. \tag{151,17}$$

როგორც დავინახეთ $[\hat{H},\;\hat{k}\hat{\mathbf{h}}]=0$, ამიტომ ენერგია და $\hbar k$ ერთდროულად ზუსტად იზომება, რის გამოც ჩვენ შეგვიძლია მდგომარეობა დავახასიათოთ k და E სიდიდეებით. ავირჩიოთ ისეთი წარმოდგენა, სადაც $\hat{H}$ და $\hat{\mathbf{k}}\hat{\mathbf{h}}$ მატრიცები დიაგონალურია. მაშინ α_r და α_4 შეგვიძლია შემდეგი მეორე რანგის ერმიტული მატრიცების სახით დავწეროთ:

$$\alpha_r=\begin{pmatrix}0 & -i\\ i & 0\end{pmatrix},\quad \alpha_4=\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}. \tag{151,18}$$

ცხადია, რომ ჰამილტონიანში შემავალი $\alpha_r\alpha_4$ ნამრავლისათვის გვექნება

$$\alpha_r\alpha_4=\begin{pmatrix}0 & -i\\ i & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}=i\begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix}=i\sigma_x^0. \tag{151,19}$$

§ 152. წყალბადისებური ატომის სპექტრის ნაზი სტრუქტურა

როგორც ექსპერიმენტული მონაცემებიდან ჩანს, წყალბადისებური ატომების სპექტრი გაცილებით უფრო რთული აგებულებისაა, ვიდრე ამას იძლევა შრედინგერის თეორია. კერძოდ, ეს ატომები ამჟღავნებენ ეგრეთწოდებულ ნაზ სტრუქტურას, რაც იმაში მდგომარეობს, რომ ენერგეტული დონეები დამოკიდებულია არა მხოლოდ მთავარ კვანტურ რიცხვზე, არამედ მომენტზედაც. ასე მაგალითად, აღმოჩნდა, რომ $n=2$ მდგომარეობაში, წინაშრედინგერის თეორიისა, რომელიც გვეუბნება, რომ უნდა გვქონდეს მხოლოდ და მხოლოდ E_2 დონე, გვაქვს ორი დონე: $p_{1/2}$ და $p_{3/2}$, რაც გამოხატავს დონეების გახლეჩას. ეს მოვლენა ჯერ კიდევ ელემენტარულ კვანტურ მექანიკაში ახსნილი იყო ზომერფელდის მიერ ელექტრონის მოძრაობაში რელატივისტური ეფექტების გათვალისწინებით. რადგან დირაკის თეორიაც ითვალისწინებს იგივე ეფექტებს, ამიტომ მისი გამოყენებით წყალბადისებური ატომებისათვის უნდა მივიღოთ სპექტრის ნაზი სტრუქტურა.

წყალბადისებური ატომის პოტენციალური ენერგია გამოისახება ფორმულით

$$V(r)=-\frac{Ze^2}{r}, \tag{152,1}$$

ამიტომ ცენტრალური სიმეტრიის ველში ჰამილტონიანს ექნება სახე

$$\hat{H} = c\alpha_r \hat{p}_r + \frac{i\hbar c}{r} \alpha_r \alpha_4 \hat{k} + \alpha_4 mc^2 - \frac{Ze^2}{r}. \qquad (152,2)$$

თუ E არის ენერგიის საკუთარი მნიშვნელობა, მაშინ დირაკის განტოლებისათვის მივიღებთ

$$\left\{\left(E - \alpha_4 mc^2 + \frac{Ze^2}{r}\right) - c\alpha_r \hat{p}_r - \frac{i\hbar c}{r} \alpha_r \alpha_4 \hat{k}\right\} \psi = 0 \qquad (152,3)$$

ან, რადგან

$$\hat{p}_r = -i\hbar \left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r}\right),$$

ამიტომ

$$\left\{\left(E - \alpha_4 mc^2 + \frac{Ze^2}{r}\right) + i\hbar c \alpha_r \left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r}\right) - \frac{i\hbar c}{r} \alpha_r \alpha_4 \hat{k}\right\} \psi = 0; \qquad (152,4)$$

ჩვენს მიერ შერჩეულ წარმოდგენაში α_r და α_4 მატრიცები მეორე რანგისაა, რის გამოც ψ იქნება ორკომპონენტიანი ფუნქცია. ტალღური ფუნქციის კუთხური და სპინური ნაწილები მოიძებნება იმ პირობით, რომ ψ იყოს $\hbar\hat{k}$ ოპერატორის საერთო საკუთარი ფუნქციაც. ჩვენ გვაინტერესებს მხოლოდ ენერგიის მნიშვნელობები, ამიტომ საკმარისი იქნება რადიალური ფუნქციების უოფაქტევის შესწავლა. ვეძებოთ (152,4)-ის ამოხსნა შემდეგი სახით:

$$\begin{pmatrix} \frac{F(r)}{r} \\ \frac{G(r)}{r} \end{pmatrix}, \qquad (152,5)$$

თუ გავითვალისწინებთ (151,18) და (151,19) ფორმულებს, (152,4) განტოლება ასე დაიწერება

$$\left\{\begin{pmatrix} E + \frac{Ze^2}{r} & 0 \\ 0 & E + \frac{Ze^2}{r} \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} mc^2 & 0 \\ 0 & -mc^2 \end{pmatrix} + \hbar c \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}\left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r}\right) + \right.$$

$$\left. + \frac{\hbar c}{r} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} k \right\} \begin{pmatrix} \frac{F}{r} \\ \frac{G}{r} \end{pmatrix} = 0. \qquad (152,6)$$

ეს უკანასკნელი კი ეკვივალენტურია შემდეგი ორი განტოლებისა;

$$\left.\begin{aligned} \left(E - mc^2 + \frac{Ze^2}{r}\right) F + \hbar c \frac{dG}{dr} + \frac{\hbar c k}{r} G = 0, \\ \left(E + mc^2 + \frac{Ze^2}{r}\right) G - \hbar c \frac{dF}{dr} + \frac{\hbar c k}{r} F = 0. \end{aligned}\right\} \qquad (152,7)$$

შემოვიღოთ აღნიშვნები

$$N_1 = \frac{E + mc^2}{\hbar c}, \quad N_2 = \frac{-(E - mc^2)}{\hbar c}, \quad \rho = \sqrt{N_1 N_2}\, r = Nr. \qquad (152,8)$$

ამ აღნიშვნებში (152,7) სისტემა მიიღებს სახეს:

$$\left.\begin{aligned}\left(-N_2+\frac{\alpha' N}{\rho}\right)F+N\frac{dG}{d\rho}+\frac{kN}{\rho}G=0,\\ \left(N_1+\frac{\alpha' N}{\rho}\right)G-N\frac{dF}{d\rho}+\frac{kN}{\rho}F=0,\end{aligned}\right\} \tag{152,9}$$

სადაც

$$\alpha'=\frac{Ze^2}{\hbar c}=\frac{Z}{137} \tag{152,10}$$

მუდმივია და, როცა $Z=1$, წარმოადგენს ზომერფელდის ნაზი სტრუქტურის უნივერსალურ α_0 მუდმივს.

(152,9) სისტემა შეიძლება შემდეგნაირადაც წარმოვიდგინოთ:

$$\left.\begin{aligned}\left(\frac{d}{d\rho}+\frac{k}{\rho}\right)G-\left(\frac{N_2}{N}-\frac{\alpha'}{\rho}\right)F=0,\\ \left(\frac{d}{d\rho}-\frac{k}{\rho}\right)F-\left(\frac{N_1}{N}+\frac{\alpha'}{\rho}\right)G=0,\end{aligned}\right\} \tag{152,11}$$

რომ დავიცვათ სასაზღვრო პირობები, რომლებიც მოითხოვენ, რომ ამ სისტემის ამოხსნები სწრაფად ისპობოდეს, როცა $r\to\infty$, ამიტომ ამოხსნა უნდა ვეძებოთ შემდეგი სახით:

$$F(\rho)=e^{-\rho}f(\rho) \text{ და } G(\rho)=e^{-\rho}g(\rho) \tag{152,12}$$

$f(\rho)$ და $g(\rho)$ ფუნქციებისათვის, (152,11)-ში შეტანის შემდეგ, მივიღებთ განტოლებათა სისტემას

$$\left.\begin{aligned}\frac{dg}{d\rho}-g(\rho)+\frac{k}{\rho}g(\rho)-\left(\frac{N_2}{N}-\frac{\alpha'}{\rho}\right)f(\rho)=0,\\ \frac{df}{d\rho}-f(\rho)+\frac{k}{\rho}f(\rho)-\left(\frac{N_1}{N}+\frac{\alpha'}{\rho}\right)g(\rho)=0\end{aligned}\right\} \tag{152,13}$$

ამ განტოლებაში ჩავსვათ

$$f(\rho)=\sum_{\nu=0}^{\infty}a_\nu\rho^{s+\nu}\quad(a_0\neq0) \tag{152,14}$$

და

$$g(\rho)=\sum_{\nu=0}^{\infty}b_\nu\rho^{s+\nu}\quad(b_0\neq0)$$

და შევნიშნოთ, რომ ეს ფუნქციები r-ზე გაყოფის შემდეგ (იხ. ფორმულა (152,5)) კოორდინატთა სათავეში სასრულონი უნდა იყვნენ, რის გამოც $s\geqslant1$. ჩასმის შედეგად მივიღებთ

$$\left.\begin{aligned}\sum_{\nu=0}^{\infty}[(s+\nu)b_\nu+kb_\nu+\alpha' a_\nu]\rho^{\nu+s-1}-\sum_{\nu=0}^{\infty}\left(b_\nu+\frac{N_2}{N}a_\nu\right)\rho^{\nu+s}=0,\\ \sum_{\nu=0}^{\infty}[(s+\nu)a_\nu-ka_\nu-\alpha' b_\nu]\rho^{\nu+s-1}-\sum_{\nu=0}^{\infty}\left(a_\nu+\frac{N_1}{N}b_\nu\right)\rho^{\nu+s}=0.\end{aligned}\right\} \tag{152,15}$$

ჩვენი მიზანია a_ν, b_ν და s სიდიდეები ისე განვსაზღვროთ, რომ ეს განტოლებები დაკმაყოფილდეს ყველა ρ-სათვის. ცხადია, ამიტომ საჭიროა ρ-ს ნებისმიერი ხარისხის წინ მდგომი კოეფიციენტი ნულის ტოლი იყოს, ორივე განტოლებაში ნულს გავუტოლოთ $\rho^{s+\nu-1}$-ის კოეფიციენტი. მივიღებთ

$$\begin{aligned}(s+\nu+k)\,b_\nu+\alpha' a_\nu-b_{\nu-1}-\frac{N_2}{N}\,a_{\nu-1}=0,\\(s+\nu-k)\,a_\nu-\alpha' b_\nu-a_{\nu-1}-\frac{N_1}{N}\,b_{\nu-1}=0.\end{aligned}\tag{152,16}$$

როცა $\nu=0$, ის სისტემა მოგვცემს

$$\begin{aligned}(s+k)\,b_0+\alpha' a_0=0,\\(s-k)\,a_0-\alpha' b_0=0.\end{aligned}\tag{152,17}$$

ამ განტოლებათა ამოხსნის არსებობისათვის საჭიროა დეტერმინანტი ნულის ტოლი იყოს, ე. ი.

$$\begin{vmatrix} s+k & \alpha' \\ -\alpha' & s-k \end{vmatrix}=s^2-k^2+\alpha'^2=0,\tag{152,18}$$

საიდანაც

$$s=\pm\sqrt{k^2-\alpha'^2}.\tag{152,19}$$

რაც შეეხება a_ν და b_ν კოეფიციენტებს, კავშირს მათ შორის ადვილად დავამყარებთ (152,16) განტოლებების საშუალებით. ამისათვის ამ სისტემის პირველი განტოლება გავამრავლოთ N_1-ზე. მეორე N_2-ზე და პირველს გამოვაკლოთ მეორე. ამასთან, გავითვალისწინოთ, რომ $N=\sqrt{N_1N_2}$. მივიღებთ საძიებელ კავშირს

$$a_\nu=\frac{N(s+\nu+k)+\alpha' N_2}{N_2(s+\nu-k)-\alpha' N}\,b_\nu.\tag{152,20}$$

გამოვარკვიოთ ტალღური ფუნქციების ყოფაქცევა დიდი მანძილებისათვის, როცა $r\gg1$ მწკრივი უნდა იყოს კრებადი. ჯერ შემოვისაზღვროთ ძალიან დიდი ν-ს შემთხვევით. მაშინ (152,16) სისტემის მეორე განტოლება მოგვცემს

$$\nu a_\nu-\alpha' b_\nu-a_{\nu-1}-\frac{N_1}{N}\,b_{\nu-1}=0,\qquad(\nu\gg1);$$

(152,20)-დან კი გვექნება

$$b_\nu=\frac{N_2}{N}\,a_\nu.$$

წინა განტოლებაში b_ν-ს მნიშვნელობის შეტანით მივიღებთ

$$a_\nu=\frac{2}{\nu}\,a_{\nu-1}.$$

სრულიად ანალოგიურად,

$$b_\nu=\frac{2}{\nu}\,b_{\nu-1},\quad(\nu\gg1).$$

დიდი ν-სათვის f და g მწკრივებს ექნებათ სახე

$$\sum_{\nu=0}^{\infty}\frac{1}{\nu!}(2\rho)^\nu,\tag{152,21}$$

რომელიც წარმოადგენს $\exp(2\rho)$-ს მწკრივად გაშლას. ამგვარად, დიდი მანძილებისათვის ორივე ტალღურ ფუნქციას, როცა $\nu \gg 1$, ექნება სახე

$$e^{2\rho}e^{-\rho} = e^{\rho} \underset{\rho\to\infty}{\to} \infty . \tag{152,22}$$

როგორც ვხედავთ, თუ (152,14) მწკრივები არ ჩამოიჭრა ზემოდან, მაშინ ტალღური ფუნქციები უსასრულობაში განშლადი იქნებიან, რაც ეწინააღმდეგება ჩვენს ძირითად მოთხოვნას. ამიტომ საჭიროა ამ მწკრივების პოლინომებად გადაქცევა. დავუშვათ, რომ რაღაც $\nu = n'$ მნიშვნელობისათვის $a'_{n'+1} = b'_{n'+1} = 0$, მაშინ, (152,20)-ის ძალით, ცხადია, რომ ყველა შემდეგი კოეფიციენტიც ნულის ტოლი იქნება. ამ პირობით (152,16) სისტემის ორივე განტოლება მოგვცემს

$$-b'_n = \frac{N_2}{N} a'_n \quad (n' = 0,\ 1,\ 2, \ldots). \tag{152,23}$$

მეორე მხრივ, (152,20) ტოლობა დავწეროთ $\nu = n'$-სათვის და გამოვიყენოთ (152,23); მივიღებთ

$$\frac{a_{n'}}{b_{n'}} = -\frac{N(s+n'+k)+\alpha' N_2}{N\alpha' - N_2(s+n'-k)} . \tag{152,24}$$

ამ უკანასკნელი ტოლობებიდან კი ვპოულობთ

$$(N_1 - N_2)\,\alpha' = 2N(s+n'). \tag{152.25}$$

ან რადგან, თანახმად (152,8) ფორმულებისა, $N_1 - N_2 = \frac{2E}{\hbar c}$, ამიტომ

$$N(s+n') = \frac{E\alpha'}{\hbar c} . \tag{152,26}$$

ავიყვანოთ ეს ტოლობა კვადრატში და შევიტანოთ $N^2 = N_1 N_2$-ის მნიშვნელობა (152,8) ფორმულებიდან. გვექნება

$$(m^2c^4 - E^2)(s+n')^2 = E^2\alpha'^2 , \tag{152,27}$$

საიდანაც

$$E = \frac{mc^2(s+n')}{\sqrt{\alpha'^2 + (s+n')^2}} = \frac{mc^2}{\sqrt{1 + \dfrac{\alpha'^2}{(s+n')^2}}} . \tag{152,28}$$

ამგვარად, ენერგიისათვის საბოლოოდ გვექნება

$$E = mc^2 \left\{ 1 + \frac{\alpha'^2}{(s+n')^2} \right\}^{-1/2} . \tag{152,29}$$

ეს არის სწორედ ნაზი სტრუქტურის ცნობილი ფორმულა, რომელიც ჯერ კიდევ კვანტური მექანიკის ჩამოყალიბებამდე ნაპოვნი იყო ზომერფელდის მიერ. ხელსაყრელია ამ ფორმულის სხვა სახითაც ჩაწერა. ამისათვის გამოვიყენოთ, რომ α' მცირე პარამეტრია და მოვახდინოთ ფესვის მწკრივად გაშლა ამ α'^2 პარამეტრის ხარისხების მიხედვით· დროებით $(s+n')$ აღვნიშნოთ n^*-ით. გვექნება

$$\begin{aligned} E &= mc^2 \left\{ 1 - \frac{\alpha'^2}{2n^{*2}} - \frac{1}{8}\frac{\alpha'^4}{n^{*4}} + \ldots + \right\} = \\ &= mc^2 - \frac{\alpha'^2 mc^2}{2n^{*2}} - \frac{\alpha'^4 mc^2}{8n^{*4}} - + \end{aligned} \tag{152,30}$$

რადგან $\alpha'=\frac{Ze^2}{\hbar c}$ და, მაშასადამე, $mc^2\alpha'^2=\frac{Z^2e^2}{a_0}$, სადაც a_0 ბორის პირველი ორბიტის რადიუსია, ამიტომ ენერგიისათვის შეიძლება დავწეროთ

$$E=mc^2-\frac{Z^2e^2}{2a_0n^{*2}}-\frac{Z^2e^2}{8a_0}\frac{\alpha_0^2}{n^{*4}}+\dots \qquad (152,31)$$

მეორე მხრივ, (152,19) ფორმულის თანახმად,

$$n^{*2}=(n'+s)^2=k^2-\alpha'^2+2n'\sqrt{k^2+\alpha'^2}+n' \qquad (152,32)$$

ან, თუ შემოვიღებთ სრულ კვანტურ რიცხვს

$$n=n'+|k| \qquad (152,33)$$

და გამოვიყენებთ, რომ $\left(\frac{\alpha'}{k}\right)^2\ll 1$, გვექნება

$$n^{*2}=n^2+2(n-|k|)(\sqrt{k^2-\alpha'^2}-|k|)=n^2\left\{1-\frac{\alpha'^2(n-|k|)}{n^2|k|}\right\}. \qquad (152,34)$$

საიდანაც

$$\frac{1}{n^{*2}}=\frac{1}{n^2}\left\{1+\frac{\alpha'^2(n-|k|)}{n^2|k|}\right\}. \qquad (152,34')$$

ასეთივე სიზუსტით

$$\frac{1}{n^{*4}}=\frac{1}{n^4}\left\{1+\frac{2\alpha'^2(n-|k|)}{n^2|k|}\right\}. \qquad (152,35)$$

შევიტანოთ ეს გამოსახულებები (152,31) ფორმულაში და შევინარჩუნოთ α'-ის კვადრატული წევრები; მარტივი გარდაქმნების შემდეგ მივიღებთ

$$E=mc^2-\frac{Z^2e^4m}{2n^2\hbar^2}-\frac{Z^2e^4m}{2n^2\hbar^2}\left(\frac{\alpha_0^2}{4n}\right)\left\{\frac{4}{|k|}-\frac{3}{n}\right\}. \qquad (152,36)$$

რადგან $|k|=j+{}^1/_2$, ეს უკანასკნელი ფორმულა ასე შეგვიძლია გადავწეროთ:

$$E_{nj}=mc^2-\frac{Z^2e^4m}{2n^2\hbar^2}\left\{1+\left(\frac{Z\alpha_0}{n}\right)^2\left[\frac{n}{j+{}^1/_2}-\frac{3}{4}\right]\right\}. \qquad (152,37)$$

ამ ფორმულაში პირველი წევრი ელექტრონის უძრაობის ენერგიაა; იგი მუდმივი სიდიდეა და ამიტომ ენერგეტიული დონეების გამოთვლისას შეგვიძლია მხედველობაში არ მივიღოთ. მეორე წევრი შეესაბამება წყალბადისებური ატომების იმ ენერგიას, რომელიც მივიღეთ შრედინგერის არარელატივისტურ თეორიაში. მესამე წევრი წარმოადგენს ენერგიის შესწორებას და იგი დამოკიდებულია როგორც მთავარ n კვანტურ რიცხვზე, ისე სრული მომენტის j კვანტურ რიცხვზედაც. რადგან α_0 მცირეა, ამიტომ ეს შესწორება მცირე სიდიდეს წარმოადგენს.

როგორც ვხედავთ, შრედინგერის თეორიისაგან განსხვავებით, ენერგია გარდა n კვანტური რიცხვისა, ფუნქციაა j-სიც. ამით მივიღეთ დონეთა მულტიპლეტური, ანდა სპექტრის ნაზი სტრუქტურა. მთავარი კვანტური რიცხვის როლს ასრულებს სიდიდე

$$n=n'+|k|=n'+j+{}^1/_2=\begin{cases}n'+l+1, & \text{როცა } j=l+{}^1/_2\\ n'+l, & \text{როცა } j=l-{}^1/_2\end{cases}, \qquad (152,38)$$

შევნიშნოთ, რომ დონეები დამოკიდებულია j-ზე და არა l-ზე; ასე რომ, წყალბადისებური ატომებისათვის, მაგალითად, $p_{3/2}$ და $d_{3/2}$ დონე ერთმანეთს ემთხვევა.

განვიხილოთ $n=2$ შემთხვევა; შრედინგერის თეორიაში გვექნებოდა ერთი E_2 ენერგეტული დონე. რადგან $l=0$ და $l=1$, ამიტომ E_2 დონე, დირაკის თეორიის თანახმად, უნდა გაიხლიჩოს შემდეგ დონეებად:

$$l=0 \quad j={}^1/_2, \quad s_{1/2}, \tag{152,39}$$

$$l=1 \quad \begin{cases} j={}^1/_2, & p_{1/2}, \\ j={}^3/_2, & p_{3/2}. \end{cases}$$

როგორც აღვნიშნეთ, ამ სამი დონიდან $p_{1/2}$ და $s_{1/2}$ ერთმანეთს ემთხვევა, ასე რომ, გვექნება ორი დონე. ამ დონეთა ენერგიები მარტივად შეიძლება გამოვთვალოთ (152,37) ფორმულის დახმარებით.

ამგვარად, წყალბადის ატომის ნაზი სტრუქტურის ფორმულის დამახასიათებელი თავისებურება იმაში მდგომარეობს, რომ ყოველი დონე გარდა ნორმალურისა, ორჯერადად გადაგვარებულია.

წყალბადისებური ატომების ნაზი სტრუქტურის გამოთვლილი სიდიდეები საუკეთესოდ ემთხვევა ექსპერიმენტის მონაცემებს. გადაგვარებული დონეები ერთი და იგივე j-თი და სხვადასხვა l-ით ასევე კარგად ეთანხმება ექსპერიმენტულ მონაცემებს. გამონაკლისს წარმოადგენს ერთი შემთხვევა, სახელდობრ, $s_{1/2}$ და $p_{1/2}$ დონეების შემთხვევა. როგორც აღვნიშნეთ, ეს დონეები ერთმანეთს უნდა ემთხვეოდეს, რადგან მათთვის j ერთი და იგივეა. მაგრამ ლემბის მიერ ნაჩვენები იქნა, რომ ადგილი აქვს ამ დონეების წანაცვლებას[1]. $2s_{1/2}$ თერმი უფრო მაღლა ძევს, ვიდრე $2p_{1/2}$. ამ მოვლენის ახსნა მოითხოვს ვაკუუმური ფლუქტუაციების გათვალისწინებას. თეორიული გამოთვლებით მიღებულ იქნა, რომ „ლემბის წანაცვლება“ კარგად ახსნება ვაკუუმის პოლარიზაციის გათვალისწინებით. საქმე იმაშია, რომ ვაკუუმის პოლარიზაციის გამო ადგილი აქვს წყალბადისებური ატომის კულონური ველის დამახინჯებას, რაც იწვევს წყალბადისებური ატომის ძირითადი ენერგეტული დონის წანაცვლებას. გამოთვლები ექსპერიმენტულ მონაცემებს ბრწყინვალედ ემთხვევა. ეს უკანასკნელი ამტკიცებს, რომ ვაკუუმურ ფლუქტუაციებს, მართლაც, რეალურად ადგილი აქვს ბუნებაში. აღნიშნული საკითხები გამოდიან ჩვენი კურსის ფარგლებიდან და ამიტომ მათ მკაცრ თეორიას არ შევეხებით.

§ 153. ბორნის რელატივისტური მიახლოება

ნაწილაკთა გაფანტვის ამოცანა რელატივისტურ მექანიკაში ზუსტად ისევე ისმის და გადაიჭრება, როგორც არარელატივისტურ კვანტურ მექანიკაში. ჩვენ არ განვიხილავთ გაფანტვის ზოგად რელატივისტურ თეორიას და დავკმაყოფილდებით ბორნის რელატივისტური ფორმულის გამოყვანით. როგორც ვიცით ბორნის მიახლოებაში პოტენციალური ენერგია განიხილება როგორც შეშფოთება და როგორც დაცემული ისე გაფანტული ტალღებისათვის შეიძლება ვისარგებლოთ ბრტყელი ტალღის მიახლოებით. ბორნის მიახლოებაში დრეკადი გაფანტვის დიფერენციალური განივკვეთისათვის გვაქვს ფორმულა

$$\sigma(\theta)\, d\Omega = \left(\frac{4\pi^2\mu}{h^2}\right)^2 \left| \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_k^* V(r)\, \psi_k\, dr \right|^2 d\Omega, \tag{153,1}$$

[1] W. Lamb, R. Retherford, Phys. Rev., 72, 241, (1947)

სადაც μ ელექტრონის მოძრაობის მასაა, $V(r)$-ურთიერთქმედების ენერგია, ψ_k და $\psi_{k'}$—თავისუფალი ნაწილაკის ტალღური ფუნქციები საწყის და საბოლოო მდგომარეობაში, k და k' ტალღური ვექტორებით. ამ ფუნქციების ნორმირება შერჩეულია პირობით

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_{k'}^{*}(r)\,\psi_k(r)\,dr = \delta(k-k'), \tag{153,2}$$

ე. ი.

$$\psi_k(r) = U(k)\frac{e^{ikr}}{(2\pi)^{3/2}}, \qquad \psi_{k'}^{*}(r) = U^{+}(k')\frac{e^{-ik'r}}{(2\pi)^{3/2}} \tag{153,3}$$

$U(k)$ ბისპინორია, რომელიც ერთი სვეტით არის განსაზღვრული, $U^{+}(k)$ კი ერთსტრიქონიანი ბისპინორია. მათი ცხადი სახე განსაზღვრულია (150,15) ფორმულებით. (153,3) ტალღური ფუნქციების შეტანით (153,1) განივკვეთის ფორმულაში მივიღებთ

$$\sigma(\theta)\,d\Omega = \frac{\mu^2}{4\pi^2\hbar^4}\,|(U_{k'}^{*}U_k)|^2\left|\int_{-\infty}^{+\infty} e^{iqr}\,V(r)\,dr\right|^2 d\Omega, \tag{153,4}$$

სადაც

$$q = k' - k \tag{153,5}$$

დაჯახების ვექტორია. რადგან დაჯახება დრეკადია, ამიტომ $k = k'$ და $q = 2k\sin\frac{\theta}{2}$.

ქვემოთ ჩვენ ვიგულისხმებთ, რომ ურთიერთქმედების პოტენციალური ენერგია სპინურ ოპერატორებზე დამოკიდებული არ არის.

იმასთან დაკავშირებით, რომ ელექტრონს აქვს სპინი, რომელიც ხასიათდება ორი პროექციით $m_s = \pm 1/2$ და ექსპერიმენტზე დაცემული ნაწილაკის სპინის მნიშვნელობა დაფიქსირებული არაა, ამიტომ საჭიროა (153,4) განიკვეთი გაეაშუალოთ ელექტრონის საწყისი სპინის მიმართულებებით, ე. ი. მივიღოთ

$$\frac{1}{2s+1}\sum_{m_s=-1/2}^{+1/2} |(U_{k'}^{*}\,U_k)|^2. \tag{153,6}$$

როცა საბოლოო მდგომარეობაში ელექტრონის სპინის პროექციების განსაზღვრული მნიშვნელობები არ გვაინტერესებს, მაშინ ცხადია, საჭიროა განიკვეთის აჯამვა სპინის პროექციებით საბოლოო მდგომარეობაში. ამგვარად, სპინების მახედვით გასაშუალოებული განიკვეთისათვის საბოლოოდ მივიღებთ

$$\sigma(\theta)\,d\Omega = \frac{\mu^2}{4\pi^2\hbar^4}\left\{\frac{1}{2}\sum_{m_s'=-1/2}^{+1/2}\sum_{m_s=-1/2}^{+1/2} |(U_{k'}^{*}\,U_k)|^2 \cdot \left|\int_{-\infty}^{+\infty} e^{iqr}\,V(r)\,dr\right|^2\right\} d\Omega. \tag{153,7}$$

აქ იგულისხმება, რომ U^{+} და U ბისპინორებისათვის აიღება ენერგიის დადებითი მნიშვნელობა. თუ (153,7)-ს შევადარებთ არარელატივისტურ ბორნის ფორმულას,

მაშინ დავინახავთ, რომ რელატივისტური გაფანტვის ფორმულა შეიცავს დამატებით მამრავლს, რომელიც უდრის

$$F=\frac{1}{2}\sum_{m_s'}\sum_{m_s}|(U_{k'}^{*}U_k)|^2=\frac{1}{2}\{|(U_{k'}^{*}|U_{k1})|^2+|(U_{k'}^{*}|U_{k\bar{1}})|^2+$$
$$+|(U_{k'}^{*}|U_{\bar{k}1})|^2+|(U_{k'}^{*}|U_{\bar{k}\bar{1}})|^2\} \qquad (153,8)$$

სიმეტრიის თვალსაზრისით ცხადია, რომ პირველი და ბოლო წევრი, ასევე შუა ორი წევრი, ერთმანეთის ტოლია. ასე რომ,

$$F=|(U_{k'}^{*}|U_{k1})|^2+|(U_{k'}^{*}|U_{\bar{k}1})|^2. \qquad (153,9)$$

ამასთან, აღსანიშნავია, რომ სპინის მიმართულების საკითხი ისე უნდა გავიგოთ, როგორც ეს აღნიშნული გვქონდა § 150-ში. ზოგადობის დაურღვევლად ვიგულისხმოთ, რომ საწყის მომენტში ნაწილაკი z-ღერძის გასწვრივ მოძრაობს.

სპინორებს, რომლებიც (153,9) გამოსახულებაში მონაწილეობენ, აქვთ შემდეგი სახე:

$$U_{k1}=\left(\frac{ac}{2|E|}\right)^{1/2}\begin{bmatrix}1\\0\\p_z/a\\p_+/a\end{bmatrix},\quad U_{\bar{k}1}=\left(\frac{ac}{2|E|}\right)^{1/2}\begin{bmatrix}0\\1\\p_-/a\\-p_z/a\end{bmatrix}, \qquad (153,10)$$

სადაც $a=\frac{|E|}{c}+mc$, ხოლო $p_{\pm}=p_x\pm ip_y$; ამასთან, $\mathrm{p}=\hbar k$ ნაწილაკის იმპულსია.

ეს სპინორები შევიტანოთ (153,9) გამოსახულებაში. გვექნება

$$F=\left(\frac{ac}{2|E|}\right)^2\left\{\left|\begin{pmatrix}10\frac{p_z'}{a} & \frac{p_-'}{a}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1\\0\\p_z/a\\0\end{pmatrix}\right|^2+\right.$$
$$\left.+\left|\begin{pmatrix}10\frac{p_z'}{a} & \frac{p_-'}{a}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0\\1\\0\\-p_z/a\end{pmatrix}\right|^2\right\} \qquad (153,11)$$

სპინორთა გადაწრაელების შემდეგ მივიღებთ:

$$F=\left(\frac{ac}{2|E|}\right)^2\left\{\left(1+\frac{p_zp_z'}{a^2}\right)^2+\frac{p_z^2}{a^4}\left(p_x'^2+p_y'^2\right)\right\}. \qquad (153,12)$$

გავითვალისწინოთ, რომ დრეკადი გაფანტვის დროს $\mathrm{p}'^2=\mathrm{p}^2$. თუ ასევე მხედველობაში მივიღებთ, რომ $p_z'=p\cos\theta$, ხოლო $p_z=p$, მაშინ

$$F=\left(\frac{ac}{2|E|}\right)^2\left\{\left(1+\frac{p^2}{a^2}\right)^2-\frac{2p^2}{a^2}(1-\cos\theta)\right\}, \qquad (153,13)$$

საიდანაც

$$F=1-\frac{4p^2a^2}{(a^2+p^2)^2}\sin^2\frac{\theta}{2}. \qquad (153,14)$$

მეორე მხრივ, $a^2+p^2=2Ea$, ამიტომ საბოლოოდ გვექნება

$$\frac{1}{2}\sum_{m_s}\sum_{m_s'}|(U_{k'}^{*}U_k)|^2=1-\frac{v^2}{c^2}\sin^2\frac{\theta}{2}, \qquad (153,15)$$

ხოლო გაფანტვის დიფერენციალური განივკვეთისათვის (153,7) ფორმულა მოგვცემს

$$\sigma(\theta)\,d\Omega=\frac{\mu^2}{4\pi^2\hbar^4}\left(1-\frac{v^2}{c^2}\sin^2\frac{\theta}{2}\right)\left|\int\limits_{-\infty}^{+\infty}e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}}V(\mathbf{r})\,d\mathbf{r}\right|^2 d\Omega \qquad (153{,}16)$$

ჩვენ ვხედავთ, რომ ბორნის რელატივისტური ფორმულა არარელატივისტური ფორმულისაგან განსხვავდება $\left(1-v^2/c^2\sin^2\frac{\theta}{2}\right)$ მამრავლით. ამასთან, რა თქმა უნდა (153,16) ფორმულაში მასა განისაზღვრება რელატივისტური დამოკიდებულებით $\mu=m\,(1-v^2/c^2)^{-1/2}$.

რეზერფორდის ფორმულა. ამის შემდეგ პირდაპირ შეიძლება დაიწეროს გაფანტვის დიფერენციალური განივკვეთის ფორმულა დამუხტული ნახევარსპინიანი ნაწილაკების გაფანტვისა $\frac{Ze^2}{r}$ კულონური ველით. ამ ფორმულას (129,7)-ის თანახმად ექნება სახე ($Z_1=1,\ Z_2\equiv Z$)

$$\sigma(\theta)d\Omega=\left(\frac{Ze^2}{2\mu v^2}\right)^2\frac{1-\frac{v^2}{c^2}\sin^2\frac{\theta}{2}}{\sin^4\frac{\theta}{2}}\,d\Omega. \qquad (153{,}17)$$

ეს ფორმულა ძალიან მცირე კუთხეებისათვის მოგვცემს

$$\sigma(\theta)d\Omega=\left(\frac{Ze^2}{2\mu v^2}\right)^2\frac{d\Omega}{\sin^4\frac{\theta}{2}}. \qquad (153{,}18)$$

თუ შემოვიღებთ რელატივისტურ იმპულსს

$$\mathbf{p}=\frac{m\mathbf{v}}{\sqrt{1-\beta^2}},\quad (\beta=v/c) \qquad (153{,}19)$$

მაშინ (153,18) ფორმულა ასე გადაიწერება:

$$\sigma(\theta)d\Omega=\left(\frac{Ze^2}{2pv}\right)^2\frac{d\Omega}{\sin^4\frac{\theta}{2}}, \qquad (153{,}20)$$

ასეთი ჩაწერიდან ჩანს, რომ მცირე კუთხეებზე μv^2-ის ნაცვლად pv სიდიდის შემოტანით რელატივისტური შესწორება რეზერფორდის ფორმულას სახეს არ უცვლის. pv სიდიდეს ენერგიის განზომილება აქვს. იგი მცირე სიჩქარეების დროს გაორკეცებული კინეტიკური ენერგიის ტოლია, დიდი სიჩქარეებისათვის კი—კინეტიკურ ენერგიას ემთხვევა.

საგანთა საძიებელი

ადიაბატური მიახლოება 427
აინშტაინის
— ფორმულები სინათლის კვანტისათვის 8
— ფოტოეფექტისათვის 316.
— ენერგიის ფორმულა 466
აინშტაინისა და დე ჰაასის ცდა 327
აპიპილაცია 521, 522
ატომის
— სიცოცხლის ხანგრძლივობა 309, 310
ატომი წყალბადისებური 214

ბალმერის სერია 222
ბესელის უტოლობა 51
— განზოგადებული განტოლება 180, 213 229
— ფუნქცია 180
— სფერული ფუნქცია 180, 182, 213, 229, 356, 443, 456
ბისპინორი 472, 486, 490, 504, 526, 527, 528, 529, 540
ბორის
— მაგნიტონი 224, 327, 300, 336, 352, 420, 511
— შესაბამისობის პრინციპი 203
— დამატებითობის პრინციპი 130
— პირველი ორბიტის რადიუსი 218, 255, 275, 299, 317, 399, 421, 538
— სიხშირე, 222, 260, 350
ბოლცმანის მუდმივი 352
ბოზეს ნაწილაკები 370, 371, 372, 376, 378,
ბორნის მიახლოება 460, 461, 462, 463, 464 539
— პარამეტრი 463, 464
ბრა-ვექტორი — 38, 55, 56, 57, 58, 70, 454,
ბრილუენის ფუნქცია 353, 420
ბრტყელი ტალღა 12, 17, 21, 525

ბაფანტეის
— ამპლიტუდა 441, 442, 458, 459, 460
— დიფერენციალური ეფექტური განივკვეთი 438, 441, 461, 539, 542
— ინტეგრალური განივკვეთი 319, 441, 445, 447, 464
— მატრიცა 457, 458
ბადაგვარება 41, 104, 178, 202, 209, 240, 250, 338
— გაცვლითი 387
გაუსის განაწილება 200
გასაზომ სიდიდეთა სრული კრებული 129, 130, 174, 175, 221
გარდატეხის მაჩვენებელი 320
გეომეტრიული ოპტიკის მიახლოება 13, 14, 17
გეირაბის ეფექტი 191, 289
გირომაგნიტური ფარდობა 224
— — სპინური 327
— — ორბიტალური 327
გრინის ფუნქცია 36, 448, 449, 450, 451, 452, 453, 454, 455, 457.

დალამბერის განტოლება 12, 112
დე ბროილის ტალღის სიგრძე 8, 16, 25
დენის ვექტორი 27, 32, 177, 441, 467, 476, 477, 478, 480, 482, 486, 529, 530
დეტრონი 234
დიამაგნეტიზმი 351, 354, 355, 421
დიპოლმომენტი 296, 297, 306, 307, 320, 321, 322, 324
დიპოლური გადასვლა 306, 307
დიპოლური გამოსხივება 345
დირაკის
— დელტა ფუნქცია 43, 44, 263, 266, 271
— მატრიცები 468, 471, 495, 496, 497, 498, 499
— განტოლება 472, 473, 475, 481, 490, 503, 508, 525
— პირობები 469, 470, 474, 478, 491
— შემფოთების თეორია 241
— წარმოდგენა 471, 492, 524
დისპერსია 320, 323
— უარყოფითი 323

ეიკონალის განტოლება 14, 15, 17
ერენფესტის განტოლებები 137, 138, 516, 517, 519.

ვან დერ ვაალსის ძალები 433
ვალენტობა 417, 418
ვარიაციული მეთოდი 272
— შრედინგერის 272
— რიტცის 272, 276
ვირიალის თეორემა 138, 399

ზეემანის ეფექტი 251, 344, 420
— მარტივი (ნორმალური) 345, 350, 420
— რთული (ანომალური) 338, 345, 350
ზომერფელდის
— ნაზი სტრუქტურის მუდმივი 303, 328, 337, 422. 535

თავისუფალი ნაწილაკი 21
— — განსაზღვრული იმპულსით 174. 175
— — განსაზღვრული მომენტით 175. 178
თომას ფერმის მოდელი 384, 396, 398, 399, 400, 415
თერმი 404, 406, 407, 408, 409, 410
თეთრშეთანხმებული ველის მეთოდი 367, 368, 378, 393, 395

იგიური ნაწილაკები 357, 366, 447

კატ-ვექტორი — 38, 55, 56, 57, 58, 70, 73, 454
კვანტური
— ვექტორები 105, 155, 157, 225
— მდგომარეობათა რიცხვი 188, 189, 190
კვანტური რიცხვი
— მთავარი 217, 220, 239, 326
— აზიმუტალური 102, 161, 210, 220, 326
— რადიალური 217, 326
— მაგნიტური 101, 104, 105, 160, 161, 220, 333
— როტაციული 423, 434, 435, 436
— ვიბრაციული 423
— სპინური 328
კვადრუპოლური მომენტი — 296, 297, 299, 309, 365
კვადრუპოლური მომენტის ტენზორი — 296, 297, 299, 309
კვაზიკლასიკური (WKB) მიახლოვება 280, 284
კვანტური მექანიკის ძირითადი პრეთეზა 90, 92, 95, 108, 137, 224, 357, 358
კიურის კანონი 354
კლაინ-გორდონის განტოლება 466, 467, 468, 474
კლებშ-ჟორდანის კოეფიციენტი 155, 165, 166, 169, 169, 379
კომპტონის
— ეფექტი 271, 272
— ტალღის სიგრძე 126, 422, 466
კრონეკერ-ვეიერშტრასის სიმბოლო 43, 44, 48, 67

ლაგერის პოლინომი 219
— განზოგადებული პოლინომი 219
ლაგრანჟის ფუნქცია 10
— განტოლება 10
ლაგრანჟ-მოპერტუის პრინციპი 11, 15
ლანდეს მამრავლი 347. 348, 420
ლანეეენის ფუნქცია 353, 354
ლარმორის სიხშირე 342, 345, 420
ლეჟანდრის ოპერატორი 100, 208, 236
— პოლინომი 102, 182, 445
— მაკავშირებელი პოლინომი 102
ლორენცის გარდაქმნები 466, 482, 485, 486.
ლორენც-ინვარიანტობა 480, 482
ლენრბა 152, 153, 154, 364, 365
ლენრბის შენახვა 152, 153, 154

მაგნიტური მომენტი
— — ნუკლონისებური ატომის 223
— — ელექტრონის (ორბიტალური) 341, 511
— — ელექტრონის (სპინური) 341
— — პროტონის 511
— — ნეიტრონის 511
მაგნიტური დიპოლური მომენტი 296, 255, 300, 306, 308
მაიორანას წარმოდგენა 492, 520, 524.
მატრიცა 65, 66
— დიაგონალური 66, 67
— ერთეულოვანი 67
— ერმიტულად შეუღლებული 67, 68
— ერმიტული 67, 71
— ენერგეტულ წარმოდგენაში 68, 81, 82, 83
— კომპლექსურად შეუღლებული 67,
— საკუთარ წარმოდგენაში 68
— სიმკვრივის 116, 130, 131, 133, 134, 135
— ტრანსპონირებული 67
— უნიტარული 72, 74, 78
— უნყვეტი 73, 134
— შებრუნებული 71
მატრიცის შპური (კვალი) 66, 73, 74
მობრუნების წერტილები 282, 283, 287
მოტტის ფორმულა 464
მენდელეევის პერიოდული სისტემა 384, 412
მულტიპლეტური სტრუქტურა 336, 338, 404

ნარევი (მდგომარეობა) 130, 131, 132, 133

ოპერატორები 35, 65
— წრფივი 35, 36, 41, 54
— შებრუნებული 36
— შეუღლებული 38
— ერმიტული 38, 39, 54
— კომუტატური 40, 53
ოსცილატორი 194
— განსაზღვრული მომენტით 238
— წრფივი ჰარმონიული 194, 251
— წრფივი ანჰარმონიული 251
— სიერციით ანიზოტროპული 201
— მატრიცული სახით 203
ნაზი სტრუქტურა სპექტრისა 339
ოსცილატორის ძალა 323

პარამაგნიტიზმი 351, 352, 354, 355, 420, 421
პაულის
— მატრიცები 162, 329, 366, 379, 469, 470, 478, 494, 496
— განტოლება 329, 330, 334, 465, 466, 488, 511
— პრინციპი 371, 372, 376, 397, 405, 407, 414
პაწენ-ბაკის ეფექტი 350
პლანკის
— ჰიპოთეზა 197
— მუდმივი 7
პოლარიზაცია 112, 304, 307, 308, 319, 345
— გამოსხივებული სინათლის 314, 315
— გარემოსი 320, 322
პრეცესია 342
პუასონის
— განტოლება 36
— კლასიკური ფრჩხილები 59, 60
— კვანტური ფრჩხილები 60, 63, 92, 97, 493

რამანის ეფექტი 324
რეზერფორდის ფორმულა 463, 542
რიდბერგის
— მუდმივი 222
— ენერგიის ერთეული 422
როტატორი
— ბრტყელი 237
— მყარი 235, 236

საველენტო ელექტრონის მოდელი 225, 226
საუკუნოებრივი განტოლება 250, 256
სიდიდის საშუალო მნიშვნელობა 116, 117, 135
— ოპერატორული სახით
— მატრიცული სახით 119
სუპერპოზიციის პრინციპი 33, 42, 90, 131
სპინი 155, 327, 335, 465, 468, 506, 507, 508
— ელექტრონისა 326
სპინორი 330, 473, 490, 491, 509, 511
სპინ-სპინ ურთიერთქმედება 384, 411, 412
სპინ-ორბიტალური ურთიერთქმედება 335, 336, 339, 342, 350, 351, 378, 384, 403, 411, 412, 512, 513, 514
სუფთა მდგომარეობა 131, 132, 133

ტალღის
— ფაზა 11
— პაკეტი 22, 24, 25
ტალღური ფუნქცია 21, 25, 26
ტალღური ფუნქციის კვანძი 188, 200
ტალღის განტოლება 12, 17
ტრანსურანული ელემენტები 418

უწყვეტობის განტოლება 27, 28, 331, 358, 467

ფერმას პრინციპი 14, 15
ფერმის
— ნაწილაკები 370, 371, 372, 373, 376, 378, 381, 382
ფოტოეფექტი 316, 317
ფურიე
— გაშლა 52, 80
— ინტეგრალი 52, 58, 121, 183, 267
— კოეფიციენტი 52, 78, 80, 95, 118, 122
— კომპონენტი 52, 95, 122, 183, 267, 268
— მეთოდი 31, 110, 178, 201, 360, 361

ქმედების ფუნქცია 10

შემოკლებული ქმედება 11
შერჩევის წესები 339
— წყალბადისებური ატომებისათვის 310
— დიპოლური გადასვლებისათვის 310, 349.
— კვადრუპოლური გადასვლებისათვის 312
— მაგნიტური დიპოლური გადასვლებისათვის 313
— რთული ატომებისათვის 410
შეშფოთების თეორია 241
— მარტივი სპექტრისათვის 241
— გადაგვარებული სპექტრისათვის 247, 248, 254, 255.
— დროზე დამოკიდებული 258
შვარც-ბუნიაკოვსკის უტოლობა 37, 124
შრედინგერის განტოლება 17
— — არასტაციონარული მდგომარეობებისათვის 19, 20
— — დირაკის აბსტრაქტული ვექტორი სივრცეში 59
— — ნაწილაკთა სისტემისათვის 357
— — სტაციონარული მდგომარეობებისათვის 18, 19, 32, 89, 128, 171
— — რადიალური ეენქციებისათვის 179, 209
— — ელექტრომაგნიტური ველისათვის 114
— — დროითი 20, 80, 106, 171
— — იმპულსურ წარმოდგენაში 122
— — მატრიცული სახით 80
შრედინგერის წარმოდგენა 84, 85
შრედინგერის განტოლების ინვარიანტულობა 140
— — — გალილეის გარდაქმნის მიმართ 141
— — — მომაელის წარსულის შეცვლის მიმართ 141
— — — გრადიენტული გარდაქმნის მიმართ 142
— — — კანონიკური გარდაქმნების მიმართ 143
შტარკის ეფექტი 251, 254, 255

ჩებიშევ-ერმიტის
— განტოლება 197, 198
— პოლინომი 197, 198

ჯამთა წესი 323, 324
ჯგუფური სიჩქარე 22, 24

ჰამილტონის
— უმცირესი ქმედების პრინციპი 10
— კლასიკური განტოლებები 138
— კვანტური განტოლებები 138
— ოპერატორი 19, 106
ჰამილტონ-იაკობის განტოლება 10, 11, 15, 17, 19, 20, 21, 280, 281.
ჰანკელის სფერული ფუნქცია 456
ჰარტრი-ფოკის მეთოდი — 384, 391, 395, 396
ჰარტრის ატომური ერთეულები — 421
ჰაიზენბერგის
— განუზღვრელობის თანაფარდობა 7, 29 31, 116, 123, 124, 127.
— დაკვანტვის პირობა 83, 325.
— წარმოდგენა 84, 85
ჰაიტლერ-ლონდონის მეთოდი 426, 432
ჰუნდის წესი 404, 405, 406, 407, 408, 409
ჰუნდ-მილიკენის მეთოდი 426.

ს ა რ ჩ ე ვ ი

მეორე გამოცემის წინასიტყვაობა 3
პირველი გამოცემის წინასიტყვაობა 4

შ ე ს ა ვ ა ლ ი 5

ერთი ნაწილაკის კვანტური მექანიკა

თ ა ვ ი I კვანტური მექანიკის მოძრაობის განტოლება

§ 1. ანალოგია კლასიკურ მექანიკასა და გეომეტრიულ ოპტიკას შორის 9
§ 2. შრედინგერის სტაციონარული მდგომარეობების განტოლება 17
§ 3. შრედინგერის არასტაციონარული მდგომარეობების განტოლება 19
§ 4. ტალღური ფუნქციის ფიზიკური შინაარსი 21
§ 5. დენის ვექტორი. უწყვეტობის განტოლება 27
§ 6. კვანტური მექანიკის სტატისტიკური ხასიათი 29
§ 7. სტაციონარული მდგომარეობა 31
§ 8. სუპერპოზიციის პრინციპი 33

თ ა ვ ი II. ოპერატორული აღრიცხვა

§ 9. ოპერატორთა თვისებები 36
§ 10. ოპერატორთა საკუთარი ფუნქციები და საკუთარი მნიშვნელობები 41
§ 11. კრონეკერ-ვეიერშტრასის სიმბოლო და დირაკის ფუნქცია 43
§ 12. საკუთარი ფუნქციების ორთო-ნორმირება 47
§ 13. ნებისმიერი ფუნქციის გაშლა საკუთარი ფუნქციების მიხედვით 50
§ 14. კომუტატურ ოპერატორთა თვისებები 53
§ 15. ბრა- და კეტ- ვექტორების თვისებები 55
§ 16. პუასონის ფრჩხილები 59

თ ა ვ ი III. მატრიცული აღრიცხვის ელემენტები

§ 17. ოპერატორის სახე სხვადასხვა წარმოდგენაში 64
§ 18. მატრიცათა ზოგადი თვისებები 66
§ 19. მოქმედებანი მატრიცებზე 69
§ 20. უნიტარული მატრიცები 72
§ 21. დროზე დამოკიდებული უნიტარული გარდაქმნები 74
§ 22. საკუთარი მნიშვნელობებისა და საკუთარი ფუნქციების მოძებნის მატრიცული მეთოდი 76
§ 23. კავშირი მატრიცის ორ სხვადასხვა წარმოდგენას შორის 77
§ 24. ერმიტული მატრიცის დაყვანა დიაგონალურ სახეზე 78
§ 25. შრედინგერის განტოლება მატრიცული სახით 80
§ 26. მატრიცების გაწარმოება დროით, მატრიცა ენერგეტიკულ წარმოდგენაში 81
§ 27. შრედინგერისა და ჰაიზენბერგის წარმოდგენები 84

თ ა ვ ი IV. ფიზიკურ სიდიდეთა ოპერატორებით წარმოდგენა

§ 28. კვანტური მექანიკის ძირითადი ჰიპოთეზა 89
§ 29. იმპულსის ოპერატორი 92
§ 30. ნებისმიერი ფუნქციის გაშლა იმპულსის ოპერატორის საკუთარი ფუნქციების მიხედვით 94

§ 31. იმპულსის მომენტის ოპერატორი 95
§ 32. მომენტის ოპერატორი სფერულ კოორდინატებში 98
§ 33. მომენტის მდგენელისა და კვადრატის საკუთარი ფუნქციები და საკუთარი მნიშვნელობები 100
§ 34. სრული ენერგიის ოპერატორი. ჰამილტონიანი 106
§ 35. შრედინგერის განტოლება ფარდობითი მოძრაობისათვის 108
§ 36. შრედინგერის განტოლება ელექტრომაგნიტურ ველში მოძრავი ნაწილაკისათვის 111

თ ა ე ი V. მდგომარეობის კვანტური აღწერა

§ 37. ფიზიკური სიდიდის საშუალო მნიშვნელობა 116
§ 38. ერთი წარმოდგენის ფუნქციიდან მეორეზე გადასვლა 119
§ 39. ჰაიზენბერგის განუზღვრელობის თანაფარდობა 123
§ 40. მდგომარეობის კვანტური აღწერა 127
§ 41. სუფთა მდგომარეობა და ნარევი. სიმკვრივის მატრიცა 131
§ 42. მოძრაობის კვანტური განტოლებები 135
§ 43. ერენფესტის განტოლებები 137

თ ა ე ი VI. შრედინგერის განტოლების ინვარიანტობა და შენახვის კანონები

§ 44. შრედინგერის განტოლების ინვარიანტული თვისებები 140
§ 45. უსასრულოდ მცირე გარდაქმნის ოპერატორები 143
§ 46. შენახვის კანონები 148

თ ა ე ი VII. მომენტები

§ 47. მომენტი 155
§ 48. მომენტის საკუთარი მნიშვნელობები და მატრიცული ელემენტები 157
§ 49. მომენტთა შეკრების წესი 162
§ 50. ორი მომენტის ჯამის კვადრატისა და პროექციის საკუთარი ფუნქციები. კლებშ-ეორდანის კოეფიციენტები 165

თ ა ე ი VIII. შრედინგერის განტოლების ამოხსნა სხვადასხვა მარტივი ამოცანისათვის

§ 51. ზოგადი შენიშვნები 171
§ 52. კაშირი სხვადასხვა სიდიდეზე ნორმირებულ ტალღურ ფუნქციებს შორის 173
§ 53. თავისუფალი ნაწილაკი განსაზღვრული იმპულსით 174
§ 54. თავისუფალი ნაწილაკი განსაზღვრული მომენტით 178
§ 55. ბრტყელი ტალღის გაშლა სფერულ ფუნქციებად 182
§ 56. თავისუფალი ნაწილაკის ფუნქცია იმპულსურ წარმოდგენაში 183
§ 57. პოტენციალური ორმო 184
§ 58. კვანტურ მდგომარეობათა რიცხვი 188
§ 59. პოტენციალური ჭებირი 190
§ 60. ოსცილატორის ამოცანა 194
§ 61. სიერციი ოსცილატორი 201
§ 62. ოსცილატორის ამოცანა მატრიცული სახით 203

თ ა ე ი IX. მოძრაობა ცენტრალური სიმეტრიის ველში

§ 63. შრედინგერის რადიალური ფუნქციების განტოლება 207
§ 64. რადიალური ტალღური ფუნქციების ასიმპტოტური ყოფაქცევა 211
§ 65. წყალბადისებური ატომის პრობლემა 214
§ 66. წყალბადისებური ატომების მაგნიტური მომენტი 223
§ 67. საველენტო ელექტრონის მოდელი 225
§ 68. უსასრულო სიღრმის პოტენციალური ორმო 229
§ 69. სასრულ კედლებიანი პოტენციალური ორმო. დეიტრონი 231
§ 70. მყარი როტატორი 235
§ 71. ოსცილატორის ამოცანა განსაზღვრული მომენტით 238

ვი X. შრედინგერის განტოლების მიახლოებითი ამოხსნის მეთოდები

ყოთების თეორია მარტივი სპექტრისათვის . . 241
ყოთების თეორია გადაგვარებული სპექტრის შემთხვევაში 247
ივი ანჰარმონიული ოსცილატორი 251
ოის ეფექტი . 254
ზე დამოკიდებული შეშფოთების თეორია. გადასვლის ალბათობის ფორმულა 258
სვლის ალბათობის ფორმულა, როცა შეშფოთების ენერგია დროის პერიოდული ფუნქციაა 261
სვლის ალბათობის ფორმულა მეორე მიახლოებაში 268
ხაცეული მეთოდი 272
ცის ჭეთოდი . 276
ჟლასიკური მიახლოების მეთოდი 280
ნების კოეფიციენტი ნებისმიერი სახის ერთგანზომილებიანი ყუბირის შემთხვევაში. 284
ბლია თეორია 288

თავი XI. სინათლის ურთიერთქმედება ატომებთან

§ 84. ატომის ელექტრული და მაგნიტური მომენტები 295
§ 85. სინათლის გამოსხივება და შთანთქმა 300
§ 86. მულტიპოლური გამოსხივების ფორმულები 305
§ 87. შერჩევის წესები წყალბადისებური ატომებისათვის 310
§ 88. გამოსხივებული სინათლის პოლარიზაცია 314
§ 89. ფოტოეფექტი 316
§ 90. დისპერსიის კვანტური თეორია 320
§ 91. ჯამთა წესი 324

თავი XII. ელექტრონის სპინი და მასთან დაკავშირებული მოვლენები

§ 92. ელექტრონის სპინი . 326
§ 93. ელექტრონის სპინის ოპერატორი 328
§ 94. პაულის განტოლება 329
§ 95. სრული მექანიკური მომენტი 332
§ 96. სპინ-ორბიტალური ურთიერთქმედება და სპექტრის მულტიპლეტური სტრუქტურა 335
§ 97. ელექტრონის სრული მაგნიტური მომენტი 341
§ 98. პეემანის ეფექტი . 344
§ 99. ატომური ელექტრონიანი ატომების პარამაგნიტიზმი და დიამაგნიტიზმი . 351

ნაწილაკთა სისტემის კვანტური მექანიკა

თავი XIII. მრავალი ნაწილაკისაგან შედგენილი სისტემები

§ 100. შრედინგერის განტოლება ნაწილაკთა სისტემისათვის 357
§ 101. ნაწილაკთა სისტემის დამახასიათებელი ფიზიკური სიდიდეები 360
§ 102. იგივეური ნაწილაკთა სისტემა . . . 366
§ 103. სიმეტრიული და ანტისიმეტრიული ტალღური ფუნქციები 368
§ 104. ფერმისა და ბოზეს ნაწილაკები 370
§ 105. პაულის პრინციპი . 371
§ 106. სიმეტრიული და ანტისიმეტრიული ფუნქციების შედგენა 372
§ 107. ორაერთიერთმოქმედ ნახევარსპინიან ნაწილაკთა ტალღური ფუნქციები. ტალღური ფუნქციის სიმეტრიულობის დამოკიდებულება მომენტზე 378

თავი XIV. მრავალელექტრონიანი ატომები

§ 108. ჰელიუმის ატომი 384
§ 109. გაუცლითი ურთიერთქმედება 389
§ 110. რთული ატომის ენერგიის გამოთვლა პარტრისა და ფოკის მეთოდით 391

§ 111. თომას-ფერმის მეთოდი
§ 112. რთული ატომების ზოგადი დახასიათება
§ 113. მენდელეევის ელემენტთა პერიოდული სისტემა
§ 114. მაგნიტური მოვლენები რთულ ატომებში
§ 115. ატომური ერთეულები

თავი XV. ორატომიანი მოლეკულები

§ 116. ორატომიანი მოლეკულის კვანტური დონეები
§ 117. პეტეროპოლარული და ჰომეოპოლარული ბმები .
§ 118. წყალბადის მოლეკულა
§ 119. ორთო- და პარა-წყალბადი

თავი XVI. გაფანტვის კვანტური თეორია

§ 120. გაფანტვის ამოცანის დასმა კვანტურ მექანიკაში
§ 121. გაფანტვის განივკვეთი. გაფანტვის ფაზა .
§ 122. იგივეური ნაწილაკთა გაფანტვა
§ 123. გრინის ფუნქცია. გაფანტვის ინტეგრალური განტოლება
§ 124. სასაზღვრო პირობის გათვალისწინება ფორმალური მეთოდით
§ 125. ლიპმან-შვინგერის განტოლება . 454
§ 126. გაფანტვის რადიალური ფუნქციების ინტეგრალური განტოლება. ფაზის გამოხატვა სათელეო ფორმულით 455
§ 127. გაფანტვის $T(E)$-მატრიცა 457
§ 128. ბორნის მიახლოება 460
§ 129. რეზერფორდის ფორმულა 463

რელატივისტური კვანტური მექანიკა

თავი XVII. დირაკის განტოლება

§ 130. მეორე რიგის რელატივისტური განტოლება . 465
§ 131. დირაკის განტოლება თავისუფალი ელექტრონისათვის 468
§ 132. დირაკის განტოლება ველში მოძრავი ელექტრონისათვის 475
§ 133. ალბათობისა და ალბათობის დენის სიმკვრივე 476
§ 134. დირაკის განტოლება γ-მატრიცებში 477
§ 135. დირაკის განტოლების ინვარიანტობა . . 480
§ 136. დირაკის ტალღური ფუნქციის თვისებები. კოორდინატთა წრფივი ორთოგონალური გარდაქმნის დროს 483
§ 137. დირაკის მატრიცების სხვადასხვა წარმოდგენა 491
§ 138. დირაკის და პაულის მატრიცების ზოგადი თვისებები 493
§ 139. რელატივისტური ინვარიანტები 498

თავი XVIII. დირაკის განტოლების გამოყენებანი

§ 140. სტაციონალური მდგომარეობების განტოლება 503
§ 141. მოძრაობის განტოლება. შენახვის კანონები 504
§ 142. ელექტრონის სპინი . . . 506
§ 143. დირაკის განტოლების არარელატივისტური ზღვარი, მაგნიტური მომენტი პაულის განტოლება . . . 508
§ 144. სპინ-ორბიტალური ურთიერთქმედების ოპერატორი 512
§ 145. სიჩქარის ოპერატორები 515
§ 146. ერენფესტის განტოლებები 516
§ 147. ელექტრონის „კანკალი" 517
§ 148. პოზიტრონის თეორია 519
§ 149. ანტინაწილაკები. მეხტურად შეუღლების ოპერატორი და მეხტურად შეუღლებული ფუნქცია 522
§ 150. თავისუფალი ნაწილაკი ნახევრის ტოლი სპინით 525
§ 151. ელექტრონის მოძრაობა ცენტრალური სიმეტრიის ველში 530
§ 152. წყალბადისებური ატომის სპექტრის ნაზი სტრუქტურა 535
§ 153. ბორნის რელატივისტური მიახლოება 539
საგანთა საძიებელი 543

რედაქტორი გ. ჭილაშვილი
გამომცემლობის რედაქტორი ი. მჭედლიძე
ტექრედაქტორი ი. ხეციშვილი
კორექტორი ც. კვანტალიანი

გადაეცა წარმოებას 13/VII-77
ხელმოწერილია დასაბეჭდად 14/II-78
ქაღალდის ფორმატი 70×108¹/₁₆
ნაბეჭდი თაბახი 48,3
საღრიცხვო-საგამომცემლო თაბახი 35,37

სბ №63

შეკვეთა 1227 ფე 06523 ტირაჟი 3000

ფასი 2 მან. 02 კაპ.

თბილისის უნივერსიტეტის გამომცემლობა,
თბილისი, 380028, ი. ჭავჭავაძის პროსპექტი, 14.
Издательство Тбилисского университета,
Тбилиси, 380028, пр. И. Чавчавадзе, 14.

თბილისის უნივერსიტეტის სტამბა,
თბილისი, 380028, ი. ჭავჭავაძის პროსპექტი, 1.
Типография Тбилисского университета,
Тбилиси, 380028, пр. И. Чавчавадзе, 1.