

რ. ვ. ბერბენი

შესავალი ქვეანგურ მექანიკაში

ავტორის წინასიტყვაობა რუსულ გამოცემისთვის

ამ წიგნში, რომელსაც გამოსცემს აგრეთვე კემბრიჯის უნივერსიტეტის გამომცემლობა, მე ვცდილობდი ქვანტური მექანიკის პრინციპები გადმომეცა ისეთი ფორმით, როგორც გასაგები იქნებოდა ექსპერიმენტატორთათვის და ამეხსნა ისინი გრაფიკულ მეთოდების დახმარებით. მე დიდად მოხარული ვარ, რომ ჩემი წიგნი ითარგმნა და გამოიცემა იმ ქვეყანაში, სადაც ასე მძლავრად წახალისდებიან სამეცნიერო კვლევანი, და იზედი მაქვს, რომ ვსტგ. მიერ გამოცემულ სხვა წიგნებთან ერთად, ის შეასრულებს თავის როლს; რომ დააკმაყოფილოს მეცნიერულ შემეცნებათა ის წყურვილი, რომელსაც მე, ს. ს. რ. კ.-ში ჩემი პირველი ჩამოსვლის დროს ყველგან ვხვდებოდი.

რ. ვ. ბერნი

ბრისტოლის უნივერსიტეტი
ინგლისი

რედაქტორის წინასიტყვაობა

მეოცე საუკუნის დასაწყისში, როდესაც ფიზიკოსების მთელი ყურადღება მიიმართა ატომის აღნაგობის საკითხებზე, აღმოჩნდა, რომ ფიზიკაში არსებული კანონები არ გამოდგებიან ატომურ მოვლენების ასახსნელად. დაახლოებით 1925 წლამდე დაგროვდა დიდი მასალა ატომურ მოვლენებიდან, რომელიც მიუთითებდა ამ უთანხმოებაზე ცდების მონაცემებისა და თეორიის შორის. ამასთან დაკავშირებით საჭირო გახდა თეორიულ ფიზიკის თვით ძირითადი დებულებათა ძირფესვიანად გადასინჯვა. ამ გარემოებას მოჰყვა ახალი ფიზიკის შექმნა, რომელსაც ტალღურ ანუ ქვანტურ ფიზიკას უწოდებენ.

ქვანტური ფიზიკა წარმოადგენს ძველი, კლასიკური, ფიზიკის შემდგომ განვითარებას, განზოგადობას იმ მხრივ, რომ იგი არაატომურ, მაკროსკოპიულ, მოვლენებაში იძლევა სრულიად ისეთივე შედეგებს, რაც კლასიკური ფიზიკა, მაშინ როდესაც ატომურ, მიკროსკოპიულ, მოვლენებაში მისი შედეგები, რომელნიც საზოგადოთ კარგ თანხმობაში არიან ცდების მონაცემებთან, სრულიად განსხვავდებიან კლასიკურ ფიზიკის შედეგებიდან.

დღეს ქვანტური ფიზიკა წარმოადგენს საკმაოდ ჩამოყალიბებულ მეცნიერებას. იგი ითვლებს ძირითად კურსად ფიზიკო-მათემატიკურ და ქიმიურ ფაკულტეტებზე. სწორედ ამიტომ უკანასკნელი წლების განმავლობაში გამოვიდა ქვანტური მექანიკის სახელმძღვანელოების საკმარისი რაოდენობა როგორც რუსულ, ისე უცხო ენებზე.

ქართულ ენაზე-კი არც ერთი წიგნი ქვანტური ფიზიკიდან ჯერ ჯერობით არ მოგვეპოვება.

წინამდებარე თარგმანი ნაწილობრივ ავსებს ამ დანაკლისს. გერმანის წიგნი შესანიშნავია იმით, რომ ავტორი ძირითადად ყურადღებას აქცევს საგნის პრინციპული, ფიზიკური მხარის გაშუქებას. იმ მხრივ ეს წიგნი დიდ დახმარებას გაუწევს სტუდენტობას, მასწავლებლებს და მეცნიერულ მუშაეებსაც, რადგან ქვანტური ფიზიკის შეთვისების სიძნელე არა მათემატიკურ, არამედ სწორედ მის ფიზიკურ მხარეშია.

ენერგეტიკული მრუდები, ატომთა და მოლე- კულათა ენერგიის სიდიდე

1. ჩვენი დროის ფიზიკოსი, მოლეკულიალურ ან ატომურ რაი-
მე საკითხის გადაწყვეტისას, ხშირად უწინარეს ყოვლისა ენერგე-
ტულ დიაგრამას აგებს. ამისთვის იგი გადაზომავს ორდინატთა
ღერძზე სისტემის პოტენციალურ ენერგიას, ხოლო აბსცისთა ღერძ-
ზე სისტემის რომელიმე დამახასიათებელ კოორდინატს. ასეთია, მა-
გალითად, ორი ატომის ურთიერთ მიზიდვის ან განზიდვის ენერგიის—
ან მოლეკულიალურ ელექტროსტატიკულ ველში მყოფი ელექტრონის
პოტენციალური ენერგიის—მანძილიდან დამოკიდებულების მრუდი.
ამოცანებისადმი ანალოგიური მიდგომა დამახასიათებელია კვანტური
მექანიკისათვის და გამოწვეულია იმ მდგომარეობით, რომ შრედინ-
გერის ტალღურ განტოლებაში შედის, როგორც კოორდინატების
ფუნქცია, სისტემის პოტენციალური ენერგია V .

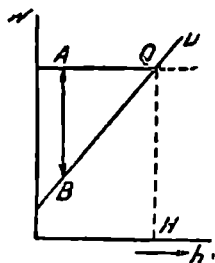
ასეთი ენერგეტიკული მრუდების სწრაფად აგების და ინტერპრე-
ტაციის უნარი საკმაოდ ადვილი მისაწვდომია და იგი ძალიან აად-
ვილებს კვანტური მექანიკის თავისებურებათა გაგებას.

ამიტომ ჩვენ უპირველესად განვიხილავთ კლასიკური კანონების
მიხედვით აგებულ მრუდეებს და აქაც უმარტივესი ამოცანებით და-
ვიწყებთ. მკითხველს, რომელიც უკვე იცნობს ამ გრაფიკულ მეთო-
დებს, შეუძლია უშუალოდ 2—პარაგრაფზე გადავიდეს.

თუ ვერტიკალურად ავისვრით m მასას v საწყისი სიჩქარით, იგი
მოაღწევს სიზღვეს $\frac{v^2}{2g}$, სადაც g —სიმძიმის ძალის აჩქარებაა. ამ

მოძრაობის დროს სხეულის სრული ენერგია W მუდმივი დარჩება,
თუ ჰაერის წინააღმდეგობას უგულვებელვყოფთ. თუ ავაგებთ W
ენერგიის h მანძილზე დამოკიდებულების მრუდს, გადავზომავთ რა
ორდინატთა ღერძზე W -ს, ხოლო აბსცისთა ღერძზე h -ს; მივიღებთ
ჰორიზონტალურ წრფეს AQ (ნახ. 1). h სიმაღლეზე ასვლისას სხეუ-
ლი შეიძენს V -პოტენციალურ ენერგიას, რომელიც ეტოლება mgh .

ჩვენს სურათზე ეს გამოიხატება BD სწორი ხაზით, რომლის დახრა ტოლია $\pi\pi$ -სი. ცხადია, რომ მანძილი ვერტიკალის მიმართულე-ბით ორივე ხაზს შორის, მაგალითად AB , განსაზღვრავს სხეულის კინეტიურ ენერჯიას შესაბამ სიმაღლეზე. სხეულის პოტენციალურ ენერჯია იზრდება მანამდე, ვიდრე ის არ გაუტოლდება W სრულ ენერჯიას—ე. ი. ვიდრე ეს ხაზები არ გადაიკვეთებიან; ამ დროს კინეტიური ენერჯია, ცხადია, ნული გახდება— ე. ი. ნაწილაკი გაჩერდება განსაზღვრულ H სიმაღლეზე, რომელიც შეესაბამება Q წერტილიდან დაშვებულ პუნქტიროვან ვერტიკალურ ხაზს. ამის შემდეგ, კლასიკური მექანიკის თანახმად, ნაწილაკი ამ წერტილიდან უკანვე დაიწყებს მოძრაობას. დაშვება იმისა, რომ ნაწილაკს შეუძლია H -ზე მეტ სიმაღლეზე ავიდეს უაზრობაა, რადგან ასეთ შემთხვევაში პო-



ნახ. 1.

ტენციალური ენერჯია მეტი იქნებოდა სრულ ენერჯიაზე, ხოლო მისი კინეტიური ენერჯია უნდა გამხდარიყო უარყოფითი, რასაც აზრი არა აქვს. ამიტომ H -ს იქეთ მდებარე არე, აქრძალული არეა, რომელშიც W ენერჯია მქონე ნაწილაკებს არ შეუძლია მოხედნენ.

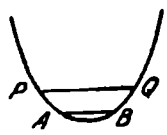
1 ნახაზით ილიუსტრირებული შენელების და შეჩერების პროცესი საფუძვლად ედება მატერიალური სხეულების მფგრადობას. კლაუზიუსის და მაქსველის მიერ მე-XIX საუ-

კუნეში დამუშავებული წარმოდგენას იმის შესახებ, რომ სითბო მოლეკულების სწრაფი და შეუწყვეტელი მოძრაობის გამომჟღავნებაა, გაზებზე გამოყენების დროს, არავითარ სიძნელეებთან არ მიეყავდით; პირიქით, ეს ჰიპოთეზა კარგად ხსნიდა მათ დენადობას. მაგრამ სულ სხვა მდგომარეობა გვაქვს მყარი სხეულებისათვის. მოვიყვანოთ ციტატა „ბრიტანეთის ენციკლოპედიიდან“: „როგორც ყოველდღიურ დაკვირვებათა უთვალავი ფაქტები გვაჩვენებენ, მყარი სხეულების ატომების გადაადგილებანი მათი სითბური მოძრაობის დროს ძალზე მცირე სიდიდეა. მაგალითად, ლითონის კვეთილი ზედაპირი (როგორსაც შევხვდებით იმ ფირფიტებზე, რომლებიც ფოლადზე გრავირების შესასრულებლად იხმარებიან) საუკუნეთა განმავლობაში ზუსტად ინარჩუნებენ თავისი ფორმას. თუ ლითონის ზედაპირი დაფარულია ოქროს თხელ ფენით, ოქროს ატომები რჩებიან ამ ზედაპირზე ნებისმიერ ხანგრძლივად; მათ, რომ გადაადგილების უნარი ჰქონოდათ, თუნდაც სულ მცირე მანძილებზე, ისინი მალე შეერეოდნენ ძირითადი ლითონის ატომებს და დიფუზიით შევიდოდნენ მის შიგნით. ამ

გვარად მყარი სხეულების ატომებს შეუძლიათ მხოლოდ უმნიშვნელო რხევების შესრულება თავისი საშუალო მდებარეობათა მახლობლობაში“.

სითბოს კინეტიური თეორია შეიძლება შევათავსოთ მყარი სხეულის მდგრადობის ფაქტთან, მხოლოდ იმ წარმოდგენის დახმარებით, რომ ავირჩიოთ შესაძლო არეები, სადაც $W > V$ და აკრძალული არეები, რომელთა შორის, როგორც ნახ. 1 გვაჩვენებს მკვეთრი საზღვარია. ამავე დროს იგულისხმება, რომ მყარი სხეულის ყოველი ატომისათვის არსებობს მცირე დასაშვები არე, რომელშიც ატომს შეუძლია მოძრაობა, მაშინ როდესაც მთელი დანარჩენი სივრცე აკრძალული არეა. რა მიმართულებითაც არ უნდა იმოძრაოს ატომმა, მისი პოტენციალური ენერგია სწრაფად იზრდება, ხოლო კინეტიური ენერგია, როგორც ნახ. 1 გვიჩვენებს მცირდება იქამდე, ვიდრე ატომი არ შეჩერდება ზედაპირზე, სადაც $W = V$; შემდეგ იგი ბრუნდება უკან.

ნებისმიერ მიმართულებით პოტენციალური ენერგიის მრუდს ექნება ის სახე, რომელიც მე-2 ნახ-ზეა დახატული; ასე რომ ატომი ერთგვარ პოტენციალურ „ორმოში“ ანუ „ყუთშია“ ჩამწყვდეული. ამ მხრივ ატომი მოგვაგონებს საქანს, რომლის პოტენციალურ ენერგიას, როგორც გადაადგილების ფუნქციას აქვს მე-2 ნახ-ის მრუდის ანალოგიური სახე, სადაც კინეტიური ენერგიას უდიდესი მნიშვნელობა აქვს შუაწერტილში. სიგანე ატომის მოძრაობის დასაშვები უბნისა დამოკიდებულია იმ სრულ ენერგიაზე, რომელიც მას აქვს. ისევე, როგორც კამერტონის ან საქანის რხევის იმპლიტუდა დამოკიდებულია მის ენერგიაზე. ამგვარად რაც უფრო მაღლა მდებარეობს PQ ხაზი AB ხაზის მიმართ მით უფრო დიდ სრულ ენერგიას და ფართო არეს შეესაბამება ის. V ენერგიის მრუდი შეიძლება სიმეტრიული იყოს, როგორც ეს მე-2 ნახ-ზეა; თუ მოძრაობა ერთმხრივ, გაცილებით ჩქარა ნელდება, ვიდრე მეორე მხრივ, მაშინ ის შეიძლება ძალზე ასიმეტრიული იყოს, როგორც მაგ. 48 ნახ-ზეა.

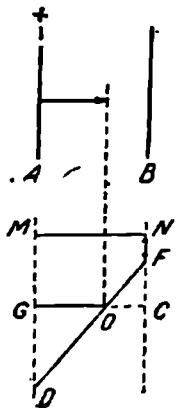


ნახ. 2.

წარმოდგენა მე-2 ნახ. მსგავს მცირე არეებში ჩამწყვდეული ატომებზე გაჯოსადგეგია არა მარტო მყარ სხეულებისათვის – არამედ ცალკეულ ორატომიან ან მრავალატომიან მოლეკულისთვისაც. ყოველი ატომი შებმულია სხვა ატომებთან, იმიტომ რომ ის იმყოფება პოტენციალურ ყუთში, რომელსაც აკრძალული არე არტყია ყოველმხრივ ანუ უფრო ზუსტად, რომ ვსთქვათ, იგი შებმული რჩება მა-

ნამდებ, ვიდრე მისი სრული ენერგია W ნაკლებია პოტენციალურ ორმოს სიღრმეზე.

თუ დროის რობელიმე მომენტში ატომი შეიძენს ისეთ ენერგიას, რომ ($W - V$) მეტი გახდება, ვიდრე პოტენციალური ორმოს სიღრმე.



ნახ. 3.

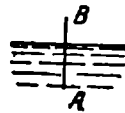
(იხ. მაგ. ნახ. 49), ატომს მიეცემა შესაძლებლობა დასტოვოს იგი—ე. ი. მოლეკულას დისოცირება, შეეძლება.

შემდეგი ნაბიჯი, რომელსაც ჩვენ გადავდგამთ შეეხება დამუხტულ ნაწილაკის მოძრაობის განხილვას ელექტროსტატიკურ ველში. იყოს A და B (ნახ. 3, —ლითონის ორი პარალელური ფირფიტა, რომელთაგან პირველი დადებითად არის დამუხტული ხოლო მეორე უარყოფითად. ვიგულისხმობთ, რომ A ფირფიტის შუაზე მივმართეთ სინათლის ულტრაფიოლეტური სხივი, რის შედეგადაც ლითონიდან ამოვარდება ფოტო-ელექტრონი. დაუშვათ, რომ ის სწორი კუთხით ამოვარდა, როგორც ეს ისრით არის ნაჩვენები. ლითონიდან ამოვარდნის შემდეგ ელექტრონი მოძრაობს თანაბრად შემწელებელ ველში, რომელშიც მისი პოტენციალური ენერგია გამოიხატება წრფეხაზით, მაგ. DF -ისებური ხაზით.

შემდეგ, ელექტრონის შეიძლება ჰქონდეს ან არ ჰქონდეს ენერგია საკმაო იმისათვის, რომ მივიდეს მოპირდაპირე ფირფიტამდე. თუ ელექტრონის სრული ენერგია ისეთია, რომ მისი წარმოდგენა შეიძლება MN ხაზით, მაშინ იგი მივა ფირფიტამდე; მასზე დაცემისას, კიდევ ექნება მცირე კინეტიური ენერგია NF . თუ სრული ენერგია ნაკლებია და GC დონით განისაზღვრება, მაშინ ელექტრონი გაჩერდება Q წერტილში და, კლასიკური მექანიკის თანახმად, დაბრუნდება იმ ფირფიტაზე, რომლიდანაც ამოვარდა.

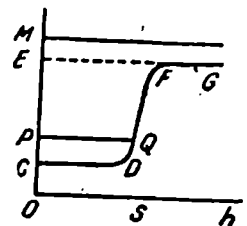
წინა მსჯელობაში ჩვენ არ გავვიხილავს, როგორ ხდება ელექტრონის ამოვარდნა ლითონის შიგნითა ნაწილიდან. ეს პროცესი ძალიან წააგავს სითხის ზედაპირიდან მოლეკულის ამოვარდნის ცნობილ პროცესს—განვიხილოთ უწინარეს ყოვლისა ეს შემთხვევა. ვიგულოვთ, რომ ერთგვაროვანი სითხის ზედაპირის პერპენდიკულარულად გატარებულია AB წრფეხაზი (ნახ. 4); ვნახოთ, როგორ შეიცვლება ამ ხაზის გასწვრივ მოლეკულის პოტენციალური ენერგია. გადავზომოთ აბსცისთა ღერძზე სიმაღლე h AB ხაზზე და S იყოს წერტილი, რომელშიც AB ჰკვეთს სითხის ზედაპირს, ამასთან ერთად

სითხე S -ის მარცხნივ ივლისსმება, ხოლო ორთქლი—მარჯვნივ. ორთქლში გაჩერებულ მოლეკულას უფრო მეტი ენერგია აქვს, ვიდრე სითხის შიგნით გაჩერებულ მოლეკულას; პოტენციალურ ენერგიათა ეს სხვაობა გამოხატული იყოს CE მონაკვეთით, ასე რომ FG შეესაბამება სითხის გარე პოტენციალურ ენერგიას, ხოლო CD —პოტ. ენერგიას სითხის შიგნით. მაშინ მოლეკულის პოტენციალური ენერგია AB ხაზის გასწვრივ გამოიხატება $CDQFG$ მრუდით.



ჩვენ ვიცით, რომ თუ სითხის ზედაპირს მოლეკულა უახლოვდება შიგნიდან უფრო მეტი ენერგიით, ვიდრე რაიმე კრიტიკული ენერგიაა, მაშინ მას შეუძლია დასტოვოს სითხე.

ეს მოხდება მაგ. იმ შემთხვევაში, როცა AB სწორზე მოძრაობს, მოლეკულა CM კინეტიური ენერგიით. იგი ძალიან შეფერხდება ზედაპირთან მიახლოებისას, მაგრამ მაინც ამოვარდება სითხიდან მცირე ნარჩენი EM კინეტიური ენერგიით. რასაკვირველია, მოლეკულათა მხოლოდ მცირე რაოდენობა უახლოვდება ზედაპირს ისეთი კინეტიური ენერგიით, რომლის სიდიდე CM -ს აღწევს. საშუალო კინეტიური ენერგია ვაცილებით ნაკლებია; იყოს ეს CP -ს ტოლი. ასეთი ენერგიის მქონე მოლეკულისათვის Q -ს იქეთა არე კლასიკურ მექანიკაში აკრძალული არეა, ასე რომ მოლეკულა მიაღწევს რა Q წერტილს, უკანვე დაბრუნდება. თუ P და M ისე ავირჩევთ, რომ CP და EM შეესაბამებოდნენ კინეტიური ენერგიის საშუალო მნიშვნელობებს სათანადო სითხეში და ორთქლში, მაშინ PM ვერტიკალური მონაკვეთით გამოხატული სიდიდე წარმოადგენს სწორედ სითხის აორთქლების ფარული სითბოს მოცემულ ტემპერატურაზე.



ნახ. 4.

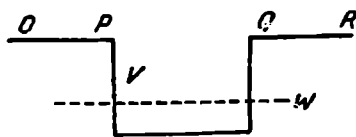
ეხლა შეგვიძლია დაუბრუნდეთ ლითონიდან ელექტრონების ამოვარდნის საკითხს: ოთახის ტემპერატურისას ლითონის ზედაპირიდან ელექტრონის სპონტანური (თავისნებით) ამოვარდნა შედარებით იშვიათ მოვლენას წარმოადგენს—რადგან აორთქლების ფარული სითბო ლითონის ელექტრონებისათვის ვაცილებით უფრო მეტია ვიდრე სითხის მოლეკულებისათვის. მაგრამ ნახ. 4-ის ემპირიული მრუდით შეიძლება აქაც ვისარგებლოთ, თუ ვივსულებთ, რომ ორდინატთა მასშტაბი შეცვლილია.

ვთქვათ AB (ნახ. 4)—ლითონის ზედაპირის მართობულად გატარებული წრფეა, და S არის წერტილი, რომელშიც AB ჰკვეთს ლი-

თონის ზედაპირს, ამასთანავე S -ის მარჯვნივ ვაკუუმში იმყოფება, მარცხნივ-კი—ლითონი. ლითონის შიგნით და ვაკუუმში გაჩერებულ ელექტრონის, განხილვისას მივიღებთ პოტენციალური ენერჯიის $CDFG$ მრუდს. ელექტრონი, რომელსაც CD -ს შესაბამის კინეტიური ენერჯია აქვს ლითონის ზედაპირიდან უკანვე დაბრუნდება. მაგრამ, თუ ზედაპირზე სინათლე ეცემა და ელექტრონი შთანთქმავს სინათლის კონიდან PM ენერჯიას, მაშინ იგი შესძლებს ლითონის დატოვებას ნარჩენი, EM -ის ტოლი კინეტიური ენერჯიით. სწორედ ამაში მდგომარეობს ფოტო-ელექტრული ეფექტი.

თუ მხოლოდ ლითონის ზედაპირის განხილვის ნაცვლად, შვეის-წავლით ელექტრონის პოტენციალური ენერჯიის ცვლილებას ლითონში გატარებული ხაზის გასწვრივ, მივიღებთ მრუდს (ნახ. 5) ეს მრუდი გამოსადეგია სითხის მოლეკულებისთვისაც. როგორც ერთ ისე მეორე შემთხვევაში, V მრუდის გადაძვეეთი, ყოველი ჰორიზონტალური ხაზი (როგორც, მაგ. W მე-5 ნახ.) განსაზღვრავს იმ ნაწილაკის ენერჯიას, რომელიც „პოტენციალურ ყუთშია“. ჩამწყვდეული, მაშინ როდესაც V პოტენციალური მრუდზე მთლიანად ზემოდ, მდებარე W მნიშვნელობანი თავისუფლად ამოქვარდნ ან ჩამვარდნ ნაწილაკებს შეესაბამებოდა.

მე-4 და მე-5 ნახაზზე ჩვენ დიდ ზომიან სისტემებთან გვეკონდასაქმე; სითხის წვეთის ან ლითონის ნაჭერის მთელი ნოცულობა დასაშვები უბანი იყო. მაგრამ თუ მე-5 აბსცისებს მასშტაბს შეუცვლით, მივალთ იმ შემთხვევასთან, რომელიც მე-2 ნახ. ავწერეთ უკვე და რომლისთვისაც დაშვებული არის სივანე მხოლოდ ერთი ატომის



ნახ. 5.

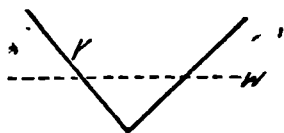
დიამეტრის ტოლი იყო. ამავგვარი მრუდებით შეიძლება ავწეროთ ელექტრონების ბმა დადებითი ატომგულთან რომლებიც ნეიტრალურ ატომს შეადგენენ. თუმცა ელექტრონები ატომის შიგნით სწრაფი მოძრაობის მდგომარეობაში

არაიან $W-V$ კინეტიური ენერჯიით, მაგრამ ყოველ მათგანს მეტად მცირე დასაშვები არე აქვს. თუ მაგ. წყალბადის ატომის ელექტრონის და პროტონის ურთიერთქმედების პოტენციალური ენერჯიის

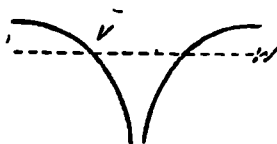
$$V = -\frac{e^2}{r}$$

მრუდს დავხაზავთ მივიღებთ მე-7 ნახაზს. W -ს ის მნიშ-

ენელობანი, რომლებიც ამ მრუდის ყველა წერტილზე მალა არიან, თავისუფალ ელექტრონს შეესაბამებიან; შებმული ელექტრონისათვის V და W მრუდებმა ერთმანეთი უნდა გადაკვეთონ ისე, როგორც



ნახ. 6.



ნახ. 7.

მე-7 ნახ-ზეა ნაჩვენები. ბორის ატომის მოდელის არსებითი მხარე მდგომარეობდა იმ დაშვებაში, რომ შებმული ელექტრონებისათვის ბუნებაში გვხვდებიან W -ს მხოლოდ გარკვეული დისკრეტული მნიშვნელობანი.

2. შემდეგ თავებში ჩვენთვის ხშირად აუცილებელი იქნება ატომთა და მოლეკულათა ენერჯიის სიდიდის რიგის შეფასება. ამიტომ, ეხლავე შევჩერდეთ მასზე.

ატომებში ან მოლეკულებში დაშვებულ ენერგეტიულ დონეთა შორის მოთავსებული შუალედები განსაზღვრავენ გამოსხივების ისეთ γ -სიხშირეებს, რომელთა (გამოშვება) ემისია ან შთანთქმაც სისტემას შეუძლია,

$$h\nu = W_m - W_n,$$

ფორმულის მიხედვით, სადაც $h = 6,53 \cdot 10^{-27}$ ერგი. სეკ. ხოლო W_m და W_n ენერჯიის ორი რომელიმე მნიშვნელობაა ერგებში გამოსახული. იისფერი სინათლის სიხშირე ტოლია დაახლ. 10^{15} სეკ.⁻¹, მაშასადამე, ულტრაიისფერი სინათლის კვანტი დაახლოებით $6 \cdot 10^{-13}$ ერგს შეიცავს. ატომთა ენერჯიების ყველაზე ხელსაყრელი საზომი ერთეული არის ელექტრონ-ვოლტი, ე. ი. ენერჯია, შეძენილი ელექტრონის ან პროტონის მიერ, როცა ის გაივლის ერთი ვოლტის ტოლ პოტენციალთა სხვაობას; ეს ერთეული $1,6 \cdot 10^{-12}$ ერგის ტოლია, ან უფრო ზუსტად $1,5911 \cdot 10^{-12}$ ერგის. ამგვარად, ხილული სინათლის კვანტები შეიცავენ 2-დან 4-მდე ელექტრონ-ვოლტ ენერჯიას (ვოლტი განისაზღვრება, როგორც 10^9 ელ.-მაგნ. ერთეული; ამ რიცხვის გაყოფით c სინათლის სიჩქარეზე—ე. ი. $3 \cdot 10^{10}$ -ზე მივიღებთ, რომ ვოლტი ტოლია $\frac{1}{300}$ ელ.-სტ. ერთეულის, ელექტრონის მუხტი e ტოლია $4,77 \cdot 10^{-10}$ ელ.-სტ. ერთეულის, ხოლო ელექტრონ-ვოლტის ერგებში გამოსახული მნიშვნელობა (ელექტრო-

ნი-ვოლტის ხშირად აღნიშნავენ როგორც «ე.-ვ.» შეადგენს ამ რიცხვის $\frac{1}{300}$ ნაწილს. სასარგებლოა დასამახსოვრებლად რომ ტალღის სიგრძე 12345 ონგსტრემში ანუ $1,2445 \mu$, რაც ინფრა წითელ არეში იმყოფება, შეესაბამება ზუსტად $1,0$ ე. ვ.-ს. (ეს ადვილად შემოწმდება, თუ ვისარგებლებთ დამოკიდებულებით $h\nu = \frac{hc}{\lambda}$). მოლეკულების

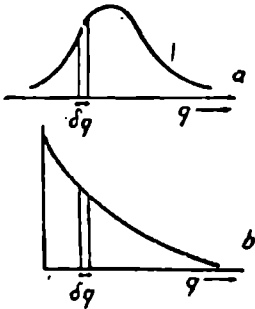
ჩხვეის ენერგები ჩვეულებრივ რამოდენიმედ მცირენი არიან, მაშინ როდესაც ბრუნვის ენერგები დაკავშირებული არიან სპექტრალურ ხაზებთან შორეულ, დაახლოებით 1 მილიმეტრიანი ტალღის სიგრძის მქონე ინფრა წითელ არეში.

სასარგებლოა ამ სიდიდის შედარება სითბური მოძრაობის ენერჯიასთან ოთახის ტემპერატურაზე. გაზის ერთი მოლისთვის გამოთვლილი გაზთა მუდმივი უდრის $8,3 \cdot 10^7$ ერგს გრადუსზე; ამ გამოსახვის ავოგადროს რიცხვზე, $6,06 \cdot 10^{23}$ -ზე გაყოფით, მივიღებთ k ბოლცმანის მუდმივს, ტოლს $1,37 \cdot 10^{16}$ ერგისა გრადუსზე. ბოლცმანის პრინციპის მიხედვით, იდეალური გაზის იმ ატომთა ან მოლეკულათა რიცხვი, რომელთაც აქვთ შინაგანი ენერჯია E , პროპორციუ-

ლია $e^{-\frac{E}{kT}}$ -სი, სადაც T გაზის ტემპერატურაა. სასარგებლოა დამახსოვრებისათვის, რომ ოთახის ტემპერატურაზე kT სიდიდით, დაახლოებით, $\frac{1}{40}$ ელექტრონი-ვოლტის ტოლია. ეხლა შევეკითხოთ ჩვენს თავს: მოლეკულათა რა რაოდენობას აქვს ენერჯია, რომელიც 1 ელექტრონი-ვოლტამდე აღწევს? პასუხი, ცხადია, ასეთია; ეს მოლეკულები შეადგენენ საერთო რიცხვის მე- e^{-10} ან მე- 10^{-11} ნაწილს. ატომთა ან მოლეკულათა საკმაო რიცხვი ასეთ მაღალ დონებამდე მხოლოდ მნიშვნელოვან ტემპერატურებზე აღიძვრება. მეორე მხრივ, მანძილი მოლეკულის ბრუნვითი დონებს შორის, რომელიც ზემოდ მოვიგონეთ, ხშირად $0,1$ ელექტრონი-ვოლტის რიგისაა. მაშ, ოთახის ტემპერატურაზედაც კი მოლეკულები განაწილებული არიან რამოდენიმე ბრუნვითი მდგომარეობათა შორის.

ფიზიკის და ქიმიის ახალი ენა.

ყოველი სამეცნიერო დაკვირვების საერთო ხასიათი იმაში მდგომარეობს, რომ თუ რომელიმე სიდიდის გაზომვა მრავალჯერ მეორდება, მაქსიმალურ სიზუსტით, მაშინ ვლტებულობთ არა ერთადერთ მნიშვნელობას, არამედ მნიშვნელობათა რიგს, რომლებიც რომელიმე საშუალო მნიშვნელობის მახლობლად იმყოფებიან. მნიშვნელობანი, რომლებიც დიდად განსხვავდებიან საშუალოსაგან, უფრო იშვიათად გვხვდებიან, ვიდრე უფრო ახლო მდებარენი. თუ აბსცის-



ნახ. 8.

თა ლერძზე გასაზომი სიდიდის მიღებულ მნიშვნელობებს გადავზომავთ, ხოლო ორდინატთა ლერძზე იმ შემთხვევათა რიცხვს, რომლებშიც ყოველი ასეთი მნიშვნელობა აქო ნაპოვნი, მაშინ მივიღებთ ამა თუ იმ სახის ჩვეულებრივ „ცდომილებათა მრუდს“. (ნახ. 8, a).

როდესაც ფიზიკოსი ატომის რაიმე ექსპერიმენტის რეზულტატს წინასწარმეტყველებს, მისი წინასწარმეტყველება ხშირად 'განაწილების მრუდით გამოისახება. მარეგისტრირებელი ხელსაწ-

ყოები ჩვეულებრივ არ არიან მგრძობიარენი ცალკეულ ატომების მიმართ და ფიზიკოსს არ შეუძლია ცდის პირობების იმდენად ზუსტად ფიქსირება, რომ შესაძლო იყოს გასაზომი სიდიდისათვის ერთი ერთადერთი გარკვეული მნიშვნელობის წინასწარმეტყველება.

ხშირად მაქსიმუმში, რაც მას შეუძლია მოგვეცეს, მდგომარეობს მოსალოდნელი რეზულტატის წარმოდგენაში მრუდის საშუალებით, რომელიც გვაძლევს იმ ნაწილაკთა რიცხვს, (ან, რაც იგივეა, ერთ ნაწილაკზე დაკვირვებათა რიცხვს) რომელთათვისაც გაზომვის რეზულტატი, ვთქვათ, q და $q + \delta q$ შორის თავსდება. ხელსაყრელია ასეთი მრუდისთვის განსაკუთრებული სახელის დარქ-

მევა; ჩვენ მას ვუწოდებთ გასაწინასწარმეტყველებელ რეზულტატთა განაწილების სურათს, დამახასიათებელს მოცემულ პირობების და ხმარებულ ხელსაწყოათვის.

კვანტური მექანიკის მნიშვნელოვანი თავისებურება იმაში მდგომარეობს, რომ მან შესცვალა ჩვენი დამოკიდებულება ასეთ „განაწილების მრუდებისადმი“. მათი წინასწარმეტყველების წინანდელი მეთოდი შემდეგში მდგომარეობდა: ა) ხდებოდა გამოთვლა იმისი, თუ რაც უნდა მომხდარიყო სხვადასხვა იდეალურად ზუსტი პირობების დროს, ამასთან ერთად ყოველ იდეალურ ცდისათვის იწინასწარმეტყველებოდა არა რეზულტატთა განაწილება, არამედ ერთი გარკვეული მნიშვნელობა; ბ) ამის შესრულების შემდეგ, მხედველობაში ღებულობდნენ ხელსაწყოს ხვრელთა სასრულო სიგანეს და სხვებს და მოთხოვნილი განაწილების მრუდი მიიღებოდა სხვადასხვა მოსალოდნელი სიდიდეთა სათანადო კავშირში შესაბამისი პროპორციებით მიყვანით. ამგვარად მთელი მეთოდი დაფუძნებული იყო იმ დაშვებაზე, რომ ყოველმა იდეალურად ზუსტმა გაზომვამ უნდა, მიგვიყვანოს ერთ გარკვეულ რეზულტატთან და რომ საძიებელი განაწილება უნდა მიიღებოდეს იმ რეზულტატთა შეთანადებით.

კვანტური მექანიკა-კი დაფუძნებულია რევოლუციონურ შეხედულებაზე იმის შესახებ, რომ ეს გამოსავალი დებულება, საზოგადოდ, არ არის სწორი. თუ წარმოვიდგენთ, რომ ჩვენ იდეალური ხელსაწყოთი ვსარგებლობთ, მოლეკულიარულ სისტემაზე დაკვირვების მოხდენისას, ამ შემთხვეშიც კი უნდა დაუშვათ, რომ ხშირად სრულებით არ არსებობს ერთი ერთადერთი სწორი მნიშვნელობის მსგავსი რამაც კი ყოველი გასაზომი სიდიდისათვის; რამოდენიმე იდეალურად ზუსტი გაზომვის შედეგადაც კი მიიღება რეზულტატთა რაიმე ნარჩენი უზუსტობა. ამგვარად, კვანტური მექანიკას შემოაქვს ცნება წმინდა თეორეტიული „განაწილებების“, რომელთა სახეც დამოკიდებულია მხოლოდ სამყაროს თვისებებზე და არა რაიმე, ხელსაწყოზე ან ცდის პირობებზე. ჩვენ შეგვიძლია ამ თავისებურების გაგებასთან შემდეგი გზით მივიდეთ. იმისათვის რომ განვსაზღვროთ მოძრავი სხეულის მდებარეობა, ჩვენ შეგვიძლია მივმართოთ მასზე სინათლის სხივი და გამოვარკვიოთ, თუ სად იმყოფება ის მოცემულ მომენტში. სინათლის სხივი, როგორც ვიცით, მოახდენს სხეულზე წნევას, მაგრამ ეს წნევა ჩვეულებრივ ძლიერ მცირეა იმისათვის; რომ მან შესძლოს სხეულის მოძრაობის რამოდენიმედ მაინც შესამჩნევად დამახინჯება. თუ სხეულის მასა ძალიან მცირე არაა, მაშინ იგი მნიშვნელოვნად არ აჩქარდება დაცემულ სინათლის გავლენით. მაგრამ ძალზე მცირე ნაწილაკებზე გადასვლისას, ჩვენ ასეთ დილემას ვეგებებით:

ერთის მხრივ, თუ სინათლე არ გაიფანტა ჩვენი თვალის ა მგრძნობიარე ხელსაწყოს მიმართულებით, ჩვენ ვერ შევძლებთ იმის გაგებას, თუ სად იმყოფება ნაწილაკი. მაგრამ, მეორეს მხრივ, თუ გამოსხივება გაიფანტება ნაწილაკის მიერ, მაშინ მოხდება მოძრაობის რაოდენობის გადაცემა და ნაწილაკი განიცდის უკუდაკერას, რომელიც სცვლის მის სიჩქარეს. თითქოს ცხადია, რომ ჩვენ შეგვიძლია გავიანგარიშოთ ამ უკუდაკერის გავლენა და, ამგვარად, სავსებით ზუსტად განვსაზღვროთ ჩვენი ნაწილაკის როგორც მდებარეობა, ისე სიჩქარე მოცემულ მომენტში; მაგრამ ეს შეუძლებელი ხდება იდეალურ ცდაშიც კი. ჩვენ არ ვიცნობთ ასეთი დამცემი გამოსხივების მეთოდზე უფრო ზუსტი დაკვირვების ხერხს; ყველა დანარჩენი მეთოდები სინამდვილეში უფრო უხეში არიან. ამიტომ ატომის წინანდელ თეორიაში სერიოზულ შეცდომას უშვებდნენ, როდესაც ანგარიშს არ უწევდნენ იმ ფუნდამენტალურ გარემოებას, რომ არ შეგვიძლია მოვახდინოთ დაკვირვება ატომის სისტემაზე მისი პერტურბაციის გარეშე.

მეცნიერებაში არა აქვს აზრი ცდის მოხდენას ისეთ სისტემაზე, რომლის მდგომარეობის შესახებ საკმაო ცნობები არა გვაქვს, რადგანაც მისგან არ შეიძლება არავითარი სასარგებლო დასკვნების გამოყვანა. ფრიად არსებითია სისტემის რაც შეიძლება კარგად შესწავლა წინასწარი დაკვირვებების დახმარებით. ძველ ფიზიკაში მიღებული იყო, რომ იდეალურ ცდაში ეს საწყისი ცნობები შეიძლება მივიღოთ გარკვეული მნიშვნელობათა ერთობლიობის სახით, თითოეული მნიშვნელობა ყოველი სიდიდისათვის, რომელიც აუცილებელია სისტემის მდგომარეობის განსაზღვრისათვის მოცემულ მომენტში. მაგრამ ეხლა აღმოჩნდა, რომ თვით წინასწარი დაკვირვებებსაც ფიზიკური ექსპერიმენტის ხასიათი აქვთ და შეუძლიათ მოგვეცენ მხოლოდ არა სრული მსგავსება ცნებებისა, რომელთა მოთხოვნას ფიზიკოსი შეეჩვია, რადგან ზოგიერთ სიდიდეებისათვის ყოველშემთხვევაში, ისინი იძლევიან განაწილებებს გარკვეულ მნიშვნელობათა ნაცვლად. რაიმე სისტემის შესაბამის სხვადასხვა განაწილებანი არ არიან დამოუკიდებელი ერთმანეთზე. როგორც მე-IV თავში გამოიკვლევა, რაც უფრო ზუსტად არის გარკვეული ერთი რომელიმე სიდიდის მნიშვნელობა, მით უფრო მეტი ცდომილება მიიღება რომელიმე მეორე სიდიდის განაწილების სურათში.

წინადა უშვებდნენ რომ მცირე ნაწილაკები, მსგავსი ელექტრონების და პროტონების, უნდა ემორჩილებოდნენ მექანიკის იმავე კანონებს, რომელთაც, როგორც დამყარებული იყო, მიკროსკოპიული სხეულები ემორჩილებიან. მაგრამ ეხლა, ზემოდ ნაჩვენები მიზეზების

გამო, აუცილებელია დაშვება იმისა, რომ ატომური ნაწილაკები არ ემორჩილებიან ჩვეულებრივი მექანიკის კანონებს. რადგან ამას რამოდენიმედ მოჰყვება უარის თქმა გარკვეული მნიშვნელობებით სარგებლობაზე, მაშინ ჩვენ უნდა მოვიგონოთ ახალი ენა, რომლითაც შესაძლებელი იქნებოდა მოლექულიარული სისტემათა აღწერა. შეიძლებოდა გვეფიქრა, რომ უარის თქმა ფიზიკურ სიდიდეთა გარკვეულ მნიშვნელობებზე მიგვიყვანს სისტემის გარკვეულ მდგომარეობის აღწერის შეუძლებლობასთან. მაგრამ სინამდვილეში ეს სწორი არ არის; ყველაფერი, რაც ჩვენ უნდა მოვახდინოთ, მდგომარეობს განაწილების სურათების შემოღებაში სათანადო გარკვეულ მნიშვნელობათა ნაცვლად. ყოველი დაკვირვებადი სიდიდე, თუნდაც არ შეიძლებოდეს მისთვის არანეიტარო გარკვეული მნიშვნელობის მიწერა, ყოველ შემთხვევაში, შეიძლება აიწეროს რომელიმე განაწილების სურათით. მკითხველი შემდეგში დარწმუნდება, რომ ყველა განაწილების სურათების ერთობლიობა სავსებით ახასიათებს სისტემის გარკვეულ მდგომარეობას. ყოველი სხვა მდგომარეობა აღწერილი იქნება სხვა განაწილების სურათთა ერთობლიობით. ეს განაწილების სურათები წარმოადგენენ სწორედ ფიზიკის ახალ ენას და აუცილებელია მხოლოდ ჩვენი აზროვნების ჩვევათა უმნიშვნელო ცვლილება, რომ შევისწავლოთ მასზე ისევე თავისუფლად. ლაპარაკი, როგორც ძველ ენაზე. ფიზიკოს-თეორეტიკოსის ამოცანა მდგომარეობს ატომის თეორიის სხვადასხვა პრობლემებისთვის ამ განაწილებათა სახის პოვნაში და აგრეთვე იმის შესწავლაში, თუ როგორ იცვლება განაწილების სახე სისტემის მდგომარეობის შეცვლისას, მაგ. თუ, იგი შეტანილი იქნება მაგნიტურ ველში ან თუ მასზე ეცემა გამოსხივება, ან ნაწილაკთა ნაკადი. ამ შესწავლის დასრულების შემდეგ მან იცის ყველაფერი, რაც-კი მან უნდა იცოდეს.

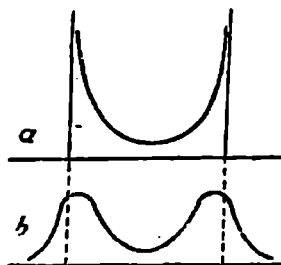
აქ საჭირო იქნება რამოდენიმედ უფრო დაწვრილებით მოგონება განაწილების ყოველი თეორეტიკული და ემპირიული სურათის ზოგიერთა ცხადი თვისებების. ვიგულისხმობთ უპირველესყოვლისა, რომ ჩვენ მოვახდინეთ ცდა და ნახ. 8 გვადღევეს მრუდს, რომელიც რაიმე g სიდიდის მრავალი გაზომვის რეზულტატებს აღწერს, რომლის მნიშვნელობანიც აბსცისთა ლერძზე არიან გადაზომილი. თუ გამოვყოფთ მნიშვნელობათა მცირე ნე არეს და ავმართავთ მე-8 ნახ-ზე ნაჩვენებ ვერტიკალურ ზონას, მაშინ ამ ზონის ფართი $N(g)dg$ მოგვეცემს იმ დაკვირვებათა რიცხვს, რომელთა რეზულტატებიც ამ მცირე ნე არეში არიან მოთავსებული. რადგანაც ყველაფერი ეს სხვა ზონებსაც შეხება, ამიტომ მთელი ფართი შემოსაზღვ-

რული მრუდით, ცხადია ჩატარებულ მოხდენილ დაკვირვებათა სრულ რიცხვს უდრის. თუ ჩვენ გვსურს ეალა რამოდენიმე (მაგალითად, 11) დამატებითი დაკვირვების მოხდენა—მრუდიდან მაშინვე შეიძლება პოვნა, თუ რას უდრის ალბათობა იმისა, რომ რომელიმე მათგანის რეზულტატი მოთავსებულ იქნება $2q$ არეში. ამისთვის საკმაოა მხოლოდ ორდინატთა მასშტაბის შეცვლა ისე, რომ მთელი ფართი, შემოსაზღვრული მრუდით, უდრიდეს n -ს; კერძოდ თუ ჩვენ მრუდით შემოსაზღვრული ფართს ერთის ტოლად გავხდით, მაშინ ყოველი ზოლის ფართი მოგვეცემა ჩვენ ალბათობას $P(q)2q$ იმისა, რომ ერთი რომელიმე დაკვირვების რეზულტატი q და $q+2q$ შორის არის მოთავსებული. ჩვენ აღნიშნეთ რომ სახელდობრ ამ სახით განისაზღვრებიან კვანტურ მექანიკაში განაწილების თეორეტიული სურათები. თუ მრუდით შემოსაზღვრული ფართი ერთის ტოლად არის მიღებული, მაშინ იტყვიან, რომ განაწილება „ნორმირებულია“ ერთთან. თავისთავად იგულისხმება, რომ ჩვენ ვაპირებთ განაწილების სურათის წინასწარმეტყველებას წმინდა ფეორიის საფუძვლებზე და არა მისი მიღებას გავზომვებით.

განაწილების სურათების მნიშვნელობა ცხადი გახდება, თუ ვნახავთ, რა სახე აქვს რაიმე განაწილებას კლასიკურ მექანიკაში. თუ მოვხედნით ნელად მრხევადი საქანის მომენტალურ ფოტოგრაფირებას დროის ნებსით შუალედების შემდეგ, მხოლოდ ზოგიერთი არა მრავალრიცხოვანი ფოტოჩაწერები გამოხატავენ საქანს მისი ცენტრალური მდებარეობის მახლობლად—სხვანაირად რომ ვთქვათ, ეს მდებარეობა აღმოჩნდება მცირე ალბათიანი უბრალოდ იმიტომ, რომ მრხევი საქანი თავისი ცენტრალური მდებარეობის მახლობლად, სადაც მისი სიჩქარე უდიდესია, დროის შედარებით მცირე მონაკვეთის განმავლობაში იმყოფება.

$P(q)2q$ ალბათობა იმისი რომ საქანის გადაადგილებას ექნება q და $q+2q$ -ს შორის მდებარე მნიშვნელობა, კლასიკურ შემთხვევაში ადვილად გამოითვლება. მართლაც P უკუპროპორციულია სიჩქარის, შესაბამე წერტილში, ხოლო სიჩქარე პროპორციული $\sqrt{a^2 - q^2}$ -ის, სადაც a რხევის ამპლიტუდაა. P ალბათობის მრუდს აქვს მე-9, a ნახაზზე გამოხატული სახე. P ალბათობა დიდია q -ს a -ზე ცოტათი ნაკლებ მნიშვნელობებისათვის, როდესაც საქანი ძალზე ნელა მოძრაობს და, ცხადია უდრის ნულს q -ს a -ზე მეტი მნიშვნელობათათვის. იგივე სახე აქვს ალბათობის მრუდს ყოველი იმ სიდიდისათვის, რომელიც უბრალო პარამონიული კანონით იცვლება, მაგ. გადაადგილება მონოქრომატიულ ტალღაში.

თუ ჩვენ დავაპირებდით გვესარგებლა განაწილების სურათებით, რომლებიც კლასიკური მექანიკის კანონებით იქნებოდნენ გამოთვლილი, მაშინ იგივე მრუდი წარმოგვიდგენდა ატომურ ოსცილიატორის განაწილების სურათს. მაგრამ კვანტურ მექანიკაში შეიძლება ველო-



ნახ. 9.

დეთ, რომ აუცილებელი განუზღვრელობა მოგვცემს განაწილების, რამოდენიმედ სახეშეცვლილ სურათს ნახ. 9 ბ მრუდის მსგავსს. შემდეგ თავში ჩვენ ვნახავთ, თუ რამდენად შეესაბამება მოსალოდნელობა სინამდვილეს.

თუ ჩვენ გადავწყვიტეთ განაწილების აღბათობათა კანონებით სარგებლობა, მაშინ ჩვენ უნდა გამოვიმუშაოთ ყოველი სიდიდისთვის, რომლის გაზომვაც ჩვენ შეგვიძლია, შესაბამისი ფუნქციის გა-

მოთვლის მეთოდი. ჩვენ რომ გვქონოდა $P(q)$ -ს უშუალოდ განმსაზღვრელი განტოლება, ეს იქნებოდა ყველაფერი, რაც კი საჭიროა.

მაგრამ აქ ჩვენ თეორიის მოულოდნელ მხარეს ველობებით. შრედინგერის განტოლება და სხვა განტოლებანი, რომლებმაც ასეთი წარმატებით მიგვიყვანეს ცდასთან შეთანხმებულ რეზულტატებთან, არასოდეს არ საზღვრავენ უშუალოდ P აღბათობას, არამედ იძლევიან P -ს კვადრატული ფესვის მსგავს სიდიდეს. ამაში მდგომარეობს კვანტური მექანიკის არსებითი მხარე, რომლის გაწინასწარმეტყველებასაც ჩვენ ვერ შევსძლებდით. ეს შეეხება განაწილების სურათის ყველა სახეებს, რომელთაგანაც ზოგიერთს, რაც შეიძლება მეტად დამახასიათებლებს, ახლავე მოვიყვანთ ჩვენ მაგალითისათვის:

1) თუ ჩვენ საქმე გვაქვს დაპოლიზრებული სინათლის სხივთან, მაშინ არსებობს იმის აღბათობის განაწილების ფუნქცია, რომ ელექტრიული ველის დაძაბულებას ტალღაში (ელექტრიულ ვექტორს) აქვს E და $E+dE$ შორის მოთავსებული მნიშვნელობა. იმის ნაცვლად, რომ საქმე უშუალოდ $P(E)$ -სთან გვქონდეს, ჩვენ უნდა ვიგულისხმოთ, რომ $P(E) = |\Psi(E)|^2$. ჩვენს განტოლებებში სეორედ $\Psi(E)$ სიდიდე შედის, რომლისგანაც შეიძლება $P(E)$ -ს მიღება, მისი მოდულის კვადრატში აყვანით.

- 2) თუ ჩვენ განვიხილავთ ნაწილაკის მოძრაობის რაოდენობას p და თუ გვჭირდება განაწილების სურათი, რომელიც განსაზღვრავს P აღბათობას, იმისა რომ p მდებარეობს p და $p+dp$ შორის, მაშინ ჩვენ უნდა ვიგულისხმოთ, რომ $P(p) = |\Psi(p)|^2$. ჩვენი განტოლებანი

მოგვეცემენ $\Psi(p)$ -ს სიდიდეს, და თუ ის ცნობილია შეიძლება P -ს პოვნა.

3) ვიგულოვთ, რომ ჩვენ ვსწავლობთ ატომს, რომელსაც შეუძლია იმყოფებოდეს რამოდენიმე სივადასხვა მდგომარეობაში, რომლებსაც ჩვენ 1, 2, 3 და ა. შ. მდგომარეობებს უწოდებთ. აღვნიშნოთ ალბათობა იმისა, რომ ატომი იმყოფება 1 მდგომარეობაში, P_1 -ით, ალბათობა იმისა, რომ იგი იმყოფება მეორე მდგომარეობაში P_2 -თ და ა. შ. მაშინ ჩვენ უნდა ვიგულოვოთ, რომ $P_1 = |a_1|^2$, $P_2 = |a_2|^2 \dots$ და ვისარგებლოთ ჩვენ განტოლებებში P_1 , P_2 ნაცვლად a_1 და a_2 -თ.

4) ვიგულისხმობთ, რომ ჩვენ განვიხილავთ ორ ნაწილაკს, რომლებიც ცენტრალურ შეჯახებას განიცდიან. განაწილების სურათი რომელიც აღწერს შეხლას, განსაზღვრავს ალბათობას იმისა, რომ ერთი ნაწილაკი იქნება მოთავსებული რომელიმე წერტილში x_1 და $x_1 + dx_1$ შორის და იმავე დროს მეორე ნაწილაკი მოთავსებული იქნება x_2 და $x_2 + dx_2$ შორის.

ეს შეიძლება ასე გამოვხატოთ.

$$|\varphi(x_1, x_2)|^2 = P(x_1, x_2).$$

თუ რატომ უნდა ვისარგებლოთ კვადრატული ფესვებით ალბათობათაგან სავსებით ცხადი არ არის; კვანტური მექანიკა აგებული იყო მთელი რიგი მიხვედრათა გზით, და ჩვენ ვსარგებლობთ ამ მეთოდით იმიტომ, რომ ის შესაძლებლობას გვაძლევს ჩვენ, მივიღოთ ცდასთან შეთანხმებული განაწილების სურათები. კვადრატული ფესვებით სარგებლობას აქვს ანალოგი ფიზიკის სხვადასხვა დარგებში: ტალღური მოძრაობის ყველა სახეებში—ბგერის ტალღებში, სინათლის ტალღებში და ა. შ. ჩვენ ყოველთვის საქმე გვაქვს კვადრატული ფესვთან ინტენსივობიდან ე. ი. ტალღის ამპლიტუდასთან. ინტერფერენციის მოვლენა დაკავშირებულია იმ გარემოებასთან რომ ინტენსივობა უდრის ამპლიტუდის კვადრატს. ვსარგებლობთ რა ამ ანალოგიით, შეიძლება ვილაპარაკოთ ალბათობის ამპლიტუდებზე. განტოლებას, რომელიც რომელიმე Ψ ფუნქციას გვაძლევს ეწოდება ტალღური განტოლება, ხოლო კვანტური მექანიკას ხშირად აგრეთვე ტალღური მექანიკასაც უწოდებენ.

1)—4) მაგალითებში ნაჩვენებია ალბათობის ამპლიტუდების გამოკვლევის დროს ადვილად ვრწმუნდებით, რომ მათი ბუნება სავსებით განსხვავდება ფიზიკაში ცნობილი ტალღებისაგან. ბგერის ტალღების სინათლის ტალღების და სხვების არსებითი მხარე იმაში

მდგომარეობს, რომ ისინი ვრცელდებიან ჩვეულებრივ სივრცეში, ე. ი. რომ ტალღით დახასიათებული სიდიდე ჩვეულებრივ სივრცულ კოორდინატთა ფუნქციაა, მაგ. x , y , z -ის (და აგრეთვე დროისაც).

როგორც ვხედავთ ამას ადგილი არა აქვს არც ერთი ჩამოთვლილი მაგალითების Ψ ფუნქციისთვის; ეს განსაკუთრებული ამპლიტუდები არ შეიძლება წარმოვიდგინოთ, როგორც ავეულებრივ გვარი ტალღების ამპლიტუდები და აქ გამოუსადეგია ტალღური ანალოგიუკი საბედნიეროდ, არსებობს ერთი დიდი მნიშვნელობის მქონე კერძო შემთხვევა, რომელშიაც ფუნქციები შეიძლება წარმოდგენილი იქნენ, როგორც ტალღები ჩვეულებრივ სივრცეში, სწორედ იმიტომ რომ, ისინი არიან სივრცის ჩვეულებრივი სამი კოორდინატის ფუნქციები. განაწილების როგორ სურათებს აქვთ ეს თვისება? ცხადია, რომ P და მასისადამე Ψ -ც იქნებიან მხოლოდ სამი x , y , z კოორდინატის ფუნქცია იმ შემთხვევაში, თუ ხდება განსაზღვრება ალბათობისა იმისი, რომ რომელიმე ცალკეული ნაწილაკი იმყოფება x , y , z წერტილში ან მის მახლობლად.

ამგვარი განაწილების სურათები და მისი შესაბამისი Ψ ტალღები შეიძლება აიწეროს ალბათობის განაწილების სურათის საშუალებით, რომელიც (განაწილება) ზოგიერთ მიზნებისთვის შეგვიძლია წარმოვიდგინოთ ელექტრონთა მცირე ღრუბელის სახით, რომელიც შექმორტყმულია დაღბით ატომ გულზე—ე. ი. პატარა არეში განაწილებული უარყოფითი მუხტის სახით, რომელშიაც პროტონია ჩაძირული. ატომის ყოველი აღგზნებული მდგომარეობისათვის განაწილების სურათს ნორმალური მდგომარეობიდან განსხვავებული სახე აქვს. ზოგიერთი ამ განაწილებათაგანი ნაჩვენებია მე-10 ნახ-ზე. საყსებით ბუნებრივია, რომ ჩვენ ვსარგებლობთ Ψ ტალღების ამ უნარტივისი სახით ყველა შემთხვევებში როდესაც კი ეს შესაძლოა. ჩვენ არ დაგვეჭირდება უფრო რთული სახის Ψ ტალღების გამოყენება მე-VI თავამდე.

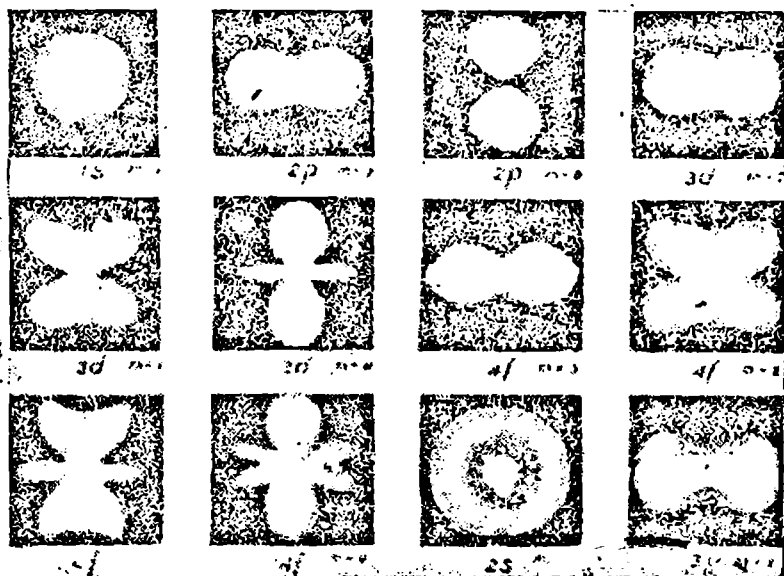
მკითხველისთვის ალბათ ცნობილია, რომ 1924 წელს დე-ბროილმა დაუწევა, რომ ნაწილაკების მოძრაობასთან როგორღაც უნდა იყენენ დაკავშირებული ტალღები. *m* მასის მქონე ნაწილაკს, რომელიც თანაბრად მოძრაობს *v* სიჩქარით ე. ი. კინეტიური ენერგიით

$$W - V = \frac{1}{2} mv^2.$$

მან მიაწერა ტალღის სიგრძე

$$\lambda = \frac{h}{m \cdot v} = \frac{h}{\sqrt{2m(W-V)}} \quad (1)$$

ეს გამოთქმა გამოყენილი იყო მარტივი ანალოგიის დახმარებით; კვანტური მექანიკის იდეების უმრავლესობის მსგავსად ეს იყო მხო-



ნახ. 10,

ეს განაწილების ან ელექტრონული ღრუბლის მოდელური წაროდგენა წყალბადის ატომის ძირითადი და ზოგიერთი აღზნებულ დონეებისათვის.

ლოდ მიხვედრა. როგორც შემდეგ თავში გამოიკვევა, ეს გამოთქმა ტალღის სიგრძისთვის შეტანილი იყო ზოგად თეორიაში, სადაც ის მიეკუთვნება მუდმივი ψ სიჩქარით მოძრავე ნაწილაკის განაწილების სურათს. მაგ. მე-5 ნახ-ის პოტენციალური ყუთის შიგნით, სადაც $(W-V)$ -ს მუდმივი მნიშვნელობა აქვს, ψ განაწილების სურათს ექ-

ნება სინუსოიდის ან კოსინუსოიდის სახე (1)-ით განსაზღვრული ტალღის სიგრძით. ამ განაწილების სურათებში ψ , ცხადია, მიიღებს, როგორც უარყოფით, ისე დადებით მნიშვნელობებს. მაგრამ ეს არ გამოიწვევს სიძნელეებს, რადგან როგორც $|\psi|^2$, ისე მასთან ერთად P ალბათობაც ყოველთვის დადებითი არიან.



ნახ. 11.

λ -სთვის (1) გამოთქმის თანახმად, რაც უფრო მეტია ნაწილაკის სიჩქარე, მით უფრო

მოკლეა მასთან დაკავშირებული ტალღის სიგრძე.

მაშასადამე იქ, სადაც ნაწილაკთა ნაკადი თანდათანობით აჩქარებას ან შეფერხებას განიცდის, ხდება ტალღის სიგრძის უწყვეტი ცვლა. ფიზიკაში ჩვენ შევეჩვიეთ სინათლის და ბგერის ტალღებს, რომლებიც ვრცელდებიან ისეთ, გარემოში როგორც მაგ. ჰაერი, წყალი და მიწაა, რომლებიც ერთგვაროვანი არიან. ჩვენ უფრო ნაკლებად ვიცნობთ ტალღებს, რომლებიც ვრცელდებიან გარემოში, რომლის სხივტეხვის მაჩვენებელი იცვლება ნელა და უწყვეტად წერტილიდან წერტილამდე; ეს აიხსნება იმით, რომ განხორციელება ისეთი გარემოსი, რომლის სხივტეხვის კოეფიციენტი მოცემული კანონის თანახმად იცვლება, საკმაოდ ძნელია. მაგრამ ჩვენ ვიცით, რომ ასეთ გარემოში ყოველ მონოქრომატიულ ტალღის სიგრძე უნდა იცვლებოდეს წერტილიდან წერტილამდე, როგორც მაგ. ეს მე-11 ნახ-ზეა ნაჩვენები. ტალღის სიგრძის შეცვლასთან დაკავშირებულია ამპლიტუდის შეცვლა, რაც სურათზე არ არის ნაჩვენები.

ვიგულისხმობთ, რომ ჩვენ გვაქვს ასეთი გარემო, და რომ ცნობილია, თუ როგორ იცვლება სხივტეხვის მაჩვენებელი ნების მიერ სინშირის სინათლისათვის x , y , z -ის ფუნქციად. ფიზიკოსს შეუძლია, მოახდენს რა ამოცანის თვისობრივ გამოკვლევას, განსაზღვროს ნებისმიერი სინშირის ტალღების მიახლოებითი სახე. მათემატიკოსს კი შეუძლია გამოსთვალოს იგი ზუსტად, ტალღების გავრცელების სათანადო განტოლების გადაწყვეტით.

სახელდობრ ამოცანების ასეთი ტიპი და ასეთი ხერხები ყველაზე უფრო მოგვაგონებენ, როგორც თვისებრივ, ისე ზუსტ მეთოდებს, რომელთაც იყენებს ტალღური მექანიკა ატომის თეორიის ამოცანათა გადასაწყვეტად. იმიტომ, რომ ყოველ ასეთ ამოცანაში ჩვენ მოცემული გვაქვს ნაწილაკთა შორის მიმზიდველობის და გამზიდველობის ძალები, რომლებთანაც (ძალებთან) დაკავშირებულია გარკვეული V პოტენციალური ენერჯია.

თუ V სიდიდე მოცემულია, როგორც x , y , z -ის ფუნქცია. როგორც მაგ. I თავში, მაშინ ეს ექვივალენტურია გარემოს სხივების მარეფლექციის ყოველ წერტილისათვის მოცემის. შრედინგერის განტოლების გადაწყვეტით მათემატიკოსი შესძლებს ზოგჯერ ყოველწერტილში ψ -ს ზუსტი მნიშვნელობის გამოთვლას. მაგრამ ფიზიკოსისა და ქიმიკოსისთვის ასევე მნიშვნელოვანია თვისობრივი გამოკვლევათა საშუალებით ψ -ს მიახლოებითი სახის გამოკვლევა და ამგვარად სისტემის ყოფა-ქცევის შესახებ დაახლოებითი ცნობების მიღება.

**ტალღური განტოლება. წყალბადის ატომი
ელექტრონის მაგნიტური მომენტი. და სპინი.
შპარტივესი ამოცანები.**

განვიხილოთ—რა განაწილებათა ალბათობითი სურათების ბუნება ატომურ სისტემებისათვის, ჩვენ შეგვიძლია გადავიდეთ | თავის ამოცანების ამოხსნაზე. ჩვენ ვნახეთ, თუ რა სახით ახსნის კლასიკური მექანიკა V პოტენციალური ენერჯიის დახმარებით იმ ფაქტს, რომ ელექტრონები და ატომები თავიანთ ადგილზე არიან დაქერილი. მსოფლიოში ყველა ნაწილაკები მოძრაობენ ისეთ არეში, სადაც $V < W$. ცხადია, რომ რა მიმართულებითაც არ უნდა მოძრაობდეს ნაწილაკები, ის ადრე თუ გვიან მიაღწევს ზედაპირს, სადაც $V = W$ და მისგან დაბრუნდება უკანვე. კვანტურ მექანიკაში სხვას არაფერს უნდა ველოდეთ ისევე გარკვეულს, როგორცაა შემომსაზღვრელი ზედაპირი. და მეტად მნიშვნელოვანია დადგენა იმისი, თუ რა შესცვლის ამ საზღვარს.

შრედინგერმა გვაჩვენა, რომ განტოლებას, რომლის ამოხსნები იმ არეში, სადაც $W > V$ -ზე დე-ბროილის ტალღებია, შეიძლება ჰქონდეს აზრის მქონე ამოხსნები იმ შემთხვევაშიც, როცა $V > W$.

ამ განტოლებას აქვს სახე:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{8\pi^2m}{h^2} (W - V) \psi = 0. \quad (2)$$

მართლაც, თუ $(W - V)$ დადებითია და ან მუდმივია ან ნელა იცვლება x -ის ცვლით, მაშინ ამ განტოლებას შემდეგი ამოხსნა აქვს:

$$\psi(x) = A \cos \frac{2\pi x}{\lambda} + B \sin \frac{2\pi x}{\lambda}, \quad (3)$$

სადაც A და B —მუდმივებია, ხოლო λ —დე-ბროილის ტალღის სიგრძეა (1) ფორმულით განსაზღვრული; ამაში ადვილად დავრწმუნდებით, თუ

(3)-ს გავადიფერენციალებთ x -ით. ამგვარად, ვიდრე, $W > V$ -ზე და V ნელა იცვლება, (2) განტოლება უბრალოდ მათემატიკური გამოხატევა იმ ფაქტის, რომ ψ -ს აქვს ტალღის სიგრძე ტოლი

$$\frac{h}{\sqrt{2m(W-V)}}\text{-სი. შრედინგერმა დაუშვა რომ განტოლება გამოსადე-$$

გია იმ შემთხვევაშიც, როცა $W < V$ და V სწრაფად იცვლება x -ის ცვლით. სინამდვილეში (2) განტოლების ამოხსნები იძლევიან მოთხოვნილი სახის განაწილების სურათებს, სახელდობრ ისინი განსაზღვრავენ $|\psi(x)|^2$ ალბათობას, მოცმულ W -სთვის. გამოვიყენოთ (2) განტოლება, მე-5 ნახაზზე გამოსახულ პოტენციალურ ყუთში მყოფ ნაწილაკის ამოცანაზე, ამასთან ერთად დაუშვათ, რომ PO და QR ხაზები გაგრძელებული არიან უსასრულობამდე ორივე მიმართულებით. (3) ამოხსნა სამართლიანია იმ არესთვის, რომელიც პოტენციალურ ყუთის შიგნით არის მოთავსებული W -ს V -ზე მეტი, ნებისმიერი მნიშვნელობისთვის. ყუთის ორივე მხრივ, აკრძალულ არეში, $(W - V)$ უარყოფითი და მუდმივია. ამ შემთხვევაში (2) განტოლების ამოხსნას აქვს სახე:

$$\psi(x) = Ce^{-kx} + De^{kx}, \quad (4)$$

სადაც C და D —მუდმივებია, ხოლო

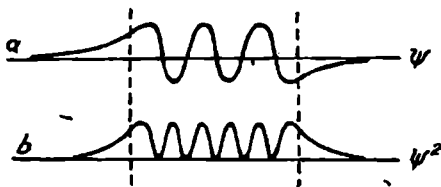
$$k = \frac{2\pi}{h} \sqrt{2m(V - W)} \quad (5)$$

რისი შემოწმებაც ადვილია, (4) განტოლების განწარმოებით.

ჩვენ ვხედავთ, რომ ψ -ს გამოთქმა, შეიცავს წევრს, რომელიც მცირდება მაჩვენებლიანი კანონით და წევრს, რომელიც იზრდება მაჩვენებლიანი კანონით. ცხადია, რომ კოეფიციენტი ამ ზრდად, წევრთან ნულის ტოლი უნდა იყოს, თუ განაწილების სურათი უნდა შეესაბამებოდეს პოტენციალურ ყუთში შემზღულ ნაწილაკს, რადგან სხვაგვარად ψ და $|\psi|^2$ სიდიდეები დიდ მანძილებზე უსასრულობის ტოლები გახდებოდნენ, რაც შეესაბამებოდა დროის მეტ წილად ლაბარატორიიდან უსასრულო მანძილზე მყოფ ნაწილაკს. პოტენციალური ყუთის მარჯვნივ, სადაც x მიისწრაფის $+\infty$ -სკენ, D კოეფიციენტი ნულს უნდა უდრიდეს; ხოლო მარცხნივ, სადაც x მიისწრაფის $-\infty$ -სკენ, C კოეფიციენტი უნდა უდრიდეს ნულს. ამგვარად, ყოველი მხრივ მხოლოდ მაჩვენებლიანი კლებადი ფუნქცია რჩება, და თუ k საკმაოდ დიდია, ჩვენ ვღებულობთ ψ ფუნქციას, რომლის მნიშვნელობანიც სწრაფად მცირდებიან, როცა შე-

ვიქრებით არეში, რომელიც $W = V$ განტოლებით განზღვრულ, კლასიკურ საზღვარს იქეთ ძევს.

მე-5 ნახ-ის შემთხვევაში სრული განაწილების მიღება შეიძლება, თუ ყველა სამ ნაწილს შემდეგნაირად შევაერთებთ: შუაში მოთავსდება სინუსოიდა ან მისი ნაწილი, ხოლო მისგან ყოველი ორივე მხრივ — „კუდები“, რომლებიც მაჩვენებლიანი კანონით მცირდება და უსასრულობამდე აღწევენ. მე-12 სურათის a მრუდი იძლევა განაწილების შესაძლო სურათს W -ს ერთ-ერთ გარკვეულ მნიშვნელობის დროს. b მრუდზე ნაჩვენებია სათანადო $|\psi|^2$ ალბათობის მრუდი. თუ a ორდინატი ისეა არჩეული, რომ b მრუდით შემოსაზღვრული მთელი ფართი ერთის ტოლია, მაშინ იტყვიან, რომ განაწილების სურათი ნორმირებულია.



ნახ. 2.

2. ლითონებში ელექტრული დენის ბუნება უცნობი იყო წარსული საუკუნის 80-ან წლებამდე. პირობით მიღებული ჰქონდათ, რომ დადებითი ელექტრობა მიმდინარეობს მიმართულებით, რომელსაც დადებითს უწოდებდნენ, ამასთან ერთად უშვებდნენ, რომ უარყოფითი ელექტრობა იმავე დროს მიმდინარეობს შექცევით მიმართულებით. ბოლოს და ბოლოს დადგენილი იყო, რომ მოძრაობს მხოლოდ ერთგვარი ელექტრობა, სახელდობრ ნაკადი ელექტრონებისა, რომლებიც იმ მიმართულებით მიმდინარეობენ, რომელსაც დაარქვეს უარყოფითი. თუ რამოდენიმე ერთმანეთის შემხებ ლითონში გადის დენი, ატომები (უფრო სწორედ იონები, რომლებიც რჩებიან ატომებისგან, როდესაც ამათ გარე მოძრავი ელექტრონები მოშორდებიან) რჩებიან თავისი ძველ ადგილებზე, მაშინ როდესაც ელექტრონები დენის მთელ წრედში ადვილად გადადიან ერთი ლითონიდან მეორეში. ამგვარად, თუ საქმე მივა დინამიკის კლასიკური კანონების შეცვლამდე, ჩვენ მზად უნდა ვიყვეთ დაუშვათ, რომ ელექტრონებს უფრო მეტი თავისუფლება გააჩნიათ, ვიდრე ატომებს.

ჩვენ ეხლაბან ვნახეთ, რომ თუ ვისარგებლებთ, მე-(2) განტოლებიდან გამოყვანილ, განაწილების სურათებით, მაშინ კლასიკური დაყოფა დასაშვებ და აკრძალულ არეებათ ისპობა, რადგან $|\psi(x)|^2 dx$ არის ნებისმიერ dx შუალედში ნაწილაკის ყოფნის ალბათობა. ნაწილაკი, რომელიც კლასიკური არეს საზღვარს უახლოვდება და გა-

დასცდება მას, ადრე თუ გვიან დაბრუნდება უკანვე. მხოლოდ, არ არსებობს არავითარი შემოსაზღვა იმ მანძილისა, რომლის გავლაც მას შეუძლია შემობრუნების მომენტამდე კლასიკურ საზღვარზე გადასვლის სრული აკრძალვის ნაცვლად, ნაწილაკის ყოფა-ქცევა განისაზღვრება $|\psi|^2$, რომელიც e^{-2kx} კანონით კლებულობს; ესლა, ჩვენ უნდა გამოვთვალოთ ამ კლებადობის სიჩქარე. ამისთვის შემდეგი სიდიდეები დაგვჭირდება:

$$\text{პლანკის მუდმივი } h = 6,5 \cdot 10^{-27} \text{ ერგი სეკ.}$$

$$\text{ელექტრონის მასა } m = 9,0 \cdot 10^{-28} \text{ გრ.}$$

$$\text{პროტონის მასა } M = 1,6 \cdot 10^{-24} \text{ გრ.}$$

$$\text{ერთი ონგსტრემი } 1 \text{ \AA} = 10^{-8} \text{ სმ.}$$

$$\text{ერთი ელექტრონ-ვოლტი} = 1,6 \cdot 10^{-12} \text{ ერგს.}$$

$$1 \text{ eV} = 0,4343$$

ატომთა სისტემებისთვის ყველაზე მეტად ხელსაყრელი ერთეულე-ბია ონგსტრემი, როგორც სიგრძის ერთეული და ელექტრო-ვოლტი, როგორც ენერგიის ერთეული. თუ ვისარგებლებთ ამ ერთეულებით, ვიპოვით

$$2kx = 3 \cdot 10^{12} x \sqrt{m} \sqrt{V - W} \quad (6)$$

ატომის ენერგიის რომელიმე ტიპიურ მნიშვნელობის არჩევის შემდეგ ჩვენ შეგვიძლია ვისარგებლოთ ამ გამოსახვით იმისათვის რომ ვიპოვოთ თუ, როგორ იცვლის სახეს საზღვარის გადასვლის კლასიკური აკრძალვა.

მაგალითად, ვსთქვათ, რომ სხვაობა $(V - W)$ ერთი ელექტრონ-ვოლტის ტოლია და გამოვთვალოთ e^{-2kx} -ის მნიშვნელობა ორი ონგსტრემის მანძილზე კლასიკური საზღვრის იქეთ.

ჩვენ დაახლოებით ვიპოვით:

$$\text{ელექტრონთათვის, } e^{-2kx} = e^{-2,8} = 0,1,$$

$$\text{პროტონთათვის } e^{-2kx} = e^{-100} = 10^{-48}.$$

ჩვენ ვხედავთ, რომ ელექტრონებსა და პროტონებს შორის მკვეთრი განსხვავებაა. ელექტრონებისთვის $|\psi|^2$ მნიშვნელობა სწრაფად არ მცირდება, და მათი ყოფა-ქცევა სავსებით განსხვავდება იმისაგან, რასაც კლასიკური მექანიკა იწინასწარმეტყველებს. პირიქით, პროტონებისთვის პრინციპიალური აკრძალვა იცვლება არანაკლებ ეფექტიური პრაქტიკული აკრძალვით, უფრო მკვეთრით უფრო შიშვე ნაწილაკებისთვის.

სწორედ ამ მიზეზის გამო არადამაკმაყოფილობა კლასიკური მექანიკისა წინეთ არ იყო შემჩნეული. აუცილებელია შევნიშნოთ, რომ

ნაწილაკის მუხტი (2) განტოლებაში ცხადათ არ შედის. სამაგიეროდ იგი შედის ამ განტოლებაში პოტენციალური ენერჯიის V -ს საშუალებით, რადგან ყოველი ელექტრული ველში ენერჯია V დამოკიდებულია მოძრავი მუხტის სიდიდეზე და ნიშანზე.

3. ეხლა ჩვენ შეგვიძლია მოვნახოთ განაწილებები სურათი 1 და მე-3 ნახაზზე ნაჩვენები ამოცანისთვის, სადაც ნაწილაკები მუდმივი ძალის მოქმედებით ჩერდებიან. პოტენციალური ენერჯია კოორდინატების წრფივი ფუნქციაა, და მაშასადამე, მე-(2) განტოლებაში ($W-V$)-ს ნაცვლად უნდა დავწეროთ ($W-cx$), სადაც c —მუდმივი სიდიდეა. განტოლება ბესელის ფუნქციის საშუალებით ამოიხსნება. ორი წევრისაგან ჩვენ ისევ უკუვაგდებთ იმ წევრს, რომელიც უსასრულობისკენ მიისწრაფვის და გამოვიყენებთ მხოლოდ მეორე ამოხსნას, რომელიც უსასრულო მანძილზე ნულისკენ მიისწრაფვის. ამ პირობებში მიღებული ψ და $|\psi|^2$ განტოლების ფუნქციები კლასიკური საზღვრის მახლობელ, ჩვენთვის საინტერესო, არეში გამოხატულია მე-13 ნახ-ზე, V მრუდის რაღაც გარკვეული დახრისათვის რაც უფრო დაქანებულია დახრა, მით უფრო ჩქარა იცვლება λ . იქ სადაც ნაწილაკები მუხრუქდებიან, ამპლიტუდა იზრდება (როგორც უნდა მოველოდეთ მე-19 გვერდზე მოყვანილი მსჯელობის საფუძველზე), ხოლო კლასიკური საზღვრის (მე-13 ნახაზზე ვერტიკალური პუნქტიროვანი წრფით არის ნაჩვენები) იქეთ-კი, ψ ფუნქცია კლებულობს, როგორც წინანდელ ამოცანაში, მაჩვენებლიანი კანონით. წინანდებურად მცირეა ალბათობა იმ-სა რომ ნაწილაკი იქნება შორს, კლასიკურ შემოსაბრუნებელ წერტილის იქეთ. აქაც ψ -ს ექსპონენციალური კლების სისწრაფე კოლოსალურად არის დამოკიდებული ნაწილაკის მასაზე, და ადვილი მისაღებია, რომ ზემოთმოყვანილის მსგავსი გამოთვლა, მოგვცემს ნებისმიერი სახის ენერგეტიული მრუდის დროს იმავე რეზულტატს, თუ ამ მრუდს კლასიკურ შემთხვევაში მოძრაობის გარკვეული საზღვრის არსებობასთან მივყავართ.

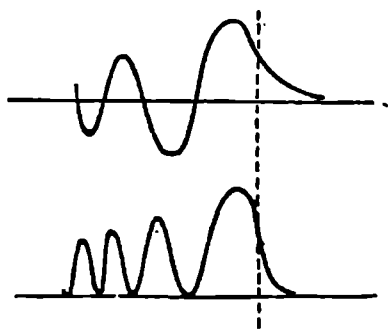
ამგვარად მივდივართ იმ დასკვნასთან რომ თავისუფლად შეიძლება თავის მინებება კლასიკური მექანიკისთვის და მე-(2) განტოლებით სარგებლობა. თუმცა დასაშვებ და აკრძალულ არეებად დაყოფას თითქოს არსებითი მნიშვნელობა ჰქონდა მატერიალურ სხეულების მდგრადობის შენარჩუნებისათვის, მაგრამ კვანტურ მექანიკაში იგი შეინაცვლება შემოსაზღვრით, რომელიც საკმაოდ მკაცრია მძიმე ატომების მიმართ. მაგრამ ელექტრონებისათვის და უფრო ნაკლებად პროტონებისათვის უშვებს მნიშვნელოვან თავისუფლებას. კვანტური მექანიკის პროგრამა შეიცავს, არც მეტი და არც ნაკლები,

გადასინჯვას ატომურ და მოლეკულიალურ ფიზიკისა ნაწილაკთა ყოფა-ქცევის განსხვავებულ კანონების საფუძველზე, რომლებიც ახალ მექანიკიდან გამომდინარეობენ.

4. შევნიშნავთ, რომ მე-3 პარაგრაფის ამოცანაში ψ განაწილება ერთი და იგივეა W -ს ნებისმიერ მნიშვნელობებისათვის. მართლაც, თუ 1-ლ ნახაზზე გავავლებთ W -ს სხვა რომელიმე მნიშვნელობის შესაბამე პორიზონტალურ წრფეს, ადვილი სანახავია, რომ ($W-V$) ყველა მნიშვნელობანი იგივე რჩებიან, მხოლოდ მარჯვნივ ან მარცხნივ გადადგილდებიან. ზეიძლება ვისარგებლოთ ამ მდგომარეობით, რომ მივიღოთ განაწილების სურათი მე-6 ნახაზის შემთხვევაში, რომლის ყოველ ნახევარში პოტენციალურ ენერგიას სწორედ ისეთი სახე აქვს, როგორც ესაა განხილულ ამოცანაში. ყოველ ნახევარში ψ მრუდი უნდა იყოს მე-13 ნახაზის ნაწილი. W -ს რომელიმე მნიშვნელობის არჩევით, მივიღებთ სათანადო საზღვრებს ორივე მხრივ; გამოვხატოთ ეს საზღვრები ვერტიკალური პუნქტიროვანი ხაზებით (14 ნახ.). თუ წავამატებთ მე-13 ნახ-ის საჭირო ნაწილს მის სარკითი გამოხატულებას, მივიღებთ 14 *a*, ნახაზს უაზრო მარყუქიკო შუაში.

თუ გადავებრუნებთ ერთ-ერთ ნაწილთაგანს რაც დასაშვებია; მივიღებთ ნახაზს 14 *b*, რომელზედაც მრუდებს ისევ არ შეუძლიათ შეერთდნენ. შრედინგერმა პირველმა დაუშვა, რომ ასეთი ამოხსნები უნდა უქუფავდოთ და რომ ამას მივყავართ უშუალოდ ენერგიის დაკვანტვასთან. მართლაც, თუ ჩვენ ავირჩევდით მე-6 ნახაზზე W -ს ცოტათი უფრო მცირე მნიშვნელობას სათანადო უფრო ვიწრო დასაშვები არეთი, მაშინ მაქსიმუმები, რომლებიც არ

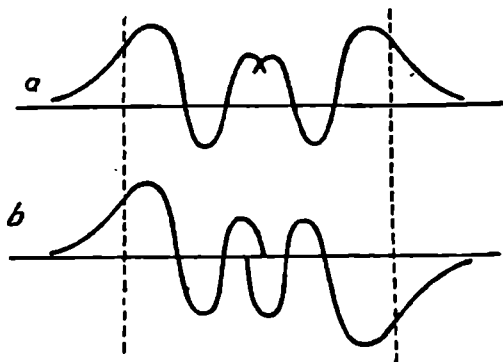
თანხვდებიან ნახ. 14*a*-ს ცენტრში ცოტათი უფრო ახლო იქნებოდნენ ერთმანეთთან, და ცხადია, შესაძლო იქნებოდა W -ს ისეთი მნიშვნელობის პოვნა, რომლის დროსაც მრუდის ორივე ნახევარი ერთდება და იძლევა განაწილების დასაშვებ სურათს. W -ს ეს მნიშვნელობა, როგორც შრედინგერმა დაუშვა, იქნება სწორედ ერთ-ერთი დასაშვები დაკვანტული დონეთაგანი. ამავე ხერხით შეიძლება



ნახ. 13.

ვიპოვოთ მეორე, უფრო მაღალი მნიშვნელობა ენერგიის, რომლის დროსაც დასაშვები არეს ექნება სივანე ზუსტათ საჭირო იმისათვის,

რომ სურ. 14 ბ ორივე ნახევრები შეერთდნენ. მე-14 ნახ-ის ორივე ნაწილის ასეთნაირი გადაადგილებით ურთიერთ მიმართ, ჩვენ, მივიღებთ ψ -ს განაწილებას დასაშვებ სურათთა უსაზღვრო რიცხვს, შესაბამისს ენერჯიინ დასკრეტულ მნიშვნელობებთან, გალაგებულს ურთიერთისგან გარკვეულ მანძილზე. ამგვარად მე-(2) განტოლების



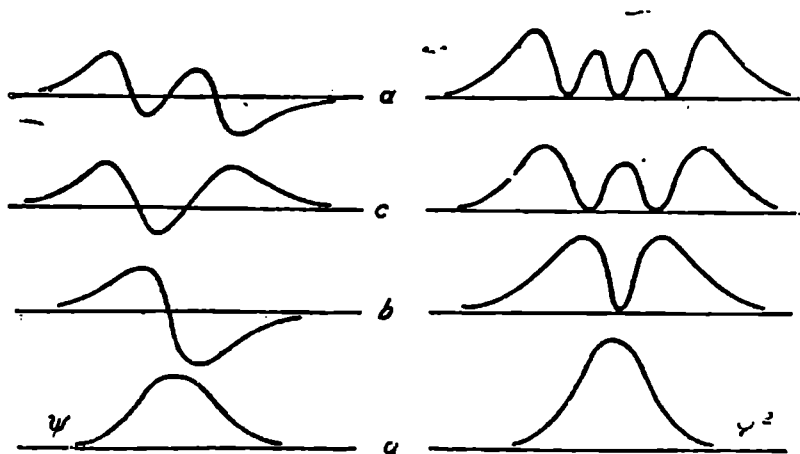
ნახ. 14.

გამოყენებას ალბათობათა განაწილების მრუდის სურათის საპოვნელად მივყავართ, და, ივანტულ დონეთა დისკრეტული რიგის დადგენამდე.

ამ დასკვნას ძირითადი მნიშვნელობა აქვს, რადგან იგი გამოსადეგია ყოველგვარი პოტენციალური ყუთისთვის V ენერგეტიული მრუდის სახისაგან დამოუკიდებლად. მოვიყვანეთ-რა მე-12 ნახ-ის მრუდი, როგორც შესაძლო ამონახსნი სწორკუთხოვან პოტენციალურ ყუთის შემთხვევაში, ჩვენ ყურადღება არ მივაქციეთ დე-ბროილის სინუსოიდისთან მაჩვენებლიანი მრუდეების ბოლოების თანხვედნის აუცილებლობას. საზოგადოთ რომ ვსთქვათ, ეს შეუძლებელია მრუდეს სადმე განტების გარეშე, რადგან ყუთის სიგრძე წინასწარვეა მოცემული, და მაშასადამე არსებობენ მხოლოდ ზოგიერთი გარკვეული ტალღის სიგრძეები, რომლებიც სწორედ მიდიან მასთან და განტების გარეშე უერთდებიან სათანადო მაჩვენებლიან მრუდეებს ყუთის ორივე მხარეს. მხოლოდ ასეთი ტალღის სიგრძეებისთვის შეიძლება ψ და $\frac{d\psi}{dx}$ ყველგან უწყვეტი იყვნენ. (ეს ყოველთვის შესრულდებოდა, რომ შესაძლო ყოფილიყო ზრდადი და კლებადი (4) მაჩვენებლიანი მრუდეებით წრფივი კომბინაციით სარგებლობა, მაგ-

რამ მაშინ ψ -ს მნიშვნელობა დიდ მანძილებზე წავიდოდა უსასრულობისაკენ და რეზულტატს არავითარი აზრი არ ექნებოდა.) მაშასადამე, ისევე, როგორც წინანდელ ამოცანაში, ენერჯიის მხოლოდ გარკვეულ, დისკრეტულ, ერთმანეთისგან რაიმე მანძილით დაშორებულ მნიშვნელობებს შეესაბამებათ დასაშვები განაწილების სურათები. ენერჯიის ყველაზე დაბალი დონე ისაა, რომელიც შეესაბამება დებროილის ტალღას, ორზე უფრო მეტჯერ დიდს პოტენციალური ყუთის სიგრძეზე; ასე რომ განაწილების სურათი შესდგება ორი მაჩვენებლიანი მრუდისაგან, რომელთა შორის მოთავსებულია სინუსოიდის ნაკვეთი—ნახევარტალღაზე ნაკლები (ნახ. 15 ა). ცხადია, არ შეიძლება ენერჯიის უფრო ნაკლები მნიშვნელობებისთვის ψ უწყვეტი მრუდის მიღება. შემდეგი, უფრო მაღალი დონე ენერჯიისა ეს ისაა, რომლისთვისაც ტალღის მთელი სიგრძე თავსდება პოტენციალურ ყუთში (ნახ. 15 ბ) და ა. შ.

დაუბრუნდეთ მე-14 სურათს, ჩვენ დავინახავთ რომ ამ შემთხვევაში უმცირესი დონის შესაბამისი განაწილების სურათები ეხლახან გარჩეულის მსგავსი იქნებიან, თუმცა ისინი სულ სხვა ფორმის პოტენციალურ ყუთს ეკუთვნიან. მე-14, ა ნახ-ზე მიღებულ უღრმეს დონეს



ნახ. 15.

აქვს იმის მსგავსი განაწილების სურათი, როგორიც 15 ა ნახ-ზეა გამოხატული; 14 ა ნახ-ზე მიღებულ შემდეგი დონეს აქვს 15, ბ-ს მსგავსი განაწილების სურათი; შემდეგ ნახ. 14, ა და 15, ც-ს განაწილების სურათები ერთმანეთის მსგავსნი არიან და ა. შ.

ψ განაწილების ფუნქციის სახე არაა დამოკიდებული პოტენციალურ ყუთის თვისებებზე, რის მიზეზიც ქვემოთ აიხსნება. ψ მრუდები ყოველთვის მსგავსნი არიან როიალის სიმის რხევის ნორმალური მრუდებისა. ულრმესი დონის ψ მრუდს არასოდეს არა აქვს კვანძები (ნახ. 15, ა); შემდეგი მრუდს ყოველთვის ერთი კვანძი აქვს (ნახ. 15 ბ); მესამეს—ორი კვანძი და n -ურს— $(n-1)$ კვანძი. მე-10 ნახაზზე გამოხატული მრუდები მართლაც წარმოადგენენ ამოხსნებს იმ პოტენციალურ ყუთისთვის, რომლის ენერგეტიული მრუდიც პარაბოლაა (ნახ. 2)—ე. ი. ჰარმონიული ოსცილიატორისთვის. მეექვსე დასაშვები ენერგეტიული დონის მრუდი მოგვაგონებს მე-11 ნახაზს, იმ განსხვავებით, რომ სინუსოიდის ამპლიტუდა არ არის ერთნაირი ყუთის გასწვრივ და ხუთი კვანძი მდებარეობს სხვადასხვა მანძილზე ერთმანეთისაგან. მხოლოდ ამით განსხვავდებიან სხვადასხვა პოტენციალური ყუთების ენერგეტიული მრუდები. ადვილი გასაგებია, თუ რატომ ასე ძალზე ჰგავენ ერთმანეთს სხვადასხვა პოტენციალური ყუთების შესაბამისი ψ მრუდები. პირველ ყოვლისა შევნიშნავთ, რომ $\frac{d^2\psi}{dx^2}$ არის მრუდის დახრის ცვლის სიჩქარე—ე. ი. სიმრუდე, და გადაწეროთ მე-(2) განტოლება შემდეგი სახით:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -\frac{8\pi^2m}{h^2} (W - V). \quad (7)$$

თუ $W > V$, მაშინ განტოლების ორივე მხარე უარყოფითია და მრუდი ყოველგან ჩაზნექილობით მიმართული უნდა იყოს x -ღერძისაკენ, რასაც მართლაც ადგილი აქვს მაგ. სინუსოიდების, კოსინუსოიდების და სხვ. მიმართ. თუ $W < V$, მაშინ, პირიქით, მრუდის ამოზნექილი ნაწილი უნდა იყოს მიმართული x -ღერძისკენ, რასაც ადგილი აქვს მაჩვენებლიანი მრუდებში. კლასიკური საზღვარი, სადაც $W = V$, გამოჰყოფს არეებს, რომლებშიც მრუდს ერთი ან მეორე ხასიათი აქვს. ამგვარად რაიმე ამოცანის ამოხსნისას, ენერგეტიული მრუდის აგებით, ჩვენ შეგვიძლია აღრიდანვე ვიქონიოთ საკმაოდ კარგი წარმოდგენა იმის შესახებ, თუ როგორია განაწილების შესაძლო სურათები.

შემდეგ თავებში შევხვდებით რა ამოცანას სისტემის ენერჯიის შესაძლო მნიშვნელობათა პოვნის შესახებ, ჩვენ ვისარგებლებთ ხსენებული ხერხებით. ძირითადად ისინი დაიყვანებიან მოცემულ პოტენციალურ ყუთში ψ მრუდების „ამორგებაზე“. ულრმესი დონისთვის

ფუნქციას არასოდეს არა აქვს კვანძი; ეს ყველაზე მეტად საინტერესო დონეა, რადგან სისტემას არ შეუძლია იმაზედ უფრო ნაკლები ენერგია ჰქონდეს, რაც ამ დონეს შეესაბამება. სისტემის მდგომარეობა შემდეგი, უფრო მაღალ ენერგეტიულ დონეზე აიწერება განაწილების იმ მრუდით, რომელსაც პოტენციალურ ყუთში ერთი კვანძი აქვს. უფრო მაღალ დონეებზე გადასვლისას სულ უფრო და უფრო მოკლე ტალღებით ვსარგებლობთ და ამავე დროს პოტენციალური ყუთი სულ უფრო და უფრო ფართოვდება. დონეთა განლაგება—ე. ი. მანძილები მათ შორის დამოკიდებულია პოტენციალური ყუთის სიდიდეზე და ფორმაზე. ცხადია, რომ ენერგეტიული V მრუდის გარკვეული სახის დროს შეიძლება მოხდეს ენერგიის დონეების დალაგება ერთმანეთისაგან ტოლ მანძილებზე. ამას მართლაც ადგილი აქვს ჰარმონიული ოსცილიატორის შემთხვევაში; ასეთი ოსცილიატორის პოტენციალური ენერგია პროპორციულია საშუალო მდებარეობიდან გადაადგილების კვადრატის: $V = \frac{1}{2} \alpha x^2$. ენერგიის შესაძლო მნიშვნელობანი, რომელთაც შეესაბამებიან, მე-15 ნახ-ზე გამოხატული განაწილების სურათები, განისაზღვრებიან ფორმულით

$$W_n = \left(n + \frac{1}{2} \right) \frac{h}{2\pi} \sqrt{\frac{\alpha}{m}}, \quad (8)$$

სადაც n სხვადასხვა დონეებისთვის მთელ დადებით მნიშვნელობებს: 0, 1, 2, ... მიიღებს და ეწოდება კვანტური რიცხვი. ამგვარად, დონეები თანაბრად არიან განაწილებული და ორ მომდევნო დონეთა შორის

$$\text{სხვაობა ტოლია } \frac{h}{2\pi} \sqrt{\frac{\alpha}{m}}.$$

მეორე მხრივ, მე-7 ნახ-ზე პოტენციალური ყუთის სივანე პირველად ნელა იზრდება, ხოლო შემდეგ ჩქარა და, ბოლოს, უსასრულობისაკენ მიისწრაფის; მაშასადამე, პირველად დონეები ერთმანეთისაგან დიდ მანძილებზე განლაგდებიან, ამალღების მიხედვით ახლოვდებიან და ბოლოს, იკრიბებიან რაიმე ზღვართან.

პირველი თავის ბოლოს ჩვენ ყურადღება მივაქციეთ იმ გარემოებას, რომ ატომებში ენერგეტიული დონეები ერთმანეთისაგან თითქმის ასჯერ უფრო დიდი მანძილებით არიან დაშორებული, ვიდრე მოლეკულებში. ამიტომ ატომში ელექტრონის ან მოლეკულაში ატომის აღწერისათვის ჩვენ შეგვიძლია გამოვიყენოთ იმის მსგავსი განაწილების მრუდეები, რომლებიც მე-15 ნახ-ზეა გამოხა-

ტული, მხოლოდ, ამასთან ერთად, მათი ტალღები დიდად განსხვავებული იქნებიან, რადგან ტალღის სიგრძის დამოკიდებულება ნაწილაკის მასისაგან განისაზღვრება $\lambda = \frac{h}{mv}$ თანადობით. როგორც

იქნება ამ შემთხვევაში მანძილი ენერგეტიულ დონეთა შორის, რომელთაც განაწილების ეს სურათები შეესაბამება? დავამტკიცოთ რომ დონეთა შორის მანძილების სიდიდეებს დაახლოებით სწორი მნიშვნელობა აქვთ. ელექტრონთა დონეებისთვის, ის დე-ბროილის ტალღის სიგრძეები, რომლებიც 2—3 ჯერ განსხვავდებიან ერთმანეთისაგან უნდა შეესაბამებოდნენ ენერჯიის იმ მნიშვნელობებს, რომლებიც რამოდენიმე ელექტრონ-ვოლტით განსხვავდებიან. ვთქვათ 3 Å სიგანის მქონე ატომურ ყუთში მოთავსებულ ელექტრონის ნახევარი ტალღა $\frac{\lambda}{2} = 3 \cdot 10^{-8} \text{ cm}$ და განვსაზღვროთ კინეტიური ენერჯიის სიდიდე

(1) ფორმულის საშუალებით:

$$(W - V) = \frac{h^2}{2m\lambda^2} = 5 \cdot 10^{-12} \text{ ერგს} = 3 \cdot \text{ელ-ვოლტს.}$$

რაც შეეხება პროტონებს და უფრო მძიმე ნაწილაკებს, მათთვის ენერგეტიული დონეები უფრო ახლოს იქნებიან ერთმანეთთან მაშინაც კი, როცა პოტენციალური ყუთის სიგანე გაცილებით ნაკლებია.

5. ეხლა საჭიროა გადასვლა ამ მეთოდების განზოგადობაზე სამ განზომილებიან ამოცანებისთვის. კიდევ ერთხელ განვიხილოთ 1 ნახ. ამოცანა. 1 ნახ-ზე ჩვენი ნაწილაკი ავიდა Q წერტილის შესაბამე სიმაღლეზე, რომლისთვისაც $W - V = 0$; ეს იმიტომ მოხდა, რომ ნაწილაკი, როგორც ჩვენ შევთანხმდით ვერტიკალურად იყო ასროლილი. ნაწილაკი, რომელსაც იგივე ენერჯია აქვს და ვერტიკალის მიმართ კუთხით არის გასროლილი, არ შეიძლება ავიდეს იმავე სიმაღლეზე, რადგან კინეტიური ენერჯიის ნაწილი ამ დროს უკავშირდება მოძრაობის ჰორიზონტალურ შემადგენელს.

რომ ვიპოვოთ, თუ რა სიმაღლეზე ავა ნაწილაკი, აუცილებელია ენერჯიის ამ ნაწილის გამოკლება და ამ ხერხით კლასიკური საზღვარის მიღება. ψ განაწილებათა სათანადო სურათის მოძებნის მეთოდი ისეთივეა, როგორიც წინაა. x, y, z , სწორკუთხოვანი სისტემის შემთხვევაში (2) განტოლების ნაცვლად უნდა ვისარგებლოთ

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{d^2\psi}{dy^2} + \frac{d^2\psi}{dz^2} + \frac{8\pi^2m}{h^2}(W - V)\psi = 0, \quad (9)$$

განტოლებით, სადაც კინეტ. ენერგია

$$W - V \equiv \frac{m}{2} (\dot{x}^2 + \dot{y}^2 + \dot{z}^2), \quad (10)$$

სამ. განზომილებიანი პოტენციალური ყუთი იქნება არე, სადაც $W > V$, შემოსაზღვრული ყოველი მხრიდან აკრძალული არეთი, რომელშიც $W < V$. ახალ განტოლებისთვის გამოსადეგია იგივე მსჯელობანი, რაც მე-(2) განტოლებისთვის. განსაზღვრულ ზედაპირის შიგნით ψ განაწილების სურათს ექნება ტალღური ხასიათი, ხოლო ამ ზედაპირის გარეთ ψ კლებადია ყოველ მხრივ მაჩვენებლიანი კანონით.

რადგან დამუხტულ ნაწილაკს, მაგ. ატომის გულს, სფერული სიმეტრიის მქონე ველი აქვს ამიტომ ჩვენთვის უმთავრესად საინტერესოა სფერული პოტენციალური ყუთი. 5, 6 და 7 ნახაზებს შეესაბამებათ სამგანზომილებიანი ამოცანები, რომელთათვის V ენერგეტული მრუდეები, გამოხატულნი ამ სურათებზე, იძლევიან პოტენციალურ ენერჯიას რომელიც დიამეტრის გასწვრივ. ჩვენ არ შეივსწავლით 5 და 6. ნახაზებთან დაკავშირებულ ამოცანებს, მაგრამ შევიჩერდებით მე-7 ნახ-ზე, რომელიც დაკავშირებულია წყალბადის ატომის მეტად მნიშვნელოვან ამოცანასთან. პროტონი ჰქმნის პოტენციალურ ყუთს ელექტრონისთვის, მხოლოდ კლასიკური ელექტრონული ორბიტა უნდა შეეცვალოს წარმოდგენით განაწილების სურათზე. მიზანთა მთელი რიგისთვის ეს განაწილება შეიძლება ისეთ ელექტრონულ ღრუბლად წარმოვიდგინოთ, რომლის სიმკვრივე პროპორციულია $|\psi|^2$ -ის და სწრაფად მცირდება ყოველი მიმართულებით. ეს სამკვრივე „ალბათობათა სიმკვრივეა“, რადგანაც წყალბადის ატომში ψ განაწილების სურათი ისე უნდა იყოს ნორმირებული, რომ ზუსტად შეესაბამებოდეს ერთ ელექტრონს, ე. ი. ψ მნიშვნელობა ისე უნდა ავირჩიოთ, რომ ინტეგრალი მთელ სივრცეზე ერთს უტოლდებოდეს:

$$\int |\psi|^2 d\tau = 1. \quad (11)$$

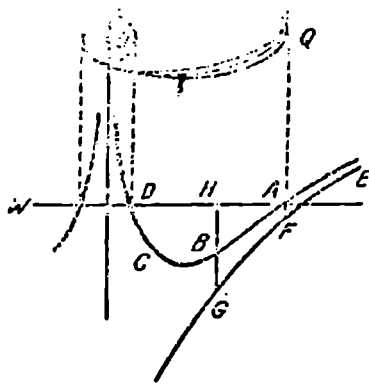
დრო გამოშვებით ელექტრონი დიდ მანძილებით შორდება გულს, მაგრამ ძლიერ მცირეა ალბათობა იმისა, რომ ელექტრონი იმყოფებოდეს იმ მოცულობის საზღვარს იქეთ, რასაც ჩვეულებრივ ატომის მოცულობად ვთვლით. თუ $|\psi|^2$ -ს გავამრავლებთ ელექტრონის e -მუხტზე მაშინ ღრუბელი შეგვიძლია წარმოვიდგინოთ, როგორც განაწილება ელექტრობის, რომლის სრული რაოდენობა მთელ სივრცეში e -ს ტოლია. (11) ფორმულის თანახმად ნორმირების დროს $|\psi|^2$ -ს ყოველწერტილში განსაზღვრული რიცხვითი მნიშვნელობა უნ-

და ჰქონდეს. განვიხილოთ, თუ რა ერთეულებში შეიძლება ამ სიდიდის გამოხატვა. ცხადია რომ მისი განზომილება უნდა იყოს მოცულობის განზომილების შებრუნებული იმისთვის რომ (11) გამოთქმა განყენებულ რიცხვს წარმოადგენდეს. ნორმირებული ψ ფუნქციის სიდიდის მიახლოებითი მნიშვნელობა ატომის ელექტრონისთვის შეგვიძლია მივიღოთ დაახლოებითი შეფასებით. თუ ატომის მოცულობა, რომლის შიგნითაც ψ მნიშვნელოვნად განსხვავდება ნულისაგან ტოლია, ვთქვათ, 10^{-22} სმ³-ის, მაშინ ერთის მიღება შეიძლება ამ რიცხვის 10^{22} სმ.⁻³-ზე გამრავლებით, ეს იქნება $|\psi|^2$ -ის საშუალო მნიშვნელობა ატომის შიგნით, ხოლო კვადრატული ძირი მისგან, 10^{11} სმ.^{-3/2} ტოლი, იქნება ψ -ს საშუალო მნიშვნელობა. სინამდვილეში ირკვევა, რომ წყალბადის ატომისულრმესი დონის შესაბამ განაწილების სურათისთვის ψ ტოლია თითქმის $5 \cdot 10^{11}$ სმ.^{-3/2} ცენტრში და ამ მნიშვნელობიდან ეცემა მაჩვენებლიანი კანონით ყოველ მიმართულებით, როგორც ეს 21 *d* ნახაზზეა ნაჩვენები.

ამ შემთხვევაში შეუძლებელი იყო მოლოდინი, რომ ψ ფუნქციას ექნებოდა 15 *a* ნახ-ზე გამოხატული სახე, რადგან დადებითი გული მოთავსებულია პოტენციალური ყუთის ცენტრში. ელექტრონის ღრუბლის ეს უმარტივესი სახე, რომლის თვალსაჩინო გამოხატულება მე-10 ნახ-ზეა მოცემული, ძალიან განსხვავდება კლასიკური ორბიტისაგან, რომელიც ელექტრონის მოძრაობას განსაზღვრული სიბრტყით შემოფარგლავს. უმეტეს შემთხვევებში ψ განაწილების სურათები, რომლებიც აღვზნებულ მდგომარეობებს შეესაბამებიან დიდათ ემსგავსებიან ორბიტას, ამიტომ ვიდრე წინ წავიდოდეთ, ხელსაყრელი იქნება იმ როლის განხილვა, რომელსაც მოძრაობის რაოდენობის მომენტი თამაშობს ორბიტის აგებულებაში.

განვიხილოთ, ძველი წარმოდგენათა შენარჩუნებით, მაგალითად, მბრუნავი ელიპტიური ორბიტა. ელექტრონი არასოდეს არ უახლოვდება გულას *OP*-ზე ნაკლებ მანძილით (მე-16 ნახ.) და არასოდეს არ შორდება მას *OQ*-ზე მეტად. *r*-ის მნიშვნელობანი $r \neq OP$ და $r = OQ$ შორის *r*-ის დანაშვები მნიშვნელობანი არიან, ხოლო $r > OQ$ და $r < OP$ მნიშვნელობანი აკრძალუო არეს განსაზღვრავენ. ეს იმაზე მიგვითითებს, რომ ეფექტიურ ენერგეტიული *V* მრუდს აქვს *ABCD* მრუდის მსგავსი და არა *EFG* კულინის მრუდის მსგავსი სახე. *Q* წერტილში რადიალური სიჩქარე ნულის ტოლია, მაგრამ ნაწილაკს მაინც აქვს რალაც *AF* მონაკვეთით გამოხატული კინეტიური ენერგია. *D*-ში საზღვარის არსებობაც მოსალოდნელი იყო, რადგან გულაზე ელექტრონის დაჯახებას სწორედ *O*-ს მიმართ მოძრაობის რაოდენობის მომენტი უშლის ხელს. *r*-ის შესაძლო მნიშვნელობათა

განსაზღვრის დროს მოძრაობის რაოდენობის ამ მომენტთან დაკავშირებული კინეტიური ენერგია, უნდა გამოაკლდეს სრულ კინეტიურ ენერგიას $W-V$ -ს. თუ გავავლებთ რომელიმე ვერტიკალურ წრფეს HBG , მაშინ მონაკვეთი HG გამოხატავს სრულ კინეტიურ ენერგიას; ვთქვათ BG იყოს ბრუნვითი ნაწილი, ხოლო HB —რადიალური ნაწილი. H -ს A -სთან ან D -სთან მიახლოებისას მონაკვეთი HB მიისწრაფვის ნულისაკენ და ამგვარად A -ში ან D -ში მიიღება საზღვარი. ამ გზით ჩვენ ვღებულობთ პოტენციალურ ყუთს $ABCD$ პირველყოფილ პოტენციალური ყუთის ნაცვლად. ქვემოთ ჩვენ დავინახავთ, თუ როგორ შედის ეს იდეა საკითხის კვანტურ მექანიკური ინტერპრეტაციაში.



ნახ. 16.

6. ტუტე ლითონების Li, Na, K, Rb, Cs ატომებს წყალბადისებურნი ჰქვიათ—ყველა ისინი დადებითი ნაშთისა და ერთი, ერთადერთი, სავალენტო ელექტრონისაგან შესდგებიან. ნაშთი მთლიანად ერთ დადებით მუხტის მატარებელია, ჯადგან იგი $Z-1$ ელექტრონს შეიცავს, რომლებიც გარსჭრტყმიან Ze დადებით მუხტს. პოტენციალური ყუთი ელექტრონისთვის შეიქმნება ნაშთის მიერ და არა გულის მიერ. სავალენტო ელექტრონი დროის დიდ ნაწილს ატარებს ნაშთის გარედ, მაშასადამე ველში რომელიც თითქმის თანხვედნილია პროტონის ველთან, იმ მიზეზების გამო, რომლებიც ქვემოთ იქნება ცხადი, ამ ატომების გამოკვლევა ხელსაყრელია წყალბადის ატომის განხილვასთან ერთად მოხდეს. წყალბადისებური ატომების მიერ გამოშვებული რთული ხაზოვანი სპექტრების ასახსნელად ბორმა დაუშვა ენერგეტიულ ღონეთა რამოდენიმე სერიების არსებობისა, რომელთაგან ყველაზე მნიშვნელოვანნი ცნობილი არიან s, p და d ¹. სერიების სახელწოდებით.

¹ s, p და d ასოები ინგლისური სიტყვების „sharp“, „principal“ და „diffuse“ (მკვეთრი, მთავარი და გაშლილი) დასაწყისი ასოებია; ეს სიტყვები ადრე იხმარებოდნენ სპექტრალურ ხაზების კლასიფიკაციისთვის; ხოლო შემდეგ გადაიტანეს დონეებზე, რომლებიც, როგორც ფიქრობენ, დასაწყისს აძლევენ სპექტრალური ხ. ხეების ამ სერიებზე.

შედეგების გაწინასწარმეტყველებით, ესლავე შეიძლება დადგენა ზოგად ხაზებში თუ რა სახით მიიღებიან ამ სერიების შესაბამისი ψ განაწილებას სურათები. ჩვენ მივიღებთ φ სერიას, იმ განაწილების პოვნით, რომელიც მარტივ პოტენციალურ ყუთს (ნახ. 7) ან *EFG* მრუდს (ნახ. 16) შეესაბამება. φ დონეების მიღება შეიძლება, *ABCD* პოტენციალური ყუთის ალებით (ნახ. 16), ხოლო ψ დონეები — ისეთივე ტიპის სხვა რომელიმე პოტენციალურ ყუთში განაწილების შესწავლით.

დამატებით ნაწილში (შენიშვნა 1) მტკიცდება რომ შრედიანგერის განტოლება, თუ იგი გამოხატულია სფერულ კოორდინატებში, განცალდება სამ უფრო მარტივ განტოლებად, რომელთაგან ყოველი მხოლოდ ერთ ცვლადს შეიცავს r , θ და φ -თაგან. θ და φ -სთვის არსებულ განტოლებებში პოტენციალური ენერჯია არ შედის და, მაშასადამე, ψ ფუნქციის დამოკიდებულება კუთხეებისაგან ერთიანი იგივე იქნება ნებისმიერ ველში, რომელსაც-კი სფერული სიმეტრია აქვს. ამგვარად, თუმცა ქვემოთ მოყვანილი მსჯელობა უშუალოდ წყალბადის ატომს ეხება, მაგრამ აუცილებლად უნდა გვახსოვდეს, რომ მას გამოყენების უფრო ფართო არე აქვს.

უმარტივესი სამ განტოლებათა შორის დამატ. (5) განტოლებაა რომლის ამოხსნასაც აქვს სახე:

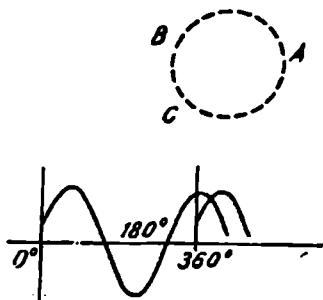
$$\Phi = A \cos m\varphi + B \sin m\varphi. \quad (12)$$

კერძო შემთხვევაში, როცა $m = 0$, ჩვენ ვხედავთ, რომ Φ ფუნქცია მუდმივია და, მაშასადამე, არ არის დამოკიდებული φ -ზე. რადგან φ -ს მნიშვნელობა უნდა იცვლებოდეს 0-დან 2π -მდე, ამიტომ საბოლოო მამრავლი ცხადია უნდა უდრიდეს $A = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}$. თუ m გან-

სხვადდება ნულისაგან, მაშინ (12)-ის თანახმად ψ -ს მნიშვნელობა იცვლება სინუსოიდალურად φ -კუთხესთან დამოკიდებულებით. ამ გარემოებიდან მნიშვნელოვანი შედეგები გამომდინარეობენ. მართლაც, ვთქვათ *ABC* (ნახ. 17) იყოს, რაიმე წრეხაზი, რომელიც იმყოფება ექვატორიალურ სიბრტყეში და რომლის ცენტრიც თანხვედება ატომის გულს. ნებისმიერად არჩეულ, A წერტილში ψ -ს ექნება გარკვეული მნიშვნელობა. ავირჩიოთ A გამოსავალ წერტილად, შემოჭიაროთ წრეხაზზე და დაუკვირდეთ ψ -ს სინუსოიდალურ ცვლას. როდესაც უკანვე A წერტილში დავბრუნდებით, ψ ფუნქციამ ცხადია, უნდა მიიღოს იგივე მნიშვნელობა, რომლითაც დავიწყეთ, რადგან ამ დროს ჩვენ მხოლოდ ორჯერ ვახდენთ ერთსა და იმავე დაკვირვებას. ამას შემოაქვს შეზღუდვა ψ -ფუნქციის შესაძლო სახეზე. მაგ. მე-17 ნახ-ზე

გამოხატულია განაწილების დაუშვებელი სახე. მრუდის ნაწილი 360° და 450° -ებს შორის, ცხადია, იგივეური უნდა იყოს 0 და 90° შორის მყოფი ნაწილის, რადგან ისინი წარმოადგენენ ერთი და იგივეს ორ აღნიშვნას. მაგრამ მე-17 ნახაზზე m -ის ნებისმიერ მნიშვნელობათათვის მრუდების შეერთება შეუძლებელია და, მაშასადამე, ისინი უნდა უარყოფოთ; მდგომარეობა ანალოგიურია იმისა, როგორც გამოხატულია მე-14 ნახაზზე. მაგრამ შეიძლება ზოგიერთი დისკრეტული დამაკმაყოფილებელი ამოხსნების პოვნა, ეს ისინი ჩქნებიან, რომლებიც შეესაბამებიან m -ის მთელ მნიშვნელობებს.

მსგავსივე მსჯელობანი შეიძლება გამოვიყენოთ იმ მრუდებზე, რომლებიც განსაზღვრავენ ψ -ს დამოკიდებულებას θ -გან (ნახ. 22). როგორც დამატებაშია ნაჩვენები, განაწილების



ნახ. 17.

დასაშვები სურათები მიიღებიან მხოლოდ მაშინ, როდესაც l მიიღებს მნიშვნელობებს $0, 1, 2, \dots$ ამას გარდა, არის კიდევ ერთი შეზღუდვა, რაც იმაში მდგომარეობს, რომ არ შეიძლება იყოს m l -ზე მეტი და $-l$ -ზე ნაკლები. როდესაც $l = 0$, მაშინ ψ ტუნქცია არ არის დამოკიდებული θ -ზე. მაშასადამე, $l = 0$ და $m = 0$ დროს ვღებულობთ სფერულ სიმეტრიულ განაწილებას. l -ის სხვა მნიშვნელობებს შეესაბამებათ, მე-17 ნახ-ზე გამოხატული მრუდის ანალოგიური, სხვადასხვა მრუდები.

ამ შეზღუდვიდან რომლის თანახმადაც l -ს შეუძლია მიიღოს მხოლოდ მთელი მნიშვნელობანი, გამომდინარეობს მოძრაობის რაოდენობის მომენტის დაკვანტვა, რომელიც ადრე ბორის მიერ იყო მიღებული. მან დაუშვა, რომ ბუნებაში მხოლოდ ისეთი ორბიტები განხორციელდებიან, რომელთათვის მოძრაობის რაოდენობის მომენტი ტოლია $\frac{lh}{2\pi}$ სადაც h — პლანკის მუდმივია, ხოლო l რომელიმე მთელი რიცხვი. თუ ელექტრონის მასას μ -თი აღვნიშნავთ, მაშინ ამ მოძრაობის რაოდენობის მომენტთან დაკავშირებული კინეტიური ენერჯია, ცხადია, ტოლი იქნება:

$$\frac{\left(\frac{lh}{2\pi}\right)^2}{2\mu r^2} = \frac{l^2 h^2}{8\pi^2 \mu r^2}$$

ეს ისევ მიგვიყვანს ჩვენ $ABCD$ პოტენციალურ ყუთის საკითხთან (ნახ. 16), რომელიც ჩვენი დაშვების მიხედვით უნდა მიგველოკროდესაც სრულ ენერგიას ვაკლებდით ბრუნვის კინეტიურ ენერგიას. თუ ბორის დაშვება სწორია, მაშინ უნდა ველოდეთ, რომ რადიალურ განტოლებაში კინეტიური ენერგია ($W-V$) შეიცვლება გამოთქმით $\left(W - V - \frac{l^2 \hbar^2}{8\pi^2 \mu r^2} \right)$. მართლაც შრედინგერის განტოლება სწორედ ასეთი სახეს ღებულობს თუ არ მივიღებთ მხედველობაში, იმას რომ l^2 -ის ნაცვლად შედის გამოთქმა $l(l+1)$. ეს სერიოზული არგუმენტია ბორის პირველყოფილი იდეის სასარგებლოდ მოძრაობის რაოდენობის მომენტის დაკვანტვის შესახებ და მიგვიითი-თებს იმაზე, რომ l -სიდიდე, რომელიც დამატების (7) განტოლებაში შედის, თამაშობს ჩვეულებრივი კუთხური (ანუ—როგორც უწოდებენ—აზიმუტალური) კვანტური რიცხვის როლს, მაშინ როდესაც m განსაზღვრავს მოძრაობის რაოდენობის მომენტის პროექციას ღერძზე. ეს თვალსაზრისი ეთანხმება განაწილების სახეს. მართლაც, თუ მოვიგონებთ ჩვეულებრივი მოძრაობის რაოდენობის შემთხვევას, რომლისთვისაც არსებობდა დამოკიდებულება $\lambda = \frac{h}{\mu v}$, უნდა გვეფიქრ-

ნა, რომ ასეთივე დამოკიდებულებას ექნებოდა ადგილი მოძრაობის რაოდენობის მომენტისთვისაც, და სინამდვილეში, ჩვენ ვხედავთ, რომ რაც უფრო მეტია m -ის ან l -ის მნიშვნელობა, მით უფრო მოკლეა ტალღის სიგრძე (ნახ. 17 და 22). როცა მე- V თავში ჩვენ განვიხილავთ, თუ როგორ უნდა აიწეროს კვანტურ მექანიკაში ნაწილაკთა ნაკადის მოძრაობა, მაშინ შევძლებთ ამ წარმოდგენის დადასტურებას, იმის ჩვენებით, რომ ყოველ ელექტრონულ მდგომარეობას აუცილებლათ უნდა მივაწეროთ უწყვეტი ღენი, რომელიც მსგავსია ელექტრონის ორბიტზე ბრუნვის და პროპორციულია l -ის.

7. ვიდრე დაწვრილებით განვიხილავდეთ განაწილების, რომელიმე სპეციალურ სურათს, ჯერ ვნახოთ, როგორ მიიღებიან ენერგეტიული დონეების სხვადასხვა სერიები. აღვნიშნოთ:

$$V + \frac{l(l+1)\hbar^2}{8\pi^2\mu r^2} = V_l \quad (13)$$

მაშინ (7) განტოლება მიიღებს სახეს:

$$\frac{d^2 F}{dr^2} = C(V_l - W) \quad (14)$$

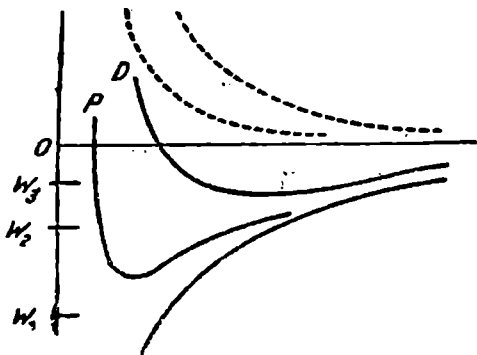
F მრუდის ხასიათი, ისე როგორც (7) განტოლებაში ($V_l - W$)-ს მიმართ და მოკიდებული. ყოველი არე, რომელშიც $V_l < W$, წარმოადგენს პოტენციალურ ყუთს, რომელშიც უნდა „მოემწყვდეს“ *F* მრუდები. როცა $l = 0$, მაშინ პოტენციალური ენერგია არის პირველ-საწყისი ენერგია იმ ელექტრონის, რომელიც იმყოფება დადებითი ნაშთის ან გულის ველში. შევნიშნავთ, რომ საკითხი ამ ველის ზუსტი სახის შესახებ პირველად გვხვდება ეხლა. ყველა რეზულტატი, რომელიც აქამდე იყო მიღებული, დამოუკიდებელია $V(r)$ -ისგან, რადგან $V(r)$ არ შედის დამატების (3) და (4) განტოლებებში. ატომურ ამოცანებში $V(r)$ ფუნქცია დაახლოებით ან ზუსტად ტოლია $-\frac{e^2}{r}$.

(13) გამოთქმის შესაბამისი მრუდის მისაღებად, შეიძლება ავადგოთ მრუდები ყოველ შესაკრებისათვის ცალკე და ორდინატები შევკრიბოთ.

თუ r ერთი ონგსტრემის ტოლია, მაშინ $\frac{h^2}{8\pi^2\mu r^2}$ ტოლია $6 \cdot 10^{-12}$ ერგის, ხოლო $\frac{e^2}{r} = 2,3 \cdot 10^{-11}$ ერგს. მე-18 ნახ-ზე ქვედა მრუდი შეესაბამება კულონურ წვერს, ხოლო ორი პუნქტიროვანი მრუდები—მეორე წვერს $l = 1$ და $l = 2$ დროს. ყოველ ამ მრუდეთაგანის ორდინატების მიმართებით კულონის ენერგიისადმი, ჩვენ მივიღებთ P და D მრუდებს $ABCD$ მრუდის მსგავსს (ნახ. 16). $l = 3$ და სხვებისთვის მიიღება მრუდები, რომლებიც D მრუდის ზემოთ არიან და ნაკლებად საჭირო მნიშვნელობა აქვთ. r -ის დიდ მნიშვნელობათათვის ყველა მრუდები ასიმპტოტიურად უახლოვდებიან r -ლერძს. ნებისმიერი ჰორიზონტალური წრფე, გავლებული r ლერძის ზემოთ, ჰკვეთს ასეთ მრუდს, როგორც მაგალითად P -ს მხოლოდ ერთხელ და წარმოადგენს თავისუფალ ელექტრონის W ენერგიას. ლერძის ქვემოთ მდებარე ჰორიზონტალური წრფე, ან სულ არ ჰკვეთს P მრუდს, ან ორჯერ ჰკვეთს მას და ამგვარად წარმოადგენს პოტენციალურ ყუთში ჩაშვადეულ ელექტრონის W ენერგიას. სივრცეში დასაშვები არის მიღება, ცხადია, შეიძლება O — წერტილის, როგორც ცენტრის, ირგვლივ ბრუნვით; ამგვარად, არე, სადაც $W > V$ წარმოადგენს სფერული შრეს; რომლის სიფართო W -ზეა დამოკიდებული.

(14) განტოლების ამონახსნების პოტენციალურ ყუთში „მორგების“ დახმარებით სადაც ყუთი P -თია აღნიშნული, ჩვენ ჩვეულებრივი ხერხით მივიღებთ დონეთა ერთობლიობას, სახელდობრ ე. წ.

p სერიას. განაწილებათა სურათების ამ ერთობლიობას ექნება ისეთივე თვისებები, როგორც მე-4 პ-ში აღწერილ განაწილებას ჰქონდა; ყველაზე ღრმა p დონის შესაბამისი განაწილების სურათი, მსგავსია მე-15 ნახ-ის a მრუდის. p -ს შემდეგი უფრო მაღალი დონის ფუნქცია იქნება (როგორც მე-15 ნახ-ის b მრუდზე) r -ის ერთ-ერთ რაიმე მნიშვნელობისთვის ყუთის შიგნით ნულის ტოლი, ხოლო რადგან ამას ადგილი აქვს კუთხეებისაგან დამოუკიდებლად, $\psi = 0$ ერთ-ერთი რადიუსიანი სფეროს მთელ ზედაპირზე. P -ს შემდეგი დონისთვის (ნახ. 15-ის c მრუდი) ψ ფუნქცია ნულის ტოლი იქნება r -ის ორი მნიშვნელობისათვის ყუთის შიგნით.



ნახ. 18.

და, ამგვარად, იარსებებს ორი სფერული კვანძითი ზედაპირი და ა. შ. იგივე შენიშვნები გამოდგება D -თი აღნიშნულ პოტენციალურ ყუთისთვისაც; ყველაზე ღრმა d დონეს არ ექნება სფერული კვანძითი ზედაპირი და ა. შ.

$l = 0$ დროს ჩვენ ვღებულობთ პირველსაწყის კულონურ სფერულ ყუთს (ნახ. 7). 16 ნახ-ის საწინააღმდეგოდ, ამ შემთხვევაში გული მღებარეობს დასაშვები არეში და არ არის ისეთი რამ, რაც ხელს შეუშლიდა ელექტრონის ხშირ დაჯახებებს გულზე. შრედინგერის განტოლება იძლევა დასაშვებ განაწილების სურათთა რიგს, რომლებიც შეესაბამებიან განსაკუთრებით მნიშვნელოვან s სერიას, რომელსაც, როგორც დავინახავთ, წყალბადის ატომის ჩვეულებრივი ძირითადი დონეც მიეკუთვნება. ამ დონეებისათვის, რომლებიც $l = 0$ შეესაბამებიან, მოძრაობის რაოდენობის მომენტი უდრის ნულს; ელექტრონი მოძრაობს რომელიმე დიამეტრის გასწვრივ, რომელიც პირდაპირ გაივლის გულაში.

ჩვენ ვნახავთ, რომ s , p და d არიან უბრალოდ სახელები იმ დონეების, რომელთათვის $l = 0$, $l = 1$ და $l = 2$. ამას გარდა არსებობენ უფრო ნაკლებად მნიშვნელოვანი სერიები, შესაბამისნი $l = 3, 4$ და სხვების.

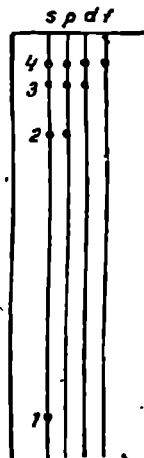
განხილვის გასაადვილებლად, მე-18 ნახ-ზე ნაჩვენებია W -ენერჯი

გვის სამი კერძო მნიშვნელობა. W_2 -ის მახლობელ ენერგიებისთვის ჰორიზონტალური წრფე ჰკვეთს მხოლოდ კულონურ მრუდს და p მრუდს; ამ არეში მხოლოდ s და p დონეებია შესაძლო. W_3 -ის მახლობლად d დონეებიცაა შესაძლო, W_1 -ის მახლობლად მხოლოდ s დონეები შეიძლება; მართლაც ამ არეში შეიძლება ატომის მხოლოდ ერთი დონე—ულრმესი დონე; განაწილების შესაბამისი სურათი ჩვენ უკვე ვახსენეთ მე-5 პ-ში. ამგვარად, ნორმალური ძირითადი დონე ყოველი წყალბადისებური ატომისათვის s დონეა. პირველი ალგზნებულ დონე იქნება ან s -ის მეორე დონე ერთი სფერული კვანძითი ზედაპირით, ან პირველი p დონე, იმისგან დამოკიდებით, თუ რომელი მათგანია უფრო ღრმა; ტუტიან ლითონების ატომებში პირველი p დონე უფრო ღრმა არის ვიდრე s -ის მეორე დონე. მომდევნო უფრო მაღალი დონე, მათ შემდეგ, იქნება მეორე p დონე ან მესამე s დონე ან პირველი d დონე და ა. შ. ყველა შემდეგი დონეები იმყოფებიან ამ დონეებსა და ენერგიის, იმ ზღვარული ენერგიის შესაბამ დონის შორის, რომლის დროსაც ელექტრონი თავისუფლდება (ჰორიზონტალური ღერძი მე-18 ნახ-ზე). ეს ზღვარული ენერგია ჩვეულებრივ ნულად მიიღება, რომლიდანაც აითვლებიან ატომის დონეთა უარყოფითი ენერგიები. უარყოფითი ენერგია ულრმესი კვანტური მდგომარეობისთვის ათვლილი ამ ნულიდან, ცხადია, წარმოადგენს ატომის საიონიზაციო პოტენციალს.

წყალბადისებურ ატომებში დადებითი ნაშთი ჰქმნის პოტენციალურ ყუთს სავალენტო ელექტრონისთვის, რომელიც $-\frac{e^2}{r}$ -ისაგან განსხვავდება სიდიდით, რაიც ყოველი ელემენტისთვის დამახასიათებელი მნიშვნელობის არის. მაშასადამე ყოველი ელემენტისთვის გვაქვს დონეთა რაიმე სისტემა, რომელიც მოცემულ სახის ატომისთვის დამახასიათებელ ენერგიის მნიშვნელობებს შეესაბამება. საიონიზაციო პოტენციალს და ალგზნებულ დონეების ენერგიებს აქვთ ელემენტისათვის დამახასიათებელი მნიშვნელობა. მაგრამ თვისობ-



ნახ. 19.



ნახ. 20.

რივი განხილვა მე-18-ნახ-ის გამოსადეგია ყველა ატომისათვის და ამიტომ, ადვილი გასაგებია, თუ როგორ მიიღება დონეთა სისტემა, მაგ. მე-19 ნ-ზე გამოხატულ სისტემის მსგავსი; უკანასკნელი 0-დონეთა იმ ემპირიული სქემის ნაწილია, რომელიც საშუალებას გვაძლევს აეხსნათ ნატრიუმის ოპტიური სპექტრის ნებისმიერი ხაზი. მასშტაბი ვოლტებშია მოცემული და ყოველი მცირე წრე ენერგეტიულ დონეს გამოხატავს. ულტრამეტი დონე არის 1 *s* დონე, და ჩვენ ვხედავთ, თუ როგორ წარმოიშებიან მიმდევრობით, ენერჯის უფრო მაღალ მნიშვნელობებისათვის, *p*, *d* და *f* ტერმები—პირველად მიდის *p* დონე, შენდეგ *d* და ბოლოს *f*, როგორც მე-19 ნახაზიდან სჩანს. ბევრი ზედა დონე მე-19 ნახ-ზე ნაჩვენებია არ არის.

მე-4 პარაგრაფის ამოცანებში ენერჯის ყოველ მნიშვნელობას შეესაბამებოდა ψ -ს ერთად-ერთი განაწილების სურათი. მაგრამ ჩვენ აქ ვხედავთ, რომ გულის განსაკუთრებული სახის ველის შედგენით, შესაძლოა შემთხვევა, როდესაც *p* დონე თანაემთხვევა მეორე *s* დონეს; მაშინ ენერჯის ერთ შესაძლო მნიშვნელობას შეესაბამება ψ -განაწილების ერთზე მეტი სურათი. ასეთ თანხვედრას მართლაც აქვს ადვილი წყალბადის ატომის შემთხვევაში. მასში თანხვედებიან არა მარტო ეს დონეები, არამედ მათ გარდა მესამე *s* დონე, მეორე *p* დონე და პირველი *d* დონე და ა. შ. დონეთა მთელ სქემაში, როგორც მე-20 ნახ-ზეა ნაჩვენები. ეს სისტემატიური თანხვედენა თვისებაა იმ ველის, რომელიც შებრუნებულ კვადრატთა კანონს ემორჩილება; შრედინგერის განტოლებით განსაზღვრული შესაძლო დონეები, ეთანხმებიან მე-20 ნახ-ზე გამოხატულ დონეთა ემპირიულ სქემას.

ტუტე მეტალთა ატომების სავალენტო ელექტრონის შემთხვევაში ატომის ველის გადახვევა შექცეულ კვადრატთა კანონიდან, როგორც ეს ნაჩვენებია მე-19 ნახ-ზე, სავსებით სპობს სხვადასხვა *l*-ის მქონე დონეების თანხვედრას. მაგრამ ის გავლენას არ ახდენს სხვადასხვა *m*-ის მქონე დონეების თანხვედენაზე.

ზემოთ უკვე აღვნიშნავდით, რომ *m* კვანტური რიცხვისთვის შემოტანილი შეზღუდვა, მდგომარეობს იმაში, რომ იგი უნდა იყოს მთელი რიცხვი, არა უმეტესი *l*-ისა და არანაკლები —*l*-ის. *p* დონეებისთვის, რომელთათვისაც *l* = 1, *m* კვანტური რიცხვს შეიძლება ჰქონდეს სამი მნიშვნელობა: 1, 0 — 1 და ყოველ ამ მნიშვნელობათაგანს შეესაბამება ψ -ს სხვადასხვა განაწილების სურათები, როგორც წყალბადისათვის მე-10 ნახაზზეა ნაჩვენები.

ეს სამივე სურათი შეესაბამება ენერჯის ერთსა და იმავე შესაძლო მნიშვნელობას, ტუტე ლითონთა ატომებშიც-კი. *d* დონეებისთვის,

რომელთათვისაც $l = 2$, m რიცხვს შეუძლია მიიღოს მნიშვნელობანი: 2, 1, 0, -1, -2 და, ამგვარად, ყოველ დონეს შეესაბამება ზუთი სხვადასხვა განაწილების სურათი. როდესაც ატომი მოთავსდება ძლიერ ელექტრულ ან მაგნიტურ ველში, მაშინ პოტენციალურ ყუთს ელექტრონისათვის უკვე აღარა აქვს სფერული ფორმა, ხოლო ამ სხვადასხვა განაწილებათა სურათების შესაბამის ენერჯიის დონეები აღარ თანხვდებიან. ატომის მიერ გამოსხივებული ან შთანთქმული სინათლის სიხშირე აღარ იქნება ერთნაირი ამ დონეებიდან სხვებზე გადასვლისას და, ამგვარად, მიიღება სპექტრალური ხაზების კარგად ცნობილი განცალგება რომლებსაც შტარკის და ზეემანის ეფექტებში ვამჩნევთ. როცა მოდებული ველის დაძაბულება მცირდება ნულამდე, ქვედონეები ისევ მოიკრიბებიან ერთ ერთად-ერთ დონეში, რომელსაც „გადაგვარებული“ ეწოდება. დონის გადაგვარების „ჯერადობა“, l -კვანტური რიცხვის შესაბამისად, ცხადია რომ უდრის $(2l + 1)$. ყველა s^1 დონეები ერთ-ჯერადი არიან, რადგან m შეიძლება მხოლოდ ნულს უდრიდეს.

წყალბადის არათანხვდენილი ენერგეტიული დონეები დაინომრებიან ქვემოდან ზემოთ ციფრებით 1, 2, 3, როგორც მე-20 ნახ-ზეა ნაჩვენები. ამ რიცხვებს ეწოდებათ მთავარი კვანტური რიცხვები და ისინი განსაზღვრავენ დონეთა ენერჯიებს (19) გამოთქმის საშუალებით, ისევე როგორც (8) განტოლება.

ამ აღნიშვნებში ქვედა p დონეს, რომლისთვისაც ψ განაწილების სურათს არა აქვს სფერული კვანძითი ზედაპირი; ეწოდება $2p$ დონე და არა $1p$, რადგან ის ეკუთვნის დონეს მთავარი კვანტური რიცხვით $n = 2$.

სწორედ ასევე ქვედა d დონეს ეწოდება $3d$ დონე.

ეს აღნიშვნებივე გავრცელდება ტუტე ლითონთა ატომების დონეებზე, თუმცა ამ შემთხვევაში დონეები უკვე არ თანხვდებიან; ამგვარად, არ არსებობს ისეთი დონე, როგორიც არის $1p$ ან $2d$.

8. ამ დონეთა სერაებს, რომ მარტო ოპტიურ სპექტრთა ახსნისათვის ჰქონდეს მნიშვნელობა, მათ არ დაეთმობოდათ ამდენი ადგილი. მაგრამ მკითხველი შემდეგ გაიგება, რომ ზემოთ მოცემული კლასიფიკაცია დონეებისა მეტად მნიშვნელოვანია ატომებისა და მოლეკულების აგებულების გასაგებად. გაცილებით ნაკლები მნიშვნელობა აქვთ დეტალებს, რომლებიც ეხებიან განაწილების სურათებს

¹ მე-9 პ-ში დავინახავთ, რომ თუ ანგარიშს გაუწევთ ელექტრონის „სპინს“, მაშინ განაწილებათა სურათების რიცხვი ორჯერ უნდა გადიდდეს.

და ენერჯიის მნიშვნელობებს, რომელთაც მოკლედ განვიხილავთ ამ პარაგრაფში. განაწილების სწრაფობის ზუსტი გამოთქმათა მიღება შეიძლება მხოლოდ ერთ ელექტრონიან სისტემებისთვის: H ატომი, He⁺ იონი, Li⁺⁺ იონი და ა. შ.

r რადიუსის და dr სისქის მქონე სფერულ შრის მოცულობა უდრის $4\pi r^2 dr$, ხოლო ელექტრონული ღრუბლის სიმკვრივე ამ შრეში განისაზღვრება ფუნქციით $[R(r)]^2$. ალბათობა ელექტრონის ყოფნისა r -დან $r + dr$ -მანძილამდე გულიდან ტოლია არა $[R(r)]^2 dr$ -ის, არამედ

$$4\pi r^2 [R(r)]^2 dr = 4\pi [F(r)]^2 dr. \quad (15)$$

ამიტომ გასაკვირი არაა, თუ $F(r)$, დამატ. (8) ფორმულის თანახმად, უფრო მარტივ განტოლებას აკმაყოფილებს, ვიდრე თვით $R(r)$ ფუნქცია. ჩვენ გვაინტერესებს ორივე, $F(r)$ და $R(r)$ ფუნქციის სახე. ადვილი საპოვნია, რომ $l = 0$ და $V_l = \frac{-e^2}{r}$ -ის დროს (14) კერძო ამოხსენს აქვს სახე:

$$F(r) = r \cdot e^{-\frac{r}{a}} \quad (16)$$

მართლაც (16)-ის ორჯერ გადიფერენციალებით r -ის მიმართ, ჩვენ ვიპოვიით:

$$\frac{d^2 F}{dr^2} = \left(\frac{1}{a^2} - \frac{2}{ar} \right) F, \quad (17)$$

ე. ი. მოთხოვნილი სახის განტოლებას, თუ

$$\frac{2}{a} = \frac{8\pi^2 \mu e^4}{h^2}$$

ფრჩხილებში მყოფი გამოთქმა ნიშნის იცვლის, $r = 2a$ რადიუსიან სფეროს საზღვარზე. ამიტომ W -ს შესაძლო მნიშვნელობა განისაზღვრება ფორმულით $\left(W + \frac{e^2}{2a} \right) = 0$. ეს არის მართლაც წყალბადის ატომის ულტრამეტი დონე:

$$W = - \frac{2\pi^2 \mu e^4}{h^2}. \quad (18)$$

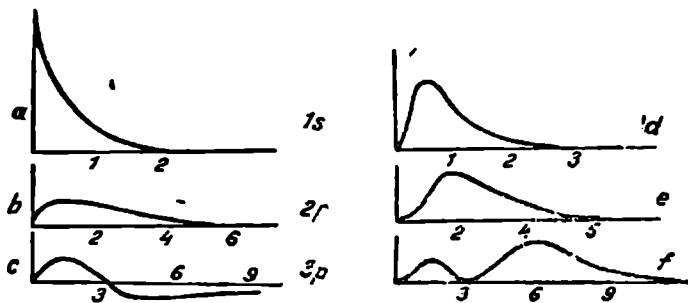
ეს ფორმულა ეთანხმება წყალბადის ატომის იონიზაციის პოტენციალის ექსპერიმენტალურ მნიშვნელობას, რომელიც 13,53 ელექტრონ-ვოლტის ტოლია.

აღზნებულ დონეთა შესაძლო ენერგიები აბსოლიუტური სიდიდით უტოლდებიან იონიზაციის პოტენციალის $1/4, 1/9, \dots$ და სხვებს, მაშასადამე, ზოგადი გამოთქმას მათთვის აქვს სახე:

$$W_n = - \frac{2\pi^2 \mu e^4}{h^2} \cdot \frac{1}{n^2}, \quad (19)$$

სადაც n მთავარი კვანტური რიცხვია. როცა n დიდია, მაშინ მანძილი დონეთა შორის, ცხადია, მცირეა და ისინი მიისწრაფიან ჩვენთვის ცნობილი ზღვარისაკენ. (19) გამოთქმა გვიჩვენებს რომ კულონურ ველში l კვანტური რიცხვი არაერთაარ როლს არ თამაშობს ენერგიის შესაძლო მნიშვნელობათა განსაზღვრისათვის, უმცირესი რაოდენობა შინაგანი ენერგიისა, რომლის შთანთქმა შეუძლია წყალბადის ატომს, ე. ი. პირველი რეზონანსული პოტენციალი (19)-ის თანახმად იონიზაციის პოტენციალის $3/4$ -ის ტოლია.

სხვადასხვა დონეების შესაბამი განაწილების სურათები, რომ ერთმანეთს შევადაროთ, განვიხილოთ თუ რა არეებშია $W > V$, სხვადასხვა მრუდებისთვის მე-18 ნახაზზე. d დონესათვის დასაშვები არე გასაგებია, რომ შეესაბამება r -ის უფრო დიდ მნიშვნელო-



ნახ. 21.

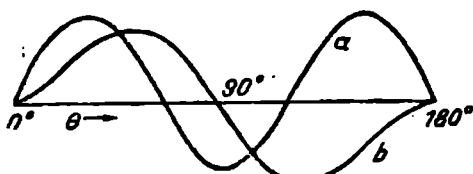
a, d და e მრუდებზე ორდინატები პროპორციულია $R(r)$ -ის, ხოლო d, e და f-ზე პროპორციულია $F^2(r)$ -ის ერთი და იმავე დონეთათვის. აბსცისთა ღერძზე გადახომილია r -ის მნიშვნელობები ონგსტრემებში.

ბებს, ვიდრე უღრმესი p დონესათვის, რომლისთვისაც იგი, თავის მხრივ r -ის უფრო დიდ მნიშვნელობებს შეეფარდება, ვიდრე $1s$ დონისთვის მოცულობა, რომელშიაც გაბნეულია ელექტრონული ღრუბელი სწრაფად იზრდება n კვანტრ რიცხვთან ერთად, რაც ეთანხმება ჩვენს წარმოდგენას ელექტროსტატიკული ენერგიის შესახებ.

მე-10 ნახ-ზე ყველა განაწილების სურათები მოყვანილი იყვნენ სათანადოთ შეცვლილ მასშტაბებში, ხოლო 21 ნახ-ზე ყოველი მრუდი „ნორმირებულია ერთთან“. კრიტიკული რადიუსი, რომელიც (17) განტოლებაში შედის ტოლია $5,3 \cdot 10^{-9} \text{ cm}$, ე. ი. დაახლოებით ნახევარი ორგანოტრემის. (16) გამოთქმა გვიჩვენებს, რომ 1s დონისათვის $F(r)$ ფუნქციას აქვს მაქსიმუმი $r = a$ რადიუსთან სფეროზე; ეს მაქსიმუმი მოსჩანს 21 ნახ-ის d მრუდზე. ამ დონისათვის $R(r)$ -ის გამოთქმას, ნორმირებულს სათანადო წესით აქვს სახე:

$$R(r) = \frac{1}{(\pi a^3)^{1/2}} e^{-\frac{r}{a}} \quad (20)$$

თუ $r = 0$ ეს გამოთქმა ტოლია $5 \cdot 10^{11} \text{ cm} - \frac{3}{2}$ -ის, რაც უკვე მე-5 პარაგრაფში იყო ხსენებული; ნულად იგი გადაიქცევა მხოლოდ უსასრულობაში. განსხვავება ერთმხრივ b და c მრუდებისა და მეორე მხრივ a მრუდის სახეში, გამოწვეულია იმ გარემოებით რომ ყველა დონეთათვის, s დონეს გამოკლებით, არსებობს აკრძალული არე კოორდინატთა სათავის მახლობლად, სადაც $W < V_1$. 3d და 4d დონეთა მრუდები წააგავენ 2p და 3p დონეთა მრუდებს, მაგრამ r -ის



ნახ 22.

დიდ მნიშვნელობათათვის. თუ მაქსიმუმი ორი ან უფრო მეტია, მაშინ მათგან კიდური ყოველთვის უდიდესია, როგორც მაგალითად, f მრუდზე, რაც რაღაც დიდი ორბიტის მაგვა-

რის არსებობაზე მიგვითითებს. დასასრულს შეიძლება რამოდენიმე სიტყვა დაუმატოთ ψ ფუნქციის მ-საგან დამოკიდებულების შესახებ. ზენ უკვე აღვნიშნავდით ფუნქციის სფერულ სიმეტრიულობის შესახებ $l = 0$ დროს. $l = 1$ დროს დამოკიდებულება მ-საგან ძალიან მარტივია, სახელდობრ ψ პროპორციულია \cos . მ-სი $m = 0$ დროს და

$\frac{1}{\sqrt{2}} \sin$ მ-სი $m = 1$ დროს. როცა $\theta = 90^\circ$, მაშინ $\cos \theta = 0$ და,

მაშასადამე, მიიღება კენძითი სიბრტყე, რომელიც ატომს შუაზე

ჰკვეთს, როგორც ამის დანახვა შეიძლება მე-10 სურ. დახატულ განაწილებათა სურათიდან $2p$ დონესათვის.

$m = 1$ დროს იგივე კვანძითი სიბრტყე სწორი კუთხითაა მიბრუნებული. $l = 2, 3$ და სხვებისთვის მიიღებინან განაწილებათა უფრო რთული მე-10 ნახ-ზე დახატული სურათები.

n -მთავარი კვანტური რიცხვიანი დონისთვის განაწილებას ყოველთვის აქვს $(n - 1)$ კვანძითი ზედაპირი. ავიღოთ, მაგალითად, $3p$ დონე. იგი მეორე დონეა და, მაშასადამე, აქვს ერთი სფერული კვანძითი ზედაპირი. ამას გარდა არსებობს ერთი კვანძითი სიბრტყეც, გამავალი გულზე, რომელიც უკვე აღნიშნული იყო ჩვენს მიერ და, ამგვარად, სულ ორი კვანძითი ზედაპირი მიიღება. იგივე ითქმის ყველა დონეების მიმართ.

მაგალითისთვის ამოვწეროთ სრული ფუნქცია ψ , შემდგარი სამი ფუნქციის ნამრავლისაგან $R(r)$. $\Theta(\theta)$. $\Phi(\varphi)$ წყალბადის ატომის $2p$ და $2s$ მდგომარეობათათვის. მათ შემდეგი სახე ჰქვით:

$$2s \quad \left. \begin{array}{l} b \left(2 - \frac{r}{a} \right) e^{-\frac{r}{2a}} \\ m = 0 \quad \frac{br}{a} e^{-\frac{r}{2a}} \cos \theta \\ m = \pm 1 \quad \frac{br}{a\sqrt{2}} e^{-\frac{r}{2a}} \sin \theta \end{array} \right\} e^{\pm i\varphi} \quad (21)$$

სადაც

$$b = \frac{1}{4\sqrt{2\pi a^3}}$$

9. კვანტური მექანიკიდან მიღებული წყალბადის ატომის მოდელი ნორმალური მდგომარეობისთვის, ისე ძალიან განსხვავდება ჩვენი წინა წარმოდგენებისაგან, რომ ჩვენ იძულებული ვართ მოვახდინოთ ატომების მაგნიტურ თვისებებზე ჩვენი შეხედულებათა გადათვლიერება და კერძოდ, სხვაგვარად ჩავატაროთ შტერნისა—და გერლახის ცდის ინტერპრეტაცია. ძველი კვანტური თეორიის იდეების მოკლედ ფორმულირება შემდეგნაირად შეიძლება:

1) ცნობილია, რომ ჩაკეტილი, ელექტროდენის მატარებელი კონტური გარეშე მაგნიტურ ველში ისე იქცევა, როგორც მაგნიტი; ამაზეა დაფუძნებული მოძრავ ხეიანი გალვანომეტრის და ხმამაღლა მოლაპარაკის მოწყობა. ელექტრონი, რომელიც დიდი სიხშირით შემოირბენს ბორის ორბიტას, წარმოადგენს ელექტროდენს და აქვს მოძრაობის

რაოდენობის მომენტი ტოლი $\frac{lh}{2\pi}$. შეფარდებას მაგნიტური მომენტისა მოძრაობის რაოდენობის მომენტთან გარკვეული მნიშვნელობა აქვს, $\frac{e}{2\mu c}$ -ს ტოლი. მაშასადამე, ყოველ კვანტურ ორბიტას აქვს მაგ-

ნიტური მომენტი, რომელიც $\frac{eh}{4\pi\mu c}$ -ს მთელი ჯერადი სიდიდეა. ამ სიდიდეს ბორის მაგნეტონი ეწოდება და ტოლია $9,2 \cdot 10^{-21}$ ელ.-სტ. ერთ.

2) ზეემანის უბრალო ეფექტის რაოდენობრივი ახსნა შესაძლო გახდა იმ დაშვებით რომ მაგნიტურ ველში ატომის შეტანის დროს ელექტრონის ორბიტის სიბრტყეს შეუძლია მიიღოს მხოლოდ ზოგიერთი გარკვეული მიმართულებანი ველის მიმართ. მაგალითად, წყალბადის უბრალო ორბიტისთვის დაუშვებს, რომ მაგნიტური დერძი ან პარალელურია ველის, ან ანტიპარალელურია. ასეთ ატომთა ერთობლიობაში ნახევარი განლაგდება ერთი მიმართულებით, ხოლო მეორე ნახევარი—მეორეთი.

3) განვიხილოთ ეხლა პატარა მაგნიტი, რომელიც არაერთგვაროვან ველშია მოთავსებული. თუ ჩრდილო პოლიუსი იმყოფება ველის უფრო მძლავრ ნაწილში, ვიდრე სამხრეთ პოლიუსი მაშინ მთლიანად მთელ მაგნიტზე იმოქმედებს რალაც ძალა. თუ სამხრეთ პოლიუსი იმყოფება ველის უფრო მძლავრ ნაწილში ვიდრე ჩრდილოეთის, მაშინ ძალა საწინააღმდეგო მიმართულებით იმოქმედებს. ამგვარად, თუ 2 პ-ში გადმოცემული წარმოდგენანი სწორები იყვნენ; მაშინ შეიძლებოდა ატომთა ერთი ნახევრის გამოყოფა მეორისაგან, თუ მათ გავატარებდით არაერთგვაროვან ველში.

ჯერ წყალბადისებურ ატომებზე, ხოლო შემდეგ ელექტროდაცლის მილიდან მიღებულ წყალბადის ატომებზე შესრულებულმა ცდამ დადასტურა ეს დაშვება. ატომთა ნაკადს ატარებდნენ ელექტრო მაგნიტის პოლიუსებს შორის მაღალ ვაკუუმში. პოლიუსებს ისეთი ფორმა ჰქონდათ მიცემული, რომ მიიღებოდა რაც შეიძლება არაერთგვაროვანი ველი. აღმოჩნდა, რომ მაგნიტური ველის ჩართვის შედეგათ ატომთა ვიწრო კონა, ორ კონად იყოფოდა, მათ შორის ვიწრო ცა-

რიელ შუალედით, როგორც ეს მოსალოდნელი იყო. მიუხედავად ამისა, აუცილებელია უარყოფა ამ ცდის პირვანდელი ინტერპრეტაციის, განსაკუთრებით იმ ატომებისთვის, რომელთა ნორმალური მდგომარეობაც s -მდგომარეობაა.

ყოველის უპირველეს წყალბადის ატომს კვანტური მექანიკის თვალსაზრისით, არა აქვს ბრტყელი ელექტრონული ორბიტა, რომელსაც შეეძლებოდა ორიენტირება მაგნიტურ ველში. აუცილებელია მისი წარმოდგენა, როგორც სფერული სიმეტრიული ელექტრონულ ღრუბლის, რომელსაც არა აქვს მოძრაობის რაოდენობის მომენტი ან მაგნიტური მომენტი. იგივე ითქმის ყველა წყალბადისებურ ატომებზე, რომლებიც ნორმალურ მდგომარეობაში იმყოფებიან. აპრობმა მაგნიტური მომენტისთვის, რომელიც ექვს გარეშე მიიღება შტერნ-გერლახის ცდაში, უნდა გამოვძებნოთ სხვა ახსნა. უკანასკნელი იმაში მდგომარეობს, რომ ელექტრონი თვითონ წარმოადგენს პატარა მაგნიტს და რომ ამ ცდაში ჩვენ ვზომავთ თვით ელექტრონის მაგნიტურ მომენტს; მისი მნიშვნელობა თანხვედება შტერნ-გერლახის ცდაში ნაპოვნ და პირველად ორბიტზე მიწერილ მნიშვნელობას— $e \cdot h$. უდრის ბორის ერთ მაგნიტონს. ამასთან ერთდროულად ჩვენს ელექტრონს მივაწერთ მოძრაობის რაოდენობის რაიმე მომენტს, რომელსაც „სპინს“ უწოდებთ და რომელიც $\frac{h}{4\pi}$ ტოლია. ატომის ყველა მდგომარეობათათვის s მდგომარეობის გარდა, როცა l განსხვავდება ნულისაგან, ატომის ნაერთი მაგნიტური მომენტი ტოლია თვით ელექტრონის „სპინური“ მომენტის და მოცემულ l -ის შესაბამ „ორბიტალური“ მომენტის ვექტორული ჯამის.

ძველ შეხედულებათა მეორე ცვლილება იმაში მდგომარეობს, რომ კვანტური მექანიკას მივყავართ მაგნიტურ ძალების ასაწერად ახალი ენით სარგებლობის აუცილებლობასთან. ჩვენ, დავინახავთ, რომ ამ წიგნში თითქმის არ მოიხსენება ნაწილაკთა აჩქარება. კვანტურ მექანიკაში ჩვენ ყოველთვის გვანტერესებს პოტენციალური და სრული ენერჯია. ველის დაძაბულება ჩვენ არ გვანტერესებს, გვანტერესებს მხოლოდ გაკვრით, როგორც ენერგეტიული მრუდის დახრა. ამ თვალსაზრისთან თანხმობით ჩვენ შეძოვფარგლავთ ჩვენ ყურადღებას მაგნიტური ენერჯიის საკითხით, არ დავინტერესდებით—რა მაგნიტურ ძალების მოქმედების შედეგად მაგნიტურ მომენტთა ორიენტაციით. თუ წყალბადის ატომს მაგნიტურ ველში მოვათავსებთ, ატომის პოტენციალური ყუთის ფორმა ოდნავ შეიცვლება. რომელიმე ჰირვანდელი ენერჯიის შესაბამი განაწილების სურათი უკვე აღარ იქნება დასაშვები და მასსადამე ენერჯიის მნიშვნელობანი გადად-

გილდებიან ველის პროპორციულ სიდიდით. მაგნიტური მომენტი წარმოადგენს სიდიდეს, რომელიც ენერგიის ცვლილებას განსაზღვრავს. წყალბადისებურ ატომებზე დაყენებული შტერნის და გერლახის ცდის საფუძველზე ჩვენ ვასკნით, რომ ყოველ H დამახულობის ველში ენერგიას შეიძლება ჰქონდეს ორი მნიშვნელობა, რომელთაგან ერთი მეტია და მეორე ნაკლებია პირვანდელ ენერგიაზე $\pm MH$ სიდიდით, სადაც მაგნიტური მომენტი M ერთი მაგნეტონის ტოლია.

თუ თვითონ ელექტრონებს აქვთ მაგნიტური მომენტი, მაშინ ერთი შეხედვით ასე გამოდის, რომ ჩვენ შეგვეძლებოდა შტერნ-გერლახის ცდის დაყენება თავისუფალ ელექტრონთა ნაკადზე ატომების, როგორც მათი მატარებელთა დაუხმარებლად. მაგრამ ელექტრონის მასის სიძვირეს თურძე მიეყავაბრთ საკმაოდ ზუსტად შემოფარგლულ ელექტრონთა კონის მიღების შეუძლებლობასთან იმ მიზეზების გამო, რომლებიც შემდეგ თავში იქნებიან გადმოცემული. მაგრამ ელექტრონები ატომის შიგნით, გულის ველში მოძრავნი, ჰქმნიან მაგნიტურ ველს და თვითონ ჰქმნიან თავისებურ შტერნ-გერლახის ცდას. ამ შიგნითა მაგნიტურ ველში ელექტრონის საკუთარ მაგნიტურ მომენტს აქვს გარკვეული ენერგია, რომელსაც დაკვანტვის შემდეგ შეუძლია $\pm MH$ -დან ერთ-ერთი მნიშვნელობის მიღება. n, l, m კვანტური რიცხვთა ყოველ ერთობლიობისათვის ჩვენ გვაქვს ეხლა ψ განაწილების სურათთა წყვილი, რომლებიც შეესაბამებიან, საერთოდ რომ ვსთქვათ (s -მდგომარეობის გამორიცხვით) არა თანხვდენილ ენერგეტიულ დონეებს. ამგვარად დონეები წყვილ-წყვილად დალაგდებიან და ყოველი მათგანის გამორჩევა შეიძლება მეოთხე სპინური კვანტური რიცხვის შემწეობით. s დონის შემთხვევაში, როგორც ვნახეთ მოძრაობის რაოდენობის მომენტი ნულის ტოლია და, მაშასადამე, არ არსებობს შინაგანი მაგნიტური ველი, რომელსაც შეეძლებოდა დონეების განცალგება. ამგვარად s მდგომარეობისათვის სპინის ეფექტი მდგომარეობს ერთი და იგივე ენერგიის მქონე ორ შესაძლო მდგომარეობის წარმოშობაში. ყველა სხვა დონეთა განცალგება იწვევს სხვადასხვა სიხშირის სპექტრალურ ხაზების წარმოშობას; უხეშად რომ ვსთქვათ, შეიძლება ამაში დავინახოთ ნატრიუმის ცნობილი D -გაორებულხაზების წარმოშობის მიზეზი.

აქ უადგილო არ არის შევეხოთ პროტონის სპინს. როცა ელექტრონის სპინი იყო აღმოჩენილი, მაშინ ზუსტად ისეთივე მოძრაობის რაოდენობის მომენტი, $\frac{h}{4\pi}$ -ს ტოლი, პროტონსაც მიაწერეს. აქედან გამომდინარეობდა, რომ პროტონს გაცილებით მცირე მაგნიტური

მომენტი უნდა ჰქონოდა, ვიდრე ელექტრონს. მაგნიტური მომენტის მექანიკურთან შედარება მიღებული იყო $\frac{e}{\mu c}$ ტოლად, სადაც μ — ნაწილაკის მასაა. მაშასადამე, პროტონის სპინის მაგნიტური მომენტი დაახლოებით 1840-ჯერ მცირე უნდა ყოფილიყო ელექტრონის მაგნიტურ მომენტზე; მაგრამ, იხ. მე-VII თავის § 3.

10. წყალბადისებური ატომების ამ ვრცელი გამოკვლევისაგან ცხადია, რომ ატომის თეორიის უმარტივესი ამოცანის ელემენტარული განხილვაც საკმაოდ რთულია. უნდა შევნიშნოთ, რომ სფერული პოტენციალური ყუთების შემთხვევაში ყოველ ენერგეტიულ დონეს ყოველთვის (ზოგიერთ გამონაკლისთა გარდა) შეესაბამება ψ რამოდენიმე განაწილების სურათი; მაგალითად, შევადაროთ იზოტროპიული ჰარმონიული ოსცილატორი, რომლისთვისაც $V = \alpha(x^2 + y^2 + z^2)$, ჰარმონიულ ოსცილატორს, რომლისთვისაც $V = \alpha x^2 + \beta y^2 + \gamma z^2$ და მაშასადამე პოტენციალურ ყუთს არა აქვს სფერული ფორმა. პირველს იმდენივე ψ განაწილების შესაძლო სურათი აქვს რამდენიც მეორეს, მხოლოდ მრავალ მათგანს ერთი და იგივე ენერგია აქვს; მართლაც, შესაძლო ენერგეტიული დონეები წინანდებურად განისაზღვრებიან (8) გამოთქმით, 29 გვერდზე, ამასთან ერთად კვანტური რიცხვი n ეხლა სამი დამოუკიდებელი კვანტურ რიცხვთა n_x, n_y, n_z ჯამია, რომელთაგან ყოველ მათგანს შეუძლია მიიღოს მნიშვნელობანი 0, 1, 2, ... n_x, n_y, n_z ყოველ კომბინაციას შეესაბამება ψ განაწილების ერთადერთი სურათი. ამ შემთხვევაში $n_x + n_y + n_z = 2$ პირობით განსაზღვრული ენერგიები შეესაბამებიან ექვს შემდეგ სურათს:

n_x	1	1	0	2	0	0
n_y	1	0	1	0	2	0
n_z	0	1	1	0	0	2

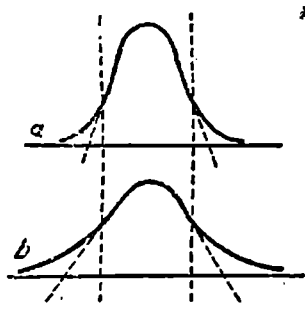
როდესაც n დიდია, მაშინ ცალკეულ ენერგეტიულ დონისთვის განაწილებათა რიცხვი დაახლოებით $\frac{n^2}{2}$ -ის ტოლია. იმ ჰარმონიულ ოსცილატორს, რომლის პოტენციალური ყუთი არაა სფერული, ამდენივე სურათი აქვს, მხოლოდ მათი ენერგიები არ თანხვდებიან ერთმანეთს.

საბედნიეროთ ატომთა და მოლეკულათა თეორიის მრავალი ამოცანა რამოდენიმედ შესაძლოა ერთ განზომილებაში იყოს შესწავლილი, და მიიღება სამ განზომილებაში ზუსტად გამოკვლეულთან თან-

ხედნილი შედეგები. ამ მიზნით აუცილებელია გავყვეთ მე-4 პ-ის მე-
თოდებს. შემდეგ მაგალითებში ჩვენ განვიხილავთ ყოველი სისტემის
მხოლოდ ქვედა შესაძლო დონეებს. ჩვენ ხშირად ვისარგებლებთ სი-
ნუსოიდის იმ თვისებით, რომ იქ, სადაც ორდინატები დიდია, მრუ-
დის დახრა მცირეა, ხოლო იქ, სადაც ისინი მცირეებია, მრუდის
დახრა დიდია.

1) განვიხილოთ ორი პოტენციალური ყუთი, რომელთაც ერთნაი-
რი სივანე აქვთ, მხოლოდ სხვადასხვა სიღრმე და შევადაროთ მათი
შესაბამი განაწილების სურათები. ცხადია, რომ იმ ტალღის სიგრძე,
რომელიც მოთავსდება მაღალ კედლებიან ყუთში (ნახ. 23, *ა*), მოკ-
ლეა, ვიდრე დაბალ კედლებიან ყუთში მოთავსებული ტალღის სიგ-
რძე (ნახ. 23, *ბ*), რადგან ამ უკანასკნელისთვის აუცილებელია მცი-
რედ დახრილი დაშვება ყოველ საზღვარზე, რომ მრუდი გადავიდეს
მაჩვენებლიან მრუდში λ -ს მცირე მნიშვნელობით.

2) მე-24 ნახ-ზე გამოხატული, ყუთის ქვედა დონის შესაფერი
განაწილების სურათი ადვილად მიიღება. მარჯვნივ, სადაც კედელი
დაბალია, λ მნიშვნელობა ნაკლები იქნება, ვიდრე მარცხნივ სადაც
($V - W$) მნიშვნელობა მეტია; მაშასადამე თუ სინუსოიდის ნაწილი
მოთავსებულია კედლებს შორის, იგი ისე უნდა გადაიწიოს, რომ და-



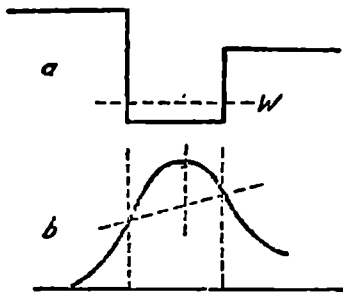
ნახ. 23.

ქანებული ნაწილი მდორეთ შეუერთ-
დეს მარჯვენა ნაწილს, როგორც ეს
24, *ბ* ნახ-ზეა. ეს განტეხვათა გარე-
შე შესაძლოა მოხდეს W -ს მხო-
ლოდ ერთადერთ მნიშვნელობის
დროს.

3) ψ -ს განაწილების სურათები
24 ნახ-ის ტიპის მარტივი პოტენ-
ციალური ყუთისთვის ჩვენთვის უკვე
ცნობილია; განვიხილოთ როგორი
განაწილების სურათები შეესაბამებიან
 $OPQRST$ ენერგეტიულ მრუდს, რო-

მელიც 24-ნახ-საგან იმით განსხვავდება, რომ $QRST$ ჯებირი საფე-
ხურიანია, ამასთან ერთად ST საფეხური QR საფეხურზე მაღლაა და
 ST და PO უსაზღვროდ გრძელდებიან შესაბამ მიმართულებით. (ეს
ჯებირი არაა ნაჩვენები სურათებზე; QR და ST -თი ჩვენ აღვნიშ-
ნავთ მის მარჯვენა მხარეზე ორ საფეხურს) QR არეში ($V - W$)
მნიშვნელობანი ნაკლებია, ვიდრე ST არეში. მაშასადამე e^{-kx} გამოთ-
ქმაში λ -ს QR არეში უფრო ნაკლები მნიშვნელობა აქვს, ვიდრე მის

იქეთ. ვთქვათ სიდიდეები უდრიან k_1 და k_2 ; ისინი (5) ფორმულით განისაზღვრებიან. რასაკვირველია, ჩვენ უფლება არა გვაქვს დაუშვათ მრუდის ნახტომის არსებობა იმ ადგილას (R ან S), სადაც $e^{-k_1 x}$ შეიცვლება $e^{-k_2 x}$ -ით. როგორ უნდა ავიცილოთ ეს? S -ის იქეთ მდებარე მრუდის ნაწილი არ შეიძლება ამისთვის გამოვიყენოთ. ამიტომ CR არესთვის აუცილებელია მრუდის მოძებნა, რომელიც შეიძლება გაგრძელდეს საკმაოდ მდორედ, ამის გაკეთება შეიძლება, თუ ვინარგებლებთ ზრდადი და კლებადი მაჩვენებელნი ფუნქციითა წრფივი კომბინაციით: ამ არეში, იმის მსგავსად, როგორიც 28 ნახაზზეა ნაჩვენები. აქ EF მრუდი წარმოადგენს $Ce^{-k_1 x}$ გამოთქმას, ხოლო $G'H'$ — $De^{k_2 x}$ გამოთქმას (D -ს მცირე უარყოფითი მნიშვნელობა აქვს, უფრო ნაკლები, ვიდრე 28 ნახ-ზე) EF და $G'H'$ ორდინატების შეკრებით მივიღებთ $J'L'$ -ის მსგავს-მრუდს, რომელსაც L' -ში უფრო მეტად დაქანებული დახრა აქვს, ვიდრე EF მრუდს F' -ში.



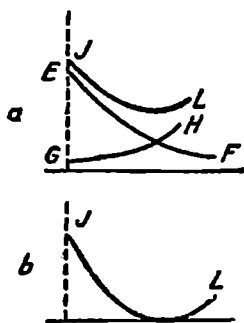
ნახ. 24.

C და D -ს მნიშვნელობათა შერჩევით, შეიძლება მივიღოთ მრუდი, რომელიც უწყვეტად გადადის ST არეს მრუდში. ამ გზით W -ს ნებისმიერ მნიშვნელობით მიიღება ისეთი მრუდი, რომელიც მდორედ მცირდება ნულამდე უსასრულობაში, მაგრამ W -ს მხოლოდ ზოგიერთი დისკრეტული მნიშვნელობანი გვაძლევენ მრუდებს, სინუსოიდაში მდორედ გადაშვალთ პოტენციალურ ყუთში.

4) აღენიშნავთ, რომ ისეთივე მეთოდით, როგორითაც ჩვენ აქ მივიღეთ e^{-kx} -ზე მეტად დაქანებული მრუდი, შეგვიძლია უფრო ნაკლებ დაქანებული მრუდის ან, უფრო მეტიც, შექცეული დახრის მქონე მრუდის მიღება. ეს ნაჩვენებია 25, a ნახ-ზე, სადაც D -სთვის მიღებულია მცირე დადებითი მნიშვნელობა, თუ D კიდევ უფრო ნაკლებია, მაშინ ψ -ს შეიძლება ჰქონდეს უმნიშვნელოდ მცირე მნიშვნელობანი მეტად დიდ მანძილებზე; მაგრამ, საბოლოოდ როცა De^{kx} შესამჩნევ სიდიდეს მიაღწევს, იგი ისევ დაიწყებს ზრდას (ნახ. 25, b).

5) თუ გადავხედავთ უკან ჩვენს მსჯელობათა გზას, მოგვაგონდება, რომ პოტენციალური ყუთი გამოხატავს დასაშვებ არეს, რომელშიაც ნაწილაკს მოძრაობა შეუძლია. ვთქვათ ეხლა 26, a ნახ. გამო-

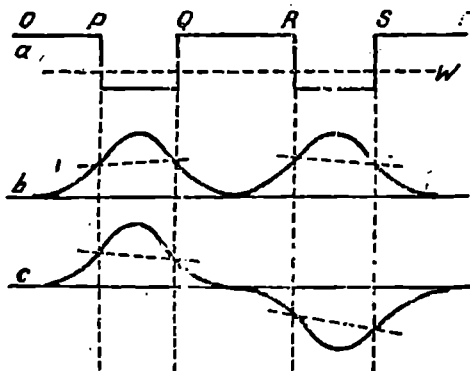
ხატავდეს ცალკეულ ნაწილაკის პოტენციალურ ენერგიას ორ ასეთ PQ და RS არეებზე გამავალ სწორის გასწვრივ. ST და PQ დაშვების თანახმად ვრცელდებიან შესაბამე მიმართულებებით უსასრულო-



ნახ. 25.

ბამდე. კლასიკურ მექანიკაში ორივე უთი სრულიად დამოუკიდებელი იქნებოდა. თუ ნაწილაკი მოთავსებული იქნებოდა მარცხენა პოტენციალურ ყუთში, მაშინ მეორე ყუთის არსებობას პირველისაგან დიდ მანძილზე არ შეეძლებოდა გავლენის მოხდენა ნაწილაკის მოძრაობაზე. სწორედ ასევე, თუ იგი მოთავსებული იქნებოდა მარჯვენა ყუთში, მაშინ მარცხენა ყუთის არსებობას არავითარი მნიშვნელობა არ ექნებოდა მის მოძრაობისთვის. პირიქით, კვანტურ მექანიკაში W ენერგიის რომელიმე შესაძ-

ლო მნიშვნელობის შესაბამი ψ განაწილების სურათი მთელ სივრცეზე ვრცელდება. ამიტომ არ შეიძლება ვილაპარაკოთ თითოეული ყუთში ცალკეული განაწილების სურათის შესახებ. ენერგიის ყოველი შესაძლო მნიშვნელობა განისაზღვრება მთელი ენერგეტიული მრუდით.



ნახ. 26.

ორივე ყუთში ისევე, როგორც ყოველი განაწილების სურათი ერთდროულად უნდა ეკუთვნოდეს ორივე ყუთს. ცხადია, რომ ისევე როგორც წინად ცალკეულ ყუთებს ჰქონდათ, ეხლა მათ ერთობლიობა-

საც ენერჯის შესაძლო მნიშვნელობათა დისკრეტული მწკრივი ექნება A და P -გან უნდა იწყებოდნენ ექსპონენციალური „კუდები“, რომლებიც დადებით ან უარყოფით უსასრულობამდე ვრცელდებიან, ხოლო $\frac{d\psi}{dx}$ -ის უწყვეტობის მოთხოვნით გამოწვეული შეზღუდვამ ისევე როგორც მე-4 პ-ში დაკვანტვასთან უნდა მიგვიყვანოს.

(7) განტოლების შესაბამისად ყოველ პოტენციალურ ყუთის შიგნით უნდა მოთავსდეს სინუსოიდის ნაწილი; ამასთან ერთად, ცხადია რომ იმ მრუდს, რომელიც ჩვენ წინა პარაგრაფში ვახსენეთ სწორედ ისეთი სახე ექნება, როგორიც აუცილებელია QR შუალა არეში იმისთვის, რომ PQ და RS -ში ჩადებული სინუსოიდები შეერთდნენ. თუ QR ჯებირი განიერია, მაშინ $|\varphi|^2$ ფუნქცია ამ არეში ნულამდე უნდა შემცირდეს, მაგრამ შემდეგში იგი უნდა გაიზარდოს, რომ უწყვეტად გადავიდეს მეორე ყუთის სინუსოიდაში; ამისთვის გამოდგება ნახ. 25, ბ-ზე გამოხატული მრუდი. თუ QR ჯებირი დაბალი და ვიწროა, მაშინ შეიძლება ავიღოთ 25, ა ნახ-ის JL -ის მსგავსი მრუდი. ამოცანა მდგომარეობს C და D -ს ისეთი მნიშვნელობათა შერჩევაში, რომელთათვისაც მრუდი ყველგან მდორე იქნება.

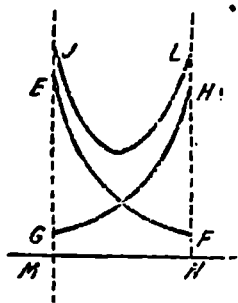
პრაქტიკულად მეტად მნიშვნელოვანია შემთხვევა, როცა PQ და RS ყუთები ერთნაირებია (მაგ. H_2^+ წყალბადის მოლეკულის იონში ორი პროტონის მიერ შექმნილი პოტენციალური ყუთები). ამ შემთხვევაში სისტემას თავისი შუა წერტილის მიმართ სრული სიმეტრია ექნება. მაშასადამე $|\psi|^2$ -ს მარჯვენა ნახევრის ყოველ წერტილში ისეთივე მნიშვნელობა უნდა ჰქონდეს, როგორიც მარცხენა ნახევრის შესაბამე წერტილში; კერძოდ, $|\psi|^2$ -ს ერთიდაიგივე მნიშვნელობა უნდა ჰქონდეს R და Q წერტილში. თუ როგორ შეიძლება ამის მიღწევა, $Ce^{-kx} + De^{kx}$ სახის ფუნქციით სარგებლობით, ცხადია მე-27 ნახ-დან, რომლებზედაც M და N წერტილები Q და R -ს შესაბამებია. De^{kx} -ის გამოშახველი QH მრუდი, წარმოადგენს EF -ის ასარკულ გამოსახულებას; მაშასადამე, ორივე მრუდის ორდინატების შეკრებით, ჩვენ მივიღებთ JL სიმეტრიულ მრუდს, რომელიც ჩვენ სწორედ გვჭირდება სინუსოიდაში მდორედ გადასასვლელად.

ვთქვათ მანძილი $QR = d$ და ვთქვათ Q წერტილში აბსცისა $x = 0$. მაშინ Q წერტილში ფუნქცია $\psi = C + D$ და C -ს და D -ს მნიშვნელობანი ისე უნდა იქნენ შერჩეული, რომ

$$D = Ce^{-kd}, \quad (22)$$

რადგან $GM = FN = Ce^{-kt}$. JL -ის მსგავსი მრუდი W ენერჯის ნებისმიერ მნიშვნელობისთვის შეიძლება შევარჩიოთ მაგრამ მხოლოდ ერთ მნიშვნელობისათვის მიიღება ისეთი სრული მრუდი, როგორც მე-26 ნახ-ზეა ნაჩვენები.

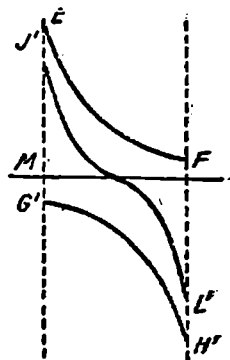
ესლა ჩვენ გველოდება წინ ის მნიშვნელოვანი მდგომარეობა რომ $|\psi|^2$ -ის სიმეტრიულობისათვის შუაწერტილის მიმართ—სრულებით არ არის აუცილებელი, რომ ψ ფუნქციას ისეთი სახე ჰქონდეს, როგორც მე-26, N ნახ-ზეა ნაჩვენები. ფუნქციას, შესაბამის წერტილებში, შეიძლება მოპირდაპირე ნიშნებიც-კი ჰქონდეს, როგორც ეს მე-26 C ნახ-ზეა, რადგან კვადრატში ამაღლებისას, სულერთია, სიმეტრიული მრუდი მიიღება $|\psi|^2$ -სთვის. JL მრუდის ნაცვლად მე-28 ნახ-ის $J'L'$ -ს მივიღებთ. აქ $G'H'$ მრუდი EF მრუდის იგივეურია, მხოლოდ შემბრუნებული ნიშანი აქვს. $J'L'$ -სახის მრუდი შესაძლოა W -ს ნებისმიერ მნიშვნელობისთვის და ჩვენ მივდივართ საკითხთან: ენერჯის თუ როგორ მნიშვნელობას შეესაბამება ასეთი მრუდით გამოხატული შესაძლო განაწილების სურათი. 27 და 28 ნახ-ების შედარებისას, ჩვენ



ნახ. 27.

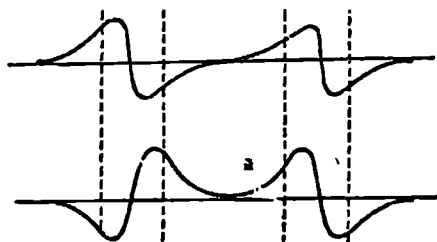
დავინახავთ, რომ $J'L'$ მრუდის დახრა J' წერტილში ცოტათი მეტია, ვიდრე EF -ის დახრა E წერტილში, მაშინ როდესაც JL -ის დახრა J წერტილში ცოტათი ნაკლებია. დახრათა ეს განსხვავება, გასაგებია, რომ დამოკიდებულია GM -ის ან $G'M$ -ის EM -თან შეფარდებაზე; იგი მეტად მცირეა, როცა QR ჯგებირები ყუთებს შორის მცირეა.

როდესაც გვინდა ψ მრუდის დასრულება, J ან J' -თან სინუსოიდის ნაწილის შეერთებით, ჩვენ გველოდება ისეთივე ამოცანა, როგორც მე-23 ნახ-ზე იყო. ჩვენ ვხედავთ, რომ სინუსოიდა რომელიც მორგებული უნდა იქნეს J -სთან, თავის ამოხვეტილობასთან ცოტათი ახლოს უნდა იქნეს შეერთებული, ხოლო სინუსოიდა, რომელიც მორგებული უნდა იქნეს J' -სთან, ცოტათი შორს უნდა შეუერთდეს; ამასთან ერთად ψ ფუნქციის მნიშვნელობა Q წერტილში ცო-

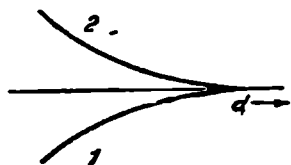


ნახ. 28.

ტათი მეტი აღმოჩნდება ვიდრე P წერტილში (26 ნახ-ის b მრუდი), ან ცოტათი ნაკლები ვიდრე P წერტილში (c მრუდი), როგორც ამას გვაჩვენებენ დახრილი პუნქტიროვანი ხაზები 26 ნახ-ზე. PQ უთ-ში ჩვენ ტალღის სიგრძის ცოტათი შემცირებული ნაწილი უნდა მოვათავსოთ, ვიდრე RS უთვის არ ყოფნის შემთხვევაში, ან შებრუნებით (c მრუდი), ტალღის სიგრძის ცოტა უფრო დიდი ნაწილი. რადგან PQ და RS პოტენციალური ყუთების სიგანე წინასწარ არის მოცემული, აქედან გამომდინარეობს, რომ შრედიფერის განტოლების ამ ორ შესაძლო ამონახსნს პოტენციალურ ყუთში დე-ბროილის ტალღის სხვადასხვა სიგრძე აქვს. ის λ ტალღა, რომელიც



ნახ. 29.



ნახ. 30.

JL ტიპს, უნდა „მოვარგოთ“ ცოტათი გრძელია, ვიდრე JL' ტიპის შესაფერისი λ ტალღა. მაგრამ ტალღის სიგრძეთა ეს სხვაობა ნიშნავს მოძრაობის რაოდენობის და კინეტიური ენერჯის მცირე განსხვავებას. სხვა სიტყვებით, ჩვენ გვაქვს ახალ ენერგეტიულ დონეთა წყვილი. მე-26, b ნახ-ის სიმეტრიული განაწილების სურათი, გასაგებია, რომ შეესაბამება წყვილის ქვედა დონეს, ხოლო ანტისიმეტრიული განაწილების სურათი (c მრუდი) — ზედას. ამ გარეგულ—დონეთა ენერჯიები მეორე ყუთის არ არსებობისას ყუთის ქვედა მდგომარეობის ენერჯის ორივე მხრივ მდებარეობენ. პირველსაწყისი ძირითადი დონე, მახლობლად მეორე ყუთის არსებობის გამო, ორ დონეთა განცალდება. ეს შეეხება ნებისმიერ პირველ საწყის დონეს. პირვან-დელი პირველი აღგზნებული დონე, რომლისთვისაც განაწილების სურათს ერთი კვანძი აქვს ყუთში, განცალდება ორ დონეთა, რომელთა განაწილების სურათებიც მე-29 ნახ-ზეა გამოხატული. იმავე მიზეზით, რაიც წინადაც იყო, განაწილების ანტისიმეტრიულ სურათს ისევე დე-ბროილის ტალღების მოკლე სიგრძე აქვს და ამ გვარად ორ განცალდებულ დონისაგან ის ეკუთვნის ზედა დონეს.

შემდეგ თავებში ჩვენ უნდა განვიხილოთ განაწილების ამ სურათ-
თა ინტერპრეტაცია და ვისარგებლოთ იმ მნიშვნელოვანი მდგომარეობით, რომ გაორებული-დონეები ერთმანეთს შორდებიან მაჩვენებლიანი კანონით, როცა ყუთებს ვაახლოებთ (იხ. ნახ. 30, რომელზედაც ნაჩვენებია ენერჯის დამოკიდებულება ატომებსშორის მანძილისაგან). მე-27 და მე-28 ნახაზიდან ცხადია, რომ ამ განცალების სიდიდე, ყუთებს შორის ნებისმიერი მანძილისთვის დამოკიდებულია *FN* და *EM*—ფარდობით სიდიდეზე, ე. ი. ყუთების მიახლოებისას განცალება უკვე ისეთ *d* მანძილზე იქნება მნიშვნელოვანი, რომელზედაც e^{-kd} უკუგდება აღარ შეიძლება. თუმცა სიმარტივისთვის მე-26 ნახ-ზე აღებული იყო სწორკუთხოვანი პოტენციალური ყუთები, მაგრამ, ძირითადი რეზულტატი სრულებით დამოუკიდებელია ყუთების ფორმისგან.

**განუზღვრელობის პრინციპი. მრავალ ნაწილაკთა
უმეცველი სისტემები. ელექტრონული კონფიგურაციები და ელემენტთა კერიოლული სისტემა.
მეტალები.**

1. იმისათვის, რომ ψ -ს განაწილებათა სურათზე, უკეთესი წარმოდგენა მივიღოთ, საჭიროა მისი განმსაზღვრელი ფაქტორების უფრო დაწვრილებით შესწავლა. ყველაზე ზუსტი იდეალური დაკვირვება, რისი წარმოდგენაც კი შეგვიძლია, იქნებოდა ისეთი, დაკვირვება რომელშიც მხოლოდ ერთი დაცემულ სინათლის კვანტით ვისარგებლებდით. ν სიხშირიანი სინათლის სხივში ყოველი კვანტს აქვს

მოძრაობის რაოდენობა ტოლი $\frac{h\nu}{e}$ -სი, სადაც h —პლანკის მუდმივაა, ხოლო e —სინათლის სიჩქარე. სწორედ ეს მოძრაობის რაოდენობა იწვევს უკუგდებას ყოველი მცირე ნაწილაკისა, რომელსაც-კი კვანტი შეეხლება. ნაწილაკის მოძრაობის ეს სახეცვლილება, რომელზედაც ჩვენ მე-II თავში ავლნიშნავდით, აუცდენელია, და ჩვენ განსაკუთრებით არ ვიზრუნებდით უკუგდების სიდიდეზე, რომ შესაძლო ყოფილიყო მისი ზუსტი აღრიცხვა; იმიტომ რომ ამ შემთხვევაში არ იქნებოდა, საჭირო უკუგდების დახასიათება, როგორც რალაცნაირ განაწილების, დამოუკიდებლად პროცესის კანონების ჩვენი ცოდნისაგან. როდესაც კვანტი, ნაწილაკთან შეხლისას, მ კუთხით გაიფანტება მაშინ უკუგდების მოძრაობის რაოდენობა განისაზღვრება (23) (იხ. ქვემოლ) დამოკიდებულებით.

ერთადერთი კითხვა მდგომარეობს იმაში, თუ რამდენად ზუსტად შეგვიძლია ჩვენ მ კუთხის გაზომვა? ამას მივყავართ იმ პირობათა გამორკვევასთან, რომელთა საშუალებითაც ჩვენ შევძლებთ გაფანტული კვანტის დაჭერას იდეალურ ულტრა-მიკროსკოპში.

შეიძლება შევეცადოთ ნაწილაკის სიჩქარის გაზომვას, განვსაზღვრავეთ-რა, თუ როგორი მანძილი გაიარა მან დროის მეტად მოკ-

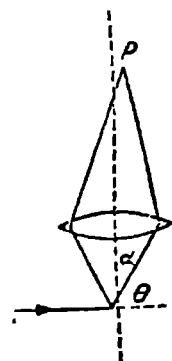
ლე შუალედში. ამ მიზნით ჩვენ ორი დაკვირვება უნდა მოვახდინოთ; ორივე მათგანში უნდა ვისარგებლოთ ერთი კვანტით, რომელიც x ღერძის გასწვრივ ეცემა; ეს ღერძი მიკროსკოპის ღერძის მიმართ სწორკუთხოვან მდებარეობაშია. თუ კვანტი Θ კუთხით გაიფანტება, მაშინ ნაწილაკი მიიღებს მოძრაობის რაოდენობას, რომლის შემადგენელი x ღერძზე ტოლია.

$$\frac{h\nu}{c} (1 - \cos \theta). \quad (23)$$

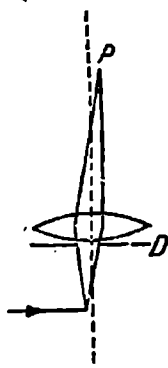
მიკროსკოპის გარჩევის უნარიანობის თეორიას, დამუშავებულს მე-XIX საუკუნეში, მიეყაერთ იმ კარგად ცნობილ ფაქტთან, რომ საკმაოდ მკვეთრი გამოხატულების და დიდი გარჩევის მისაღებათ უნდა მოვიხმაროთ რაც შეიძლება დიდი აპერტურა (კუთხე, რომლითაც მოსჩანს ობიექტივის ლინზა იმ წერტილში, სადაც დაკვირვებადი საგანი იმყოფება), რადგან უმცირესი მანძილი, რომლის გარჩევა შესაძლოა, განისაზღვრება ფორმულით:

$$\Delta x = \frac{c}{v \sin \alpha}, \quad (24)$$

სადაც α — აპერტურის კუთხეა, ხოლო v — იმ სინათლის სიხშირე,



ნახ. 31



ნახ. 32

რომელიც განათებისთვის იყო გამოყენებული. მაგრამ დიდი აპერტურა — ეს სწორედ ის არის რაც ჩვენ უნდა თავიდან აგვეცილებინა. მარალაც, 32 ნახ. შემთხვევაში, სადაც აპერტურა ძალზე შემცირებულია, სინათლის ყოველ კვანტს, რომელსაც ჩვენ უკვირდებით და რომელიც P -ს აღწევს, უნდა გაეარა D დიაფრაგმის პატარა ხვრელში და მაშასადამე, კუთხე θ ცნობილია საკმაო სიზუსტით. 31-ნახ. შემთხვევაში კი კვანტს, რომელიც P -ში მოექცევა შეუძლია მოძრაობა აპერტურის დიდი კონუსის შიგნით ნებისმიერი გზით.

რადგან $\cos \theta$ არ არის უფრო მეტი ვიდრე $\sin \alpha$, ამიტომ მოძრაობის რაოდენობას შეიძლება ჰქონდეს ნებისმიერი მნიშვნელობა.

$\frac{h\nu}{c} (1 - \sin \alpha)$ და $\frac{h\nu}{c} (1 + \sin \alpha)$ შორის. მაშ მოძრაობის რაოდენობის განუზღვრელობა ტოლია.

$$\Delta p_x = \frac{2h\nu}{c} \sin \alpha. \quad (25)$$

ეს სიდიდე მხოლოდ მაშინ არის მცირე, როცა მცირეა $\nu \cdot \sin \alpha$. საუბედუროდ, (24)-ის თანახმად, როცა $\nu \cdot \sin \alpha$ მცირეა, მაშინ დიდია მდებარეობის განუზღვრელობა. ამგვარად მივიღვართ დასკვნამდე, რომ რაც უფრო ზუსტად გავზომავთ მდებარეობას, მით უფრო ცოტა გვეცოდინება მოძრაობის რაოდენობის შესახებ, და რაც უფრო ზუსტად გავზომავთ მოძრაობის რაოდენობას, მით უფრო ცოტა გვეცოდინება ნაწილაკის ადგილმდებარეობის შესახებ.

მართლაც, (24)-ის (25)-ზე გამრავლებით მივიღებთ, რომ x კოორდინატის განუზღვრელობის ნამრავლს p_x იმპულსის განუზღვრელობაზე აქვს პლანკის მუდმივის სიდიდის რიგი:

$$\Delta x \cdot \Delta p_x \approx h. \quad (26)$$

რომ რამოდენიმე მაინც მივიღოთ წარმოდგენა იმ სიდიდეებზე, რომლებთანაც საქმე გვაქვს, გამოვთვალოთ განუზღვრელობა იმ ელექტრონის მდებარეობისა, რომლის სიჩქარე, 20%-მდე სიზუსტით, 10^7 სმ/სეკ. ტოლია (რაც შეესაბამება $1/10$ ელექტრონვოლტს). mv სიდიდე მაშინ დაახლოებით 10^{-20} -ის ტოლია და, მაშასადამე, $\Delta p = 2 \cdot 10^{-21}$. რადგან $h = 6,5 \cdot 10^{-27}$, ამიტომ მდებარეობის განუზღვრელობა მეტია 300 \AA -ზე. შექცევით, თუ ჩვენთვის ცნობილია ელექტრონის მდებარეობა უფრო მეტი სიზუსტით, მაშინ პროპორციულად მივიღებთ მისი სიჩქარის უფრო მეტ განუზღვრელობას. მეორეს მხრივ, მაკროსკოპიულ ნაწილაკისათვის ეს ეფექტი სრულიად უმნიშვნელოა. თუ მაგალითად, 1 მგ. მასა მოძრაობს $1 \frac{\text{სმ}}{\text{სეკ}}$. სიჩქარით (სიზუსტით ერთ მემილიონედამდე) მაშინ მდებარეობის განუზღვრელობა უსასრულოდ მცირე იქნება.

ეს იმასთან არის დაკავშირებული, რომ მასიური ნაწილაკები არ განიცდიან შესამჩნევ უკუგდებას დაცემულ გამოსხივებისაგან.

ანალოგიური მოფიქრებითი ცდის საშუალებით შეიძლება მივიღოთ რომ ენერჯის ყოველი გაზომვა დაკავშირებულია დროის გაზომვასთან ასეთივე დამოკიდებულებით, რომელიც ორივე გაზომვის სიზუსტის ურთიერთშემომდარგვლილია:

$$\Delta W \cdot \Delta t \approx h. \quad (27)$$

სინათლის ტალღის რხევის პერიოდის რიგი 10^{-15} სექუნდია; თუ ჩვენ მოვისურვებთ დროის გაზომვას ასეთი სიზუსტით, ეს თან მოიტანს ენერგიის განუზღვრელობას ერთზე მეტ ელექტრონ-ვოლტში.

(25) და (26) გამოთქმები იძლევიან რაოდენობრივ საზომს იმ წარმოდგენებისა, რომლებიც II თავის დასაწყისში იყვნენ მოხსენებული და რომლებიც ხსნიან განაწილებათა სურათების არსებობის აუცილებლობას.

მეორე მხრივ, III თავი მიეკუთვნა (2) და (9) განტოლებათა ამოხსნების შესწავლას—განტოლებათა, რომლებიც, როგორც ჩვენ ვნახეთ, გამომდინარეობენ წარმოდგენიდან დე-ბროილის ტალღებზე.

ეხლა ჩვენ უნდა დავამყაროთ კავშირი ამ სხვადასხვა თვალსაზრისებს შორის.

(26) განტოლებანი გვალოდინებენ, რომ მძიმე ნაწილაკების მდებარეობის განმსაზღვრელი განაწილებანი, უფრო ნაკლებ განფენილნი არიან, ვიდრე მსუბუქი ნაწილაკების, და ამიტომ მასიური ნაწილაკები „კლასიკურად“ იქცევიან. წინა თავში ჩატარებულმა e^{-2kx} მნიშვნელობათა გამოთვლამ, გვაჩვენა, რომ შრედინგერის განტოლებიდან მიღებულ განაწილებებს, მართლაც აქვთ ასეთი თვისება.

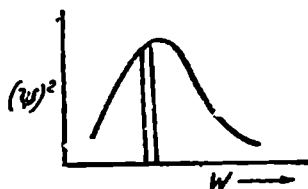
დამატების მე-(3) შენიშვნაში მტკიცდება, რომ (26) შეიძლება განვიხილოთ, როგორც (2) განტოლების ექვივალენტური დამოკიდებულება.

მე-III თავში ჩვენ, უმთავრესად, ყურადღება მივაქციეთ ψ განაწილებათა სურათის იმ სახეს, რომელიც იძლევა ნაწილაკის მდებარეობის განუზღვრელობის გამოსახვას. მაგრამ (26) გვაჩვენებს, რომ მოძრაობის რაოდენობის განუზღვრელობა გამოსახება სწორედ იმავე გვარად. ჩვენ უკვე აღვნიშნავდით იმის შესახებ, რომ თავისუფალი ნაწილაკის მოძრაობის რაოდენობა, უნდა შეისწავლებოდეს ψ განაწილებათა სურათების დახმარებით.

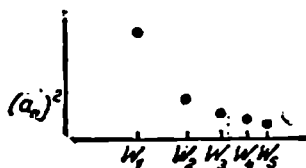
თუ ნაწილაკზე არავითარი გარეშე ველი არ მოქმედებს, მაშინ $(W - V) = \frac{p^2}{2m}$; მაშასადამე, $\psi(p)$ განაწილების სურათს შეესაბამება

ენერგიის მიხედვით $\psi(W)$ -ს განაწილების რომელიმე სურათი. და საზოგადოთ თუ ჩვენ წინასწარი დაკვირვებათა საშუალებით „მოვამზადეთ“ რაიმე მდგომარეობაში მყოფი რომელიმე სისტემა, მაშინ ყოველთვის იარსებებს განაწილების ისეთი სურათი, რომ გამოთქმა $|\psi(W)|^2$ dW იქნება ალბათობა იმისი, რომ ენერგიას აქვს

W და $W+dW$ შორის მდებარე მნიშვნელობა (ნახ. 33). ამ ψ ფუნქციას უნდა ჰქონდეს განზომილება შექცეული ერგისა $\frac{1}{2}$ ხარისხში, ხოლო $|\psi|^2$ მრუდის სრული ფართი უნდა უდრიდეს ერთს, რადგან ენერგიას აუცილებლად აქვს რაიმე მნიშვნელობა. ცხადია, ასეთი მრუდი შეიძლება არსებობდეს მხოლოდ თავისუფალ ნაწილაკთათვის, რომელთათვის შესაძლოა ენერგიის ყველა მნიშვნელობანი. ამ წიგნ-



ნახ. 33 .



ნახ. 34.

ში კი ჩვენ უფრო მეტად გვაინტერესებს შებმული ნაწილაკები, რომლებიც ამისგამო დაქვანტულ სისტემებს წარმოადგენენ და მდგრადი არიან ენერგიის მხოლოდ ზოგიერთი დისკრეტულ მნიშვნელობათათვის W_1, W_2, W_3, \dots ასეთი სისტემისათვის ენერგიის მიხედვით განაწილების სურათი აღარ წარმოადგენს უწყვეტ მრუდს, არამედ წერტილთა რიგს (ნახ. 34), რომელთა კოორდინატებიც a_1, a_2, a_3, \dots ისეთებია, რომ გამოთქმა $|a_n|^2$ წარმოადგენს n -ურ, მდგომარეობაში, W_n ენერჯიით, სისტემის ყოფნის ალბათობას. ეს a_n არიან განყენებული რიცხვები, დამოუკიდებელი x, y, z კოორდინატებისაგან. მათი მნიშვნელობები დამოკიდებულია იმ ხერხზე, რომლითაც მომზადდა სისტემა, და ისეთი უნდა იყვნენ, რომ

$$|a_1|^2 + |a_2|^2 + |a_3|^2 + \dots = 1. \quad (28)$$

2. წინა თავში ნაჩვენები იყო, თუ როგორ იძლევიან შრედინგერის განტოლების ის ამონახსნები, რომლებიც უსასრულობაში ნულისკენ მიისწრაფვიან, წყალბადის ატომის დამახასიათებელ დონეებს, შეთანხმებულს ცდასთან. ამ მიზნისათვის შესაძლო იყო არ გვექონოდა ცხადი წარმოდგენა თვით ამოხსნათა აზრზე. ჩვენ უკვე მაშინ ვაფრთხილებდით, საწინააღმდეგოდ იმისა, რომ ψ განაწილებათა სურათი განიხილებოდეს, როგორც ბორის ორბიტის შესაბამისი ექვივალენტი. ეს რომ გასაგები იყოს განვიხილოთ, მაგალითად, ატომის ე. წ. პირველი აღგზნებული მდგომარეობის W_2 ენერგიის შესაბამისი ψ_2 ფუნქცია. ამ შემთხვევაში, თუ ψ_2 ფუნქცია ნორმირებულია სათანადოთ, გამოთქმა $|\psi_2(x, y, z)|^2 dx dy dz$ წარმოადგენს $x, y, z,$

შანლობელ მცირე მოცულობაში ელექტრონის ყოფნის ალბათობას, თუ ცნობილია, რომ სისტემის ენერგია დაკვირვების მომენტში არის W_2 ; მაგრამ ეს მართალია მხოლოდ იმ შემთხვევაში, თუ $|a_2|^2$ ტოლია ერთის, ხოლო ყველა დანარჩენი a_n ტოლია ნულის. თუ ენერგია მოცემულ მომენტში განუზღვრელია (და ჩვეულებრივ ასეა სინამდვილეში, რადგან ატომს შეუძლია ყოფნა არა მარტო მეორე მდგომარეობაში, არამედ სხვა მდგომარეობებშიც), მაშინ ამ $dx dy dz$ მოცულობაში ელექტრონის ყოფნის ალბათობა დამოკიდებული იქნება ψ -ს განაწილებათა იმ სურათებზე, რომლებიც ყველა შესაძლო მდგომარეობებს შეესაბამებიან. ამ დროს, ცხადია, ყოველი წევრი უნდა „აიწონოს“ იმ მდგომარეობის ალბათობის შესაბამისად, რომელსაც იგი ეკუთვნის. ის გარემოება, რომ საძიებელი ψ ფუნქცია ჯამია ამ ყველა წევრების, შეიძლება შემდეგნაირად წარმოვიდგინოთ:

$$\psi(x, y, z) = a_1\psi_1 + a_2\psi_2 + a_3\psi_3 \dots \quad (29)$$

ყოველი სისტემა უნდა აიწეროს ამგვარი რთული ψ ფუნქციის საშუალებით, გარდა განსაკუთრებული შემთხვევებისა. რომ შესაძლებლობა გვექონდეს შევკრიბოთ ψ -ს განაწილებათა სხვადასხვა სურათების ცალკეული ნაწილები, უნდა გვექონდეს, ასე ვსთქვათ, „სტანდარტული ზომა“ განაწილების ყოველი სურათისათვის.

ეს მიიღწევა ნორმირებით, რომელზედაც უკვე იყო ლაპარაკი.

განაწილებათა ცალკეულ სურათების ნორმირება და (28) დამოკიდებულებანი საკმარისია იმისათვის, რომ რთული ფუნქცია გახდეს ნორმირებული.

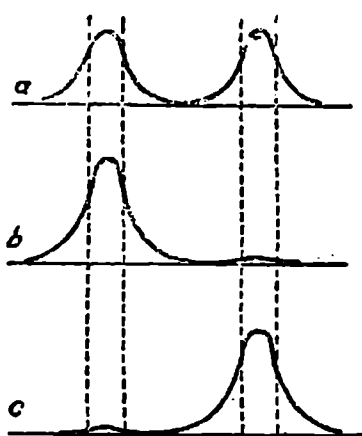
(29) გამოთქმის გამოყენება შეიძლება გავარკვიოთ შემდეგი უბრალო მაგალითით. განვიხილოთ ისევ მე-26 ნახ-ის ამოცანა, 52 გვ-ზე, რომელშიც ჩვენ გვექონდა ერთმანეთისაგან მნიშვნელოვან მანძილზე მყოფი ორი ერთნაირი პოტენციალური ყუთი. ვთქვათ მარცხენაში, ნაწილაკის ჩადებით მოვამზადოთ სისტემა.

სავსებით კანონიერია ის დაშვება რომ დროის მცირე შუალედის შემდეგ ცდის ჩატარებისას, ნაწილაკის ისევ მარცხენა ყუთში ნახვის ალბათობა დიდია. ვნახოთ, ეთანხმება თუ არა $|\psi|^2$ ამ მოლოდინს. თუ კვადრატში ავიყვანთ მე-26 ნუხაზის b მრუდის ორდინატას, ან c მრუდის ორდინატას, მაშინ ორივე შემთხვევაში მივიღებთ 35ა ნახ-ზე გამოხატულის მსგავს მრუდს, რომლის თანახმად მარჯვენა ყუთში ნაწილაკის ყოფნის ალბათობა ტოლია მარცხენა ყუთში მისი ყოფნის ალბათობისა. ჩვენ მივიღეთ ეს, საღ აზროვნებასთან წინააღმდე-

გობაში მყოფი რეზულტატი, მხოლოდ იმიტომ, რომ დაუშვით შეცდომა, როდესაც სისტემის გამოსახვისათვის ვისარგებლეთ ψ განაწილებათა სურათით, რომელიც შეესაბამება ერთად-ერთ ღონეს. ჩვენ უნდა ავიღოთ ყოველ შემთხვევაში ორი ფუნქციის წრფივი კომბინაცია

$$\psi = a_1\psi_1 + a_2\psi_2 \quad (30)$$

თუ დაუშვებთ, რომ $a_1 = a_2$ შევკრებთ b და c (26 ნახ) მრუდების ორდინატებს კვადრატში ამჟღავნებამდე, მივიღებთ 35 ნახ-ის b მრუდს, რომლის თანახმად ნაწილაკი თითქმის უეჭვოდ მარცხენა ყუთში იმყოფება. ცხადად სჩანს, რთული ფუნქცია ψ სწორედ ისეთია, როგორიც საჭიროა ასეთი მდგომარეობის ასაწერად. ამგვარადვე განაწილების სურათი აღმოწერი იმ მდგომარეობის, როდესაც ნაწილაკი იმყოფება მარჯვენა ყუთში მიიღება 26 ნახ-დან თუ დაუშვებთ $a_2 = -a_1$; მაშინ ჩვენ მივიღებთ 35 ნახ-ის c მრუდს. ეს მაგალითი გვაძლევს წარმოდგენას იმის შესახებ, თუ რას ვგულისხმობთ, როდესაც ვამბობთ, რომ სხვადასხვა a_n მნიშვნელობა დამოკიდებულია სისტემის „მომზადების“ ხერხზე. ეს შედეგები მიგვითითებენ, თუ როგორ შეიძლება უკეთ მიეწვდეთ მე-III თავში შრედინგერის განტოლებიდან მიღებულ ψ განაწილებათა სურათების აზრს. თუმცა ხშირად ხელსაყრელია ლაპარაკი ψ ტალღებზე, როგორ ჩვეულებრივ სივრცეში არსებულ ტალღებზე, კლასიკური ორბიტის მსგავსად, მაგრამ სინამდვილეში ისინი წარმოადგენენ ხერხებს, რომლითაც ჩვენ ვსარგებლობთ სისტემის შესახებ ჩვენი ცოდნის ფორმულირებისათვის. როცა ჩვენ ვღებულობდით 35 სურათის a მრუდს, აგეყავდა რა კვადრატში ან მხოლოდ ψ_1 , ან მხოლოდ ψ_2 ამით საქმე გვექონდა ისეთ შემთხვევასთან, როდესაც ენერგია ცნობილი იყო გაორებული-ღონეებს შორის მცირე განცალკეებაზე ნაკლები განუზღვრელობით; ამასთან დაკავშირებული არცოდნა ნაწილაკის მდებარეობისა ავტომატიურად გამოისახება 35 a ნახ-ზე. პირი-



ნახ. 35.

გვითითებენ, თუ როგორ შეიძლება უკეთ მიეწვდეთ მე-III თავში შრედინგერის განტოლებიდან მიღებულ ψ განაწილებათა სურათების აზრს. თუმცა ხშირად ხელსაყრელია ლაპარაკი ψ ტალღებზე, როგორ ჩვეულებრივ სივრცეში არსებულ ტალღებზე, კლასიკური ორბიტის მსგავსად, მაგრამ სინამდვილეში ისინი წარმოადგენენ ხერხებს, რომლითაც ჩვენ ვსარგებლობთ სისტემის შესახებ ჩვენი ცოდნის ფორმულირებისათვის. როცა ჩვენ ვღებულობდით 35 სურათის a მრუდს, აგეყავდა რა კვადრატში ან მხოლოდ ψ_1 , ან მხოლოდ ψ_2 ამით საქმე გვექონდა ისეთ შემთხვევასთან, როდესაც ენერგია ცნობილი იყო გაორებული-ღონეებს შორის მცირე განცალკეებაზე ნაკლები განუზღვრელობით; ამასთან დაკავშირებული არცოდნა ნაწილაკის მდებარეობისა ავტომატიურად გამოისახება 35 a ნახ-ზე. პირი-

ქით, თუ ცნობილია, რომელ ყუთშია ნაწილაკი, მაშინ უცნობია მისი ენერგეტიული მდგომარეობა. ამგვარად, (2) შრედინგერის განტოლების ამოხსნები, თუ მათგან შევადგენთ რთულ ψ ფუნქციას, გამოაუღენენ (26) დამოკიდებულებით გამოსახულის მსგავს ურთიერთ განუზღვრელობას.

თუ ψ_1 და ψ_2 ნორმირებული არიან, უნდა განისაზღვროს a სიდიდის ის მნიშვნელობა, რომლის დროსაც განაწილების სურათი ნორმირებული იქნება.

$|\psi|^2$ მრუდით შემოფარგლული ფართობი განისაზღვრება გამოთქმით:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi|^2 dx =$$

$$= a^2 \left[\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi_1|^2 dx + \int_{-\infty}^{+\infty} (\psi_1^* \psi_2 + \psi_1 \psi_2^*) dx + \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi_2|^2 dx \right] \quad (31)$$

ტოლობის მარჯვენა მხარეში მდგომი სამი ინტეგრალისაგან, პირველი და მესამე, ნორმირების პირობის თანახმად, ერთის ტოლია, ხოლო მეორე როგორც ადვილად შესამჩნევია, ტოლია ნულის.

მართლაც, თუ ავიღებთ 26 ნახ-ზის b და c მრუდებს, ჩვენ ვნახავთ, რომ მარჯვენა ნახევრის ნებისმიერ წერტილში $\psi_1 \psi_2$ უარყოფითია, ხოლო მარცხენა ნახევრის შესაბამის წერტილში—დადებითი; ამიტომ ეს ინტეგრალი ნულის ტოლია. აქედან სჩანს, რომ a -ს სწორი მნიშვნელობა ამ შემთხვევაში $\frac{1}{\sqrt{2}}$ ეტოლება.

ამგვარად, (30) ფორმულაში $a_1^2 + a_2^2 = 1$, რაც თანახვედნაშია (28)-თან. მკითხველს შეუძლია შეამოწმოს, რომ მე-26 ნახაზის მრუდების შეკრებითა და გამოკლებით, როგორც ეს მე-26 ნახაზის მრუდების მიმართ იყო ჩატარებული, შეიძლება მივიღოთ მარჯვენა ან მარცხენა ყუთში უფრო მაღალ დონეზე მყოფი ნაწილაკის, განაწილების აღმწერი სურათები.

როდესაც ჩვენ ატომის ასაწერად რთულ ψ ფუნქციით ვსარგებლობთ, მაშინ ცხადია, რომ ჩვენ ახალ აზრს ვაძლევთ გამოთქმას „ატომი აღვზნებულ მდგომარეობაში არისო“. (29) თანახმად ატომს შეუძლია რაიმე ალბათობით ჰქონდეს ნებისმიერი $W_2, W_3 \dots$ ისევე როგორც W_1 ენერგია. რადგან აღვზნებული მდგომარეობა არამდგრადია, წამოიჭრება საკითხი, შეიძლება თუ არა საზოგადოდ მიღებულ იქნეს ატომი გარკვეული ენერგიით. შეიძლება მტკიცება, რომ

დონეთა ყოველ სისტემაში არის ერთი ერთადერთი ასეთი დონე, და სახელდობრ ქვედა დონე. ატომს შეუძლია დასტოვოს ეს მდგრადი მდგომარეობა მხოლოდ ენერჯიის რაიმე რაოდენობის შექმნით ამგვარად თუ არ შეიძლება მიუახლოვდეს ატომს არც გამოსხივების კვანტი, არც მეორე ნაწილაკი, მაშინ იგი დარჩება ამ მდგომარეობაში უსაზღვროდ დიდხანს. ამ შემთხვევაში შეიძლება არ ვისარგებლოთ რთული ψ ფუნქციით, არამედ დაუშვათ რომ ყველა a_n , გარდა a_1 -ისა ნულის ტოლია.

თუ ჩვენ გვსურს ისეთი ატომის ყოფაქცევის შესწავლა, რომელსაც უფრო მეტი ენერჯია აქვს, ვსთქვათ W_2 ტოლი ენერჯია, მაშინ დაუშვებთ რომ $[a_2]^2 = 1$, ხოლო ყველა დანარჩენი $a_n = 0$. (მხოლოდ, მკაცრად რომ ვსთქვათ, ასეთი დონე, არის რა არამდგრადი, არ შეიძლება დარჩეს იზოლირებულად სასრულო შუალედების განმავლობაში ყველა სხვა უფრო ღრმა დონეებისაგან).

3. აქამდე განხილულ ამოცანებში, ჩვენ ყოველთვის საქმე გვქონდა ისეთ პოტენციალურ ყუთთან რომელიც ერთ ნაწილაკს შეიცავდა. დასაშვებ არეში განაწილების სურათების „მორგებით“, ჩვენ არ შეეჩერებულვართ საკითხზე იმის შესახებ, შესძლებს თუ არა ყუთი ერთზე მეტი ნაწილაკის ჩატევას; ამისთვის არც იყო არავითარი აუცილებლობა. \textit{ერთჯერ იონიზირებული ჰელიუმი სატომში} $He+$ არის ერთი ელექტრონი და თავისუფალი ადგილი მერკესათვის. $Li++$ იონში. არის ორი თავისუფალი ადგილი დამატებითი ელექტრონებისათვის, მაგრამ ეს თავისუფალი ადგილები გაელენას არ ახდენენ ყუთში 'შებმულ პირველი ელექტრონის დონეებზე და განაწილების სურათებზე. ეხლა უნდა გამოვარკვიოთ რა მოხდება, თუ ყუთი შეიცავს მრავალ ნაწილაკს. თუ $He+$ მოემატებ მერე ელექტრონი, მაშინ ყოველი მათგანი იმოძრაებს დადებით გულისა და მერე ელექტრონის მიერ შექმნილ პოტენციალურ ყუთში. მე-III თავში წყალბადისებური ატომების განხილვისას, ჩვენ ვისარგებლეთ წარმოდგენით. სავალენტო ელექტრონზე; ეს ელექტრონი გულასა და ელექტრონული გარსის მიერ შექმნილ პოტენციალურ ყუთში მოძრაობდა.

წყალბადისებური ატომის გარსი რჩება თითქმის ერთი დაიგივე, დამოუკიდებლად იმისა, არის თუ არა სავალენტო ელექტრონი; ეს იმასთან არის დაკავშირებული, რომ სავალენტო ელექტრონი დროის დიდ ნაწილს გარსის გარეთ ატარებს. ეს შემთხვევა გამონაკლისს წარმოადგენს. ჩვეულებრივ განაწილების სურათები განისაზღვრებიან ურთიერთ მორგებით. მაგალითად, ჰელიუმის ატომში ერთი ელექტრონის გამომხატველი ელექტრონული ღრუბლის სახე განსაზღვრავს იმ პოტენციალური ყუთის ფორმას, რომელშიც მერე ელექტრონი მოძ-

რობს და მაშასადამე მისი ψ განაწილების სურათსაც; უკანასკნელი თავის მხრივ განსაზღვრავს ყუთის ფორმას, რომელშიც პირველი ელექტრონი მოძრაობს. (ამგვარი ამოცანების გადაწყვეტის მეორე მეთოდი მოცემული იქნება მე-VI თავში).

N ელექტრონის შემცველ ატომში, ყოველი ელექტრონი შეიძლება ჩაითვალოს, როგორც დადებითი გულისა და დანარჩენი ($N-1$) ელექტრონის მიერ შექმნილ პოტენციალურ ყუთში მოძრავი.

ეს წარმოდგენა შეიძლება გავავრცელოთ თავისუფალ ელექტრონებზე ლითონში. თუ სავალენტო ელექტრონს შეუძლია თავისუფლად იმოძრაოს ლითონის შიგნით და მხოლოდ ზედაპირთან ჩერდებოდეს, მაშინ მთელი ლითონი ჰქმნის ვეებერთელა პოტენციალურ ყუთს. განვიხილოთ ლითონის ნაჭერი, რომელშიც N ერთვალენტური ატომია. მივაქცევთ რა ყურადღებას ერთ ელექტრონს, ჩვენ შეგვიძლია ჩავთვალოთ იგი, როგორც N დადებითი ატომურ ნარჩენის და ($N-1$) ელექტრონის მიერ შექმნილი ველში მოძრავი. ყოველი სხვა სავალენტო ელექტრონი იმყოფება იმავე მდგომარეობაში, ე. ი. მოძრაობს პოტენციალურ ყუთში, რომლის საზღვრები ლითონის საზღვრებს თანხვდება. ψ განაწილების სურათი ერთნაირია ყველა ელექტრონისათვის და უნდა მოიძებნოს ისევე, როგორც მე-III თავში. განაწილების ყოველი სურათი თანაბრად შეავსებს ლითონის მთელ მოცულობას, როგორც ეს 12 ნახ-ზეა და მის გარეთ კლებულობს მაჩვენებლიანი კანონით. ლითონზე გამოდგება იგივე კანონები, როგორც მრავალ ელექტრონიან ატომებზე. მხოლოდ ლითონის ამოცანა რამდენიმედ უფრო ცხადია, რადგან ენერგიის დიდი მნიშვნელობათა შესაბამისი განაწილების სურათები ვრცელდებიან იმავე მოცულობაზე, როგორზეც ენერგიის მცირე მნიშვნელობათათვის, მაშინ როდესაც ატომში ენერგიის მცირე მნიშვნელობათა შესაბამისი ψ განაწილების სურათები, კონცენტრირებული არიან გულას მახლობლად.

მრავალ ელექტრონთა შემცველ პოტენციალურ ყუთის შესწავლისას, შეიძლება მხედველობაში ვიქონიოთ, როგორც ატომის თეორიასთან, ისე ლითონთა თეორიასთან დაკავშირებული საკითხები. სრული ენერგია არის დაკავანტულ დონებზე ცალკეული ელექტრონების ენერგიების ჯამი. აბსოლუტურ ნულ ტემპერატურაზე ელექტრონთა ერთობლიობა ყუთში იქნება ყველაზე დაბალ შესაძლო მდგომარეობაში. ამოცანის პირველი ნაწილი იმაში მდგომარეობს, რომ გამოვარკიოთ, როგორია ეს, უმცირესი ენერგიის მქონე მდგომარეობა. ბორმა ატომის აგებულობის თავის თეორიაში უკვე დიდიხანია.

ვამოსთქვა აზრი, რომ როცა ელექტრონები მოექცევიან პოტენცი-
ალურ ყუთში, ისინი ძირიდან დაწყებული სხვადასხვა დონეებს იკა-
ვებენ. იბადება საკითხი, როგორ შენდება თანდათან ატომი, თუ და-
ვიწყებთ ატომის დიდ დადებით ტვირთიანი იზოლირებული გულათი
და თანდათან მიუმატებთ ელექტრონებს ერთი მეორეს შემდეგ. ბორ-
მა მიიღო, რომ ამ ნააზრევ პროცესში ორი პირველი ელექტრონი
მოთავსდება ქვედა K დონეზე, შემდეგი რვა ელექტრონი—უფრო
მაღალ L -დონეებზე, შემდეგი 18 ელექტრონი—ურო მაღალ დონე-
ებზე და ა. შ., აბსოლუტურ ნულ ტემპერატურაზეც კი ელე-
ქტრონებს არ შეეძლებოდათ ამაზე უფრო დაბალ დონეებზე და-
ცენა. ეს წარმოდგენა უბრალოდ ემპირიული სქემა იყო, რომელიც
წარმატებით ხსნიდა რენტგენის სხივების დონეებს და ელემენტთა
პერიოდულ ცხრილს. როდესაც 1926 წელს შემოტანილი იყო წარმო-
დგენა მბრუნავი ელექტრონის შესახებ იმ წესთან ერთად, რომ სპი-
ნის კვანტურ რიცხვს შეიძლება ჰქონდეს მხოლოდ ორი მნიშვნელობა,
შესაძლო აღმოჩნდა—ბორის სქემის გამოსახვა შემდეგი წესის დახმა-
რებით: ატომში ყოველ კვანტურ მდგომარეობაში არ შეიძლება ერთზე
მეტი ელექტრონი იყოს.

K დონეზე, მაგალითად, არის ადგილი წყვილი ელექტრონისა-
თვის მოპირდაპირედ მიმართული სპინებით, მაგრამ აღარ არის ად-
გილი მესამე ელექტრონისათვის. ეს წესი დაუშვებლად ხდის ელე-
ქტრონების დაგროვებას ერთი და იმავე დონეზე და ცნობილია,
როგორც გამორიცხვის პრინციპი ანუ პაულის პრინციპი. იგი გამო-
სადგეია ყოველი პოტენციალური ყუთისათვის, მისი სიდიდისაგან
დამოუკიდებლად. ლითონის ნაქერშიც კი ორ ელექტრონს არ შე-
შეუძლია საესებით ერთი და იმავეგვარ კვანტურ მდგომარეობებში
ყოფნა. ამიტომ თავისუფალი ელექტრონები განაწილებული არიან
მილიონიან დონეებზე და მხოლოდ მათი უმნიშვნელო ნაწილი იმყო-
ფება დაბალ ენერჯის მქონე დონეებზე. პაულის პრინციპი გამოყე-
ნებული იქნება ატომის თეორიის მიმართ მე-4 პ-ში, ხოლო ლითონს
შიგნით თავისუფალ ელექტრონების მიმართ მე-5 პ-ში.

4. გვაქვს რა ჩვენს განკარგულებაში III თავის ψ განაწილების
სურათები განვიხილოთ ბორის წარმოდგენები მძიმე ატომის აგებუ-
ბულობის შესახებ. დავიწყოთ დიდ დადებით Ze ტვირთით დატვი-
რთულ გულათი და მივიყვანოთ მასთან პირველი ელექტრონი. ამ
ერთადერთი ელექტრონისათვის ადვილია დასაშვები დონეებისა და
შესაძლო სურათების მიღება წყალბადის ატომში არსებულ შესაბამი-
სი დონეებიდან და განაწილებათა სურათებიდან; საკმაოა მულმივათა

შეცვლა, რადგან შრედინგერის განტოლებაში შემავალი პოტენცი-
 ალური ენერგია ტოლი იქნება არა $-\frac{e^2}{r}$, არამედ $-\frac{Ze^2}{r}$. ენერგე-
 ტიულ დონეთა სქემა წინანდებურად (19) ფორმულით განისაზღვრება,
 მხოლოდ ენერგიის ყოველი მნიშვნელობა სწორედ Z^2 -ჯერ მეტია.
 აბსოლუტური სიდიდით (და, მაშასადამე, ნაკლებია ალგებრულად),
 ψ განაწილების სურათები აღადგენენ მინიატიურულად წყალბადის
 განაწილების სურათებს Z ჯერ შემციირებული რადიუსით. ჩვენ აქ
 გვინტერესებს მხოლოდ ძირითადი დონე, რომელზედაც თავსდება
 ელექტრონი; უარყოფითი ენერგია ამ დონისა იქნება სწორედ Z^2 ჯერ
 მეტი წყალბადის ატომის საიონიზაციო პოტენციალზე (13,5 ელექ-
 ტრონ-ვოლტი). მაგ. თუ $Z=80$, მაშინ იგი უდრის 86.400 ელექტრო-
 ნი ვოლტს და მიიღება სინდიყის დასრულებული ატომი (ატომის
 ნომრით 80) ასეთია ის მუშაობა, რომელიც საჭიროა ამ ელექტრონის
 მოსაშორებლად გულასაგან იმ შემთხვევაში, თუ არცერთი მეტი ელექ-
 ტრონი არ არის. მას შემდეგ რაც დაემატება დანარჩენი 79 ელექ-
 ტრონი იმავე ელექტრონის სახელდობრ k , ელექტრონის, მოსაშორებ-
 ლად აუცილებელი მუშაობაა, რამოდენიმედ, მაგრამ არა ძალიან
 მცირე გახდება, რადგან ცნობილია, რომ იგი უდრის 82.900 ელექ-
 ტრონ-ვოლტს. (ეს მნიშვნელობა მიღებულია იმ ტალღის სიგრძიდან,
 რომელიც შეესაბამება რენტგენის სხივების შთანთქმით ფენის კიდეს K
 შრისთვის). რადგან ეს შეეხება დანარჩენ ელემენტებსაც, ამიტომ K
 შრის ენერგია თითქმის პროპორციულია ატომის ნომრის კვადრატის—
 ასე რომ თუ ავაგებთ მრუდს, რომელიც გამოხატავს ენერგიიდან კვად-
 რატული ძირის დამოკიდებულებას Z -ისაგან, მივიღებთ წრფეს, რო-
 მელიც მოზღვის წრფის სახელით არის ცნობილი.

შმატებთ რა ამ K შრის ელექტრონებს დანარჩენებს, ჩვენ და-
 ვრწმუნდებით, რომ პაულის პრინციპის თანახმად სხვადასხვა ელექ-
 ტრონების მიერ დაკავებულ დონეებს, იმავე გვარი მიმდევრობა
 ექნებათ, როგორც წყალბადის ერთად ერთ ელექტრონის აღ-
 გზნებულ დონეებს, სახელდობრ: $1s, 2s, 2p, 3s, 3p, 3d$ და ა. შ.
 მთავარი კვანტური რიცხვი უკვე აღარ განსაზღვრავს ენერგიის მნი-
 შვნელობას, როგორც ეს მე-(19)-ში იყო, მაგრამ წინანდებურად მოგ-
 ვცემს სფერული კვანძითი ზედაპირების რიცხვს ელექტრონულ ღრუ-
 ბელში, რომელიც ყოველი s დონესათვის ტოლი იქნება $(n-1)$ -ის,
 ყოველი p დონესათვის $(n-2)$ -ის, ყოველი d -დონესათვის $(n-3)$
 და ა. შ. ენერგიის მნიშვნელობები და განაწილების სურათები განი-
 საზღვრებიან ელექტრონთა ურთიერთქმედებით და შეიძლება განი-
 საზღვრონ მხოლოდ ძალზე გრძელ გამოთვლათა საშუალებით. მაგრამ
 დონეთა ტიპების ცოდნა საშუალებას გვაძლევს ჩვენ ავხსნათ ელექ-

მენტოა ძირითადი ფიზიკური და ქიმიური თვისებანი პერიოდულ ცხრილში.

ორი K -ელექტრონი, არის რა ორივე s ელექტრონი, გულასთან ერთად ჰქვნიან დადებით ნარჩენს, რომელსაც სფერული სიმეტრია აქვს. ქვედა დაუკავებელი დონე ამ დროს $2s$ დონეა, ისეთი განაწილების სურათით, რომ სიმკვრივის მაქსიმუმი ამ ნარჩენის გარედ ძევს. ელექტროსტატიკის პრინციპებიდან გამომდინარეობს რომ ψ განაწილების სურათები, რომელთათვისაც სიმკვრივის მაქსიმუმი გულადან შედარებით შორს იმყოფება, უნდა შეესაბამებოდნენ ენერჯის დიდ მნიშვნელობებს; სინამდვილეში ეს ასეც არის. ლითიუმის პირველი საიონიზაციო პოტენციალი წყალბადის საიონიზაციო პოტენციალის ნახევარზე ნაკლებია. L შრეში, ვასაგებია, 8 ელექტრონისთვის არის s ადგილი, სახელდობრ: ორი $2s$ ელექტრონისათვის საწინააღმდეგოთ მიმართული სპინებით და სამი წყვილი $2p$ ელექტრონისათვის. ყოველ ამ წყვილთაგანის კვანტურ რიცხვებს აქვთ მნიშვნელობანი:

$$\begin{aligned} n: & 2, 2, 2, 2 \\ m: & 0, 1, 1, 1 \\ l: & 0, 1, 0, -1 \end{aligned}$$

შემდეგი ელექტრონი უნდა მოთავსდეს $n=3$ დონეზე, იმ ნარჩენის გარეთ, რომელიც 10 ელექტრონს შეიცავს. მაშასადამე, ელემენტი ატომური ნომრით 11—*e*. ი. ნატრიუმი უნდა იყოს ერთვალენტისანი და მოგვაგონებდეს ლითიუმს. ატომის აგებულების აღწერისას ყოველი სახის ელექტრონების რიცხვი ჩვეულებრივ აღინიშნება განსაკუთრებული ნიშნების საშუალებით.

საერთო აღნიშვნებში აზოტის ატომის ნორმალური მდგომარეობა აიწერება სიმბოლოთი $1s^2 \cdot 2s^2 \cdot 2p^3$, რაც მიგვითითებს ორი $1s$ ელექტრონის, ორი $2s$ ელექტრონის და სამი $2p$ ელექტრონის არსებობაზე. ამავე გვარად ნატრიუმის ატომის ნორმალური მდგომარეობა შეიძლება აიწეროს სიმბოლოთი; $1s^2 \cdot 2s^2 \cdot 2p^6 \cdot 3s$.

M შრეში შეიძლება მოთავსდეს თვრამეტი ელექტრონი, ანუ ცხრა წყვილი, რომელთა კვანტურ რიცხვებს აქვთ მნიშვნელობანი:

$$\begin{aligned} l: & 0, 1, 1, 1, 2, 2, 2, 2 \\ m: & 0, 1, 0, -1, 2, 1, 0, -1, -2 \end{aligned}$$

ამას შეესაბამება პერიოდული ცხრილის 18 ელემენტი მე-10 ნეონსა და მე-29 სპილენძს შორის; ამ უკანასკნელს M შრე შევსებული აქვს და, ამასგარდა, არის ერთი ელექტრონი N შრეში.

აუცილებელია შენიშვნა, რომ 18 ელექტრონისაგან 12-ს აქვს

ნულისაგან განსხვავებული m . მაგრამ მაგნიტური მომენტები არ ამჟღავნებენ არაერთარ მისწრაფებას გაზრდისადმი მძიმე ელემენტებშიც კი, რადგან როგორც ადვილი სანახავია, ელექტრონთა ყოველ წყვილს $m=1$ -ით, შეესაბამება ელექტრონთა წყვილი $m=-1$ -ით და ელექტრონთა ყოველ წყვილს $m=2$ -ით, შეესაბამება ელექტრონთა წყვილი $m=-2$ -ით, რის გამო მათი მაგნიტური მომენტები ურთიერთ ისპობიან. ამავე გვარად გაზრდისადმი არაერთარ მისწრაფებას არ ამჟღავნებენ ელექტრონთა ნაერთი სპინური მომენტები, რადგან ყოველ დასრულებულ შრეებში ისინი გვხვდებიან წყვილებით, ისე რომ მაგნიტურ ველში ერთი შეიძენს, ხოლო მეორე ჰკარგავს ენერგიის ტოლ რაოდენობას; განმარტების თანახმად წყვილის მაგნიტური მომენტი ნულის ტოლია.

უმძიმეს ატომებში ორმოცზე მეტი წყვილია, მაგრამ ისინი თავს არ იჩენენ ატომის მაგნიტურ მომენტის სიდიდეზე.

ბოლოს თვით ელექტრონული ღრუბლების შესწავლაზე გადასვლისას, ჩვენ შევჩერდებით ყველა p ელექტრონთა ერთობლიობის ერთ მნიშვნელოვან თვისებაზე. როგორც 44 გვ-ზე იყო აღნიშნული $l=1$ დროს ψ -ფუნქციის დამოკიდებულება θ -საგან ლებულობს $\cos \theta$

სახეს, თუ $m=0$ და $\frac{1}{\sqrt{2}} \sin \theta$ -სახეს, თუ $m=\pm 1$. ამიტომ ელექტრონულ ღრუბელის სიმკვრივის ის ნაწილი, რომელიც დამოკიდებულია რომელიმე p ელექტრონზე პროპორციულია $\cos^2 \theta$, ან $\frac{1}{2} \sin^2 \theta$ -სი. თუ რომელიმე ატომში არსებობს სამი ერთნაირი p ელექტრონი $m=1, 0, -1$ მნიშვნელობებით, მაშინ ატომის ელექტრონული ღრუბელის სიმკვრივეს ექნება სფერული სიმეტრია, რადგან (12)-ის თანახმად, $|\Phi|^2$ მუდმივია და, ამასგარდა,

$$\frac{1}{2} \sin^2 \theta + \cos^2 \theta + \frac{1}{2} \sin^2 \theta = 1. \quad (32)$$

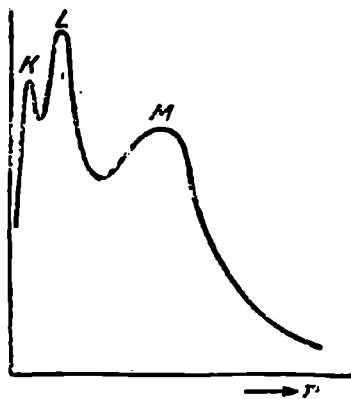
L და M შრეებისათვის ზემოდ მოყვანილ კვანტურ რიცხვთა ცხრილიდან სჩანს, რომ p ელექტრონი სამი წყვილია. აქედან დაუყოვნებლივ გამომდინარეობს, რომ L შრეს სფერული სიმეტრია უნდა ჰქონდეს. M შრეში, ამას გარდა, ხუთი წყვილი d -ელექტრონიც არის. ხუთი ერთნაირი d ელექტრონისათვის ადვილი აქვს (32)-ის მსგავს დამოკიდებულებას; ამიტომ M შრეც აგრეთვე სფერულ სიმეტრიულია. ძველ კვანტურ თეორიაში ჰალოიდური ატომის მზად ყოფნა ელექტრონის მისაღებად სამართლიანად მიეწერებოდა აუშენებელი გარსის

მისწრაფებას დაკლებული ელექტრონის დაჭერისადმი. კვანტური მექანიკა იძლევა ამ მოვლენის უფრო დეტალურ სურათს. ჰალოიდების ატომის ელექტრონულ ღრუბელში არის თავისებური „ორმო“, რომელიც დაკლებულ ელექტრონის კვანტურ რიცხვებიანი განაწილების სურათის არ არსებობას შეესაბამება. როდესაც გარსი ზემოთ ელექტრონს დაიჭერს, ორმო შეივსება და ატომის სრულ სფერულ სიმეტრიას მიიღებს.

სხვადასხვა K ; L , M შრეების წარმომდგენი ელექტრონული ღრუბლები, რასაკვირველია, ერთიმეორეს ეფინებიან; ამდროს წარმოიშვება, რაღაც ნაერთი ღრუბელი, რომელიც განისაზღვრება რადიალური მამრავლით ურთიერთმომქმედი ელექტრონების მქონე დასრულებული ატომის ელექტრონული სიმკვრივის გამოთქმაში. ჯერ კიდევ კვანტური მექანიკის წარმოშობამდე გამოიკვია სიმკვრივის ამ განაწილების დიდი მნიშვნელობა; ეს განაწილება განსაზღვრავდა რენტგენის სხივების გაფანტვას სხვადასხვა ელემენტთა ატომების მიერ. მაგრამ იმ დროს მრუდი, რომელიც 36-სურ-ზე გამოხატულის მსგავსია და წარმოადგენს ელექტრონული სიმკვრივის დამოკიდებულებას გულამდე მანძილისაგან, განიხილებოდა როგორც სხვადასხვა ფორმის სრულიად გარკვეულ ორბიტებზე მოძრავ ელექტრონების მდებარეობის დროში გასაშუალოების შედეგი.

ესლა კი ψ განაწილების სურათს ჩვენ განვიხილავთ, როგორც ატომში ელექტრონების მდგომარეობის აწერის ერთადერთ კანონიერ ხერხს.

5. ჩვენ ხშირად გვიჩდება მოსმენა იმ აზრის, რომ როდესაც არ არის დენი არავითარი ელექტრული ველი არ არსებობს გამტარის შიგნით. ეს რომ ანბანური ქეშმარიტება იყოს, მაშინ ელექტრონის პოტენციალური ენერგია ერთნაირი იქნებოდა მთელი გამტარის განვრცობაში და პოტენციალურ ყუთს ექნებოდა მე-5 ნახ-ზე



ნახ. 36.

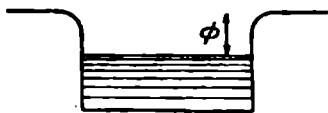
ნაჩვენები სახე. სინამდვილეში ყოველი ატომის დადებითი ნარჩენი ლითონში წარმოშობს ადგილობრივ ინტენსიურ ველს, მე-7 ნახ-ზე გამოსახულ ველის მსგავსს. მაგრამ ლითონთა ბევრი თვისება შეი-

ძლება გამოყვანილ იქნეს, თუ წარმოვიდგინეთ რომ ეს დადებითი მუხტები განფენილნი არიან ერთგვაროვან ღრუბლად, რომელიც თითქმის ნეიტრალდება ასეთივე ერთგვაროვან უარყოფით ღრუბლის მიერ, რომელსაც ($N-1$) ელექტრონი ჰქმნის. ამ დროს ყოველი სავალენტო ელექტრონისათვის პოტენციალურ ყუთს ექნება მარტივი სახე, ნაჩვენები მე-5 ნახ-ზე; მისი სიღრმე ახასიათებს ყოველ მოცემულ ელემენტს და იცვლება დაახლოებით 6 ელექტრონ-ვოლტიდან—ერთვალენტოვანი ლითონისთვის—12-ზე მეტ ელექტრონვოლტამდე—მეტ ვალენტოვანი ლითონებისთვის.

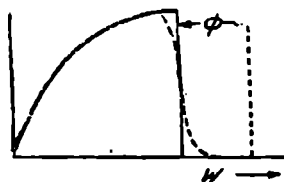
შესაძლო დონეები მოიძებნებიან ψ განაწილებათა სურათების ყუთში „მორგების“ ჩვეულებრივი მეთოდით. განაწილების ის სურათები, რომლებიც მიეკუთვნებიან ქვედა დონეებს, ემსგავსებიან მე-12 და მე-15 ნახ-ზე გამოსახულ მრუდებს, მხოლოდ ვეებერთელა სიგრძის დებროილის ტალღებით. მანძილი დონეებს შორის შეიძლება ვიპოვოთ იმის ანალოგიური მსჯელობათა მიხედვით, როგორიც მე-(29) გვერდზე იყო ჩატარებული ატომის დონეებისათვის. კრისტალის 'შაკროსკოპიულ ნაქერისათვის მანძილები მომდევნო დონეებს შორის იმდენად მცირეები არიან, რომ ერთი ელექტრონ-ვოლტის ფარგლებში დონეები მილიონებით ეტევიან. თუ, მაგალითად, ჩვენ მოვისურვებთ, დებროილის 10 ონგესტრემიანი სიგრძის ტალღის მორგებას 1 *mm* სიგრძის პოტენციალურ ყუთში, მაშინ აღმოჩნდება, რომ მასში მოთავსდება ორი მილიონი ნახევარ-ტოლდა; ეს იქნება, მაშასადამე დონე 2.000.000 ნომრით.

ამას გარდა, ჩვენ ვხედავთ, რომ რაც უფრო დიდია ლითონის ნაქერი, მით უფრო ახლო მდებარეობენ დონეები. თუ ამოცანას ამოვხსნით კუბისათვის, მაშინ აღმოჩნდება, რომ ენერჯის ყოველ შესაძლო მნიშვნელობას შეესაბამება განაწილების რამოდენიმე სურათი, რომელთა ენერჯიები თანხვედნილი არიან; n -რი დონისათვის მათი რიცხვი დაახლოებით $\frac{n^2}{2}$ ის ტოლია, როგორც ნაჩვენები იყო მე 49 გვერდის ამოცანაში. იმავე ზომის ლითონის ნაქერისათვის, რომელსაც კუბის ფორმა არა აქვს, დონეთა რაოდენობა იგივე იქნება, მხოლოდ თანხვედნილი აღარ იქნებიან. დონეთა სქემა, რომელსაც ლითონთა ამ გამარტივებული მოდელით ვღებულობთ, ძალიან ჰგავს იმ სქემას, რომელთანაც მივალთ, თუ სათანადოთ გავითვალისწინებთ ლითონთა კრისტალების პერიოდულ აგებულობას, რასაც მე-VIII თავში განვიხილავთ.

რომ ვიპოვოთ ის მდგომარეობა, რომელშიც აბსოლუტურ ნულ ტემპერატურაზე იქნება ლითონი. ამ დონეებზე უნდა მოვათავსოთ ელექტრონები პაულის პრინციპის შესატყვისად. ყოველ დონეს შეუძლია ჩაიტოს წყვილი ელექტრონი მოპირდაპირე სპინებით. მცირე ენერჯიან დონეებზე შედარებით ცოტა ელექტრონები მოთავსდებიან, მაგრამ მათი რიცხვი იზრდება μ^2 -ის პროპორციულად. მაგ. მემილიონე დონეზე შეიძლება მოთავსდეს დაახლოებით 10^{12} ელექტრონი. ამგვარად ჩვენ შეგვიძლია ვიპოვოთ ადგილი ყველა თავისუფალი ელექტრონისათვის—თუმცა ერთ კუბიურ სანტიმეტრში ისინი შეიძლება 10^{22} -ზე მეტი იყვნენ—იმ პრინციპის დაურღვევლად, რომლის მიხედვით ერთ კვანტურ მდგომარეობაში არ შეიძლება ერთზე მეტი ელექტრონის ყოფნა; ამასთან ერთად ყოველთვის რჩება კიდევ მრავალი თავისუფალი დონე. განვიხილოთ ჯერ ტიპური ლითონი აბსოლუტურ ნულზე, ხოლო შემდეგ ჩვენ შეგვიძლიან მივუმატოთ სითბური ენერჯია შესაბამისი უფრო მაღალი ტემპერატურის. იგულისხმება, რომ პოტენციალური ყუთის სიღრმე დაახლოებით 6-დან 18 ელექტრონ-ვოლტამდეა სხვადასხვა ელემენტებისათვის და რომ ელექტრონები ავსებენ მას ქვემოდან დაახლოებით ორ მესამედამდე,



ნახ. 37.



ნახ. 38.

სტოვებენ—რა გარკვეულ დონეზე მაღლა მდებარე ყუთის ნაწილს, სავსებით ცარიელს ეს ცარიელი არე (ნახ 37) განსაზღვრავს ლითონიდან ელექტრონების გამოსვლის მუშაობას Φ . ამ სიდიდის და აორთქლების ფარული სითბოს მსგავსებზე მითითებულ იყო თავში. დაკვირვებით მიღებული მნიშვნელობები Φ -ისა სხვადასხვა ელემენტებისათვის ირყევიან ფარგლებში 2-ე. ე-დან—ტუტიანი ლითონებისათვის 6-ზე მეტ ე-ვ-მდე—პლატინისათვის Φ -ის მნიშვნელობა არ არის დამოკიდებული ლითონის ნაჭრის ზომისაგან, იმიტომ რომ, თუმცა დიდ ნაჭერში

მეტი ელექტრონებია, რომლებიც ყუთში, უნდა მოთავსდნენ მაგრამ ეს ზუსტად კომპენსირდება ზემოდაღნიშნულ იმ მდგომარეობით, რომ რაც უფრო დიდია პოტენციალური ყუთი, მით უფრო ახლო განლაგდებიან დონეები. ენერჯიის მნიშვნელობათა არე, რომელშიც განაწილებული არიან ელექტრონები, დამოკიდებულია მათ სიმკვრივეზე და არა მათ საერთო რიცხვზე; რადგან მანძილები დონეთა შორის მეტად მცირეები არიან, ჩვენ შეგვიძლია ვილაპარაკოთ მათ შესახებ ისეთი თქოს ისინი წარმოადგენდნენ არა დისკრეტულ, არამედ უწყვეტ ერთობლიობას; თუ შევეცდებით ავაგოთ 1 cm^3 -ში W და $W+dW$ შორის მდებარე ენერჯიების მქონე ელექტრონების რიცხვის W სიდიდისაგან დამოკიდებულების გამომხატველი მრუდი, მაშინ მივიღებთ 38 ნახზე გამოსახულ უწყვეტ მრუდს. კლასიკურ მექანიკაში იგულისხმებოდა, რომ მეტად დაბალ ტემპერატურებზე თავისუფალი ელექტრონების კინეტიური ენერჯია მიისწრაფვის ნულისაკენ, გაზის მოლეკულების ენერჯიის მსგავსად. მაგრამ მე-37 და მე-38 ნახაზიდან ცხადია, რომ საშუალო კინეტიური ენერჯია ძალიან დიდია აბსოლუტურ ნულზედაც კი. ტემპერატურის ამალღებისას ზოგიერთი ელექტრონები, რომლებიც უფრო მაღალ დონეებზე იმყოფებიან, დაიწყებენ კრიტიკულ დონის იქეთ გადახტომას—ეს დონე შეიძლება W_0 -ით აღვნიშნოთ—რის შედეგადაც ეს უკანასკნელი უკვე აღარ აღნიშნავს მკვეთრ საზღვარს დაკავებულ და თავისუფალ დონეებს შორის. T ტემპერატურაზე, რომელიც აბსოლუტურ ნულზე მეტია, კრიტიკული ენერჯიის შესაბამისი დონეები ნახევრად შევსებული არიან, ხოლო მათ

ზემოთ ელექტრონთა რიცხვი მცირდება $e^{-\frac{W-W_0}{KT}}$ კანონით, როგორც პუნქტიროვანი ხაზით არის ნაჩვენები მე-38 ნახ-ზე. ოთახის ტემპერატურაზე ამ მაჩვენებლიანი ფუნქციის დაცემა ისე სწრაფად ხდება, რომ შეუძლებელია შესაბამისი მრუდის გარჩევა იმ სწორი ხაზისაგან, რომელიც მე-38 ნახ-ზეა ნაჩვენები; ელექტრონთა უმრავლესობა წინანდებურად რჩება იმავე დონეებზე რომლებზედაც იყვნენ ისინი აბსოლუტურ ნულ ტემპერატურისას. ამიტომ ლითონის ხვედრითი სითბოტევადობა გაცილებით ნაკლებად არის დამოკიდებული თავისუფალ ელექტრონებისგან, ვიდრე კლასიკურ თეორიიდან გამომდინარეობდა.

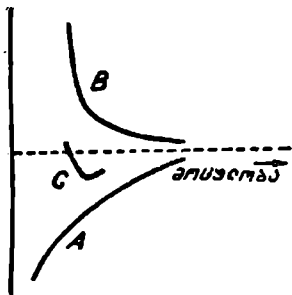
საკითხი იმის შესახებ, უნდა ჩაითვალოს თუ არა საზღვარი დაკავებულ და თავისუფალ დონეებს შორის საკმაოდ მკვეთრად, თუ ეს დაუშვებელია, გადაწყდება განსახილველი ფიზიკური პროცესისაგან.

დამოკიდებულებით. ფოტო-ელექტრული ეფექტის შემთხვევაში მოვლენა დგება საკმაოდ უეცრივ, ისე რომ შესაძლოა ლაპარაკი სიხშირის საზღვარზე, რომელიც $h\nu = \Phi$ ტოლობას შეესაბამება, ოთახზე მაღალ ტემპერატურებზეც კი.

მეორე მხრივ, თერმოელექტრიული ემისია მიიღება სწორედ იმ ელექტრონებისაგან, რომლებიც კრიტიკულ დონის საზღვარს იქეთ გადაფრინდებიან ლითონს შიგნითა დაჯახების შედეგათ; ამ საკითხს მე-VIII თავში გაეარჩევთ.

ყოველი გაზი აწეება მის შემომფარგვლელ ზედაპირს და გაფართოებისკენ მიისწრაფვის. ამგვარად, თუ წინა მეთოდში, რომელშიც ელექტრონები განიხილებოდნენ, როგორც ერთ ატომიანი გაზი, ირის კემარიტების წილი, მაშინ ჩვენ ახსნა უნდა მივცეთ იმ ფაქტორებს, რომლებიც განსაზღვრავენ ხვედრითი მოცულობას ყოველი ელემენტისათვის. თუ შევამცირებთ ლითონის ნაჭერის მოცულობას, მისი შეკუმშვით, ან გავადიდებთ—მისი გაჭიმვით, მაშინ როგორც ერთ, ისე მეორე შემთხვევაში ჩვენ მუშაობას ვასრულებთ. ამ დროს, თუ დავხაზავთ ენერჯიის დამოკიდებულებას მოცულობისაგან, მაშინ მიღებულ მრუდს უნდა ჰქონდეს მინიმუმი იმ წერტილში, რომელიც შეესაბამება დაკვირვებულ ხვედრით მოცულობას (იხ. მრუდი C ნახ. 39).

ამ მრუდის შედარებით მე-18 და მე-51 ნახ. მინიმუმებთან, შეიძლება იმ აზრთან მისვლა, რომ ეს მრუდი წარმოადგენს ჯამს, ორი ისეთი სახის მრუდისა, როგორიც, მაგალითად A და B-ა, რომელთაგან ერთი მიზიდვის ენერჯიას, ხოლო მეორე განზიდვის ენერჯიას შეესაბამება. ლითონის ნაჭერის მოცულობის შემცირებით,



ნახ. 39

ჩვენ პოტენციალურ ყუთის მოცულობას ვამცირებთ, იმ ყუთის რომელშიც ელექტრონები მოძრაობენ. ხოლო რადგანაც ყველა შესაძლო განაწილების სურათს აქვს ტალღის სიგრძე λ , რომელიც უნდა გამოდგეს ყუთისთვის, ამიტომ ყოველი ტალღის სიგრძე უნდა შემცირდეს ლითონის შეკუმშვის პროპორციულად. ეს გამოიყენება დონეთა ყველა მილიონებზე. მაგრამ დე-ბროილის ტალღის ნაკლები სიგრძე ნიშნავს ელექტრონის მეტ ენერჯიას და მაშასადამე, ამ მოდელის თანახმად, კინეტიური ენერჯია ყოველი თავისუფალი ელექტრონისა ამ დროს იზრდება. იმავე დროს, ლითონის შეკუმშვისას საშუალო მან-

ძილი დადებით და უარყოფით ტვირთებს შორის მცირდება, რის შედეგად პოტენციალური ენერგია რამოდენიმედ მცირდება. თუ ამ ელექტროსტატიულ ენერგიას გამოვსახავთ A მრუდით, ხოლო ელექტრონების სრულ კინეტიურ ენერგიას B მრუდით, მაშინ ორდინატთა შეჯამებით მიღებული C მრუდი გამოსახავს სრულ ენერგიას. B მრუდის დახრა ნებისმიერ წერტილში განსაზღვრავს ელექტრონულ გაზის წნევას.

ლითონთა გამტარებლობის მოვლენის აღწერა, ლითონთა კრისტალურ ხასიათის აგებულების გათვალისწინებით, მე-VII თავში იქნება მოცემული.

ნაწილაკთა ძრავა.

1. მე-II თავში ჩვენ ვამბობდით, რომ კვანტური მექანიკის მიზანი მდგომარეობს 1) სისტემის შესაძლო განაწილებათა სურათების და 2) სხვადასხვა ზეგავლენისას სისტემის თვისებათა ცვლილებების გაწინასწარმეტყველებაში. აქამდე ჩვენ საქმე გვქონდა პირველი გვარის ამოცანებთან, რომლებიც მხოლოდ ატომთა და ლითონთა სტრუქტურას შეეხებოდნენ. ეხლა ჩვენ შეგვეძლო იმავე მეთოდების რამოდენიმედ განზოგადოებით, მოლეკულების და დილექტრიკებისათვის განაწილების სურათთა შესწავლაზე გადასვლა. მაგრამ უფრო ხელსაყრელია ეს საკითხი გადავდოთ და ეს თავი მივაკუთვნოთ კვანტური მექანიკის იმ ნაწილის წინასწარ გაცნობას, რომელიც აუცილებელია მეორეგვარი ამოცანების გადასაწყვეტად—ე. ი. ნაწილაკის მოძრაობის ასაწერად სისტემის მდგომარეობის რაიმე ფიზიკო—ქიმიურ ცვლილებების დროს.

უმრავლეს შემთხვევაში პერტურბაციად, რომელსაც განიცდის ატომიან მოლეკულა, გვევლინება ელექტრული ან ელექტრომაგნიტური ველი. წინათ ისინი განიხილებოდნენ როგორც ელექტრონებისა და ატომების აჩქარებებს ან გადახრის მიზეზი.

კვანტურ მექანიკაში კი პერტურბაცია ყოველთვის განიხილება, როგორც V პონტენციალური ენერგიის შეცვლა. დამატებითი ველის არსებობისას დამუხტული ნაწილაკის პოტენციალური ენერგია x , y , z წერტილში განსხვავდება პირვანდელი ენერგიისაგან—ე. ი. ენერგეტიული მრუდი იცვლება. პირვანდელი განაწილების სურათები, რასაკვირველია, არ შეესაბამებიან ამ სახე შეცვლილ ენერგეტიულ მრუდს და ეს შეცვლა წარმოადგენს ფიზიკურ მოვლენას, რომელიც პერტურბაციასთან არის დაკავშირებული:

1) ხელსაყრელია პერტურბაციის ორი სახის გარჩევა. პირველ სახეს მიეკუთვნება დროებითი პერტურბაცია, რომლის მოქმედება

ისეთია რომ დროის მოკლე შუალედის შემდეგ ენერგეტიული მრუდი მიიღებს პირვანდელ სახეს. განვიხილოთ, მაგალითად, წყალბადის ატომი, რომლის მახლობლად სწრაფი ელექტრონი გაიფრენს. საწყის მომენტში გულას ველში ატომის ელექტრონის პოტენციალურ ენერჯიას აქვს მე-7 ნახ-ზე გამოსახული სახე.

სწრაფი ნაწილაკის გავლისას ამ ველს დროის მოკლე შუალედში, ვსთქვათ 10^{-11} სეკუნდში, მიემატება ამ ნაწილაკის ინტენსიური ველი, რომელიც სახეს უცვლის ენერგეტიულ მრუდს, რის შემდეგაც პოტენციალური ენერჯია გულას მახლობლად ისევ მიიღებს მარტივ კულონურ სახეს. როდესაც ეს მოხდება, მაშინ მდგომარეობა ისევ ψ განაწილების მხოლოდ პირვანდელი სურათებით აიწვრება. მაგრამ ეს არ ნიშნავს, რომ არაფერი არ მომხდარა. მართლაც, სისტემის მდგომარეობა განისაზღვრება ფუნქციით $\psi = a_1\psi_1 + a_2\psi_2 + a_3\psi_3 + \dots$, და სხვადასხვა ψ_n შეიძლება ეხლა სხვადასხვა თანაფარდობით ავილოთ, რაც a_1, a_2, a_3, \dots ახალი მნიშვნელობებით განისაზღვრება. თუ ატომი ან მოლეკულა საწყის მომენტში ძირითად დონეზე იყო, მაშინ მას შეეძლო ასვლა რომელიმე ალგზნებულ მდგომარეობაში.

(9) განტოლებების ამონახსენები ψ_1, ψ_2, \dots , ცხადია, უცვლელნი რჩებიან და წარმოადგენენ თავისებურ ანბაას კვანტური მექანიკისა; ნაერთი ფუნქცია ψ , შექმნილი, მათგან, იცვლება იმ თანაფარდობათა ცვლილების წყალობით, რომელშიც ერევიან განაწილების სურათების ცალკე შემადგენლები.

2) მეორე გვარის პერტურბაციებში პოტენციალური ენერჯიის ცვლილება არ არის დროებათი. ენერგეტიული მრუდის შეცვლისას Ψ განაწილების პირვანდელი სურათები სტაციონალურ მდგომარეობისათვის უკვე აღარ გვაძლევენ მართებულ ცნობებს სისტემის შესახებ. თუ სისტემის მდგომარეობა შეიცვლება დროში, მაშინ აღბათობა $P(q)dq$ იმისი, რომ რაიმე დაკვირვებად სიდიდეს აქვს $q, q+dq$ შორის მდებარე მნიშვნელობა მუდმივი კი არარის, არამედ იცვლება დრო-

ის მიხედვით. ჩვენ უნდა ვიპოვოთ $\frac{dP}{dt}$ მოძებნის ხერხი. რადგან ჩვენ ყოველთვის P -ს ვნახულობთ $(\psi)^2$ -ის სახით, ამიტომ ბუნებრივია დავიწყოთ თვით ψ ფუნქციის $\frac{d\Psi}{dt}$ წარმოებულის ძებნით. როდენობრივი აღწერა ამ ორი ფიზიკური პროცესისა წარმოადგენს მეტად ფართო თემას—ჩვენ მას შევუდგებით მე-IX და მე-X თავში. აქ კი მხოლოდ ნიადაგს მოვამზადებთ ამ შესწავლისთვის, განვიხილავთ რა, თუ რა ახალი პრინციპები უნდა შემოვიდნენ ნაწილაკთა

ძრარბის ასაწერად. ცხადია რომ (9) განტოლება, რომელიც დროს არ შეიცავს, ვერაფერს ვერ გვეტყვის მოძრარობის შესახებ. მაშასადამე, ჩვენ ახალი განტოლება გვესაქიროება.

2. რამდენადაც დიდი არ უნდა იყოს ორ უკანასკნელ თავში მიღებული ცოდნა, ჩვენ მხოლოდ ეხლა მივედით კვანტური თეორიის ფუნდამენტალურ, ამოცანებთან, რადგანაც დამაკმაყოფილებელი შეიძლება იყოს მხოლოდ პერტურბირებულ ატომთა შესწავლის ისეთი მეთოდი, რომელიც გამოიყენება პერტურბაციის ყველაზე მეტად მნიშვნელოვან შემთხვევისათვის სახელდობრ სინათლის შთანთქმისათვის. სწორედ შთანთქმის ამ შემთხვევაში განსხვავება კლასიკურ თეორიასა და ძველ კვანტურ თეორიას შორის ყველაზედ მეტად მნიშვნელოვანი იყო. კლასიკური თეორიის თანახმად, ატომების და მოლეკულების მიერ გამოსხივების შთანთქმა წარმოადგენს ისეთსავე რეზონანსს, როგორსაც აკუსტიკაში შევხვდებით. წარმოდგენილი ჰქონდათ, რომ ატომში ელექტრონები მოძრარობენ რაიმე დამახასიათებელი სიხშირეებით და რეაგირებენ სინათლის სხივის მათ ტოლ სიხშირეებზე, გამოყოფენ რა უწყვეტი სპექტრიდან შთანთქმის ვიწრო ფენებს. ზუსტად ასევე წარმოდგენილი ჰქონდათ, რომ ატომები მოლეკულებში ირხვეიან დამახასიათებელი სიხშირეებით, რაც იწვევს შთანთქმის ხაზის წარმოშობას ინფრა-წითელ ნაწილში. ეს მარტივი წარმოდგენები უკუგდებული იყო მას შემდეგ, რაც გაიგეს, რომ გამოსხივება რაიმე სიხშირისა შეიძლება შთაინთქას მხოლოდ გარკვეული $h\nu$ ენერჯიის მქონე კვანტებით. შთანთქმის ასახსნელად, ეხლა აუცილებელი შეიქნა არა რეზონანსის მექანიზმის აგება, არამედ ენერჯიის განსაზღვრულ რაოდენობათა შთანთქმის მექანიზმის ახსნა სიხშირეზე განსაკუთრებული, ზრუნვის გარეშე. ეს გაკეთებული იყო, როდესაც სიხშირე დაუკავშირეს ატომის ან მოლეკულის W_m და W_n ენერჯეტიულ მდგომარეობებს შთანთქმის წინ და შემდეგ, ნაცვლად იმისა, რომ დაეკავშირებინათ იგი ნაწილაკის რხევის (ან ბრუნვის) სიხშირესთან შთანთქმის პროცესის დროს. კვანტური მექანიკის ერთ-ერთი მიღწევა იმაში მდგომარეობს, რომ მან შესძლო ამ ორი თვლსაზრისის შერიგება.

ეხლა საჭიროა იღვას ψ განაწილებათა სურათების შესახებ, რომლებიც, როგორც ნაპოვნი იყო დაკვანტულ დონეებს იძლევიან, შეუერთდეს წარმოდგენა დამახასიათებელი რხევებზე.

ჩვენ უკვე უსრადლება მივაქციეთ მე-15 სურათზე გამოსახულ ψ განაწილებათა მსგავსებას, იმ ფორმებთან, რომლებსაც მიიღებენ მდგრადი ტალღები მრხევ მავთულზე. მსგავსება უფრო სრული

გახდება თუ ვიგულისხმებთ, რომ მოცულობის ყოველწერტილში ψ ფუნქციის მნიშვნელობა, მათულის წერტილის გადაადგილების მსგავსად, უწყვეტად იცვლის, დადებით ნიშანს უარყოფითზე v -ჯერ სეკუნდში. შემდეგ ჩვენ ვიგულისხმებთ, რომ სიხშირე დაკავშირებულია W ენერგიასთან $v = \frac{W}{h}$ დამოკიდებულებით ისევე, როგორც პლანკის ოსცილიატორის შემთხვევაში. ψ სიმბოლოს წინანდელ მნიშვნელობის შენარჩუნებასთან, ერთად ჩვენ ვისარგებლებთ ψ -ს დროითი მამრავლზე $(\cos 2\pi\nu t + i\sin 2\pi\nu t)$ (აქ $i = \sqrt{-1}$) ნამრავლის აღსანიშნავად, როგორც ეს ჩვეულებრივ მიღებულია დიდი Ψ ასოთი (იხ. დამატება, შენიშვნა 2). ამგვარად t მომენტში Ψ მნიშვნელობისათვის ჩვენ გვაქვს:

$$\Psi = \psi e^{-2\pi i \nu t} = \psi e^{-i 2\pi \frac{W}{h} t} \quad (33)$$

ხოლო კომპლექსურად შეუღლებული სიდიდისათვის:

$$\Psi^* = \psi^* e^{2\pi i \nu t} = \psi^* e^{i 2\pi \frac{W}{h} t} \quad (33a)$$

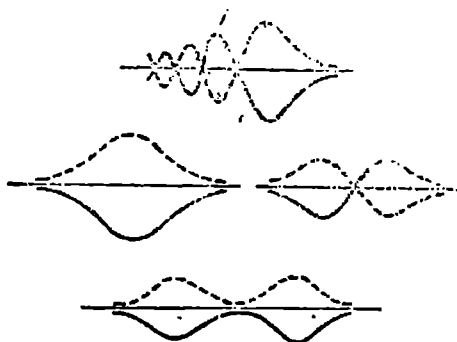
ამგვარად W_n შესაძლო ენერგიის შესაბამისი განაწილების სურათი, ირხევა თავის საკუთარი სიხშირით $\frac{W_n}{h}$. ეს განზოგადობა

გავლენას არ ახდენს განაწილების სურათების ჩვენ მიერ განხილულ ინტერპრეტაციაზე, რადგან $\Psi\Psi^* = \psi\psi^* = |\psi|^2$. არ არსებობენ არავითარი მიზეზები, რომელთა მიხედვითაც ψ ფუნქციათა მრუდებს მე-13, მე-15 და მე-27 ნახ-ზე უნდა მისცემოდათ უპირატისობა მე-40 ნახ-ზე გამოსახული მრუდების წინაშე. ჩვენი ეხლანდელი თვალსაზრისით ყოველი Ψ ფუნქცია ირხევა ამ ორი ფორმის შორის.

3. უნდა აღინიშნოს Ψ -ს რხევათა შესანიშნავი გამოყენება მე-26 ნახ-ის ამოცანის მიმართ: PQ პოტენციალურ ყუთში მოთავსებული ნაწილაკი იმოდრავებს შიგ წინ და უკან: ის ყოველთვის არ დაბრუნდება უკანვე P და Q წერტილების მახლობელ ადგილიდან, არამედ ზოგჯერ გაჯონავს მნიშვნელოვან მანძილზე ამ საზღვარს იქეთ; ამის ფარდობითი ალბათობა განისაზღვრება O გვერდზე მოყვანილი გამოთვლით.

ძნელია თავის დალწევა იმ დასკვნიდან რომ ადრე თუ გვიან ერთ-ერთი ასეთი ექსპერისის დროს იგი მიაღწევს R -ს, რის შემდეგაც რაიმე დროის განმავლობაში იმყოფება RS ყუთში. რასაკვირვე-

ბრუნვითი ენერგია, ეს მოვლენა აუცილებელი კი არაა, არამედ ნხოლოდ ალბათ იანია. და მისი ალბათობა ვაშოინატეხა განაწილებათა სურათის „განფენით“.



ნახ. 40.

ენაოთ, მიუკავართ თუ არა თეორიას, რაიმე ახალ დაშვებათა გარეშე, ამ მოსალოდნელ ეფექტთან. მდგომარეობა, რომლის დროსაც ნაწილაკი აუცილებლად მარცხენა ყუთში იწყობება, მიღებული იყო მე-35 ნახ-ზე, მე-63 გვ-ზე 25 ნახ-ის h და c განაწილებათა სურათების შეკრებით, რომლებიც ენერგიის W_1 და W_2 მახლობელ მნიშვნელობებს შეესაბამებოდნენ და ტოლ „რაოდენობებით“ იყვნენ აღებული. მოგაგონებთ, რომ ამ დროს ფუნქციები თითქმის სავსებით აკომპენსირებენ ერთი მეორეს მარჯვენა ყუთში. W_1 და W_2 ენერგიების, მეტად მცირე განსხვავებათა წყალობით რხევათა სიხშირეები ν_1 და ν_2 რომელთაც ჩვენ Ψ_1 და Ψ_2 ფუნქციებს მივაწერთ. მეტად ახლოს არიან ერთმანეთთან, მაგრამ ერთიდაიგივე მინც არ არიან, არამედ სახელდობრ:

$$\nu_1 = \frac{W_1}{h} \quad \text{და} \quad \nu_2 = \frac{W_2}{h}$$

ამ დროს სისტემის მდგომარეობა აუცილებლად უნდა აიწეროს

$$\Psi(x, t) = \Psi_1 + \Psi_2 \equiv a_1 \psi_1 e^{-2\pi i \nu_1 t} + a_2 \psi_2 e^{-2\pi i \nu_2 t} \quad (34)$$

ფუნქციის საშუალებით. ეხლა თვალსაჩინოა, რომ ეს ფუნქცია აღწერს არა სტაციონარულ მდგომარეობას, არამედ რომელიღაც პროცესს. რადგან ν_1 და ν_2 თითქმის ერთნაირებია, ამიტომ Ψ_1 და Ψ_2 დაიწყებენ რხევას ურთიერთ ფაზაში. მაგრამ რადგან სიხშირეები

ტოლნი მაინც არ არიან, დროის მიხედვით გადახვევა სინქრონიზმიდან სულ დიდი და დიდი გახდება. მარჯვენა ყუთში ფუნქციებზე-ს ურთიერთ კომპენსაცია სულ უფრო ნაკლებ და ნაკლებ სრული იქნება და Ψ -ს მნიშვნელობა მარჯვენა ყუთში სულ გაიზრდება მარცხენა ყუთის ხარჯზე, სადაც რხევები უკვე აღარ იქნებიან ერთმანეთთან ფაზაში. ეს პირველი მაგალითია იმისი, თუ როგორ აღწერს კვანტური მექანიკა ფიზიკურ მოვლენას. ჩვენ ვლებულობთ ზრდად ალბათობას იმისა, რომ ნაწილაკი რომელიც დასაწყისში ერთ ყუთში იმყოფებოდა, გადავა მეორე ყუთში იმ შუა არეს გავლით, რომელშიც კლასიკური წარმოდგენების მიხედვით მას გავლა არ შეეძლო. პოტენციალურ ბარიერში ნაწილაკების გასვლის ეს უნარი, როდესაც $W < V$ მნიშვნელოვან როლს თამაშობს კვანტურ მექანიკაში და ცნობილია „გვირაბის ეფექტის“ სახელით.

განხილულ შემთხვევაში ბუნებრივია ველოდეთ, რომ რაც უფრო დიდია შუა ბარიერა პოტენციალურ ყუთებს შორის, მით უფრო მცირეა მასში ნაწილაკის გავლის ალბათობა, დროის მოცემულ მცირე შუალედში. ადვილი საპოვნიაა, რომ სინამდვილეში მართლაც ასეა, რადგან „გადენის“ სიჩქარე პროპორციულია შეჭდგენელ რხევათა „ძგერის სიხშირის“, სახელდობრ $(\nu_2 - \nu_1)$ -ის და მაშასადამე $(W_2 - W_1)$ ენერჯის მნიშვნელობათა სხვაობის, რაც პროპორციულია e^{-kx} -სი, სადაც k ყუთებს შორის მანძილია. მაშასადამე საწყისი სიჩქარე გადენისა იცვლება მაჩვენებლიანი კანონით, შუა ბარიერის სიგანესთან დამოკიდებულებით, რაც მოსალოდნელიც იყო, და დიდ მანძილებზე ისე მცირე ხდება, რომ შეიძლება მისი უგულვებელყოფა. პირიქით, თუ ბარიერი მეტისმეტად ვიწროა, იგი შესწევს წინააღმდეგობის გაწევას, რის შედეგადაც ამ დროს ორივე ყუთი თითქოს ერთიანდება ერთ მთლიან ყუთში.

4. ეხლახან განხილულ ამოცანამ ცხადჰყო ის მნიშვნელოვანი როლი, რომელსაც თამაშობენ რხევები კვანტურ თეორიაში. ეხლა შეგვიძლია დაუბრუნდეთ მე-2 პ. ში დასმულ საკითხს, კვანტურ სიხშირეებსა და გაოხსხივების კლასიკურ თეორიის დამახასიათებელ სიხშირეების შესაძლო თანადობის შესახებ, მიუხედავად იმისა, რომ თვით განაწილების სურათები დაკვანტულ დონეებს მიეკუთვნებიან. გაჩიხილოთ ატომები ალში, ვარსკლავთა ატმოსფეროში ან სინათლის გამოშხივებელ ელექტრო დამცლელ ძილში; კვანტურ თეორიის თანახმად დროის ყოველ მომენტში ყოველ ალგხნებულ მდგომარეობაში არის ამ ატომთა რაიმე ნაწილი. სწორედ ასევე მოლექულიარულ გაზში, ოთახის ტემპერატურებზეც კი, მოლექულებს დაკვანტულ

პრუნქციითი ენერჯიათა სხვადასხვა რაოდენობანი აქეთ, როგორც ახსნილი იყო მე-8 გვ-ზე. ე. ი. მხოლოდ მათი ნაწილი იმყოფება ძირითად დონეზე. ამას გარდა, ძირითად მდგომარეობაში ყოველთვის ერთიანი იგივე მოლეკულები კი არ აღმოჩნდებიან; მოლეკულები განუწყვეტლივ გადადიან ერთი მდგომარეობიდან მეორეში ენერჯიის შთანთქმისა და გამოსნივების გამო. შეიძლებოდა გვეფიქრა, რომ ერთნი უნდა აგვეწერა Ψ_1 ფუნქციის დახმარებით, რომელიც ძირითად დონეს მიეკუთვნება, მეორენი — Ψ_2 ფუნქციის დახმარებით, სხვანი Ψ_3 -ით და ა. შ. მაგრამ სინამდვილეში აუცილებელია დაშვება, რომ ჩვენ არა გვაქვს არაერთიანი საშუალება დავადგინოთ, თუ როგორ მდგომარეობაში იმყოფება მოცემულ მომენტში ჩვენი სიმრავლის ნებისმიერად არჩეული რომელიმე ატომი. არსებობენ მხოლოდ ზოგიერთი ალბათობანი მოლეკულების 1, 2 ან 3... მდგომარეობაში ყოფნისა და რადგან ეს ალბათობანი ერთნაირია ყოველი მოლეკულისათვის, ამიტომ სხვადასხვა მდგომარეობებში მოლეკულების აღსაწერად ჩვენ უნდა ვისარგებლოთ არა სხვადასხვა Ψ , განაწილება ია სურათით, არამედ ერთადერთი სურათით, რომელიც ერთნაირია ყველა მოლეკულისათვის. მას ისეთივე სახე ექნება, როგორიც (23)-ში:

$$\Psi = a_1 \Psi_1 + a_2 \Psi_2 + a_3 \Psi_3 \dots \quad (35)$$

სიმარტივისთვის ავიღოთ ჯერ მხოლოდ ორი მდგომარეობა, რომელთათვისაც Ψ კანისაზღვრება (34) ფორმულით, ხოლო მისი შეუღლებული ფუნქცია ფორმულით:

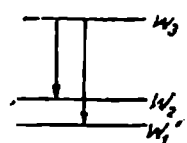
$$\Psi^* = a_1^* \psi_1^* e^{2\pi i \frac{W_1}{h} t} + a_2^* \psi_2^* e^{2\pi i \frac{W_2}{h} t}$$

$\Psi\Psi^*$, მისალბებ:თ, გადავამრავლოთ ორივე გამოთქმა. შედეგად მივიღებთ კვანტურ თეორიის ერთ უმეტესად მნიშვნელოვან შედეგთაგანს.

$$\begin{aligned} \Psi\Psi^* = & a_1 a_1^* \psi_1 \psi_1^* + a_2 a_2^* \psi_2 \psi_2^* \pm a_1 a_2^* \psi_1 \psi_2^* e^{2\pi i \frac{W_2 - W_1}{h} t} + \\ & - 2\pi i \frac{W_2 - W_1}{h} t \\ & + a_1^* a_2 \psi_1^* \psi_2 e \end{aligned} \quad (36)$$

ჩვენ ვხედავთ, რომ ცალკეულ მდგომარეობათა სათანადო სიხშირეები მოისპვენ, ხოლო ამის ნაცვლად განაწილების ს. რათი ირბევა $\frac{W_2 - W_1}{h}$ სიხშირით. ეს სწორედ ის არის რაც საჭიროა ახალ-

თეორიაში კლასიკურ და კვანტურ წარმოდგენების გასაერთიანებლად. ეს შედეგი საშუალებას გვაძლევს ვისარგებლოთ კვანტურ დამოკიდებულებით შთანთქმისა და გამოსხივების დროს, რეზონანსის კლასიკურ წარმოდგენის გარეშე. როგორც სუსტიც არ უნდა იყოს დაცემულ გამოსხივების ინტენსივობა, ატომს არ შეუძლია ერთზე ნაკლები კვანტის შთანთქმა. შთანთქმის კოეფიციენტის გამოთვლა მე-IX თავში იქნება მოცემული.



ნახ. 41.

ესლა შეგვიძლია ვნახოთ, რა პასუხს იძლევა კვანტური მექანიკა ერთ კითხვაზე, რომლის შესახებაც ძველ თეორიებში არ იყო აზრთა ერთიანობა.

ვთქვათ ისრები 41 სურ-ზე გამოსატყვევ W_2 -მდგომარეობიდან ორ შესაძლო კვანტურ გადასვლას სათანადო სპექტრალურ ხაზების გამოხსივებით. ძველ კვანტურ თეორიის არსებითი ნაწილი იმის მტკიცებაში მდგომარეობდა, რომ დროის ალტერულ მომენტში ატომს შეუძლია გამოასხივოს ან ერთი, ან მეორე ამ მონოქრომატიულ ხაზთაგანი, მაშინ როდესაც კლასიკურ თეორიის მიხედვით ელექტრონს შეეძლო გამოესხივებინა სხვადასხვა სიხშირეები ერთდროულად მსგავსად იმისა, როგორც გრამოფონის ფირფიტას შეუძლია ერთდროულად სხვადასხვა სიმაღლის ტონების გადმოცემა.

მაგალითად ზემანის ეფექტში, როდესაც ხაზი ორდება, კლასიკურ თვალსაზრისის მიხედვით, ორივე სიხშირე ერთიდაიგივე ელექტრონის მიერ გამოსხივდება, მაშინ როდესაც ბორის თეორიის თვალსაზრისით, პირველ ხაზს ატომთა ერთი ნაწილი გამოასხივებს, ხოლო მეორე ხაზს — მეორე ნაწილი. ეს საკითხი რომ გადაწყდეს ჩვენ უნდა დავეწყოთ W_2 გამოთქმა იმ მდგომარეობისთვის, რომელიც რამოდენიმე დონისაგან შესდგება.

კლასიკურ თეორიის თანახმად რხევა შეიკრიბება რამოდენიმე სიხშირის ჰარმონიულ რხევათაგან. მაგრამ კვანტური მექანიკა ამას იმ აზრს ანიჭებს, რომ არსებობს გარკვეული აღზათობა ყოველი ამ სიხშირის კვანტის გამოსხივებისა. თანამედროვე თეორია განზრახ გამოურკვევლად სტოვებს გამოსხივების მექანიზმს, რადგან საკითხს ამის შესახებ განუზღვრელობის პრინციპის თანახმად. აზრი არა აქვს.

5. ესლა ჩვენ შეგვიძლია გადავწყვიტოთ პირველად დასმული ამოცანა $\frac{\partial \psi}{\partial t}$ -სთვის ზოგადი გამოსახვის პოენისა. (33)-ის განწარმოებით t -თი მივიღებთ:

$$\left. \begin{aligned} \frac{\partial \Psi}{\partial t} &= -\frac{2\pi i W}{h} \Psi - 2\pi i \frac{W}{h} t = -\frac{2\pi i}{h} W \Psi \\ W \Psi &= \frac{i\hbar}{2\pi} \frac{\partial \Psi}{\partial t} \end{aligned} \right\} \quad (37)$$

პრედინგერის განტოლება შეიძლება შემდეგი სახით წარმოვიდგინოთ:

$$W \Psi - V \Psi + \hbar \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = 0, \quad (38)$$

სადაც $\hbar = \frac{h^2}{8\pi^2 m}$. (37)-ის (38)-ში ჩასმით, მივიღებთ განტოლებათა შემდეგ წყვილს:

$$\frac{i\hbar}{2\pi} \frac{\partial \Psi}{\partial t} - V \Psi + \hbar \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = 0, \quad (39)$$

$$-\frac{i\hbar}{2\pi} \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} - V \Psi^* + \hbar \frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial x^2} = 0. \quad (40)$$

ამ სახის განტოლებანი თამაშობენ ისეთივე როლს განაწილება-თა სურათების ცვლილების წინასწარმეტყველებაში, როგორსაც (2) და (9) თამაშობდნენ თვით სურათების სახის გაწინასწარმეტყველებაში. შესანიშნავია, რომ (39) ცხადათ შეიცავს მამრავლს $\sqrt{-1}$, რომელიც ზრდის ψ ტალღების, როგორც ფიზიკურ რეალობის ინტერპრეტაციის სიძნელეს. მაგრამ ამას მნიშვნელობა არა აქვს, რადგან ისინი ნაწილაკების მდგომარეობას და მასთან დაკავშირებულ დაკვირვებად სიდიდეებს განსაზღვრავენ. ატომზე მოხდენილ რაიმე ცდების შედეგების წინასწარ განსაზღვრისთვის, სრულებით არ არის აუცილებელი, რომელიმე დეტალურ ატომურ მოდელის არსებობა. ასე მაგალითად, რომ ვისარგებლოთ (36) მნიშვნელოვანი შედეგით არ არის საჭირო არც იმის ცოდნა, თუ რა ირხევა. არც დაშვება, რომ $\nu_1, \nu_2, \nu_3, \dots$ აქეთ რაიმე გარკვეული მნიშვნელობანი, რადგან მნიშვნელოვანია მხოლოდ $(\nu_m - \nu_n)$ სხვაობები. შემდეგ, შემოგვყავს-რა რხევები, ბუნებრივი იქნებოდა მათი გამოსახვა $\Psi_m = \psi_m \cos 2\pi\nu_m t$ სახის უბრალო პერიოდული ნამრავლის საშუალებით; მაგრამ ეს არ არის მიზნისმიერი, რადგან ის საჭირო (36) შედეგთან კი არ მიგვიყვანს, არამედ მეორე გამოსახვა-სთან, რომელშიც $\frac{(W_m - W_n)}{\hbar}$

სიხშირეებს თანადევნ $\frac{(W_m + W_n)}{h}$ სიხშირეები. წარმოსახვი-

თი სიდიდეებით სარგებლობა არსებითია და მას ის დამატებითი უპირატესობაც აქვს, რომ როდესაც Ψ განისაზღვრება (33) განტოლებით, მაშინ $\Psi\Psi^*$ სიდიდე, ინტეგრირებული მთელი სივრცეში, არ იცვლება დროის მიხედვით, არამედ ერთის ტოლი რჩება ξ -ს ყველა მნიშვნელობებისთვის.

6. ალბათ, ფიზიკურ მოვლენის ცხადად აღწერის ცდის დროს გამოქვეყნებულ სიძნელეთა მიზეზი, განუზღვრელობათა თანადობა უნდა იყოს: ნაწილაკთა ყოველგვარ მოძრაობის დროს ჩვენ სიმბოლურ აღწერით უნდა დავკმაყოფილდეთ. ამიტომ Ψ ტალღები თავისუფალ ნაწილაკებისათვის ამ წიგნში არ განიხილებოდნენ აქამდე. შეიძლებოდა ლოდინი, რომ მრბენი ბრტყელი ტალღის გამოსახვისთვის გამოსადეგია ფიზიკაში ჩვეულებრივ ხმარებული გამოთქმა: $A \cos 2\pi \left(\nu t \pm \frac{x}{\lambda} \right)$. მაგრამ ქვემოთ ნაჩვენები იქნება, რომ ჩვენ უნდა ვისარგებლოთ გამოთქმით:

$$\psi = Ae^{\pm 2\pi i \frac{x}{\lambda}}, \quad \Psi = Ae^{-2\pi i \left(\nu t \pm \frac{x}{\lambda} \right)} \quad (41)$$

აქ ამპლიტუდა A თავისებური მანორმირებული მამრავლია, რადგან ნაწილაკთა სიმკვრივე ნაკადში ანუ ალბათობა მოცულობის ერთეულში ან სიგრძის ერთეულში ნაწილაკის პოვნისა ტოლია:

$$\rho = \Psi\Psi^* = AA^*. \quad (42)$$

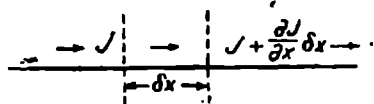
განვიხილოთ პირველად x ღერძის პარალელურად მოძრავე მაკროსკოპიულ ნაწილაკთა ნაკადი. თუ ყოველ განივკვეთში გამავალ ნიწილაკთა რიცხვი ერთიდაიგივეა, ე. ი. თუ j დენს ყველგან ერთიდაიგივე მნიშვნელობა აქვს, მაშინ არსად არ მოხდება ნაწილაკთა დაჯროვება. ხოლო თუ j სადმე დამოკიდებულებას x -საგან, მაშინ ამ ადგილზე სიმკვრივე ან უნდა გაიზარდოს ან უნდა შემცირდეს. განვიხილოთ პატარა δx არე; თუ ამ არეში შემავალი დენი j -ს ტოლია, გამოშვებული ტოლი იქნება $\left(j + \frac{\partial j}{\partial x} \delta x \right)$.

დროის δt შუალედში ნაწილაკთა რიცხვი განსახილავ არეშ გაიზარდება ან, პირიქით, შემცირდება $\frac{\partial j}{\partial x}$ წარმოებულის ნიშნის მი-

სედვით $\frac{\partial j}{\partial x}$ δx δt ტოლი სიდიდით. ორივე შემთხვევაში სიმკვრივე განსახილავ არეში შეიცვლება

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = - \frac{\partial j}{\partial x} \quad (4.3)$$

გამოთქმით განსაზღვრულ სიჩქარით; ეს გამოთქმა სხვას არაფერს წარმოადგენს, გარდა მატერიის შენახვის განტოლებისა.



ნახ. 42.

იგი რომ Ψ ტალღებზე გამოვიყენოთ, აუცილებელია $\frac{\partial \rho}{\partial t}$ -სათვის გამოთქმის პოვნა. ეს ადვილად კეთდება (39) და (40) განტოლებათა დახმარებით. გავამრავლოთ (39)-ის ყველა წევრი Ψ^* -ზე, ხოლო (40) ყველა წევრი Ψ -ზე და გამოვაკლოთ. მაშინ მივიღებთ:

$$\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial t} + \Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} - \frac{i\hbar}{4\pi m} \left(\Psi^* \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} - \Psi \frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial x^2} \right) = 0, \quad (44)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \Psi \Psi^* = - \frac{\partial}{\partial x} \left\{ \frac{\hbar}{4\pi m i} \left(\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} - \Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} \right) \right\}. \quad (45)$$

(45)-ის შედარებით (43)-თან და იმის მხედველობაში მიღებით, რომ $\Psi \Psi^*$ შეესაბამება ρ -ს, ჩვენ ვხედავთ, რომ ფიგურალურ ფორჩხილებში მდგომი გამოთქმა უნდა შეესაბამებოდეს j -ს. ეს რომ ნათელი გახდეს განვიხილოთ პირველყოვლისა უმარტივესი მოძრაობა გარეშე ძალების არ არსებობისას, რომლისთვისაც დე-ბროილის ტალღის სიგრძე მუდმივია. თუ (41) გამოხატავს ნაწილაკთა ერთგვაროვან ნაკადს, მაშინ მისი საშუალებით მიღებული მნიშვნელობა უნდა წარმოადგენდეს უბრალოდ ρ -ს ნამრავლს v -ზე—ე. ი. ნაკადის სიჩქარის სიმკვრივეზე ნამრავლს. ავიღებთ რა ჯერ (41)-ს მინუს ნიშნით და მოვახდენთ გადიფერენციალებას x -ით, ჩვენ ვიპოვით

$$\begin{aligned} \frac{\hbar}{4\pi m i} \left(\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} - \Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} \right) &= \frac{\hbar v}{4\pi m i} \left(\frac{2\pi i A A^*}{\lambda} + \frac{2\pi i A^* A}{\lambda} \right) = \\ &= \frac{A^2 \hbar}{m \lambda} = \rho v, \end{aligned} \quad (46)$$

რადგან $\lambda = \frac{\hbar}{mv}$. ამ გვარად დენისთვის მიღებული გამოთქმა შე-

პმება მოსალოდნელს. სწორედ ასევე (41) გამოთქმა აღებული მოპირდაპირე ნიშნით, აღწერს ერთგვაროვან ნაკადს მოპირდაპირე მიმართულებით. ბოლოს, თუ ψ -აქვს სახე;

$$\psi = Ae^{-2\pi i \frac{x}{\lambda}} + Re^{2\pi i \frac{x}{\lambda}} \quad (47)$$

სადაც A და B ნამდვილნი არიან, მაშინ ადვილად შემოწმდება, რომ (46) განტოლება რეზულტირებულ ნაკადს იძლევა. კერძო შემთხვევაში, როცა $B = A$ რეზულტირებული ნაკადი ნულის ტოლი იქნება. მართლაც ამ შემთხვევაში ψ ფუნქცია პირდაპირ $2A \cos 2\pi \frac{x}{\lambda}$ -ს

ტოლია, ე. ი. არ შეიცავს წარმოსახვითობას, ასე რომ საერთოდ არ არის ნაკადი. მართლაც (45)-ში $V = 1$ -ის არსებობის წყალობით ნამდვილი დენი j შეიძლება მხოლოდ იმ შემთხვევაში მივიღოთ. ეფ (44) და (46) განტოლებათა ფრჩხილებში მდგომი გამოთქმები წარმოსახვითებია.

წინა თავებში განვიხილავდით რა სხვადასხვა პოტენციალურ ყუთებს, ჩვენ მიუთითებდით, რომ ყველა თავისი წერტილებით ენერგეტიულ მრუდზე მალა მდებარე ჰორიზონტალური ხაზი, ყოველთვის გამოხატავს თავისუფალ ნაწილაკის H' ენერგიას. ენერგიის ასეთ მნიშვნელობას შეესაბამება H' განაწილებათა სურათი, რომელიც ენერგეტიულ მრუდის სახით განისაზღვრება. მისი მიღება ჩვეულებრივი ბერხით შეიძლება, ამოვხსნით-რა შრედინგერის განტოლებას H' ფუნქციის მოცემულ კერძო სახრანს. ამ შემთხვევაში არავითარი დაკვანტვა არ არის H' -ს ყველა მნიშვნელობანი იძლევიან განაწილების შესაძლო სურათებს, რომლებიც მთელ განფენილობაზე რხეადნი არიან. განაწილების ეს სურათები მნიშვნელოვანია სპეციალურ ამოცანებში. მაგალითად, როდესაც ელექტრონი ატომიდან ამოვარდება, მისი განაწილების პირვანდელი სურათი შეიცვლება ისეთ სურათით, რომელიც განთავისუფლებულ დამშორებად ელექტრონს გამოხატავს.

სხვა ამოცანები. რომლებშიც მნიშვნელობა აქვს თავისუფალ მოძრაობას, ეს არის ამოცანები ნაწილაკთა შორის შეხლათა შესახებ. ისინი შეიძლება გაიყონ ორ ტიპად იმისგან დამოკიდებულებით, გვიანტერესებს ჩვენ ორივე ნაწილაკის, თუ ერთი მათგანის ყოფაქცევა. ბუნებრივია, მეორე ტიპის ამოცანები უფრო ადვილი არიან და შეიცავენ, მაგალითად, ისეთ პრობლემებს, როგორიც არის ატომების მიერ ელექტრონთა ნაკადის დრეკადი გაფანტვა; ამ დროს ჩვენ გვინდა

გაფანტულ ელექტრონთა განაწილების გაგება მიმართულებათა მიხედვით.

თუ ერთგვაროვან ნაკადიდან გამოვალთ, მაშინ, (41) ფუნქცია გამოხატავს ბრტყელ ტალღას იქამდე, ვიდრე ($II - I'$) მნიშვნელობა მუდმივი რჩება. მაგრამ, თუ ამ ტალღას გზაზე ატომს ან მოლეკულას მოვითავსებო, მაშინ ($II' - I'$) მნიშვნელობა ძალიან შეიცვლება მცირე არეში. ჩვეულებრივ, II' ფუნქცია და მისი წარმოებულები უწყვეტი უნდა იყვნენ საზღვარზე, რის შედეგადაც მივალვით სფერულ ტალღას, რომელიც ყველა მიმართულებით ვრცელდება; სწორედ ისე როგორც სინათლის ნაკადის გზაზე მოთავსებულა, ამრეკლავ ნივთიერების ნაჭერი ფუნქციას სუსტ სფერულ ტალღას. რომელიმე მიმართულებით გავრცელებული ტალღის ამპლიტუდის კვადრატი განსაზღვრავს იმის ალბათობას, რომ დაცემული ნაწილაკი გაფანტება ამ მიმართულებით.

მე-II თავში შემოვიტანეთ რა წარმოდგენა განაწილებათა თეორიულ სურათებზე, ჩვენ ყურადღება მივაქციეთ იმ მნიშვნელოვან მდგომარეობას, რომ სურათის სახე არაა დამოკიდებული იმ ნაწილაკთა რიცხვზე, რომლებსაც იგი წარმოგვიდგენს.

ეხლა ჩვენს მიერ განხილულ II' ფუნქციებს შეუძლია ამ ფაქტის ილიუსტრირება. ნაკადის განხილვისას ბუნებრივი იყო გამოვსუდიყავ ისეთი II' ტალღიდან, რომელიც გამოხატავდა მრავალ ერთნაირ ნაწილაკთა შემცველ ნაკადს. მაგრამ ცხადია, რომ ერთად ერთი ნაწილაკის აღსაწერად, რომელიც თანაბრად მოძრაობს თუ გარე ძალები არ არსებობენ, უნდა გამოვიყენოთ ისეთივე (41) ერთგვაროვანი ტალღების ჯგუფი. ნაწილაკის არავითარი სხვა მოძრაობის მოცემა არ შეუძლია (41) ფუნქციას, რადგან (42)-ის თანახმად, $II' = \text{სიდიდე ყველგან ერთნაირია}$. ეს დაკავშირებულია იმასთან, რომ მოძრაობის რარდენობას ჩვენ გარკვეული λ -თი გამოხატული მნიშვნელობა მივანიჭეთ და, მაშასადამე, განუღწერელობათა (26) თანაფარდობის თანახმად, არ შეგვიძლია გვქობდეს არავითარი ცნობა იმის შესახებ, თუ სად იმყოფება ნაწილაკი. რომ შეიძლებოდეს რაიმე მონაცემების მძღება მოძრაი ნაწილაკის მდებარეობაზე, აუცილებელია ისეთ II' ფუნქციით სარგებლობა, რომელიც გააერთიანებს სხვადასხვა ენერგეტიულ დონეებს, - როგორც ეს (30)-ში იყო გაკეთებული შემბული ნაწილაკისთვის. როდესაც თავისუფალი ნაწილაკის აღწერისათვის სარგებლობენ ენერჯის მნიშვნელობათა უწყვეტი შეაღედით, როგორც 33 ნახ-ზე, მაშინ რთულ II' ფუნქციას ტალღური პაკეტი ეწოდება.

პირველსაწყისი განუზღვრელობა ამ $\Psi(x, y, z)$ ფუნქციის...
 ე. ი. პირველსაწყისი არასიხუსტე ჩვენი ცნობებისა ნაწილაკის მდებარეობის შესახებ დამოკიდებულია იმაზე, თუ როგორ იყო „მომზადებული“ ნაწილაკი.

ამოცანების უმეტეს ნაწილში არ მოითხოვება ნაწილაკის მდებარეობის ცოდნა მოცემულ მომენტში; მაგალითად, ელექტრონების გაფანტვისას ჩვენ ვვინდა ვიცოდეთ, რა დაემართება ელექტრონს, რომელიც s სიჩქარით ეცემა; ამასთან ერთად ასეთი ნაწილაკი გამოისახება ბრტყელი მონოქრომატიული ტალღით. ძველ მექანიკაში მიღებული იყო გამოთქმა, რომ თუ ელექტრონი α მანძილზე გაივლის ატომის ცენტრიდან, იგი გადაიხრება განსაზღვრულ θ კუთხით. მაგრამ, ეხლა, ჩვენ არ შეგვიძლია ვიცოდეთ ზუსტი მნიშვნელობანი θ და α სიდიდეებისა საწყის მომენტში; მაშასადამე ტალღის ფრონტი ჩვენს მიერ განხილულ მონოქრომატიულ დამცემი ტალღისა შეიცავს თავისთავში α -ს ყველა მნიშვნელობებს. ამ მეთოდების საშუალებით შეიძლება გამოვთვალოთ სხვადასხვა ელემენტების ატომთა მიერ ნაწილაკთა გაფანტვის ინტენსივობა, შესაბამისი $V(x, y, z)$ ფუნქციის შემოტანით.

7; ჩვენ ვნახეთ, თუ როგორ უნდა აიწერონ მოძრავი ნაწილაკები. გადავიდეთ ისევ წყალბადის ატომის განხილვაზე, მისი მოძრაობის რაოდენობის მომენტის საკითხთან დაკავშირებით. ჩვენ ვვინდა ვიცოდეთ — ჰქმნია თუ არა გულანა ირგვლივ მოძრავი ელექტრონი მუდმივ წრიულ j -დენს. ამ მიზნით შემოვიტანოთ მე-(12) განტოლებაში კომპლექსური ამპლიტუდა, როგორც მე-(2)-ში იყო გაკეთებული, $B = \pm iA$ დაბეჭდით. მაშინ მივიღებთ

$$\Phi = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{\pm im\varphi} \quad (48)$$

თუ s -ით აღვნიშნავთ რაიმე მანძილის, გახომილს r რადიუსიანი წრებას s გასწვრივ, მაშინ $\frac{s}{r} = \varphi$. ჩვენ მივიღებთ (45) განტოლებაში შესატანად გამოსადგე Ψ ტალღას, თუ განვიხილავთ ელექტრონს, რომლის მოძრაობა შემოთარგლულია r რადიუსიანი წრებაზე და დავწეროთ

$$\Psi(s) = \frac{1}{\sqrt{2\pi r}} e^{-i\left(2\pi vt \pm m \frac{s}{r}\right)},$$

სადაც m კვანტური რიცხვია.

ებლა ელექტრული დენის სიდიდის და მისი მაგნიტური მომენტის, რომელიც ტოლია დენისა და კონტურის ფართობის ნამრავლის, საპოვნელად, შეიძლება (45) ფორმულით სარგებლობა. ელექტრონის მასის μ -თი აღნიშვნის და ჯერ დადებითი ხიშხის აღების შემდეგ გავადიფერენციალოთ წრეხაზის გასწვრივ. შედეგად მივიღებთ:

$$\frac{h}{4\pi\mu i} \left(\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial s} - \Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial s} \right) = \frac{\mu}{4\pi\mu i} \left(\frac{im}{2\pi r^2} + \frac{im}{2\pi r^2} \right) = m \frac{h}{4\pi^2 r^2 \mu} \quad (49)$$

ამგვარად ვღებულობთ წრიულ დენს. დაკავშირებულს $\frac{mh}{2\pi}$ მოძრაობის რაოდენობის მომენტთან. დენს ელექტრო-მაგნიტურ ერთეულებში მივიღებთ, თუ (49) გამოთქმას $\frac{e}{c}$ -ზე გავამრავლებთ. სწორედ ეს დენი ახდენს, როგორც მე-II თავში იყო აღნიშნული თავიანთურ შტერნ-გერლახის ცდას ელექტრონის სპინზე და იწვევს ელექტრონის დონეების ცნობილ განცალკებას დუბლეტებათ, ტრიპლეტებათ და ა. შ. s მდგომარეობისათვის $l = 0$, $m = 0$, წრიული დენი არ არსებობს და აპიტომ ელექტრონის დონეთა განცალკება არ ხდება. მაგნიტურ მომენტის სიდიდის მიღება შეიძლება ამ დენის გარავლებით πr^2 ფართობზე:

$$m \frac{h}{4\pi^2 r^2 \mu} \frac{e\pi r^2}{c} = m \frac{eh}{4\pi\mu c}$$

ზაგრამ $\frac{eh}{4\pi\mu c}$ სიდიდით, სწორედ ბორის ერთი მაგნიტონია (ტოლი ელექტრონის სპინის მომენტის); ამ გვარად. მაგნიტური მომენტი შეიძლება ახ. ნულს უდრიდეს (როცა $m = 0$), ან ბორის მაგნიტონის მთელი რიცხვს. l -განაწილების იმ სურათისათვის, რომელთანაც $\frac{lh}{2\pi}$ მოძრაობის რაოდენობის მომენტია დაკავშირებული, მაგნიტურ მომენტს შეუძლია მიიღოს ნებისმიერი მთელი მნიშვნელობა l -დან — l მაგნიტონამდე. პლიუს ან მინუს ნიშნები (49)-ში, ისევე როგორც (41)-ში შეესაბამებიან მოპიროდაპირე მიმართულებით მოძრაე ელექტრონებს. თუ მოცემულ დონეზე იყოფება ერთი ელექტრონი m კვანტური რიცხვით და მეორე ელექტრონი — m კვანტური რიცხვით, მაშინ როგორც აღნიშნული იყო მე-IV თავში, მათი მაგნიტური მომენტები ურთიერთ ბათილდებიან, რის შედეგადაც ყოველი ჩაკეტილი გარსი დიამაგნიტურია.

8. ნაწილაკისთვის, რომელიც პოტენციალურ ყუთთან არის შებ-
პული, j —დენი ხელს უნდა უდრიდეს ყველა დაკვანტულ დონი-
სათვის. გარდა ღერძს ირკვილი ბრუნვის სპეციალურ შემთხვევისა,
რაც წინა პარაგრაფში იყო განხილული. პოტენციალურ ყუთში
უბრალოდ წინ და უკან მოძრაეი ნაწილაკის შემთხვევაში, U
იყოფიეები ყოველ შესაძლო დონისათვის მდგარ ტალღებს წარმოად-
გენენ როგორც 15, 36 და ა. შ. ნახ-ზე. მიუხედავად ამისა. ამ თავის
მე-3 პ.ში ნაჩვენები იყო, რომ თუ აგებულია რთული U ფუნქცია,
მაშინ შემადგენელი ფუნქციეები არ სახხედებიან ერთმანეთს ფაზაში
და განაწილებას აიძულებენ გადაადგილდეს. თუ U ფუნქცია გამო-
ვატავს ნაწილაკის კემშარტი მოძრაობის ალბათობას, მაშინ შეიძ-
ლებოდა გვეფიქრა, რომ მათ უნდა შეესაბამებოდეს ნამდვილი დე-
ნი, მიუხედავად იმისა, რომ U ფუნქციის ყოველ შემადგენლისა-
თვის, ცალ-ცალკე აღებისას, j დენი ხელის ტოლია.

ეს რომ შევამოწმოთ, ჩავსვათ (34) (37)-ში, გულისხმობით რომ
ყველა სიდიდეები: ψ_1, ψ_2, a_1, a_2 —ნამდვილებია. მაშინ ჩვენ მიე-
ღებთ:

$$\begin{aligned} U^* \frac{\partial U}{\partial x} - U \frac{\partial U^*}{\partial x} &= \left(a_1 a_2 \psi_1 \frac{\partial \psi_2}{\partial x} - \right. \\ &- \left. a_2 a_1 \psi_2 \frac{\partial \psi_1}{\partial x} \right) \left(e^{2\pi i(\nu_1 - \nu_2)t} - e^{-2\pi i(\nu_1 - \nu_2)t} \right) = \\ &= 2i a_1 a_2 \left(\psi_1 \frac{\partial \psi_2}{\partial x} - \psi_2 \frac{\partial \psi_1}{\partial x} \right) \sin 2\pi(\nu_1 - \nu_2) t. \quad (50) \end{aligned}$$

ამ გამოთქმის $\frac{i\hbar}{4\pi m}$ -ზე გამრავლებით ჩვენ მივიღებთ ნამდვილ
დენს, რომლის მიმართულება პერიოდულად იცვლება. ამ ხერხით
ორი ან მეტი მდგარი ტალღების შეერთებით-ყოველთვის შეიძლება
აღწერა ნაწილაკის, რომელიც სასურველ მიმართულებით მოძ-
რაობს დროის გარკვეულ პონაკვეთში, თუმცა ზოგიერთ სხვა მო-
წვეულებში მოძრაობა ხდება შექცეულ მიმართულებით.

ასეთ ტალღური პაკეტის შემწეობით შეიძლება გამოვხატოთ,
საგალითად, ლითონში მოძრაეი ელექტრონი.

მე-13 ნახ-ზე წარმოდგენილ ამოცანაში, რომლისთვისაც V ყო-
ველგან უდრის ex -ს, შეუძლებელია W -ს კერძო მნიშვნელობია არ-
ჩეივთ მივიღოთ U ფუნქცია, ანალოგიური (41)-ის, გამოხატეული
 x ღერძის პარალელური ნაკადისა. ამას უნდა ველოდეთ რადგან,

თუმცა ნაწილაკები არ უნდა აირეკვლებოდნენ იმ წერტილში სადაც $V = W$, მაგრამ სადმე ისინი მიიწევიან უნდა კობრუნდნენ უკან. მაშასადავე, დენი მარჯვნიდან მარცხნივ უნდა უდრიდეს დენს მარცხნიდან პარალელურად და ჩვენ უნდა ვხედავდეთ მდგარი ტალღები გვერდში. მათგან შეიძლება შეიქნეს ტალღური პაკეტი. რომელიც იმპობრავებს საზღვრისკენ და იქ სრულ არეკვლას განიცდის.

ხოლო თუ ენერგეტიული მრუდი AB , იმის ნაცვლად რომ უსახლოვროდ იბრუნებოდა, საიბე დაიწყებს ქვენოდ სვლას, როგორც, მაგ. BC მე-43 ნახ-ზე, მაშინ სურათზე ნაჩვენებ W მნიშვნელობათათვის პოტენციალური ბარიერი, რომლისთვისაც $W < V$, ასაზღვრებს ორ დასაშვებ არეს. იგივე გვაქვს 43, b ნახ-ზეც; ჩვენ ვიცით, რომ ამ შემთხვევაში, აკრძალულ არეში განისაზღვრება (4) განტოლებით. მაგ. (46) და (47) გამოთქმები მიგვითითებენ იმაზე, რომ თუ (4)-ში შევიტანთ კომპლექსურ ამპლიტუდას, მაშინ მიიღება აუდშივი დენი, შიშდინარე აკრძალულ არეში.

$$U = (Ce^{-ikx} + iDe^{ikx})e^{-2\pi i\nu t}$$

დაშვებით სადაც C და D ნამდვილებია, და ამ გამოთქმის (45)-ში ჩასმით მივიღებთ j -სათვის გამოთქმას

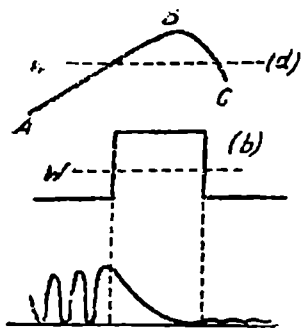
$$j = \frac{\hbar k}{\pi m} CD, \quad (61)$$

სიდაც k განისაზღვრება (5) ფორმულით.

დაუშვათ ვხლა, რომ საკმაოდ ფართო პოტენციალურ ბარიერზე მარცხნიდან ეცემა U ტალღა (ხოლო მარჯვნიდან არაფერი არ ეცემა). ბარიერიდან არეკვლილი ტალღის ამპლიტუდა უკვე აღარ იქნება ბუსტად დაცემის ტალღის ამპლიტუდის ტოლი, რის გამოც მარცხნიდან მარჯვნივ მიედინება სუსტი დენი, რომელიც გაჟონავს ბარიერში და გახდება მოპირდაპირე მხარზე. მე-III თავში ნაჩვენები იყო, რომ კლასიკურ ბარიერის იქეთ x მანძილზე ნაწილაკის გაჟონვის ალბათობა პროპორციულია e^{-2kx} -ის. ამიტომ სავსებით კანონიერია დაშვება, რომ თუ d -- პოტენციალური ბარიერის სიგანეა, ნახ. 43, b , მაშინ გამოვაღ და დაცემის ტალღების ინტენსივობათა შეფარდება e^{-2kd} რიგის იქნება. U -ს განაწილების მთელი სურათი შეიძლება მივიღოთ სხვადასხვა ნაქრების ერთ მთლიანში

შეერთებით, როგორც ეს 25—29 ნახ-ზეა. ამისათვის U და $\frac{\partial U}{\partial x}$

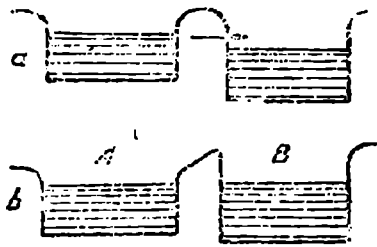
აიღებინან ყოველთვის უწყვეტები ფაჭების და A, B, C, D და ა. შ. მუდმივების სათანადო შერჩევის შემდეგობით. მას შემდეგ რაც ეს გაკეთდება, თურმე, გამომავალი დენი გარკვეულ ფარდობაშია დაცემის დენთან; ამასთან ერთად, იმ შემთხვევის გამოკლებით, როცა ბარიერი მეტის მეტად მცირეა, ეს ფარდობა სიდიდის რივით e^{-2kd} -ს ტოლია.



ნახ. 43.

9. ამოცანების ამ ტიპს ჩვენ მე- X თავში გავარჩევთ. უხლა კი, როგორც ჩვენ ვფიქრობთ, ყველაზე უკეთესია თავის დამთავრება იმ ფიზიკური პროცესის აღკვერთ, რომელშიც მნიშვნელობა აქვს (51) გამოთქმით განსაზღვრულ დენს. განვიხილოთ თავი: უკუალ ელექტრონების ყოფა-ქცევა მაშინ, როდესაც ლითონს

ორი ნაჭერი ერთმანეთის ახლოს არის მოთავსებული. რადგან ლითონს ყოველი ნაჭერთაგანი წარმოადგენს პოტენციალურ ყუთს, ამიტომ ორი ნაჭერი შეესაბამება ორ ყუთს მათ შორე პოტენციალური ბარიერი, როგორც ის მე 26 ნახ. ია ამოცანაშია და რომელიც შემდეგ ამ თავია მე-3 კ-ში განვიხილეთ. ელექტრონებს, რომლებიც შეიქრებიან აკრძალულ არეში თანდათან შეუძლიათ მოექცნენ ლითონია ერთი ნაჭრიდან მეორეში. თუ ლითონები ერთნაირებია, მაშინ ერთ მიმართულებით მოძრა ვი ელექტრონების რიცხვი ტოლია მეორე მიმართულებით მოძრაის და შესამჩნევი არაფერი მოხდება. თუ კი ეს ლითონები სხვადასხვა ელემენტები არიან, მაგალითად სპილენძი და თუთია, რომელთაც ელექტრონები გამოსვლის სხვადასხვა მუშაობები აქვთ, მაშინ იგივლებთ მე-44,



ნახ. 44.

რონთა დინებით მოპოვდაპირე მიმართულებით. ამიტომ B ლითონი მიიღებს უარყოფით ტვირთს, ხოლო A-დანდებით ტვირთს. და ეს

ზდება ნელა ან ჩქარა შუალედის სი იიდისგან დამოკიდებულებით. ამ ტვირთების გაზრდა, გასაგებია, 'ნიშნის პოტენციალთა სხვაობის გაზრდა'. ენერგეტიკული მრუდი ამ შუალედში მიიღებს დახრას, რომელიც დაადაპლებს A ყუთს B -ს მიმართ, როგორც მე-44, ბ-ნახ-ზე. დინება A -დან B -სკენ იქამდე გაგრძელდება, ვიდრე პოტენციალთა სხვაობა არ გახდება საკმარისი, მისი შეჩერებისთვის; ეს მაშინ მოხდება, როცა ელექტრონები შეაფებენ A და B -ს ხესტად ერთიდაიგივე დონეზე. (იხ. ნახ. 44, ს); ამ დროს წონასწორობა დამყარდება.

ასეთია ვოლტას მიერ აღმოჩენილ პოტენციალთა კონტაქტური სხვაობის წარმოშობა, რომელიც მაშინ იცადება, როცა ორი ლითონი ეხება ერთმანეთს.

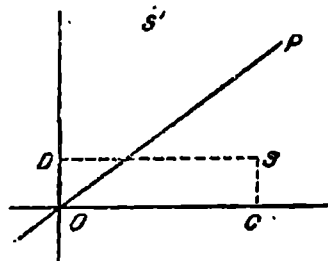
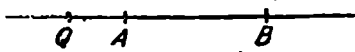
მარი ნაწილაკის ურთიერთქმედება. მრატომინანი მ : ლევაშლევნი

1. I თხემეა შემოტანლი ენერგეტიული მრუდები, მარტივ ამოცანათა ამოაანანელად საქმარისხი იყენენ. სამ განხომილებიან სიატე-სიათკისაკ კი, როკორც, მავალათად, წყალბადის ატომისთვის, შეიძლება ძარტივ ენერგეტიულ მოუფით სარკებლობა, რომელიც მოვეცემდა პოტენციალურ ენერჯიის. დაპოკიდებულერას r მანძილისაგახ. ძაკრამ ამოცანება ორ ურთიერთმოქმედ ნაწილაკის მოძრაობის შესახებ არ შეიძლება ამგვარად გამარჯივდნენ: ამ შემთხვევაში ერთ ცვლადზე დაყვანა სავსებით შეუძლებელია. ენერგეტიული ძრუდის ხაკვლად საქაროა ენერგეტიული რუქა. ენერგეტიული მრუდი გადაიქცევა ენერგეტიულ ფართეულად. ხოლო W ენერჯია ჰორიხონტალური სწორით კი აღარ გამოისახება, არამედ ჰორი-ზონტალური სიბრტყით.

შემოვიფარგლებით რა ერთგანზომილებიან შემთხვევით, დაუშვათ, რომ ჩვენ გვაქვს პროტონი და ელექტრონი, რომლებიც თავისუფლად მოძრაობენ სწორი ხაზის გასწვრივ. მივილოთ სწორზე მდებარე რომელიმე Q წერტილი სათავედ (ხახ. 45) და დაუშვათ, რომ A და B წერტილები შეესაბამებიან პროტონის და ელექტრონის მყისა მდებარეობებს. ჩვენი სისტემის ყოველი კონფიგურაცია შეიძლება გამოისახოს წერტილით xy სიბრტყეზე. ვთქვათ მანძილი Q -დან ელექტრონამდე იყოს x , ხოლო პროტონამდე $-y$. გადავხომოთ 45 ხახ-ზე. QB -სატოლი მონაკვეთი OC და QA -ს ტოლი მონაკვეთი OD . მაშინ S წერტილი გამოხატავს იმ კონფიგურაციას, რომლის დროსაც ელექტრონი B წერტილში იმყოფება, ხოლო პროტონი A წერტილში. ამგვარადვე xy სიბრტყის ყოველი წერტილი გამოსაჩვენს ნაწილაკთა წყვილის შესაძლო მდებარეობას, ხოლო ნაწილაკთა წყვი-

ლის ყოველი მოძრაობა გამოისახება შესაბამის წერტილის მოძრაობით.

ყოველ წერტილში OP -ხაზის გასწვრივ—ეს ხაზი გავლებულია სათავეზე 45° -იანი კუთხით—ადგილი აქვს ტოლობას $x = y$. მაშასადამე, ამ დიაგონალის მახლობელ წერტილებს სათანადოთ ნაწილაკები ერთმანეთის მახლობლად არიან, ხოლო დიაგონალიდან დაშორებულ წერტილთა სათანადოთ ნაწილაკები ერთმანეთისაგან შორს არიან. ენერგეტიული ფარგული ადვილად აიკვება, თუ პოტენციალურ ენერგიას x ღერძზე გადავზოავთ. როდესაც ნაწილაკები ერთმანეთისაგან იმდენად შორს იმყოფებიან, რომ მათი ურთიერთქმედების უგულვებელყოფა შეიძლება, მაშინ ენერგეტიული ფართეოლი წარმოადგენს xy სიბრტყის პარალელ სიბრტყეს. მთელ დიაგო-



ნახ. 45.

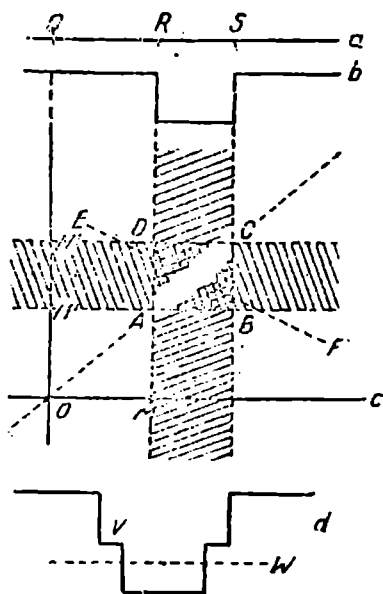
ნალის გასწვრივ ენერგეტიული ფართეულს ექნება „ღარი“, რომლის x -ის პარალელური კვეთი მე-7 ნახ-ზეა გამოახული. (თუ ენერგეტიულ ფართეულის როქაზე გავაულებთ ერთნიარ სიმალეებიანი წერტილების შემერთებელ ხაზებს, მაშინ უველა ისინი დიაგონალის პარალელური სწორი ხაზები იქნებიან).



ნახ. 46.

W -ს მხიშენლობა xy სიბრტყია პარალელურ სიბრტყით გამოისახება. ერთად შემზულ ელექტრონის და პროტონის შემთხვევაში W სიბრტყე გადაჰკვეთს ენერგეტიულ ფართეულს ღარზე და დასაშვები არე იქნება სიბრტყის ის ნაწილი, რომელიც ღარის შიგნით მდებარეობს. თუ განვიხილავთ ორ ელექტრონს და ორ პროტონს, რომლებიც პიოდაპირ შეხლას განიცდიან, QAB გასწვრივ, მაშინ მათი ურთიერთ ენერგია განხილვის ენერგია იქნება და ენერგეტიული ირული ზუსტად შეიქცევა მთელი OP დიაგონალის გასწვრივ იქნება „მალლობი“, რომლის განივი კვეთს აქვს მე-46 ნახ-ზე გამოხატული სახე. ყველა W სიბრტყეები ამ დროს ენერგეტიულ ფართეულს ჰკვეთენ. კლასიკურ მექანიკაში ორი ნაწილაკის შეხლისას მათი შესაბამისი წერტილი მიდის ამ მალლობთან და აირეკლე-

ბა მისგან, როდესაც ნაწილაკები განშორდებიან. თუ ნაწილაკებს აქვთ, რაიმე გარკვეული საწყისი v სიჩქარე, მაშინ კლასიკურ თეორიის წარმოდგენების თანახმად, მათი ურთიერთ განხილვა საშუალებას არ მისცემს შეხლისას მივიღოთ ერთმეორესთან გარკვეულ a მანძილზე ახლოს: მალლობის ქვეშ აკრძალული არე იპყრება, რომელშიც წერტილი ვერ შეეა. კვანტურ მექანიკაში, რასაკვირველია, არსებობს ასეთი კლასიკური საზღვრის ანალოგი. გამომხატველი წერტილის მაგივრად ჩვენ გვაქვს ψ ტალღა, რომლის მიწვეულობა მაჩვენებლიან კანონით კლებულობს მალლობის ქვეშ. რაც მიგვიბრუნებს მცირე ალბათობაზე იმის, რომ ნაწილაკები ერთი მეორეს დაუახლოვდნენ კლასიკურზე ნაკლებ მანძილზე. დაშვებული და აკრძალული არეები, გასაგებია რომ არ არიან ჩვეულებრივი სივრცის არეები და ψ განაწილების სურათი არ შეიძლება წარმოვიდგინოთ, როგორც ჩვეულებრივ სივრცეში „მოთავსებული“.



ნახ. 47.

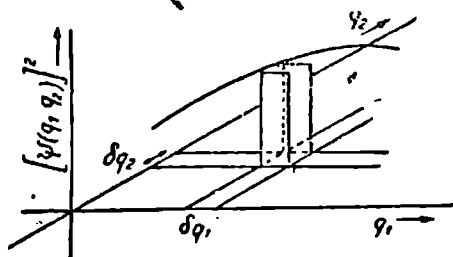
ჩვენ აქამდე ვიხილავდით ორი ნაწილაკის მოძრაობას გარე ძალების არსებობის გარეშე. მეორე უკიდურესი შემთხვევა ის არის, როდესაც გარეშე ველში ნაწილაკთა პოტენციალურ ენერჯიას ძალიან დიდი მნიშვნელობა აქვს, მაგალითად, როდესაც გარეშე ველი ნაწილაკთათვის პოტენციალურ ყუთს ჰქმნის. ხელსაყრელია რამოდენიმე ხნით დავივიწყოთ ნაწილაკთა ურთიერთ მოქმედების შესახებ, რომ ცოტა გვიან იგი ისევ შემოვიკვანოთ განხილვაში. დაუშვათ, რომ ერთ ნაწილაკთაგანის პოტენციალური ენერჯია QRS ხაზის გასწვრივ (ნახ. 47) b მრუდით გამოიხატება. თუ მეორე ნაწილაკის მუხტი განსხვავებულია პირველის მუხტისაგან, მაშინ მას მეორე ენერგეტიკული მრუდი ექნება. თუ ორივე ნაწილაკი ერთნაირია და თუ ორივე QRS ხაზის გასწვრივ მოძრაობს, მაშინ ორივესთვის პოტენციალური ენერჯია b მრუდით გამოიხატება. გადავზოპოთ QR -ის ტო-

ლი OM და OM' მონაკვეთი და GN -ის ტოლი ON და ON' მონაკვეთი. ჩვენ მივიღებთ ბრტყელ ენერგეტიულ ფართეულს ორ ერთნაირ ერთმანეთის პერპენდიკულარულ არბებით—რომელთაგან ერთი x ლერძის პარალელურია, ხოლო მეორე y ლერძის. იანნი გამოსახული არიან 47 ნახ-ზე დაშტრიხულ ფართობების საშუალებით. ორივე არხის გადაკვეთის წერტილში არის კვადრატული ყუთი, რომელიც ორჯერ უფრო დიდია k მრუდის პირვანდელ ყუთთან შედარებით. თუ ავიღებთ EF ხაზის გასწვრივ ენერგეტიულ ფართეულის კვეთს, მაშინ როცა ნაწილაკთა ურთიერთქმედებათან დაკავშირებული დიაგონალური მალლობი არ არსებობს, მას d მრუდის სახე ექნება. ყოველი d მრუდის ქვედა ნაწილის გადამკვეთი, H' სიბრტყისათვის $W > V$ მხოლოდ $ABCD$ კვადრატში. როცა სისტემას W -ს ასეთი მნიშვნელობა აქვს, მაშინ ორივე ნაწილაკი ყუთში უნდა იყოს შებმული. (W -ს მეტ მნიშვნელობას ერთი ნაწილაკი შეიძლება თავისუფალი იყოს, ხოლო მეორე ყუთთან შებმული. შემდეგში ჩვენ განვიხილავთ H -ს მხოლოდ ყველაზე დაბალ მნიშვნელობებს). სწორედ ისევე, როგორც მე-III თავში მოვარგებდით $\psi(x)$ მრუდს $V(x)$ ფუნქციით განხლვრულ ენერგეტიულ მრუდის პოტენციალურ ყუთს, ასევე აქაც ψ ფართეული უნდა მოვარგოთ $V(x, y)$ ფუნქციით განხლვრულ ენერგეტიულ ფართეულის $ABCD$ პოტენციალურ ყუთს. ამ ψ ფართეულის გამოხატვისათვის ჩვენ ისევ შეგვიძლია \mathcal{E} კოორდინატით სარგებლობა. ყუთის გარეთ ყველა მიმართულებით ψ -ს მნიშვნელობა უნდა კლებულობდეს მაჩვენებლიანი კანონით და ნულად იქცეს უსასრულობაში. ენერჯის სხოლოდ გარკვეულ დისკრეტულ მნიშვნელობათათვის მიიღებინა ψ ფართეულები განტების გარეშე.

ქვედა დასაშვებში დონისათვის ψ ფართეულს $ABCD$ ყუთში გუმბათის ფორმა ექნება, რის შედეგადაც ფართეულის პერპენდიკულიარულა ყოველი კვეთი მე-15 ნახ-ის a მრუდის მსგავსად გამოიყურება; ეს მრუდი v სიხშირით უნდა „ირხეოდეს“ მრუდის ან ფორმისა და „ფინჯანისებურ“ ფორმის შორის, რომლის კრილმც №-40 ნახ-ზეა ნაჩვენები; ასეთივეა სურათი უფრო მაღალ დონეებისთვისაც.

$|\psi|^2$ იძლევა ნაკლებად მარტივი სახის აღბათობათა განაწილების სურათს, ვიდრე მე-II თავში იყო განხილული. იმის აღბათობის გამოსახატავად, რომ დაკვირვებადი სიდიდე q და $q + \Delta q$ შორის იმყოფება. ჩვენ ვისარგებლეთ მე-8 ნახ-ზე აღებულ ვერტიკალური ზოლით, რომელიც მრუდითაა შემოფარგლული; აქ კი ჩვენ საქმე გვაქვს

ფართულით შემოსაზღვრულ მოცულობასთან. თუ ჩვენ ვაკვირდებით, ორ q_1 და q_2 სიდიდეს, მაინც $\delta q_1 \delta q_2$ ფართობზე აგებული ვერტიკალური პარალელეპიპედი (ნახ. 48) იძლევა იმის ალბათობას,



ნახ. 48.

რომ q_1 მნიშვნელობა ძვეს-
ბე, არეში და ერთდროუ-
ლად q_2 მნიშვნელობა ძვეს-
ბე, არეში. ამ შეჯამებაში
ში ψ -ს ნორმირებისთვის
 $|\psi|^2$ -ით შემოფარგლული მთე-
ლი მოცულობა უნდა უჯრი-
დეს ერთი, რადგან თვითე-
ულს ამ ორ სიდიდეთაგან...
გასაგებია, რომ რაიმე მნიშ-

ვნელობა უნდა ჰქონდეს. მე-45 ნახ.ზე წარმოდგენილ ამოცანაში, ორივე სიდიდე წარჩაადგენს ორი ნაწილაკის მანძილებს კოორდინატთა სათავედან და ყოველი მათგანი, გასაგებია, სადმე უნდა იმყოფებოდეს.

ორ ნაწილაკს შორის (ორი ელექტრონის შეჯამება) ისევ გამზიდველი ძალის შემოტანით, ჩვენ ისევ მივიღებთ ენერგეტიულ ფართულის გასწვრივ მიმავალ მაღლობს (ნახ. 47). ან მაღლობის მოქმედება გამოიხატება $ABCD$ პოტენციალურ ყუთის მოსპობაში ან მის ორ თანასწორ ნაწილად გაყოფაში. თუ ყუთი ისპობა ეს იმას ნიშნავს, რომ ურთიერთ განზიდვის ძალა აბრკოლებს მდგრადი სისტემის არსებობას. მაგალითად, ტუტე ატომის ნაშთის მიერ შექმნილ პოტენციალურ ყუთში შეიძლება მოთავსდეს მხოლოდ ერთი და არა ორი ელექტრონი. მაგრამ, თუ $ABCD$ ყუთი საკმაოდ დიდია, მაშინ მაღლობის ეფექტი მდგომარეობა მისი ორ სავსებით ერთგვარ ნაწილებად გაყოფაში—ამ ნაწილებში შეგვიძლია მოვამწყვდილოთ ψ განაწილებათა ზოგერთი სურათები. ამ მეთოდით ჩვენ მ ვრღებთ ჰელიუმის ატომის ერთგანზომილებიან მოდელს¹ (და წალჭადის ატომის უარყოფითი იონისას) პოტენციალურ ყუთში მოთავსებულ ორი ელექტრონით.

მეჭად მნიშვნელოვანია ის ამბავი, რომ ორი განყოფილების არსებობას შუაში დიაგონალური მაღლობით ჩვენ ისეთივე მოვლენე-

¹ ცნობა ბოჰლიუმის და პარაჰელიუმის შესახებ. იხ. 'Зоммерфельд. Волновая механика. ГТИ, 1934; Марк, Основы квантовой механики; ГТИ, 1133.

ბთან მიეყვებართ, როგორებთანაც, ზიეყავდით PQ და RS (ნახ. 26) ყუთების მაგალითზე შესწავლილ მოვლენებს. განაწილების ყველა სურათები ან სიმეტრიული იქნებიან ამ დიაგონალის მიმართ, ან ანტი-სიმეტრიული.

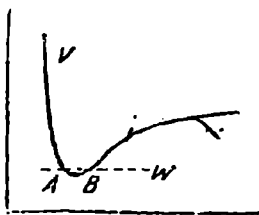
თუ ამოცანას არ გავამარტივებთ, მაშინ V და ψ ექვსი კოორდინატის ფუნქციები არიან. ჩვენ უნდა ვიპოვოთ პატარა dV_1 მოცულობაში x_1, y_1, z_1 წერტილის მახლობლად ერთი ნაწილაკის ყოფნის ალბათობა და ერთდროულად ალბათობა მეორე ნაწილაკის dV_2 მოცულობაში x_2, y_2, z_2 წერტილის მახლობლობაში ყოფნისა. ψ განაწილების სურათი ეხლა ექვს განხილვებიან სივრცეს შეეხება და მოთხოვნილი ალბათობა განისაზღვრება $|\psi|^2 dV_1 dV_2$ -ით. V და ψ სიმეტრიის თვისებები არსებითად უცვლელი რჩებიან.

N ელექტრონის შემცველ პოტენციალურ ყუთის მიახლოებითი განხილვის მეთოდი აღწერილი იყო მე-IV თავში. ჩვენ ყურადღება შევაჩერეთ ერთ ელექტრონზე და დაუშვიტ, რომ დანარჩენი ($N-1$) ელექტრონის მუხტის მდებარეობა სივრცეში განუზღვრელია და ამგვარად განვსაზღვრავდით საშუალო სახეს იმ პოტენციალურ ყუთის, რომელშიც მოძრაობდა ერთი ელექტრონი. ამ ხერხით შეიძლება მივიღოთ მიახლოებითი მნიშვნელობა ψ განაწილებათა სურათის ყოველი ელექტრონისთვის ცალ-ცალკე. მეორე მხრივ ჰელუმიის მაგალითზე ეხლახან აღწერილი მეთოდი, ცხადია, საესებით ზუსტია, რადგანაც აქ ჩვენ ზუსტად ვლებულობდით მხედველობაში x_1, y_1, z_1 წერტილში მყოფ ერთი ელექტრონის მოქმედებას x_2, y_2, z_2 წერტილში მყოფ მეორე ელექტრონზე. ლითიუმის ატომში ელექტრონი უნდა აღწერილიყო განაწილების ერთადერთ ცხრა განხილვებიან სურათით. კრისტალის ზედაპირიდან ელექტრონების დიფრაქციის—ფეკტის, რომელმაც ბევრად ხელი შეუწყო კვანტურ მექანიკის განვითარებას—სწორი გაგება კიდევ უფრო რთულია. მეთოდის მნიშვნელოვნება დაფუძნებულია იმაზე, რომ შეიძლება მისი გამოყენება H_2 მოლეკულის ორ ელექტრონზე და, ამასთან დაკავშირებით, ვალენტური ბმის საერთო საკითხებზე.

2. წინაღ ფიქრობდნენ, რომ მოლეკულების შემქმნელი ატომები დაჭერილი არიან მიმზიდველი ძალებით. ამიტომ, საპასუხოდ კითხვაზე, შეუძლიან თუ არა A და B ატომებს მოლეკულის შექმნა, წაროიდგენდნენ რომ ისინი ახლოვდებიან და დაადგენდნენ, ერთმანეთის მიმართ ისინი მიზიდვას განიცდიან თუ განხილვას. კვანტური მექანიკა ამ საკითხს სხვა თვალსაზრისით უდგება. ვთქვათ ჩვენ A და B ატომი გვაქვს გარკვეულ დაკვანტულ მდგომარეობებში, რის

შედგება სისტემის ენერჯიის გარკვეული მნიშვნელობა აქვს. დაუშვათ ესაა, რომ საწყის მომენტში მოსვენებით მდგომარეობაში მყოფი ატომები იწყებენ ერთმანეთთან მიახლოებას. მიეცეთ ჩვენ თავსაკითხვა: სისტემის პოტენციალური ენერჯია საწყის ენერჯიაზე მეტად გახდება თუ ნაკლები. თუ იგი იზრდება, მაშინ მიახლოებისას ჩვენ უნდა შევისრულოთ მუშაობა და, მაშასადამე, ისინი ერთმანეთს განიზიდავენ. ხოლო თუ პოტენციალური ენერჯია მცირდება, მაშინ ჩვენ მიმზიდველობის ძალის არსებობას ვიპოვით. ენერჯიის საკითხზე ყურადღების ესეთი ფიქსირება ეთანხმება, მე-III თავში მაგნიტურ მომენტების განიღვის დროს მიღებულ თვალსაზრისს. ორი ატომის შემდეგი მიახლოებისას მიზიდულების ძალა რაიმე მანძილზე აუცილებლად გადავა უფრო ინსტენსიურ განიღვაში, რის წყალობითაც პოტენციალური ენერჯია ისევ სწრაფად იზრდება, როგორც მაგ. 45 ნახ-ზე, სადაც გამოხატულია პოტენციალური ენერჯიის ატომთა შორის მანძილისაგან დამოკიდებულების მრუდი. ამგვარად, ჩვენ მივიღებთ „ყუთს“, რომელიც უშვებს მდგრადი მოლეკულის არსებობას.

აქ აუცილებელია შენიშვნა იმისა, რომ ჩვენ მივედით ამოცანათა ისეთ ტიპთან, რომლებიც განსხვავდებიან ამ წიგნში უკვე განხილულთაგან. აქამდე ყველა ამოცანაში ენერგეტიული მრუდი წინასწარ იყო მოცემული. ესაა ჩვენ უნდა ვისარგებლოთ კვანტური მექანიკის მეთოდებით იმის დასადგენად, იქნება თუ არა მოცემული სისტემა მდგრადი და თუ კი, მაშინ როგორია პოტენციალური ყუთის სახე. ნახ. 49-ზე გამოხატულის, მსგავსი ემპირიული ენერგეტიული მრუდები გამოიყენებოდნენ ჯერ კიდევ კვანტურ მექანიკის წარმოშობამდე, ამასთან ერთად მრუდის მუდმივები მოლეკულარულ სპექტრებიდან განისაზღვრებოდნენ. ჩვენ ძივილებთ ერთ მრუდს იმ შემთხვევაში, თუ ელექტრონები მოლეკულაში ნორმალურ ქვედა მდგომარეობაში იმყოფებიან და სხვა მრუდებს, ყოველი მდგომარეობისთვის, რომელშიც სავალენტო ელექტრონები იმყოფებიან აღზნებულ დონეებზე.



ნახ. 49.

მრუდები შეიძლება მნიშვნელოვნად განსხვავდებოდნენ ერთმანეთისაგან, როგორც 63 ნახ-ზე ნაჩვენები, რადგან ელექტრონის შეუძლია ჰქონდეს სრულებით სხვა „შემბმელი მოქმედება“, როდესაც ის იმყოფება დიდ ენერჯიან დონეზე. ამ თავში ჩვენ საქმე გვექნება თითქმის გამოუკლებლივ უმეტესად მნიშვნელოვან ენერგეტიულ მრუდთან, რომელიც

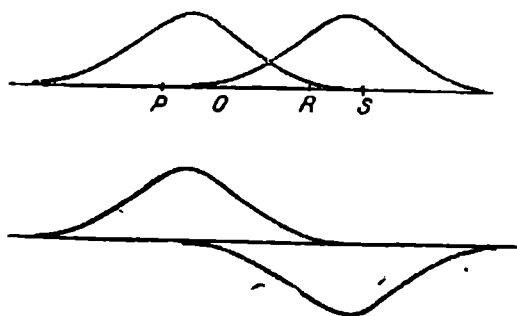
ნორმალურ ქვედა მდგომარეობას შეესაბამება. 49 ნახახის ინტეგრ-
პრეტაცია კლასიკურ ბექანიკის თანახმად შეიძლება შემდეგი ყო-
ფილიყო.

თუ გავაგლებთ W -ს გამოხატვას, რომელიმე პარიზონტალურ
ხაზს, მაშინ ყუთის შიგნით კინეტიური ენერგია ტოლი იქნება
($IV-V$)-სი. ატომ გულებს შორის მანძილი d უწყვეტად ირჩევა ორ
კიდურ მნიშვნელობათა შორის, ისეთების, როგორც არის მაგალი-
თად, W -სგან დამოკიდებული, A და B : რხევითი ენერჯიის ამ კერ-
ძო მნიშვნელობათვის d -ს A -ზე ნაკლები და B -ზე მეტი მნიშვნე-
ლობანი კლასიკურად აკრძალული არიან. კვანტურ მექანიკაში, რა-
საკვირველია, იარსებებს კლასიკურ ფიზიკის ამ საზღვრის რაიმე
ანალოგი. მაგრამ ამ საკითხით ჩვენ დაინტერესდებით გვიან. პირ-
ველი ნაბიჯი მდგომარეობს პოტენციალურ ყუთის პოვნაში.

3. უმარტივესი მოლეკულიარული სისტემა წყალბადის იონიზი-
რებული მოლეკულაა H_2^+ , რომელიც ორი პროტონისა და ერთი
ელექტრონისგან შესდგება. გავეცნოთ ასეთი მოლეკულიარულ იო-
ნის შექმნას ძირითად მდგომარეობაში მყოფ წყალბადის ატომისა
და მისგან დიდ მანძილზე მყოფ პროტონის განხილვით. ელექტრო-
ნისთვის ψ განაწილებაა საწყისი სურათი უნდა იყოს თითქმის
ზუსტად განსაზღვრული (20) ფორმულით H ატომის $1s$ დონისათ-
ვის, რადგან საკმაოდ დაშორებულ პროტონს შეუძლია მხოლოდ
უმნიშვნელო შეცვლა მისი. მაგრამ, ენახოთ, როგორ შეიცვლება პო-
ტენციალური ენერგია პროტონების შედარებულ ხაზის გასწვრივ;
მას ექნება 51 ნახ-ზე გამოხატულ მრუდის სახე. ჩვენი ამოცანა თან-
ხედება ამოცანას ორ პოტენციალურ ყუთის შესახებ. რომელიც
უკვე ახსნილი იყო ერთ განზომილებიან შემთხვევაში. (იხ. ნახ.
26—29). შედეგები შეიძლება გადავიტანოთ უშუალოდ სამ განზო-
მილებამდე. პოტენციალურ ენერჯიის არსებითი თვისება იმაში მდგო-
მარეობს, რომ იგი სიმეტრიულია სისტემის ცენტრის მიმართ. თუ
კოორდინატთა სათავედ მივიღებთ პროტონთა შორის მანძილის
შუაწერტილს, მაშინ $(-x, -y, -z)$ წერტილში V -ს მნიშვნელობა
ტოლი იქნება V -ს მნიშვნელობის (x, y, z) წერტილში. მაშასადამე
ერთი ნახევრის წიპისმიერი ψ^2 -ის სიდიდე ტოლი უნდა იყოს მეო-
რე ნახევრის შესაბამე წერტილში ψ^2 -ის სიდიდის. მაგრამ ამისთვის
არ არის აუცილებელი, რომ თვით ψ ფუნქციის მნიშვნელობანი იყუ-
ნენ თანატოლი—ისინი შეიძლება ნიშნით საწინააღმდეგე იყვნენ:

$$\psi(-x, -y, -z) = -\psi(x, y, z).$$

ამ გზით ჩვენ მივიღებთ დონეთა სისტემას განაწილებათა ანტი-სიმეტრიულ სურათებით; აქ ჩვენ გვაინტერესებს მხოლოდ ის სურათი, რომელსაც ენერჯიის ქვედა მნიშვნელობა შეესაბამება. ამ დონისთვის ψ -ს ცვლილება მოლეკულიარულ ღერძის პარალელურ რომელიმე ხაზის გასწვრივ, მოხდება 26 ნახ-ის c მრუდით. რომ მივიღოთ განაწილების სურათთა სააე და ენერჯიის შესაძლო მნიშვნელობანი, შრედიანგერის განკოლებაში უნდა შევიტანოთ. სათანადო $V(x, y, z)$ ფუნქცია და ამოვხსნათ იგი—ეს ამოცანა, გაცილებით უფრო რთულია, ვიდრე ამოცანა H -ს შესახებ, რომელმაც მე-III თავის მეტი ნაწილი დაიკავა. მაგრამ მკითხველი ალბათ უკვე შენიშნავდა, რომ 26 ნახ-ის b მრუდს თითქმის იგივე სახე აქვს, როგორსაც მივიღებდით, თვითოეული ცალკე აღებულ პოტენციალურ ყუთის ψ მრუდების ორდინატების შეკრებით, ხოლო 26 ნახ-ის მრუდს თითქმის იგივე სახე აქვს, როგორსაც მივიღებდით სათანადო ორდინატების გამოკლებით. 50 ნახ-დან სჩანს, რომ ψ -ს მნიშვნელობა Q წერტილში განაწილების სიმეტრიულ სურათისთვის კოტა უფრო მეტია, ვიდრე P წერტილში და ანტისიმეტრიულ სურათისთვის კოტათი ნაკლებია, ვიდრე P -ში; ამ გვარად, მსგავსება



ნახ. 50.

დალიან დიდია. თუ $\psi_A(x)$ -ით აღვნიშნავთ იმ განაწილების სურათს, რომელიც ცალკე აღებული PQ ყუთს ეთანადება ხოლო $\psi_B(x)$ -ით—ასეთივე განაწილების სურათს, რომელიც RS ყუთს ეთანადება ისე, რომ ყუთებს შორის მანძილი QR -ს ეტოლება, მაშინ მიახლოებით:

$$\psi_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_A + \psi_B) \quad \text{და} \quad \psi_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_A - \psi_B), \quad (52)$$

სადაც მამრავლი $\frac{1}{\sqrt{2}}$ აუცილებელია იმისათვის, რომ ψ_1 და ψ_2 ნორ-
მირებული იყვნენ.

ამ მიახლოებით გამოთქმათა თანხედენა განაწილების სწორ
სურათებთან შემთხვევითი კი არ არის, არაჲდ საერთო პრინციპის
კერძო შემთხვევაა, რომელსაც დამატების მე-6 შენიშვნაში განვი-
ხილავთ.

ეს მოსაზრებები ვარგისია სამ განზომილებიან განაწილებათა სუ-
რათისთვისაც, და ისინი იძლევიან დაახლოებით სწორ განაწილების
სურათებს განხილულ ამოცანისთვის. ვიგულისხმობთ, რომ პროტონე-
ბი გარკვეულ მანძილზე არიან ერთიმეორისაგან. ვთქვათ ψ_A იქონ
განაწილების სურათი წყალბადის 1s დონისთვის, იმ შემთხვევაში,
თუ კოორდინატთა სათავედ მიჩნეულია მარცხენა პროტონი, ხოლო
 ψ_B — განაწილების იგივე სურათი იმ შემთხვევაში, თუ კოორდინატ-
თა სათავედ მარჯვენა პროტონია მიჩნეული. მაშინ თუ ორივე პრო-
ტონი გვაქვს, მიახლოებით იქნება:

$$\Psi_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_A + \psi_B) e^{-2\pi i v_2 t} \quad (53)$$

$$\Psi_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_A - \psi_B) e^{-2\pi i v_2 t} \quad (54)$$

იქამდე ვიდრე პროტონები ერთმანეთისაგან შორს იმოძვებიან
ის დონე რომელსაც (54) ფუნქცია ეკუთვნის. მხოლოდ ცოტათია
უფრო მაღლა (53) ფუნქციის შესაბამ დონეზე. განაწილების სურათ-
თა როგორც ერთ, ისე მეორე ტიპში ელექტრონული ღრუბელი
უზუსტოა, ისე რომ მისი ნახევარი ერთი პროტონის მახლობლად
იმყოფება, ხოლო მეორე ნახევარი მეორე პროტონის მახლობლად.
ეს დასკვნა აუცილებლად უნდა შეუთანხმობთ იმ ფაქტს, რომ თუ ჩვენ
გამოვდივართ წყალბადის ატომიდან და პროტონიდან, მაშინ საწყის
მომენტში ელექტრონი აუცილებლად დაკავშირებული იქნება ერთ-
ერთ გარკვეულ პროტონთან. გასაგებია, რომ ამისათვის შეიძლება
რთული, 35-ნახ-ზე გამოსახულის მსგავსი Ψ ფუნქციის გამოყენება.
თუ სწორი სანორმირო მამრავლის შემოტანით, დაუშვებთ, რომ

$\Psi = \frac{1}{\sqrt{2}} (\Psi_1 + \Psi_2)$ და განესახლვრავთ $\Psi\Psi^*$ გამოთქმას დროის

$t = 0$ მომენტისათვის. რადგან ψ_A და ψ_B ნამდვილებია, ამიტომ (52) და (54)-დან გამომდინარეობს, რომ t მომენტში

$$\Psi' = \frac{1}{2} \left[\psi_A^2 + \psi_B^2 + (\psi_A^2 - \psi_B^2) \cos 2\pi(\nu_2 - \nu_1)t \right].$$

მაგრამ ეს გამოთქმა $t = 0$ მომენტში ზუსტად ψ_A^2 -ის ტოლია და მაშასადამე გამოხატავს მარცხენა პროტონთან შებმულ, $1s$ დონეზე მყოფ ელექტრონს. თუ პროტონები ერთმანეთისგან დაშორებული არიან, მაშინ $(\nu_2 - \nu_1)$ სხვაობა მცირეა, იმიტომ რომ დონეთა განცალგება ($H_2 - W_1$) მცირეა და კოსინუსი მეტად მძიმედ მცირდება ერთიდან. სწორედ ასევე $\Psi' = \frac{1}{\sqrt{2}} (\Psi'_1 - \Psi'_2)$ ალებით, შეიძლება გამოვსახოთ საწყის მომენტში ბარჯვენა პროტონთან შებმული ელექტრონი.

მას შემდეგ რაც პროტონები ერთმანეთთან უფრო აბლო მანძილზე აღმოჩნდებიან, ჩვენ უკვე არ გვინტერესებს ელექტრონის მყისა მდებარეობა, მაგრამ სამაგიეროდ t -ს ნაკლებ მანძილებზე ჩვენივის სასურველი იქნება ენერჯიის ზუსტი განსაზღვრა. პირველ ყოვლისა, პროტონები განიზიდავენ ერთმანეთს და შესრულებული მუშაობა მათი კულონურ პოტენციალის e^2/d ტოლია, რომლის ცვლილება 51.6 ნან-ზე გამოხატული ზედა პუნქტიროვანი ხაზით. ამავე დროს ელექტრონულ გადაგვარებულ დონეთა განცალგება იზრდება, როგორც 30 ნან-ზე, იქამდე ვიდრე იგი არ გასდება რამოდენიმე ელექტრონ-ვოლტის ტოლი. ამ ენერჯიათა გამოთვლის მეთოდი მე-IX თავში იქნება მოცემული. როდესაც პროტონები ერთმანეთისაგან რაიმე d მანძილზე მდებარეობენ, მაშინ სისტემა ორთაგან ერთერთ წესაძლო მდგომარეობაში იმყოფება, რომელთა სრული ენერჯიების მიღება შეიძლება თუ ერთისა ან მეორის ელექტრონულ ენერჯიას დაუმჯტებო e^2/d .

მას შემდეგ, რაც ეს უკანასკნელი გამოთვლილია, შეიძლება წინა პარაგრაფში გადმოცემულ გეგმით მოვიტკუთ და განვსაზღვროთ, იქნება თუ არა პროტონთა სრული ენერჯია d მანძილის რაიმე შუალედში ნაკლები მათ სრულ ენერჯიაზე, რომელიც მიიღება ერთმანეთისგან დიდ მანძილზე დაშორებისას. ორ მდგომარეობათაგან შემოსათვის ეს, რასაკვირველია შეუძლებელია, რადგან სრული ენერჯია სულ იზრდება. ქვედა მდგომარეობისთვის ეს დამოკიდებულია იმაზე, თუ რა უფრო სწრაფად ხდება, ელექტრონის ენერჯიის დაკ-

ლება თუ განზიდვის ენერგიის ზრდა. H^+ იონის შემთხვევაში ქვედა ელექტრონული დონის ენერგიისთვის გამოთვლები იძლევიან 51,6 ნახ-ის ქვედა პუნქტიროვან მრუდს. ორივე პუნქტიროვანი მრუდების ორდინატთა შეკრებით, ჩვენ მივიღებთ სრულ ენერგიას შუა მრუდით გამოხატულს, რომელიც პოტენციალურ ყუთს წარმოადგენს; ეს ყუთი დასაქებად ხდის წყალბადის მდგრად იონიზირებულ მოლეკულის არსებობას, ყუთის ყველაზე მეტად მნიშვნელოვანი ნაწილი მდებარეობს, $l = 0,8 \text{ \AA}$ -სა და $l = 1,4 \text{ \AA}$ შორის.

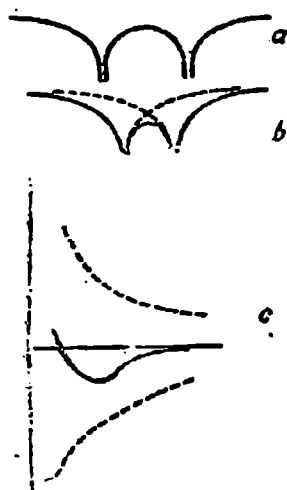
შეჯამებისას, ჩვენ ვხედავთ, რომ H^+ იონის მდგრად მდგომარეობასთან წყვევართ განაწილების სიმეტრიულ სურათს.

H^+ განაწილების ამ ერთადერთი სურათში ელექტრონული ღრუბელი განთხმულია ნახევრად ერთი პროტონისა და ნახევრად მეორის ირგვლივ. თუმცა ჩვენ გამოვედით წყალბადის ატომიდან და პროტონიდან, მაგრამ ეხლა ელექტრონი ორივე პროტონს ეკუთვნის ერთად. ვიდრე H^+ იონის თვისებებს განვიხილავდეთ, ჯერ ენახოთ, როგორ შეიძლება მივიღოთ შესაბამისი პოტენციალური მრუდი წყალბადის ნეიტრალურ მოლეკულისთვის.

4. ნეიტრალური H_2 მოლეკულაში ორი პროტონი ჰქმნის ორ იგავურ პოტენციალურ ყუთს თვითნებულ ელექტრონისთვის, ისევე როგორც დადებით H^+ იონში, იხ. ნახ. 51 ბ. მაგრამ რადგან ეხლა ჩვენ ორი ერთმანეთის გამხიდეელი ელექტრონი გვაქვს, ამიტომ აუცილებელია ამ თავის 1 პარაგრაფის მოსაზრებათა მხედველობაში მიღება. რომ თავი დაეღწიოთ ექვსი განზომილების საკურობებს, ჯერ დაუშვათ, რომ ელექტრონები მოძრაობენ პროტონების შემზღობილი ხაზის გასწვრივ; ამ შემთხვევისათვის შეიძლება x, y სიბრტყით სარგებლობა. ავიღოთ სიმარტვისთვის სწორკუთხაოვანი პოტენციალური ყუთები $P(x)$ და $R(x)$, 52 ნახ-ის, რომლებიც დასაწყისში ერთმანეთისაგან მნიშვნელოვან მანძილზე მდებარეობენ. ვირჩევთ რა კოორდინატთა სათავედ A წერტილს, დაუშვათ რომ ერთი ელექტრონია მანძილი A -დან არის x , ხოლო მეორის — y . თუ x კოორდინატის ცვლილების შესაბამ პოტენციალურ ენერგიას გადავაზომავთ, მაშინ თვითნებულ პოტენციალურ ყუთს ორთაგან ენერგეტიულ უარათეულზე შეესაბამება x ღერძის პერპენდიკულიარულად მდებარე უსასრულოდ გრძელი არხი. თუ y ღერძზე გადავზომავთ მეორე ელექტრონის ასეთსავე პოტენციალურ ენერგიას, მაშინ ყოველ ყუთთაგანს შეესაბამება y ღერძის პერპენდიკულიარულად მდებარე უწყვეტი არხი.

ელექტრონთა ურთიერთ განზიდვა გამოიწვევს ჩვეულებრივ დიაგნოსტურ მალლობს OP . E არეში, სადაც არსები დადიკეეთებიან, ჩვენ გვაქვს პოტენციალური ყუთი, ორჯერ უფრო ღრმა პირვანდელზე, და მეორე ასეთივე ყუთი გვაქვს F არეში. თუ ავიღებთ ენერგეტიულ ფართეულს კვეთს, რომელიმე EF ისებურ ხაზის გასწვრივ, ამ დროს მიღებულ ენერგეტიულ მრუდს ექნება ისეთივე სიმეტრია, როგორიც აქვს მრუდს 26 ნახ-ზე. თუ პროტონები უძრავი და ერთმანეთისგან დიდ მანძილებზე არიან, მაშინ შესაძლო დონები შეეგუფდებიან მეტად ახლო მდებარე წყვილებად, რომელთათვისაც ψ განაწილებათა სურათები სიმეტრიული იქნებიან დიაგნოსტის მიმართ. სხვაგვარად რომ ვსთქვათ, თუ ψ ფართეულს E ყუთში გუმბათისებური სახე აქვს, მაშინ F ყუთში მას ან ზუსტად ისეთივე სახე ექნება, ან ფინჯანისებური, ზუსტად შექცეული პირველისა.

დანარჩენში ისეთივე რჩება მსჯელობა, როგორიც მოლეკულიარულ იონისთვის გვექონდა. პროტონების დაახლოებისას, ჩვენ ვამჩნევთ, რომ დონეთა განცალგება იზრდება მაჩვენებლიანი კანონით. ამავე დროს იონთა განზიდვის კულონური ენერგია, რომელიც აუცილებლად უნდა დაემატოს, იზრდება.



ნახ. 51.

ისევე, როგორც წინად, ყოველი წყვილის ზედა დონეს არ შეუძლია მიგვიყვანოს მდგრადი მოლეკულის შექმნასთან, რადგან წყალბადის ორივე ატომი ამ შემთხვევაში განიზიდება ერთმანეთისაგან ყველა მანძილებზე. ქვედას ორთავე დონეთაგან რეზულტატი დამოკიდებულია იმაზე, თუ რა უფრო სწრაფად ხდება: ელექტრონული ენერგიის შემცირება თუ განზიდვის ენერგიის ზრდა; მოლეკულების სრული ენერგია-კი ორივე ენერგიის ჯამის ტოლია. გამოთვლა, რომელიც აუცილებლად ექვს განზომილებაში უნდა შესრულოეს ექსპერიმენტთან თანხმობაშია იმ მიმართებით, რომ მისი მიხედვით მრუდს უნდა ჰქონდეს მინიმუმი—ე. ი, პოტენციალური ყუთი,

რომელიც ჩვეულებრივი H_2 მოლეკულის არსებობას უშვებს. ყუთის სიღრმე მოლეკულის დისოციაციის ენერგიის გამომხატველი ცდის მონაცემების თანახმად 4,4 ელექტრონ ვოლტია და მინიმუმი მაშინ

მიიღება როცა პროტონები ერთმანეთისაგან $1,76 \text{ \AA}$ მანძილზე იმყოფებიან. ამ პარაგრაფის დასასრულს, შეიძლება მიუთითოთ, რომ 51,1 ნახ-ის პოტენციალურ ყუთებში, შეიძლება პროტონების ნაცვლად ატომთა დადებითი ნაშთები მოთავსდეს. მაშასადამე ამ წარაგრაფის მსჯელობანი გამოიყენება იმ შემთხვევაშიც, როცა ჩვენ ვაახლოვებთ ნატრიუმის ორ ატომს, რომელთაგან თვითნებულს თვითო სავალენტო ელექტრონი აქვს. ამგვარად ჩვენ მივიღებთ ცნობილ მოლეკულებს Na_2 , Li_2 და ა. შ., რომლებიც ტუტე ლითონთა ორთქლში არიან ჩვეულებრივ. ორზე მეტი ელექტრონის შემცველ მოლეკულებისთვის პოტენციალურ ყუთების ფორმის გამოთვლა შეუძლებელია, მაგრამ შეიძლება მათი ემპირიულად გამოყვანა დაკვარვებით მიღებულ ზოლოვან სპექტრებიდან.

5. მივიღეთ რა H_2 და H_2^+ -სთვის პოტენციალური ყუთები შემდეგნაბიჯი მდგომარეობს იმის განხილვაში, თუ მათი როგორი გამოყენება შეიძლება. მე-2 პ-ში მოცემულ კლასიკურ ინტერპრეტაციის საწინააღმდეგოდ, ჩვენ არ მოვიხილეთ მოლეკულაში გულების მანძილთა ზუსტ მოცემას დროის ნებისმიერ მომენტში. ამის ნაცვლად ჩვენ განაწილების სურათებს მოვარგებთ პოტენციალურ ყუთს და ვისარგებლებთ ψ^2 -ით გულათა სააღბათო მანძილების განსაზღვრისათვის. განაწილების ეს სურათები არ შეიძლება აურიოთ ელექტრონულ განაწილების სურათებს, რომლებთანაც აქამდე გვჭონდა საქმე.

ამ ახალ ψ მრუდების საპოვნელად, არ შეიძლება მარტივად გულათა შორის მანძილს მივაწეროთ რაიმე x გარკვეული სიდიდე და შემდეგ (5) განტოლებით ვისარგებლოთ $\psi(x)$ -ის საპოვნელად. მართლაც (2) განტოლება შეიცავს m -ს, მოძრავი ნაწილაკის მასას. აქ-კი ჩვენ საქმე გვაქვს არა ერთ ნაწილაკთან, არამედ ორივე გულას მოძრაობასთან ერთდროულად. ეს საკითხი განიხილება შემდეგ თავში, სადაც მტკიცდება, რომ ერთიდაიგივე მასიან ორ ნაწილაკისთვის შეიძლება ვისარგებლოთ (2) განტოლებით ყოველგვარ ცვლილებათა გარეშე, თუ m -ის ნაცვლად შევიტანთ თვითნებულ ნაწილაკის მასის ნახევარს. დე-ბროილის ტალღის სიგრძეები, რომლებიც ჩვენ უნდა მოვარგოთ პოტენციალურ ყუთს, (1)-ის თანახმად ელექტრონთა შესაბამ ტალღის სიგრძეებზე უფრო მოკლე იქნებიან. 49 ნახაზის ენერგეტიულ მრუდისათვის შესაძლო განაწილების სურათების მოძებნისას ჩვენ სხვათაშორის გარკვეულ შედეგის სახით მივიღებთ დისკრეტულ დონეთა ერთობლიობას ისე, როგორც

ელექტრონების შემთხვევაში. H^+ ენერგიის ქვედა დონესთვის ψ მრუდს არ ექნება კვანძები, შემდეგ მრუდს ერთი კვანძი ექნება. და ა. შ., როგორც მე-15 ნახ-ზე. ქვედა დონეები იმყოფებიან ერთმანეთისაგან თითქმის ერთნაირ მანძილებზე, როგორც (18)-ში: მაგრამ უფრო მაღალ დონეებისთვის პოტენციალურ ყუთის სივანე სწრაფად იზრდება და უსასრულო ხდება, ასე რომ მანძილი დონეთა შორის სულ ვიწრო და ვიწრო ხდება და დონეთა მწკრივი ზღვარისაკენ მოსწრაფვის. ქვედა და შემდეგი უფრო მაღალი რბევითი დონის ენერგიების სხვაობა ძალიან საჭიროა გაზის ხვედრითი სითბოტევადობასთან დაკავშირებით. წარსული საუკუნიდან დაწყებული, ცდილობდნენ საკითხის გადაჭრას იმის შესახებ, თუ რატომ არის ორ ატომიან გაზების ექსპერიმენტით მიღებული სითბოტევადობა იმაზე ნაკლები, რომელთანაც კლასიკურ თეორიას მიეყვება. უნდა გველოდნა, რომ სრული შინაგანი ენერგია გრამ-მოლისა T ტემპერატურისას.

უნდა უდრიდეს $\frac{7}{2} RT$ (სადაც R — გაზის უნივერსალური მუდმივია),

რომელთაგან $\frac{3}{2} RT$ წარმტან ენერგიაზე მოდის, RT — რბევითზე და

RT — ბრუნვით ენერგიაზე, საიდანაც გამოპდინარეობს, რომ ხვედრითი სითბოტევადობა მუდმივი მოცულობის დროს უნდა უდრიდეს

$\frac{7}{2} R$ -ს. მაგრამ ცდის მონაცემების თანახმად, იგი მხოლოდ სულ

$\frac{5}{2} R$ ს უდრის. ამის მიზეზი ცხადი იქნება, თუ ψ განაწილებათა

რბევით სურათს მოვარგებთ პოტენციალურ ყუთს და განვსაზღვრავთ მანძილს ქვედა და მისი მომდევნო უფრო მაღალ დონეს შორის.

ენერგიათა სხვაობა აღმოჩნდება რამოდენიმეჯერ უფრო დიდი, ვიდრე kT სიდიდე — სითბური ენერგია ოთახის ტემპერატურისას. მაშასადამე ოთახის ტემპერატურისას და მასზე მაღლაც გაზის თითქმის

ჯველა მოლეკულები განაგრძობენ ქვედა რბევით დონეზე ყოფნას, სწორედ ისევე, როგორც ელექტრონები იმყოფებიან უფრო ღრმა

ელექტრონულ დონეზე. ამგვარად რბევითი ენერგია თავს არ იჩენს ხვედრითი სითბოტევადობაზე იქამდე ვიდრე მიღწეული არ იქნება

ძალიან მაღალი ტემპერატურები.

6. მე-3 პ-ში H^+ იონის განხილვისას ჩვენ ყურადღება მივაქციეთ

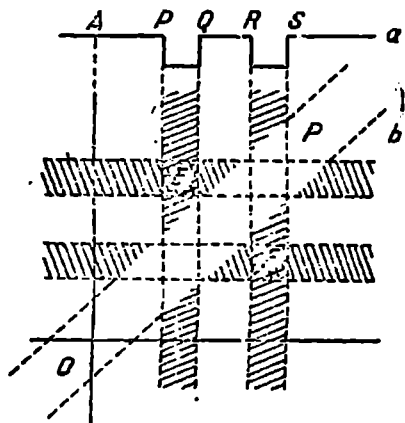
შესაძლო ელექტრონულ დონეთა განცალკების მნიშვნელოვნებაზე ორივე პოტენციალური ყუთის დაახლოების დროს. თუ PQ და RS

(ნახ. 26) პოტენციალურ ყუთებს შორის მანძილს შევამცირობთ, მაშინ ენერგეტიული მრუდი 53 ნახ-ის h მრუდის სახეს მიიღებს და საბოლოოდ, როდესაც (PR) ბარიერი მოისპობა, ყუთები შეერთდებიან და ჰქმნიან ერთადერთ $P\alpha$ ყუთს (მრუდი a). ყველა ამ პტადიებში ენერგეტიულ მრუდს შეესაბამება დონეთა წყვილების და ψ განაწილებათა სურათების ერთობლიობა — ეს განაწილებანი უწყვეტად იცვლიან თავის სახეს ენერგეტიულ მრუდის შეცვლისას. 53 ნახ-ის b მრუდით გაჩხატულ სტადიაში, სურათებს, რომლებიც ქვედა დონეებს მიეკუთვნებიან, ექნებათ e და d მრუდების მსგავსი სახე. როდესაც ყუთები ერთმანეთისაგან შორს იყენენ, მაშინ დონე, რომელსაც e მრუდი ეკუთვნოდა იმ წყვილის ზედა დონე იყო, რომელზედაც განცალდებოდა ძირითადი დონე. მაგრამ ეხლა 53 ნახ-ის c მრუდი, გასავებია, უფრო მეტ მსგავსებას ამბებს პირველ აღგზნებულ მდგომარეობის ერთკვანძიან განაწილებების ჩვეულებრივ სურათთან, რომელიც მე-15 ნახ-ზეა გამოხატული. მართლაც, როდესაც ყუთები შეერთდებიან და ერთადერთ ყუთს ჰქმნიან, e მრუდი თანხედება $P\alpha$ ყუთის პირველ აღგზნებულ დონის განაწ. სურათს (მრუდით a), d -კი ძირითად დონეს მოგვყვს. ამგვარად ჩვენ მივღებთ დონეთა განშლის რაოდენობრივ საზომს. წყვილის ქვედა დონე უწყვეტად დააღლებოდა და გახდა ყუთის ძირითად დონეთ, ხოლო ზედა — მომდევნო, უფრო მაღალ დონეთ. სწორედ ასევე ადვილი დასაინახია, რომ 29 ნახ-ის მრუდები გადავლენ განაწილებათა სურათებში, რომლებიც მესამე და მეოთხე დონეებს მიეკუთვნებიან.

ეს იძლევა მოლეკულების ელექტრონულ დონეების განხილვის სახალ მეთოდს. მაგალითად, H_2^+ იონში, თვითოეული პროტონი, როგორც ვნახეთ, პოტენციალურ ყუთს ჰქმნის ელექტრონისთვის. სინამდვილეში ჩვენ არ შეგვიძლია ამ პროტონების დაახლოება, მაგრამ ეს რომ შესაძლო ყოფილიყო, მაშინ მათი, პოტენციალური ყუთები შეერთდებოდნენ და ელექტრონი იქნებოდა $+ 2e$ დადებით ტვირთთან გულას ველში — ე. ი. ჩვენ მივიღებდით He^+ იონს, რომლის ყველა დასაშვები დონეები ჩვენთვის ზუსტად ცნობილია, ისევე როგორც განაწილების სურათები. როგორც მე-IV თავში იყო ახსნილი He^+ საიონიზაციო პოტენციალი Z^2 ჯერ მეტია წყალბადის ატომის საიონიზაციო პოტენციალზე და ტოლია $4 \cdot 13,5$ ელექტრონ-ვოლტის. როდესაც პროტონები ერთმანეთისაგან შორს არიან, სისტემიდან ელექტრონის მოსაშორებლად საჭირო მუშაობა ტოლდა

13,5 ელექტრონ-ვოლტის ე. ი. წყალბადის ატომის საიონიზაციო პოტენციალის. მაშასადამე ჩვენთვის ცნობილია ნახ. 51, c-ს ჭევეჯა პუნქტიროვანი მრუდის სრული დაცემა; იგი ტოლია $3 \cdot 13,5$ ანუ 40,5 ელექტრონ-ვოლტის. მრუდის სახე შეიძლება გამოვთვალოთ მე-IX თავის მეთოდით და ამგვარად განვსაზღვროთ ნორმალური ალუგზნებელი მდგომარეობა. თუ, მეორე მხრივ, გამოვალთ პროტონიდან და ალგზნებულ მდგომარეობაში მყოფ ელექტრონიან წყალბადის ატომიდან, მაშინ შეიძლება მსგავსივე მრუდის დახაზვა, რომელიც აკავშირებს გამოსავალ სისტემას He^+ იონის სათანადო ალგზნებულ დონესთან. ისევე ნიუმატებით-რა ამ მრუდს კულონის ენერჯიას, როგორც 51 ნახ-ზე, ჩვენ მივიღებდით მეორე პოტენციალურ ყუთს H_2^+ იონისთვის, რომლის ელექტრონი ამჟამად გარკვეულ ალგზნებულ დონეზე იქნებოდა.

H_2^+ იონზე მეტად საინტერესოა H_2 ნეიტრალური მოლეკულა, რომელზედაც გამოიყენება მსგავსივე მსჯელობანი. თუ 52 ნახ-ის



ნახ. 52.

ენერგეტიულ ფართეულებიდან გამოვალთ, აუცილებელია არბთა ორივე წყვილის მიახლოება იქამდე, ვიდრე ისინი, ბოლოსდაბოლოს არ შეერთდებიან და შექმნიან ერთ ერთადერთ, 47 ნახ-ის $ABCD$ -ს მსგავს ყუთს.

ეს ილიუსტრაციას უკეთებს პროცესს, რომელიც უცვილებლად უნდა შესრულდეს ექვს განზომილებაში. რომ შესაძლო ყოფილიყო წყალბადის მოლეკულის ორივე პროტონის მიახლოება, მაშინ ჩვენ მივიღებდით, დადებით 2θ ტვირთის ირგვლივ მბრუნავ ელექტრონს;

ე. ი. განაწილების სურათი გახდებოდა ისეთივე, როგორიც არის He ნეიტრალურ ატომისთვის, რომლის დონეები ჩვენთვის ცნობილია. H_2 მოლეკულის ყოველი დონე, რამოდენიმეთ შუალაა H ატომის დონესა და He ატომის დონეს შორის. მაგალითად საიონიზაციო პოტენციალი 13,5 ე.-ვ.-დან H ატომისთვის და 17 ე.-ვ.-დან H_2 მოლეკულისთვის He ატომისთვის 24,4 ე. ვ.-მდე იზრდება. ამ სისტე-

მებს მეტად მსგავსი თვისებები უნდა ჰქონდეთ, რადგან განაწილების ელექტრონული სურათები უწყვეტად გარდიქმნიებიან. II ატომის ძირითად მდგომარეობაში ელექტრონის მოძრაობის რაოდენობის მომენტი ნულის ტოლია, და მაშასადამე, იგი ნულის ტოლი იქნება აგრეთვე H_2 და He -ს ძირითად მდგომარეობებში. 1s დონეზე ორი ელექტრონი მოთავსდება მხოლოდ იმ შემთხვევაში, თუ მათი სპინთა მამართულება მოპირდაპირეა; მაშასადამე სპინები ანტიპარალელური უნდა იყვნენ H_2 -ის ძირითად მდგომარეობაშიც. ელექტრონული ფუნქცია ψ , მხედველობაში სპინის ძიუღებლად, სიმეტრიულია H_2 -ის ამ დონესთვის, როგორც 2b ნახ-ზე; იგი სიმეტრიულია აგრეთვე კელიუმის ატომის შესაბამის დონესთვის. როდესაც აღზნებულ მდგომარეობაში მყოფ ატომებისაგან წარმოიშვება მოლეკულა, მაშინ ელექტრონები შეინარჩუნებენ მოძრაობის რაოდენობის იმ მომენტს, რომელიც საწყის მომენტში ჰქონდათ.

მოლეკულების ეს მსგავსება იმ ატომთან, რომელიც ისეთივე რიცხვის საეალენტო ელექტრონებს შეიცავს მეტად მნიშვნელოვანია, რადგან ეს გამოიყენება უფრო რთულ მოლეკულებზეც, რომლებიც შეიცავენ პროტონებს, მაგალითად HCl მოლეკულაზე. შევადაროთ ქლორის ატომი (ატომური ნომერი 17) არგონის ატომს (ატომური ნომერი 18). ქლორის ატომის გულას ტვირთი 17e-ს ტოლია და მას 17 ელექტრონი აქვს, ხოლო არგონის ატომსაქვს გულა 18e ტვირთით და 18 ელექტრონი. აგრეთვე HCl მოლეკულას აქვს 18 ელექტრონი, ხოლო მისი გულას ტვირთი $(17 + 1)e$ -ს ტოლია. სავსებით კანონიერია დაშვება, რომ HCl მოლეკულა განსხვავდება არგონის ატომისაგან მხოლოდ იმით, რომ მასში ერთი დადებითი ტვირთი მოცილებულია დანარჩენ 17-ს და არ არის შეერთებული მათთან ერთ ერთადერთ გულაში. ნაცვლად იმისა, რომ შევისწავლოთ ნეიტრალურ H ატომის ნეიტრალურ Cl ატომთან შეერთება, ჩვენ მიუღვეთ HCl მოლეკულის აგებულების საკითხს მე-IV თავის მეთოდებით ვისარგებლებთ რა ჰაულის პრინციპით 18 ელექტრონისთვის, თითქოს ერთ ერთადერთ ატომთან გვექონდეს საქმე. ამ განხილვამ, თუ ის წარმატებით აღმოჩნდება უნდა მოგვეცეს გულებისთვის 49 ნახ-ზე გამოხატულის მსგავსი და HCl მოლეკულის არსებობის დამშვები მრუდი.

ასეთ ორ ატომიანი მოლეკულის ლერძი—ე. ი. გულებზე გამავალი სწორი ხაზი რასაკვირველია არ არის დამაგრებული სიერცეში. ჰირიქით, სწორედ ისევე, როგორც მე-III თავში უშვებდით, რომ

ელექტრონს შეუძლია წყალბადის გულას ირგვლივ ბრუნვა აქაც დაუშვებთ, რომ პროტონს შეუძლია ბრუნვა ქლორის ირგვლივ. მე-18 ნახ-ზე პირველსაწყისი კულონური მრუდი იცვლება ბრუნვის გამო და შეიქმნებიან სხვა პოტენციალური ყუთები; ამგვარად პირველსაწყისი ენერგეტიული მრუდი იცვლება სხვადასხვა გვარად. სინამდვილეში, არც ერთ ორატომიან მოლეკულაში ერთი გულა არ ბრუნავს მეორის ირგვლივ, არამედ ორივენი მოძრაობენ მათი საერთო სიმძიმის ცენტრის ირგვლივ. ჰაგრამ ყველა მსჯელობანი სწორი იქნებიან, თუ 1-ით აღწნ-შრავთ ნაწილაკების მანძილს ერთმანეთისაგან და 2-თი—მათ დაყვანილ მასას.

დამოუკიდებელი დაკვირვებადი სიდიდეები. ორი ერთგვარი ატომისაგან შემდგარი მოლეკულა. ბი. ვალენტური ბმა

1. აღენიშნოთ სხვადასხვა მოვლენათა ალბათობები P_1, P_2, P_3, \dots -ით. მაშინ, თუ ეს მოვლენები ერთმანეთისაგან დამოუკიდებელი არიან, ალბათობა იმისი, რომ ისინი ერთდროულად დადგებიან ეტოლება ნამრავლს:

$$P = P_1 P_2 P_3 \dots$$

ეს გამოთქმა წარმოადგენს თეორემას, რომელსაც კვანტურ მექანიკაშიც აქვს ადგილი და რომელიც შეიძლება გამოვიყენოთ ჩვენთვის საინტერესო ალბათობის შემთხვევაში; სახელდობრ, იმის ალბათობაზე, რომ გარკვეულ დაკვირვებად სიდიდეებს, ვსთქვათ q, r, s, \dots აქვთ ერთდროულად გარკვეულ dq, dr, ds შუალედებში მდებარე მნიშვნელობანი. მე-II თავში ნაჩვენები იყო, რომ ყოველ რთულ სისტემაში არსებობს მრავალი სიდიდე, რომელთა გაზომვა შესაძლოა—მანძილები, კუთხეები და ა. შ. და თუ არ შეიძლება მათი ზუსტი მნიშვნელობათა პოვნა, მაშინ ყველა ამ დაკვირვებად სიდიდეთა აღწერისათვის აუცილებელია განაწილების სურათების ცოდნა. ჩვენს მიერ ფორმულირებული თეორემა, გვეუბნება თუ როგორ შეიძლება აიწეროს რთული სისტემის მდგომარეობა. ერთადერთი ცალიება, რომელსაც ჩვენ მასში შევიტანთ, იმაში მდგომარეობს, რომ ჩვენ, გამოვსახავთ—რა ალბათობას ჩვეულებრივ ფორმაში $|\psi|^2$, ვისარგებლებთ კვადრატული ძირით P -დან. კერძო შემთხვევაში, როდესაც q, r, s სიდიდეები ერთმანეთისგან დამოუკიდებელი არიან, უნდა აღებულ იქნას ნამრავლი

$$|\psi_1|^2 dq |\psi_2|^2 dr |\psi_3|^2 ds,$$

რაც უდრის

$$|\psi_1 \psi_2 \psi_3|^2 dq dr ds.$$

მაშასადამე ეს სისტემა აიწერება რთული ψ ფუნქციით, რომელიც სამი ψ -ფუნქციის ნამრავლის ტოლია:

$$\psi(q, r, s) = \psi_q \psi_r \psi_s \quad (56)$$

ამ ψ ფუნქციას შეიძლება დაუპირისპიროთ რთული ψ ფუნქცია, რომელიც მე-IV თავში იყო მიღებული სხვადასხვა ψ ფუნქციათა ბეკრეაის შედეგათ. $\psi_1, \psi_2 \dots$ ფუნქციები, რომლებიც იკრიბებოდნენ, ერთიანი იყვნენ ცვლადის სხვადასხვა ფუნქციები იყვნენ და ყველას ერთნაირი განზომილება ჰქონდა. მეორე მხრივ. $\psi_1, \psi_2, \psi_3 \dots$ რომლებიც (56)-ში გადამრავლდებიან, სხვადასხვა $q, r, s \dots$ ცვლადთა ფუნქციებია და, საზოგადოთ რომ ვსთქვათ, არ ექნებათ ერთნაირი განზომილებები. როგორც ეს ფიზიკაშია მიღებული, ჩვენ ვკრებთ ერთ სახელიან სიდიდეებს და ვამრავლებთ სხვადასხვა სახელიანს.

გასაგებია, რომ q, r და s -ის განზომილებათაგან დამოუკიდებლად, (55)-ით განზღვრული სიდიდე, ყოველთვის განყენებული რიხცვია.

კინეტიური ენერჯია, რომელიც აქვს აღებულ მომენტში რთულ სისტემას, გასაგებია წარმოადგენს იმ კინეტიურ ენერჯიათა ჯამს, რომელიც მის სხვადასხვა ნაწილებს აქვთ. იგივე ითქმის პოტენციალური ენერჯიის მიმართ.

სრული ენერჯია W უნდა უდრიდეს W_q, W_r და W_s -ის ჯამს. (56) ფორმულა აბსურდული იქნებოდა, რომ ψ ფუნქციითა გადამრავლება არ იყოს შეთავსებადი ენერჯიის შეკრებასთან. ადვილი საპოვნია, რომ ორივე ოპერაცია შეიძლება ერთმანეთს შეუთავსოთ მაჩვენებლიანი ფუნქციის თვისების წყალობით, რადგან

$$W_q W_r W_s = \psi_q \psi_r \psi_s e^{-\pi i (W_q + W_r + W_s) / h} \quad \text{ქ}$$

წინა თავებში ჩვენ არ გვეკირდებოდა განაწილების სურათთა ამ თვისებების აღნიშვნა, რადგან ყოველთვის ყურადღებას ვაქცევდით, რამდენადაც ეს შესაძლო იყო, მხოლოდ ერთ დაკვირვებად სიდიდეს. მაგრამ ამ თავში ჩვენ შეეხვდებით ორი სურათით სარგებლობის აუცილებლობას: ერთი განაწილების სურათი ელექტრონთა ასაწერად, ხოლო მეორე - გულათა შორის მანძილების განსაზღვრისთვის, აღარ ვლაპარაკობთ-რა მოლეკულის ბრუნვის აღწერის აუცილ-

ლებლობაზე. ყველაზედ უკეთესია გადავათვალეოთ მთელი თავის მსჯელობანი თავიდან.

გამოვიღვართ-რა, როგორც 1 პ-ში, ორი დატვირთული სწორი ხაზის გასწვრივ მოძრავი ნაწილაკიდან, ყურადღება მივაქციოთ (ნახ. 45) მათ მანძილს რაიმე სათავიდან. გარკვეულ წერტილის მახლობლად ერთი ნაწილაკთაგანის ყოფნის ალბათობა დამოკიდებული იყო იმისგან, იმყოფებოდა თუ არა ამ წერტილის მახლობლად მეორე ნაწილაკი. ამიტომ $\psi(x, y)$ ფუნქცია. რომელიც 45 ნახ-ის შემწეობით უნდა გვეპოვნა, არ შეიძლებოდა დაწერილიყო $\psi_n(x) \psi_n(y)$ ორი დამოუკიდებელი სიდიდის ნამრავლის სახით. ეს რომ შესაძლო ყოფილიყო, მაშინ, გასაგებია, ჩვენთვის ხელსაყრელი იქნებოდა გამოგვეყო ისეთი სიდიდეები, რომლებიც კონფიგურაციას განსაზღვრავენ და იპავე დროს ერთმანეთისგან დამოუკიდებელი არიან. ორ ურთიერთმომქმედი ნაწილაკის შემთხვევაში ეს შეიძლება გაკეთდეს: ა) რაიმე სათავიდან ნაწილაკთა წყვილის სიმძიმის ცენტრის მანძილზე, ბ) ნაწილაკთა ურთიერთ მანძილზე ყურადღების მიქცევით; მაგალითად, თუ 45 ნახ-ზე OD მონაკვეთი გამოხატავს სიმძიმის ცენტრის მანძილს სათავიდან, ხოლო OC —ნაწილაკების ურთიერთ მანძილს, მაშინ S წერტილი შეესაბამება ნაწილაკთა წყვილის რომელიმე გარკვეულ კონფიგურაციას და ყველა შესაძლო კონფიგურაცია შეიძლება გამოისახოს ყოველ შესაძლო S წერტილებით. y ღერძის მახლობლად ყველა წერტილებისთვის, ყოველი მხრივ მისგან, x სიდიდე მცირეა, რის შედეგადაც პოტენციალური მალლობი (ან ღარი, გარემოებებისგან დამოკიდებულობით) რომელიც 45 ნახ-ზე ენერგეტიულ ფართეულზე დიაგონალის გასწვრივ მდებარეობს, ეხლა y ღერძის გასწვრივ წარემართება. y ღერძის მიმართულებით მოძრაობა გამოხატავს სიმძიმის ცენტრის მოძრაობას, ხოლო x ღერძის მიმართულებით მოძრაობა ორივე წერტილის ერთმანეთთან მიახლოებას ან დაშორებას; მაგალითად, თუ ცნობილია, რომ სიმძიმის ცენტრი მოძრაობს რაიმე ხაზის გასწვრივ v სიჩქარით, რომელიც $\frac{h}{mv} = \lambda$ ტოლობით განისაზღვრება (m —მასათა ჯამია), მაშინ ვისარგებლებოთ ფუნქციით

$$\Psi = \psi(x) \cdot e^{-2\pi i \left(vi \pm \frac{y}{\lambda} \right)}.$$

ამგვარად, თუ ვისარგებლებთ (20) ფორმულით, მაშინ წყალბადის მოძრავი ატომი შეიძლება ავწეროთ:

$$\Psi = \frac{A}{(\pi a^3)^{1/2}} e^{-\left(\frac{2\pi i W t}{h} + \frac{r}{a} \pm \frac{2\pi i y}{\lambda}\right)},$$

სახის ფუნქციის საშუალებათ, სადაც W -ში შედის ატომის კინეტიური ენერგია $\frac{1}{2} mv^2$. ამ შემთხვევაში ჩვენ არავითარი ცნობა არ

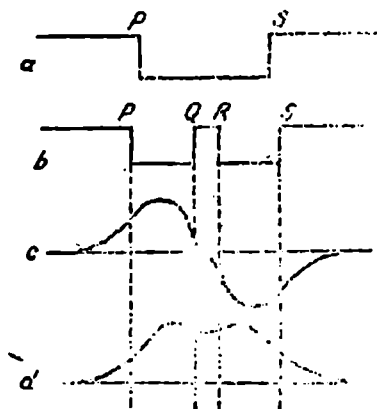
გვაქვს ატომის მყისა მდებარეობის შესახებ (ე. ი. სიმძიმის ცენტრის მდებარეობის შესახებ); თუ ჩვენ ასეთი ცნობები გვაქვს, მაშინ $\Psi(x, y)$ უნდა იყოს ტალღური პაკეტი და არა მონოქრომატიული ტალღა.

ყოველი მდგარი ψ ტალღა, დაცემული და არეკვლილი ენერგეტიულ ფართეულზე მყოფ პოტენციალურ მაღლობზე, გამოსახავს ორ შემხლელ ნაწილაკს; ასეთი მდგარი ტალღებიდან შეიძლება აგრეთვე x ღერძის პარალელურად მოძრავ ტალღური პაკეტის შექმნა. როდესაც ნაწილაკებზე არ მოქმედებენ გარეშე ძალები, მაშინ პოტენციალურ მაღლობს ყველგან ერთნაირი კვეთა აქვს. ამ შემთხვევაში არ არის აუცილებელი ენერგეტიული ფართეულით სარგებლობა, რადგან ყოველი $\psi(x)$ და $\psi(y)$ ფუნქციათაგანი, ცალ-ცალკე შეიძლება მიღებულ იქნეს ორ შესაბამის ენერგეტიული მრუდიდან. ნაწილაკების მანძილების პოვნისათვის აუცილებელი ენერგეტიული მრუდი, გასაგებია, წარმოადგენს ნაწილაკთა პოტენციალური ენერჯის მათ შორის მანძილისგან დამოკიდებულების მრუდს.

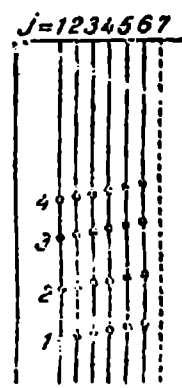
მაგრამ ეს ენერგეტიულ მრუდის სწორედ ის სახეა, რომლის მოძებნა მოლეკულისათვის განხილული იყო 49—51 ნახ-ზე. განაწილებათა სურათების „ამორგებით“ ასეთ პოტენციალურ ყუთში, ჩვენ მივიღებთ $\psi(r)$ ფუნქციას ფარდობითი ძრაობისთვის. როგორც ჩვენ ვნახეთ, იმის ალბათობის განსაზღვრელად, რომ მოლეკულის ღერძს აქვს θ, φ მიმართულება აუცილებელია $\psi(\theta, \varphi)$ ფუნქციით სარგებლობა. როდესაც გარეშე ველი არ არის მანძილი გულათა შორის სავსებით დამოკიდებულია ღერძის ორიენტაციაზე სივრცეში. მაშასადამე, თუ ჩვენ ვიპოვეთ ψ_x გულათა რხევისათვის და ψ_y მოლეკულათა ბრუნვისთვის, მაშინ რთული ψ მიღება შეიძლება ამ ფუნქციათა გადამრავლებით:

$$\psi = \psi_x \psi_y.$$

ამ მსჯელობასთან სრული თანხმობით ჩვენ მივიღეთ H ატომის-
თვის განაწილების სურათი $R(r) \cdot \Theta(\theta) \cdot \Phi(\varphi)$ ნამრავლის სახით.
თუმცა საკითხთან ამ თვალსაზრისით არ მივსულვართ. ამგვარად
 $\Psi \cdot \Phi$ ნამრავლი იძლევა იმის ორიენტაციას, რასაც შეიძლება ეწო-
დოს ატომის ღერძი, პირველის მოძრაობის დროს სიმძიმის ცენტ-
რის ირგვლივ. ამოცანა მოლეკულის შესახებ სავესებით ექვივალენ-
ტურია და უნდა გადაწყდეს დამატების (3)–(6) განტოლებათა დახ-
მარებით. მოლეკულიარული ბრუნვის ენერგია იკვანტება და დამო-
კიდებულია $C = j(j+1)$ სიდიდებზე, სადაც j – მთელი რიცხვია.
სრული ენერგიიდან ბრუნვის ენერგიის სხვადასხვა მნიშვნელობათა-
 $j(j+1) \frac{h^2}{8\pi^2\mu r^2}$ გამოკლებით, ჩვენ მივიღებთ სახე შეცვლილ პოტენ-
ციალურ ყუთს. მაგრამ მაშინ როდესაც H ატომში დაყვანილი მას-



ნახ. 53.



ნახ. 54.

μ მცირედ განსხვავდებოდა ელექტრონის მასისაგან, ორ ატომიან
მოლეკულის გულათათვის იგი გაცილებით დიდია, რის შედეგადაც
 j -ს შესაბამისი პოტენციალური ყუთები ერთმანეთთან და $j=0$ შე-
საბამ პირველ საწყის ყუთთან თითქმის იგივეურებია. ამიტომ ამ ყუთებში
 ψ „მორგებისას“ ჩვენ ვნახავთ, რომ n -რი დონე ერთ-ერთი მათგანისა
თითქმის თანხედება ყველა დანარჩენთა n -რ დონეს. ენერგიის უ-
ნიშვნელო განსხვავებებს, რთული ფუნქციიდან $|\Psi|^2$ -ს შედგენისას,
როგორც, მაგალითად, (36)-ში მივეყვართ ძალიან მცირე სიხშირიან
რბევის წარმოშობასთან და, ძალიან დიდი ტალღის სიგრძის ინტრა-

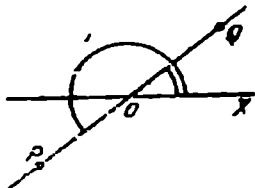
წითელი სხივების შთანთქმასთან და წარმოშობასთან მოლეკულის გადახტომის დროს ერთიდან მეორე ბრუნვითი დონეზე.

დონეთა სქემის ნაწილი მრხველადი მოლეკულისთვის ნაჩვენებია 54 ნახ-ზე. ყველა გამოხატული დონეები ეკუთვნიან მოლეკულის ერთ ერთადერთ ელექტრონულ დონეს—ეტიკვათ, ქვედა ელექტრონულ დონეს. ყოველ სხვა ელექტრონულ დონეს ეკუთვნის მრხვე—მბრუნაე დონეთა მსგავსივე სისტემა. სქემის შესაბამ ენერგიის მნიშვნელობათა არე ერთ ელექტრონ-ვოლტზე ნაკლებია, ე. ი. მცირეა ელექტრონების აღვზნების ენერგიებთან შედარებით. თუ დავიხსომებთ ად განსხვავებას მასშტაბებში, მაშინ 54 ნახ. შეიძლება შევადაროთ 20 ნახ. ორივე დიაგრამაზე, ერთ ვერტიკალურ რიგში მდებარე წერტილები, ეკუთვნიან ერთსადაიმამე აზიმუტალურ კვანტურ რიცხვს— ე. ი. რომელიმე გარკვეულ სახე შეცვლილ პოტენციალურ ყუთს. ქვედა დონეს ნებისმიერ ვერტიკალურ რიგში არა აქვს კვანძი, შემდეგ დონეს ერთი კვანძი აქვს, რომელიც სფერულ კვანძით ზედაპირად გადაიქცევა და ა. შ. რხვეითი დონის შეცვლას მოჰყვება ასეთ ფართეულთა რიცხვის შეცვლა, მაშინ როდესაც ბრუნვითი გადასვლის დროს მათი რიცხვი უცვლელი რჩება. (შეიძლება კითხვის დასმა: თუ ამოცანები ერთნაირია, რატომ შესაძლოდ არ ჰქმნის წყალბადის ატომში ელექტრონი რხვეად და მბრუნაე სპექტრალურ ხაზებს? პასუხი იმაში მსგომარეობს, რომ იგი ამათ გამოასხივებს, მაგრამ როგორც მე-20 ნახ-დან სჩანს, არაა მიზანშეწონილი განსხვავება გავატაროთ ხაზთა ორთავე სახის შორის, რადგან ისინი ერთმანეთთან არეული არიან).

2. ორატომიან მოლეკულებს, რომელთაც ერთნაირი გულები აქვთ, ჰომონუკლეარულები ეწოდებათ. თუმცა 52 ნახ-ზე H_2 აღწერილისათვის ერთგვარი ყუთები იყო აგებული, მაგრამ ყუთების იგივეობა არავითარ როლს არ თამაშობს საკითხის შესწავლისას. მართლაც როგორი სახე ექნებოდა ენერგეტიულ ფართეულს, ყუთებს რომ სხვადასხვა სიგანეები ჰქონოდათ? ნაწილაკთა პოტენციალური ენერგიის გადაზომვით x და y ღერძებზე, ჩვენ მივიღებთ არხთა ორ წყვილს, რომელთაგან თითოეულში ერთი არხი მეორეზე განიერი იქნება. პოტენციალური ყუთები E და F არეებში ეხლა სწორკუთხოვანი გახდებიან და არა კვადრატული. მაგრამ მნიშვნელოვანია ის, რომ ისინი დიაგონალის მიმართ სიმეტრიულად მდებარეობენ; მართლაც, მთელი ენერგეტიული ფართეული მთლიანად, აგების მიხედვით, სავსებით სიმეტრიულია დიაგონალის მიმართ. მაშასადამე ψ^2 აგრეთვე სიმეტრიული უნდა იყოს, მაშინ როდესაც ψ შეიძლება

იყოს ანტისიმეტრიული. მაშინ როდესაც H^T იონში ეს სიმეტრიის თვისებები დაკვირვებული არიან პროტონების ერთნაირობაზე, აქ ისინი ორივე სავალენტო ელექტრონის ერთნაირობაზე არიან დამოკიდებული.

ავიღოთ ორი ნაწილაკი, რომლებაც 1 და 2-ს დავარქმევთ და კიდევ განვიხილოთ 44 ნახ. A წერტილი გამოხატავს მდგომარეობას, რომლის დროსაც ნაწილაკი ნომერი 1 იმყოფება, ეთქვას, A წერტილში QAB ხაზზე. ხოლო ნაწილაკი ნომერი 2 — B წერტილში. შესაბამისი წერტილი A' , რომელიც დიაგონალის მეორე მხრივ იმყოფება გამოხატავს მდგომარეობას, როდესაც ნაწილაკი ნომერი 2 A წერტილში იმყოფება, ხოლო ნაწილაკი ნომერი 1 — B წერტილში. თუ ნაწილაკები ერთნაირებია მაშინ მათ ნუმერაციას აზრი არა აქვს და ორივე მდგომარეობების ალბათობები ერთნაირები უნდა იყვნენ, რადგან ისინი ექსპერიმენტალურად განურჩეველი არიან.



ნახ. 55.

ამიტომ ყოველი სისტემისთვის, რომელსაც ორი იგიური ნაწილაკი აქვს გამოსადეგია შემდეგი აზრი: მდგომარეობის ამწერ ნებისმიერ ψ ფუნქციას ის თვისება უნდა ჰქონდეს, რომ ორივე ნაწილაკის გადასმისას $|\psi|^2$ -ის სიდიდე უცვლელი უნდა დარჩეს, მაშინ როდესაც ψ -მ ნიშანი უნდა შეიცვალოს. როგორც ჩვენ 51 ნახ-ზე ენახეთ სიმეტრიულ და ანტისიმეტრიულ დონეთა ენერგიების განსხვავებას ხშირად ძალიან დიდი ანიშვნელობა აქვს.

ენერგიების ამ განსხვავებებს მიეყავართ რალაცნაირ ძალების გამოვლენასთან, რომლებიც კვანტურ მექანიკის მიერ იყო შემოტანილი პირველად: მათ ეწოდათ „გაკვეთილი ძალები“, იმიტომ რომ წარმოიშობებიან იმ შემთხვევაში, როდესაც იგიური ნაწილაკები, როგორც ჩვენ ვგულისხმობთ, ადგილებს იცვლიან.

რადგან იგულისხმება, რომ მატერიალური სამყარო უშთავრესად ელექტრონებისა და პროტონებისაგან შესდგება, ამიტომ შეიძლება H ატომი იყოს ერთადერთი არა გულური მდგრადი სისტემა, რომელიც არ შეიცავს ერთნაირ ნაწილაკებს.

აქ აუცილებელია, თუნდაც მოკლედ, განვიხილოთ სხვა გზები, რომლებითაც ცნება იგიურობის შესახებ შემოიტანება მოლეკულარულ ფიზიკაში. ავიღოთ, მაგალითად, მბრუნავი კომონუკლეარული

მოლეკულა (ნახ. 17) და განვიხილოთ მოლეკულის ღერძის პროექცია. 55 ნახ-ზე გულები P და Q ასობით არის აღნიშნული; φ იყოს კუთხე OP და OX შორის რომელიმე მომენტში; ნახაზზე φ კუთხე დაახლოებით 210° -ის ტოლია. თუ P და Q -ს ადგილებს შეუცვლით, მაშინ XOP კუთხე გაუტოლდება 30 ან 390° ე. ი. ($\varphi \pm \pi$). მოვიგონოთ ესლა, რომ თუ φ —რაიმე კუთხეა, ხოლო— m , კენტი მთელი რიცხვი მაშინ

$$\cos m(\varphi \pm \pi) = -\cos m\varphi,$$

$$\sin m(\varphi \pm \pi) = -\sin m\varphi.$$

ამიტომ თუ ვისარგებლებთ (48) ფორმულით, სახელდობრ:

$$\Phi = A \cos m\varphi + iA \sin m\varphi,$$

მაშინ ადვილად ვნახავთ, რომ გულათა გადასმისას იმ მდგომარეობებში რომელთათვისაც m კენტია Φ ფუნქცია ნიშანს იცვლის და ამიტომ ანტისიმეტრიულია.

დონეებს, რომელთათვისაც m ლუწია, სიმეტრიული Φ ფუნქცია აქვთ, რადგან გულების გადასმისას მათი ნიშანი უცვლელი რჩება. აგრეთვე შეიძლება ითქვას, რომ განაწილების სურათები შეიძლება სიმეტრიული ან ანტისიმეტრიული იყვნენ იმისგან დამოკიდებულებით, კენტი თუ ლუწი j კვანტური რიცხვი.

ეს თვისება დიდ და მოულოდნელ გავლენას ახდენს წყალბადის ხედრითი სითბოტევადობაზე. თუ გავაცივებთ H_2 -ს აბსოლიუტურ ნულამდე, მაშინ ჩვენ დაველოდებით, რომ ყველა მოლეკულები, როგორც ყოველთვის, მოთავსდებიან ქვედა ბრუნვითი დონეზე— ე. ი. დონეზე, რომლისთვისაც $m = 0$. მაგრამ შეიძლება ჩვენება, რომ რომელიმე ანტისიმეტრიულ მდგომარეობიდან სიმეტრიულ მდგომარეობაში გადასვლა ძალიან იშვიათად ხდება; სხვადასხვა მოვლენათა მრავალრიცხოვანი დაკვირვება ატყეცებს თეორიის ამ დასკვნას.

ამის შედეგად მოლეკულები, რომლებიც საწყის მომენტში ლუწ ბრუნვითი დონეებზე იყვნენ, გადავლენ დონეზე, რომლისთვისაც $m = 0$, ხოლო კენტ დონეებზე მყოფი მოლეკულები ჯერ გადავლენ ყველაზე ღრმა ანტისიმეტრიულ დონეზე— ე. ი. დონეზე, რომლისთვისაც $m = 1$ და მხოლოდ ამის შემდეგ რამოდენიმე დღის განმავლობაში გადადიან ქვედა დონეზე. ამგვარად წყალბადი იქცევა ორი გაზის ნარევისებურად, რომელთაც ორთოწყალბადი და პარაწყალბადი უწოდეს. გასაგებია, რომ H_2 -ს გასათბობად $m = 0$ დონედან.

უფრო მეტი სითბოა საჭირო, ვიდრე მისი გასათბობად $m = 1$ დონედან, ამიტომ წყალბადის ორივე სხეს სხვადასხვა ხვედრითი სითბოტევადობა ექნება, ხოლო ჩვეულებრივი ხვედრითი სითბოტევადობა იქნება ნარევის სითბოტევადობა. რადგან ხვედრითი სითბოტევადობათა განსხვავებას თანსდევს ორთქლის წნევების განსხვავება ამით შესაძლო ხდება ორივე სახის ერთმანეთისგან განცალკევება

3. განვიხილოთ ეხლა რთული ψ ფუნქციის თვისებები, რომელიც ორი ფუნქციის ნამრავლს წარმოადგენს, მაგალითად $\psi = \psi_p \psi_q$, რომელთაგან თვითეულს აქვს სიმეტრიული თვისებები. განვიხილოთ რომელიმე გარკვეული დონე, რომლისთვისაც ორივე ψ_p და ψ_q ფუნქციები ანტისიმეტრიულებია. ნაწილაკების გადასპისას ψ_p ნიშანს იცვლის, სწორედ ასევე იცვლის ნიშანს ψ_q . $\psi_p \psi_q$ ნაწარველი კი ნიშანი არ იცვლის და სრული ფუნქცია ამ შემთხვევაში სიმეტრიულია, ე შეგვიძლია გამოვხატოთ სიმბოლიური ტოლობის საშუალებით $A \cdot A = S$. თუ ანტისიმეტრიულია მხოლოდ ერთი ψ_p , ψ_q ფუნქცია თავანი და არა ორივე ერთდროულად, მაშინ შედეგად ψ ფუნქცია ანტისიმეტრიულია, ე. ი. $A \cdot S = A$ და $S \cdot A = A$.

ანალოგიური მსგელოა გამოიყენება სამი ფუნქციის ნამრავლზედაც რომლის სიმეტრია განისაზღვრება ალგებრის ჩვეულებრივი წესებით. განვიხილოთ ეხლა ჰომონუკლეარული მოლეკულის სხვადასხვა ალგზნებული მდგომარეობანი, რომლებიც განსაზღვრავენ მის ზოლოვან სპექტრს. გულათა რხევის შესაბამისი ფუნქცია შეიძლება არ განვიხილოთ, რადგან იგი ყოველთვის სიმეტრიულია და ამიტომ რეზულტატზე გავლენას არ მოახდენს. ქელ. ფუნქცია სიმეტრიული უნდა იყოს ელექტრონთა ერთ დონეებისთვის და ანტისიმეტრიული მეორეთათვის, მაშინ ოოდესაც ψ_b . სიმეტრიული ან ანტისიმეტრიული იქნება ბრუნვის რიცხვის ლუწობის ან კენტობისაგან დამოკიდებულებით. ამგვარად უნდა დავლოდებოდით, რომ ყოველ მოლეკულაში არის დონეები, რომლებიც აიწერებიან ნამრავლ ψ ფუნქციის ყველა შესაძლო სახეებით, ე. ი.:

$$\left. \begin{matrix} S & S \\ A & A \end{matrix} \right\} = S, \quad \left. \begin{matrix} S & A \\ A & S \end{matrix} \right\} = A. \quad (57)$$

მაგრამ ცდებში დაკვირვებულ დონეთა განხილიდან გამომდინარეობს, რომ ჰომონუკლეარული მოლეკულები შეიძლება დაიყოს ორკლასად. ზოგიერთ ელემენტებისთვის გვხვდებიან განაწილებათა მხოლოდ ისეთი სურათები, რომელთათვისაც საბოლოო ψ ფუნქცია ან-

ტისიმეტრიულია, ხოლო სხვებისთვის—განაწილებათა მხოლოდ ისეთი სურათები, რომელთათვისაც ψ ფუნქცია სიმეტრიულია; თავისებური პაულის პრინციპის გამო არცერთ მოლეკულას არა აქვს ფუნქცია იათა ორივე ტიპი. აქედან გამომდინარეობს მნიშვნელოვანი შედეგები, დამოკიდებული იმისგან, აქვს თუ არა მოლეკულათა გულებს შინაგანი მოძრაობის რაოდენობის მომენტი—ე. ი. სპინი.

მე III თავში აღვნიშნავდით, რომ პროტონს აქვს მცირე მოძრაობის რაოდენობის სპინ მომენტი. H_2 მოლეკულაში ორივე პროტონის სპინები ხან პარალელურად განლაგდებიან, ხან ანტიპარალელურად; მაგრამ ეს შესაძინევე გავლენას არ ახდენს ენერჯის შესაძლო მნიშვნელობებზე. გულათა სპინების მიმართულება ნებისმიერ მოლეკულაში უნდა აიწეროს განაწილებათა რაიმე სურათის დახმარებით (გულას სპინი), რომელიც შეიძლება იცვლიდეს, შეიძლება არ ი. ვ. ლიდეს ნიშანს გულათა გადასმისას. რეზულტირებული საბოლოო ψ ფუნქცია ეხლა სამი მამრავლის ნამრავლს წარმოადგენს:

$\psi = \psi_{ელ} \psi_{ბრ} \psi_{გულ}$.

ზოგიერთ ატომთა გულებს, როგორც, მაგალითად, He^4 , C^{12} , O^{16} არა აქვთ სპინი; ასეთ შემთხვევაში $\psi_{გულ}$ არ არსებობს. ეხლა ცხადია, რომ ასეთი სპინის არ მქონე ატომებისაგან შექმნილი ჰომონუკლეარულ მოლეკულას, როგორც მაგალითად ჩვეულებრივ O_2 -ს, ექნება ზემოდ მოყვანილი წესის თანახმად დონეთა ორჯერ ნაკლები რიცხვი, ვიდრე მოლეკულას, რომლის გულათა სპინები ნულისგან განსხვავდებიან. დანარჩენი ბრუნვითი დონეები ვერ იარსებებენ, რადგან ისინი (ΔJ)-ის თანახმად იძლევიან საბოლოო ψ ფუნქციის არასწორ სახეს. გულას სპინიან მოლეკულებისთვის არ არის არავითარი შემოფარგვლა, რადგან $\psi_{ელ}$, $\psi_{ბრ}$, შეიძლება კომბინირებულ იქნას ნებისმიერ სიმეტრიულ და არა სიმეტრიულ $\psi_{გულ}$ -სთან იმისაგან დამოკიდებულებით, თუ როგორი მდგომარეობის მიღებაა საჭირო.

ჩვენი ცნობები მოლეკულიარულ დონეების შესახებ მიღებულია იმ ზოლოვან სპექტრთა შესწავლიდან, რომელიც გამოსხივდება კვანტურ გადასვლების დროს. ეს დაკვირვებანი გვაჩვენებენ, რომ ისეთი მოლეკულების ყოველი ზოლი, როგორც არის მაგალითად $O^{16}O^{16}$ კრატრით არ განსხვავდება ჩვეულებრივი მოლეკულის შესაბამის ზოლიდან, მხოლოდ ამოვარდნილია ხაზების მთელი რიგი. ასე რომ მიიღება რიგ-რიგობითი მიმდევრობა ამოვარდნილ და დარჩენილ ხაზების.

დადგენილი იყო, რომ ამ ეფექტს ამხელენ სწორედ ის მოლეკულები, რომელთა ატომებს, როგორც სხვა ამოცანებისაგან არის ცნობილი, გულას სპინი არა აქვთ. სწორედ აქედან იყო გამოყვანილი ზემოდ მითითებული წესი.

პარაწყალბადში გულას ყველა სპინები ანტიპარალელური არიან და ისინი არაერთარ გაქლენას არ ახდენენ მაგნიტურ მომენტის სიდიდეზე. ორთოწყალბადში მოლეკულთა ორმესამედს პარალელური სპინები აქვს, ხოლო ერთ მესამედს—ანტიპარალელური სპინები. ამგვარად, ორთოწყალბადის მოლეკულების ნაკადზე შტერნ-გერლახის ცდის განსორციელებით, შეიძლება პროტონის მაგნიტური მომენტის გამოთვლა. ფრიშმა და შტერნმა 1933 წ. მიიღეს შედეგი, რომელიც 2,5 ჯერ სკარბობს მოსალოდნელ მნიშვნელობას, სახელდობრ აღმოჩნდა, რომ პროტონის სპინი $\frac{1}{7,30}$ მაგნეტონის ტოლია და არა $\frac{1}{1838}$ -ის. მსგავსივე ცდამ წყალბადის მძიმე იზოტოპთან მოგეცა დეიტონის ანუ დიპლონის მაგნიტური მომენტისთვის დაახლოებით პროტონის სპინის $\frac{1}{3}$ -ს ტოლი მნიშვნელობა.

4. ყველა ჩვენი გამოკვლევები აქამდე ძალიან მცირედ შეეხენ თუნდამენტალურ საკითხს იმის შესახებ, თუ ზოგიერთი ატომები შეერთებისას რატომ ჰქმნიან მდგრად მოლეკულებს, ზოგიერთები კი არ ჰქმნიან. ძირითადი პრობლემა ცხადია იმაზე დაიყვანება, არსებობს თუ არ არსებობს, მინიმუმის მქონე ენერგეტიული მრუდი, როგორც ეს 49 ნახ-ზეა. მაგრამ არის თუ არა რაიმე სახელმძღვანელო პრინციპი, რომლის საშუალებითაც შესაძლო იქნებოდა ენერგეტიული მრუდის სახის განსაზღვრა? და კერძოდ, რა კავშირია ახალ მეთოდებსა და ჭიპირიულ წესებს შორის, რომელნიც წარსულ საუკუნის განმავლობაში დადგინდნენ, სახელდობრ ვალენტობის წესებს შორის? რაიმე კავშირი უნდა არსებობდეს, რადგან ვალენტობის კანონები საკმაოდ დამაკმაყოფილებელი იყვნენ, თუ მხედველობაში არ მივიღებთ ზოგიერთ მნიშვნელოვან გამონაკლისს.

დავიწყოთ საკითხით: რატომ არ შეუძლიათ ჰელიუმის და წყალბადის ატომს შეერთდნენ და მოლეკულა შექმნან? რატომ არ შეიძლება 45 ნახ-ზე გამოხატულის მსგავსი მრუდის მიღება? ჰელიუმის ატომში ძირითად მდგომარეობაში ორივე ელექტრონს 1s დონე უჭირავთ და იგივე დონე აქვს დაკავებული წყალბადის ატომში ელექტრონს. პაულის პრინციპის თანახმად არაერთარ სისტემას არ შეუძლია იქონიოს ორზე მეტი ელექტრონი 1s დონეზე, ისიც მოპირდაპირედ მიმართული სპინებით. ამიტომ თუ ჩვენ შევეცდებით HeH მოლეკულის აგებას, მაშინ არსებითია, რომ ერთერთი ელექტრონი

აწეულ უნდა იქნეს უფრო მაღალ, მაგალითად მეორე კვანტურ დონეზე.

ჩვენ უკვე ვნახეთ 53 ნახ-ზე, როგორ შეუძლია რომელიმე დონეს უფრო მაღალ კვანტურ რიცხვიან დონეში გადასვლა. თუ ასეთი დონე დაკავებულია ელექტრონის მიერ, მაშინ ხდება მისი კვანტური დონის ამალღება—ელექტრონი, როგორც იტყვიან, გადასახლდება შემდეგ დონეზე. ამოცანაში H_2 -ის შესახებ (ნახ. 52) დამწვევი დონემ შესძლო ორივე შემავრთი ატომის ელექტრონების ჩატევა.

აქ კი ჩვენ ზედმეტი ელექტრონი გვაქვს, რომელიც უნდა გადავსაბლოთ აღმავალ დონეზე. რამდენადაც საკითხი ეხება დადებით გულებსა და ორ ელექტრონს, პროტესი ანალოგიურია იმისი რომელიც ჩვენ გვქონდა H_2 შემთხვევაში—ე. ი. პირველთა განზიდვას წინაღუდგება უკანასკნელთა დონეების დაწევა. საკითხი იმაში მდგომარეობს, საკმაოა თუ არა მესამე ელექტრონის კვანტური დონის აწევისთვის საჭირო მუშაობა იმისთვის, რომ ხელი შეეშალოს მოლეკულის შექმნას. ამ საკითხზე შეიძლება პასუხი მიეცეს იმის მსგავს მსჯელობათა დახმარებით, რომლითაც ჩვენ ვსარგებლობდით წინა თავში. პროტონი და ჰელიუმის გულა, რომ არ განიზიდავდნენ ერთმანეთს შესაძლო იქნებოდა მათი მიახლოება და ერთადერთი გულას შექმნა. წყალბადის და ჰელიუმის ატომიდან დაწყებით ჩვენ მივიდოდით სისტემასთან 3 ელექტრონით, რომლებიც დადებითი 3 e ტვირთის ირგვლივ ბრუნავენ—ე. ი. მივიღებდით ლითიუმის ატომს, რომლისთვისაც საიონიზაციო პოტენციალი სულ 5 ე. ვ. -ის ტოლია. სავალენტო დონე 8 ე. ვ. -ზე მეტად მაღლაა, ვიდრე წყალბადის ატომში. განიზიდავენ თუ არა H და He ერთმანეთს სხვადასხვა მანძილებზე, შეიძლება მხოლოდ გამოთვლებით ჩატარდეს. მსგავსივე მსჯელობა გამოიყენება იმ შემთხვევაშიც, როდესაც ძირითად მდგომარეობაში მყოფ ჰელიუმის ორ ატომს ვაახლოებთ. ამ შემთხვევაში გვაქვს ოთხი ელექტრონი 1s მდგომარეობაში, რომელთაგან ორი უნდა იყოს გადასახლებული; ამას მივყავართ განზიდვასთან.

მე-(33) გვ-ზე უკვე აღვნიშნავდით, რომ ლითიუმის ატომის ერთადერთი სავალენტო ელექტრონი ისევე მოიქცევა როგორც ელექტრონი წყალბადის ატომში. ლითიუმის ორი ატომის მიახლოებისას ქვედეს იმ დონეთაგან, რომლებზედაც განცალდება სავალენტო დონე, მივყავართ ატომთა წორის მიზიდვასთან. ჩვენ უგულვებელყოფთ იმ მდგომარეობას, რომ ორივე ატომი ერთად აღებული შეიცავს ოთხ ელექტრონს 1s მდგომარეობაში, რომელთაგან ორი გადასახლებული უნდა იყოს, შემდეგ დონეზე, როგორც ჰელიუმის ატომის შემთხვევაში. ამ დროს

მიღებული განზიდვა მცირეა იმ მიზიდვასთან შედარებით, რომელსაც იწვევს ელექტრონთა „შემბმული“ მოქმედება. ასე, ჩვენ გვაქვს ყველა საფუძველი იმისათვის, რომ 2s მდგომარეობაში მყოფ ელექტრონს ატომის სავალენტო ელექტრონი უწოდოთ. მაგრამ, ჩვენ მიუთითეთ 30 ნახ-თან დაკავშირებით, რომ ელექტრონის ენერჯის ამალღება ან მისი შექცეული პროცესი შესამჩნევი ხდება, როცა d მანძილი ატომებს შორის იმდენად მცირეა, რომ e^{-2} მნიშვნელოვანი ხდება; ამას გარდა მოვიგონოთ, $1c$ მამრავლი შეიცავს ($V-W$) სხვაობას, რომელიც ყუთებს შორის პოტენციალური ბარიერის სიმალღეს განსაზღვრავს. ლითიუმის ატომის K -დონე, რასაკვირველია, ღრმად ძვეს: დაახლოებით 60 ე. ვ.-ით ქვემოღ, ვიდრე ელექტრონის 2s დონეა. მაშასადამე e^{-2} მამრავლი, განმსაღვრელი K -ელექტრონების ენერჯის ამალღებისა, მეტისმეტად მცირეა, d -ს ძალიან მცირე მნიშვნელობებამღა და ამიტომ გავღენას არ ახღენს Li_2 -ის მოღეკულის წარმოშობაზე, რომელშიც მანძილი გუღებს შორის 2.6 Å-მღე აღწვეს. ეს მსჯელობა შეეხება ყველა ატომთა ღრმა დონეებს. ამგვარად ჩვენ გვაქვს სრული საფუძველი მივიღოთ, რომ მხოლოდ სუსტად შებმული ელექტრონები ახღენენ გავღენას ვალენტობაზე.

მაგრამ სუსტად შებმული ელექტრონები ხშირად ატომთა შორის განზიდვის გამოვღენას იწვევენ, მაგალითად N_2 , NO და O_2 მო-ეკულების შემთხვევებში. ამ ატომების გამოკვღევისას შეიძლება ვისარგებლოთ მე-IV თავში შემოტანილ აღნიშვნებით.

ელემენტებს ნახშირბადიღან ნეონამღე შემღეგი კონფიგურცია აქვთ:

ნახშირბადი	$1s^2$	$2s^2$	$2p^2$
აზოტი	$1s^2$	$2s^2$	$2p^3$
ენგბადი	$1s^2$	$2s^2$	$2p^4$
ფტორი	$1s^2$	$2s^2$	$2p^5$
ნეონი	$1s^2$	$2s^2$	$2p^6$

ნეონს ჩაკეტილი გარსი აქვს, რადგან მე-2 კვანტურ დონეზე შეიძლება 8 ელექტრონი იმყოფებოდეს. მაგრამ აზოტის ორი ატომის ძიახლოებისას მეორე კვანტურ დონეზე პირველად 10 ელექტრონი იმყოფება—ხუთ-ხუთი ელექტრონით ყოველ ატომში. მაშასადამე, ამ ელექტრონთაგან ორი უნდა გადასახლღეა უფრო მაღალ, სახეღდობრ მესამე კვანტურ დონეზე. ამ ღროს მღგრადი მოღეკულის

შექმნის ფაქტი გამოწვეულია იმ გარემოებით, რომ განზიდვა უფრო სუსტია ვიდრე მიზიდვა, შექმნილი დანარჩენი 8 ელექტრონის შემბმე-ლი მოქმედების შედეგად. მოლეკულის შექმნა შეიძლება აწეროთ, მის თქმით, რომ ყოვლი ატომი იძლევა ოთხ შემბმელ ელექტრონს და ერთ „გამხსნელ“, ე. ი. ბისის შემასუსტებელ ელექტრონს. ეს უკანასკნელი სპობს ერთ ზმათაგანს და ამგვარად სამი ბმა რჩება.

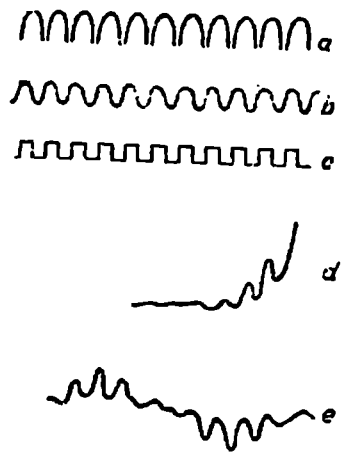
NO მოლეკულის შექმნისას მეორე კვანტურ დონეზე არის პირ-ველსაწყისად თერთმეტი ელექტრონი და, მაშასადამე, სამი მათგან-ი უნდა გადავიდეს უფრო მაღალ დონეზე.

O_2 მოლეკულის შექმნისას 12 ელექტრონი გვაქვს, რომელთაგან 4 უნდა გადავიდეს უფრო მაღალ დონეზე; ჟანგბადის ყოველი ატომ-ი იძლევა 4 „შემბმელ“ ელექტრონს და 2 „გამხსნელ“ ელექტრონს, სტოვებს რა ორ ბმას. მაშასადამე, უნდა ველოდეთ, რომ ამ მზრდა-დი ენერჯიანი ელექტრონების არსებობა მიგვიყვანდა საინონიზაციო პოტენციალების და დისოციაციის ენერჯიის შემცირებასთან O_2 და NO მოლეკულებისთვის ვიდრე N_2 -სთვის, და უფრო ნაკლებიან ფტორ-ისათვის. დაკვირვებები გვიჩვენებენ, რომ ეს შეეფერება სინამ-დვილეს.

HF , H_2O , NH_3 და CH_4 მოლეკულები, რომელთაგან ყოველს ათი—ელექტრონი აქვს, უნდა ჰქონდეთ ისეთივე ელექტრონული კონ-ფიგურაცია, როგორიც ნეონის ატომშია. CH რადიკალს ისეთივე ელექტრონული კონფიგურაცია აქვს, როგორიც აზოტის ატომს. ამ-გვარად გასაკვირი არაა, რომ ორი CH რადიკალი ერთდება და ჰქმნის აცეტილენს C_2H_2 , სწორედ ისევე, როგორც აზოტის ორი ატომი ერთდება და N_2 -ს ჰქმნის. შემდეგ, ბორის ჰიდრიდის BH_3 რადიკალს, აგრეთვე CH_3 , ისეთივე კონფიგურაცია აქვს როგორიც ჟანგბადის ატომს. მაშასადამე მათი ნახვა შეიძლება მხოლოდ B_2H_6 და C_2H_6 სახით, რომლებიც O_2 შეესაბამებიან, მაშინ როდესაც C_2H_4 მოლეკულა შეესაბამება ფტორს F_2 .

ელექტრონები კრისტალებში. ნეონიატორები და გამტარები

1. ატომის დადებით ნაშთზე გამავალ ხაზის გასწვრივ ელექტრონის პოტენციალური ენერჯიის ცვლილება გამოიხატება მე-7 ნახ-ის მრუდით, ხოლო ატომთა ორ ერთნაირ დადებით ნაშთზე გამავალ სწორი ხაზის გასწვრივ, 51 ნახ-ის *h* მრუდით. მაგრამ ყოველ კრისტალში, როგორც მაგალითად, ალმასში და ვერცხლში, სავალენტო ელექტრონთა წარმოდგენის თვალსაზრისით არის ერთნაირ დადებით ნაშთთა რიგები, რომლებიც ერთმანეთისაგან თანატოლ მანძილებზე მდებარეობენ მთელ მესერში. ამიტომ ენერგეტიული მრუდი 56 ნახ-ის *a* მრუდის მსგავსი იქნება, თუ აღებული მიმართულება ატომთა გულეზე გადის და *b* მრუდის მსგავსი, თუ იგი არ გადის მათზე. მოვლენის აოსებითი მხარე შეიძლება გამოვიკვლიოთ, უწინარეს ყოვლისა, ამ ენერგეტიულ მრუდის უფრო მარტივ *c* მრუდით შეცვლით. ელექტრონების მოსალოდნელი ყოფა-ქცევის დასადგენად კრისტალში, ვიპოვოთ სხვადასხვა *W* ენერგ-ტიულ დონეთადმი მიკუთვნებული განაწილებათა სურათები. ამოცანა ორ ნაწილად იყოფა: ა) ჯერ იგულისხმება, რომ მრუდ-ს პერიოდული ცვლილება მეორდება უსასრულობამდე ყოველი მიმართულებით და ბ) შემდეგ გამოიკვლევა



ნახ. 56.

ზედაპირის გავლენა ნამდვილ კრისტალთან. ჩვენ (ა) ნაწილიდან დავიწყებთ, ხოლო მესერის ზედაპირს ცოტა გვიან შემოვიტანთ. ავილოთ რომელიმე მრუდ-, მაგალითად c , და აავალოთ, ჩვეულებრივად, W -ს გამომხატველი ჰორიზონტალური ხაზი. ჩვენ ვანსხვავებთ ხაზებს, რომლებიც ყველა თავისი წერტილებით ამ ენერგეტიულ მრუდის ზემოდ არიან და ხაზებს, რომლებიც მრავალჯერ გადაჰყვებიან მას. მაგრამ ეს განსხვავება, რომელსაც ჩვეულებრივ ასეთი ფუნდამენტალური მნიშვნელობა აქვს, ამ ამოცანაში მეორე ხარისხოვანია.

ჩვეულებრივი განცალების ამ დარღვევას მივყევართ თავისებურებათა მთელ რიგთან.

1) ჯერ ენერგეტიულ მრუდზე მალა მდებარე სწორის აღებით, ჩვენ მივიღებთ განაწილებათა შესაძლო სურათებს, რომლებიც მარჯვნიდან მარცხნივ მოძრავ ნაკადს გამომხატავენ. მოძრავ ნაწილაკის კინეტიური ენერგია ($W - V$) პერიოდულად იცვლება, მაგრამ W -ს ყოველ კერძო მნიშვნელობას შეესაბამება მესერში მოძრაობის გარკვეული სიჩქარე.

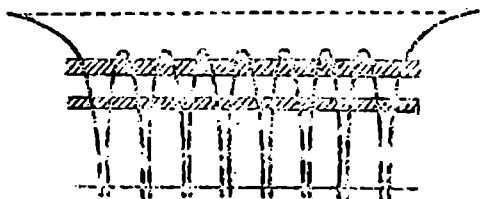
ψ მრუდი მოცემულ c სახის მრუდისთვის მიიღება ორი სხვადასხვა სიგრძის ტალღის სინუსოიდის ნაკვეთების ერთმანეთთან „მორგებით“; ამასთან ერთად წარმოსახვილი და ნამდვილი ნაწილისათვის თვითოეული მრუდები ცალ-ცალკეა.

2) იმ შემთხვევაზე გადასვლისას, როდესაც W სწორი მრავალჯერ ჰყვებს ენერგეტიულ მრუდს, ჩვენ ვხედავთ, რომ არ ზრის არავითარი მიზეზი, რომელიც აიძულებს ψ განაწილებათა სურათს შეიცვალოს თავის სახე წინა შემთხვევასთან შედარებით. თუმცა მოკულობა დაყოფილია პატარა დასაშვებ არეებათ, შუა ჯებირთა სიგანე არასოდეს არ იქნება 2 ან 3 λ -ზე მეტი (ეს ცნობილია კრისტალთა მესერის შესწავლიდან); ხოლო ასეთი ვიწრო ბარიერებს ძლივს თუ შეეძლება წარმოადგენდნენ რაიმე დაბრკოლებას ელექტრონთა მოძრაობისთვის, თუ ბარიერი ძალიან მალალი არ არის.

ψ განაწილებათა სურათები იპოვნებიან 27 და 28 ნახ-ზე ახსნილი მეთოდით: სინუსოიდის ნაკვეთების და მაჩვენებლიან მრუდების ამპლიტუდები ისე აირჩევიან, რომ მიიღებოდეს უწყვეტი მდორე მრუდი. ეს შესაძლო იქნებოდა ყოველთვის, რომ შეგვეძლებოდა აგრეთვე ექსპონენციალურად ზრდადი ფუნქციების შემოტანა. მაგრამ ჩვენ, როგორც ყოველთვის, შემოფარგლული ვართ განაწილებათა სურათების არჩევისას იმ პირობით, რომ ფუნქციები სასრულონი უნდა იყვნენ მთელ სივრცეში. ენერგიის ზოგიერთ მნიშვნელობებზე

ბისას განაწილების ერთადერთ შესაძლო მრუდეებს აქვთ ამპლიტუდები, რომლებიც უწყვეტად იზრდებიან ერთ მიმართულებით (მ მრუდი) და უწყვეტად ეცემათ მეორე მიმართულებით; ასეთი მრუდეები უსათუოდ უნდა უკუეაგდოთ.

განაწილებათა დასაშვებ სურათების ამპლიტუდზე შეიძლება ირ-ნეოდეს ნებისმიერი სახით (მრუდი e), მხოლოდ სასრულო უნდა რჩე-ზოდეს. გამოკვლევა გვიჩვენებს, რომ განაწილებათა სურათების ეს



ნახ. 57.

ორი ტიპი გვხვდება ენერჯის ერთმანეთის მომდევნო ზონებში, რომლე-ბიც, მაშასადამე, დაშვებული და აკრძალული ზონები იქნებიან მიმდევ-რობით. ამის ილიუსტრირება შეიძლება 57 ნახ-ის საშუალებით, თუ ვიგულისხმებთ, რომ დაშტრიხული ზონები შეესაბამებიან ენერჯის იმ მნიშვნელობებს, რომელთა დროსაც განაწილებათა ყველა სურა-თები სასრულო რჩებიან, მაშინ როდესაც შუა ზონებში არ არსე-ზობენ კრისტალში მყოფი ელექტრონების გამომხატველი განაწილე-ბათა სურათები.

ყოველ კრისტალს აქვს თავისი საკუთარი დამახასიათებელი ზო-ნები, ატომთა დადებით ნაშთთაგან შექმნილი ველის ფორმისა და კრისტალის მესერის სახისაგან დამოკიდებული. ჩვენს მიერ განხილულ უსასრულოდ დიდ კრისტალებში ენერჯიათა ყველა მნიშვნელობებია შესაძლო, რომლებიც-კი დასაშვებ ზონათა შიგნიო მდებარეობენ. კრისტალის სასრულო ნაკვეთში მომწყვედულ ელექტრონისთვის კი აქ ფუნქცია საზღვრიდან ყოველი მიმართულებით მაჩვენებლიანი კა-ნონით უნდა კლებადობდეს. ისევე როგორც 'პოტენციალურ ყუთის შემთხვევაში, ეს შესაძლოა ენერჯიათა მხოლოდ გარკვეულ დისკრე-ტულ მნიშვნელობათათვის. ეს დაკვანტვა გამოჰყოფს ყოველ დასაშ-ვებ ზონიდან დონეთა განსაზღვრულ რიცხვს, რომლებიც კრისტა-ლის ზომამზე არიან დამოკიდებული. (საველენტო ელექტრონების-

თვის განაწილების მრუდი c მრუდზე უფრო რთულია. ლითიუმისთვის განაწილების სურათს ყოველი ატომის შიგნით უნდა ჰქონდეს კვანძი, რადგან პაულის პრინციპის თანახმად მხოლოდ K ელექტრონებს შეუძლიათ არ ჰქონდეთ არც ერთი კვანძი პოტენციალურ ყუთებში. უფრო შიშვე ატომებისთვის L ელექტრონებს თითო კვანძი ექნებათ, ხოლო სავალენტო ელექტრონებს უნდა ჰქონდეთ ორი ან უფრო მეტი კვანძი ყოველ ატომის შიგნით).

2. შეიძლება სხვა მხედველობის კუთხითაც მივიდეთ ამოცანასთან დონეების შესახებ. დავიწყებთ რა ერთი ატომიდან, შეიძლება წარმოვიდგინოთ, რომ ატომთა რიგი, რომელიც 57 ნახ-ზეა გამოხატული, შექმნილია ატომების მიმატებით ერთი მეორის შემდეგ (ორატომიანი მოლეკულის აგების პროცესის განზოგადობა). ამ დროს ჩვენ ვნახეთ, რომ ყოველი ატომი უმატებს კრისტალის დონეებთან თავის საკუთარ დონეებს, ასე რომ თუ n ატომს შეიცავს რიგი, მაშინ ყოველ დასაშვებ ფენაში სწორედ n დონეა, რომელთაგან ყოველ მათგანზე შეიძლება ორი ელექტრონის მოთავსება თანამოწინააღმდეგედ მიმართულ სპინებით. მას შემდეგ რაც ყველა ელექტრონები მოთავსებული იქნებიან ამ ფენებში დონეების მიხედვით, ზოგიერთი ფენები შეესებულებიან აღმოჩნებებიან, ხოლო ზოგიერთები ცარიელი დარჩებიან. ეხლა ჩვენთვის ცხადია კავშირი ამ მოდელსა და IV თავის მოდელს შორის. მე-IV თავის მარტივი პოტენციალურ ყუთის ბსკერი შეესაბამება ერთ-ერთ დასაშვებთაგანი ფენის ბსკერს, სახელდობრ c მას, რომელიც დაკავებულია სავალენტო ელექტრონების მიერ. ლითიუმის შემთხვევაში K -დონეებისა და იმ ფართო ფენის შორის, რომელიც სავალენტო ელექტრონებით არის დაკავებული, დაახლოებით 60 ელექტრონ-ვოლტის ტოლი შუალედი. მეზობელ ატომებს შორის ასეთი პოტენციალურ ბარიერის არსებობისას, რომლის სიმაღლე დაახლოებით 60 ელექტრონ-ვოლტია, K -ელექტრონები უძრავი რჩებიან და შეიძლება ჩავთვალოთ, რომ ისინი ცალკეულ ატომებთან არიან შებმული, როგორც მაგ. Li_2 -ის შემთხვევაში. მართლაც, მთელი ჩვენი გამოკვლევას მთავარი შედეგი იმაში მდგომარეობს, რომ ყოველი კრისტალი დიდი მოლეკულის გარდა სხვა არაფერია. მე-VI თავში ხაზგასმული იყო, რომ ორ ატომიან მოლეკულაში სავალენტო ელექტრონები არ მიეკუთვნებიან ერთ რომელიმე გარკვეულ ატომს, რადგან ისინი ბრუნავენ ორივე ნაშთის სრულყოფილ იმავე გვარად, აქაც, განაწილების სურათები სავალენტო ელექტრონებისათვის არ არიან ლოკალიზებული ცალკეულ ატომთა მახლობლად, არამედ თანაბრად განფენილნი არიან მთელ

კრისტალში. მე-56 ნახ-ის e მრუდის მსგავსი მდგრადი ტალღა, არსებითად არ განსხვავდება დე-ბროილის მარტივი მდგარი ტალღები-საგან, რომლებითაც ჩვენ მე-IV თავში ავწერეთ ლითონის ელექტრონება. ორივე შემთხვევებში მათგან შეიძლება რთული ψ ფუნქციის შექმნა, რომელიც კრისტალში არსებულ j დენს გამოხატავს, როგორც მე-V თავის მე-8 პ-ში იყო ახსნილი.

3. ერთი შეხედვით მეტად გასაოცარია ის, რომ ეს შეხედულებანი გამოყენებულ უნდა იქმნან განმამხოლოებელ კრისტალების მიმართ ისევე, როგორც ლითონების მიმართ. სამართლიანობა ჩვენი დაშვებისა იმის შესახებ, რომ იზოლიატორში შეიძლება თავისუფალ ელექტრონთა დონების არსებობა, მტკიცდება ფოტო-გამტარებლობის შოვლენით. მრავალი კარგი იზოლიატორი სათანადო სიგრძის ტალღიანი სინათლით გაშუქებისას ელექტრონულ გამტარებლობას ამჟღავნებს, რაც იმაზე მიგვითითებს, რომ ელექტრონებს შეუძლიათ მოძრაობა მესერში.

ამოცანა იმაში მდგომარეობს, რომ აიხსნას თუ რატომ არიან ისინი კარგი იზოლიატორები სიბნელეში. კლასიკურ მექანიკაში ეს ადვილი გასაკეთებელი იყო, რადგან ყოველგვარი მოძრაობა ისეთ ატომშიგნითა არეებში, რომლებშიც $W < V$, შეუძლებელი იყო; მთელი ახსნა მდგომარეობდა იმის რწმუნებაში, რომ იზოლიატორში არ არიან თავისუფლად მოძრავი ელექტრონები. მაგრამ კვანტური მექანიკის თანახმად, იზოლიატორსა და ლითონს შორის უფრო მეტი მსგავსებაა, ვიდრე წინა დღეებში გუგულობდნენ.

ნორმალურ პირობებში კრისტალში ელექტრონების სიჩქარეები თანაბრად არიან განაწილებული ყოველი მიმართულებით. როდესაც ლითონს მიუყენებენ დაძაბულებას, მაშინ ზოგიერთი ელექტრონები აჩქარდებიან ველის მიმართულებით. ყოველი ელექტრონი, რომელმაც ამგვარად კინეტიური ენერგია შეიძინა, აიწევს ცოტათი უფრო მეტი ენერგიის მქონე დონეზე. განვიხილოთ ტუტე, ლითონის კრისტალი, რომელიც n ატომს შეიცავს. პაულის პრინციპის თანახმად სავალენტო ელექტრონების შემკველ n ფენში, შეიძლება n საწინააღმდეგოდ მიმართულ სპინებიანი წყვილის ჩატევა, — ე. ი. სულ $2n$ ელექტრონის. რადგან ყოველი ატომი მხოლოდ ერთ სავალენტო ელექტრონს შეიცავს, ამიტომ დონეთა ეს ფენა ზუსტად ნახევრად შევსებული იქნება. მდგომარეობა ნულ ტემპერატურაზე და ოთახის ტემპერატურაზე მე-37 ნახ-ზე გამოხატულის მსგავსია, რადგან ფენის სასრულო სიფართო განაწილებაზე გავლენას არ ახდენს. უშუალოდ დაამუშავება მრავალი თავისუფალი დონე, რომელზედაც შეუძლიათ გა-

კავებულ დონეების ზემოდ დახტომა იმ ელექტრონებს, რომელთაც მიძღვლეს აჩქარება. მაშასადამე ტუტე ლითონების კრისტალები კარგი გამტარები უნდა იყვნენყველა ტემპერატურებზე. მაგრამაუცილებელია შენიშვნა, რომ გარეშე ველით აჩქარდება და ელექტრულ დენში მონაწილეობს ელექტრონთა მხოლოდ უმნიშვნელო რიცხვი, სახელდობრ ისინი, რომელთაც სავალენტო ფენის უმაღლესი დონეები აქვთ დაქერილი. ენერგია, რომლის შეძენა შეუძლია ელექტრონს მიყენებული ველის შედეგად, მეტად მცირეა; ამასგარდა ჩვეულებრივ დაბალ ტემპერატურებზე ფენის ქვედა ნაწილებში მყოფ ელექტრონებს, თითქმის არა აქვთ თავისუფალი დონეები, რომელზედაც შეეძლებოდათ გადასვლა.

მაშასადამე, გამტარებლობის ელექტრონთა რიცხვი გაცილებით ნაკლებია სავალენტო ელექტრონების რიცხვზე.

ესლა ტუტე-მიწოვანი ლითონებზე გადასვლისას ჩვენ ვხედავთ, რომ რადგან ყოველ ატომს ორი სავალენტო ელექტრონი აქვს, ამიტომ ყოველ კრისტალში ჩვენ გვექნება ელექტრონთა საკმაო რიცხვი იმისთვის, რომ შეივსოს დონეთა „სავალენტო“ ფენა. ეს დაუყოვნებლივ მიგვითითებს იმაზე, რომ უნდა არსებობდნენ იზოლიატორის თვისებების მქონე კრისტალები. (ამ თვალსაზრისით უნდა ველოდეთ, რომ ტუტე-მიწოვანი ლითონები იზოლიატორები იქნებიან). ყველა ცნობილ იზოლიატორში ა) ელექტრონთა რიცხვი ზუსტად ისეთია, რომ შეივსოს დონეთა შესაძლო ფენების გარკვეული რიცხვი და ბ) ამ დაქერილ დონეების შემდეგი, უფრო მაღალი, თავისუფალი ფენიდან გამომყოფი აკრძალული ზონა ენერჯიისა, უნიშვნელოვანი სიგანისაა. თუმცა ელექტრონების განაწილებათა სურათები მთელ კრისტალს ავსებენ, ძაგრაჲ მაინც მათი დახმარებით გამტარებლობის მიღება შეუძლებელია.

მიყენებული ველი არ ააჩქარებს ელექტრონებს, რადგან არ არის დონეები ენერჯიის ცოტათი მეტი მნიშვნელობებით, რომლებზედაც გადახტომა შეეძლებოდათ ელექტრონებს. ამგვარად, იზოლიატორის დამახასიათებელი ის არის, რომ კრისტალში სავალენტო ელექტრონები ჩაკეტილ ჯგუფს ჰქმნიან.

ტუტე-მიწოვანი ელემენტთა ლითონური თვისებები დამოკიდებული არიან დონეთა სისტემის ჯერ კიდევ განუხილველ თვისებისაგან. ჩვენ დავინახეთ, რომ ატომთა ერთგანზომილებიან რიგში ყოველთვის არსებობენ აკრძალული ზონები, რომლებიც გამოჰყოფენ აკრძალულ არეებს და ამასთან ერთად აქ ზონების მდებარეობა და სიფართოე დამოკიდებულია ატომთა განლაგებისაგან. სამგანზომილებიან

კრისტალში მანძილები მესერის სიბრტყეებს შორის სხვადასხვა გვარია სხვადასხვა მიმართულებით. მაგალითად, კუბურ კრისტალში (100) სიბრტყეები ერთმანეთისაგან უფრო შორს მდებარეობენ, ვიდრე (110) ან (111) სიბრტყეები, — კრისტალის ყოველ სრულ ფენას შეესაბამება თავის თავში დონეებს, რომლებიც გამოხატავენ მოძრაობას ყოველი იმპართულებით. ამ დროს შეიძლება მოხდეს, რომ დონეთა ერთი ფენის ზედა ნაწილი გადაეფინოს შემდეგი, უფრო მაღალი ფენის ქვედა ნაწილს, ე. ი. რომ არ არსებობს საშუალო ზონა, რომელშიც აკრძალულია მოძრაობის ყველა მიმართულებანი. ენერგიის მნიშვნელობათა იმ არეში, რომელსაც ფენები გადაჰფარავენ. ელექტრონები განაწილდებიან ნაწილობრივ ერთი სახის დონეებში და ნაწილობრივ მეორე დონეებში, ხოლო მათ ზემოთ იქნება თავისუფალ დონეთა სიმრავლე. ასეთი კრისტალი ლითონური იქნება იზოლიატორში დასაშვები ფენები საესებით განცალკეული უნდა იყვნენ.

ელექტრონთა მოძრაობა კრისტალში დაუბრკოლებლად მხოლოდ იმ შემთხვევაში მოხდება, თუ მესერი სრულია. ნებისმიერ ტემპერატურაზე აბსოლუტური ნულის გამოკლებით, მე-5 ნახ-ზე გამოხატული ენერგეტიული მრუდი უკვე აღარ იქნება საესებით წესიერი; არამედ სახეს შეიცვლის მესერის სითბურ რხევათა შედეგათ. ამ დროს ლითონში შიმიდინარე ელექტრონული დენში მონაწილე ელექტრონების მოძრაობა ყოველთვის შეფერხდება და ამიტომ აუცილებელია ელექტრონებს მიეწეროს ტემპერატურისაგან დამოკიდებული რაიმე საშუალო თავისუფალი განარბენი. ამჩქარებელ ველისაგან მიღებული ენერგია მესერს მიეცემა და სითბოს სახით გამოიყოფა. ამგვარად წარმოშობილი ლითონთა ელექტრული წინააღმდეგობა იცირება დაბალ ტემპერატურებზე და სწრაფად იზრდება ტემპერატურის ამაღლებისას. ლითონში შენაერთთა არსებობა იწვევს წინააღმდეგობის გაზრდას, იმიტომ რომ ამათი ირღვევა წესიერი კერძოლოდობა ენერგეტულ ძრუდის. შენაერთთა არსებობა იზოლიატორში როგორც შემდეგ ენახავთ, საწინააღმდეგო გავლენას ახდენს.

მიუბრუნდებით რა ეხლა კრისტალთა ოპტიურ თვისებებს, ჰვენ ვხედავთ, რომ დონეთა წარმოდგენილი სქემა ხსნის, თუ რატომ არიან ჩვეულებრივ იზოლიატორები გამჭვირვალე. გამჭვირვალობა და იზოლირების თვისებები წარმოიშვებიან ერთი და იმავე მიზეზის გამო, რაც იმაში მდგომარეობს, რომ ელექტრონთა გადასვლა შესაძლოა მხოლოდ დონეთა ერთი ფენიდან მეორეში. წმინდა კრისტალი ვერ

შთანთქავს ტალღებს, რომელთათვისაც λ ენერჯის მნიშვნელობა ზონის სიგანეზე ნაკლებია. გამჭვირვალე კრისტალები ყოველთვის ამხელენ დამახასიათებელ შთანთქმას γ ტალღის იისფერ არეში, როგორც ეს მოსალოდნეობდა იყო. თუ ვიცით იმ ტალღის სიგრძე, რომლის დროსაც ხდება ეს შთანთქმა, შეიძლება განვსაზღვროთ ზონის სიგანე დასაშვებ დონეთა შორის.

იმ კრისტალისთვის, რომელიც ხილული არეს ყოველი სიგრძის ტალღებისთვის არის გამჭვირვალე, ეს შუალედი უნდა უდრიდეს ყოველ შექთხვევაში 3 ელექტრონ-ვოლტს. იმ კრისტალთათვის, რომელნიც შუმანის ულტრა იისფერ არესადმი არიან გამჭვირვალენი, შუალედი უნდა უდრიდეს, ყოველ შემთხვევაში, 5 ან 6 ელექტრონ-ვოლტს.

4. შენაერთის ატომები ასეთ კრისტალში მნიშვნელოვან როლს თამაშობენ, თუნდაც მეტად მცირე რაოდენობისანი იყვნენ, რადგან არ არის არავითარი მიზეზი, რომლის გამოც ასეთი ატომების ელექტრონული დონეები უნდა მდებარეობდნენ კრისტალის კუთვნილ დასაშვებ ზონათა შიგნით; ჩვეულებრივ ისინი მდებარეობენ ცარიელ ენერგეტიულ ზონაში მესერის ზონებს შორის. მაშასადამე, მათ შეუძლიანთ შთანთქმან არა იმ სიგრძის ტალღები, რომლებიც დამახასიათებელი არიან მესერისთვის, რის გამოც კრისტალი მიიღებს შთანთქმის სუსტ სპექტრს. განვიხილოთ განაწილების სურათი შენაერთის დონისთვის, მაგ. AB დონისთვის 57 ნახ-ზე, რომელიც (დონე), თუ თვითონ მას არ ჩავთვლით ცარელ ზონაში იმყოფება; აბსოლტუდა მხოლოდ შენაერთის ატომის შიგნით იქნება დიდი. მაშასადამე, დონე ლოკალიზებულია, და ელექტრონს არ შეუძლია მოძრაობა მესერაში. მაგრამ შენაერთთა არსებობა ძლიერად მოქმედებს კრისტალის მაიზოლირებელ თვისებების შემცირებაზე.

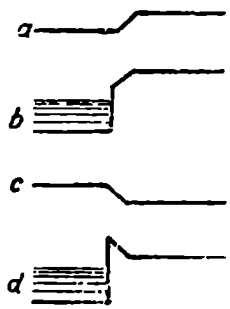
38 ნახ. გვიჩვენებს, თუ როგორ აღმოჩნდება ლითონში ელექტრონების გარკვეული რიცხვი, რომელიმე ტემპერატურაზე, უფრო მაღალ დონეებზე. იმავე გვარად იზოლიატორში სითბურ რხევათა მოქმედება იმაში მდგომარეობას, რომ ზოგი ელექტრონი დარჩება დონეთა თავისუფალ ფენაში (თუ თვითონ ელექტრონებს არ მივათვლით) აკრძალულ ზონის ზემოდ. ეს ელექტრონები აჩქარდებიან მიყენებულ ნებისმიერ დაძაბულებით, მაგრამ მათი მოძრაობა არ მოგვცემს რამოდენიმედ მნიშვნელოვან დენს ოთახის ტემპერატურაზე, რადგან მათი რიცხვი მეტად მცირეა; ბოლცმანის კანონის დახმარებით ჩატარებული გამოთვლები, გვაჩვენებენ, რომ თუ აკრძალული არეს სიფართე 2 ელექტრონ-ვოლტს უდრის, მაშინ მცირე ალბათიანია, რომ 1 სმ^3 -ში თუნდაც ერთი ასეთი გაქტარებ-

ლობის ელექტრონი არსებობდეს. ამას შეიძლება დაუპირისპიროთ შენაერთის ატომის სავალენტო ელექტრონის უფა-ქცევა, რომელსაც სავალენტო დონე შემთხვევით სწორედ ისე უივე თითქმის ცარიელ დონის ქვეშ აქვს უშუალოდ, როგორც, მაგ. AB, 57 ნახ-ზე. ბოლცმანის კანონიდან გამომდინარეობს, რომ ამ თითქმის ცარიელ ფენის გამტარ დონეებზე ელექტრონის გადასვლის ალბათობა შეიძლება მილიონებჯერ მეტი იყოს. მაშასადამე, ოთახის ტემპერატურაზედაც კი მცირე რიცხვი შენაერთის ასეთ ატომებისა მოგვეცემენ საკმაო გამტარებლობის ელექტრონებს იმისთვის, რომ მიღებულ იქნას გაზომვისთვის შესამჩნევი დენი. რაც მაალაია ტემპერატურა, მით უფრო მეტი იქნება ისეთი ელექტრონების რიცხვი, რომლებიც გამტარ დონეებზე იქნებიან. და, მართლაც კარგად ცნობილია, რომ იზოლიატორია წინააღმდეგობა მცირდება ტემპერატურის ამაღლებისას, ლითონების თვისებათა საწინააღმდეგოდ. ესლა ფიქრობენ, რომ ყველა მყარი სხეულები, საშუალონი თავისი თვისებებით გამტარებსა და იზოლიატორებს შორის და ცნობილი ნახევრად გამტარების სახელით, შეგვეძლო კარგ იზოლიატორებად გადაგვექცია, თუ კი შესაძლო იქნებოდა მათი მიღება წმინდა სახით. ჩვეულებრივ მათი გამტარებლობის ელექტრონები, მოტანილი არიან შენაერთების ატომების მიერ, რომელთა სავალენტო დონეები მდებარეობენ გამტარებლობის ცარიელ დონეთა ზემოდ, მათზე ან უშუალოდ მათ ქვემოდ. და, მართლაც, ცნობილია რომ ასეთი ნივთიერებათა წინააღმდეგობა მით უფრო მეტია, რაც უფრო წმინდაა ნიჭეში. კიდევ ერთი საკითხი რჩება, როგორც დონეების გამტარ ფენას შეეხება და რომელზედაც პასუხის გაცემა აუცილებელია.

როდესაც განმამზოლოებელი კრისტალი მოთავსებულია ლითონის ორ ნაჭერს შორის, რატომ არ შეიძლება, რომ თავისუფალი ელექტრონები გადადიოდნენ იზოლიატორის გავლით ერთი ლითონიდან მეორეში? ამ კითხვას, რომ სწორად უპასუხოთ, აუცილებელია განვიხილოთ თუ რა ხდება, როდესაც განმამზოლოებელი კრისტალი ეხება ლითონის კრისტალს რაიმე გარე დამბულების არსებობისას. მდგომარეობა 44 ნახ-ზე გამოხატულის მსგავსია. ლითონიდან ელექტრონები ვერ გადავლენ ვერც იზოლიატორის შეესებულ ფენაში ვერც აკრძალულ ენერგეტიულ ზონაში. მაშ რჩებიან ლითონის მხოლოდ ის დონეები, რომლებიც თანხვედრიან იზოლიატორის თითქმის ცარიელ გამტარ დონეებს. ორივე კრისტალის შეხების დროს ამ დონეებზე მყოფი ელექტრონთა რიცხვი შეიძლება მეტი ან ნაკლები აღწონდეს თითქმის ცარიელ ფენაში მყოფ ელექტრონების

მცირე რიცხვზე. თუ იგი ნაკლებია, მაშინ ელექტრონები გადადიან ლითონში, მუხტავენ მას უარყოფითად და მალე სწევენ ლითონის დონეებს მანამდე, ვიდრე წინასწორება არ იქნება მიღწეული. თუ იგი მეტია, მაშინ ელექტრონთა მცირე რიცხვი გადადის კრისტალში, მის ზედაპირს უარყოფითად მუხტავს და ამ დროს აქვეითებს ლითონის დონეებს მანამდე. ვიდრე ელექტრონთა რიცხვი ლითონში გამტარი ფენის პირდაპირ ისეთივე მცირე არ გახდება, როგორც თვით ფენაშია. მას შემდეგ, რაც მიყენებულია დამატება, ან ელექტრონებს შეუძლიათ მოძრაობის დაწყება იზოლიატორში, მაგრამ მათი რიცხვი არ სკარბობს იზოლიატორის გამტარებელ ელექტრონთა პირვანდელ რიცხვს. ლითონის გამტარებლობის ელექტრონთა უმრავლესობა იმყოფება იზოლიატორის ცარიელ გამტარ დონეთა ბევრად ქვემოლ და არ არსებობს ისეთი მექანიზმი, რომელსაც მათი აწევა შეეძლოს.

5. უბრუნდებით რა ატომთა რიგს, გამოხატულს 57 ნახ-ზე განვიხილოთ პოტენციალური ენერგია უკანასკნელი ატომისა მარჯვნივ. თუ ატომს უბიძგებთ მარცხნივ, მაშინ ის განიცდის ინტენსიურ განხილვას. თუ უბიძგებთ მარჯვნივ, მაშინ განიცდის მიზიდვას, რომელიც კრებულობს მანძილს ზრდასთან ერთად. ენერგეტიული მრუდი ამ ატომისთვის 49 ნახ-ის მრუდის მსგავსია. კრისტალის ზედაპირიდან ატომის გამოსაყოფად აუცილებელი მუშაობა, არის სუბლიმაციის ენერგია, მოლეკულის დისოციაციის ენერგიის შესაბამისი.



ნახ. 58.

ლითონის კრისტალის შემთხვევაში შეიძლება ამის ნაცვლად დადებითი ნაშთი განვაცალკეოთ, დავტოვებთ რა N ელექტრონს და $N-1$ ნაშთი; ამ დროს ჩვენ მივიღებთ სხვა ენერგეტიულ მრუდს, 49 ნახ-ის მრუდის მსგავსს. ამ ენერგეტიულ მრუდებისთვის, ისევე როგორც მოლეკულებისთვის, არსებობს მრხევადი დონეთა სისტემა.

განვავარძობთ რა რიგის მარჯვენა ბოლოში უკანასკნელ ატომის განხილვას, ვიკითხოთ, რა შეიცვლებოდა, ეს ატომი რომ სხვა ელემენტს ეკუთვნოდეს, ე. ი. ლითონის ზედაპირზე, რომ აღსორბირებული იყოს გარეშე ატომი. თუ პირველადი კრისტალი მართლაც ზემოლექულაა, მაშინ საბოლოო მდგომარეობა შეესაბამება უბრალოდ რომელიც სხვა ატომის შემცველ ზემოლექულას. ელექტრონთათვის ენერგეტიულ მრუდს ექნება წინანდებურად

57 ნახ-ზე გამოხატული სახე. თუ არ ჩავთვლით იმას, რომ: ა) სა-
შუალო მანძილი ადსორბირებულისა და მეზობელ ატომამდე შეიძ-
ლება სხვა იყოს და ბ) შინაგანი ველი მისი ატომურ ნაშთის მიერ
შექანილი, შეიძლება იყოს აგრეთვე სხვა. როდესაც ჩვენ განვსაზღვ-
რავთ ამ მრუდების შესაბამ განაწილებათა ელექტრონულ სურათე-
ბის სახეს, მაშინ ფუნქციის ამპლიტუდა რიგის ამ ბოლოზე შეიძლე-
ბა წინანდელზე მეტა ილქოჩნდეს, ეხერგის ზოგიერთ მნიშვნელობა-
თათვის და წინანდელზე ნაკლები, ეხერგის სხვა მნიშვნელობა-
თათვის.

თუ ჩვენ გვაქვს ლითონის ზედაპირზე ადსორბირებულ გარეშე
ატომების ერთატომიანი შრე, მაშინ ადსორბირებულ შრეში ელექ-
ტრონული ღრუბლის სრული სიმკვრივე შეიძლება ნორმალურზე მე-
ტი იყოს ან ნაკლები. თუ იგი ნაკლებია, მაშინ ზედაპირზე წარ-
მოიშვება ორმაგი ელექტრონული შრე. გარედან დადებითი, ხოლო
თუ იგი მეტია, მაშინ — ორმაგი შრე, გარედან უარყოფითი. როდე-
საც ულექტრო-მუხტი გადიტანება ორჯაგ შრეში, მაშინ სრულდება
მუშაობა ან განთავისუფლება ენერგია — ე. ი. ენერგეტიულ მრუდ-
ზე ხდება დამატებითი ნახტომი ზემოდ ან ქვემოთ, როგორც ამას
58 ნახ-ის *a* და *c* მრუდეები გვიჩვენებენ. ადსორბირებულ შრით
დაფარულ ლითონის ზედაპირზე მყოფ ელექტრონისათვის. *a* და *c*
მრუდეები შეიძლება შეერთდნენ 58, *d* სურ-ზე გამოხატულ ენერგე-
ტიულ მრუდით, თუ შრე დადებითია გარედან. ამავე გვარად, თუ
შრე უარყოფითია გარედან, მაშინ *b* მრუდს მივიღებთ; ამ დროს,
გამოსვლის მუშაობა ელექტრონებისათვის მნიშვნელოვნად იზრდება.

ცდით მიღებულია, რომ ქანზადის ადსორბცია ვოლფრამის ზე-
დაპირზე გამოსვლის მუშაობას ზრდის 4,4-დაა 8-ზე მეტ ელექტ-
რონ-ვოლტამდე. თუ ორმაგი შრე გარე მხრივ დადებითია, მაშინ
გამოსვლის მუშაობა მცირდება. *d* მრუდზე არის ვიწრო პოტენცია-
ლური ბარიერი, რომელშიც ψ ტალღას შეუძლია „გაჟონვა“. სწო-
რედ ამით მიიღწევა ის, რომ ოქსიდირებულ ძაფებიანი სავარვა-
რო ნათურები იძლევიან დიდ დენს საკმაოდ დაბალ ტემპერატუ-
რებზე.

კ მ რ ტ შ რ ბ ა ც ი ა თ ა თ ე ო რ ი ა

1. განვიხილოთ კიდევ ერთხელ პოტენციალურ ყუთში მოძრავი დამუხტული ნაწილაკი, რომლისთვისაც ცნობილია ენერჯის შესაძლო მნიშვნელობანი W_1, W_2, W_3, \dots , და ვიგულისხმობთ, რომ ზენ მოვახდინეთ ელექტროსტატიკურ ველის რაიმე მუდმივი შიცვლა, იმ არეში, რომელიც პოტენციალური ყუთის მახლობლად ან თვით მასში მდებარეობს. როგორ შეიცვლება ენერჯის შესაძლო მნიშვნელობანი? ამ საკითხში გასარკვევად, განვიხილოთ შემდეგი ორი მარტივი შემთხვევა:

1. ვიგულისხმობთ, რომ პოტენციალური ყუთის შემცველი მთელი პრუდი, აწეულია ან დაწეული მთლიანად რაიმე v სიდიდით ენერჯის ათულის საწყისის მიმართ. W -ს ყველა შესაძლო მნიშვნელობანი ამ დროს აგრეთვე გაიზრდებიან ან შემცირდებიან იმავე v სიდიდით, რადგან დასაშვები ψ განაწილების სურათები მხოლოდ $(W - V)$ სხვაობაზე არიან დამოკიდებული.

2) ავიღოთ მეორე კიდური შემთხვევა და ვიგულისხმობთ, რომ ენერგეტიულ მრუდის ცვლილება იმ არეში მოხდა, რომლის ყოველ წერტილში ერთ ან უფრო მეტი რიცხვის ψ ფუნქციის მნიშვნელობა ნულის ტოლია. ამ ψ ფუნქციათა შესაბამისი ენერჯის შესაძლო მნიშვნელობანი უცვლელი დარჩებიან. მკაცრად, რომ ესთქვათ არ შეიძლება არც ერთი ამ შემთხვევათაგანის ზუსტად განხორციელება. რადგან ψ განაწილების ყოველ სურათს მთელი სივრცე ოკირავს. მაგრამ შეიძლება მტკიცება, რომელიც იმაზედვე დაიყვანება, რომ თუ V ისეთ არეში იცვლება, სადაც რომელიმე ψ ფუნქციის მნიშვნელობანი მცირენი არიან, მაშინ შეიძლება ენერჯის შესაძლო მნიშვნელობათა ცვლილების უკუღებელყოფა; იმ ენერჯის, რომელსაც მიეკუთვნება განაწილების აღებული სურათი. ამგვარად, მივხვდებით დასკვნამდე, რომელსაც ჩამოვაყალიბებთ, როგორც პირველ ცხადყოფილ არინ-

ციხს (ა), რომ შემდეგში მხედველობაში უნდა მივიღოთ მხოლოდ ის არეები, სადაც ψ არ არის ძალიან მცირე. უპრუნდებით რა პირველ ამოცანას, (1) შემთხვევაში შეიძლება ითქვას, რომ თუ თანაბარ ν ცვლილებას ემორჩილება განაწილების მთელი სურათი მეტად მცირე ნაწილის გამოკლებით, მაშინ ენერჯიის შესაძლო მნიშვნელობის ცვლილება თითქმის ზუსტად უდრის ν -ს.

ზემოდ მოყვანილი დაშვება, რომელიც იმაში მდგომარეობს, რომ ν ცვლილება ერთნაირი უნდა იყოს რაიმე განსაზღვრული აოეს მთელ სივრცეზე, რასაკვირველია, ზედმიწევნით ხელოვნურია. ამ დაშვებით სწორედ ისევე შეგვიძლია ვისარგებლოთ, პრინციპთა რლიუსტრაციისათვის, როგორც ხშირად ვსარგებლობდით სელოენური ფორმის პოტენციალური ყუთით, მაგრამ სინამდვილეში ცვლილება ყოველთვის სხვადასხვანაირი იქნება წერტილიდან წერტილისკენ. პირვანდელ პოტენციალურ ენერჯიას $V(x, y, z)$ ემატება $\nu(x, y, z)$, სიდიდე და მაშ შედეგად იქნება $(V + \nu)$ პოტენციალური ენერჯია. პერტურბაციის შედეგად ენერჯეტიული მრუდი შეიძლება ზოგ ადგილებში აიწიოს, ხოლო ზოგან დაიწიოს. მაგრამ ზოგჯერ შეიძლება წერტილიდან წერტილისაკენ ცვლილებისას პერტურბაციას ჰქონდეს ყველგან ერთგვარი ნიშანი. ყოველ შემთხვევაში შეიძლება ითქვას, რომ თუ არეებში, რომლებიც (ა)-ს თანახმად მთავარ როლს თამაშობენ, V -ს მნიშვნელობათა ცვლილება ყველგან დადებითია, მაშინ ნებისმიერ W_n დონის გადაწევა დადებითი იქნება, ხოლო თუ მთავარ არეებში ν ყველგან უარყოფითია, მაშინ ნებისმიერ W_n დონის გადაწევა უარყოფითი იქნება. ეს ეთანხმება იმას რაც ჩვენ უკვე ვიცით ენერჯიის შესაძლო მნიშვნელობათა შესახებ. მაგალითად, ცნობილია, რომ პოტენციალური ყუთის შეზავიწროებელი ყოველი ცვლილება ძალიან სწევს დოზებს, ხოლო ყუთის გამათართობელი ყოველი ცვლილება ქვემოდ სწევს მათ.

გავარკვიეთ-რა ამგვარად ძირითადი პრინციპები, გადავიდეთ ნამდვილი მაგალითის განხილვაზე. ვიგულისხმობთ, რომ V ცვლილება გამოწვეულია თავისუფალი პროტონის მიახლოებით, რომელიც დასაწყისში არ არსებობდა.

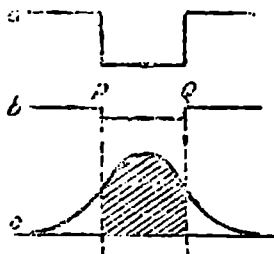
პერტურბაცია $\left(-\frac{e^2}{r}\right)$ ყველგან უარყოფითია. იგი გავრცელებულია

მთელ სივრცეზე. მაგრამ უმნიშვნელოდ მცირეა გარკვეულ სფერულ მოცულობის გარეთ. ჩვენ შეგვიძლია ჩამოვაყალიბოთ, როგორც თავისთავად ცხადი პრინციპი (ბ), რომ შესაძლო ენერჯეტიულ დონეთა გადაწევის განსაზღვრისას მხედველობაში უნდა მივიღოთ მხოლოდ ის არეები, სადაც ν ძალიან მცირე არ არის. ამ წარმოდგენის (ა)

პრინციპთან შეფარდებით, ჩვენ მივდივართ ე. წ. „დამთხვევის“ პრინციპთან, რომელიც, როგორც შემდეგ ირკვევა, მეტად მნიშვნელოვან როლს თამაშობს კვანტურ მექანიკის მრავალ საკითხში. ყოველი არე, სადაც ψ და v შესამჩნევად „გადაიფარებიან“, თავს იჩენენ შესაბამ H' დონეთა გადაწყვეაში. $dx dy dz$ მოცულობის ელემენტის მოქმედება დამოკიდებულია ამ მოცულობაში v და ნორმირებულ ფუნქციის ψ -ის მნიშვნელობებისაგან. ენერჯის შესაძლო დონის გადაწყვეა შეიძლება მივიღოთ მთელ სივრცეში ინტეგრაციით. თუ H'_n - ახალი მნიშვნელობაა H'_n -ის. მაშინ გადაადგილება პირველი მიახლოებით ტოლია.

$$H'_n - H_n = \int v |\psi_n|^2 dv = \int \psi_n v \psi_n^* dv. \quad (58)$$

(58) ფორმულის გამოყვანა მოცემულია დამატებაში, 7 შენიშვნაში. შევნიშნავთ, რომ სრულ თანაბარი დამთხვევის შემთხვევაში, (11)-ის თანახმად, ამას მივყავართ ზემოდ განხილულ (1) შემთხვევის შედეგთან.



ნახ. 59.

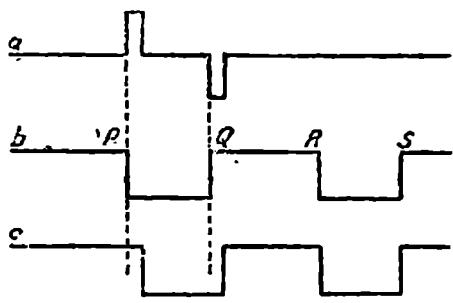
არასრულ დამთხვევის მარტივი მაგალითი მოყვანილია 59 ნახ-ზე. a მრუდი წარმოადგენს პირვანდელ ენერჯეტიულ მრუდს, ხოლო c მრუდი არის ყუთის ქვედა დონის შესაბამისი განაწილების სურათი. ვთქვათ ეხლა პოტენციალური ენერჯია იცვლებოდეს b მრუდის დამთხვევის შედეგად; ცვლილება

PQ არეს გარდა ყველგან ნულის ტოლია, ხოლო აქ v -ს უდრის; ეფექტი მდგომარეობს პოტენციალური ყუთის ჩაღრმავებაში v სიღრმით. ყველა დონეები დაიწვეიან, მაგრამ რადგან ცვლილება ყოველ განაწილების სურათის მარტო ცენტრალურ ნაწილს დაედება, ამიტომ ყოველი დონის დაწყება შესაბამ ფართობით v -ზე ნაკლები იქნება, თუ (58) ფორმულა სწორია. რადგან შეცვლილ პოტენციალურ ყუთს უფრო მაღალი კედლები აქვს, ამიტომ იმ მეთოდს, რომლითაც ჩვენ 57 გვერდზე 23 ნახ. განვიხილეთ, იმავე დასკვნასთან მივყავართ.

(58) ფორმულის აზრი გასაგები იქნება, თუ მოვიგონებთ როგორ განიხილავს კვანტური მექანიკა ატომთა შორის ძალებს. რომ ვიპოვოთ ატომებს შორის მიზიდვის ან განზიდვის ძალები, ვიგულისხმობთ, რომ მანძილები მათ შორის შეიცვალა და ვიპოვოთ როგორ

გაიზრდება ან შემცირდება მათი ენერგია. გასაგებია, რომ ამისათვის შეიძლება (58) განტოლებით სარგებლობა. საილიუსტრაციოდ შეიძლება გამოვიყენოთ იგი გამარტივებულ H_2^+ იონზე, რომელიც სწორკუთხოვან ყუთების წყვილით არის გამოხატული. რადგან ამ მარტივ შემთხვევისთვის ჩვენ უკვე ვიცით შედეგი განაწილებათა სურათების უშუალო განხილვიდან. ჩვენ შევძლებთ (58) ფორმულის სამართლიანობის შემოწმებას. ავიღებთ რა პირველსაწყის ენერგეტიულ მრუდის სახით 60 ნახ-ის მრგდს, დავიწყით პოტენციალურ ყუთების მიახლოება.

პოტენციალურ ენერგიის ცვლილებას, გასაგებია, რომ a მრუდის სახე აქვს. a და b მრუდეების ორდინატების შეკრებით, ჩვენ საბოლოოდ უნდა „შევაესოთ“ პოტ. ყუთის ნაწილი P -სთან და „მოექრათ“. ტოლი ნაწილი QR პოტენციალურ ბარიერიდან. ამ დროს PQ ყუ-



ნახ. 60.

თი გადაადგილდება მარჯვნივ—ე. ი. მიუახლოვდება H^+ ყუთს, როგორც c მრუდზეა ნაჩვენები. a მრუდი გამოხატავს $v \cdot X$ ფუნქციას რომელიც ყველგან ნულის ტოლია, P და Q -ს მახლობელ წერტილების გარდა. (58)-ს ინტეგრაცია უნდა შესრულდეს მხოლოდ ამ ორ პატარა არეში; ამიტომ ჩვენ ψ მრუდის ის ნაწილი გვაინტერესებს, რომელიც P და Q -ს მახლობლად იმყოფება.

v ფუნქციის უარყოფითი მნიშვნელობა (μ -ს მახლობლად, რასაკვირველია, უდრის მის დადებით მნიშვნელობას P -ს მახლობლად და როგორც ერთი, ისე მეორე უდრის პოტენციალურ ყუთის სიღრმეს. ამიტომ ინტეგრალი (58)-ში ნულს ეტოლება, თუ ψ^2 -ს აქვს ზუსტად ერთი და იგივე მნიშვნელობა (μ და P -ს მახლობლად. მაგრამ ჩვენ საკმაოდ ხაზი ვაუსვით, 26 და 50 ნახ-ზე დაყრდნობით, რომ ყოველ ანტისიმეტრიულ სურათისთვის ψ -ს მნიშვნელობა რამოდენიმედ ნაკლებია ვიდრე P -ში, ხოლო ყოველ სიმეტრიულ სურათისთვის რამოდენიმედ ნაკლებია P -ში, ვიდრე Q -ში. აქედან უშუალოდ გამომდინარეობს დონეთა განცალგება რადგან (58) ინტეგრული, დადებითია—რა ყოველ ანტისიმეტრიულ განაწილების სურათისთვის, ასწევს შესაძლო დონეს და უარყოფითია—რა ყოველი სიმეტრიულ განაწილების სურათისთვის დაადაბლებს შესაძლო დონეს. თუ რომელიმე ψ ფუნქციის მნიშვნე-

ლობებს P და Q წერტილებში $\psi(P)$ და $\psi(Q)$ -თი ავლნიშნავთ, მაშინ ყუთებს შორის აანძილის dx -ით შემცირებისას

$$\frac{dW}{dx} = \{|\psi(P)|^2 - |\psi(Q)|^2\}.$$

ადვილი შესაძოწმებელია, რომ ამ ტოლობის მარჯვენა მხარეს აქვს ძალის განსომილება, — ე. ი. მასისა, გაპრავლებული აჩქარებისაზე. ეს მაგალითი რამოდენიმედ წარმოდგენას იძლევა იმ გამოთვლაზე, რომელიც აუცილებლად უნდა შესრულდეს 3-განსომილებიან შემთხვევაში, რომ ამ მეთოდის დახმარებით მივიღოთ H_2^+ იონისთვის, 51 ნახაზის პუნქტიროვან მარჯვნივ ფორმით თანხედენილი შრული.

2. ნეიტრალური H_2 მოლეკულის გამოთვლის მეთოდის ილიუსტრირება შემდეგნაირად შეიძლება: 52 ნახ-ის ენერგეტიული ფართეული ამდროს, გასაგებია, უნდა შეიცვალოს, ψ ფართეულის ისეთ ნაირ დადებით, რომ არხები ცოტათი დაუახლოვდნენ ერთმანეთს. (58) ინტეგრალი უნდა ავიღოთ xy სიბრტყის იმ ნაწილში, რომელიც არსებით როლს თამაშობს. ამ დროს ჩვენ აუცილებლად უნდა ვიცოდეთ მიახლოებითი სახე ψ ელექტრონულ ფართეულის. რომელიც (58)-ში უნდა ჩავსვათ. (50) ნახ-ის საწინააღმდეგოდ, ჩვენ რასაკვირველია, არ შეგვიძლია მიახლოებითი განაწილების სურათების ძილება მოლეკულისათვის ყოველ ატომში ცალკეულ ელექტრონების განაწილების სურათების შეკრებით განცალკეულ ატომთა განაწილების ელექტრონულ სურათების ცოდნისას, აუცილებელია მათი შეერთების სწორი მეთოდის პოვნა. ჩვენ ვნახეთ, რომ ψ ფართეულზე, რომელიც 52 ნახ-ს შესაბამება, ψ მნიშვნელობა ყიელგან მცოიე უნდა იყოს, E და F პოტენციალურ ყუთების გარდა. ვთქვათ, ისევე რადგორც VI თავში, ψ_A იყოს PQ ყუთის ყუთენილი განაწილების სურათი, ხოლო ψ_B — RS ყუთის კუთენილი განაწილების სურათი; ამასთან ერთად ყუთები იმყოფებიან ერთმანეთისაგან გარკვეულ QR მანძილზე. გამოვთვალოთ ეხლა $\psi_A(x)\psi_B(y)$ ნამრავლი. ამ ნამრავლს აქვს გარკვეული მნიშვნელობა xy სიბრტყის ყოველ წერტილში; მისი მნიშვნელობა დიდია მხოლოდ E არეში და მცირდება მაჩვენებლიანი კანონით ყუთის გარეთ ერთერთი მამრავლის ან ორივესი ერთად მაჩვენებლიანი შემცირების გამო. სწორედ ასევე ცხადია, რომ $\psi_B(x)\psi_A(y)$ ნამრავლი დიდია მხოლოდ F არეში და მცირეა

ყველა, მის გარედ მდებარე, წერტილში. ავიღოთ ეხლა ψ_1 ფართეული შემდეგი ტიპის:

$$\psi_1 = \psi_A(x)\psi_B(y) + \psi_B(x)\psi_A(y). \quad (59)$$

ამ ფართეულს გუმბათისებური ფორმა ექნება F და F ყუთებში, დაცემა რა მცირე მნიშვნელობამდე მთელ დანარჩენ სივრცეში. სწორედ ასევე

$$\psi_2 = \psi_A(x)\psi_B(y) - \psi_B(x)\psi_A(y) \quad (60)$$

ტიპის ფართეულს E ყუთში გუმბათისებური ფორმა ექნება, ხოლო F -ში ისეთი ფინჯანის ფორმა, რომელიც ზუსტად გუმბათის შებრუნებას წარმოადგენს.

სწორედ ეს არის თვისება სიმეტრიულ და ანტისიმეტრიულ განაწილ. სურათებისა. რომლებიც უღრმეს ენერგ. დონეს მიეკუთვნებიან 52 ნახ-ზე. სინამდვილეში (59) და (60) წარმოადგენენ პირველ ნაბიჯს ცალკეულ ატომთა ელექტრ. განაწილების სურათების შეერთების გზაზე, როცა ატომები ერთმანეთისგან შორს იმყოფებიან. რადგან ჩვენ საესებით უგულებელყოფდით დიაგონალურ მალლობას არსებობას. ენერგეტიულ ფართეულზე, ამიტომ პირველ შეხედვით, (59) და (60)-ის თანხედენა ნამდვილ განაწილების სურათებთან, რომლებიც მალლობის გათვალისწინების სწორ შემთხვევაში არიან მიღებული, რამოდენიმედ გასაოცარია. მაგრამ ეს იმ მდგომარეობით არის გამოწვეული, რომ როცა ატომები ერთმანეთისაგან შორს არიან მაშინ ψ სიდიდე მეტად მცირეა დიაგონალის მახლობლად და უახედნს დამთხვევის პრინციპის ილიუსტრაციას, რომლის თანახმად პოტენციალურ ენერჯიის ცელილებანი უმნიშვნელონი არიან, თუ ისინი იმ არეებში ხდებიან, სადაც ψ მცირეა.

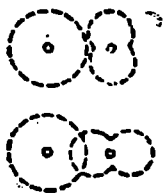
წინა განხილვა ცხადყოფს იმ მეთოდს, რომლითაც სარგებლობა აუცილებელია ეხლანდელ ამოცანაში ორი ატომის შესახებ, რომელიც ის განსხვავებაა რომ აქ ექვსი კოორდინატაა:

$$x_1, y_1, z_1, x_2, y_2, z_2$$

ჩვენ ვიცით, რა უნდა გვესმოდეს აუცილებლად ψ_A და ψ_B -ს ქვეშ ატომის შემთხვევაში, რომელთა ძირითადი მდგომარეობანიც ε -მდგომარეობებია, თუ ჩვენ ავირჩევთ, რაიმე გარკვეულ მანძილს გულათა შორის. მაგრამ ε -მდგომარეობა ძირითადი მდგომარეობაა ელემენტთა შედარებით მცირე რიცხვისათვის. დანარჩენ ელემენტთათვის ძი-

რითადი მდგომარეობის განაწილების ელექტრონულ სურათებს არა აქვთ სფერული სიმეტრია.

განაწილების კომბინირებული სურათი ატომთათვის s და p მდგომარეობებში, გასაგებია, რომ შედარებით ორიენტაციისაგან არის დამოკიდებული. თუ ავიღებთ განაწილების ორ სურათს (ნახ. 10), შეიძლება გამოვხატოთ ორი სხვადასხვანაირი ატომი, რომლებიც ერთმანეთისგან გარკვეულ მანძილზე იმყოფებიან, მხოლოდ სხვადასხვანაირად არიან ორიენტირებული, როგორც ეს 61 ნახ.ზეა.



ნახ. 61.

თუ ორი ატომი მიახლოებისას ერთდება, ჰქმნიან რა მოლეკულას, მაშინ სტაბილური იქნება ისეთი კონფიგურაცია, რომლის ენერგეტიულ მრუდს ყველაზე ქვედა მინიმუმი აქვს; იგივე შეეხება სამი ან მეტი რიცხვის ატომთა შემთხვევას. თუმცა აუცილებელი გამოთვლები საკმაოდ რთულია, მიუხედავად ამისა ამ მეთოდს დიდი მნიშვნელობა აქვს, რადგან მას მიეყავართ სავალენტო ბმების სივრცულ ორიენტაციის და მრავალ ატომიან მოლეკულათა

ნამდვილი ფორმის მეტად მნიშვნელოვან საკითხთან.

3. ამ თავის დასაწყისში ჩვენ ვგულისხმობდით, რომ ჩვენთვის ცნობილია ენერჯიის შესაძლო მნიშვნელობანი და განაწილების სურათები რომელიმე გარკვეული ენერგეტიული მრუდისთვის და ვცდილობდით დაგვედგინა შეიძლება, თუ არა ამ მონაცემების მეოხებით, Ψ'' -ის შესაძლო მნიშვნელობათა პოვნა მცირედით შეცვლილ ენერგეტიულ მრუდისთვის. ამ ამოცანის განზოგადოება, გასაგებია, იმაში მდგომარეობს, რომ დადგინდეს შეიძლება, თუ არა ამ მონაცემებით სარგებლობით აგრეთვე. ახალი Ψ'' განაწილების სურათების პოვნაც.

განვიხილოთ, მაგალითად, განაწილების სურათი, რომელიც მიეკუთვნება Ψ_2' სურათს. იგი ცოტათი განსხვავებული იქნება პირვანდელ Ψ_2 სურათისაგან. ძირითადი იდეა იმაში მდგომარეობს, რომ სწორად იქნეს შეცვლილი Ψ_2 ფუნქცია, სხვა პირვანდელ მრუდების მცირე „რაოდენობებით“ მიმატებით:

$$\Psi_2' = \Psi_2 + a_1\Psi_1 + a_3\Psi_3 + \dots \quad (61)$$

სადაც a_1, a_3, \dots მცირე რაოდენობით ან უარყოფითი სიდიდეებია. ამოცანა მდგომარეობს ამ სიდიდეთათვის საუკეთესო შესაძლო მნიშვნელობათ განსაზღვრაში. მათი გამოთვლის წესი გამოყვანილია დამატების მე-7 შენიშვნაში.

4. V თავის დასაწყისში მიუთითებდით ატომის ალგზნებაზე. როგორც ფიზიკურ პროცესის მაგალითზე. მოცემულ პერტურბაციისას ჩვენ უცილოდ არ გვეკოდინება, რომელ ალგზნებულ დონეზე აიწვევს ატომი — ყოველ მდგომარეობას შეესაბამება გარკვეული ალბათობა. თუ ცნობილია, რომ საწყისა მომენტში ატომი იმყოფება ღირითად მდგომარეობაში, მაშინ α_1 ერთის ტოლი იქნება $l = 0$ მომენტამდე. ამის შემდეგ ალგზნებულ დონეთა განაწილების სურათები დაიწყებენ ზრდას ძირითადი დონის კუთვნილ განაწილების სურათის ხარჯზე. ეს უბრალოდ ილიუსტრაციაა აღწერის ზოგადი მეთოდის. განაწილების სურათების ზრდა პირვანდელ სურათის ან სურათების ხარჯზე, თუ ენერგეტიულ მრუდემ რაიმე ცვლილებები განიცადა, წარმოადგენს კვანტურ მექანიკაში ფიზიკური მოვლენის გამოსახვის განსაკუთრებულ მეთოდს. ისევე, როგორც 1 პ-ში, პირვანდელ პოტენციალურ ენერჯიას V ემატება v და ვლდებულობთ $(V + v)$ სიდიდეს.

თუ ჩვენს თავს დაუსვამთ კითხვას: განაწილების როგორი სურათები გაიზრდებიან ყველაზე სწრაფად, მაშინ შემდეგისათვის ნიადაგის მოსამზადებლად, 1 პ-ის მსგავსად ჯერ გავარკვიოთ რამოდენიმე მარტივი საკითხი. უპირველესად, თუ v ცვლილება იმ არეებში ბდება, სადაც პირვანდელი Ψ' ფუნქციის მნიშვნელობა მეტად მცირეა მაშინ არავითარი გაზომვისათვის მისაწვდომი ეფექტი არ მოხდება. შემდეგ, თუ არსებობს Ψ' ფუნქციები, რომლებიც სრულებით არ გადააფარებიან პირვანდელ Ψ'_1 ფუნქციას მაშინ საჭირო არ არის მათი მხედველობაში მიღება, რადგან Ψ'_1 პირვანდელ ფუნქციით გამოხატული მდგომარეობიდან სხვა მდგომარეობაში აწილაკის გადასვლის ალბათობა ნულის ტოლი იქნება. მაგრამ, რადგან განაწილების ყოველ სურათს მთელი სივრცე უჭირავს, ამიტომ აუცილებელია ამ წესის შემდგენილი ფორმულირება: ყოველი Ψ' ფუნქცია, არსად არ გადააფარავი პირვანდელ Ψ'_1 ფუნქციის შეიძლება არ მივიღოთ მხედველობაში. მაგრამ იმავე დროს განაწილების სურათები, რომლებიც ყველაზე მეტად ეფარებიან პირვანდელ სურათს არ არიან აუცილებლად ყველაზე მნიშვნელოვანი. მართლაც, სავსებით დასაშვებია, რომ იმ არეში, სადაც ეს „გადაფარვა“ v სიდიდე მცირე აღმოჩნდეს. ჩვენ საერთოდ გადასვლები კი არ გვანტერესებს, არამედ v -ს ზიერ გამოწვეული გადასვლები. რა მოქმედებას მოგვეცემს დროის რაიმე მომენტში პოტენციალური ენერჯიის ცვლილება v , როდესაც ეს უკანასკნელი მეტისმეტად მცირეა. ამ შემთხვევაში განაწილების სურათთა დიდ გადაფარვასაც კი მნიშვნელობა არა აქვს.

ცხადია, რომ აქ განსაკუთრებით მნიშვნელოვანია განაწილების სამმაგო ურთიერთ გადაფარვა: Ψ_n -ის სურათისა ψ -სთან და Ψ -ის პირვანდელ განაწილების სურათთან. Ψ_n ფუნქციის ზრდა დამოკიდებულია მხოლოდ იმ არეებზე, რომლებშიც Ψ_n გადაეფარება ψ და Ψ_1 -ს. $dx \cdot dy \cdot dz$ მოცულობის ელემენტის მოქმედება პროპორციულია იმ მნიშვნელობების, რომლებიც აქვთ ამ სამ მამრავლს აღებულ მცირე მოცულობაში. ისევე როგორც (58) განტოლების შემთხვევაში, სრული ეფექტი მიიღება ნამრავლის ინტეგრაციით მთელ სივრცეში, იხ. ქვემოთ (62) განტოლება. აღარც კი არის საჭირო მითითება, რომ აქ ყველგან ნაგულისხმევაა ფუნქციათა ნორმირება, და როდესაც ვლაპარაკობთ Ψ_n ფუნქციის „ზრდაზე“, α_n -ის გადიდება იგულისხმება.

ეს ისჯელობა, როგორც სჩანს, სწორი აღწერა უნდა იყოს მოვლენებისა და, როგორც დავინახავთ, უშუალოდ გამომდინარეობს (39) და (40) განტოლებებიდან. მაგრამ იმ დროს, როდესაც 1 კ-ში ჩვენ უნდა გვეპოვა ენერჯიის მნიშვნელობა და ვიპოვეთ იგი (58) ინტეგრალის სახით, აქ მოვლენის ალბათობა უნდა ვიპოვოთ და ჩვენ კი აქამდე მხოლოდ (62) ინტეგრალი მივიღეთ, რომელსაც აგრეთვე ენერჯიის განზომილება აქვს. მოგაგონებთ, რომ განაწილების სხვადასხვა სურათები მიეკუთვნებიან დაკვანტულ დონეებს და W_n ენერჯიის მქონე საწყის მდგომარეობიდან მალალ W_m მდგომარეობაში გადასვლისთვის საჭიროა ($W_n - W_m$) ენერჯიის შექმნა პერტურბაციის აგენტისაგან.

თუ ამ გზით მიღებულ გამოსახვაში შედის პლანკის მუდმივი, როგორც ამაჲ (39) განტოლების საფუძველზე უნდა მოველოდეთ. მაშინ არ იქნებოდა გასაკვირველი, თუ აღმოჩნდებოდა, რომ $\frac{(W_n - W_m)}{h}$ სიხშირე წარმოადგენს რომელიმე რხევის სიხშირეს. მართლაც, თუ სავსებით ამოვწერთ ინტეგრალს გადამფარავ განაწილების სურათებით, როგორც (35) განტოლებაში, ჩვენ მივიღებთ:

$$\int \Psi_n^* \psi \Psi_m dv = \int \psi_n^* \psi_m e^{2\pi i \left\{ \frac{(W_n - W_m)}{h} \right\} t} dv. \quad (62)$$

მე-5 კ-ში გარკვეული იქნება ამ ინტეგრალის აზრი (39) განტოლების საფუძველზე. გამოყვანა ეფუძნება ψ ფუნქციის ერთ-ერთ თვისებას, რომლის წინააწარი გამოკვლევაც აუცილებელია. ψ ფუნქციები, რომლებიც შეეაბამებიან რაიმე პოტენციალურ ყუთის (ან

რაიმე ენერგეტიულ მრუდის) ენერჯის შესაძლო მნიშვნელობებს, ჰქმნიან ფუნქციათა ოჯახს, რომელთა ყველა წევრებს საერთო გარკვეული თვისებები აქვთ, ვიღებთ რა პირველად ერთგანზომილებიან განაწილების სურათებს, განვიხილოთ, მაგალითად, ინტეგრალი:

$$-\infty \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_m(x) \psi_n^*(x) dx, \quad (63)$$

სადაც ψ_m და ψ_n — ორი ნორმირებული ფუნქციაა. ასეთი ინტეგრალი ჩვენ უკვე შეგვხვდა (იხ. (31) ფორმულა, გვ. 64) და აღმოჩნდა, რომ იგი ნულის ტოლია. მეორე მაგალითის სახით ავიღოთ მე-15 ნახ-ის a და b მრუდები. მარჯვენა ნახევრის ყოველ წერტილში ψ_a , ψ_b ნამრავლი უარყოფითია, ხოლო მარცხენა ნახევრის შესაბამე წერტილში ნამრავლს ისეთივე დადებითი მნიშვნელობა აქვს.

მაშასადამე, ამ შემთხვევაში ინტეგრალი ისევ ნულის ტოლია, და იგივე ითქმის ლუწი და კენტ ფუნქციათაგან შემდგარ ნებისმიერ წყვილზე. შემდეგ 15 ნახ-ის a და c მრუდების განხილვისას, ჩვენ ვლტებულობთ უარყოფით წევრს შუანაწილიდან და დადებით წევრებს მარჯვენა და მარცხენა ნაწილებიდან. ეს შედეგი არც ისე ცხადია, მაგრამ ისინი ნამდვილად აკომპენსირებენ ერთმანეთს, რის გამოც (63) ინტეგრალი ისევ ნულის ტოლი აღმოჩნდება. ეს მაგალითები მხოლოდ ილიუსტრაციაა საერთო თვისების, რომელიც სრულებით დამოუკიდებელია იმ ენერგეტიული მრუდის სახისგან, რომელსაც მიეკუთვნებიან განაწილების სურათები, თუ ეს მრუდი ერთნაირია განაწილების ყველა სურათისთვის. ეს სამართლიანია არა მარტო ერთგანზომილებიან შემთხვევაში, არამედ განზომილებათა ნებისმიერ რიცხვისთვისაც, ინტეგრალი $\int \psi_m \psi_n^* dx$, მთელ სივრცეში აღებული, ყოველთვის ნულის ტოლია. ის მდგომარეობა, რომ ყველა ψ ფუნქციები ერთსადაიმავე შრედინგერის განტოლებას აკმაყოფილებენ და ნულის ტოლი არიან უსასრულობაში, საკმარისია იმისთვის, რომ მათ ჰქონდეთ ასეთი თვისება — რაიც ორთოგონალობის სახელწოდებით არის ცნობილი.

თუ ჩვენ საქმე გვაქვს ჩვეულებრივ რთულ მდგომარეობასთან, რომელიც ნორმირებულ ფუნქციათა ჯამით გამოიხატება, როგორც, მაგალითად, (29) განტოლებაში, მაშინ ეს ორთოგონალობის თვისება საშუალებას გვაძლევს გამოვყოთ ის წევრი, რომელიც ნებისმიერ ენერგეტიულ დონეს შეესაბამება. დაუშვათ, რომ გვინდა მწკრივი-

დან გამოვყოთ W_2 ენერგეტიულ დონის შესაბამისი წევრი. გაეამ-
რავლოთ მთელი ჯამი ψ_2^* -ზე და მოვახდინოთ ინტეგრაცია მთელ-
სივრცეში. შედეგათ მივიღებთ:

$$\int (a_1 \psi_1 + a_2 \psi_2 + a_3 \psi_3 + \dots) \psi_2^* dv = a_2 \quad (64)$$

რადგან, ორთოგონალობის თვისების გამო, მწკრივის ყველა წევრე-
ბი მეორის გარდა ნულის ტოლები გახდებიან. ამას გარდა, რადგან
 ψ_2 ფუნქცია ნორმირებულია, მეორე წევრი სწორედ a_2 -ს ეტოლება-
შემდეგში ჩვენ კიდევ ვისარგებლებთ ამ მეთოდით.

5. (39) განტოლება გვიჩვენებს, როგორ იცვლება Ψ ფუნქცია-
ნებისმიერ წერტილში დროის მიხედვით. მაგრამ განსახილავ სახის-
ამოცანაში ჩვენ არ გვაინტერესებს ის, თუ რა ხდება ცალკეულ
 x, y, z წერტილში. ჩვენ გვაინტერესებს, თუ როგორ იცვლებიან
დროის მიხედვით a_1, a_2, a_3, \dots მნიშვნელობანი. ამიტომ იზადება კით-
ხვა: როგორ გამოვიყენოთ ამ მიზნით (39) განტოლება. თუმცა მე-
თოდი საერთოა, მაგრამ ჩვენ შეგვიძლია მხედველობაში ვიქონიოთ
ატომის აღგზნების ამოცანა. რომ ავიშოროთ მდგომარეობათა დიდ
რიცხვთან საქმის დაქერის აუცილებლობა, განვიხილოთ მხოლოდ ორი-
მდგომარეობა. ვთქვათ შრედიანგერის განტოლებაში (39) $\Psi = a_1 \Psi_1 +$
 $+ a_2 \Psi_2$, სადაც a_1 და a_2 — მუდმივებია. (39) განტოლების თანახმად

$$\left. \begin{aligned} \frac{i\hbar}{2\pi} \frac{\partial}{\partial t} (a_1 \Psi_1 + a_2 \Psi_2) + \alpha \frac{\partial^2}{\partial x^2} (a_1 \Psi_1 + a_2 \Psi_2) - \\ - V(a_1 \Psi_1 + a_2 \Psi_2) = 0 \end{aligned} \right\} \quad (65)$$

ეხლა თუ დროის გარკვეულ მომენტში პოტენციალური ენერგია
 V -ს ნაცვლად $(V + v)$ -ს ტოლი გახდება, მაშინ ახალ განტოლებას
ჩვილებთ, რომელიც ორ დამატებით წევრს $v a_1 \Psi_1$ და $v a_2 \Psi_2$ შეი-
ცავს. ამ განტოლების გადაწყვეტის მეთოდი იმაში მდგომარეობს,
რომ მოიძებნოს ნიშნით v საწინააღმდეგო წევრები, რომლებიც გაბათილ-
დებოდნენ ამ ახალ წევრებთან ერთად. ამ მიზნით დაუშვათ რომ V -ს
ცვლილების შედეგად a_1 და a_2 სიდიდეები უკვე აღარ იქნებიან მუდმივ-
ნი, როგორც (65)-ში, არამედ იცვლებიან დროის მიხედვით. თუ გაშლი-
ლად ამოვწერთ (65) განტოლების პირველი ფრჩხილის გამოთქმას, მა-

შინ მივიღებთ $\frac{da_1}{dt}$ და $\frac{da_2}{dt}$ -ს შემცველ ახალ წევრებს, რომლებიც ადრე ნულის ტოლები იყვნენ. მთელ გამოთქმას ეხლა ასეთი სახე ექნება:

$$\frac{i\hbar}{2\pi} \left(a_1 \frac{d\Psi_1}{dt} + \Psi_1 \frac{da_1}{dt} + a_2 \frac{d\Psi_2}{dt} + \Psi_2 \frac{da_2}{dt} \right) + \\ + \alpha \frac{\partial \psi}{\partial x^2} (a_1 \Psi_1 + a_2 \Psi_2) - (V + v) (a_1 \Psi_1 + a_2 \Psi_2).$$

(65)-თან შედარება გვიჩვენებს, რომ იგი ნულს ეტოლება იმ პირობით, თუ

$$\frac{i\hbar}{2\pi} \left(\Psi_1 \frac{da_1}{dt} + \Psi_2 \frac{da_2}{dt} \right) - v(a_1 \Psi_1 + a_2 \Psi_2) = 0. \quad (66)$$

თუმცა სიმარტივისთვის ჩვენ ნხოლოდ x კოორდინატით ვსარგებლობდით, მაგრამ (66) ფორმულასთან მივიდოდით იმ შემთხვევაშიც, თუ ვისარგებლებდით სამივე x , y , z კოორდინატით.

ეხლა თუ v , რომ დროის საწყის მომენტში სისტემა 1 მდგომარეობაში იმყოფებოდა, მაშინ $t=0$ დროს $a_1=1$ და $a_2=0$. ჩვენ გვინდა ვიცოდეთ a_2 -ს მნიშვნელობა შემდგომ ნებისმიერ მომენტში; თუ a_2 იზრდება a_1 -ის ხარჯზე. ნულიდან a_2 -ს ზრდის პირველსაწყისი სიჩქარის პოვნა საკმაოდ ადვილია. დროის საკმაოდ მოკლე შუალედის განმავლობაში $t=0$ -ის შემდეგ a_1 სიდიდით თითქმის ერთის ტოლი დარჩება და a_2 a_1 -თან შედარებით შეიძლება უგულვებელყოთ. ამგვარად, ამ შუალედის განმავლობაში ჩვენ მიახლოებით გვექნება:

$$v(a_1 \Psi_1 + a_2 \Psi_2) = v\Psi_1. \quad (67)$$

მაშასადამე, (66) შეიძლება შემდეგი სახით გადავწეროთ:

$$\Psi_1 \frac{da_1}{dt} + \Psi_2 \frac{da_2}{dt} = \frac{2\pi}{i\hbar} v\Psi_1. \quad (68)$$

ეხლა შეიძლება გამოვყოთ მე-2 მდგომარეობის კუთვნილი წევრი, თუ ვისარგებლებთ ზემოდსცნებულ ორთოკონალ-

ბის თვისებით. (68) განტოლების ორივე მხარე Ψ_2^* -ზე გაავარაულოთ და მოვახდინოთ ინტეგრაცია მთელ სივრცეში. მარცხნივ მდგომი პირველი წევრი ნულად იქცევა, ხოლო მეორე სწორედ $\frac{da_2}{dt}$ -ს გადალევს. მაშასადამე

$$\frac{da_2}{dt} = \frac{2\pi}{i\hbar} \int \Psi_2^* v \Psi_1 dV. \quad (69)$$

ჩვენ ვხედავთ, რომ ჩვენ მიერ ნაგულისხმევი დამთხვევის პრინციპი მართლდება; მოცულობის ყოველი 'ელემენტი,' რომელშიც კი Ψ_2 გადაეთარება v -ს და Ψ_1 -ს, გაელენას ახდენს. a_2 -ს ზრდის სისწრაფეზე. ურთიერთ გადათარვის ხარისხი განსაზღვრავს იმის ალბათობას, რომ v გამოიწვევს Ψ_1 ფუნქციით აღწერილიდან Ψ_2 -თი აღწერილ მდგომარეობაში გადასვლას. როგორც მე-4 პ-ში იყო აღნიშნული ინტეგრალს ენერჯის განზომილება აქვს; ეხლა ცხადია, როგორ მოგვეცემს იგი, თუ კიდევ პლანკის მუდმივსაც შემოვიტანთ, დროის ერთეულში რაიმე მოვლენის დადგომის ალბათობას. (69)-ს დროთი ინტეგრაციით მივიღებთ:

$$a_2 = \frac{2\pi}{i\hbar} \int_0^t \int \Psi_2^* v \Psi_1 dV dt. \quad (70)$$

თუმცა სიმარტივისთვის ჩვენ გამოვდივართ ძირითად მდგომარეობაში მყოფ სისტემიდან, მაგრამ შეიძლება გამოსვლა რთული Ψ ფუნქციიდანაც; ამ შემთხვევაში a_2 -ს ზრდის სისწრაფე და მოკიდებული იქნებოდა საწყის მომენტში არსებულ ყოველ მდგომარეობიდან. მნიშვნელობა, რომელიც a_2 -ს ექნება 1 მომენტში, შეიძლება წარმოვიდგინოთ ყველა ამ წევრების ჯამის სახით:

$$a_2(t) = a_{21} + a_{22} + a_{23} + \dots \quad (71)$$

$|a_{nm}|^2$ სიდიდენ ზომავს იმის ალბათობას, რომ v გამოიწვევს გადასვლას m მდგომარეობიდან n მდგომარეობაში და განისაზღვრება გამოთქმით:

$$|a_{nm}|^2 = \frac{4\pi^2}{\hbar^2} \left| \int_0^t \int \Psi_n^* v \Psi_m dV dt \right|^2 \quad (72)$$

(72) განტოლების გამოყენების არე მეტად ფართოა. იგი საშუალებას გვაძლევს გამოვთვალოთ ხილული, ინფრაწითელი, რენტგენის გამოსხივების და γ -სხივების შთანთქმის თეორიული კოეფიციენტები, ფოტოელექტრული ეფექტი, რაიმე მოძრავი ნაწილაკების მიერ გამოწვეული იონიზაცია და ალგზნება.

$\int \Psi_n^* v \Psi_m dV$ ინტეგრალები, გაკრცლებულნი მთელ სივრცეზე, იმდენად ხშირად იხმარება, რომ ხელსაყრელობის მიხნით შეიძლება მათი მოკლედ აღნიშვნა, როგორც ეს ჩვეულებრივ ხდება, v_{nm} -ით ან $(v)_{nm}$ -ით. ეს v_{nm} სიდიდეები ცნობილი არიან. როგორც v ფუნქციის მატრიცული ელემენტები, რადგან თუ მათ რიგზე ამოვწერთ, ისინი შექმნიან რიცხვთა ერთგვარ ცხრილს ანუ მატრიცას.

რადგან ატომის მოცულობა მეტად მცირეა, არე, რომელშიც ელექტრონულ ღრუბელს მნიშვნელო ანი სიმკვრივე აქვს სულ 10^{-24}სმ^3 -ის რიგისა არის—ამიტომ ხშირად თვლიან, რომ ელექტროვლის დაძაბულება E , რომელიც v პერტურბაციას წარმოშობს, ერთნაირია მთელ ავ მოცულობაში—სხვანაირად რომ ვთქვათ, ველის დაძაბულება E შეიძლება სწრაფად იცვლებოდეს დროის მიხედვით, მაგრამ დროის ნებისმიერ მომენტში მას ერთიდაიგივე მნიშვნელობა აქვს ატომის მთელ სივრცეზე—ე. ი. ენერგეტიულ მრუდს ექნება მდმივი დახრა, როგორც $n2$ ნახ-ზე, n ან n -ს. თუ x ღერძს მიემართავთ ძალხაზების მიმართულების გასწვრივ, მაშინ რადგან ენერგეტიული მრუდის დახრა eE -ს ტოლია, ჩვენ გვექნება $v = Eex$ და, მაშასადამე,

$$\int \Psi_n^* v \Psi_m dV = eE \int \Psi_n^* x \Psi_m dV. \quad (73)$$

Ψ ფუნქციების მთლიანად ამოწერით მივიღებთ

$$\int \Psi_n^* x \Psi_m dV = e^{-2\pi i v_{nm} t} \int \psi_n^* x \psi_m dV, \quad (74)$$

სადაც

$$v_{nm} = \frac{(H)_m - (H)_n}{h}$$

ცხადია, რომ ინტეგრალი $\int \psi_n^* x \psi_m dV$ არის რომელიღაც ატომური მუდმივა, რომელსაც არაერთარნი დამოკიდებულება არა აქვს რაიმე პერტურბაციასთან; იგი შეიძლება არსებობდეს ან არ არსებობდეს. შესამოკლებლად ასეთი ინტეგრალი ჩვეულებრივ x_{nm} -ით აღინიშ-

ნება. $x_{\text{მომ}}$ სიდიდეები წარმოადგენენ რაიმე სიგრძეებს, ატომის რადიუსზე ნაკლებს და ატომის ან მოლეკულის დამახასიათებლებს. ისინი შეიძლება ერთხელ და სამუდამოდ გამოთვლილი და შემდეგ გამოყენებულ იქნენ, პერტურბაციით (როჯლის ველი საკმაოდ ერთგვაროვანია ატომის მოცულობის განთენილობაზე) გამოწვეულ გადასვლების ალბათობის განსაზღვრისათვის. ყოველ ატომში ზოგიერთი $x_{\text{მომ}}$ სიდიდეები შეიძლება ნულები აღმოჩნდნენ სიმეტრიის შედეგათ [შეად. (63)]. ასე, მიგალითად, $x_{\text{მომ}}$ ნულის ტოლი იქნება ატომის s -მდგომარეობათა ყოველ წყვილისთვის.

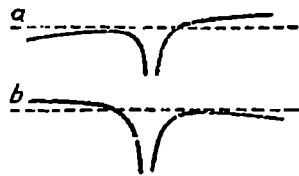
6. ამ მეთოდის გამოყენება გამოსხივების შთანთქმვაზე, გვაჩვენებს, თუ როგორ დამაკმაყოფილებლად თანხვდება კვანტური მექანიკა კლასიკურ თეორიას. ეს იმიტომ, რომ ამ ამოცანაში ჩვენ არ შემოგვაქვს თავიდანვე სინათლის კვანტები და დაცემის გამოსხივებას კლასიკურ ტალღათა ჯგუფად ვსაუვლით. სიმარტივისთვის ავიღოთ ბრტყლად-პოლიარიზებული კონა ν სიხშირით. ატომში ტალღათა ჯგუფის გასვლისას მასზე იმოქმედებს სწრაფად ცვლადი ელექტროველი, რომლის დაძაბულება დროში იცვლება $E = A \cos 2 \pi \nu t$. კანონით.

ხილული სინათლის ტალღის სიგრძეები დაახლოებით 5000 Å ტოლია; მაშ ულტრაიისფერი გამოსხივების შემთხვაშიც კი ტალღის სიგრძე დაახლოებით 1000-ჯერ მეტია ატომის დიამეტრზე. ამიტომ შეიძლება მივიღოთ, რომ ველის დაძაბულება მუდმივია მთელ ატომის განთენილობაზე. აერლებთ რა სავალენტო ელექტრონისთვის პირვანდელ ენერგეტიულ მრუდს 7 ნახ-ის ფორმით, განვიხილოთ, თუ როგორ შეიცვლება იგი სხვადასხვა მიმართულებით. სინათლის სხივის მიმართულებით იგი უცვლელი დარჩება, რადგან ტალღის ველი განივია. განივ მიმართულებით ენერგეტიული მრუდი რხევას დაიწყებს ν სიხშირით 62 ნახ-ის a და b მრუდებს შორის. თუ x ღერძა ველის ვექტორის მიმართულებად მივიღებთ, გვექნება

$$v = Eex = Aex \cos 2 \pi \nu t = \frac{Aex}{2} \left(e^{2\pi i \nu t} + e^{-2\pi i \nu t} \right). \quad (75)$$

რომ ვიპოვოთ, თუ როგორ რეაგირებას იძლევა ν სიხშირიან დაცემა სინათლეზე ატომში მყოფი დამახასიათებელი $\nu_{\text{მომ}}$ სიხშირის მქონე ელექტრონი, აუცილებელია ამ გამოთქმის ჩასმა (70)-ში. ჯერ კიდევ კვანტური მექანიკის წარმოშობამდე იცოდნენ, რომ თუ საწ-

ყას მომენტში ატომი აღზნებულ მდგომარეობაშია, მაშინ დაცემის სინათლეს ორი ეფექტის გამოწვევა შეუძლია: მას შეუძლია აიძულოს ატომი გადავიდეს უფრო მაღალ აღზნებულ მდგომარეობაში (შთანთქმა) ან უფრო დაბალ მდგომარეობაში (იძულებითი გამოფრქვევა) ამიტომ ნაცელად იზისა, რომ საწყის მომენტში ატომი ძირითად მდგომარეობაში იყოს, უკეთესია დაშვება, რომ გვაქვს საწყისი მდგომარეობა W_m ენერჯით, ხოლო საბოლოო მდგომარეობის ენერჯია შეიძლება მეტი იყოს ან ნაკლები W_n -ზე. რადგან x_{nm} დამოუკიდებელია t -სგან, (75)-დან ვღებულობთ:



ნაწ. 62.

$$\int_0^t \int V_n^* V_m dV dt = A e x_{nm} \int_0^t e^{2\pi i \nu_{nm} t} \cos \pi \nu t \cdot dt =$$

$$= \frac{1}{2} A e x_{nm} \left[\frac{e^{2\pi i (\nu_{nm} + \nu) t}}{2\pi i (\nu_{nm} + \nu)} + \frac{e^{2\pi i (\nu_{nm} - \nu) t}}{2\pi i (\nu_{nm} - \nu)} \right]_0^t \quad (16)$$

აქედან შეგვიძლია ვიპოვოთ ნებისმიერ ტალღის სიგრძის მქონე დაცემის სინათლისთვის $(x_{nm})^2$ -ის მნიშვნელობა. რადგან ν_{nm} ტოლია $\frac{(W_n - W_m)}{h}$ -სი, ამიტომ იგი დადებითი ან უარყოფითი იქნება

იმისგან დამოკიდებულებით, ჩვენ მიერ განსახილავი საბოლოო დონე საწყის დონეზე ზემოდ მდებარეობს, თუ ქვემოდ თუ ν_{nm} დადებითია, (76)-ში პირველ წევრს შეუძლია მოგვეცეს რეზონანსი. რაც უფრო ახლოა დაცემის სინათლის სიხშირე ν ატომის რომელიმე ν_{nm} სიხშირესთან, მით უფრო ნაკლებია მნიშვნელში მდგომი $(\nu_{nm} - \nu)$ სხვაობა და მით უფრო მეტ გავლენას მოახდენს ეს სიხშირე. მართლაც კვანტის შთანთქმის ალბათობა მეტად მცირეა იმ შემთხვევის გამოკლებით, როდესაც ν რეზონანსულია ერთ-ერთისა ν_{nm} სიხშირეებიდან. ამგვარად მიიღება შთანთქმის ხაზოვანი სპექტრი. ეფექტი ველის დაძაბულების სიდიდისაგან დამოუკიდებლად, მკაცრად პროპორციულია A^2 -ის — ე. ი. ამპლიტუდის კვადრატის. შთანთქმის სხვადასხვა ხაზების ფარდობითი ინტენსივობანი განისაზღვრებიან x_{nm}^2 სიდი-

დებით; იმ შემთხვევაში, როდესაც ისინი ნულს ეტოლებიან, შესაბამისი შთანთქმის ხაზები არ არსებობენ.

ქვემოთ, უფრო ღრმა დონეებზე გადასვლისათვის ($W_n - W_m$) უარყოფითია. ამ დროს რეზონანსი შეიძლება მიღებულ იქნეს მეორე წვერის მნიშვნელში; რეზონანსულ სიხშირეებისთვის შეიძლება პირველი წვერი უგულვებელყოთ.

ამგვარად შთანთქმის ზოლების ინტენსივობათა განსაზღვრის ამოცანა გადაწვეტილი იქნება, თუ გვეცოდინება განაწილება სურათები, რომელთა დახმარებითაც შეიძლება α_{nm} -ის გამოთვლა. წყალბადის ატომისა და He^+ და Li^{++} იონებისთვის ფუნქციები ზუსტად არიან ცნობილი და შეიძლება შთანთქმის კოეფიციენტის აბსოლიუტური მნიშვნელობის გამოთვლა. რადგან თერმოდინამიული განხილვა გვიჩვენებს, რომ გამოსხივების ინტენსივობა გარკვეულ, $\frac{3\pi h\nu^3}{c^3}$ ტალ, ფარდობში უნდა იყოს შთანთქმის ინტენსივობასთან, ამის გამო გამოსხივების ხაზების ინტენსივობანიც აგრეთვე ცნობილი იქნებიან.

ატომთა აღზნების გამოსაკვლევად ჩვენ ავიღეთ W_n ფუნქცია იმ ელექტრონისთვის, რომელიც დისკრეტულ დონეზე იმყოფება. მაგრამ განტოლებებში არაფერია ისეთი, რაც ასეთ შეზღუდვას მოითხოვს. საბოლოო მდგომარეობისთვის ჩვენ შეგვიძლია ამის ნაცვლად ნებისმიერი W ფუნქცია ჩავსვათ, რომელიც აღწერს ატომიდან დაშორებად, თავისუფალ ელექტრონს—ე. ი. W ფუნქცია, რომელიც შეესაბამება იმავე ენერგეტიულ მრუდს, მხოლოდ უფრო დიდი ენერგიის შესაფერს; ამ შემთხვევაში (72) ფორმულა მოგვცემს ფოტონიზაციის ალბათობას. თავისუფალ ნაწილაკებისთვის, რასაკვირველია, არავითარი დაკვანტვა არ შეიძლება; მაშასადამე, ატომს შეუძლია რეაგირება ყველა სიხშირეზე, რომელთათვისაც-კი $h\nu$ მეტია საონიზაცია პოტენციალზე. ამ დროს ელექტრონი ამოვარდება კინეტიური ენერგიით $\frac{1}{2} m v^2 = h\nu - \Phi$, სადაც Φ — იონიზაციის

ენერგიაა. ამგვარად, ატომის ხაზოვანი სპექტრის ულტრაიისფერ საზღვრის იქეთ არის შთანთქმის უწყვეტ სპექტრი, რომლის ინტენსივობა შეიძლება (72)-იდან გამოითვალოს. ეს მსჯელობა შეიძლება გამოყენებულ იქნეს ატომის შიგნითა გარსების ელექტრონებზე; ავი-

ღებთ რა საწყის მდგომარეობათ K -ან L -ელექტრონის განაწილების სურათს, შეიძლება გამოითვალოს რენტგენის სხივების ფოტო-ელექტრიული შთანთქმა. სწორედ ამგვარადვე შეიძლება ლითონთა ხედაპირებზე ფოტო-ელექტრიული ეფექტის გამოკვლევა, ავიღებთ რა Ψ_1 და Ψ_2 მახით, ლითონში მყოფ ელექტრონის და ხედაპირიდან გამოძვალ ელექტრონის განაწილების სურათებს.

მოლეკულის ელექტრონული აღგზნება გაცილებით უფრო რთულ პროცესს წარმოადგენს. ატომის ამოცანაში ჩვენ უნდა გავგეხილა მხოლოდ ორი ელექტრონული განაწილების სურათის „გადათარევა“. ხოლო მოლეკულის, როგორც საწყისი, ისე საბოლოო მდგომარეობანი ψ ელ. ψ რხ. ნამრავლით უნდა გამოიხატებოდნენ. მაშასადამე,

$$\psi_1 \psi_2 = \psi_{\text{ელ. 1}} \psi_{\text{რხ. 1}} \psi_{\text{ელ. 2}} \psi_{\text{რხ. 2}} \quad (77)$$

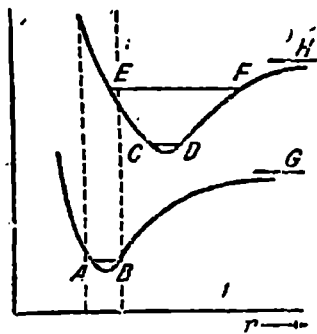
თუ რაიმე საწყის და საბოლოო მდგომარეობათათვის ψ რხ. ψ_1 და ψ რხ. ψ_2 -თა „გადათარევა“ უწინშენელოა, მაშინ ეს მდგომარეობა საკმაოა, რომ შესაბამი ტალღის სიგრძის ინტენსიური შთანთქმა შეუძლებელი იყოს. ჩვენ უკვე ვლაპარაკობდით, (63) ნახ-ზე გამოხატულ მრუდებზე. ვთქვათ CD — პირველი აღგზნებული მდგომარეობის ქვედა რხევითი დონეა, ხოლო AB — ქვედა რხევითი დონე ნორმალური მდგომარეობის.

აბსცისთა ღერძზე გადაზომილია ატომებს შორის მანძილი r , ხოლო ვერტიკალური მონაკვეთი GH გამოხატავს ენერგიას, რომელიც აუცილებელია ატომთა შესაბამ აღგზნებისათვის, როცა ისინი ერთმანეთისგან დიდ მანძილებზე იმყოფებიან. AB დონისათვის ψ რა ფუნქცია დაეცემა მაჩვენებლიანი კანონით B -ს მარჯვნივ და A -ს მარცხნივ, როგორც ეს 15, a ნახ-ზეა, ასე რომ იგი მცირე იქნება ყველგან, იმ გულათა შორის მანძილების გამოკლებით, რომლებიც ნახაზზე ნაჩვენებ ვერტიკალურ პუნქტიროვან ხაზებს შორის მდებარეობენ.

განვიხილოთ ეხლა იმ მოლეკულის აღგზნება, რომელიც დასაწყისში AB დონეზე იმყოფება. ენერგიის უმცირესი მნიშვნელობა, რომელიც საჭიროა მოლეკულის ასაწევად უფრო მაღალ ელექტრონულ მდგომარეობაში განისაზღვრება AB და CD -ს შორის მანძილით ვერტიკალზე. მაგრამ მოლეკულათა ამ ტიპისათვის ასეთი გადასვლა შეუძლებელია ალბათიანია, CD დონის შესაფერი ψ რხ. რომელიც მაჩვენებ-

ლიანი კანონით ეცემა C -დან, მეტად მცირედ გადაეფარება AB დონის შესაფერ ψ რ.ს. უფრო მაღალი რხევითი დონეები, მახლობელნი EF -ის, უკეთ გადაეფარება AB -ს. თუ, მაგალითად, მოლეკულა, თეთრი სხივით არის განათებული, მაშინ იგი გაცილებით მძლავრად შთანთქავს BE მანძილის (ვერტიკალზე) შესაბამ სიგრძეების ტალღებს, ვიდრე უფრო გრძელ ტალღებს. როგორც სჩანს ეს მსჯელობა გამოიყენება აგრეთვე მოლეკულების აღზნებაზე, როდესაც ეს გამოწვეულია ელექტრონებთან შეხლას შედეგად.

როდესაც ელექტროული მუხტის მქონე ნაწილაკი გაზში გაირბენს დიდი სიჩქარით, მაშინ მისი ტრაექტორიის მახლობლად მყოფი ატომები-დროებით მოექცევიან ძლიერ ველში ტრაექტორიიდან უფრო დაშორებული ატომები მოექცევიან ველში, რომლის დაძაბულება თუმცა კი სწრაფად იცვლება დროის მიხედვით, მაგრამ ატომის განფენილობაზე დროის ყოველ მიცემულ მომენტში თითქმის ერთგვაროვანი რჩება. ეს ველი შეიძლება შედარებით ძალიან სუსტი იყოს. მაგრამ, (73)-ის თანახმად, აღზნების და იონიზაციის ალბათობა მაინც არსებობს, როგორი სუსტიც არ არ უნდა იყოს ველი. ამგვარად შესაძლოა, ტრაქტორიიდან დაშორებულ რა-



ნახ. 63.

შოდენივე ატომის აღზნება; შესაბამისი ალბათობანი განისაზღვრებიან x_{max} მნიშვნელობებით, როგორც სინათლის მიერ აღზნების შემთხვევაში. იონიზაციის და აღზნების დიდი ნაწილი კი, ტრაექტორიის მახლობლად მომხდარი, უნდა გამოითვალოს (72) ფორმულის დახმარებით, მივიღებთ რა მხედველობაში იმ გარემოებას, რომ ψ არ არის ერთნაირი ატომის მთელ განვრცობაზე.

წინა თავში ლითონთა გამტარებლობის საკითხის განხილვისას, ჩვენ მიუთითებდით, რომ როდესაც ელექტრონი აჩქარდება ლითონში, მიყენებულ დაძაბულების გამო, მაშინ იგი შეიძენს ენერგიას ე. ი. გადავა უფრო მაღალ დონეზე. ერთი შეხედვით ასეთი აღზნება არ შეიძლება მიეკუთვნოს ამოცანათა იმ კლასს, რომლებშიც პოტენციალური ენერგიის ცვლილება დროებითი მოვლენაა. როდესაც გამტარის ორივე მხარეს დაძაბულებას მიუყენებენ, მაშინ 37 ნახ-ის ენერგეტიული მრუდი შეიცვლება; მაგრამ ჩვეულებრივ, დენის შესანარჩუნებლად საჭიროა დაძაბულების განუწყვეტლივ მი-

ყენება. ეს ყოველ შემთხვევაში აუცილებელია ოთახის ტემპერატურაზე. ტემპერატურის აბსოლიუტური ნულის მახლობლად ზეგამტარობის თვისების მქონე ლითონის შემთხვევაში კი მყისა ელექტრომამოძრავებელი ძალაც კი საკმარისია დენის გაჩენისთვის, რომელიც დიდი ხნის განმავლობაში იდენს მას შემდეგ, რაც დენის წყაროს მოვაშორებთ. ოთახის ტემპერატურაზე სითბური რხეიანი თვითონ იწვევენ ენერგეტიულ მრუდის მეორად ცვლას, რომელიც აჩერებს დენის სვლას.

პერტურბაციათა თეორია. ფიზიკურ მოვლენათა აღწერა

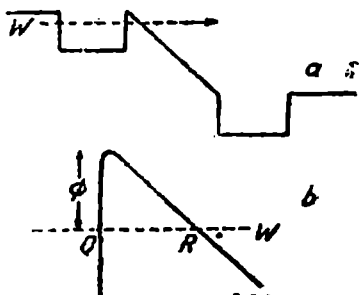
1. წინა თავში განხილული გადასვლები, ერთიდაიმავე ენერგეტიკულ მრუდის კუთვნილ IV_m და IV_n ენერგიის მნიშვნელობათა შორის ხდებოდა. არანაკლებ მნიშვნელოვანია 44 ნახ-ზე წარმოდგენილის მაგვარი ამოცანები, თუმცა ისინი სხვა ტიპს ეკუთვნიან. მათში პერტურბაცია რადიკალურად სცვლის ენერგეტიკულ მრუდს და პიკყავართ მოძრაობის, წინად არ არსებულ, ახალ შესაძლო სახეებთან. 44 ნახ-ზე ელექტრონებს შეუძლიათ. ამოვარდნა A ლითონიდან IV ენერგიის შეუცვლელად. რომ ვიწინასწარმეტყველოთ. თუ რა მოხდება ასეთ შემთხვევებში, აუცილებელია ისევ (39) განტოლებით სარგებლობა განაწილების სურათის ცვლილების ასაწერად. მაგრამ ვიდრე თეორიას გადმოვეცემდეთ, ზედმეტი არ იქნებოდა მიგვეთითებინა ასეთი ფიზიკური პროცესის სხვა მაგალითებზე.

განვიხილოთ თავისუფალი ატომი სიციარიელეში ლითონის ზედაპირის მახლობლად. სავალენტო ელექტრონის პოტენციალური ენერგია ატომის გულას ან დადებითი ნაშთის ველში განისაზღვრება მე-7 ნახ-ზე გამოხატული მრუდით, ხოლო ლითონის ზედაპირზე მას ექნება 37 ნახ-ზე მოყვანილ მრუდის სახე ენერგეტიკული მრუდი ლითონის ზედაპირის პერპენდიკულარულ და ატომზე გამავალ სწორის გასწვრივ მიიღება ამ ორივეს შეერთებით, როგორც 64 ნახ-ზე; იგი შესდგება ორი პოტენციალური ყუთისაგან შუაში ბარიერით, რომლის სიგანე უდრის მანძილს ზედაპირიდან ატომამდე. სიმარტივისათვის დაუშვათ, რომ ლითონი იმყოფება ჩვეულებრივ დაბალტემპერატურაზე და, მაშასადამე, დაკავებულ და თავისუფალ დონეებს შორის არის კრიტიკული ენერგიის შესაბამი მკვეთრი საზღვარი. ჩვენი ამოცანა მდგომარეობს მასში, რომ გადავწყვიტოთ, გადავა

თუ არა სავალენტო ელექტრონი ატომიდან ლითონში პოტენციალურ ბარიერში გავლით. იგი ვერ შესძლებს ამას, თუ ლითონში ყველა თავისუფალი დონეები უფრო მაღლა მდებარეობენ, ვიდრე საწყისი დონე ატომში, ე. ი. თუ Φ უფრო ნაკლებია ვიდრე I , სადაც I — ატომის საიონიზაციო პოტენციალია. მაგრამ ტუტე ატომების საიონიზაციო პოტენციალები 4 და 5 ელექტრონ-ვოლტებს შორის მდებარეობენ, ამიტომ, როცა ასეთი ატომი დაეცემა ლითონზე, რომელსაც საკმაოდ დიდი გამოსვლის მუშაობა აქვს, ადვილად შესაძლოა, რომ მან (ატომმა) გადასცეს თავისი სავალენტო ელექტრონი ლითონს. და მართლაც, იონების ძლიერ ნაკადის მიღების ჩვეულებრივი მეთოდი იმაში მდგომარეობს, რომ ტუტე ლითონების ორთქლის ნაკადი წარიმართება ცხელ ძაფზე (მაღალი ტემპერატურა იფარავს დამცემ ატომთა მიწებებას ლითონის ზედაპირზე). შეიძლება აგრეთვე აღმოჩნდეს, რომ ლითონში სავალენტო დონე დასაწყისში თავისუფალი იყოს — ე. ი. გეკონდეს დადებითი იონი, რომელიც ლითონის ზედაპირს უახლოვდება. ამ შემთხვევაში ელექტრონს შეუძლია გადავიდეს ბარიერში გავლით ლითონიდან იონთან და განვი-



ნახ. 64.



ნახ. 65.

ტრალოს იგი, თუ-კი Φ ნაკლებია I -ზე. გასაგებია, რომ სწორედ ამაში მდგომარეობს ატომურ და მოლეკულარულ დადებით იონების ხეიტრალაზაციის პროცესი მათი მიახლოებისას ვაკუუმში მყოფ ელექტრონებთან. უარყოფითი იონები კი თავის ელექტრონებს ზემოდაღწერილისადმი შექცეული პროცესის შედეგად ჰკარგავენ.

მეორე მავალითის სახით დაუშვათ, რომ ჩვენ გვაქვს ლითონის ორი ნაჭერი, სწორედ ისევე, როგორც მე-44 ნახ-ზე წარმოდგენილ ამოცანაში, მხოლოდ ერთმანეთის მახლობლად მოთავსების ნაცვლად. დაემუხტოთ ერთი მათგანი მაღალ პოტენციალამდე მეორის მიმართ. მათზე გამავალ სწორის გასწვრივ ენერგეტიულ მრუდს ესლა ექნება 65 ნახ-ზე გამოხატულ მრუდის და არა, როგორც ეს წინადა იყო. 44 ნახ-ის მრუდის, სახე. უარყოფითად დატვირთულ ლითონის შესა-

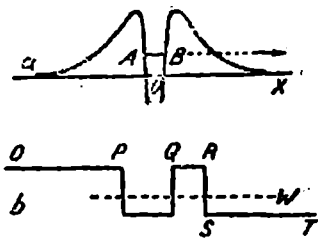
ბამ, მარცხენა პოტენციალურ ყუთში მყოფ ელექტრონების განხილვისას, შევნიშნავთ, რომ ისინი ყუთში რჩებიან მხოლოდ სამკუთხოვანი სახის პოტენციალური ბარიერის დახმარებით, რომელიც გადიდებული მასშტაბით x მრუდზეა ნაჩვენები. ამ აკრძალულ არეს სიგანე QR მით უფრო მცირე იქნება, რაც უფრო დიდია მიყენებული დაძაბულება. ასე ელექტრონებს შეუძლიათ ლითონის მიტოვება ოთახის ტემპერატურებზედაც. სინამდვილეში ბარიერის სიმაღლე უდრის ყოველ შემთავებაში ორ ელექტრონ-ვოლტს, ე. ი. ტუტე ლითონის გამოსვლის მუშაობის სიდიდეს, ხოლო QR სიგანე ის მანძილია, რომელზედაც ელექტრული პოტენციალი ორი ვოლტით ეცემა—ე. ი. თუ ველის დაძაბულება უდრის ერთ მილიონ ვოლტს სანტიმეტრზე, მაშინ QR ტოლი იქნება დაახლოებით 200 \AA . სამკუთხოვანი ბარიერი ცოტათი უფრო გამჭვირვალე იქნება ელექტრონებისთვის, ვიდრე იმავე სიგანის და 2 ვოლტის სიმაღლის შქონე სწორკუთხოვანი ბარიერი. მაგრამ, 23 გვ-ზე ჩატარებულ გამოთვლებზე დაყრდნობით, ჩვენ ტყუილად დაველოდებით ბარიერში გასვლათა მნიშვნელოვან რიცხვს იქამდე, ვიდრე მისი სიგანე არ გახდება 100 \AA -ზე გაცილებით ნაკლები. ცდების შედეგად ნაპოვნი იყო, რომ ლითონიდან ელექტრონების ამოვარდნის ეფექტი ოთახის ტემპერატურებზე გაზომვადი ხდება. როდესაც მოდებული ველის დაძაბულება 10^7 V/cm -ზე მეტია.

2. აკრძალულ სრეში. გაყონვის ყველაზე მეტად გასაოცარი მაგალითი ჩვენ გვაქვს რადიოაქტიურობის მოვლენაში, რომელიც მხოლოდ გამოცანა იყო კვანტური მექანიკის აღმოცენებამდე. მდგრადი გულები არსებობენ იმავე მიზეზით, რა მიზეზითაც სტაბილური ატომები ან მოლეკულები არსებობენ; ეს მიზეზი იმაში მდგომარეობს, რომ მათი შემადგენელი ნაწილაკები მოძრაობენ პოტენციალურ ყუთში. რადიოაქტიულ ელემენტებისთვის ყოველთვის აუხანელი იყო შემდეგი მდგომარეობა: გულას შემადგენელი ნაწილაკი, მას შემდეგ, რაც იგი რჩებოდა ყუთში წლებისა და დღეების განმავლობაში, უცებ გამოვარდებოდა მისგან ყოველგვარი ხილული მიზეზის გარეშე.

კვანტური მექანიკის დახმარებით, რომ შევისწავლოთ α ნაწილაკების გამოსროლის საკითხი, აუცილებელია ვიცოდეთ გულას ველში α -ნაწილაკის პოტენციალური ენერჯის ენერჯეტიული მრუდის სახე. სტაბილურ სისტემებისაგან განსხვავებით, რომლებიც უკვე განხილული იყვნენ ამ წიგნში, როგორც α -ნაწილაკს, ისე გულას აქვთ ერთიდაიგივე ნიშნის ტვირთები. სხვადასხვა ელემენტების გულათა მიერ α -ნაწილაკების გაფანტვის შესწავლამ გვაჩვენა, რომ მათ შორის მოქმედებს

განზიდვის ჩვეულებრივი კულუნური ძალა (ნახ. 46) მაგრამ დამტკიცებული იყო, რომ უფრო ახლო მანძილებზე ეს ინტენსიური განზიდვა უნდა გადავიდეს მიზიდვაში, რაც განსაზღვრავს გულათა სტაბილურ არსებობას, მიუხედავად მათი დიდი დაჯებიანი მუხტისა.

საქირო ენერგეტიული მრუდი ჰგავს 46 ნახ-ზე გამოხატულ მრუდს, მხოლოდ მას შუაში პოტენციალური ყუთი აქვს. 66 ნახ-ის ენერგეტიული მრუდის განხილვისას ადვილი შესამჩნევია, თუ რატომ შეიძლება არსებობდნენ სტაბილური და არა სტაბილური გულები. გულას შიგნით მყოფ ნაწილს, რომელსაც აქვს x : ლერძისქვემოდ მდებარე ჰორიზონტალური ხაზით გამოხაზული, W ენერგია, არ შეუძლია გამოვიდეს გარემოში კელ სივრცეში. მაგრამ იმ შემთხვევაში, როდესაც უფრო მაღალი დონე დაკავებული, როგორც, მაგ., AB , თუ განსახილავი წარმოდგენა სწორია, მდგომარეობა შეიძლება გამოიხატოს ყუთიდან „გამყოფი“ განაწილების სურათით; თუხდაც ეს საუკუნეთა განმავლობაში ხდებოდა.



ნახ. 66.

ამ ხერხით შეიძლება აეხსნათ რადიოაქტიულ ელემენტების არსებობა.

3. ვიდრე ამოცანათა ამ ტიპს დაუკავშირებდეთ მე-IX თავის ამოცანებს, განვიხილოთ საკითხის გადაწყვეტის უფრო პირდაპირი გზა; ავიღოთ 66 ნახ-ის b ენერგეტიული მრუდი, რომელზედაც ნაგულისხმევია, რომ ST და PO სწორები უსასრულობამდე გრძელდებიან ორივე მიმართულებით. PQ პოტენციალური ყუთი გამოყოფილია (კარიელ სივრციდან QR ბარიერით. განაწილების შესაძლო სურათების პოვნისას, ადვილად ვნახავთ, რომ ასეთი პოტენციალური ყუთისთვის არ არსებობს დისკრეტული დაკვანტული დონეები; 23 ნახ-ზე ψ მრუდი უნდა დაეცეს მაჩვენებლიანი კანონით ნულამდე, როგორც მარჯვნივ, ისე მარცხნივ. თუ უარს ვიტყვით ამ შემოფარგვლაზე, მაშინ დიფუზიონური მივალთ იმასთან, რომ W -ს ყველა მნიშვნელობებისთვის არსებობენ განაწილების დასაშვები სურათები. შეიძლება მათი დაყოფა ψ მრუდებზე, რომელთათვის ψ -ს ამპლიტუდა:
 ა) PQ -ში მცირეა ST -ში არსებულ ამპლიტუდასთან შედარებით
 ბ) PQ -ში მეტია გარეთ არსებულ ამპლიტუდებთან შედარებით.

რადგან ბარიერის ქვემოდ მდებარე ψ მრუდი (4) ფორმულით განსაზღვრება, ამიტომ ფარდობითი ამპლიტუდა გარე არეში დამო-

კიდებულია იმაზე, თუ რა უფრო მეტია D თუ Ce^{-kt} , სადაც $d = dK$ ბარიერის სიგანეა. კინეტიური ენერჯიის უმცირეს მნიშვნელობათათვის PQ -ს შიგნით ψ -ს ამპლიტუდა მე ჯად მცირეა, რადგან ტალღის სიგრძეები გაცილებით დიდებია იმისთვის, რომ ისინი, თუნდაც მიახლოებით ჩაეტიონ ყუთში. ენერჯიის ღირ მნიშვნელობებს თუ შევმართავთ, მივალთ არესთან, რომლისთვისაც ψ ფუნქცია ჩაეტევა PQ -ში D -ს მცირე მნიშვნელობებისათვის; ეს ვიწრო არე იმ დონის მახლობლად იმყოფება, რომელიც ქვედა შესაძლო დონე იქნებოდა PQ -სი, QR ბარიერი რომ უსასრულოდ განიერი ყოფილიყო. ყოველ განაწილების სურათს ამ არეში რხევა ექნება თავისი საკუთარი სიხშირით $\frac{W}{h}$ და, თუ განაწილების ასეთი სურათებისაგან ავაგებთ ტალღურ პაკეტს იმ ნაწილაკის ასაწერად, რომელიც საწყის მომენტში PQ ყუთშია, მაშინ მათ შორის მიიღება ფაზათა გადაწევა. რის შედეგადაც ამპლიტუდა PQ -ში ჩაქრება დროის მიხედვით.

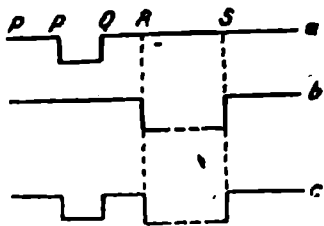
4. ეხლა თუ მიუბრუნდებით ფიზიკურ ამოცანებს, რომლებიც განიხილავენ ასეთ გაეონვას პოტენციალურ ბარიერში, ჩვენ ვნახავთ, რომ ეს გაეონვა არ შეიძლება მუდმივად გაგრძელდეს. გაეონვა წარმოადგენს ყოველ შემთხვევაში დროებით მოვლენას, გამოწვეულს იმ მდგომარეობით, რომ ენერგეტიული მრუდი ალებულ მომენტში განსხვავდება რომელიმე წინა პერიოდის ენერგეტიულ მრუდისაგან. 44 ნახ-ის შესაბამ ამოცანაში, ლითონის ორი ნაქერი ერთმანეთისაგან შორს იყვნენ და ელექტრონებმა მნიშვნელოვანი რაოდენობით გადასელა დაიწყეს ერთი ნაქერიდან მეორისაკენ მხოლოდ მათი დაახლოების შემდეგ.

64 ნახ-ზე ბარიერი ატომსა და ლითონს შორის მხოლოდ მაშინ ვიწროვდება, როცა ატომი დაუახლოვდება ზედაპირს. 65 ნახ-ზე ელექტრონები მხოლოდ მაშინ დაიწყებენ ამოვარდნას, როცა ენერგეტიული მრუდი საკმაოდ მოხვეული გახდება, მიყენებული დაძაბულების შედეგად. სწორედ ასევე 66 ნახ-ზე რადიოაქტიულ გულადან გაეონვა იწყება მხოლოდ იმ მომენტში, როდესაც რადიოაქტიულ მწკრივის წინამდებარე ატომი უკვე დაშლილია. მაგალითად რადიუმი P' (პოლონიუმი) გამოასხივებს α -ნაწილაკებს, ხოლო მისი წინამავალი რადიუმი E არ გამოასხივებს მათ (ყოველ შემთხვევაში იმ რაოდენობით, რომლის გაზომვა შესაძლო იქნებოდა). ცხადია, რომ E რადიუმის დაშლის შედეგად, ჩვენ მივიღებართ, ვთქვათ $t = 0$ მომენტში, 66, α ნახ-ზე გამოხატულ მდგომარეობასთან და, ამგვარად, α -ნაწილაკების განუწყვეტელი გაეონვა იწყება ამ მომენტიდან. ამ თვალსაზრისით (39) განტოლებით შეიძ-

ლება ვისარგებლოთ ფიზიკური პროცესის ასაწერად იმავეგვარად, როგორც მე-IX თავში; სახელდობრ შეიძლება პოტენციალური ენერჯიის პირვანდელი V მრუდი შევცვალოთ $V + v$ მრუდით. ვთქვათ, მაგალითად, 67 ნახ-ის a მრუდი იყოს საწყისი ენერგეტიული მრუდი იზოლირებულ პოტენციალური ყუთით.

PQ , რომელსაც დისკრეტული დონეები აქვს. თუ გამოვალთ PQ -ს ქვე და დონეზე მყოფი ნაწილაკიდან მშინ საწყისი მდგომარეობა საეს c .

განზღერული იქნება; ყუთის g ფუნქცია ეცემა მაჩვენებლიანი კანონით. დაუშვათ ეხლა, რომ პერტურბაციის ენერჯიის v მრუდს 67 ნახ-ის b მრუდის სახე აქვს, ასე რომ პერ-



ფ. ხ. 67.

ტურბაცია ნულისაგან განსხვავდება მხოლოდ R და S წერტილებს შორის. V და v მრუდების ორდინატების შეკრებით, ჩვენ მივიღებო c მრუდს ორ პოტენციალურ ყუთით. უფრო ხელსაყრელი იქნება დაშვება, რომ RS ყუთი გაცილებით განიერია PQ ყუთთან შედარებით; ვიღერე ეს ნახაზზეა გამოხატული, რადგან ამ დროს შესაძლო დონეები მეტად ურთიერთმახლობლად განლაგდებიან და აუცილებლად იქნება საწყის PQ დონესთან მახლობელი რამოდენიმე დონე. ეხლა დაუშვათ, რომ ეს RS ყუთი ჩნდება $t = 0$ მომენტში და ყველა მისი დონეები თავისუფალია.

ამოცანა მდგომარეობს იმ სიჩქარის პოვნაში, რომლითაც RS ყუთში განაწილების სურათი იზრდება იმის გამო, რომ RS გადაეფარება პირვანდელ Ψ_1 ფუნქციის ექსპონენციალურ „კულს“. როგორც მე-IX თავში გვქონდა, განვიხილოთ პირველად მხოლოდ ერთი შესაძლო საბოლოო მდგომარეობათაგანი, რომელიც (65)-თან შესადარებლად შეიძლება Ψ_2 -თი აღვნიშნოთ. იმ დროს, როდესაც, მე-IX თავში ორივე Ψ_2 და Ψ_1 ფუნქცია ეკუთვნოდნენ პირვანდელ ენერგეტიულ მრუდს V , ამ შემთხვევაში Ψ_2 არის v მრუდის შესაბამისი განაწილების სურათი და აკმაყოფილებს განტოლებას:

$$\frac{i\hbar}{2\pi} \frac{\partial}{\partial t} a_2 \Psi_2 + k \frac{\partial}{\partial x^2} a_2 \Psi_2 - v a_2 \Psi_2 = 0. \quad (78)$$

a_1 , Ψ_1 და V -სთვის მსგავსივე განტოლების დაწერით და (78)-თან მისე შეკრებით, მივიღებთ განტოლებას, რომელიც (65)-დან მხოლოდ იმით განსხვავდება, რომ $V a_2 \Psi_2$ წევრი შეცვლილია $v a_2 \Psi_2$

წევრით, ამ განტოლების გადაწყვეტას $V + v$ ფუნქციით ჩვენ იმავე მეთოდით მოვქმდებით, როგორც წინააღ. ამ დროს ჩვენ მივალთ განტოლებასთან, რომელიც (66) განტოლებიდან მხოლოდ იმით განსხვავდება, რომ $v a_2$, W_2 შეცვლილია გამოთქმით $V a_2$, W_2 ; ეს დაკავშირებულია იმასთან, რომ W_2 -სთვის PQ ყუთია „გარეშე“, ხოლო W_1 -სთვის — RS ყუთი.

მაგრამ დროის მოკლე შუალედის განმავლობაში a_2 მცირე რჩება a_1 -თან შედარებით, ასე რომ (68) განტოლება ისევ სამართლიანი აღმოჩნდება და წინანდებურად მიეყვება (69) განტოლებასთან. მიუხედავად ამ ამოცანისა და წინა ტიპის ამოცანის შორის განსხვავებისა, სუპერპოზიციის პრინციპი შეიძლება გამოვიყენოთ ზუსტად იმავე გვარად, როგორც წინააღ. $\frac{da_2}{dt}$ წარმოებული განსაზღვრავს იმის ალბათობას, რომ ნაწილაკი გაივლის ბარიერში და მოექცევა განხილულ დონეზე.

სიმარტივისთვის დაუშვათ, რომ პოტენციალური ენერგია, მას შემდეგ რაც იგი სწრაფად შეიცვალა V -დან ($V + v$)-მდე, მუდმივი რჩება დროის გარკვეულ შუალედის განმავლობაში. მაშინ, რადგან v არ არის დამოკიდებული დროზე, (70) გამოთქმა შეიძლება შემდეგი სახით გადავიწეროთ:

$$a_2 = \frac{2\pi}{i\hbar} \int \psi_2^* v \psi_1 dv \int_0^t e^{2\pi i \left| \frac{W_2 - W_1}{h} \right| t} dt. \quad (79)$$

რომ გადავწყვიტოთ იმის შესავსი ამოცანები, რომლებიც 65 და 66 ნახაზებზეა გამოხატული, რომლებშიც ამოვარდნილი ნაწილაკი თავისუფალია, აუცილებელი იქნება შემდეგში დაშვება, რომ RS ყუთი უსასრულოდ გრძელია; ამ შემთხვევაში შესაძლოა RS დონეები ჰქონიან განუწყვეტელ მწყობრს. ეთქვას W_2 იყოს რაიმე ენერგეტიული დონე, მახლობელი PQ ყუთის საწყის W_1 დონისა.

მამრაველი $e^{2\pi i \left| \frac{W_2 - W_1}{h} \right| t}$ (79)-ში ირხება დადებით და უარ-

ყოფით მნაშენელობებს შორის $\tau = \frac{h}{(W_2 - W_1)}$ რხევის პერიოდით; თუ იგი დროის განსახილავ მცირე შუალედის განმავლობაში რამოდენიმეჯერ იცვლის ნიშანს, მაშინ ინტეგრალის დადებითი და უარ-

ყოფითი წვევრები თითქმის მთლიანად აკომპენსირებენ ერთმანეთს, რის შედეგადაც ზისი სიდიდე მეტად მცირე იქნება. რომ ამ მამრავლმა ვერ შესძლოს რამოდენიმეჯერ ნიშნის შეცვლა ჩვენთვის საინტერესო დროის შუალედის განმავლობაში, აუცილებელია, რომ τ სიდიდე დიდი იყოს—რასაც შეიძლება ადგილი ჰქონდეს მაოლოდ იმ შემთხვევაში, თუ $(W_2 - W_1)$ სხვაობა მცირეა. განაწილების ერთადერთი სურათები, რომლებიც RS ყუთში იზრდებიან, ისინი არიან, რომლებსაც თითქმის ზუსტად ისეთივე ენერგია აქვთ, როგორც საწყისი W_1 ენერგიაა. (27) ფორმულის საფუძველზე უნდა ველოდეთ ენერგიის უმნიშვნელო განუზღვრელობას, რაც დამოკიდებულია დროის შუალედის სიდიდეზე.

(79) გამოთქმა გამოიყენება ნებისმიერი სახის პოტენციალურ ბარიერზე იმ პირობით, რომ ის მეტისმეტად მცირე არ იყოს. უნდა ველოდეთ, რომ გადასვლას ალბათობა შეეთანამება ნებისმიერი მასის მქონე ნაწილაკის აკრძალულ არეში გაქონის ალბათობის ჩვეულებრივ შეფასებას, რომელზედაც ლაპარაკი იყო მე III თავში 23 გვერდზე.

მაგალითად, 67 ნახ-ზე იგი იმისაგან უნდა იყოს დამოკიდებული, თუ რამდენად შორს ვრცელდება Ψ ფუნქციის ექსპონენციალური „კუდი“ R წერტილის იქეთ. (79) ფორმულა გვაჩვენებს, რომ ეს მართლაც ასეა. მართლაც რადგან v ყველაზე ნულის ტოლია RS არც გარდა, ამიტომ ინტეგრალის სიდიდე დამოკიდებული იქნება იმისგან, თუ რამდენად შორს ვრცელდება ამ არეში Ψ -ს „კუდი“. თუ QR მანძილი d -ს ტოლია; მაშინ გადასვლის ალბათობა პროპორციულია e^{-2kd} . პოტენციალური ბარიერები ჩვეულებრივ ძალიან ვანიერები არიან იმისთვის, რომ დაუშვან პროტონის მასაზე მეტი მასის მქონე ნაწილაკების გავლა. მაგრამ გულაში არიან 10^{-12} სანტიმეტრზე ნაკლები სიგანის მქონე ბარიერები, რომლებიც გაჰქვირვალე არიან α -ნაწილაკებისთვის. ნ α , ნახ-ზე გამოხატული ამოცანის განხილვის ყველა მეთოდები მიგვიითითებენ იმაზე, რომ სექუნდში ამოსვლის ალბათობა შეიძლება $v e^{-2kd}$ -ს ტოლად მივიღოთ; სადაც v —ყუთში ნაწილაკის რხევითი მოძრაობის სიხშირეა.

სასარგებლოა დამახსოვრება, რომ ერთი ელექტრონ-ვოლტის სიმალის მქონე და ერთი ონგსტრემი სიგანის მქონე პოტენციალურ ბარიერისთვის e^{-2kd} ელექტრონისთვის თითქმის ზუსტად e^{-1} ან $\frac{1}{e}$ -ს ტოლია (შეად. გვ. 23) ატომში მყოფ ელექტრონისთვის პირველი მიახლოებით შეიძლება შევიღოთ, რომ v უდრის 10^{15} რხევას

სეკუნდში და, აზგვარად, შეიძლება განვსაზღვროთ ბარიერში გასვლის ალბათობა.

V და v მრუდეების შემთხვევაში, ნახ. 67, ჩვენ საქმე გვექონდა ცალკეულ ნაწილაკის პოტენციალურ ენერგიასთან. ნაწილაკთა წყვილისთვის შეიძლებოდა გამოვსულიყავით ენერგეტიული ფართეულიდან. v ფართეულის დახმარებით მისი შეცვლის გზით, შეიძლებოდა ახალი არეების შემოკვანა, რომლებშიც V ფუნქცია ს. წყის მნიშვნელობაზე ნაკლებია. ამ შემთხვევაში შეიძლებოდა იმ სიჩქარის პოვნა, რომლითაც ორი ნაწილაკის წარმომადგენელი განაწილების სურათი „გაქონავს“ ამ არეებში.

5. ელექტრონების შეხლით და ა. შ. გამოწვეულ ალგზნების ამოცანებში, რომლებიც წინა თავში იყვნენ განხილულნი, ატომები და ელექტრონები გადადიოდნენ უფრო მაღალი W_2 ენერგიის მქონე მდგომარეობებში. ამისათვის აუცილებელი იყო, რომ v პერტურბაცია შეცვლილიყო დროის მიხედვით. მართლაც, როგორც ჩვენ ვხედავთ, (70) განტოლება მუდმივი v-ს დროს გადადის (79) განტოლებაში და უშვებს გადასვლის შესაძლებლობას მაოლოდ ერთიდაიგივე ენერგიის მქონე მდგომარეობათა შორის. აქ უნდა მოვიგონოთ, რომ სისტემას უფრო მაღალ დონეზე გადასვლა შეუძლია მხოლოდ რაიმე ენერგიის ხარჯზე. ენერგია შენარჩუნდება, და სინამდვილეში გადასვლა ხდება რომელიმე განსაზღვრულ მდგომარეობიდან ისეთივე ენერგიის მქონე მეორე მდგომარეობაში. შეხებით ალგზნების შემთხვევაში შემხლეი ნაწილაკი ჰქარგავს ენერგიის ისეთივე რაოდენობას, როგორსაც შეიძენს ატომი. თუ განვიხილავთ სისტემას მთლიანად, მაშინ გადასვლები ხდებიან ერთნაირ ენერგიის მქონე მდგომარეობათა შორის. მაშასადამე, ამ თავის მეთოდი ამოცანათა უმრავლესობისთვის უფრო ფუნდამენტალურია, ვიდრე მე-IX თავის მეთოდი. ჩვენ მიერ განხილული გასვლები პოტენციალურ ბარიერში—ეს მხოლოდ იმ მრავალ პროცესთაგანია, რომელზედაც გამოიყენება (79) განტოლება.

ჩვენ აღვნიშნავდით 5,7 და ა. შ. ნახაზებთან დაკავშირებით, რომ W ხაზი, მთლიანად V მრუდის ზემოდ მდებარე, გამოხატავს თავისუფალ ნაწილაკის ენერგიას. ერთი შეხედვით უნდა დავლოდებოდით, რომ W სიბრტყეს, V ფართეულზე გაცილებით მაღლა მდებარეს, თავისუფალ ნაწილაკთა წყვილი უნდა გამოეხატნა. სინამდვილეში-კი W ტოლია ორივე ნაწილაკის ენერგიათა ჯამის, ამასთან ერთად ერთ მათგანს შეიძლება თითქმის მთელი W ენერგია ჰქონდეს და თავისუფალი იყოს, ხოლო მეორე—შებმული იყოს პოტენციალური ყუთის ქვედა დონესთან. W-ს ასეთ მნიშვნელობას, გასაგებია, შეესაბამება რამოდენიმე მდგომარეობა ერთიდაიგივე ენერგიით

მართლაც თავისუფალ ნაწილაკს შეიძლება ჰქონდეს ცოტათი უფრო ნაკლები კინეტიური ენერგია, ხოლო მეორე — იმყოფებოდეს პირველთან უფრო მაღალ). აღგზნებულ დონეზე პოტენციალურ ყუთისა. ეს ორი მდგომარეობა გამოიხატება სხვადასხვა, ენერგიის ერთიანი იგივე მნიშვნელობის შესაბამ, ფუნქციით. თუ გადასვლა ხდება პირველ და მეორე მდგომარეობათა შორის, მაშინ ატომი აღიზნდება, ხოლო თავისუფალი ნაწილაკი ჰკარგავს სათანადო კინეტიურ ენერგიას. ბუნებრივია, რომ ასეთ გადასვლას ადგილი აქვს მხოლოდ იმ შემთხვევაში, როდესაც ნაწილაკები შეეხებიან. თუ ატომსა და თავისუფალ ნაწილაკს შორის ურთიერთქმედების ენერგიას აღვნიშნავთ μ -თი, მაშინ μ შეიძლება განვიხილოთ, როგორც აღგზნების მიზეზი. 62 ნახ ზე μ ფუნქცია გამოიხატებოდა მრუდით, რომელიც იკვლევებოდა დროის მიხედვით, აქ კი იგი წარმოადგენს დროისაგან დამოუკიდებელ ფართეულს (ან ექვს განზომილებიან ფართეულის ანალოგს). იმ შემთხვევაში, როდესაც μ იწვევს გადასვლას ψ_1 განაწილების სურათიდან (II_1 , ენერგიის შესაბამი) ψ_2 -ზე (II_2 ენერგიის შესაბამი) (79) განტოლების გამოყენება უზრუნველყოფს, რომ შემხლელი ნაწილაკის ენერგიის შემცირება შესაძრწევეად არ განსხვავდებაოდეს ატომის აღგზნების ენერგიისაგან.

დ ა მ ა ტ ე ბ ა .

შენიშვნა 1. ცენტრალური ძალები. განვიხილოთ ცენტრალურ ძალების შემთხვევა, როდესაც V მხოლოდ r -ზეა დამოკიდებული. 30 გვ. (9) განტოლება სფერულ კოორდინატებში ასეთ სახეს მიიღებს

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \varphi^2} + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \cdot \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \psi}{\partial \theta} \right) + \frac{8\pi^2 \mu}{h^2} (W - V) \psi = 0. \quad (1)$$

კარგად არის ცნობილი, რომ ამგვარი განტოლების ამოხსნა შეიძლება მიღებულ იქნას ნამრავლის სახით, სადაც ერთი მამრავლი მხოლოდ r -ის ფუნქციაა, ხოლო მეორე — მხოლოდ θ და φ -ს ფუნქცია. ვთქვათ $\psi = R(r) \cdot S(\theta, \varphi)$. ამ გამოთქმის ჩასმით (1)-ში და $\frac{r^2}{RS}$ -ზე გამრავლებით მივიღებთ:

$$\frac{1}{R} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \left[\frac{1}{S \sin^2 \theta} \frac{\partial^2 S}{\partial \varphi^2} + \frac{1}{S \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \cdot \frac{\partial S}{\partial \theta} \right) \right] + \frac{8\pi^2 \mu r^2}{h^2} (W - V) = 0. \quad (2)$$

კვადრატულ ფრჩხილებში მოთავსებული გამოთქმა არ არის დამოკიდებული r -ზე და მუდმივი უნდა იყოს; მას ნულოვანი განზომილება აქვს.

აღვნიშნოთ იგი. (λ)-თი; მაშინ

$$\frac{1}{S \sin^2 \theta} \frac{\partial^2 S}{\partial \varphi^2} + \frac{1}{S \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \cdot \frac{\partial S}{\partial \theta} \right) + G = 0. \quad (3)$$

ვთქვათ $S(\theta, \varphi)$ ისევ ნამრავლი იყოს, რომლის ერთი მამრავლი θ -ს ფუნქციაა, მეორე-კი — მხოლოდ φ -ს ფუნქცია, ე. ი.

$$S(\theta, \varphi) = \Theta(\theta) \cdot \Phi(\varphi).$$

ჩვენ მივიღებთ

$$\frac{1}{\Phi \sin^2 \theta} \frac{d^2 \Phi}{d\varphi^2} + \frac{1}{\Theta \sin^2 \theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \cdot \frac{d\Theta}{d\theta} \right) + G = 0. \quad (4)$$

თუ ეს გამოთქმა გავამრავლებთ $\sin^2 \theta$ -ზე, მაშინ პირველი წევრი θ -საგან დამოუკიდებელი გახდება და გაუტოლდება მუდმივ სიდიდეს, რომელიც ხელსაყრელობისთვის ($-m^2$)-ით აღვნიშნოთ. ამგვარად ჩვენ გვაქვს მარტივი განტოლება.

$$\frac{d^2 \Phi}{d\varphi^2} + m^2 \Phi = 0. \quad (5)$$

ეხლა (4) განტოლება მიიღებს ასეთ სახეს.

$$\frac{1}{\sin \theta} \cdot \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{d\Theta}{d\theta} \right) + \frac{d}{d\varphi} \left(G - \frac{m^2}{\sin^2 \theta} \right) \Theta = 0. \quad (6)$$

შევნიშნავთ, რომ როდესაც $\theta = 0$ გამოთქმა $\frac{1}{\sin^2 \theta}$ უსასრულოდ იქცევა და რომ ამოხსნა სასრულო რჩება G -ს მხოლოდ ზოგიერთ გარკვეულ მნიშვნელობებისათვის. ცნობილია რომ ეს მნიშვნელობანი უდრიან მთელ რიცხვებს: 0, 2, 6, 12 და ა. შ., რომელნიც განისახლვრებიან $G = l(l+1)$ დამოკიდებულებით, სადაც l — მთელი რიცხვია. ამას გარდა ერთი შეზღუდვაც არის, რაც იმაში მდგომარეობს, რომ m არ უნდა იყოს l -ზე მეტი და $-l$ -ზე ნაკლები.

თუ (2) განტოლებაში ფრჩხილებში მოთავსებული სიდიდეს ($-G$ -ს) ტოლად ვიგულისხმებთ, გვექნება:

$$\frac{1}{R} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \frac{8\pi^2 \mu r^2}{h^2} (W - V) - l(l+1) = 0. \quad (7)$$

ეს გამოთქმა შეიძლება გამარტივდეს, ახალ ფუნქციის $F(r) = r \cdot R(r)$ შემოტანით. მაშინ (7) განტოლება მიიღებს სახეს:

$$\frac{d^2 F}{dr^2} + \frac{8\pi^2 \mu}{h^2} \left(W - V - \frac{l(l+1)h^2}{8\pi^2 \mu r^2} \right) F = 0. \quad (8)$$

შენიშვნა 2. მაჩვენებლიანი ფორმის კომპლექსური ხიდადის გამოხატვა. ჩვენ გვაქვს:

$$e^x = 1 + x + \frac{x^2}{2!} + \frac{x^3}{3!} + \frac{x^4}{4!} + \dots$$

$$\cos x = 1 - \frac{x^2}{2!} + \frac{x^4}{4!} - \dots$$

$$\sin x = x - \frac{x^3}{3!} + \frac{x^5}{5!} - \dots$$

აქედან დაუყონებლივ გამოდინარეობს, რომ

$$\left. \begin{aligned} e^{i\theta} &= \cos \theta + i \sin \theta \\ e^{-i\theta} &= \cos \theta - i \sin \theta. \end{aligned} \right\} \quad (9)$$

$$\cos \theta = \frac{1}{2} (e^{i\theta} + e^{-i\theta}), \quad i \sin \theta = \frac{1}{2} (e^{i\theta} - e^{-i\theta}).$$

თუ $z = a + ib$, ხოლო $z^* = a - ib$, სადაც a და b — ორი ნებისმიერი ნამდვილი სიდიდეა, მაშინ z -სა და z^* -ს შეუღლებულები ეწოდებათ. დადებითი ნიშნით აღებული კვადრატული ძირს zz^* ნამკრავლიდან z -ის მოდული ეწოდება და $|z|$ -ით აღინიშნება. აღებულ შემთხვევაში $|z|^2 = a^2 + b^2$.

(9)-დან გამოდინარეობს, რომ $e^{i\theta}$ და $e^{-i\theta}$ კომპლექსური გამოთქმები შეუღლებულებია და მათი მოდული ერთის ტოლია.

მე-3 შენიშვნა. იმპულსთა ოპერატორები. (33)-დან გამოდინარეობს, რომ W -ს დროთი გადიფერენციალება ექვივალენტურია

$\frac{2\pi}{i\hbar} W$ -ზე გადამრავლების, ანუ

$$W = \frac{i\hbar}{2\pi} \frac{\partial}{\partial t}. \quad (10)$$

ეს დამოკიდებულება W , \hbar და t შორის ემსგავსება (27) დამოკიდებულებას:

$$\Delta W = \frac{h}{\Delta t}.$$

თუ ამ მსგავსებას რაიმე მნიშვნელობა აქვს, მაშინ ბუნებრივად ველოდით ანალოგიურ შედეგს (26)-სთვის:

$$\Delta p_x \approx \frac{h}{\Delta x}.$$

(10)-ს ანალოგიურადად შეიძლება გულვება, რომ

$$p_x = \frac{ih}{2\pi} \frac{\partial}{\partial x}, \quad p_y = \frac{ih}{2\pi} \frac{\partial}{\partial y}, \quad p_z = \frac{ih}{2\pi} \frac{\partial}{\partial z}.$$

ეს გამოთქმები შეტად მნიშვნელოვანი არიან შრედინგერის განტოლების აზრის გასაგებად.

დავიწყოთ იმით, რომ სრული ენერგია W პოტენციალური ენერგიის V და კინეტიური ენერგიის $\frac{1}{2} mv^2 = \frac{(mv)^2}{2m} = \frac{p^2}{2m}$ ჯამს უდრის:

$$W = V + \frac{p^2}{2m}$$

$$p_x^2 + p_y^2 + p_z^2 - 2m(W - V) = 0.$$

p_x, p_y, p_z -ის მნიშვნელობათა ჩასმით მივიღებთ -

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} + \frac{8\pi^2m}{h^2} (W - V) = 0. \quad (11)$$

აქ ϕ -ს ჩასმით მივიღებთ ზუსტად შრედინგერის განტოლებას (?). მე-4 შენიშვნა. ორი არააუთიქტოროზმემედ ნაწილაკის ხისტიყვა. ვთქვათ m_1 მასის მქონე ნაწილაკი მოძრაობს წრფეხაზის გასწვრივ, მიაი მანძილი კოორდინატთა სათაიდან უდრის x_1 , ხოლო პოტენციალურ ენერგიას ამ ხაზის გასწვრივ აქვს $V_1(x_1)$ სიხე.

შეორე m_2 მასიანი ნაწილაკისთვის, რომელიც აგრეთვე წრფეხაზზე მოძრაობს, მანძილი კოორდინატთა სათაიდან x_2 -თი აღვნიშნოთ, ხოლო პოტენციალური ენერგია $V_2(x_2)$ -ით. ევგულვოთ. რომ

ეს ნაწილაკები ურთიერთ არც მიიზიდებიან და არც განიზიდებიან: მაშინ მათი განაწილების სურათები განისაზღვრებიან განტოლებებით

$$\frac{1}{m_1} \frac{d^2 \psi_1}{dx_1^2} + \frac{1}{g} (W_1 - V_1) \psi_1 = 0.$$

$$\frac{1}{m_2} \frac{d^2 \psi_2}{dx_2^2} + \frac{1}{g} (W_2 - V_2) \psi_2 = 0.$$

სადაც

$$g = \frac{\hbar^2}{8\pi^2}.$$

პირველი ამ განტოლებათაგან ψ_2 -ზე გავემრავლოთ, მეორე ψ_1 -ზე და შევკრიბოთ:

$$\frac{\psi_2}{m_1} \frac{d^2 \psi_1}{dx_1^2} + \frac{\psi_1}{m_2} \frac{d^2 \psi_2}{dx_2^2} + \frac{1}{g} (W_1 + W_2 - V_1 - V_2) \psi_1 \psi_2 = 0. \quad (12)$$

რადგან ψ_2 არ არის დამოკიდებული x_1 -ზე, ამიტომ $\psi_2 \frac{d^2 \psi_1}{dx_1^2}$ ტოლია $\frac{d^2}{dx_1^2} \psi_1 \psi_2$. იგივე ითქმის მეორე წევრზეც. აქედან გამომდინარეობს, რომ თუ შემოვიტანთ აღნიშვნებს

$$W_1 + W_2 = W, \quad V_1 + V_2 = V(x_1, x_2).$$

მაშინ (12) მიიღებს სახეს:

$$\frac{1}{m_1} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x_1^2} + \frac{1}{m_2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x_2^2} + \frac{1}{g} (W - V) \psi = 0, \quad (13)$$

სადაც $\psi = \psi_1 \psi_2$. ჩვენ დავამტკიცეთ, რომ ურთიერთ არმომქმედ ყოველი წყვილი ნაწილაკებისთვის ψ ფუნქცია ტოლია ცალკეულ ფუნქციათა ნამრავლის, რაც ეთანხმება ზოგად თეორემას ორ დამოუკიდებელ დაკვირვებად სიდიდეთა შესახებ (55) და (56).

რადგან V მხოლოდ ჯამია V_1 და V_2 -ს, ამიტომ (13) მხოლოდ აერთიანებს იმ ორ განტოლებას, რომელთაგანაც გამოვედით ჩვენ.

მე-5 შენიშვნა. ორ ურთიერთმომქმედ ნაწილაკის სისტემა განვიხილოთ ორი ურთიერთმომქმედი ნაწილაკი, რომლებიც, თუ თვითონ მათ არ მივიღებთ მხედველობაში, სიცარიელეში იმყოფებიან. პო-

ტენციალური ენერგია დამოკიდებულია მხოლოდ ერთმანეთს შორის მანძილზე და არა სიმძიმის ცენტრის მდებარეობაზე. ვთქვათ ისინი მოძრაობენ ერთიდაიგივე წრფეხაზის გასწვრივ. მივიღებთ-რა ამ ხაზზე მდებარე რომელიმე წერტილს, მათი კოორდინატების საერთო სათავედ, ვიგულოთ, რომ მათი დაშორებანი სათავედან უდრიან x_1 და x_2 -ს. მათი სიმძიმის ცენტრის დაშორება კოორდინატთა სათავედან X -ით აღვნიშნოთ, ასე რომ $(m_1 + m_2) X = m_1 x_1 + m_2 x_2$, და ξ -თ მანძილი ურთიერთ შორის: $\xi = x_2 - x_1$. პოტენციალური ენერგია დამოკიდებულია მხოლოდ ξ -ზე და შეიძლება წარმოვიდგინოთ

$$V = V_0 + V(\xi),$$

სახით. აქ V_0 მუდმივია, რომელიც ნულოვან ენერგიაზე დამოკიდებული და შევთანხმდეთ, რომ V -ს ათვლას ამ სიდიდიდან მოვახდენთ.

მაგრამ

$$\frac{\partial}{\partial x_1} = \frac{\partial X}{\partial x_1} \frac{\partial}{\partial X} + \frac{\partial \xi}{\partial x_1} \frac{\partial}{\partial \xi} = \frac{m_2}{m_1 + m_2} \frac{\partial}{\partial X} - \frac{\partial}{\partial \xi}.$$

საიდანაც:

$$\frac{\partial^2}{\partial x_1^2} = \left\{ \frac{m_2}{m_1 + m_2} \frac{\partial}{\partial X} - \frac{\partial}{\partial \xi} \right\}^2$$

$$\frac{\partial^2}{\partial x_2^2} = \left\{ \frac{m_1}{m_1 + m_2} \frac{\partial}{\partial X} + \frac{\partial}{\partial \xi} \right\}^2.$$

ამ გამოთქმათა (13)-ში ჩასმით და (37)-ით სარგებლობით ჩვენ მივიღებთ.

$$-\frac{i\hbar}{2\pi} \frac{\partial \Psi}{\partial t} + V\Psi - \frac{g}{M} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial X^2} - \frac{g}{\mu} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \xi^2} = 0, \quad (14)$$

სადაც M - სრული მასა ($M = m_1 + m_2$), ხოლო μ - დაყვანილი მასა ($\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$).

(14) განტოლება შეიძლება ორ განტოლებამდე დავეყვანოთ იმავე მეთოდის დახმარებით, რომელიც (1) განტოლების გარდასაქმნელია

იყო გამოყენებული. ვიგულისხმობთ, რომ Ψ წარმოადგენს ნამრავლს, რომლის ერთი მამრავლი Ψ_a მხოლოდ ნაწილაკთა სიმძიმის ცენტრის მდებარეობის ფუნქციაა, ხოლო მეორე Ψ_b — ფუნქციაა მხოლოდ ურთიერთშორის მანძილის

$$\Psi = \Psi_a(X) \cdot \Psi_b(\xi). \quad (15)$$

(15)-ის (14)-ში ჩასმით და Ψ_a -ზე გაყოფით მივიღებთ:

$$\begin{aligned} & -\frac{i\hbar}{2\pi} \frac{\partial \Psi_b}{\partial t} + V \Psi_b - \frac{g}{\mu} \frac{\partial^2 \Psi_b}{\partial \xi^2} + \\ & + \left[-\frac{i\hbar}{2\pi \Psi_a} \frac{\partial \Psi_a}{\partial t} - \frac{g}{M \Psi_a} \frac{\partial^2 \Psi_a}{\partial X^2} \right] \Psi_b = 0. \end{aligned}$$

ფრჩხილებში მოთავსებული გამოთქმა მხოლოდ X -ის ფუნქციაა, ხოლო სხვა წევრები, $V \Psi_b$ -ს ჩათვლით — მხოლოდ ξ -ის ფუნქციაა. მაშასადამე, ფრჩხილებში მყოფი გამოთქმა მუდმივი უნდა იყოს. მას ენერჯიის განზომილება აქვს. თუ მას $(-V_0)$ -ის ტოლა ავიღებთ, მაშინ მივიღებთ შემდეგი ორ მარტივ განტოლებას:

$$-\frac{i\hbar}{2\pi} \frac{\partial \Psi_a}{\partial t} + V_0 \Psi_a - \frac{g}{M} \frac{\partial^2 \Psi_a}{\partial X^2} = 0. \quad (16)$$

$$-\frac{i\hbar}{2\pi} \frac{\partial \Psi_b}{\partial t} + V(\xi) \Psi_b - \frac{g}{\mu} \frac{\partial^2 \Psi_b}{\partial \xi^2} = 0. \quad (17)$$

თუ შევადარებთ (16)-ს (39)-თან, ჩვენ ვხედავთ, რომ იგი წარმოადგენს უბრალოდ განტოლებას იმ ნაწილაკისთვის, რომლის მასა არის $m_1 + m_2$ და რომელზედაც არ მოქმედებენ გარეშე ძალები.

მე-6 შენიშვნა. (52) ფორმულის გამოყენების საზღვრები. რომ გავიგოთ, თუ რა პირობებში იძლევა $\psi_A \pm \psi_B$ ჯამი ან სხვაობა კარგ მიახლოებას განაწილების წესიერ სურათებთან, როგორც ეს 50 ნახ-ზეა, ჩვენ შეგვიძლია გავიმეოროთ (78) განტოლების შემთხვევაში გამოყენებული მსჯელობა. ავიღოთ ენერგეტიული მრუდი — ერთი PQ პოტენციალურ ყუთით და მეორე — RS პოტენციალურ ყუთით (ნახ. 67); აღვნიშნოთ ისინი V_A და V_B -თი V და U -ს ნაცვლად. განტოლებას, რომელსაც ψ_A აკმაყოფილებს, აქვს სახე

$$\frac{d^2 \psi_A}{dx^2} + kV \psi_A - kV_A \psi_A = 0 \quad (18)$$

V_B -ს შემცველ განტოლების, ამოწერის შემდეგ, რომელსაც ψ_B აკმაყოფილებს, იგი ჯერ შევკრიბოთ (18) განტოლებასთან და შემდეგ გამოვაყოთ მას; შედეგად ჩვენ მივიღებთ:

$$\frac{d^2}{dx^2} (\psi_A \pm \psi_B) + k W' (\psi_A \pm \psi_B) - k (V_A \pm V_B) (\psi_A \pm \psi_B) = 0. \quad (19)$$

რადგან ჩვენ ვეძებთ ორ ყუთიან ($V_A + V_B$) პოტენციალური ენერჯიის შესაფერ სურათს, (19) განტოლება შეიძლება შევედაროთ გამოთქმას;

$$\frac{d^2}{dx^2} (\psi_A \pm \psi_B) + k W' (\psi_A \pm \psi_B) - k (V_A + V_B) (\psi_A \pm \psi_B), \quad (20)$$

რომელიც ნულს ეტოლებოდა, რომ $(\psi_A \pm \psi_B)$ გამოთქმები წარმოადგენდნენ განაწილების დასაშვებ სურათებს.

ჩვენ ვხედავთ, (20) განსხვავდება წინა გამოთქმისაგან იმით, რომ აქ შედის ზედმეტად ორი წევრი $V_B \psi_A$, და $V_A \psi_B$, რომლებიც აქლია (19)-ს. თუ რაიმე კერძო შემთხვევაში ეს ზედმეტი წევრები მეტად მცირენი აღმოჩნდებიან, მაშინ ნამდვილი განაწილების სურათები შესაძლებელად არ განსხვავდებიან $(\psi_A + \psi_B)$ და $(\psi_A - \psi_B)$ -საგან. (50) და (67) ნახ-თან დაბრუნებისას, ჩვენ ვხედავთ, რომ რადგან ყუთები ერთმანეთისაგან დიდ მანძილზე არიან, მითითებული პირობები სრულდებიან ამ სურათებზე. განმარტების მიხედვით V_A განსხვავდება ნულისაგან მხოლოდ P და Q შორის, სადაც ψ_A მცირეა; სწორედ ასევე V_B განსხვავდება ნულისაგან მხოლოდ R და S შორის, სადაც ψ_B მცირეა. მაშასადამე, სუპერპოზიციის პრინციპის თანახმად გამოსარიცხ ნამრავლებს არა აქვთ მნიშვნელობა, ხოლო ორივე გამოთქმა $(\psi_A + \psi_B)$ და $(\psi_A - \psi_B)$ კარგი მიახლოებაა ნამდვილ განაწილების სურათებთან. ეხლა ადვილი საპოვნია თუ რატომ ხდება მიახლოება სულ უარესი ყუთების დაახლოების დროს. —

მე-7 შენიშვნა. (58) ფორმულის გამოყვანა. ვთქვათ, რო- როდესაც V იცვლება x სიდიდით ყოველი პირვანდელი დონე W_n გადადგილდებოდეს და იღებდეს ცოტათი განსხვავებულ მნიშვნელობას ($W_n + \delta W_n$), ხოლო შესაბამისი ψ_n ფუნქცია გადადიოდეს ოდნავ განსხვავებულ ფუნქციაში ($\psi_n + \delta \psi_n$). ჯერ ჩვენ ვაჩვენებთ, რომ ყველა δW_n განისაზღვრება (58) ინტეგრალით, რომელიც სუპერპოზიციის პრინციპიდან მიიღება, ხოლო შემდეგ შევცვლით ყველა ψ_n -ს, მიუმატებთ-რა ყველაზე მეტად შესაფერის მცირე „რაოდენობებს“

სხვა პირვანდელ განაწილების სურათებისა. განვიხილოთ რომელიმე განსაზღვრული დონე: ვთქვათ დონე H'_2 [იხ. 61]. დონეთა მთელი რიგი ერთად რომ არ განვიხილოთ, შევცვალოთ ჯერ ψ_2 ფუნქცია: მასზე მხოლოდ ψ_1 და ψ_3 -ის რაიმე რაოდენობის მიმატებით, ე. ი.

$$\psi'_2 = \psi_2 + \varphi_2.$$

სადაც

$$\varphi_2 = a_1 \psi_1 + a_3 \psi_3. \quad (21)$$

ყოველი პირვანდელი განაწილების სურათი აკმაყოფილებს (9) განტოლებას, რომელიც შეიძლება შემოკლებული სახით ჩავწეროთ შემდეგნაირად:

$$\left(\frac{1}{h} \nabla^2 - V \right) \psi_n = - W_n \psi_n, \quad (22)$$

მაშინ როდესაც შეცვლილი განაწილების სურათი აკმაყოფილებს განტოლებას

$$\frac{1}{h} \nabla^2 (\psi_n + \varphi_n) - (V + \epsilon) (\psi_n + \varphi_n) + (W_n + w_n) (\psi_n + \varphi_n) = 0. \quad (23)$$

რადგან w და ϵ -ს ცვლილებანი მცირენი უნდა იყვნენ, ამიტომ შესაძლოა $w\varphi$ და $\epsilon\psi$ ხამრავლების უგულებელყოფა. (23)-დან (22)-ის გამოკლებით და $n = 2$ ჩათვლით, მივიღებთ განტოლებას, რომელსაც φ_2 აკმაყოფილებს:

$$\left(\frac{1}{h} \nabla^2 - V \right) \varphi_2 + W_2 \varphi_2 + w_2 \psi_2 = \epsilon \psi_2. \quad (24)$$

(24)-ში (21)-ის ჩასმით მივიღებთ:

$$a_1 \left(\frac{1}{h} \nabla^2 - V \right) \psi_1 + a_3 \left(\frac{1}{h} \nabla^2 - V \right) \psi_3 + W_2 a_1 \psi_1 + W_2 a_3 \psi_3 + w_2 \psi_2 = \epsilon \psi_2. \quad (25)$$

ეხლა ჩვენ ვხედავთ, რომ (22)-ის თანახმად, (25)-ის პირველი წევრი — $a_1 W_2 \psi_1$ -ის ტოლია, ხოლო მეორე წევრი — $a_3 W_2 \psi_3$ ტოლი. მაშასადამე (25) მიიღებს სახეს:

$$a_1 (W_2 - W_1) \psi_1 + a_3 (W_2 - W_3) \psi_3 + w_2 \psi_2 = \epsilon \psi_2. \quad (26)$$

ენახოთ ესლა, რა მიიღება თუ ჩვენ ამ განტოლების ყოველ წევრს ψ_2^* -ზე გავამრავლებთ და გავაინტეგრალებთ შიგნით სივრცეში, როგორც ეს (64)-ში იყო მოხდენილი. რადგან ψ_1 , ψ_2 და ψ_3 ეკუთვნიან ერთსადაიმევე სისტემას, ამიტომ ისინი ორთოგონალური არიან და პირველი ორი წევრი ინტეგრაციის დროს ნულად იქცევა. მესამე წევრი გაუტოლდება π_2 -ს. მაშასადამე

$$H_2' - H_2 = \pi_2 = \int v \psi_3^* \psi_3 dV,$$

ე. ი. ჩვენ სწორედ „გადაფარვის ინტეგრალი“ მივიღეთ.

გასაგებია, ჩვენ იმავე შედეგს მივზღვდით, თუ (21)-ში ორ წევრს კი არა, არამედ წევრთა უსასრულო რიცხვს ავიღებდით.

ენახოთ ესლა რა მიიღება, თუ ჩვენ (26) ψ_1^* -ზე გავამრავლებთ და ისევ გავაინტეგრალებთ შიგნით სივრცეში. ამ დროს მეორე და მესამე წევრი გადაიქცევა ნულად და ჩვენ მივიღებთ

$$a_1 (H_2 - H_1) = \int \psi_1^* \psi_1^* dv = \int \psi_1^* v \psi_2 dV.$$

მაშასადამე (61)-ში ჩასასმელად საუკეთესოა π_1 -ს ის მნიშვნელობა, რომელიც ორივე ენერჯიის შეფარდებას უდრის:

$$a_1 = \frac{1}{H_2 - H_1} \int \psi_1^* v \psi_2 dV. \quad (27)$$

π_1 სიდიდის პოვნა შეიძლება, (26)-ის ψ_3^* -ზე გამრავლებით და შიგნით სივრცეში გაინტეგრალებით; შედეგი აგრეთვე არ იქნება დამოკიდებული (26)-ში შემავალ წევრთა რიცხვისაგან. ყველა π_n სიდიდეთა პოვნა შეიძლება იმავე ხერხით, თუ-კი დონეები არ არიან გადაგვარებულნი.

ნორმალურ მდგომარეობაში ატომთა ელექტრონული კონფიგურაციები და იონიზაციის პოტენციალები

		K		L		M			N			იონიზაციის პოტენციალი Φ ელექტ. ვოლტებში
		1 s	2s	2p	3s	3p	3d	4s	4p	4d		
H	1	1										13,53
He	2	2										21,47
Li	3	2	2									5,37
Be	4	2	2									9,28
B	5	2	2	1								8,26
C	6	2	2	2								11,22
N	7	2	2	2								14,48
O	8	2	2	4								13,55
F	9	2	2	5								18,6
Ne	10	2	2	6								21,47
Na	11	10 ნეონის ტიპის ჩაკეტილი გარსი.				1						5,12
Mg	12					2						7,61
Al	13					2	1					5,98
Si	14					2	2					8,12
P	15					2	3					10,3
S	16					2	4					10,4
Cl	17					2	5					12,96
A	18					2	6					15,68
K	19	18 არგონის ტიპის ჩაკეტილი გარსი							1			4,32
Ca	20								2			6,09
Sc	21						1		2			6,7
Ti	22						2		2			6,81
V	23						3		2			6,76
Cr	24						5	1	1			6,74
Mn	25						5	2	2			7,41
Fe	26						6	2	2			7,83
Co	27						7	2	2			8,5
Ni	28						8	2	2			7,81
Cu	29						10	1	1			7,68
Zn	30	28 სპილენძის ტიპის შინაგანი გარსები							2			9,36
Ga	31								2	1		5,97
Ge	32								2	2		8,09

ს ა რ ჩ ი ვ ი

	გვ.
თავი I. ენერგეტიული მრუდები. ატომთა და მოლეკულათა ენერჯიის სიდიდე	1
„ II. ფიზიკის და ქიმიის ახალი ენა	9
„ III. ტალღური განტოლება. წყალბადის ატომი. ელექტრონის მაგნიტური მომენტი და სპინი. უმარტივესი ამოცანები	20
„ IV. განუზღვრელობის პრინციპი. მრავალნაწილაკთა შემცველი სისტემები. ელემენტთა პერიოდული სისტემა და ელექტრონული კონფიგურაციები. ლითონები	57
„ V. ნაწილაკთა მოძრაობა	77
„ VI. ორი ნაწილაკის ურთიერთმოქმედება. ორატომიანი მოლეკულა	96
VII. დამოუკიდებელი დაკვირვებადი სიდიდეები. ორი ერთგვარი ატომისაგან შემდგარი მოლეკულები. ვალენტური ბმა	115
VIII. ელექტრონები კრისტალებში. იზოლიატორები და გამტარები	129
„ IX. პერტურბაციათა თეორია	140
„ X. პერტურბაციათა თეორია. ფიზიკურ მოვლენათა აღწერა	160
დამატება	170

თარგმნილი რუსულ გამოცემიდან **მ. ჩიტაიას** მიერ

რედაქტორი: **მ. მამასახლისოვი**

ტექრედაქტორი: ვ. ბოლქვაძე

კორექტორი: გ. ჩიტაია

შეკვ. № 135.

მთავ. № 2151

გადაცა წარმოებას 25 VII 37

ხელმოწ. დასაბუქდ. 25 II 38

აწყ. ზომა 6 × 10

ქალ. ზომა 62 × 94

საქ. კ. პ. (ბ) ც. კ. გა-ბა, სტამბა „კომუნისტი“ კამოს ქ. № 68.