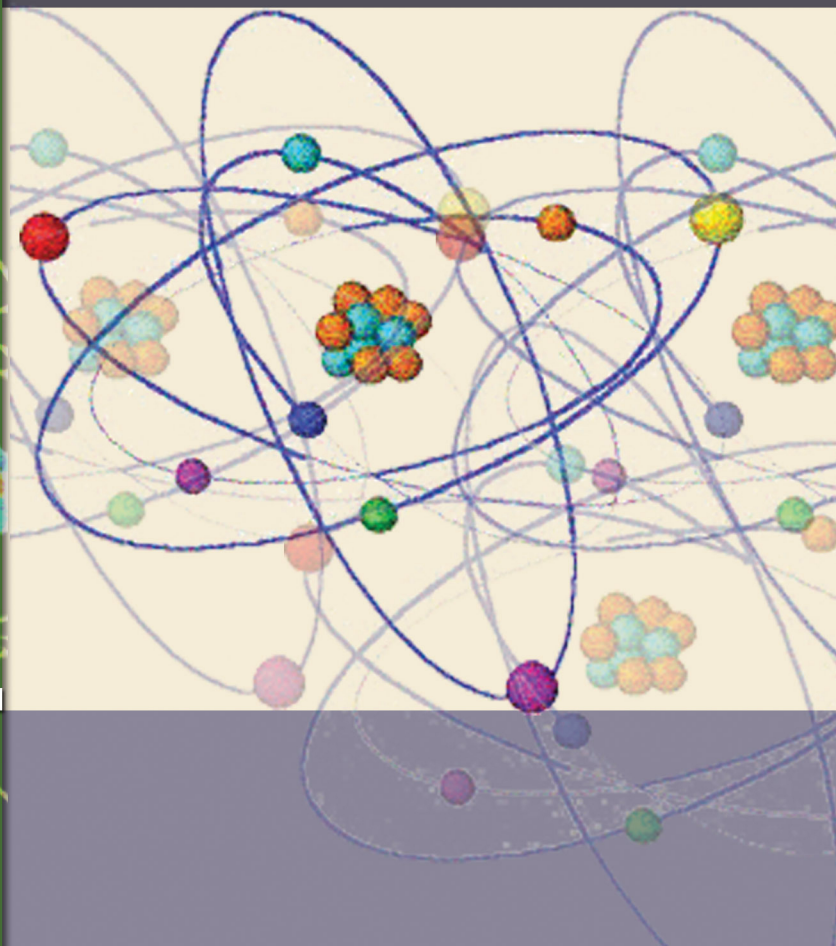


ზაალ მაჭავარიანი

ატომური ფიზიკა



საქართველოს ენციკლოპედიის გამომცემი ბიბლიოთეკა

ატომური ფიზიკა

ივანე ჯავახიშვილის სახელობის
თბილისის სახელმწიფო უნივერსიტეტი

ზაალ მაჭავარიანი

ატომური ფიზიკა



უნივერსიტეტის
გამოცემლობა

წინამდებარე ნაშრომი წარმოადგენს ივანე ჯავახიშვილის სახელობის თბილისის სახელმწიფო უნივერსიტეტის ზუსტ და საბუნებისმეტყველო მეცნიერებათა ფაკულტეტის ფიზიკის მიმართულების საბაკალავრო სავალდებულო სალექციო კურსის – ატომისა და ატომბირთვის ფიზიკის დამხმარე სახელმძღვანელოს. იგი განკუთვნილია, უპირველეს ყოვლისა, ფიზიკის მიმართულების ბაკალავრიატის სტუდენტებისათვის. წიგნის წასაკითხად აუცილებელია უმაღლესი მათემატიკისა (კალკულუსი II) და ზოგადი ფიზიკის საფუძვლების ცოდნა. წიგნის მთავარი დანიშნულებაა სტუდენტი აზიაროს მიკროსამყაროს ძირითად კანონზომიერებებს და დაანახოს მისთვის ჩვეული კლასიკური აზროვნებიდან კვანტურზე გადართვის აუცილებლობა. თუმცა კვანტური მექანიკის მათემატიკური აპარატი წიგნში მინიმალური აუცილებელი დოზით არის გადმოცემული, რათა მკითხველს გაუადვილდეს, პირველ რიგში, მოვლენის ფიზიკური არსის გააზრება.

წიგნი ასევე სასარგებლო იქნება ატომური ფიზიკის საფუძვლებით დაინტერესებული მკითხველისთვისაც.

რედაქტორები: თსუ-ის ასოც. პროფ. გიორგი ციციშვილი
თსუ-ის ასისტ. პროფ. ზაზა ტოკლიკიშვილი

რეცენზენტები: თსუ-ის ასისტ. პროფ. მალხაზ გოჩიტაშვილი
თსუ-ის ასისტ. პროფ. თეიმურაზ ნადარეიშვილი

გამოცემულია ივანე ჯავახიშვილის სახელობის თბილისის სახელმწიფო უნივერსიტეტის საუნივერსიტეტო საგამომცემლო საბჭოს გადანყვეტილებით.

© ივანე ჯავახიშვილის სახელობის თბილისის
სახელმწიფო უნივერსიტეტის გამომცემლობა, 2018

ISBN 978-9941-13-722-8 (pdf)

შინაარსი

წინასიტყვაობა	9
თავი 1. ატომის აგებულების ძირითადი საფუძვლები	11
ადრეული პერიოდი ატომის ისტორიაში	11
ატომები და მოლეკულები	13
ავოგადროს კანონი. მოლეკულური და ატომური მასა	14
ავოგადროს რიცხვი	15
ატომებისა და მოლეკულების ზომები	16
ელექტროობის ბუნება	17
ელექტროლიზის მოვლენა. ფარადეის რიცხვი	17
ელემენტარული მუხტი და მისი სიდიდე	19
ელექტრონის მუხტის, მასის და ზომების განსაზღვრა	19
თავი 2. აბსოლუტურად შავი სხეულის გამოსხივება	22
რელიე-ჯინსისა და ვინის ფორმულები	24
მოცულობის ერთეულში ოსცილატორების რიცხვის გამოთვლა	25
მოდების რაოდენობა	27
კლასიკური ოსცილატორის საშუალო ენერგია	28
კვანტური ოსცილატორის საშუალო ენერგია	29
პლანკის ფორმულის ზღვრული შემთხვევები	31
ვინის წანაცვლების კანონი	31
მაქსიმუმის სიხშირე ტალღის სიგრძეთა სკალაზე	33
თავი 3. სტეფან-ბოლცმანის კანონი	34
ენერგიის ინტეგრალური სიმკვრივე	34
ინტენსივობა	35
სიმეტრიის გათვალისწინება	37
გამოსხივების ნაკადი	37
საშუალო ინტენსივობა	39
ინტენსივობა და ენერგიის სიმკვრივე	39
სტეფან-ბოლცმანის ფორმულა	40
თავი 4. გამოსხივების კორპუსკულური თვისებები	41
ფოტოეფექტი	41
დამუხრუჭებითი რენტგენული გამოსხივება	48
კომპტონის ეფექტი	50
კომპტონის ეფექტის ახსნა	52
თავი 5. ატომის აგებულების პლანეტარული მოდელი	54
ტომსონის მოდელი	54
რეზერფორდის ცდა	55
ბორის პოსტულატები და შესაბამისობის პრინციპი	62
წყალბადისმაგვარი ატომის ენერგია	63
წყალბადის ატომის იზოელექტრონული მიმდევრობა	68
ფრანკისა და ჰერცის ცდა	69

თავი 6. წყალბადისმაგვარი სისტემების სპექტრები	72
წყალბადის ატომის სპექტრალური სერიები	72
თავი 7. კორპუსკულურ-ტალღური დუალიზმი	76
ნაწილაკთა ტალღური თვისებები	76
კავშირი იმპულსსა და გარდატეხის მაჩვენებელს შორის	77
დე-ბროილის ტალღა	78
ელექტრონების დიფრაქცია	79
თავი 8. ტალღური პაკეტი	83
ფაზური სიჩქარე	83
ჯგუფური სიჩქარე	83
ნაწილაკი როგორც ტალღური პაკეტი	86
ტალღური პაკეტის განშლადობა	87
დოპლერის გაგანიერება	88
გრაფიტაციული წითელი წანაცვლება	91
თავი 9. განუზღვრელობის თანაფარდობები	93
კლასიკურიდან კვანტურ მექანიკაზე გადასვლა	93
სპექტრული ხაზების რადიაციული გაგანიერება	94
ნაწილაკი და ტალღა – როგორც ობიექტის ორი ზღვრული შემთხვევა	95
ატომის მდგრადობის საკითხი	96
თავი 10. კვანტური მექანიკის ელემენტები	98
შრედინგერის განტოლება	98
ტალღური ფუნქცია	101
ფიზიკურ სიდიდეთა შესაბამისი ოპერატორები	103
ფიზიკური სიდიდის საშუალო მნიშვნელობა	104
შრედინგერის სტაციონალური განტოლება	105
თავი 11. ორბიტალური კუთხური მომენტი	109
ორბიტალური კუთხური მომენტის ოპერატორი	109
მდგომარეობის ლუნობა	115
თავი 12. წყალბადის ატომი კვანტურ მექანიკური აღწერა	116
დაყვანილი მასა	116
ახალი პარამეტრები	118
სფერული ცვლადების განცალება	118
ეფექტური პოტენციალი	119
რადიალური ტალღური ფუნქციის გამოთვლა	120
ტალღური ფუნქციის ნორმირება და ელექტრონის აღმოჩენის ალბათობა	125
თავი 13. წყალბადის ატომის სპექტრისფაქიზი და ზეფაქიზი სტრუქტურა. სპინ-ორბიტალური ურთიერთქმედება	128
მაგნიტომექანიკური მოვლენები	128
შტერნისა და გერლახის ცდა	129
ელექტრონის საკუთარი მექანიკური მომენტი	130
ელექტრონის სრული მექანიკური მომენტი	131

სპინ-ორბიტალური ურთიერთქმედება	133
ზეფაქიზი სტუქტურა	135
თავი 14. წყალბადის ატომის დისკრეტულ დონეებს შორის გადასვლებით გამონვეული გამოსხივება	136
ელექტრული დიპოლური გამოსხივება	136
შერჩევის წესები	139
თავი 15. მრავალელექტრონიანი ატომები	142
მრავალელექტრონიანი ატომის სრული მექანიკური მომენტი	142
ატომის მაგნიტური მომენტი	143
ატომის ვექტორული მოდელი	144
პაულის პრინციპი	146
მენდელეევის პერიოდული სისტემა	148
ჰუნდის წესი	150
მახასიათებელი რენტგენული გამოსხივება	151
ტუტე მეტალთა ატომები	154
ჰელიუმის ატომი	157
თავი 16. ატომი გარეშე მაგნიტურ ველში	164
ზეემანის ეფექტი	164
ზეემანის ეფექტის კლასიკური ახსნა	165
ზეემანის ეფექტის კვანტური ახსნა	168
ზეემანის მარტივი ეფექტი	169
ზეემანის რთული (ანომალური) ეფექტი	170
პაშენ-ბაკის ეფექტი	171
ელექტრონულ პარამაგნიტური რეზონანსი	172
თავი 17. ორატომიანი მოლეკულა	174
წყალბადის მოლეკულა	174
სინათლის კომბინაციური გაბნევა	182
ორთო და პარანწყალბადი	183
თავი 18. კვანტური გენერატორები	184
იძულებითი გამოსხივება და რეზონანსული შთანთქმა	184
ნივთიერებაში გავლისას სინათლის ინტენსივობის გაძლიერების შესაძლებლობა. ბუგერის კანონი	186
მოლეკულური გენერატორი (MASER)	187
ლაზერი (LASER)	189
გაზური ლაზერი	191
გამოყენებული ლიტერატურა	193
დამატება ა	194
დამატება ბ	195
დამატება გ	197

წინასიტყვაობა

ნაშრომი წარმოადგენს ივანე ჯავახიშვილის სახელობის თბილისის სახელმწიფო უნივერსიტეტის ზუსტ და საბუნებისმეტყველო მეცნიერებათა ფაკულტეტის ფიზიკის მიმართულების საბაკალავრო სავალდებულო სალექციო კურსის – ატომისა და ატომბირთვის ფიზიკის დამხმარე სახელმძღვანელოს. სახელმძღვანელო აგებულია უკანასკნელი ათი წლის მანძილზე შემოაღნიშნული კურსის სალექციო მასალის ბაზაზე. სახელმძღვანელოში წარმოდგენილია სალექციო კურსის პირველი ნაწილი – ატომური ფიზიკა, რაც კურსის საერთო მოცულობის დაახლოებით 80%-ს შეადგენს. წინამდებარე ნაშრომის შექმნა მოტივირებული იყო წლების მანძილზე სტუდენტების აზრის გათვალისწინებით. კერძოდ, სტუდენტთა ნაწილს უჭირდა კონკრეტული საკითხის ირგვლივ ინფორმაციის დეტალური მოძიება უცხოურ ენაზე გამოცემულ ლიტერატურაში. მართალია, ატომურ ფიზიკაში გვაქვს უფრო ადრეულ წლებში ქართულ ენაზე გამოცემული ცნობილი სახელმძღვანელოები, როგორებიცაა პროფ. მ. მირიანაშვილის ზოგადი ფიზიკის კურსი – ატომური ფიზიკა და პროფ. ჯ. მებონიას ატომური ფიზიკის კურსის დამხმარე სახელმძღვანელო, მაგრამ როგორც პრაქტიკამ გვიჩვენა აუცილებელი შეიქმნა ზოგიერთი საკითხის უფრო დეტალური განხილვა.

ნაშრომში მასალა სტუდენტისათვის მაქსიმალურად გასაგებ ენაზეა გადმოცემული. განხილული თემები ქრონოლოგიურად მიჰყვება ლექციებზე წაკითხულ საკითხებს. წინამდებარე ნაშრომი, შემოხსენებულ ქართულ ენაზე გამოცემულ სახელმძღვანელოებთან ერთად, სტუდენტებს გაუადვილებს სალექციო მასალის გააზრებასა და ათვისებას, რაც, საბოლოოდ, საფუძვლიანი ცოდნის მიღების წინაპირობა იქნება.

წინამდებარე დამხმარე სახელმძღვანელოს გამოცემა ავტორის მიერ სახელმძღვანელოს გამოცემის პირველი მცდელობაა. ბუნებრივია, იგი ვერ იქნება თავისუფალი გარკვეული ხარვეზებისგან. ამიტომაც, ავტორი სიამოვნებით გაითვალისწინებს კოლეგების მოსაზრებებს არსებული ხარვეზების გამოსწორების თვალსაზრისით.

თავი 1

ატომის აგებულების ძირითადი საფუძვლები

ადრეული პერიოდი ატომის ისტორიაში

ნივთიერების აგებულების ატომისტური თეორია სათავეს ჯერ კიდევ დაახლოებით 2500 წლის წინ იღებს. ჩვენს წელთაღრიცხვამდე მე-5 საუკუნეში ბერძნული ატომისტური სკოლის ფუძემდებლებს ლევკიპის და მის მოწაფე დემოკრიტეს მიაჩნდათ, რომ ყველა მატერიალური სხეული შედგება პატარა განუყოფელი ნაწილაკებისაგან, რომელთაც დემოკრიტემ (*atoma*) ატომები უწოდა. სიტყვა ატომი ბერძნულად ერთიანს, განუყოფელს ნიშნავს. შემდგომში ჩვენს წელთაღრიცხვამდე დაახლოებით პირველი საუკუნის დასაწყისში ატომისტური სწავლების პრინციპებმა ველარ ჰპოვეს შემდგომი განვითარება ძირითადად იმ დროისათვის საკმაოდ გავლენიანი ბერძენი ფილოსოფოსის არისტოტელეს (384-322 ჩ.წ.ა) ნეგატიური დამოკიდებულების გამო. ამრიგად ატომისტური წარმოდგენები მივიწყებული აღმოჩნდა რამოდენიმე ასეული წლის განმავლობაში, სანამ კვლავ არ გამოიკვეთა მეცნიერების განვითარების აქტიური ხანა, რომელიც ევროპის აღორძინების პერიოდს მოჰყვა. მე-16 და მე-17 საუკუნეებში ისეთი ცნობილი ფილოსოფოსები და მეცნიერები, როგორებიც იყვნენ გალილეო გალილეი, რენე დეკარტი, რობერტ ბოილი, ისააკ ნიუტონი და სხვები თვლიდნენ, რომ მატერია არ არის უწყვეტი, არამედ შედგება რაღაც განუყოფელი უმცირესი (იმ დროისათვის ასე ითვლებოდა) ნაწილაკებისაგან, ანუ ატომებისგან. მხოლოდ მე-19 საუკუნეში ქიმიკოსების დაუღალავი შრომების შედეგად ატომი როგორც ბუნდოვანი ფილოსოფიური იდეების ერთობლიობა „გადაიქცა“ ბუნებაში რეალურად არსებულ ობიექტად. შემდგომში ფიზიკოსების აღმოჩენებმა საფუძველი ჩაუყარეს ატომის აგებულების შესახებ სხვადასხვა სწავლებას.

ამის პარალელურად ასევე მიმდინარებდა სამყაროს შემეცნების ბერძნულ ფილოსოფიურ აზროვნებაზე დამყარებული სურათის აგება. ჯერ კიდევ ჩვენს წელთაღრიცხვამდე მე-5 საუკუნეში ემპედოკლი (ძველი ბერძენი ფილოსოფოსი) თვლიდა, რომ მთელი მატერია „ოთხი“ ელემენტისგან შედგება: ცეცხლის, მინის, ჰაერისა და წყლისგან. არისტოტელესა და სხვა მეცნიერთა მხრიდან გამოვლენილი მხრდააჭერის შედეგად ეს ე.წ. ოთხი ელემენტის თეორია თითქმის ორი ათასი წლის მანძილზე იყო გაბატონებული მიუხედავად იმისა, რომ არ არსებობდა ამ თეორიის კონკრეტული შინაარსის მკაფიოდ გააზრებული სურათი. ზოგიერთი მეცნიერის აზრით, ყველა ნივთიერება შედგებოდა საერთო პირველადი ნივთიერებისგან, რომელსაც შეეძლო ოთხი სხვადასხვა თვისება ჰქონოდა: კერძოდ, ყოფილიყო ცხელი, ცივი, მშრალი და ნოტიო. მაგალითად, ჰაერი შეიძლებოდა ყოფილიყო

ცხელი და ნოტიო, წყალი – ცივი და ნოტიო, ცეცხლი – ცხელი და მშრალი და მინა – ცივი და მშრალი. ნივთიერებებს შორის განსხვავება აიხსნებოდა, როგორც შედეგი ამ პირველადი ნივთიერების თვისებების ცვლილებებისა. ალბათ ოთხი ელემენტის თეორიის ასეთი ინტერპრეტაცია იყო იმის საფუძველი, რომ ძველ დროში ბევრი ალქიმიკოსის ენერგია და სიცოცხლეც კი შეინირა უბრალო მეტალების ოქროდ გადაქცევის მრავალჯერადმა მცდელობებმა. დღეისათვის კი ერთი ელემენტის მეორეში გარდაქმნა ბევრი ლაბორატორიის ყოველდღიურ საქმიანობად იქცა.

ითვლება, რომ თანამედროვე ატომური თეორიის ჩამოყალიბებას საფუძველი ჩაუყარა ინგლისელმა სკოლის მასწავლებელმა ჯონ დალტონმა (1766-1844). იხილავდა რა წყალს აირად (ორთქლი), თხევად და მყარ (ყინულოვან) მდგომარეობებში დალტონი ამბობდა: „დაკვირვებები გვიჩვენებს, რომ ყველა სასრული ზომების მქონე სხეული შედგება ძალზედ მცირე ზომის უამრავი ნაწილაკებისაგან ანუ ატომებისგან, რომლებიც ერთმანეთთან მიზიდულობის ძალთა გავლენით ურთიერთქმედებენ“. ატომების ფარდობითი ატომური მასის შემოტანის პირველი მცდელობა სწორედ დალტონს ეკუთვნის. დალტონი ატომის მასის ერთეულად წყალბადის ატომის მასას თვლიდა და ყველა სხვა ატომის მასებს ამ ერთეულებში გამოსახავდა. დალტონის თეორია სამ დასკვნას ეფუძნებოდა: 1) ნივთიერების შემადგენელ პირველად ნაწილაკებს (ატომებს) ერთი და იგივე ზომა, ფორმა და მასა აქვთ, როგორც ნივთიერების ელემენტებში, ასევე ამ ელემენტთა ქიმიურ შენაერთებში, 2) ქიმიური რეაქციები არ იწვევენ ატომთა ბუნებაში არავითარ ცვლილებებს და ვლინდებიან მხოლოდ ატომთა ურთერთ გადაწარმოებაში, 3) სხვადასხვა ნივთიერებათა ნაერთებში ატომთა კომბინაციები მთელ რიცხვთა შეფარდებით გამოიხატება. მაგალითად, დალტონს მიაჩნდა, რომ წყლის აგებულებაში წყალბადის ერთი ატომი უნდა გაერთიანებულიყო ჟანგბადის ერთ ატომთან HO . ანალოგიურად ამიაკის მოლეკულა დალტონის თანახმად NH უნდა ყოფილიყო. ქიმიური ანალიზის საფუძველზე დალტონმა დაადგინა, რომ წყალი შედგება წყალბადის ერთი მასური წილისა და ჟანგბადის შვიდი (როგორც შემდგომში იქნა ნაჩვენები რვა) მასური წილისგან, ანუ სხვა სიტყვებით რომ ვთქვათ ჟანგბადის ერთი ატომის წონა შვიდჯერ (რეალურად კი რვაჯერ) მეტია წყალბადის ატომის ერთი ატომის წონაზე. ანალოგიურად, ამიაკისთვის ადგილი ექნება $1/5$ თანაფარდობას აზოტის ატომის სასარგებლოდ. ის რასაც დალტონი ფარდობით ატომურ მასას უწოდებდა სინამდვილეში წარმოადგენდა ე.წ. ეკვივალენტურ მასას, ანუ ელემენტის იმ წონას, რომელიც უერთდება წყალბადის ერთ მასურ წილს. თუ საძიებელი ნაერთის ფორმულას აქვს სახე HCl , მაშინ ეკვივალენტური და ატომური მასები ერთმანეთს ემთხვევა. სხვა შემთხვევებში ატომური მასა წარმოადგენს ეკვივალენტური მასის ჯერად სიდიდეს. ადვილი დასანახია, რომ ეს ჯერადობა უნდა ემთხვეოდეს წყალბადის ატომთა იმ რაოდენობას, რომლებიც მოცემული ელემენტის ერთ ატომს უერთდება. ამრიგად, რადგანაც წყლის ფორმულაა H_2O , წყალბადის ორი ატომი უერთდება ჟანგბადის ერთ ატომს, ანუ გამოდის, რომ ჟანგბადის ატომური წონა

წყალბადის ატომურ წონაზე ზუსტად ორჯერ მეტია. ამიტომაც დალტონს წყლის სწორი ფორმულა რომ გამოეყენებინა მაშინ იგი ჟანგბადის ატომის წონისათვის მიიღებდა არა 7-ს არამედ 14-ს, რაც არც თუ ცუდ თანხვედრაშია ჟანგბადის ატომის წონის რეალურ მნიშვნელობასთან 16 წყალბადის ატომის წონის ერთეულებში. ანალოგიურად, ამიაკისთვის NH_3 ფორმულის გამოყენების შემთხვევაში აზოტის ატომის წონა გამოვიდოდა არა 5 არამედ 15, რაც ასევე არც თუ ძლიერად განსხვავდება აზოტის ატომის წონისგან 14. დალტონის ეპოქაში არ იყო ცნობილი რაოდენობრივი ქიმიური ანალიზის საფუძვლები. ამ დროში არ არსებობდა ზუსტი სასწორები. ასე რომ, არ შეიძლებოდა ეკვივალენტური მასების მაღალი სიზუსტით შეფასება. ტექნიკისა და ანალიზური ქიმიის მეთოდების დახვეწამ მე-19 საუკუნეში სხვადასხვა ელემენტების ეკვივალენტური მასების სულ უფრო და უფრო ზუსტი მნიშვნელობების მიღების საშუალება მოგვცა. ამის შემდეგ საჭირო იყო ამ ეკვივალენტური მასების გადაყვანა ატომურ მასებში, ანუ ყოველი ელემენტისთვის სათანადო მთელი რიცხვის პოვნა. ამ მიზნით გამოიყენებოდა ე.წ. ატომთა სითბოტევადობის მუდმივობის კანონი. ცნობილი იყო, რომ უმრავლესობა მყარი ელემენტებისათვის ატომური მასისა და სითბოტევადობის ნამრავლი დაახლოებით მუდმივი სიდიდეა. სითბოტევადობის გაზომვა სირთულეს არ წარმოადგენდა. აქედან შესაძლებელი გახდა მიახლოებით განესაზღვრათ ელემენტის ატომური წონა. ამის შემდეგ კი ეკვივალენტური მასის საშუალებით შეიძლებოდა ატომური მასის მნიშვნელობის მაღალი სიზუსტით გამოთვლა.

ატომები და მოლეკულები

გავარკვიოთ რა განსხვავებაა ატომსა და მოლეკულას შორის. ატომი – არის ქიმიური ელემენტის უმცირესი ნაწილაკი, რომელიც შეიძლება წარმოვიდგინოთ და ასევე ქიმიური ელემენტის უმცირესი ნაწილი, რომელსაც შეუძლია წარმოქმნას ქიმიური ბმები სხვა ნივთიერებების ატომებთან. მოლეკულა წარმოადგენს ნივთიერების ან ქიმიური ელემენტის უმცირეს ნაწილს, რომელსაც შეუძლია დამოუკიდებლად არსებობა. მოლეკულური ნაერთები ყოველთვის ელემენტთა ორ ან მეტ ატომებს შეიცავენ. რამდენადაც ელემენტის ატომი არის დაუშლელი ობიექტი, გამოდის, რომ შეუძლებელია მოლეკულა შედგებოდეს რაიმე ელემენტის ერთზე ნაკლები ატომისაგან. სხვა სიტყვებით რომ ვთქვათ ატომი წარმოადგენს ელემენტის იმ უმცირეს რაოდენობას, რომელიც ამა თუ იმ მოლეკულის შემადგენლობაში შეიძლება აღმოჩნდეს. სხვადასხვა ელემენტთა ნაერთების მიღებისას პირველად ნაწილაკს წარმოადგენს არა ატომი, არამედ მოლეკულა. ასეთი შენაერთები შეიძლება დავანაწევროთ ცალკეული ელემენტების ატომებად. მაგალითად, ძალიან მაღალ ტემპერატურამდე გაცხელებისას ზოგიერთი მოლეკულა იშლება ცალკეულ ატომებად, მაგრამ როგორც კი ნორმალური ტემპერატურა აღდგება ეს ატომები კვლავ მოლეკულებად ერთიანდებიან. ჩვეულებრივ ტემპერატურაზე და წნევებზე ელემენ-

ტა უმრავლესობა (ყოველ შემთხვევაში ისინი, რომლებიც გაზური სახით გვხვდებიან), ქმნიან ორატომიან მოლეკულებს: ჯანგბადი O_2 , წყალბადი H_2 , აზოტი N_2 . მაგრამ არსებობენ ასევე ისეთი ელემენტებიც ე.წ. ინერტული გაზები, რომელთათვისაც ატომი და მოლეკულა ერთი და იგივეა. ასეთია მაგალითად, ჰელიუმი, რომელსაც მოიხსენიებენ როგორც ერთატომიან გაზს. ჰელიუმის მსგავსად ნეონი, არგონი და ა.შ. იმდენად ინერტული გაზებია, რომ ისინი არც ერთმანეთს უერთდებიან და არც სხვა ელემენტის ატომებს.

ავოგადროს კანონი. მოლეკულური და ატომური მასა

ავოგადროს კანონის თანახმად, ერთნაირი წნევისა და ტემპერატურის პირობებში სხვადასხვა გაზების ტოლი მოცულობები შეიცავენ მოლეკულათა ერთნაირ რაოდენობებს. გაზის სიმკვრივე განისაზღვრება როგორც მოცემული მოცულობის მაგალითად, 1 ლიტრი გაზის მასა. ამიტომ გაზის სიმკვრივე ამ 1 ლიტრ მოცულობაში არსებულ გაზის მოლეკულათა საერთო მასის ტოლი იქნება. მაგრამ რამდენადაც ავოგადროს კანონის თანახმად 1 ლიტრ მოცულობაში სხვადასხვა გაზების მოლეკულათა ერთი და იგივე რაოდენობა იმყოფება გამოდის, რომ გაზის სიმკვრივე პირდაპირპროპორციულია მისი ერთი მოლეკულის მასის. ამიტომ გაზურ მდგომარეობაში მყოფ სხვადასხვა ნივთიერებათა სიმკვრივეების შეფარდება ამ ნივთიერებათა მოლეკულების მასების შეფარდების ტოლი გამოვა. ამრიგად, სიმკვრივეთა შედარების გზით შეიძლება განისაზღვროს ერთი ტიპის მოლეკულების მასის მეორე ტიპის მოლეკულის მასასთან შეფარდება. პრაქტიკული თვალსაზრისით ხელსაყრელია ფარდობითი მოლეკულური მასის განსაზღვრისათვის შემოვიტანოთ ეტალონური მუდმივი სიდიდე. ამ მიზნით იტალიელი ქიმიკოსის სტანისლაო კანნიცაროს (1826-1910) შემოთავაზება იყო ის, რომ გამოეყენებინათ იგივე ეტალონი რაც ატომური წონისთვის იყო შემოღებული, ანუ მოლეკულური მასა განსაზღვრულიყო ჟანგბადის ატომის მასის ერთეულებში, რომელიც 16-ის ტოლი იყო. ასეთნაირად განსაზღვრული მოლეკულური მასა ელემენტის შემადგენელი ატომების ატომური მასების ჯამის ტოლი გამოდის. რამდენადაც ჟანგბადის მოლეკულა ორატომიანია ჟანგბადის მოლეკულური მასა იქნება 32. აქედან გამომდინარე, ნებისმიერი ნივთიერების მოლეკულური მასა წარმოადგენს ამ ნივთიერების მოლეკულის მასას ჟანგბადის მოლეკულური მასის ერთეულებში. ავოგადროს კანონის გათვალისწინებით სამართლიანია შემდეგი ფორმულა

$$\begin{aligned} & \text{ნივთიერების მოლეკულური მასა} = \\ & (\text{ნივთიერების სიმკვრივე/ჟანგბადის სიმკვრივე}) * 32. \end{aligned}$$

ამრიგად ნივთიერების მოლეკულური მასის დასათვლელად საკმარისია ვიცოდეთ მხოლოდ გაზურ მდგომარეობაში მყოფი ნივთიერების სიმკვრივე.

რამდენადაც ატომი წარმოადგენს მოლეკულაში შემავალ ნივთიერების უმცირეს რაოდენობას, ატომური მასა იქნება ელემენტის უმცირესი მასა, რომელიც

შეიძლება შედიოდეს მოლეკულურ მასაში. მზადდებოდა რა მოცემული ელემენტის ადვილად აორთქლებადი ნაერთები გაზური სიმკვრივეების გაზომვის საშუალებით, განისაზღვრებოდა ამ ელემენტის მოლეკულური მასა. ამ მოლეკულური მასებიდან უმცირესი, უფრო სწორად კი მოლეკულურ მასათა უმცირესი საერთო გამყოფი, წარმოადგენდა სწორედ ელემენტის ატომურ მასას. უნდა აღინიშნოს, რომ მკაცრად თუ ვიმსჯელებთ ავოგადროს კანონი მხოლოდ იდეალური გაზების შემთხვევაშია სამართლიანი. ამიტომაც გამოთვლების დასაზუსტებლად აუცილებელია გაზის იდეალურობიდან გადახრის ხარისხის გათვალისწინება, რის შემდეგაც შესაძლებელია მოლეკულური მასების საკმაოდ მაღალი სიზუსტით მიღება.

ავოგადროს რიცხვი

ავოგადროს კანონის თანახმად, მოცემულ მოცულობაში იდეალური გაზის მოლეკულების რიცხვი არ არის დამოკიდებული გაზის ქიმიურ შემადგენლობაზე. ეს მოცულობა შეიძლება ნებისმიერად შეირჩეს, მაგრამ არსებობს სპეციალური მოცულობა, რომელსაც განსაკუთრებული მნიშვნელობა აქვს. თუ ავიღებთ რაიმე ნივთიერების მასას გრამებში, რომელიც რიცხვობრივად ამ ნივთიერების მოლეკულური მასის ტოლი იქნება, მაშინ მივიღებთ ე.წ. ნივთიერების *გრამმოლეკულურ მასას*, ანუ ნივთიერების *მოლურ მასას*. ასე მაგალითად, **2.016** გრამი წყალბადი, **32** გრამი ჟანგბადი და **28.020** გრამი აზოტი წარმოადგენენ სათანადო ნივთიერებების ერთ მოლს. ცდებით დადასტურებულია, რომ ავოგადროს კანონის თანახმად ნებისმიერი გაზის ერთი მოლი 0° ცელსიუსზე და **1** ერთეულ ატმოსფერულ წნევაზე ყოველთვის იკავებს **22.414** ლიტრ მოცულობას. ეს მოცულობა ცნობილია, როგორც მოლური მოცულობა, ხოლო ამ მოცულობაში არსებული გაზის მოლეკულების რიცხვი ერთნაირია ყველა გაზისათვის და მას *ავოგადროს რიცხვი* ეწოდება. ნივთიერების ერთი მოლი უნდა შეიცავდეს ცალკეული მოლეკულების ერთი და იგივე რაოდენობას იმის მიუხედავად როგორ აგრეგატულ მდგომარეობაში იმყოფება ნივთიერება. შესაბამისად ავოგადროს რიცხვი გვაძლევს ნებისმიერი ნივთიერების ერთ მოლში მოლეკულების რაოდენობას. ამრიგად, თუ რაიმე ნაერთის, ელემენტის ან ნივთიერების მოლეკულურ მასას ავოგადროს რიცხვზე გავყოფთ, მივიღებთ გრამებში გამოსახულ ნივთიერების ერთი მოლეკულის მასას. ანალოგიურად რაიმე ელემენტის ატომური მასის ავოგადროს რიცხვზე გაყოფით მიიღება ამ ელემენტის ერთი ატომის მასა გრამებში.

ავოგადროს რიცხვი სხვადასხვა ექსპერიმენტული მეთოდების გამოყენებით იქნა განსაზღვრული, დაწყებული ბროუნის ნაწილაკების მოძრაობის შესწავლით, დამთავრებული კრისტალების რენტგენოსკოპიური ანალიზით. მიღებული მნიშვნელობები საკმაოდ კარგი სიზუსტით ემთხვეოდა ერთმანეთს, რის საფუძველზეც დაასკვნეს, რომ ავოგადროს რიცხვია $N_A = 6.025 \cdot 10^{23}$. ეს არის ნებისმიერი ნივთიერების ერთ მოლში არსებული მოლეკულების რიცხვი.

ატომებისა და მოლეკულების ზომები

ზემოთქმულიდან ადვილი მისახვედრია, რომ თუ ელემენტის ატომურ ან მოლეკულურ მასას ავოგადროს რიცხვზე გავყოფთ მივიღებთ, შესაბამისად, ელემენტის ერთი ატომის ან ნივთიერების ერთი მოლეკულის მასას. მაგალითად, ყველაზე მსუბუქი ატომის – წყალბადის ატომის მასა არის $1.67 \cdot 10^{-24}$ გრამი, ხოლო ბუნებრივ პირობებში არსებული ყველაზე მძიმე ელემენტის – ურანის ატომის მასაა $3.95 \cdot 10^{-22}$ გრამი. არსებობს სასწორი, რომელსაც შეუძლია აწონოს ნივთიერების 10^{-8} გრამი. მიუხედავად მასის ასეთი სიმცირისა, ნივთიერების ეს რაოდენობა მაინც 10^{13} ატომზე მეტს შეიცავს.

მოლეკულებისა და ატომების ზომების შესახებ მიახლოებითი წარმოდგენა შეიძლება შევიქმნათ თუ გამოვიყენებთ ლოდშმიტის მიახლოებას და ჩავთვლით, რომ ატომები და მოლეკულები სითხეებსა და მყარ სხეულებში სფერული ფორმის არიან და ერთმანეთთან მჭიდროდ არიან განლაგებულნი. მაშინ მაგალითად, წყლისთვის, რომლის მოლეკულური მასა 18-ია მივიღებთ, რომ 18 გრამი წყალი 18 სმ³ მოცულობას იკავებს. თუ ჩავთვლით, რომ წყლის მოლეკულა სფერული ფორმისაა, მაშინ ამ მოცულობის ავოგადროს რიცხვზე გავყოფით მივიღებთ წყლის მოლეკულის მოცულობას $2 \cdot 10^{-23}$ სმ³. შესაბამისად, სფეროს მოცულობის ფორმულის გამოყენებით დავადგენთ, რომ წყლის მოლეკულის რადიუსია დაახლოებით $1.7 \cdot 10^{-8}$ სმ.

ამრიგად, ატომები ისეთი პატარა ზომისები არიან, რომ მათი დანახვა ყველაზე მძლავრი ელექტრონული მიკროსკოპითაც კი შეუძლებელია. შესაძლებელია ასეთი მძლავრი მიკროსკოპების გამოყენებით დავინახოთ რაიმე დიდი მაგალითად, ცილის მოლეკულები, მაგრამ თითოეული ეს მოლეკულა თავის მხრივ რამოდენიმე ათასი ატომისაგან შედგება. ცხრილში მოყვანილია ზოგიერთი ცნობილი ელემენტის ატომთა რადიუსები. მოხერხებულობის მიზნით შედეგები ცხრილში მოყვანილია ამგსტრემებში (1 ანგსტრემი $\overset{\circ}{\text{A}} = 10^{-8}$ სმ).

ცხრილი 1.1

ზოგიერთ ატომთა მიახლოებითი რადიუსები

ელემენტი	ატომის რადიუსი, $\overset{\circ}{\text{A}}$
წყალბადი	0.53
ჟანგბადი	0.74
ნახშირბადი	0.77
კალა	1.4
ალუმინი	1.45
ტყვია	1.75
ნატრიუმი	1.9
კალიუმი	2.35

შესანიშნავია ის ფაქტი, რომ მიუხედავად ატომთა ასეთი მცირე ზომებისა მათი ზომებისა და მასების გაზომვა, მართალია არაპირდაპირი გზით, მაგრამ მაინც იქნა შესაძლებელი. კიდევ უფრო გასაოცარია, რომ შემუშავებული იქნა მეთოდები, რომელთა საშუალებითაც შესაძლებელი შეიქმნა ატომის სტრუქტურის შესწავლა. თუმცა ამ მიმართულებით კვლევები დღესაც ინტენსიურად მიმდინარეობს.

ელექტრობის ბუნება

ჯერ კიდევ ჩვენ ნელთალრიცხვამდე მე-6 საუკუნეში ძველ ბერძენმა ფილოსოფოსებმა პირველად შეამჩნიეს, რომ თუ ქარვის ნატეხს აბრეშუმის ქსოვილის ნაჭრით გავწმენდთ, მაშინ ქარვის ნატეხს შეუძლია მსუბუქი ბუმბული ან შალის ნაჭრის მცირე ნამცეცები მიიზიდოს. ეს მოვლენა შესწავლილი იქნა მე-16 საუკუნის მეორე ნახევარში უილიამ ჰილბერტის მიერ, რომელიც დედოფალ ელიზაბეტას პირადი ექიმი იყო. დედოფლის შემოთავაზებით ამ მოვლენას დაერქვა *ელექტრობა*, ბერძნული სიტყვა ელექტრონიდან გამომდინარე, რაც ქართულად ქარვას ნიშნავს. ჰილბერტმა შეამჩნია, რომ არა მარტო ქარვა, არამედ სხვა სხეულებიც მაგალითად, მინა და ზოგირთი ძვირფასი ქვებიც ხახუნის შედეგად ასევე ელექტრიზირდებოდნენ და სხვა სხეულების მიზიდვის უნარს იძენდნენ.

შემდგომში ასი წლის განმავლობაში ამ მიმართულებით თითქმის არავითარი პროგრესი არ შეიმჩნეოდა, სანამ 1737 წელს ფრანგმა ფიზიკოსმა ფრანსუა დიუფემ არ აღმოაჩინა, რომ მინის ჯოხი აბრეშუმის ნაჭერთან ხახუნისას და ცვილი კატის ბენვითან ხახუნისას სხვადასხვანაირად ელექტრიზირდებიან. დაელექტრიზებული სხეული, რომელიც მიიზიდება ცვილის მიერ ძლიერად განიზიდებოდა მინის მიერ და პირიქით. ამიტომ ამ ორი ტიპის ელექტრობას შესაბამისად დაერქვა „მინის“ და „ცვილის“ ელექტრობა. მაგრამ 1747 წელს გამოჩენილი ამერიკელი ფილოსოფოსისა და სახელმწიფო მოღვაწის ბენჯამენ ფრანკლინის შემოთავაზებით შემოღებული იქნა ტერმინები „დადებითი“ და „უარყოფითი“ ელექტრობა, რომლებიც დღესაც დაფუძნებულია ფიზიკაში. ითვლება, რომ ნებისმიერი სხეული, რომელიც დაელექტროვებულია და განიზიდავს დაელექტროვებულ მინას ანდა მიიზიდავს დაელექტროვებულ ცვილს დაელექტრიზებულია დადებითად, ანუ არის დადებითი ელექტრული მუხტის მატარებელი. ანალოგიურად თუ დაელექტრიზებული სხეული მიიზიდება დაელექტრიზებული მინის მიერ და განიზიდება დაელექტრიზებული ცვილის მიერ, არის უარყოფითი ელექტრული მუხტის მატარებელი. თუმცა ფრანკლინს არ ქონდა სათანადო საფუძველი იმისა, რომ ჩაეთვალა რომ მინა ხახუნისას იძენდა ელექტრობის სიჭარბეს. შესაბამისად, ტერმინი „დადებითი“ და „უარყოფითი“ ნებისმიერად არჩეული შეიძლებოდა ყოფილიყო.

ელექტროლიზის მოვლენა. ფარადეის რიცხვი

1780 წელს იტალიელმა ანატომმა ლუიჯი გალვანომ შეამჩნია, რომ თუ ავიღებთ მეტალის ორ ნაჭერს რომელთაგან ერთის ერთი ბოლო ეხება ახალმოკლული ბაყაყის კუნთს, ხოლო მეორეს ერთი ბოლო კი – ბაყაყის ნერვს და მეტალის ნაჭრის

მეორე ბოლოებს შევახებთ ერთმანეთს, ბაყაყის კუნთები შეიკუმშებიან. 1796 წელს იტალიელმა ფიზიკოსმა ალესანდრო ვოლტამ შესძლო გალვანის მიერ აღმოჩენილ ეფექტის ახსნა და დაამტკიცა, რომ ელექტროობის მიღება შეიძლება მეტალის ორი ნაჭრის მაგალითად, თუთიისა და ვერცხლის საშუალებით თუ მათ შორის სველ მუყაოს ქალაღდს ან ტყავს მოვათავსებთ. ასეთ სისტემას შემდგომში გალვანური ელემენტი ან ვოლტას ელემენტი ეწოდა.

ამის შემდეგ, რამდენადაც უკვე შესაძლებელი იყო, გალვანური ელემენტის, ანუ ელექტრული დენის წყაროს მიღება მე-19 საუკუნის დასაწყისში აღმოჩენილ იქნა მოვლენა, რომლის დროსაც მჟავების წყალხსნარებში, ტუტეებში და მარილწყალში ელექტრული დენის გატარების შედეგად ადგილი ქონდა ქიმიურ ცვლილებებს, რის შედეგადაც ორივე მეტალის ელექტროდებზე დაიმზირებოდა გარკვეული ნივთიერებების დალექვა. ამ პროცესს *ელექტროლიზი* ეწოდა. მაგალითად, თუ თუთიის, სპილენძის ან რკინის მარილის წყალხსნარში გავატარებთ ელექტრულ დენს, ანუ მოვახდენთ ხსნარის ელექტროლიზს, მაშინ კათოდზე შესაბამისი მეტალი დაილექება. ეს საკითხი შეისწავლა ინგლისელმა ფიზიკოსმა და ქიმიკოსმა მაიკლ ფარადეიმ (1791-1867) და აღმოაჩინა შემდეგი კანონზომიერება: აღმოჩნდა, რაც უფრო დიდხანს გადიოდა ელექტროლიტში მუდმივი დენი, მით მეტი ნივთიერების რაოდენობა გამოიყოფა არჩეულ ერთ-ერთ ელექტროდზე, ე.ი. გამოყოფილი მასა დენის დინების დროის პროპორციული აღმოჩნდა $m = k \cdot I \cdot t$, სადაც I წყალხსნარში გამავალი დენის ძალაა, t დრო, ხოლო k პროპორციულობის კოეფიციენტს ელექტროდზე გამოყოფილი ნივთიერების ელექტროქიმიური ეკვივალენტი ეწოდება და იგი დამოკიდებულია ნივთიერების გვარობაზე. ელექტროქიმიური ეკვივალენტი რიცხვობრივად ტოლია ელექტროლიტში 1 კულონი მუხტის გავლის დროს ელექტროდზე გამოყოფილი ნივთიერებების მასისა. ფარადეიმ ცდებით დაადგინა, რომ ყოველი ნივთიერებების ელექტროქიმიური ეკვივალენტი პირდაპირპროპორციულია ნივთიერების ატომური (მოლური) მასისა და უკუპროპორციულია ნივთიერების ვალენტობის. თუ ნივთიერების ატომურ მასას A -თი ავლნიშნავთ და ვალენტობას n -ით, მაშინ $k = \frac{1}{F} \frac{A}{n}$ სიდიდეს A/n ამ ელემენტის ქიმიური ეკვივალენტი ეწოდება, ხოლო F -ს ფარადეის მუდმივა.

თუ გავიხსენებთ, რომ ნივთიერების მოლურ მასასა და მასას შორის ადგილი აქვს შემდეგ თანაფარდობას $mN_A = MN$, სადაც N m მასის ნივთიერების შემადგენელი ატომების რაოდენობაა, ხოლო N_A ავოგადროს რიცხვი და ასევე გავითვალისწინებთ, რომ $I = \Delta q / \Delta t$ და $\Delta q = neN$, სადაც e ელემენტარული მუხტია, მაშინ მივიღებთ

$$m = \frac{M \cdot I \cdot \Delta t}{n \cdot F}$$

სადაც $F = eN_A = 96485.33289$ კულონი/ მოლი ფარადეის მუდმივაა. ეს ნიშნავს იმისათვის, რომ ელექტროლიტის პროცესში ერთვალენტიან წყალხსნარში ელექტროდზე გამოიყოს ერთი მოლი სათანადო ნივთიერება, საჭიროა ამ წყალხსნარში

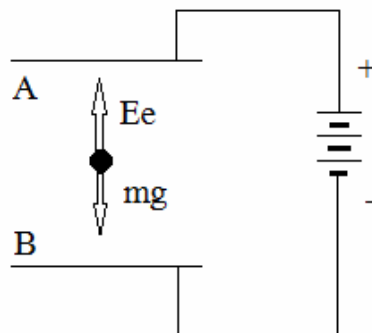
გავატაროთ ფარადეის მუდმივას ტოლი ელექტროობა. ზოგად, რომ ვთქვათ ნივთიერების 1 გრამეკვივალენტი რაოდენობის გამოსაყოფად საჭიროა ამ ნივთიერების წყალსხნარში დაახლოებით 96500 კულონი მუხტის გატარება. M/n სიდიდეს გრამეკვივალენტური მასა ეწოდება.

ელემენტარული მუხტი და მისი სიდიდე

შემდგომში ფარადეის კვლევების გაანალიზების საფუძველზე მეცნიერები მივიდნენ იმ დასკვნამდე, რომ ფარადეის რიცხვი იგივე თანაფარდობაშია ელექტროობის რაოდენობის განმსაზღვრელ ელემენტარული მუხტის სიდიდესთან, როგორც ატომური მასა, ერთი ატომის მასასთან. სხვა სიტყვებით რომ ვთქვათ, ელექტროობის ერთეულის მნიშვნელობა მიიღება თუ ფარადეის მუდმივას ავოგადროს რიცხვზე გავყოფთ. როგორც ვიცით SI ერთეულთა საერთაშორისო სისტემაში 1 კულონი არის ის მუხტი, რომელიც შეესაბამება გამტარში 1 წამის განმავლობაში 1 ამპერი დენის გავლას. ფიზიკურ კვლევებში ხშირად გამოიყენება მუხტის ელექტროსტატიკური ერთეული, რომელიც შემოტანილია ისეთ ერთეულთა სისტემაში სადაც მანძილის ერთეულია სანტიმეტრი, მასის – გრამი, დროის – წამი (CGS). 1 კულონი ეკვივალენტურია $3 \cdot 10^9$ მუხტის ელექტროსტატიკური ერთეულის. ამდენად ფარადეის რიცხვი ამ ერთეულთა სისტემაში $96500 \cdot 3 \cdot 10^9 \approx 2.89 \cdot 10^{14}$ CGSE ერთეულის ტოლი იქნება. იმ დროისათვის არსებული ფარადეისა და ავოგადროს რიცხვების სიზუსტე ზემოაღნიშნული შეფარდებისათვის ელემენტარული მუხტის $3 \cdot 10^{-11}$ CGSE ერთეულს იძლეოდა. თანამედროვე მონაცემების თანახმად კი ელემენტარული მუხტის სიდიდე $4.8 \cdot 10^{-10}$ CGSE ერთეულის ტოლია. თუ მუხტის ამ მნიშვნელობას $3 \cdot 10^9$ -ზე გავყოფთ მივიღებთ ელემენტარული მუხტის სიდიდეს კულონებში ანუ $1.6 \cdot 10^{-19}$ კულონს.

ელექტრონის მუხტის, მასის და ზომების განსაზღვრა

მე-19 საუკუნის ბოლოს მეცნიერებს ელემენტარული ელექტრული მუხტის არსებობაში ეჭვი აღარ ეპარებოდათ და მთელი სამეცნიერო ინტერესი ამ ელემენტარული მუხტის სიდიდის დასადგენად საჭირო მეთოდების შემუშავებისაკენ იყო მიმართული. ერთ-ერთი ექსპერიმენტული მეთოდი, რომლითაც ამ სიდიდის დადგენა გახდა შესაძლებელი ეკუთვნის ამერიკელ მეცნიერს რობერტ მილიკენს (1868-1953). ამ ექსპერიმენტის გამარტივებული სქემა ნახ 1.1-ზე მოცემული.



ნახ. 1.1. მილიკენის ცდის სქემა.

ჰორიზონტალურად განლაგებულ A და B ლითონის ფირფიტებს შორის მოთავსებული იყო დამუხტული მინერალური ზეთის წვეთი. ფირფიტები მუდმივი დენის წყაროსთან იყო მიერთებული. როდესაც დენის წყარო გამორთული იყო ზეთის წვეთი სიმძიმის ძალის გავლენით $v_1 = mgk$ სიჩქარით იწყებდა ვარდნას, სადაც m წვეთის მასაა, ხოლო k პროპორციულობის კოეფიციენტის, რომელიც წვეთის ზომებსა და ჰაერის სიბლანტეზეა დამოკიდებულია, g თავისუფალი ვარდნის აჩქარებაა. ცდაზე წვეთის ჩამოვარდნის სიჩქარე იზომებოდა. ამის შემდეგ ირთვებოდა დენის წყარო, რის შედეგადაც ზეთის დამუხტულ წვეთზე მოქმედებდა ვერტიკალურად ზევით მიმართული Ee ძალა, სადაც E ელექტრული ველის დაძაბულობაა, ხოლო e წვეთის მუხტი. შედეგად თუ ველის მხრიდან მოქმედი ძალა გადააჭარბებდა სიმძიმის ძალას, მაშინ ზეთის წვეთი $v_2 = k(Ee - mg)$ სიჩქარით დაიწყებდა ვერტიკალურად ზევით მოძრაობას. ეს სიჩქარეც ასევე იზომებოდა ცდაზე. ადვილი მისახვედრია, რომ ორივე მიმართულებით მოძრაობისას k პროპორციულობის კოეფიციენტი ერთი და იგივე იქნებოდა და ამიტომ სიჩქარეებს შორის შემდეგი თანაფარდობა მიიღებოდა $\frac{v_1}{v_2} = \frac{mg}{Ee - mg}$, საიდანაც $e = \frac{mg}{Ev_1}(v_1 + v_2)$. ამ უკანასკნელ ფორმულაში შემავალი ყველა სიდიდე, გარდა მასისა, გაზომვადია. რაც შეეხება მასას, მისი შეფასება ინგლისელი მათემატიკოსის სტოქსის დაშვების საუძველზეა შესაძლებელი. კერძოდ, სტოქსის თანახმად სიმძიმის ძალის გავლენით ვარდნილი წვეთის სიჩქარე ასე გამოისახება $v_1 = \frac{2gr^2d}{9\eta}$, სადაც r წვეთის რადიუსია, d – ზეთის სიმკვრივე, ხოლო η – ჰაერის სიბლანტე. რამდენადაც g, η, d სიდიდეები ცნობილია, ხოლო v_1 ცდაზე იზომება, შესაძლებელია წვეთის r რადიუსის პოვნა. თუ დავუშვებთ, რომ წვეთი სფერული ფორმისაა, მაშინ $m = \frac{4\pi r^3 d}{3}$ ფორმულის დახმარებით ადვილია წვეთის მასის გამოთვლა. ამის შემდეგ კი $e = \frac{mg}{Ev_1}(v_1 + v_2)$ ფორმულის გამოყენებით გამოვითვლით ელემენტარული მუხტის სიდიდესაც. ზემოთ მოყვანილ ფორმულებში მრავალრიცხოვანი შესწორებების გათვალისწინებით მილიკენმა ელემენტარული მუხტის სიდიდისათვის მიიღო $4.774 \cdot 10^{-10}$ CGSE. თუმცა დღეისათვის ითვლება, რომ ელექტრონი მუხტი $4.803 \cdot 10^{-10}$ CGSE სიდიდესთან ძალიან ახლოს არის.

პარალელურად მიმდინარეობდა ელექტრონის კუთრი მუხტის e/m_e განსაზღვრის ექსპერიმენტებიც. ამ მხრივ განსაკუთრებით საინტერესო იყო ზეემანის ექსპერიმენტები, რომელმაც ატომის სპექტრალური ხაზების გარეშე მაგნიტურ ველში გახლეჩის სიდიდის მიხედვით დაადგინა, რომ ელექტრონის კუთრი მუხტის მნიშვნელობაა $5.273 \cdot 10^{17}$ CGSE 1 გრამზე.

რამდენადაც ცნობილი იყო როგორც ელექტრონის მუხტის, ასევე მისი კუთრი მუხტის მნიშვნელობები, შესაძლებელი შეიქმნა ელექტრონის მასის გამოთვლა.

მართლაც $m_e = \frac{4.803 \cdot 10^{-10}}{5.273 \cdot 10^{17}} = 9.18 \cdot 10^{-28}$ გრამი. 1881 წელს ტომსონმა იმ დაშვებით,

რომ ელექტრონი არის სფერული ფორმის მქონე r_e რადიუსი მქონე ნაწილაკი თეო-

რიულად მიიღო ფორმულა $r_e = \frac{2e^2}{3m_e}$. ეს ფორმულა სამართლიანია მხოლოდ მაშინ,

როდესაც დამუხტული ნაწილაკი სინათლის სიჩქარესთან შედარებით გაცილებით ნელა მოძრაობს და დასაშვებია ნაწილაკის უძრაობის მასით სარგებლობა. ამ ფორმულის საშუალებით ელექტრონის რადიუსისათვის მიიღება $2 \cdot 10^{-13}$ სმ. უმრავლესი ატომების რადიუსი დაახლოებით $2 \cdot 10^{-8}$ სმ-ს ტოლია, ანუ ელექტრონის რადიუსი დაახლოებით 100000-ჯერ ნაკლებია ატომის რადიუსზე.

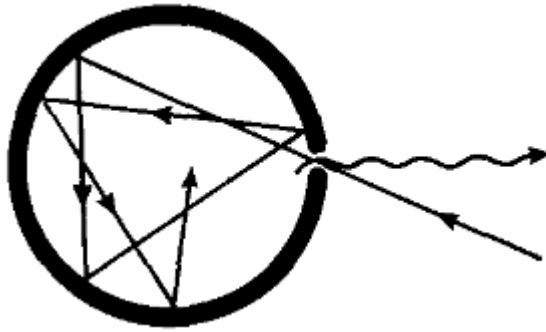
თავი 2

აბსოლუტურად შავი სხეულის გამოსხივება

XIX საუკუნის ბოლოსათვის დასრულდა თერმოდინამიკის ჩამოყალიბება და შეიქმნა ელექტრომაგნიტიზმის კლასიკური მაქსველისეული თეორია. თერმოდინამიკა დამაკმაყოფილებლად აღწერდა მატერიის ნივთიერი (კორპუსკულური) ფორმის არსებობით გამოწვეულ ბევრ ფიზიკურ მოვლენას, ხოლო ელექტრომაგნიტიზმი კი – ელექტრომაგნიტურ ველთან, კერძოდ, ელექტრომაგნიტურ ტალღებთან და სინათლის ელექტრომაგნიტურ ბუნებასთან დაკავშირებულ მოვლენებს. ელექტრომაგნიტური ტალღების სახით ელექტრომაგნიტურმა ველმა შეიძინა დამოუკიდებელი არსებობის შესაძლებლობა (დამოუკიდებლად მისი წარმომქმნელი მუხტებისაგან და დენებისაგან). მეცნიერებაში გაჩნდა წარმოდგენა გამოსხივების – როგორც მატერიის ველის სახით არსებობის შესახებ. წამოიჭრა საკითხი მატერიის კორპუსკულური და ველის სახით წარმოდგენილი ფორმების ურთიერთგარდაქმნის ანუ გამოსხივებისა და ნივთიერების ურთიერთქმედების კანონების დადგენის შესახებ.

რამდენადაც მატერიის ორივე ფორმა (კორპუსკულური და ველის სახით) კარგად იყო შესწავლილი კლასიკური ფიზიკის ფარგლებში, ბუნებრივად ითვლებოდა მათი ურთიერთქმედების კანონების კლასიკური ფიზიკის ჩარჩოებში ჩამოყალიბების შესაძლებლობა. პირველად კლასიკური ფიზიკის კანონების „სისუსტემ“ თავი იჩინა შავი სხეულის გამოსხივების კანონების ახსნისას.

ფიზიკაში ხშირად განიხილება ისეთი მოდელი, როდესაც სხეული თერმოდინამიკურ წონასწორობაშია საკუთარ გამოსხივებასთან. ასეთ შემთხვევაში საუბარია ე.წ. „შავ სხეულზე“ და „შავი სხეულის გამოსხივებაზე“. შავი სხეულის შიგნით გამოსხივების ველი ცალსახად განისაზღვრება სხეულის ტემპერატურით. შავი სხეულის სპექტრის შესწავლით დაიწყო ატომის თეორიის ერა. მიუხედავად იმისა, რომ დაბალსიხშირულ არეში შავი სხეულის გამოსხივების კანონები კლასიკური ფიზიკის ფარგლებში აიხსნება, მისი სრულყოფილი ანალიზი შესაძლებელია მხოლოდ კვანტური მექანიკის ფარგლებში. ეს გამომდინარეობს თუნდაც იქედან, რომ შავის სხეულის გამოსხივების სპექტრის აღმწერ ფორმულებში შედის \hbar პლანკის მუდმივა. მკაცრად რომ ვთქვათ, ბუნებაში აბსოლუტურად შავი სხეული ამ სიტყვის მკაცრი გაგებით არ არსებობს, მაგრამ ასეთი სხეულის მოდელად გამოდგება მაგალითად, მცირე ხვრელის მქონე ჩაკეტილი სილრუე (სურ. 2.1) ხვრელის საშუალებით სილრუეში მოხვედრილი გამოსხივება სილრუის კედლების მიერ მრავალჯერადი შთანთქმის შედეგად თითქმის სრულად შთანთქმება. შედეგად ხვრელის ზედაპირი ასხივებს, როგორც შავი სხეული და ხვრელიდან გამოსული გამოსხივება წარმოადგენს წონასწორულ სითბურ გამოსხივებას.



ნახ. 2.1 აბოლუტურად შავი სხეულის მოდელი

აღნიშნულ შავი სხეულის გამოსხივების სპექტრალური სიმკვრივე U_ω -თი. მისი განზომილებაა – ჯ/(სმ³.რად/წმ). ω ციკლურ სიხშირესა და ν სიხშირეს შორის

$$\omega = 2\pi \nu \quad (2.1)$$

თანაფარდობის გათვალისწინებით $U_\nu = 2\pi U_\omega$, ე.ი. ერთ ჰერცზე მოსული U_ω ენერგიის სიმკვრივე 2π -ჯერ ნაკლებია U_ν ენერგიის სიმკვრივეზე. თეორიულ გამოთვლებში უფრო მოსახერხებელია U_ω სიდიდით სარგებლობა, ხოლო პრაქტიკულ გამოთვლებში კი – U_ν -თი. საზოგადოდ, მნიშვნელოვანია ასევე გამოსხივების ინტენსივობის შესწავლა, რაც შავი სხეულის შემთხვევაში აღინიშნება B_ω და B_ν სიდიდეებით. ექსპერიმენტული დაკვირვების შედეგები ხშირად მოიცემა ერთეულოვანი ტალღის სიგრძისათვის და არა სიხშირისათვის. შესაბამისი ინტენსივობა აღინიშნება B_λ სიდიდით, ხოლო სათანადო ენერგიის სიმკვრივე კი – U_λ -თი. რასაკვირველია, სპექტრის გარკვეულ ინტერვალზე მოსული ენერგიის რაოდენობა არ არის დამოკიდებული სკალის არჩევაზე და ამიტომ U_ω , U_ν და U_λ სიდიდეებისათვის სამართლიანი შემდეგი ტოლობა

$$U_\lambda \Delta\lambda = U_\omega \Delta\omega = U_\nu \Delta\nu \quad (2.2)$$

ტალღის სიგრძეთა $\Delta\lambda$ და სიხშირეთა $\Delta\omega$ და $\Delta\nu$ ინტერვალები ერთმანეთთან შემდეგი თანაფარდობებით არიან დაკავშირებული

$$\lambda = c/\nu, \quad \nu = \omega/2\pi \quad (2.3)$$

საიდანაც

$$\Delta\omega = 2\pi \cdot \Delta\nu, \quad \Delta\lambda = \frac{c}{\nu^2} \cdot \Delta\nu = \frac{2\pi c}{\omega^2} \cdot \Delta\omega \quad (2.4)$$

აღსანიშნავია, რომ სპექტრალური ინტერვალები სათანადო ცვლადების დიფერენციალების მოდულის ტოლია. მართლაც (2.2)-დან ნათელია, რომ $dU/d\nu$ სიდიდე უარყოფითია, მაშინ როდესაც $\Delta\lambda$ და $\Delta\omega$ სიდიდეები დადებითად განსაზღვრული სიდიდეები არიან.

რადგანაც შავი სხეულის შიგნით ველი იზოტროპულია, მისი ნაკადი ნულის ტოლია. მიუხედავად ამისა არსებობს სპეციალური მოდელი, რომელშიც განიხილება იზოტროპული წყაროს არა შიდა არე, არამედ მისი სასაზღვრო უბანი. სასაზღვრო უბნის გამოსხივება არაიზოტროპულია და მის მიერ წარმოქმნილი ველის ნაკადი ნულისგან განსხვავებულია. ამ მოდელის ფარგლებში სამართლიანია ე.წ. სტეფან-ბოლცმანის კანონი, რომლის თანახმადაც შავი სხეულის გამოსხივების სრული ნაკადი (გამოსხივების სრული სპექტრის მიხედვით ინტეგრირებული) პროპორციულია ტემპერატურის მეოთხე ხარისხის

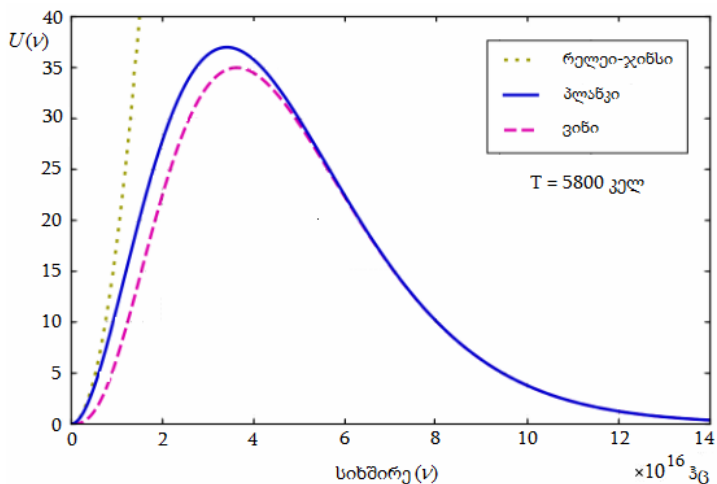
$$U = \int_0^{\infty} U_{\omega} d\omega = \sigma T^4 \quad (2.5)$$

სადაც $\sigma = 5,67 \cdot 10^{-8} \text{ ვტ} \cdot \text{მ}^2 \cdot \text{კელ}^{-4}$ სტეფან-ბილცმანის მუდმივაა, ხოლო T – თერმოდინამიკური ტემპერატურა. ეს ფორმულა ხშირად გამოიყენება ასტროფიზიკაში შორეული ვარსკვლავების გამოსხივების უნარის შესწავლისას მისი ტემპერატურის მიხედვით. ამისათვის საჭიროა გამოსხივების სიმკვრივიდან გაზომვად სიდიდეზე – ნაკადზე გადასვლა. ნაკადის ინტეგრალური (სპექტრის მიხედვით) ფორმულა გამოყვანილია ქვევით.

რელეი-ჯინსისა და ვინის ფორმულები

დაბალი სიხშირეების $\hbar\omega \ll kT$ არეში (k ბოლცმანის მუდმივაა), რომელსაც რელეი-ჯინსის არე ეწოდება გამოსხივების ენერჯის სიმკვრივე პროპორციულია აბსოლუტური ტემპერატურისა და სიხშირის კვადრატის:

$$U_{\omega} \propto T\omega^2 \quad (2.6)$$



ნახ. 2.2. აბსოლუტურად შავი სხეულის გამოსხივების სპექტრი (აქ სიხშირე ციკლურ სიხშირეს (2.1) ფორმულით უკავშირდება)

ნახ. 2.2-ზე ეს უბანი შეესაბამება ნერტილოვანი მრუდის მარცხნივ მდებარე არეს. რელეი-ჯინსის ფორმულა შეიძლება გამოყვანილი იქნას წმინდა კლასიკური წარმოდგენების საფუძველზე კვანტური წარმოდგენების გარეშე.

(2.6) ფორმულის განვრცობა მაღალსიხშირული არეებისათვის არამართებულია (ნახ 2.2-ზე ნერტილოვანი მრუდით ნაჩვენები უბანი). ასეთი სპექტრალური განაწილების სიმკვრივისათვის მთელ სპექტრში ნაინტეგრები ენერჯის სიმკვრივე უსასრულოდ დიდი სიდიდეა:

$$\int_0^{\infty} U_{\omega} d\omega \rightarrow \infty.$$

ამ მოვლენას „ულტრაიისფერი კატასტროფა“ ეწოდება.

მაღალი სიხშირებისათვის $\hbar\omega \gg kT$ (ნახ.2.2-ზე უბანი „ვინი“) სამართლიანია ვინის ფორმულა

$$U_{\omega} \propto \omega^3 \exp\left(-\frac{a\omega}{kT}\right). \quad (2.7)$$

ამ ფორმულიდან ჩანს, რომ (2.7)-ის მარჯვენა მხარე ω -ს არამონოტონური ფუნქციაა. კერძოდ, დაბალი სიხშირებისათვის ფუნქციის ყოფაქცევას განსაზღვრავს ω^3 მამრვალი და ამიტომ U_{ω} ზრდადია. სიხშირის ზრდასთან ერთად U_{ω} -ს ზრდის ტემპი მცირდება, იგი გადის მაქსიმუმის მნიშვნელობას, შემდეგ კი მცირდება ექსპონენციალური კანონით. სწორედ ამ მაქსიმუმის არსებობით განსხვავდება გამოსხივების სპექტრის ვინის უბანი რელეი-ჯინსის უბნისგან.

რაც უფრო მაღალია ტემპერატურა მით უფრო მაღალი სიხშირებისაკენ ინაცვლებს ვინის ფორმულის სამართლიანობის ქვედა საზღვარი. (2.7)-ში a კოეფიციენტის სიდიდე დამოკიდებულია ერთეულთა სისტემის არჩევაზე, რომელშიც იზომება ტემპერატურა და სიხშირე. ვინის ფორმულის მისაღებად საჭიროა სინათლის კვანტური ბუნების გათვალისწინება.

(2.7) ფორმულის შესაბამისი ფუნქციის მაქსიმუმი აღვნიშნოთ ω_{\max} -თი. მაშინ ვინის წანაცვლების კანონის თანახმად

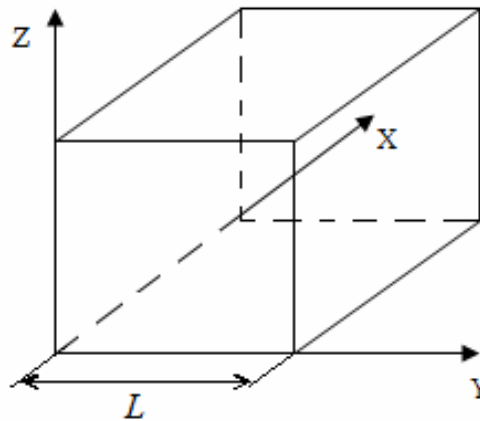
$$\frac{\omega_{\max}}{T} = \text{const} \quad (2.8)$$

ანუ ω_{\max} პროპორციულია აბსოლუტური ტემპერატურის. მუდმივას მნიშვნელობა ასევე დამოკიდებულია ტემპერატურისა და სიხშირისათვის ერთეულთა სისტემის არჩევაზე. იგი სხვადასხვაა B_v და B_λ ფუნქციებისათვის.

მოცულობის ერთეულში ოსცილატორების რიცხვის გამოთვლა

შვეცადოთ ავხსნათ ზემოთ მოყვანილი ექპერიმენტული ფაქტები. ამისათვის მოსახერხებელია შემოვიტანოთ სილრუეში ოსცილატორებისა და მდგრადი ტალღების ცნება. სილრუის კედლების ატომები შეიძლება გავაიგივოთ კლასიკურ ოსცი-

ლატორთა ერთობლიობასთან, რომელთაც შეუძლიათ ენერჯის გაცვლა სიღრუეში არსებულ გამოსხივებასთან. თერმოდინამიკური წონასწორობის პირობებში სიღრუეში არსებული გამოსხივება, თავის მხრივ, შეიძლება წარმოვიდგინოთ, როგორც მდგრადი ტალღების, ანუ ე.წ. „მოდეების“ ერთობლიობა. სიღრუე მოსახერხებელია წარმოვიდგინოთ L ნიბოს მქონე კუბის სახით (ნახ. 3).



ნახ. 3. მოდეების კონცენტრაციის გამოსათვლელი მოდელი

ასეთ სიღრუეში მდგრადი ტალღები ჩამოყალიბდებიან მხოლოდ იმ შემთხვევაში, როდესაც კუბის ორი მოპირდაპირე კედლიდან ტალღების არეკვლისა და $2L$ მანძილის გავლის შედეგად ტალღები საწყის მდებარეობას დაუბრუნდებიან მათი საწყისი ფაზისგან $2\pi n$ სიდიდით განსხვავებული ფაზით, სადაც n მთელი რიცხვია. ამიტომ მდგრადი ტალღების დამყარების პირობა ასე ჩაინერება

$$k \cdot 2L = 2\pi n \tag{2.9}$$

ანუ

$$k_x \cdot 2L = 2\pi n_x, k_y \cdot 2L = 2\pi n_y, k_z \cdot 2L = 2\pi n_z$$

სადაც k_x, k_y, k_z დადებითად განსაზღვრული ტალღური რიცხვებია, n_x, n_y, n_z – მთელი რიცხვები, ხოლო $k = \sqrt{k_x^2 + k_y^2 + k_z^2}$ – ტალღური ვექტორის მოდული.

($\omega, \omega + d\omega$) სპექტრალურ ინტერვალზე მოსული გამოსხივების ენერჯია $U_\omega d\omega$ განისაზღვრება ამავე სპექტრალურ ინტერვალში არსებული მოცულობის ერთეულზე მოსული $\langle E \rangle$ საშუალო ენერჯის მქონე ოსცილატორების dN_ω რიცხვით:

$$U_\omega d\omega = dN_\omega \langle E \rangle / V \tag{2.10}$$

ამრიგად, ამოცანა $\langle E \rangle$ და dN_ω სიდიდეების გამოთვლაზე დაიყვანება.

მოდების რაოდენობა

სილრუეში ოსცილატორების რიცხვის გამოთვლას ჩვენ შევეუდგებით რელეის მიერ შემოთავაზებული და ჯინსის მიერ რეალიზებული მეთოდის დახმარებით. ამ მეთოდის თანახმად dN_ω სილრუეში მდგრადი ტალღების, ანუ მოდების რაოდენობის ტოლი უნდა იყოს. გამოთვლები მოსახერხებელია ჩატარდეს ნახ. 2.4-ით განსაზღვრულ სფერულ სფერულ კოორდინატა სისტემაში.

ტალღათა რიცხვი, რომელთა ტალღური ვექტორი მოთავსებულია ტალღათა $k, k+dk$ ინტერვალში (2.9) ფორმულის გათვალისწინებით მოიცემა შემდეგნაირად

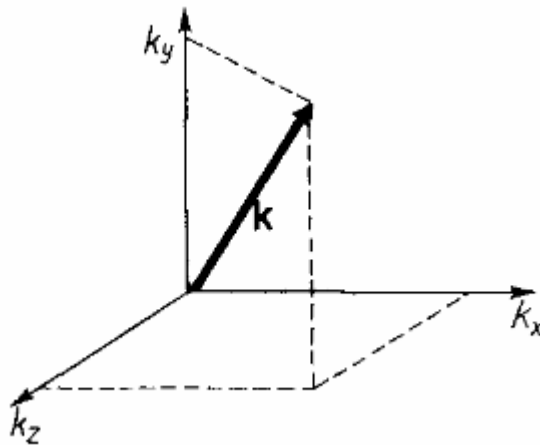
$$dN_k = dn_x dn_y dn_z = (L/\pi)^3 dk_x dk_y dk_z = (L/2\pi)^3 4\pi k^2 dk \quad (2.11)$$

თუ გავითვალისწინებთ $k = \omega/c$ თანაფარდობას, სადაც c – ვაკუუმში სინათლის სიჩქარეა, ტალღათა რიცხვისთვის სიხშირეთა $\omega, \omega+d\omega$ ინტერვალში მივიღებთ

$$\frac{dN_\omega}{L^3} = \frac{\omega^2 d\omega}{2\pi^2 c^3} \quad (2.12)$$

რამდენადაც ელექტრომაგნიტურ ტალღას აქვს ორი შესაძლო პოლარიზაცია, სილრუეში მდგრადი ტალღების სრული კონცენტრაციისათვის მივიღებთ

$$\frac{dN_\omega}{L^3} = \frac{\omega^2 d\omega}{\pi^2 c^3} \quad (2.13)$$



ნახ 2. 4. ტალღური ვექტორი სფერულ კოორდინატა სისტემაში

აღსანიშნავია, რომ (2.13) ფორმულა არ შეიცავს პლანკის მუდმივას. ეს გარემოება მიუთითებს იმაზე, რომ (2.13) ფორმულა მიიღება კლასიკური ფიზიკის ფარგლებში.

კლასიკური ოსცილატორის საშუალო ენერგია

როგორც ცნობილია, ერთგანზომილებიანი კლასიკური ოსცილატორის ენერგია მოიცემა შემდეგი ფორმულით

$$E(p, q) = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2 q^2}{2} \quad (2.14)$$

სადაც p და q შესაბამისად განზოგადებული იმპულსი და კოორდინატია. კლასიკური სტატისტიკის თანახმად ნაწილაკთა ენერგიების მიხედვით თანაბარი განაწილებისას (ჩვენს შემთხვევაში ოსცილატორებისათვის) განაწილების კანონს აქვს შემდეგი სახე

$$W(E) = A \exp(-E/kT), \quad (2.15)$$

სადაც E ოსცილატორის ენერგიაა, k – ბოლცმანის მუდმივა, ხოლო T – აბსოლუტური ტემპერატურა. მაშინ ოსცილატორის $\langle E \rangle$ საშუალო ენერგია უდრის

$$\langle E \rangle = \frac{A \iint E(p, q) \exp(-E(p, q)/kT) dpdq}{A \iint \exp(-E(p, q)/kT) dpdq}. \quad (2.16)$$

თუ შემოვიტანთ აღნიშვნებს

$$P = \frac{p}{\sqrt{2m}}, \quad Q = q\omega\sqrt{\frac{m}{2}}, \quad (2.17)$$

მაშინ

$$\langle E \rangle = \frac{\iint (P^2 + Q^2) \exp(-(P^2 + Q^2)/kT) dPdQ}{\iint \exp(-(P^2 + Q^2)/kT) dPdQ} \quad (2.18)$$

მიღებულ გამოსახულებში P და Q ცვლადები განცალდება. საერთო მამრავლზე შეკვეცის შემდეგ მივიღებთ

$$\langle E \rangle = \frac{\iint P^2 \exp(-P^2/kT) dP}{\iint \exp(-P^2/kT) dP} + \frac{\iint Q^2 \exp(-Q^2/kT) dQ}{\iint \exp(-Q^2/kT) dQ} \quad (2.19)$$

ორივე შესაკრების მრიცხველსა და მნიშვნელში მდგომი ინტეგრალები დამატებაშია გამოთვლილი. ამის შემდეგ შეიძლება ოსცილატორის საშუალო ენერგიის საბოლოო ფორმულის მიღება:

$$\langle E \rangle = kT. \quad (2.20)$$

მივიღეთ ცნობილი შედეგი, რომლის თანახმადაც თერმოდინამიკურ წონასწორობაში მყოფი სისტემის ერთ თავისუფლების ხარისხზე მოსული ენერგია $kT/2$ -ს ტოლია, ხოლო ჯამში ერთ ოსცილატორზე მოდის (ვინაიდან ერთგანზომილებიან ოსცილატორს აქვს 2 თავისუფლების ხარისხი) – kT -ს ტოლი ენერგია.

ახლა თუ (2.10) ფორმულაში შევიტანთ (2.13) და (2.20) გამოსახულებებს მივიღებთ:

$$U_\omega d\omega = \frac{\omega^2 d\omega}{\pi^2 c^3} kT \sim \omega^2 T d\omega \quad (2.21)$$

რაც ემთხვევა ფორმულა (2.6)-ს. ამრიგად რელეი-ჯინსის ფორმულა აიხსნება მხოლოდ კლასიკური წარმოდგენების საფუძველზე.

კვანტური ოსცილატორის საშუალო ენერგია

როგორც უკვე აღვნიშნეთ, ვინის ფორმულის მისაღებად საჭიროა სინათლის კვანტური ბუნების გათვალისწინება. იმისათვის, რომ აეხსნა შავი სხეულის გამოსხივების სპექტრის თავისებურებანი პლანკმა გამოთქვა ჰიპოთეზა ოსცილატორების ენერგეტიკული სპექტრის დისკრეტულობის შესახებ. ამ ჰიპოთეზის თანახმად, ოსცილატორს (ატომს) შეუძლია ენერგიის მხოლოდ დისკრეტული პორციების (კვანტების) სახით შთანთქმა და გამოსხივება. ეს ჰიპოთეზა აშკარა წინააღმდეგობაში მოდიოდა კლასიკური ფიზიკის წარმოდგენებთან. პლანკის თანახმად კვანტის ენერგია

$$\epsilon_0 = \hbar \omega, \quad (2.22)$$

სადაც ω – ოსცილატორის სიხშირეა, $\hbar = 1,054 \cdot 10^{-34}$ ჯ/ნმ – პლანკის მუდმივა. თვით ოსცილატორი კი შეიძლება იმყოფებოდეს დისკრეტულ ენერგეტიკულ მდგომარეობებში შემდეგი ენერგიებით:

$$E = E_n = n \epsilon_0 = n \hbar \omega, \quad (2.23)$$

სადაც

$$n = 0, 1, 2, \dots$$

ამრიგად, ოსცილატორის ენერგეტიკული დონეები ხასიათდებიან ე.წ. ეკვიდისტანტური სპექტრით: ნებისმიერ ორ მეზობელ ენერგეტიკულ დონეს შორის სხვაობა მუდმივი სიდიდეა. ოსცილატორს შეუძლია იმყოფებოდეს თითოეულ ამ მდგომარეობაში, ხოლო მეზობელ მდგომარეობებში გადასვლისას კი ოსცილატორი ასხივებს ან შთანთქმავს $\hbar \omega$ სიდიდის ენერგიის კვანტს.

პლანკის ჰიპოთეზის თანახმად ერთგანზომილებიანი ოსცილატორის საშუალო ენერგიის გამოსათვლელად (2.16) ფორმულაში საჭიროა ინტეგრალების ჯამებით შეცვლა, რის შედეგადაც მივიღებთ

$$\langle E \rangle = \frac{\sum_{n=0}^{\infty} E_n \exp\left(-\frac{E_n}{kT}\right)}{\sum_{n=0}^{\infty} \exp\left(-\frac{E_n}{kT}\right)}. \quad (2.24)$$

თუ შემოვიღებთ უგანზომილებო ცვლადს $x = \hbar\omega/kT$ (2.24) ფორმულა ასე გადაინერება

$$\langle E \rangle = \hbar\omega \frac{\sum_{n=0}^{\infty} n \exp(-nx)}{\sum_{n=0}^{\infty} \exp(-nx)} = \hbar\omega \frac{A}{B}. \quad (2.25)$$

ამ გამოსახულების მნიშვნელი

$$B = 1 + e^{-x} + e^{-2x} + e^{-3x} + \dots + e^{-nx} + \dots \quad (2.26)$$

წარმოადგენს უსასრულო კლებადი გეომეტრიული პროგრესიის ჯამს:

$$B = \frac{1}{1 - e^{-x}}. \quad (2.27)$$

თუ B -ს x -ით გავანარმოებთ მივიღებთ:

$$\frac{dB}{dx} = -e^{-x} - 2e^{-2x} - 3e^{-3x} - \dots - ne^{-nx} + \dots = -\sum_{n=0}^{\infty} ne^{-nx}, \quad (2.28)$$

საიდანაც

$$A = -\frac{dB}{dx} = \frac{e^{-x}}{(1 - e^{-x})^2}. \quad (2.29)$$

ახლა ადვილად დავრწმუნდებით, რომ

$$\frac{A}{B} = \frac{e^{-x}}{1 - e^{-x}} = \frac{1}{e^x - 1}. \quad (2.30)$$

ამრიგად, ოსცილატორის საშუალო ენერგია განისაზღვრება T აბსოლუტური ტემპერატურით და $\hbar\omega$ კვანტის ენერგიით

$$\langle E \rangle = \frac{\hbar\omega}{\exp\left(\frac{\hbar\omega}{kT}\right) - 1}. \quad (2.31)$$

თუ შემოვიტანთ სიდიდეს

$$n_\omega = \frac{1}{\exp\left(\frac{\hbar\omega}{kT}\right) - 1}, \quad (2.32)$$

რომელიც წარმოადგენს რხევის ერთ მოდაზე მოსულ ფოტონების რაოდენობას, მაშინ ოსცილატორის საშუალო ენერგიისათვის მივიღებთ:

$$\langle E \rangle = \hbar\omega \cdot n_\omega. \quad (2.33)$$

თუ ახლა (2.13) და (2.33) ფორმულებს შევიტანთ (2.10)-ში კვანტური ეფექტების გათვალისწინებით გამოსხივების ენერგიის სპექტრალური სიმკვრივისათვის საბოლოოდ მივიღებთ

$$U_\omega d\omega = \frac{\omega^2 d\omega}{\pi^2 c^3} \hbar\omega \cdot n_\omega = \frac{\hbar\omega^3 d\omega}{\pi^2 c^3} \frac{1}{\exp\left(\frac{\hbar\omega}{kT}\right) - 1} \quad (2.34)$$

მიღებული ფორმულა წარმოადგენს პლანკის ფორმულას, რომელიც აღწერს აბსოლუტურად შავი სხეულის გამოსხივების სპექტრს მთელ სიხშირულ დიაპაზონში.

პლანკის ფორმულის ზღვრული შემთხვევები

ადვილი მისახვედრია, რომ პლანკის ფორმულიდან შეიძლება მივიღოთ როგორც რელიე-ჯინსის, ასევე ვინის ფორმულები. მართლაც თუ $\hbar\omega \ll kT$ მაშინ (2.34) ფორმულაში ექსპონენციალური წევრი შეგვიძლია გავშალოთ მწკრივად და შემოვისაზღვროთ გაშლის მხოლოდ პირველი წევრით, რის შედეგადაც მივიღებთ:

$$U_\omega d\omega \approx \omega^2 T d\omega / (\pi^2 c^3) \quad (2.35)$$

ეს ნიშნავს, რომ $n_\omega \approx kT/\hbar\omega \gg 1$ ანუ ოსცილატორების აღზნებული მდგომარეობების დიდი რიცხვი არის გააქტიურებული. თუ $\hbar\omega \gg kT$ მაშინ (2.34) ფორმულა გვაძლევს

$$U_\omega d\omega \approx \hbar\omega^3 \exp(-\hbar\omega/kT) d\omega / (\pi^2 c^3) \quad (2.36)$$

ეს ნიშნავს, რომ $n_\omega \approx \hbar\omega \cdot \exp(-\hbar\omega/kT) \ll 1$ ანუ ოსცილატორის აღზნებული მდგომარეობების დასახლება ექსპონენციალურად მცირეა.

ვინის წანაცვლების კანონი

როგორც უკვე აღვნიშნეთ, მოცემული ტემპერატურისთვის შავი სხეულის გამოსხივების ენერგიის სიმკვრივე, წარმოადგენს სიხშირის არამონოტონური ფუნქციას: სპექტრის კლასიკურ დიაპაზონში ის ზრდადია, ხოლო როცა $\hbar\omega \gg T$ ფუნქცია ხდება კლებადი.

ω_{\max} სიხშირე დამოკიდებულია ტემპერატურაზე. იმისათვის, რომ შევაფასოთ $\omega_{\max}(T)$ დამოკიდებულება განვიხილოთ ჯერ სპექტრის ვინის უბანი. სათანადო სპექტრალური სიმკვრივე ავლნიშნოთ «W» ინდექსით. (2.36) ფორმულის თანახმად

$$U_{\omega}^W \approx \hbar \omega^3 \exp(-\hbar \omega / kT) / (\pi^2 c^3) \quad (2.37)$$

უგანზომილებო ცვლადებში (2.37) ფორმულა ასე გამოისახება

$$U_{\omega}^W = \frac{T^3}{\pi^2 c^3 \hbar^2} f^W(x), \quad (2.38)$$

სადაც

$$f^W(x) = x^3 e^{-x} \quad (2.39)$$

$f^W(x)$ ფუნქციის მაქსიმუმი მოდის არგუმენტის $x_{\max}^W = 3$ მნიშვნელობაზე.

დავაზუსტოთ მაქსიმუმის მდებარეობის მიღებული მნიშვნელობა. ამისათვის პლანკის ფორმულა ჩავენერთ, როგორც უგანზომილებო x ცვლადის ფუნქცია

$$U_{\omega} = \frac{T^3}{\pi^2 c^3 \hbar^2} f(x), \quad f(x) = \frac{x^3}{e^x - 1}. \quad (2.40)$$

$df/dx = 0$ პირობას მივყავართ ტრანსცენდენტულ განტოლებამდე x ცვლადის მიმართ

$$3(1 - e^{-x}) = x. \quad (2.41)$$

ამ განტოლების ფესვი ვეძებთ შემდეგი სახით $x=3-\delta$, სადაც δ მცირე შესწორებაა. ამის გათვალისწინებთ მივიღებთ

$$\delta = e^{-3+\delta} \quad (2.42)$$

და გავშალოთ e^{δ} მცირე პარამეტრის

$$e^{\delta} \approx 1 + \delta + \delta^2/2. \quad (2.43)$$

შედეგად ტრანსცენდენტული განტოლება გადაიქცევა კვადრატულ განტოლებად δ -ს მიმართ

$$\frac{3}{2}\delta^2 - (e^3 - 3)\delta + 3 = 0. \quad (2.44)$$

ჩვენთვის საინტერესო ფესვია

$$\delta = \frac{e^3 - 3 - \sqrt{(e^3 - 3)^2 - 18}}{3} = 0.178 \quad (2.45)$$

საიდანაც

$$x = 3 - \delta = 2.822. \quad (2.46)$$

თუ მიღებულ შედეგს შევიტანთ x -ის განმარტებაში და ტემპერატურას კელვინებში გამოვსახავთ მივიღებთ სიხშირეთა სკალაზე ვინის წანაცვლების კანონს

$$T \cdot \lambda_{\max} = 0.50996 \text{ სმ} \cdot \text{კელ} \quad (2.47)$$

მაქსიმუმის სიხშირე ტალღის სიგრძეთა სკალაზე

როგორც (2.2) ფორმულიდან ჩანს

$$U_\lambda = U_\omega \left| \frac{d\omega}{d\lambda} \right| = \frac{16\pi^2 c \hbar}{\lambda^5} \frac{1}{\exp(2\pi c \hbar / \lambda T) - 1}. \quad (2.48)$$

წინა პარაგრაფის ანალოგიურად შემოვიტანოთ უგანზომილებო ცვლადი $x = 2\pi \hbar c / (\lambda T)$. ამ შემთხვევაში განაწილების ფუნქციის მაქსიმუმი განისაზღვრება

$$f(x) = \frac{1}{x^5 (e^x - 1)} \quad (2.49)$$

ფუნქციის მაქსიმუმით. ვინის მიახლოებაში $x_{\max}^w = 5$. თუ აქაც წინა პარაგრაფის მსგავსად მოვიქცევით $\delta = 5 - x$ სხვაობისათვის მივიღებთ $\delta \approx 0.0349$ და შესაბამისად $x_{\max} = 4.965$. ვინის წანაცვლების კანონს ტალღის სიგრძეთა სკალაზე ექნება სახე:

$$T \cdot \lambda_{\max} = 0.28979 \text{ სმ} \cdot \text{კელ} \quad (2.50)$$

ამრიგად, პლანკის ფუნქციის მაქსიმუმი მოდის ტალღის სიგრძეთა სხვადასახვა მნიშვნელობებზე, იმისდა მიხედვით ვიხილავთ განაწილებას ტალღის სიგრძის თუ სიხშირის მიხედვით. მაგალითად, მზის ყველაზე უფრო კაშკაშა გამოსხივება შეესაბამება 5500\AA ტალღის სიგრძეს თუ დაკვირვება წარმოებს ტალღის სიგრძეთა სკალაზე და შეესაბამება 8800\AA ტალღის სიგრძეს თუ დაკვირვება წარმოებს სიხშირეთა სკალაზე. ადამიანის თვალის აღქმის უნარი ახლოს არის ტალღის სიგრძეთა სკალასთან. ამიტომ, მზის გამოსხივების სპექტრში მაქსიმუმის მოსაძებნად ჩვეულებრივ (2.50) ფორმულით სარგებლობენ.

თავი 3

სტეფან-ბოლცმანის კანონი

წინა თავში გამოვიყვანეთ გამოსხივების ენერჯიის სიმკვრივის სიხშირეზე დამოკიდებულების კანონი. მაგრამ ბევრ ამოცანაში გამოიყენება სიხშირის მიხედვით ნაინტეგრები გამოსხივების ინტეგრალური მახასიათებლები: ენერჯიის სიმკვრივე, ინტენსივობა და ნაკადი. ამიტომ ახლა შევუდგებით ამ ინტეგრალური მახასიათებლების გამოთვლას.

ენერჯიის ინტეგრალური სიმკვრივე

მეორე თავის (2.34) ფორმულა ვაინტეგრით სიხშირეთა მთელი ინტერვალის მიხედვით:

$$U = \int_0^{\infty} U_{\omega} d\omega. \quad (3.1)$$

თუ ახლა კვლავ შემოვიტანთ უგანზომილებო $x = \hbar\omega/kT$ ცვლადს მივიღებთ, რომ ენერჯიის სიმკვრივე აბსოლუტური ტემპერატურის მეოთხე ხარისხის პროპორციულია (იხილეთ დამატება ბ):

$$U = aT^4, \quad (3.2)$$

სადაც

$$a = \frac{\pi^2 k^4}{15c^2 \hbar^3} = 7.56464 \cdot 10^{-16} \text{ჯ}\cdot\text{მ}^{-3}\cdot\text{კელ}^{-4}.$$

a მამარავლს უწოდებენ სტეფან-ბოლცმანის მუდმივას. იგი განსხვავდება ლიტერატურაში ცნობილი σ სტეფან-ბოლცმანის მუდმივასაგან, რომლისთვისაც სამართლიანია ფორმულა

$$M_j = \sigma T^4 \quad (3.3)$$

სადაც M_j – ენერგეტიკული ნათებაა, ანუ სხეულის ზედაპირის ფართის ერთეულის მიერ გამოსხივებული სიმძლავრე. σ -ს განსასაზღვრავად საჭიროა ისეთი მოდელის შემოღება, რომლისთვისაც შავი სხეულის გამოსხივების ნაკადი ნულისაგან განსხვავებულია. ასეთი მოდელი შემოღებული იქნება შემდეგ პარაგრაფში, ახლა კი გამოვითვალთ შავი სხეულის მოცულობის ერთეულში კვანტების (ფოტონების) $N_{\text{ფ}}$ სრული რიცხვი. ამისათვის საჭიროა მეორე თავის (2.34) ფორმულა გავყოთ ფოტონის ენერჯიაზე და ვაინტეგრით სიხშირეების მიხედვით (იხილეთ დამატება ბ):

$$N_{\text{ფ}} = \frac{1}{\pi^2 c^3} \int_0^{\infty} \frac{\omega^2 d\omega}{\exp(\hbar\omega/kT) - 1} = \frac{\Gamma(3)\zeta(3)}{\pi^2} \left(\frac{T}{ch}\right)^3. \quad (3.4)$$

თუ ტემპერატურას გრადუსებში გავზომავთ, მაშინ

$$N_{\text{ფ}} \approx 20.3 \cdot T^3. \quad (3.5)$$

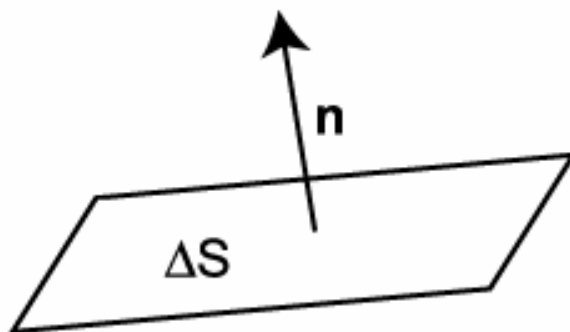
მაგალითად, რელიქტური გამოსხივებისათვის, რომლის ტემპერატურაც ცნობილია და უდრის 2.73 კელვინს

$$N_{\text{ფ}} \approx 400 \frac{\text{ფოტონი}}{\text{სმ}^3}.$$

ეს უკანასკნელი სიდიდე საგრძნობლად აღემატება სამყაროში ნაწილაკთა საშუალო სიმკვრის მნიშვნელობას, რომელიც სხვადასხვა შეფასებებით იცვლება 10^{-3} სმ^{-3} -დან 10^{-6} სმ^{-3} მდე.

ინტენსივობა

გამოსხივების ველის აღწერა ემყარება ინტენსივობის ცნებას, რომელიც წარმოადგენს მოცემულ სიხშირეთა ინტერვალში მოცემული მიმართულებით დროის ერთეულში ფართის ერთეულში ენერჯიის ნაკადს. ინტენსივობის განსასაზღვრავად ხელსაყრელია შემდეგი მსჯელობის ჩატარება. ვთქვათ მოცემული გვაქვს სიბრტყე განსაზღვრული მისი \mathbf{n} ნორმალის მიმართულებით (ნახ 3.1). ΔS -ით ავლნიშნოთ ამ სიბრტყის ფართობი. გამოსხივება ხასიათდება ორი სიდიდით: \mathbf{k} ტალღური ვექტორით და მის გარშემო შემოწერილი $\Delta \Omega$ სხეულოვანი კუთხით. მოცემული \mathbf{k} -სა და $\Delta \Omega$ -სთვის საუბარია \mathbf{k} ტალღური ვექტორის გასწვრივ $\Delta \Omega$ სხეულოვან კუთხეში მოქცეულ გამოსხივებაზე. ზოგჯერ ლაპარაკია მხოლოდ \mathbf{k} ტალღური ვექტორის გასწვრივ მიმართულ გამოსხივებაზე. ამავდროულად იგულისხმება რა $\Delta \Omega$ სხეულოვანი კუთხე. განვიხილოთ გამოსხივება, რომელიც მიმართულია \mathbf{n} ვექტორის გასწვრივ. ΔS და $\Delta \Omega$ სიდიდეები ჩავთვალოთ ისე მცირედ, რომ ΔS ფართობის გასწვრივ გამოსხივება შეიძლება განვიხილოთ ერთგვაროვნად და იზოტროპულად $\Delta \Omega$ სხეულოვანი კუთხის შიგნით. დავაკვირდეთ გამოსხივების გავრცელებას ისეთი მცირე დროის ინტერვალის განმავლობაში, რომლის დროსაც გამოსხივების ვერ-



ნახ.3.1. სიბრტყე და მისი ნორმალი

ცერთი მახასიათებელი სიდიდე ვერ ასწრებს ცვლილებას. ამ შემთხვევაში Δt დროში ΔS ფართობი გასული ΔE ენერგია, რომელიც შეესაბამება $\Delta\omega$ სიხშირეთა ინტერვალს $\Delta S \cdot \Delta\Omega \cdot \Delta\omega \cdot \Delta t$ ნამრავლის პროპორციული იქნება. შესაბამისად

$$\frac{\Delta E}{\Delta S \cdot \Delta\Omega \cdot \Delta\omega \cdot \Delta t} \quad (3.6)$$

სიდიდე არ იქნება დამოკიდებული არც სიბრტყის ΔS ფართობზე, არც დაკვირვების Δt დროზე და არც გაშლის $\Delta\Omega$ კუთხეზე. მაგრამ (3.6) ფორმულით მაინც არ შეიძლება გამოსხივების ველის დახასიათება, რამდენადაც იგი კვლავ დამოკიდებული რჩება ფართობის ნორმალის მიმართულებაზე. მართლაც, თუ ფართობს დავხრით ისე, რომ \mathbf{k} და \mathbf{n} ვექტორებს შორის წარმოიქმნება θ კუთხე, მაშინ იგივე გამოსხივების ველის ΔS ფართობში გასული ენერგია შემცირდება $|\cos\theta|$ -ს პროპორციულად, ანუ სხვა სიტყვებით რომ ვთქვათ, ფართობში გამავალი ენერგია პროპორციულია ტალღის გავრცელების ფრონტის სიბრტყეზე ამ ფართობის პროექციისა:

$$\Delta E \propto \Delta S \cos\theta. \quad (3.7)$$

ამრიგად სიდიდე

$$\frac{\Delta E}{\Delta S \cos\theta \Delta\omega \Delta\Omega \Delta t} \quad (3.8)$$

უკვე აღარ არის დამოკიდებული ფართობის ორიენტაციაზე და შეიძლება გამოდგეს გამოსხივების მახასიათებელ სიდიდედ.

თუ ΔS , $\Delta\omega$, $\Delta\Omega$ და Δt სიდიდეებს მივასწრაფებთ ნულისკენ, მივიღებთ ზღვარს, რომელსაც ეწოდება ინტენსივობა.

$$I_\omega = \frac{dE}{dS \cos\theta d\Omega d\omega dt}. \quad (3.9)$$

ითვლება, რომ ინტენსივობა ყოველთვის დადებითია. ამიტომ საჭიროა მივუწეროთ გარკვეული ნიშანი ელემენტარულ ფართობი გამავალ dE ენერგიას. კერძოდ, რამდენადაც $\Delta E/\cos\theta$ სიდიდე დადებითია, (3.9)-დან გამომდინარეობს, რომ

$$\Delta E = \begin{cases} > 0, & \theta < \pi/2 \\ < 0, & \theta > \pi/2 \end{cases} \quad (3.10)$$

ამ შეთანხმების საფუძველზე შემუშავებულია შემდეგი ტერმინოლოგია. თუ θ კუთხე მახვილია ამბობენ, რომ გამოსხივება „გამოდის“ ფართობიდან, ხოლო თუ θ კუთხე ბლაგვია გამოსხივება „შედის“ მასში. \mathbf{n} ვექტორის მიმართულების საპირისპიროთი შეცვლის შედეგად „გამომავალი“ გამოსხივება გარდაიქმნება „შემავალში“ და პირიქით.

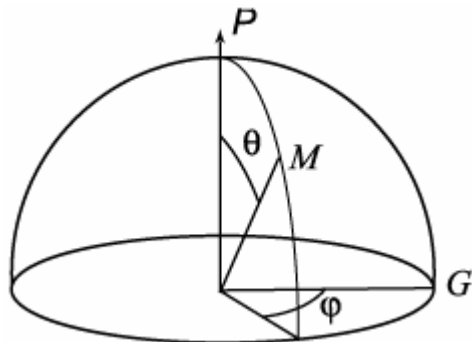
სიმეტრიის გათვალისწინება

შემოვიღოთ სფერულ კოორდინატა სისტემა ისე როგორც ეს ნახ. 3.2-ზე არის ნაჩვენები. კოორდინატა სათავე მოვათავსოთ ფართობის ცენტრში, ხოლო პოლუსის გასწვრივ მიმართულება დავამთხვიოთ \mathbf{n} ვექტორის მიმართულებას. ღერძების ასეთი არჩევის შედეგად M წერტილის შესაბამისი პოლარული კუთხე ემთხვევა ჩვენ მიერ ზემოთ შემოტანილ \mathbf{n} და \mathbf{k} ვექტორებს შორის θ კუთხეს. აზიმუტური კუთხე φ აითვლება ეკვატორის გასწვრივ PG ნულოვანი მერიდიანიდან.

პრაქტიკული მიზნებისათვის საინტერესოა ისეთი გამოსხივების შესწავლა, რომელიც ხასიათდება მაღალი სიმეტრიით, როგორც მინიმუმ ცილინდრული სიმეტრიით მაინც. ეს გარემოება გვაძლევს, რომ \mathbf{n} ვექტორი მივმართოთ სიმეტრიის ღერძის გასწვრივ. ნულოვანი მერიდიანის არჩევა ნებისმიერად არის შესაძლებელი, რადგანაც გამოსხივების ინტენსივობა არ არის დამოკიდებული φ კუთხეზე. ამიტომ φ -თი ინტეგრაცია ამ შემთხვევაში დაიყვანება უბრალოდ 2π -ზე გამრავლებაზე. შესაბამისად, გამოსხივების ინტენსივობა დამოკიდებული რჩება მხოლოდ θ პოლარულ კუთხეზე და სამართლიანია შემდეგი თანაფარდობა

$$\iint I_{\omega} f(\theta) d\Omega = 2\pi \int_0^{\pi} I_{\omega}(\theta) f(\theta) d\theta, \quad (3.11)$$

რაც საშუალებას გვაძლევს ორჯერადი ინტეგრალი დავიყვანოთ ერთჯერადზე. აქ $f(\theta)$ – წარმოადგებს პოლარული კუთხის ნებისმიერ ფუნქციას.



ნახ. 3.2. სფერულ კოორდინატა სისტემა

გამოსხივების ნაკადი

კოსმოსურ ობიექტებს შორის გვხვდება ბევრი წერტილოვანი გამოსხივების წყაროები, ანუ ისეთი გამომსხივებლები, რომელთა კუთხური ზომები ობიექტის სიშორის გამო გაცილებით ნაკლებია ტელესკოპის გარჩევის უნარიანობაზე. მათ რიცხვს მიეკუთვნება, მზის გარდა, პრაქტიკულად ყველა ვარსკვლავი. ასეთი გამომსხივებლებისათვის ინტენსივობის ცნება აზრს კარგავს და მათ გამოსხივებას

ახასიათებენ სხვა ფიზიკური სიდიდით – *გამოსხივების ნაკადით*. ნაკადი წარმოადგენს მოცემული მიმართულების მქონე გამოსხივების ერთეულოვან ფართობში გამავალი სრული ენერჯიის ზომას.

სრული სხეულოვანი კუთხე 4π გავყოთ მცირე $\Delta\Omega_i$ ზომის N ნაწილად

$$\sum_{i=1}^N \Delta\Omega_i = 4\pi. \quad (3.12)$$

ახლა გავზომოთ ის ΔE_i ენერჯია, რომელიც გაედინება რაღაც ფართობში $\Delta\Omega_i$ სხეულოვანი კუთხის მიმართულებით და გამოვითვალოთ შემდეგი ჯამი

$$\Delta E = \sum_{i=1}^N \Delta E_i. \quad (3.13)$$

ამასთან ჩვენ ვითვალისწინებთ (3.8) ფორმულას. თუ ენერჯია „შედის“ ფართობში ΔE_i დადებითია, ხოლო თუ „გამოდის“ ფართობიდან – უარყოფითი. უსასრულოდ მცირე სხეულოვან კუთხეებად დაყოფისას მივიღებთ

$$\Delta E = \oint dE, \quad (3.14)$$

სადაც კონტურული ინტეგრალი შეგვახსენებს, რომ ინტეგრება ხდება ყველა მიმართულებით dE -ს ნიშნის გათვალისწინებით. ნაკადი ეწოდება ზღვარს

$$F_\omega = \frac{\int dE}{dS dt d\omega}. \quad (3.15)$$

თუ შევადარებთ (3.15) და (3.9) ფორმულებს შეგვიძლია ნაკადი გამოვსახოთ ინტენსივობის საშუალებით

$$F_\omega = \oint I_\omega \cos\theta d\Omega. \quad (3.16)$$

ნერტილოვანი წყაროებისთვის იზომება სწორედ გამოსხივების ნაკადი. ცილინდრული სიმეტრიის შემთხვევაში სამართლიანია ფორმულა

$$F_\omega = 2\pi \int_0^{2\pi} I_\omega(\theta) \sin\theta \cos\theta d\theta. \quad (3.17)$$

(3.15) ფორმულაში კუთხური ცვლადებით აჯამვა ერთი შეხედვით ნიშნავს, რომ ნაკადი არ არის დამოკიდებული მიმართულებაზე. მაგრამ აქ მყდავანდება განსხვავება ინტენსივობასა და ნაკადს შორის. თუ ჩვენ შევცვლით ფართობის ნორმალის მიმართულებას ისე, რომ არ შევცვლით გამოსხივების ველს, მაშინ ინტენსივობა ნებისმიერი მიმართულებით დარჩება იგივე, ხოლო ნაკადის სიდიდე კი შეიცვლება. ამიტომ ნაკადის გამოთვლისას მნიშვნელოვანია მივუთითოთ თუ რომელ ფართს განჭოლავს იგი. როგორც წესი ლაპარაკი იქნება დაკვირვების მიმართულების პერპენდიკულარულად განთავსებული სიბრტყის გამჭოლ ნაკადზე.

საშუალო ინტენსივობა

საშუალო ინტენსივობა განიმარტება, როგორც ყველა მიმართულებით ნაინტეგრები ინტენსივობის შეფარდება 4π სხეულოვან კუთხესთან

$$J_{\omega} = \frac{1}{4\pi} \oint I_{\omega} d\Omega. \quad (3.18)$$

იზოტროპული გამომსხივებლის შემთხვევაში

$$I_0 = I_{\omega} \quad (3.19)$$

მუდმივი მამრავლი I_0 გადის ინტეგრალის გარეთ და იმის გათვალისწინებით, რომ სრული სხეულოვანი კუთხე უდრის 4π -ს მივიღებთ

$$J_{\omega} = I_0. \quad (3.20)$$

(3.20) ფორმულაში ჩვენ ვჯამავთ სწორედ ინტენსივობას და არა ფართობში გამავალ ენერგიის ნაკადს. ამით განსხვავდება საშუალო ინტენსივობა ნაკადისგან. ეს განსხვავება განსაკუთრებით მყლავნდება სწორედ იზოტროპული გამომსხივებლის შემთხვევაში. ამ შემთხვევაში „შესული“ და „გამოსული“ ენერგიების რაოდენობა ერთნაირია ყველა მიმართულებით საიდანაც გამომდინარეობს, რომ ნებისმიერი ფართობის გამჭოლი ენერგიის სრული ნაკადი ნულის ტოლია.

ინტენსივობა და ენერგიის სიმკვრივე

შემოვიტანოთ $dU_{\omega}(\Omega)$ სიდიდე, რომელიც აღნიშნავს $d\Omega$ სხეულოვან კუთხეში მოძრავი კვანტების ენერგიის სიმკვრივეს. მაშინ Δt დროში კვანტების მოძრაობის მიმართულების პერპენდიკულარულ ΔS ფართობში გაედინება $dU_{\omega}(\Omega) \cdot \Delta S \cdot c \cdot \Delta t$ ტოლი ენერგია (c – სინათლის სიჩქარეა). თუ გავითვალისწინებთ (3.9) თანაფარდობას მივიღებთ

$$dU_{\omega}(\Omega) = \frac{1}{c} I_{\omega} d\Omega, \quad (3.21)$$

საიდანაც ენერგიის ინტეგრალური სიმკვრივისათვის მიიღება შემდეგი გამოსახულება

$$U_{\omega} = \frac{1}{c} \oint I_{\omega} d\Omega, \quad (3.22)$$

ან თუ გავითვალისწინებთ (3.14) ფორმულას გვექნება

$$U_{\omega} = \frac{4\pi}{c} J_{\omega}. \quad (3.23)$$

ამრიგად, გამოსხივების ენერგიის სიმკვრივე ცალსახად უკავშირდება საშუალო ინტენსივობას.

სტეფან-ბოლცმანის ფორმულა

ზემოთ ავლენიშნეთ, რომ იზოტროპული გამომსხივებლის შემთხვევაში ნებისმიერი ფართობის გამჭოლი ენერგიის სრული ნაკადი ნულის ტოლია. მაგრამ თუ განვიხილავთ იზოტროპული გამომსხივებლის საზღვარს, ეს მტკიცება სამართლიანი აღარ იქნება. მართლაც, თუ იზოტროპული გამომსხივებლის საზღვრის ფორმულირებისათვის შემოვიტანთ შემდეგ მოდელს

$$I_{\omega}(\theta) = \begin{cases} I_0, & \theta < \frac{\pi}{2} \\ 0, & \theta > \frac{\pi}{2}, \end{cases} \quad (3.24)$$

(აქ θ არის კუთხე საზღვრის ზედაპირის ნორმალსა და გამოსხივების მიმართულე-ბას შორის) მაშინ (3.17) ფორმულის თანახმად გვექნება $F = \pi I_0$. (3.24) ფორმულის შინაარსი იმაში მდგომარეობს, რომ მართალია საზღვრიდან „გამომავალი“ გამოსხი-ვება იზოტროპულია, არ არსებობს საზღვარში „შემავალი“ გამოსხივება. ამიტომაც სასაზღვრო გამოსხივების ენერგიის ნაკადი განსხვავებულია ნულისგან.

სტეფან-ბოლცმანის ფორმულა მთელ სპექტრით ნაინტეგრები F გამოსხივების ნაკადისათვის სამართლიანია სწორედ ზემოაღნიშნული მოდელის ფარგლებში. შა-ვი სხეულის შიგნით I ინტენსივობა უდრის კუთხეებით გასაშუალოებულ თავისსავე J მნიშვნელობას, რომელიც თავის მხრივ (3.23) ფორმულის დახმარებით გამოისახე-ბა ენერგიის სიმკვრივის საშუალებით.

საბოლოოდ, (3.16) ფორმულის გამოსხივების მთელი სპექტრით ინტეგრებით და (3.17) ფორმულის გათვალისწინებით გამოსხივების სრული ნაკადისათვის მივი-ღებთ

$$F = \sigma T^4, \quad (3.25)$$

სადაც

$$\sigma = \frac{c}{4} a = \frac{\pi^2 k^4}{60 c^2 \hbar^3} = 5.6686 \cdot 10^{-8} \text{ ჯ}/(\text{მ}^2 \text{ წმ კელ}^4).$$

გამოსხივების ნაკადისათვის სტეფან-ბოლცმანის მუდმივაა. აღსანიშნავია, რომ (3.26) და (3.10) ფორმულების შედარებით ვასკვნით, რომ $M_j \equiv F$.

თავი 4

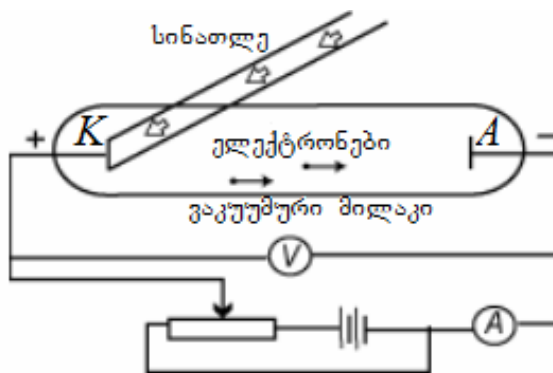
გამოსხივების კორპუსკულური თვისებები

ჩვენს ყოველდღიურ ცხოვრებაში ნაწილაკისა და ტალღის თვისებები მკვეთრად გამოიხატება. მაგრამ მიკროსამყაროში ვლინდება ე.წ. კორპუსკულურ-ტალღური დუალიზმის მოვლენა: ნაწილაკები ამჟღავნებენ ტალღურ თვისებებს, ხოლო ტალღები კი პირიქით – კორპუსკულარულს. პლანკის კვანტური ჰიპოთეზა სათანადოდ იქნა შეფასებული ფიზიკური საზოგადოების მიერ და შემდგომი განვითარება განსაკუთრებით აინშტაინის შრომებში ჰპოვა. პლანკი თავდაპირველად ვარაუდობდა, რომ კვანტი არის ენერჯის პორცია, რომლის გაცვლითაც ხდება კვანტური ოსცილატორების გამოსხივების ველთან ურთიერთქმედება. აინშტაინმა კი კვანტზე ჩამოაყალიბა განსხვავებული წარმოდგენა, რომლის თანახმადაც კვანტი წარმოადგენდა სინათლის სიჩქარით მოძრავ ნაწილაკს და ხასიათდებოდა $\epsilon_0 = h\nu$ ენერჯიით.

ამ თავში ჩვენ შევისწავლით ორ მოვლენას, რომელშიც გამოსხივება ხასიათდება კორპუსკულური თვისებებით. ესენია ფოტოეფექტი და კომპტონის ეფექტი. რაც შეეხება ნაწილაკთა ტალღურ თვისებებს ამაზე მოგვიანებით ვისაუბრებთ.

ფოტოეფექტი

ფოტოეფექტის მოვლენა აღმოჩენილი იქნა 1887 წელს გერმანელი ფიზიკოსის ჰერცის მიერ. ფოტოელექტრონული ეფექტი, ანუ ფოტოეფექტი ეწოდება მოვლენას, რომლის დროსაც სინათლის ზემოქმედებით ლითონის ზედაპირიდან ხდება ელექტრონების ამოგდება. ფოტოეფექტის კანონების შესწავლა მოხდა დანადგარზე, რომლის მონაცემების პრინციპული სქემა ნახ. 4.1-ზეა მოცემული. ვაკუუმურ მილაკში ჩარჩილულ K კათოდს მილაკის ფანჯრის საშუალებით ასხივებენ გარკვეული ინტენსივობისა და სიხშირის მონოქრომატული გამოსხივებით. კათოდიდან

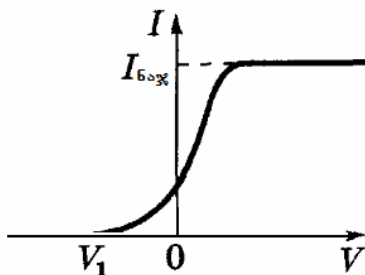


ნახ. 4.1. ფოტოეფექტის ცდის სქემა

ამოიტყორცნებიან ელექტრონები, რომლებიც მიემართებიან ანოდისაკენ და წრედში ჩართული ამპერმეტრი აღრიცხავს ელექტრულ დენს. კათოდსა და ანოდს შორის საჭიროა დამამუხრუჭებელი პოტენციალის მოდება, რათა შეწყდეს ფოტოდენი. ამრიგად შესაძლებელია ასეთი ხელსაწყო ე.წ. ვოლტ-ამპერული მახასიათებლის აგება: დენის ძალის დამოკიდებულება კათოდსა და ანოდს შორის მოდებულ პოტენციალთა სხვაობაზე. ეს დამოკიდებულება ნაჩვენებია ნახ. 4.2-ზე. მისთვის დამახასიათებელია შემდეგი თავისებურებები: ფოტოდენი ხასიათდება ე.წ. ნაჯერობის თვისებით, რომლის თანახმადაც კათოდიდან ამოტყორცნილი ყველა ელექტრონი აღწევს ანოდს და მეორე – არსებობს უბანი, რომელზედაც ფოტოდენი მცირდება ნულამდე ჩამკეტი ძაბვის რაღაც $V_1 < 0$ მნიშვნელობისათვის.

მრავალრიცხოვანი ექსპერიმენტებით დადგენილი იქნა ფოტოეფექტის შემდეგი კანონები:

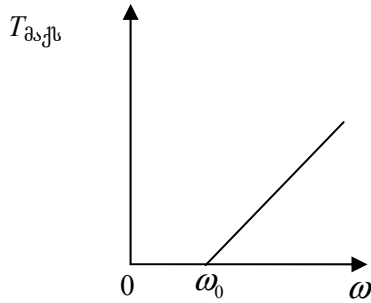
- 1) ნაჯერობის ფოტოდენი (ერთი და იგივე სპექტრალური შემადგენლობის დროს) დაცემული სინათლის ნაკადის პროპორციულია. ეს ნიშნავს, რომ ერთ წამში სინათლის მიერ კათოდიდან ამოგდებული ელექტრონების რაოდენობა დაცემული სინათლის სიმძლავრის პროპორციულია.
- 2) ყოველი მეტალისათვის არსებობს ტალღის სიგრძის ზღვრული λ_k მნიშვნელობა, რომლის დროსაც ჯერ კიდევ ხდება ელექტრონების ამოგდება. თუ ტალღის სიგრძე აღემატება λ_k -ს ე.წ. ფოტოეფექტის წითელ საზღვარს კათოდიდან ფოტოელექტრონების ამოგდება წყდება დაცემული სინათლის დიდი ინტენსივობის შემთხვევაშიც კი (გამონაკლისია ძალიან ძლიერი ინტენსივობის სინათლით, მაგალითად ლაზერით დასხივება, რომლის დროსაც წითელი საზღვარი ქრება).



ნახ. 4.2. ფოტოეფექტის ვოლტ-ამპერული მახასიათებელი

- 3) ფოტოელექტრონების მაქსიმალური კინეტიკური ენერგია დაცემული სინათლის სიხშირის წრფივი ფუნქციაა და არ არის დამოკიდებული სინათლის ინტენსივობაზე (ნახ. 4.3).

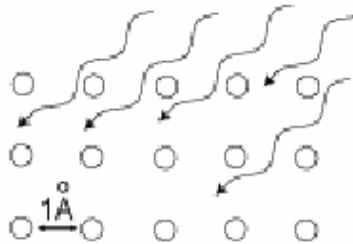
ნახ 4.3-ზე ω_k ფოტოეფექტის წითელი საზღვარია. $\omega < \omega_k$ სიხშირის გამოსხივებას არ შეუძლია აღძრას ფოტოდენი თვით ძლიერი გამოსხივების შემთხვევაშიც კი.



ნახ.4.3 ფოტოელექტრონების მაქსიმალური ენერგია

კლასიკური წარმოდგენების თანახმად, სინათლის მიერ ელექტრონების ამოგლეჯის ფაქტი არ წარმოადგენს უცნაურ მოვლენას. მართლაც თუ დაცემულ სინათლეს განვიხილავთ, როგორც ელექტრომაგნიტურ ტალღას, მაშინ ეს ტალღა გამოიწვევს მეტალში არსებული ელექტრონების იძულებით რხევებს. ელექტრონი შთანთქავს რა ელ.მაგ. ველის ენერგიას თანდათანობით მოახდენს იმ რაოდენობის ენერგიის აკუმულირებას, რომელიც საკმარისი იქნება პოტენციური ბარიერის დასაძლევად, რომელიც აკავებს ელექტრონს მეტალში, ანუ ელექტრონის გამოსვლის მუშაობის ტოლ ენერგიას. თუ ეს ასეა მაშინ ფოტოელექტრონების ენერგია დამოკიდებული უნდა ყოფილიყო სინათლის ინტენსივობაზე. ინტენსივობის გაზრდას კი მივყავართ მხოლოდ ფოტოელექტრონების რიცხვის ზრდასთან.

განსაკუთრებით საინტერესოა მცირე ინტენსივობის სინათლის დასხივების შედეგად მიმდინარე ფოტოეფექტის მოვლენის შესწავლა. ამ შემთხვევაში კლასიკური ფიზიკის თანახმად ფოტოეფექტის მოვლენისას უნდა დაიმზირებოდეს ე.წ. დაგვიანების ეფექტი. მართლაც, დავუშვათ კათოდს ვახსივებთ არაუმეტეს 10^{-10} ვტ/სმ² = 10^9 ევ/სმ²წმ ინტენსივობის სინათლით. კათოდის ნივთიერების კრისტალური სტრუქტურა ნაჩვენებია ნახ. 4.4-ზე. მესრის კვანძებს შორის მანძილი დაახლოებით $1 \text{ \AA} = 10^{-10}$ მ-ის რიგისაა.



ნახ. 4.4 კრისტალის აღზნება ელ.მაგ. ტალღის მიერ

დავუშვათ, რომ კრისტალური მესრის თითოეული ატომიდან ელექტრომაგნიტური ტალღა აგდებს ერთ ელექტრონს და აღწევს კათოდის ზედაპირის სიღრმეში ტალღის სიგრძის რიგის მანძილზე $\lambda \approx 1000 \text{ \AA}$ ანუ კრისტალის ათასი ფენის სის-

ქის მანძილზე. თითოეული ფენის ერთ კვადრატულ სანტიმეტრზე მოდის 10^{16} ატომი. ამრიგად, ერთ კვადრატულ სანტიმეტრზე დაცემული სინათლის ნაკადი ნაწილდება 10^{19} ატომს შორის. თუ თითოეული ატომიდან ამოიტყორცნება ერთი ელექტრონი, მაშინ ელექტრონების მიერ ენერგიის შექმნის სიჩქარე იქნება $10^9/10^{19}=10^{-10}$ ევ/წმ. იმისათვის, რომ ელექტრონმა შეძლოს კათოდის დატოვება (გამოსვლის მუშაობა 1 ევ-ის რიგისაა) საჭიროა 10^{10} წამი, ანუ დაახლოებით 300 წელი, რაც სრულ წინააღმდეგობაშია ექსპერიმენტთან. ექსპერიმენტი გვიჩვენებს რომ დაგვიანების დრო არ აღემატება 10^{-9} წმ-ს. წინააღმდეგობა დარჩება იმ შემთხვევაშიც თუ დავუშვებთ, რომ გამოსხივება მხოლოდ მეტალის გარე შრეს ანათებს. მართალია, ამ შემთხვევაში ენერგიის შექმნის სიჩქარე ათასჯერ გაიზრდება, დაგვიანების დრო მაინც ძალზედ დიდი – დაახლოებით ოთხი თვის ტოლი იქნება.

კლასიკური ფიზიკის მოსაზრებებზე დაყრდნობით ასევე ვერ იხსნება ფოტოელექტრონის კინეტიკური ენერგიის სინათლის სიხშირეზე პირდაპირპროპორციული დამოკიდებულება. მართლაც, თუ ელექტრომაგნიტური ველის დაძაბულობა არის E , ხოლო ელ-მაგ. ველის მიერ აღძრული ელექტრონის რხევის სიჩქარე v , მაშინ ნიუტონის მეორე კანონის თანახმად $m\dot{v} = eE$, საიდანაც თუ გავითავალისწინებთ, რომ $V \propto \exp(i\omega t)$ მივიღებთ $v = ieE/m\omega$. (აქ e ელექტრონის მუხტია). ამრიგად, ელექტრონის კინეტიკური ენერგია სიხშირის კვადრატის უკუპროპორციულად უნდა მცირდებოდეს, რაც სრულ წინააღმდეგობაშია ექსპერიმენტთან.

ყველა ზემოთხსენებული წინააღმდეგობები ქრება თუ ω სიხშირის გამოსხივებას წარმოვიდგენთ, როგორც $\hbar\omega$ ენერგიის მქონე სინათლის სიჩქარით მოძრავი კორპუსკულების (ფოტონების) ნაკადს. ფარდობითობის თეორიის თანახმად თუ ნაწილაკს გააჩნია \mathcal{E} ენერგია, მაშინ მისი მასა $m = \mathcal{E}/c^2$. ფოტონისათვის გვექნება

$$m = \hbar\omega/c^2 . \quad (4.1)$$

როგორც (4.1) ფორმულიდან ვხედავთ, ფოტონის მასა სასრული სიდიდეა. რადგანაც ფოტონი წარმოადგენს სინათლის კვანტს იგი c სინათლის სიჩქარით მოძრაობს. მაშინ $m = m_0/\sqrt{1-v^2/c^2}$ ფორმულის თანახმად გამოდის, რომ იმისათვის, რომ ფოტონის მასა სასრული სიდიდე დარჩეს აუცილებელია, რომ ფოტონს არ გააჩნდეს უძრაობის მასა ანუ $m_0 = 0$. ამრიგად ფოტონი წარმოადგენს განსაკუთრებულ ნაწილაკს, რომელსაც ელექტრონისგან, პროტონისგან, ნეიტრონისგან და სხვა უძრაობის მასის მქონე ნაწილაკებისგან განსხვავებით უძრაობის მასა არ გააჩნია და მხოლოდ c სიჩქარით მოძრაობის შემთხვევაში შეუძლია არსებობა. მაშინ $\mathcal{E}^2 - p^2c^2 = m^2c^4$ რელატივისტური თანაფარდობიდან ადვილად მივიღებთ, რომ ფოტონს

$$p = \mathcal{E}/c = \hbar\omega/c = 2\pi\hbar/\lambda \quad (4.2)$$

იმპულსი გააჩნია. თუ გავითვალისწინებთ, რომ ტალღური რიცხვი $k = 2\pi/\lambda$ წარმოადგენს \mathbf{k} ტალღური ვექტორის მოდულს, მაშინ ფოტონის იმპულსი ვექტორული სახით ასე ჩაიწერება

$$\mathbf{p} = \hbar \mathbf{k} . \quad (4.3)$$

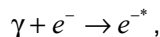
ფოტოეფექტის მოვლენის დროს ფოტონი შთაინთქმება, გადასცემს რა მთელ თავის ენერგიას ძირითადად ატომის ელექტრონს. ფოტოეფექტის მესამე კანონი კი უბრალოდ წარმოადგენს ენერგიის შენახვის კანონს

$$T_{\text{მაქს}} = \hbar \omega - A = \hbar \left(\omega - \frac{A}{\hbar} \right) = \hbar(\omega - \omega_0), \quad (4.4)$$

სადაც $A = \hbar \omega_0$ მეტალის გამოსვლის მუშაობაა. ამ ფორმულას აინშტაინის ფორმულას უწოდებენ. ამ ფორმულის თანახმად ფოტონის ენერგიის ნაწილი იხარჯება გამოსვლის მუშაობაზე, ხოლო დარჩენილი ნაწილი კი გადადის ელექტრონის კინეტიკურ ენერგიაში. (4.4) ფორმულიდან ნათელია, რომ მინიმალური სიხშირე, რომლის დროსაც ჯერ კიდევ ადგილი აქვს ფოტოეფექტს, არის $\omega = \omega_0$ -ს. თუ $\omega < \omega_0$ -ზე მაშინ ფოტონის ენერგია არ არის საკმარისი, იმისთვის, რომ ელექტრონმა შესძლოს A „სიმაღლის“ პოტენციური ბარიერის გადალახვა და მეტალის ზედაპირიდან ამოსვლა. ამით აიხსნება ფოტოეფექტის წითელი საზღვრის არსებობა (ფოტოეფექტის მეორე კანონი).

სინათლის ნაკადის ენერგიის სიმკვრივე პირდაპირპროპორციულია ფოტონების ნაკადის სიმკვრივის, ანუ განივკვეთის ერთეულოვან ფართობზე ერთ წამში მოსული ფოტონების რაოდენობის. დროის ერთეულში ამოგდებული ფოტოელექტრონების რაოდენობა პირდაპირპროპორციულია ფოტონების ნაკადის სიმკვრივის. აქედან გამომდინარეობს, რომ დროის ერთეულში მეტალის ზედაპირიდან ამოგდებული ელექტრონების რიცხვი პირდაპირპროპორციულია სინათლის ნაკადის სიმკვრივის, ანუ სინათლის სიმძლავრის (ფოტოეფექტის პირველი კანონი).

(4.4) ფორმულაში ატომური ნაშთის, ანუ ატომის ბირთვისა და ნარჩენი ელექტრონების როლი ცხადი სახით არ ჩანს. ერთი შეხედვით შეიძლება მოგვეჩვენოს, რომ აღნიშნულ მოდელში ატომბირთვის გათვალისწინების აუცილებლობა არ არის: ელექტრონი თვითონ შთანთქავს კვანტის ენერგიას და ამით გადალახავს ზემოდსხენებულ გამოსვლის მუშაობის ტოლ პოტენციურ ბარიერს. ძალიან იოლად შეიძლება ვაჩვენოთ ამ პროცესში მესამე ნაწილაკის მონაწილეობის აუცილებლობა. წინააღმდეგ შემთხვევაში ირღვევა იმპულსის შენახვის კანონი. ვაჩვენოთ ეს შემდეგი რეაქციის განხორციელების შეუძლებლობის მაგალითზე



რომელშიც ფოტონს შთანთქავს თავისუფალი ელექტრონი. დავწეროთ ენერგია – იმპულსის შენახვის კანონი „ფოტონი + ელექტრონი“ ჩაკეტილი სისტემისათვის:

$$\begin{aligned} \hbar \omega + m_e c^2 &= \sqrt{p^2 c^2 + m_e^2 c^4} \\ \hbar \mathbf{k} &= \mathbf{p} \end{aligned} \quad (4.5)$$

მეორე განტოლება გვეუბნება, რომ ელექტრონი დაჯახებამდე უძრავი იყო. თუ პირველ განტოლებას ავიყვანთ კვადრატში და p^2 -ის ნაცვლად შევიტანთ $\hbar^2 k^2$ -ს მი-

ვიღებთ უაზრო შედეგს: $\omega = 0$. ამას აქვს მარტივი ახსნა: ფოტონს და ელექტრონს არ შეიძლება ერთდროულად გააჩნდეთ ენერჯისა და იმპულსის ერთნაირი მნიშვნელობები. ეს განსაკუთრებით თვალსაჩინოა არარელატივისტური ელექტრონების შემთხვევაში, რომლის დროსაც სამართლიანია თანაფარდობა $E = p v / 2$. თუ

გავიხსენებთ, რომ $E_{\text{ფ}} = p_{\text{ფ}} c$ მივიღებთ $\frac{E}{E_{\text{ფ}}} = \frac{1}{2} \frac{p}{p_{\text{ფ}}} \frac{v}{c}$. ამ უკანასკნელი ფორმულიდან

კარგად ჩანს, რომ როცა $v \ll c$ ფოტონისა და ელექტრონის ენერჯიების ტოლობისათვის აუცილებელია, რომ $p \gg p_{\text{ფ}}$.

ახლა ჩავწეროთ ენერჯია-იმპულსის შენახვის კანონი სამი ნაწილაკისგან შემდგარი სისტემისათვის

$$\hbar\omega = \frac{P^2}{2M} + \frac{p^2}{2m_e} + I. \quad (4.6)$$

$$\hbar\mathbf{k} = \mathbf{P} + \mathbf{p}. \quad (4.7)$$

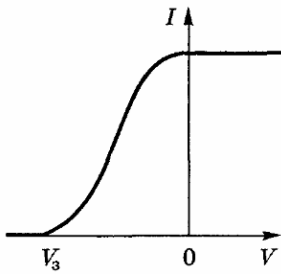
აქ \mathbf{P} და M , შესაბამისად ბირთვის იმპულსი და მასაა. მნიშვნელოვანია აღინიშნოს, რომ (4.6) განტოლებაში შედის I იონიზაციის პოტენციალი და არა A გამოსვლის მუშაობა, რადგანაც ამ შემთხვევაში საქმე გვაქვს ე.წ. შინაგან ფოტოეფექტთან, როდესაც ადგილი აქვს ელექტრონის ატომიდან ამოგდების მოვლენას და არა გარეგან ფოტოეფექტს, როდესაც ელექტრონი მეტალის გამტარებლობის ელექტრონებიდან ამოვარდება, რომელსაც პრაქტიკულად ნულოვანი გამოსვლის მუშაობა აქვს. რამდენადაც ბირთვის მასა სამი რიგით მეტია ელექტრონის მასასთან შედარებით $M > 1836 m_e$. ეს საშუალებას იძლევა ერთდროულად შესრულდეს ორი უტოლობა

$$\frac{P^2}{2M} \ll \hbar\omega, \quad (4.8)$$

$$P \gg \hbar k. \quad (4.9)$$

(4.8) საშუალებას გვაძლევს არ გავითვალისწინოთ ბირთვის ენერჯია და (4.6) დავიყვანოთ (4.4)-ზე. მიუხედავად იმისა, რომ ელექტრონის p და ბირთვის P იმპულსები აბსოლუტური მნიშვნელობით მნიშვნელოვნად აღემატებიან ფოტონის $\hbar k$ იმპულსს, \mathbf{P} და \mathbf{p} ვექტორები მიმართულნი არიან სხვადასხვა მხარეს და მათი ჯამი შეიძლება უდრიდეს სიდიდით მცირე $\hbar k$ ვექტორს. ამრიგად, ბირთვი უზრუნველყოფს ელექტრონის იმპულსის მიმართულებისა და სიდიდის კომპენსირებას და პრაქტიკულად არ მიაქვს კვანტის ენერჯია.

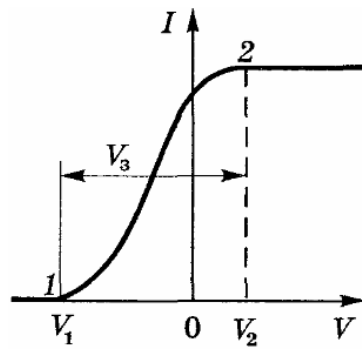
ახლა დავუბრუნდეთ ნახაზ 4.2-ზე გამოსახულ ვოლტ-ამპერულ მახასიათებელს. როგორც ცნობილია, ორ სხვადასხვა მეტალს შორის იმის გამო, რომ მათ აქვთ განსხვავებული ელექტრონის გამოსვლის მუშაობები აღიძვრება ე.წ. *პოტენციალთა კონტაქტური სხვაობა*. ეს ფაქტი აუცილებლად გასათვალისწინებელია ფოტოეფექტის შესწავლის დროს, რადგანაც, როგორც წესი, კათოდი და ანოდი სხვადასხვა მასალებისგან არიან დამზადებულნი. შედეგად ვოლტ-ამპერული მახა-



ნახ. 4.5

სიათბელი წინაცვლებს მთლიანად ან მარჯვნივ ან მარცხნივ იმის და მიხედვით თუ როგორია კონტაქტური პოტენციალთა სხვაობის ნიშანი. კათოდი და ანოდი ერთი და იმავე მასალისგან რომ ყოფილიყვენ დამზადებულნი ცხადია მათ შორის კონტაქტური პოტენციალთა სხვაობა არ იარსებებდა და V_1 -ის განსაზღვრა დავიდოდა მხოლოდ ვოლტმეტრის ჩვენების აღებაზე ნახ(4.5) ($V_3 \equiv V_1$ სადაც V_3 დამამუხრუჭებელი პოტენციალია). მართლაც, როცა $V=0$ საწყისი სიჩქარის მიუხედავად ყველა ფოტოელექტრონი მიაღწევს ანოდს და უკვე დამყარდება ნაჯერობის რეჟიმი.

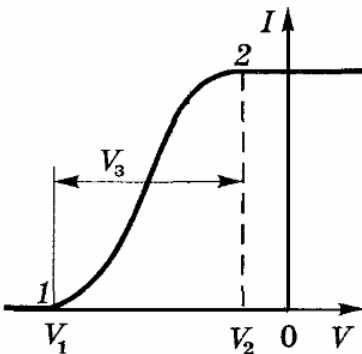
დამამუხრუჭებელი პოტენციალის განსაზღვრა რთულდება, როცა ანოდი და კათოდი სხვადასხვა მასალისგან არიან დამზადებულნი. ამ შემთხვევაში თუ მაგალითად, კონტაქტური პოტენციალთა სხვაობა ისეთია, რომ იგი ამუხრუჭებს კათოდიდან ამოტყორცნილ ელექტრონებს, საჭიროა ანოდსა და კათოდს შორის მოვდოთ ისეთი გარეშე პოტენციალი, რომელიც დააკომპენსირებს დამამუხრუჭებელ კონტაქტურ პოტენციალთა სხვაობას. ეს გამოიწვევს ვოლტამპერული მახასიათებლის მრუდის მარჯვნივ წინაცვლებას (ნახ 4.6). ამრიგად დამამუხრუჭებელი პოტენციალთა სხვაობა უდრის



ნახ. 4.6

$$V_3 = V_2 + |V_1| = V_2 - V_1 \quad (4.10)$$

უნდა აღინიშნოს, რომ V_1 ალგებრული სიდიდეა და შეიძლება იყოს როგორც დადებითი ასევე უარყოფითი ან ნული.



ნახ. 4.7

თუ კონტაქტური პოტენციალთა სხვაობა კი არ ამუხრუჭებს არამედ აჩქარებს ელექტრონებს, მაშინ ვოლტამპერული მახასიათებელი წინაცვლებს მარცხნივ. ამასთან (4.10) ფორმულაში ორივე შესაკრები უარყოფითი ხდება, მაგრამ მათი სხვაობა V_3 კი კვლავ დადებითია (ნახ. 4.7).

ამრიგად, V_3 -ის გაზომვით ჩვენ შეგვიძლია განვსაზღვროთ ფოტოელექტრონების მაქსიმალური კინეტიკური ენერგია

$$T_{\text{მაქს}} = eV_3 = e(V_2 - V_1).$$

დამუხრუჭებითი რენტგენული გამოსხივება

რენტგენული გამოსხივება აღიძვრება ანოდის სწრაფი ელექტრონებით ბომბარდირების დროს. გავარვარებული სპირალიდან ხდება ელექტრონების ამოფრქვევა, რომლებიც მოხვდებიან კათოდსა და ანოდს შორის არსებულ პოტენციალთა სხვაობაში და აჩქარდებიან ანოდის მიმართულებით. ანოდთან დაჯახების შედეგად ელექტრონები მკვეთრად მუხრუჭდებიან რის შედეგადაც აღიძვრება ე.წ. დამუხრუჭებითი რენტგენული გამოსხივება. ეს ყველაფერი ცხადია მოთავსებულია მაღალი ვაკუუმის მქონე კამერაში, ჰაერთან ელექტრონების დაჯახებების შედეგად გამონვეული დანაკარგების თავიდან ასაცილებლად. ჩვეულებრივ რენტგენის დანადგარში ანოდსა და კათოდს შორის პოტენციალთა სხვაობა 100 კილოვოლტის რიგის არის. მაგრამ არსებობს ისეთი დანადგარებიც, რომლებშიც ძაბვა მილიონ ვოლტსაც აღწევს. ამ შემთხვევაში უკვე მიიღება კიდევ უფრო მაღალი სიხშირის ელექტრომაგნიტურ გამოსხივება – გამა გამოსხივება. რენტგენული გამოსხივება წარმოადგენს ელექტრომაგნიტურ გამოსხივებას, რომლის ტალღის სიგრძეც იცვლება 106მ-დან 0,0016მ-მდე. რენტგენის გამოსხივებაზე ასეთი წარმოდგენა პირველად შემოგვთავაზა სტოქსმა 1897 წელს. თვით რენტგენი მიიჩნევდა, რომ აღმოჩენილი გამოსხივება წარმოადგენდა სინათლის განივ ტალღებს. სტოქსის თანახმად კი დამუხრუჭებული ელექტრონი ექვივალენტური იყო ცვლადი დენის, რომელიც როგორც უკვე ცნობილი იყო ჰერცის ექსპერიმენტებიდან ახდენდა ელექტრომაგნიტური ველის გენერირებას. მაგრამ ჰერცის ექსპერიმენტებისაგან განსხვავებით ელექტრონის დამუხრუჭებისას არ აღიძვრებოდა დენის რხევები. ამიტომ სტოქსმა რენტგენული გამოსხივება ელექტრომაგნიტური იმპულსების სახით წარმოიდგინა. რენტგენის სხივების საბოლოო ბუნება დადგენილი იქნა 1912 წელს ლაუეს ექსპერიმენტების შედეგად, რომელიც სწავლობდა რენტგენის სხივების დიფრაქციას. ამ ექსპერიმენტებით საბოლოოდ დადასტურდა არა მარტო რენტგენის გამოსხივების ტალღური ბუნება არამედ გაიზომა მისი ტალღის სიგრძეც.

თუ დავუშვებთ, რომ კვანტის $\hbar\omega$ ენერგია გაცილებით აღემატება A გამოსვლის მუშაობას, მაშინ (4.1) ფორმულა შედარებით მარტივდება და ლებულობს სახეს

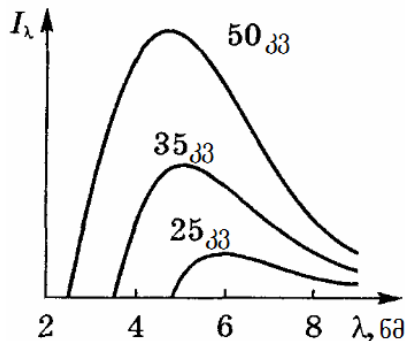
$$T_{\text{მაქს}} = \frac{mv^2}{2} = \hbar\omega. \quad (4.11)$$

ამ ფორმულის ინტერპრეტაცია შეიძლება მოვახდინოთ როგორც არა სინათლის კვანტის ენერგიის გადასვლა ელექტრონის კინეტიკურ ენერგიაში, არამედ პირიქით – V პოტენციალთა სხვაობით აჩქარებული ელექტრონის მკვეთრი დამუხრუჭების შედეგად კინეტიკური ენერგიის გადასვლა კვანტის ენერგიაში $eV = \hbar\omega$. სწორედ ასეთ პროცესს აქვს ადგილი რენტგენის დანადგარში. თუ ამ გამოსხივების სპექტრს გავშლით ტალღის სიგრძეების მიხედვით სპექტრი, აღმოჩნდება უწყვეტი.

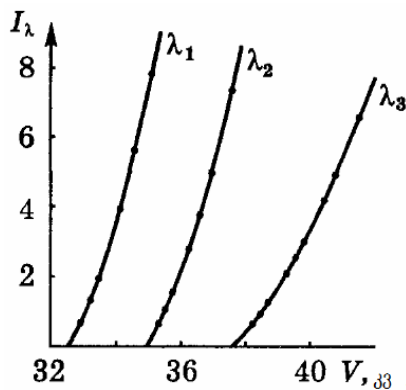
ნახ. 4.8-ზე ნაჩვენებია ინტენსივობის განაწილების ექსპერიმენტული მრუდები ამჩქარებელი ძაბვის სხვადასხვა მნიშვნელობებისათვის (ძაბვის მნიშვნელობები

მითითებულია ნახაზზე). აქაც ადგილი აქვს სპექტრის მოკლეთალღოვანი საზღვრის არსებობას. საერთოდ ანოდის მეტალში ელექტრონის დამუხრუჭებით გამოწვეული რენტგენული გამოსხივების პროცესი საკმაოდ რთული მოვლენაა, მაგრამ კორპუსკულური წარმოდგენების თვალსაზრისით ეს მოვლენა მარტივად აიხსნება.

მართლაც, თუ გამოსხივება ელექტრონის დამუხრუჭების შედეგად დაკარგული ენერგიის ხარჯზე აღიძვრება, მაშინ კვანტის $\hbar\omega$ ენერგია არ შეიძლება იყოს ელექტრონის eV ენერგიაზე მეტი. აქედან გამომდინარე გამოსხივების სიხშირე არ შეიძლება აღემატებოდეს $\omega_{\max} = eV/\hbar$ სიდიდეს. ამიტომ შესაბამისი ტალღის სიგრძე ვერ იქნება $\lambda_{\min} = 2\pi\hbar c/eV = 1,24/V$ -ზე ნაკლები (აქ დაბვა იზომება კილოვოლტებში, ხოლო ტალღის სიგრძე კი ნანომეტრებში მიიღება). მოკლეთალღოვანი საზღვრის არსებობა წარმოადგენს რენტგენული გამოსხივების კვანტური ბუნების ნათელ დადასტურებას. კლასიკური ელექტრომაგნიტიზმის თეორიის თანახმად მოკლეთალღოვანი საზღვარი საერთოდ არ უნდა არსებობდეს. ამაჩქარებელი დაბვის გამოსხივების ზღვრულ სიხშირეზე დამოკიდებულების გრაფიკის საშუალებით შესაძლებელია პლანკის მუდმივას მნიშვნელობის მაღალი სიზუსტით განსაზღვრა. ამასთან, მიღებული შედეგი კარგ რაოდენობრივ თანხვედრაშია სითბური გამოსხივებისა და ფოტოეფექტის მოვლენის საშუალებით მიღებულ პლანკის მუდმივას მნიშვნელობასთან, რაც ექსპერიმენტულად ადასტურებს $\mathcal{E} = \hbar\omega$ თანაფარდობის სამართლიანობას სპექტრის საკმაოდ ფართო დიაპაზონისათვის და ამით ამ ფორმულის უნივერსალურობაზე მოუთითებს.



ნახ. 4.8. რენტგენული გამოსხივების სპექტრი.



ნახ. 4.9.

პლანკის მუდმივას განსაზღვრის აღნიშნულ მეთოდს *იზოქრომების* მეთოდი ეწოდება. ამ მეთოდის არსი მდგომარეობს იმაში, რომ რენტგენული გამოსხივების სპექტრომეტრს ისე განათავსებენ, რომ მასში მხოლოდ ერთი და იგივე განსაზღვრული ტალღის სიგრძის გამოსხივება ხვდებოდეს და ზომავენ I_λ ინტენსივობის რენტგენის მიღზე მოდებულ V დაბვაზე დამოკიდებულებას. ნახაზ 4.9-ზე ნაჩვენებია ასეთი დამოკიდებულების გრაფიკი სამი სხვადასხვა ტალღის სიგრძის შემთხვევაში.

თითოეული მრუდის აბსცისთა ღერძთან გადაკვეთამდე ექსტრაპოლირებით პოულობენ ძაბვის V_0 მნიშვნელობას და შემდეგ

$$\hbar = \frac{e\lambda}{2\pi c} V_0 \quad (4.12)$$

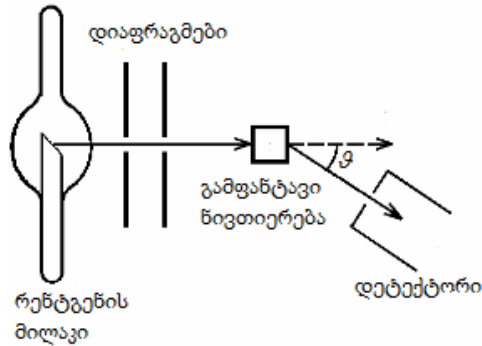
ფორმულით პოულობენ პლანკის მუდმივას.

კომპტონის ეფექტი

გამოსხივების კორპუსკულურული თვისება განსაკუთრებით კარგად ვლინდება ე.წ. კომპტონის ეფექტის მოვლენაში. 1923 წელს კომპტონი იკვლევდა რა სხვადასხვა ნივთიერებების მიერ რენტგენის სხივების გაფანტვის მოვლენას აღმოაჩინა, რომ გაფანტულ სხივებში თავდაპირველ λ ტალღის სიგრძის გამოსხივებასთან ერთად უფრო მეტი λ' ტალღის სიგრძის მქონე გამოსხივებაც დაიმზირებოდა. აღმოჩნდა, რომ $\Delta\lambda = \lambda' - \lambda$ სხვაობა არც λ -ზე და არც გამფანტავი ნივთიერების გვარობაზე არ იყო დამოკიდებული. კომპტონის მიერ ექსპერიმენტულად დადგენილი იქნა შემდეგი კანონზომიერება

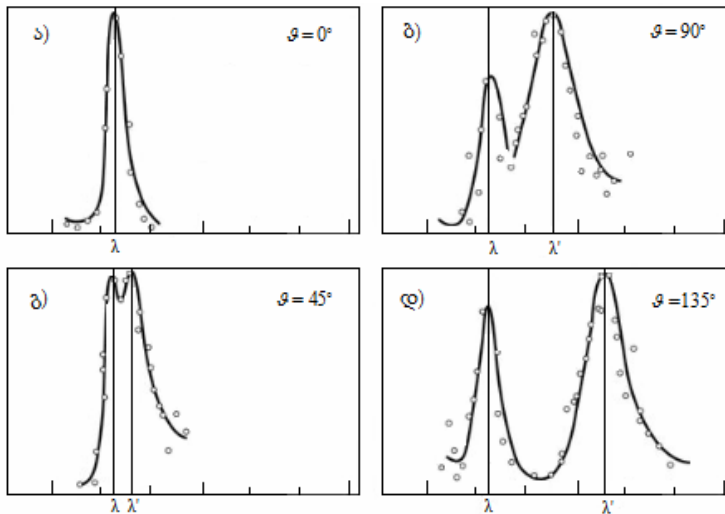
$$\Delta\lambda = \lambda_0 (1 - \cos \vartheta) = 2\lambda_0 \sin^2 \frac{\vartheta}{2}, \quad (4.13)$$

სადაც ϑ – სანყისი გამოსხივების მიმართულებისადმი გაფანტული გამოსხივების მიმართულების მიერ შექმნილი კუთხეა, ხოლო $\lambda_0 = 0.0242 \text{ \AA}$ მუდმივაა. კომპტონის ეფექტის სქემა ნაჩვენებია ნახაზ 4.10-ზე. დიაფრაგმების საშუალებით გამოყოფილი რენტგენის მონოქრომატული გამოსხივების ვიწრო ნაკადი ეცემოდა გამფანტავ ნივთიერებას და მასზე ϑ კუთხით გაიფანტებოდა. გაფანტული გამოსხივება ხვდებოდა დეტექტორში, რომელშიც ხდებოდა გაფანტული გამოსხივების სპექტრალური შემადგენლობის განსაზღვრა. ნახაზ 4.11-ზე ნაჩვენებია ნახშირბადის ატომებზე მონოქრომატული რენტგენული გამოსხივების გაფანტვის ექსპერიმენტის შედეგები. რენტგენული გამოსხივება მოლიბდენის ატომებზე ელექტრონების დამუხრუჭებისას წარმოქმნილი მახასიათებელი რენტგენული გამოსხივების K_{α} ხაზს შეესაბამება (იხილეთ თავი 15 გვ. 211). ნახაზ. 4.11ა-ზე ნაჩვენებია $\vartheta = 0^\circ$ კუთხეზე გაფანტული გამოსხივება, რომელიც მხოლოდ პირველად რენტგენულ გამოსხივებას შეიცავს. დანარჩენ ნახაზებზე კი წარმოდგენილია სხვადასხვა კუთხეებზე გაფანტული გამოსხივების შემთხვევები, როდესაც პირველად გამოსხივებასთან ერთად გაზრდილი ტალღის სიგრძის მქონე გამოსხივებაც დაიმზირება. ამ ნახაზების ორდინატთა ღერძებზე გამოსხივების ინტენსივობაა გადაზომილი, ხოლო აბსცისთა ღერძებზე კი – გამოსხივების ტალღის სიგრძეები. აშკარაა, რომ რაც უფრო მეტია გაფანტვის კუთხე მით უფრო მეტად არის ტალღის სიგრძე ნანაცვლებული და მით უფრო მაღალია ნანაცვლებული ტალღის სიგრძის მქონე

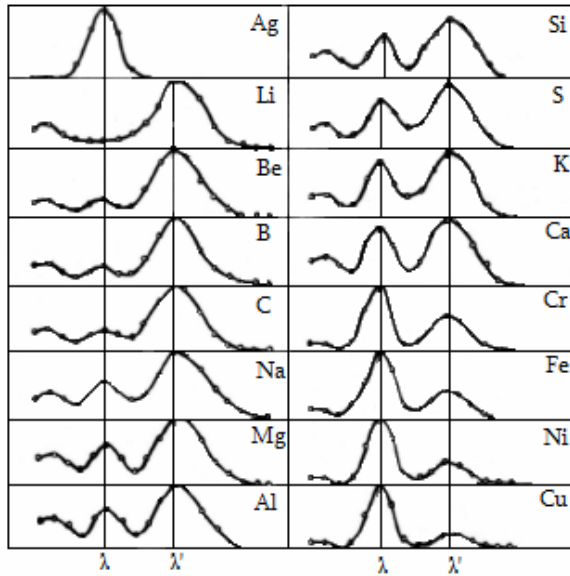


ნახ. 4.10. კომპტონის ექსპერიმენტის სქემა

გამოსხივების ინტენსივობა, თავდაპირველი გამოსხივების ინტენსივობასთან შედარებით. ნახ. 4.12-ზე ნაჩვენებია ნანაცვლებული λ' და ნაუნაცვლებელი λ ტალღის სიგრძის მქონე გამოსხივებების ინტენსივობათა გამფანტავი ნივთიერების ატომურ ნომერზე დამოკიდებულება. ნახაზის მარცხენა სვეტის ზედა მრუდი ვერცხლის ატომებზე ელექტრონების დამუხრუჭებისას წარმოქმნილი მახასიათებელი რენტგენული გამოსხივების K_{α} ხაზს შეესაბამება. დაბალი ატომური ნომრის (Li, Be, B) მქონე ნივთიერებებზე გაბნევისას გაბუელი გამოსხივების სპექტრში პრაქტიკულად ყოველთვის დაიმზირება ნანაცვლებული ტალღის სიგრძის მქონე კომპონენტის არსებობა. თანაც ამ კომპონენტის ინტენსიობა აღემატება დაცემული გამოსხივების ინტენსიობას. ატომური ნომრის ზრდასთან ერთად ნანაცვლებული კომპონენტის ინტენსიობა თავდაპირველი გამოსხივების ინტენსიობის მიმართ უფრო და უფრო მცირდება.



ნახ. 4.11. კომპტონის ეფექტი. რგოლებით ნაჩვენებია ექსპერიმენტული წერტილები

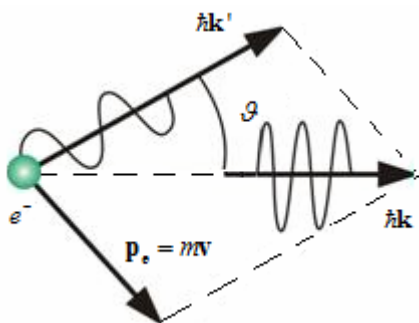


ნახ. 4.12. კომპტონის ეფექტის დამოკიდებულება გამფანტავი ნივთიერების ატომურ ნომერზე

კომპტონის ეფექტის ახსნა

კომპტონის ეფექტის ზემოაღნიშნული ყველა თავისებურება აიხსნება თუ რენტგენის გამოსხივების ნივთიერებაზე გაფანტვის პროცესს განვიხილავთ, როგორც რენტგენის გამოსხივების კვანტების, ნივთიერების ატომების პრაქტიკულად თავისუფალ ელექტრონებზე დრეკადად გაფანტვის პროცესს. მსუბუქ ატომებში შეიძლება ჩაითვალოს, რომ ატომში ელექტრონის ბმის ენერგია გაცილებით მცირეა იმ ენერგიასთან შედარებით, რომელიც რენტგენის კვანტს შეუძლია გადასცეს ატომის ელექტრონს (გავიხსენოთ, რომ ფოტონს არ შეუძლია მთელი თავისი ენერგია თავისუფალ ელექტრონს გადასცეს. იხილეთ გვ. 52-53.).

დავუშვათ თავდაპირველად უძრავ ელექტროზე იფანტება $\hbar\omega$ ენერგიისა და $\hbar\mathbf{k}$ იმპულსის მქონე რენტგენის გამოსხივების კვანტი (იხ. ნახ. 4.13). დაჯახებამდე



ნახ. 4.13. კომპტონის ეფექტის კინემატიკა

ელექტრონის ენერგია m_0c^2 -ის, ხოლო იმპულსი კი ნულის ტოლი იყო. დაჯახების შემდეგ ელექტრონის ენერგია და იმპულსი შესაბამისად mc^2 და $m\mathbf{v}$ იქნება (აქ $m = m_0/\sqrt{1-v^2/c^2}$).

ფოტონის ენერგია-იმპულსიც ასევე შეიცვლება და გვექნება შესაბამისად $\hbar\omega'$ და $\hbar\mathbf{k}'$. ენერგია-იმპულსის შენახვის კანონიდან გამომდინარეობს

$$\begin{aligned} \hbar\omega + m_0c^2 &= \hbar\omega' + mc^2, \\ \hbar\mathbf{k} &= m\mathbf{v} + \hbar\mathbf{k}'. \end{aligned} \quad (4.14)$$

(4.14) -ის პირველი განტოლება გავტოთ c -ზე და გავითვალისწინოთ $k = \omega/c$ თანაფარდობა, მივიღებთ

$$mc^2 = m_0c^2 + \hbar(k - k') \quad (4.15)$$

(4.15) ავიყვანოთ კვადრატში

$$m^2c^4 = m_0^2c^4 + \hbar^2k^2 + \hbar^2k'^2 - 2\hbar^2kk' + 2m_0c\hbar(k - k'). \quad (4.16)$$

ნახაზ 4.13-დან გამომდინარეობს, რომ

$$m^2v^2 = \hbar^2k^2 + \hbar^2k'^2 - 2\hbar^2kk' \cos \vartheta. \quad (4.17)$$

ახლა (4.17)-ს გამოვაკლოთ (4.16) ფორმულა, მივიღებთ

$$m^2(c^2 - v^2) = m_0^2c^2 - 2\hbar^2kk'(1 - \cos \vartheta) + 2m_0c\hbar(k - k'). \quad (4.18)$$

თუ გავითვალისწინებთ, რომ $m^2(c^2 - v^2) = m_0^2c^2$ (4.18) -დან მივიღებთ

$$m_0c(k - k') = \hbar \cdot k \cdot k'(1 - \cos \vartheta). \quad (4.19)$$

გავამრავლოთ (4.19) გამოსახულება $2\pi / kk' m_0c$ -ზე, მივიღებთ

$$\frac{2\pi}{k'} - \frac{2\pi}{k} = \frac{2\pi\hbar}{m_0c}(1 - \cos \vartheta). \quad (4.20)$$

საბოლოოდ, თუ გავითვალისწინებთ აგრეთვე, რომ $\lambda = 2\pi/k$ (4.20) ფორმულიდან მივიღებთ

$$\Delta\lambda = \lambda' - \lambda = \frac{2\pi\hbar}{m_0c}(1 - \cos \vartheta), \quad (4.21)$$

რომელიც ემთხვევა (4.13) ემპირიულ ფორმულას თუ დავუშვებთ, რომ $\lambda_0 = \frac{2\pi\hbar}{m_0c}$.

თუ გავითვალისწინებთ m_0, \hbar, c -ს რიცხვით მნიშვნელობებს მაშინ λ_0 -ის რიცხვითი მნიშვნელობა დაემთხვევა (4.13) ფორმულაში შემავალი მუდმივის რიცხვით მნიშვნელობას.

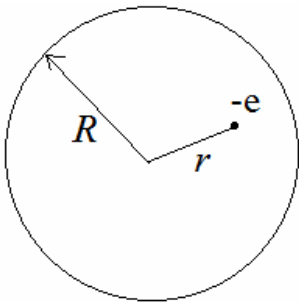
რენტგენის კვანტის მძიმე ატომების ძლიერად ბმულ ელექტრონებზე გაფანტვისას ენერგია-იმპულსის გადაცემა მთლიანად ატომზე ხორციელდება. რადგანაც ატომის მასა ელექტრონის მასას გაცილებით აღემატება, ამიტომ ასეთ შემთხვევაში ტალღის სიგრძის კომპტონის წანაცვლება უმნიშვნელოა და λ' პრაქტიკულად λ -ს ემთხვევა.

თავი 5

ატომის აბეზულების პლანეტარული მოდელი

ამ თავში ჩვენ გამოვიანგარიშებთ წყალბადის ატომისა და წყალბადისმაგვარი იონის ენერგეტიკულ დონეებს. გამოთვლებს საფუძვლად დავუდებთ ატომის აგებულების ე.წ. *პლანეტარულ მოდელს*, რომლის თანახმადაც ატომში ელექტრონები განიხილებიან, როგორც კულონური მიზიდულობის ძალის გავლენით ბირთვის გარშემო წრიულ ორბიტაზე მოძრავი ნაწილაკები.

ტომსონის მოდელი



ნახ. 5.1. ტომსონი მოდელი

ტომსონის თანახმად, იზოლირებული ატომის მიერ გამოსხივებული სპექტრის კანონზომიერების შესასწავლად გაკეთებული იქნა დაშვება, რომლის თანახმადაც ელექტრონი ატომში წონასწორობის მდგომარეობის მახლობლად ასრულებს ჰარმონიულ რხევებს, რომელიც კვაზიდრეკადი $f = -kr$ ძალის მოქმედებით არის გამონვეული (იხილეთ ნახ. 5.1). ტომსონის თანახმად ატომი წარმოადგენდა ერთგვაროვნად დადებითი ელექტროობით დამუხტულ ბირთვს, რომლის შიგნითაც იმყოფება ელექტრონი. ამ ბირთვის ჯამური მუხტი ელექტრონის მუხტის ტოლია. ასე რომ, ატომი მთლიანობაში ნეიტრალური სისტემაა.

როგორც ელექტრობის კურსიდან არის ცნობილი ბირთვის შიგნით ელექტრული ველის დაძაბულობა ტოლია

$$E(r) = \frac{e}{R^3} r \quad (0 \leq r \leq R) \quad (5.1)$$

სადაც e – ელექტრონის მუხტია, ხოლო R – ბირთვის რადიაუსი. შესაბამისად ელექტრონზე დამუხტული ბირთვის მხრიდან მოქმედი ძალა ტოლი იქნება

$$f = -eE(r) = -\frac{e^2}{R^3} r = -kr \quad (5.2)$$

ასეთ პირობებში წონასწორობიდან გამოყვანილი ელექტრონი შეასრულებს წონასწორობის მახლობლად რხევით მოძრაობას სიხშირით

$$\omega = \sqrt{\frac{k}{m}} = \sqrt{\frac{e^2}{mR^3}} \quad (5.3)$$

ამ უკანასკნელი ფორმულით კი შესაძლებელია ატომის ზომის შეფასება

$$R = \left(\frac{e^2}{m\omega^2} \right)^{1/2} . \quad (5.4)$$

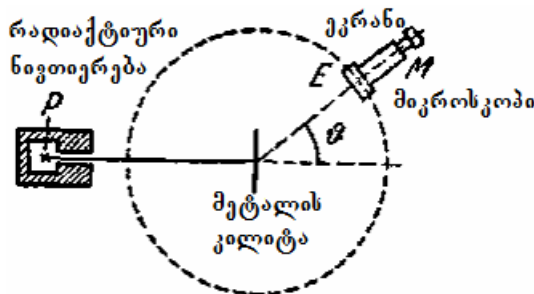
სპექტრის ხილულ არეში გამოსხივების ტალღის სიგრძე $\lambda = 0.6 \text{ მკმ} = 6 \cdot 10^{-5} \text{ სმ}$. შესაბამისად $R = \left(\frac{4.8^2 \cdot 10^{-20}}{0.91 \cdot 10^{-27} \cdot 3^2 \cdot 10^{30}} \right)^{1/2} \approx 3 \cdot 10^8 \text{ სმ}$. მიღებული შედეგი რიგით ემ-

თხვევა ატომის გაზოკინეტიკურ ზომებს, რითაც თითქოსდა დამტკიცებული იქნა ტომსონის მოდელის სამართლიანობა. მაგრამ შემდგომში გამოიკვეა ამ მოდელის არასამართლიანობა, რამდენადაც ტომსონის მოდელმა ვერ უზრუნველყო ატომის გამოსხივების ინტენსიურობის სწორი გამოანგარიშება და ასევე სრულიად გამოუსადეგარი გამოდგა უკვე ორი და მეტი ელექტრონიანი ატომების გამოსაანგარიშებლადაც. ასე რომ, დღეისათვის ეს მოდელი მხოლოდ ისტორიულ ხასიათს ატარებს, როგორც ერთ-ერთი რგოლი ატომის აგებულების შესწავლაში.

რეზერფორდის ცდა

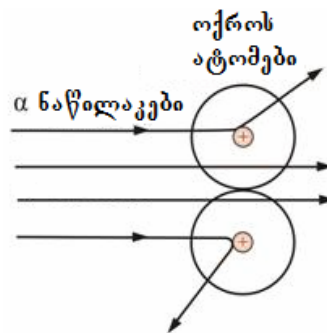
იმისათვის, რომ გარკვეულიყო ატომში დადებითი და უარყოფითი ელექტროობის განაწილება, აუცილებელი იყო ისეთი ექსპერიმენტების ჩატარება, რომლებიც შესაძლებელი იქნებოდა ატომის შიდა არეების „ზონდირება“. ასეთი ექსპერიმენტის ჩატარება 1911 წელს შეძლო ცნობილმა ინგლისელმა მეცნიერმა ერნესტ რეზერფორდმა და მისმა ჯგუფმა, რომელიც რეზერფორდის ცდის სახელით არის ცნობილი. რეზერფორდი აკვირდებოდა α ნაწილაკების მიმართული ნაკადის გადახრას მათი ნივთიერების თხელ ფენებთან ურთიერთქმედებისას.

გავიხსენოთ, რომ α ნაწილაკები ეწოდება ნაწილაკებს, რომლებიც უდიდესი სიჩქარით ამოიტყორცნებიან ზოგიერთი ნივთიერების რადიაქტიური დაშლის პროცესში. იმ დროისათვის ცნობილი იყო, რომ α ნაწილაკებს გააჩნიათ ორი ელექტრონის მუხტის ტოლი დადებითი მუხტი და ის, რომ ამ მუხტის დაკარგვის ანუ ორი ელექტრონის მიერთების შემთხვევაში α ნაწილაკები ჰელიუმის ატომებად გადაიქცეოდნენ. α ნაწილაკების რადიაქტიური ნივთიერებებიდან გამოტყორცნის სიჩქარე 10^9 სმ/წმ-ს აღწევდა.



ნახ. 5.2. რეზერფორდის ცდა

რეზერვორდის ცდა შემდეგნაირად ხორციელდებოდა (იხილეთ ნახ. 5.2). ტყვიის კონტეინერში, რომელსაც ერთი მხრიდან ნახვრეტი ქონდა გაკეთებული მოთავსებული იყო P რადიაქტიური პრეპარატი, რომელიც α ნაწილაკების წყაროს წარმოადგენდა. ასეთი გზით მიღებული α ნაწილაკების ვიწრო ნაკადის გზაზე განთავსებული იყო თხელი მეტალის (ოქროს) კილიტა. თხელი კილიტის ქვეშ იგულისხმება ისეთი სისქის კილიტა, რომელთან დაჯახებისასაც α ნაწილაკები კილიტის ატომებთან მხოლოდ ერთჯერად ურთიერთქმედებებს განიცდიან. ამ კილიტაში გავლის შემდეგ α ნაწილაკები თავდაპირველი მიმართულებიდან სხვადასხვა ψ კუთხით გადაიხრებოდნენ. ეს გაფანტული α ნაწილაკები ეჯახებოდნენ ცინკის სულფიდით (ZnS) დაფარულ E ეკრანს იწვევდნენ რა მათ სცინტილაციას (ნათებას), რომელსაც M მიკროსკოპის საშუალებით აკვირდებოდნენ. შესაძლებელი იყო მიკროსკოპის და ეკრანის ბრუნვა მეტალის კილიტის ცენტრზე გამავალი ღერძის ირგვლივ. დანადგარი მთლიანად მოთავსებული იყოს ვაკუუმურ რეზერვუარში α ნაწილაკების ჰაერის მოლეკულებთან დაჯახებების თავიდან აცილების მიზნით. აღმოჩნდა, რომ გაფანტვის შედეგად α ნაწილაკების გარკვეული რაოდენობა საკმაოდ დიდ კუთხეებზე გაიფანტებოდა, ხოლო ზოგიერთი მათგანი უკანაც კი ბრუნდებოდა (იხ. ნახ. 5.3).



ნახ. 5.3. რეზერვორდის ცდაში α ნაწილაკების გადახრა

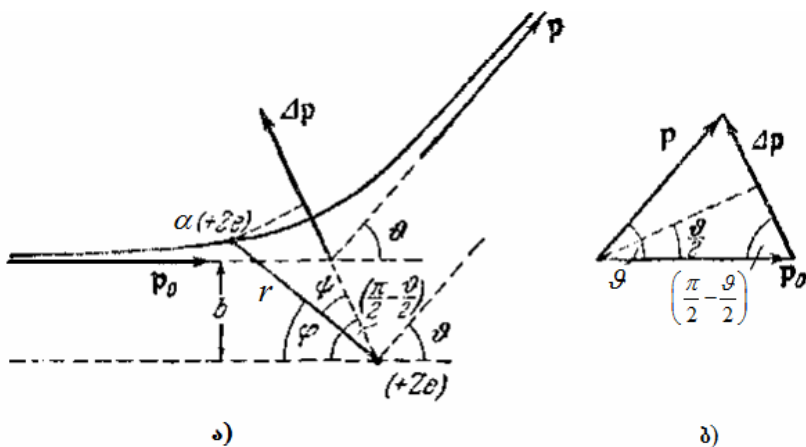
ცდის შედეგების გაანალიზებით რეზერვორდი მივიდა იმ დასკვნამდე, რომ α ნაწილაკების ასეთი ძლიერი გადახრა შეიძლება გამოეწვიოს მხოლოდ ატომის შიგნით არსებულ ძალზედ ძლიერ ელექტრულ ველს, რომელსაც ქმნიდა ძალზედ მცირე მოცულობაში კონცენტრირებული დიდი მასის მქონე დადებითად დამუხტული ნაწილაკი. ამ დასკვნაზე დაყრდნობით რეზერვორდმა შემოგვთავაზა ატომის აგებულების პლანეტარული მოდელი, რომლის თანახმადაც ატომი წარმოადგენდა მუხტთა სისტემას, რომლის ცენტრშიც განთავსებულია მძიმე დადებითად დამუხტული ბირთვი, ხოლო მის გარშემო მოძრაობდნენ ატომის მთელს მოცულობაში განწილული ელექტრონები. ატომის თითქმის მთელი მასა თავმოყრილია ბირთვში, რომლის ზომებიც რეზერვორდის თანახმად არ უნდა აღემატებოდეს 10^{-12} სმ-ს.

რეზერვორდმა შეიმუშავა α ნაწილაკების გაფანტვის თეორია და გამოიყვანა გაფანტული ნაწილაკების ψ კუთხეზე დამოკიდებულების კანონზომიერება. რე-

ზერფორდის დაშვებით α ნაწილაკების გაფანტვას უნდა იწვევდეს მათი ბირთვებთან ურთიერთქმედება. რეზერფორდის აზრით ელექტრონებთან ურთიერთქმედებას არ შეეძლო გამოენვია საწყისი მოძრაობის ტრაექტორიიდან α ნაწილაკების შესამჩნევი გადახრა, რადგანაც ელექტრონის მასა ოთხი რიგით ნაკლებია α ნაწილაკების მასაზე. როდესაც ნაწილაკები ჩაუქროლებენ ოქროს კილიტის ბირთვებს, მათზე ბირთვების მხრიდან იმოქმედება კულონური ძალა

$$f = \frac{2Ze^2}{r^2}. \quad (5.5)$$

სადაც Z – ოქროს რიგითი ნომერია, ხოლო r , α – ნაწილაკსა და ბირთვს შორის მანძილი. α ნაწილაკების ტრაექტორია ასეთ შემთხვევაში წარმოადგენს ჰიპერბოლას, რომლის ასიმპტოტები ერთმანეთს შორის ψ კუთხეს ადგენენ (იხილეთ ნახ. 5.4ა). ეს კუთხე ახასითებს α ნაწილაკების გადახრას თავდაპირველი მიმართულებიდან. იმ b მანძილს, რომელზეც ჩაუქროლებდა ბირთვს α ნაწილაკები მათ შორის ურთიერთქმედება რომ არ ყოფილიყო *სამიზნე პარამეტრი* ეწოდება. რაც უფრო ახლოს ჩაუქროლებს α ნაწილაკი ბირთვს, მით უფრო მცირეა სამიზნე პარამეტრი და მით უფრო ძლიერად (დიდ კუთხეებზე) გაიფანტება იგი. ამ შემთხვევაში ცხადია იგულისხმება, რომ α ნაწილაკები ვერ აღწევენ ოქროს კილიტის ბირთვებში. ამ უკანასკნელ შემთხვევაში აუცილებელია ელექტრონების მიერ ბირთვის ეკრანირების ფაქტორის გათვალისწინებაც. დავამყაროთ კავშირი b სამიზნე პარამეტრსა და ψ გაფანტვის კუთხეს შორის.



ნახ. 5.4. რეზერფორდის ფორმულის გამოსაყვანი სქემა

ენერგიის მუდმივობის კანონის თანახმად, ბირთვისგან შორ მანძილებზე გაფანტული α ნაწილაკის \vec{p} იმპულსი მოდულით α ნაწილაკის საწყისი \vec{p}_0 იმპულსის ტოლი უნდა იყოს: $p = p_0$. შესაბამისად, ნახაზი 5.4ბ-ს თანახმად ადვილად შევძლებთ α ნაწილაკის იმპულსის ცვლილების მოდულის გამოანგარიშებას

$$|\Delta\vec{p}| = 2p_0 \sin \frac{\vartheta}{2} = 2m_\alpha v \sin \frac{\vartheta}{2}, \quad (5.6)$$

სადაც m_α α ნაწილაკის მასაა, ხოლო v – მისი სიჩქარე. მეორე მხრივ ნიუტონის მეორე კანონის თანახმად

$$|\Delta\vec{p}| = \int f_n dt \quad (5.7)$$

სადაც $f_n = f \cos \psi$ – (5.5) ძალის პროექციაა $\Delta\vec{p}$ ვექტორის მიმართულებაზე (იხილეთ ნახ. 5.4ა). როგორც ნახ. 5.4ბ-დან ჩანს სამართლიანია კუთხეებს შორის შემდეგი ტოლობა

$$\psi = \frac{\pi}{2} - \frac{\vartheta}{2} - \varphi. \quad (5.8)$$

ამ თანაფარდობის გათვალისწინებით f_n -სთვის გვექნება

$$f_n = f \cos \psi = f \sin \left(\varphi + \frac{\vartheta}{2} \right) = \frac{2Ze^2}{r^2} \sin \left(\varphi + \frac{\vartheta}{2} \right). \quad (5.9)$$

თუ ახლა (5.9) ფორმულას შევიტანთ (5.7)-ში და ამავედროულად dt -ს შევცვლით $\frac{d\varphi}{\dot{\varphi}}$ -ით მივიღებთ

$$|\Delta\vec{p}| = 2Ze^2 \int_0^{\pi-\vartheta} \frac{\sin \left(\varphi + \frac{\vartheta}{2} \right) d\varphi}{r^2 \dot{\varphi}}, \quad (5.10)$$

სადაც $\dot{\varphi} = d\varphi/dt$. გავიხსენოთ, რომ $mr^2 \dot{\varphi}$ არის α ნაწილაკის იმპულსის მომენტი გამფანტავი ბირთვის მიმართ. α ნაწილაკზე ბირთვის მხრიდან მოქმედებს ცენტრალური სიმეტრიის ძალა, რის გამოც იმპულსის მომენტი სისტემის მოძრაობის ინტეგრალია ანუ ინახება. ეს კი ნიშნავს, რომ α ნაწილაკის იმპულსის მომენტი ტრანექტორიის ნებისმიერ წერტილში ტოლია საწყისი იმპულსის მომენტის, ანუ $m_\alpha v b = m_\alpha r^2 \dot{\varphi}$. ამის გათვალისწინებით ადვილია (5.10) ინტეგრალის გამოთვლა, რის შედეგადაც ვიღებთ

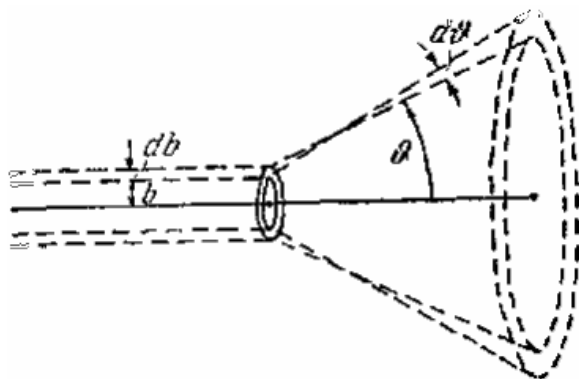
$$|\Delta\vec{p}| = \frac{2Ze^2}{vb} \int_0^{\pi-\vartheta} \sin \left(\varphi + \frac{\vartheta}{2} \right) d\varphi = \frac{2Ze^2}{vb} 2 \cos \frac{\vartheta}{2}. \quad (5.11)$$

თუ ახლა ერთმანეთს გავუტოლებთ (5.11) და (5.6) ფორმულებს მივიღებთ

$$2m_\alpha v \sin \frac{\vartheta}{2} = \frac{2Ze^2}{vb} 2 \cos \frac{\vartheta}{2}, \quad \text{ctg} \frac{\vartheta}{2} = \frac{m_\alpha v^2}{2Ze^2} b \quad (5.12)$$

როგორც აღვნიშნეთ, გამფანტავი ნივთიერების ფენა იმდენად თხელია, რომ თითოეული α ნაწილაკი კილიტის ბირთვებთან მხოლოდ ერთჯერად დაჯახებას განიცდის. იმისათვის, რომ გაფანტვა $\vartheta, \vartheta + d\vartheta$ კუთხეთა ინტერვალში მოხდეს α ნაწილაკმა ბირთვს უნდა ჩაუაროს ისე, რომ მისი სამიზნე პარამეტრი $b, b + db$ ინტერვალში იყოს მოთავსებული (იხილეთ ნახაზი 5.5). ამასთან (5.12) ფორმულის ორივე მხარის გადიფერენციალებით მივიღებთ

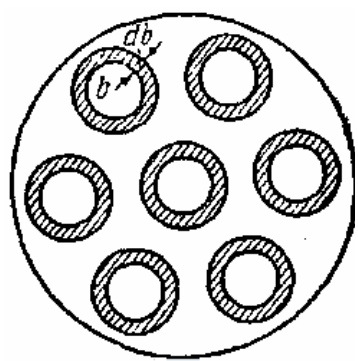
$$-\frac{1}{\sin^2 \frac{\vartheta}{2}} \frac{d\vartheta}{2} = \frac{m_\alpha v^2}{2Ze^2} db. \quad (5.13)$$



ნახ. 5.5. კავშირი სამიზნე პარამეტრსა და გაფანტვის კუთხეს შორის

მინუს ნიშანი (5.13) ფორმულაში მიუთითებს იმაზე, რომ სამიზნე პარამეტრის გაზრდა იწვევს გაფანტვის კუთხის შემცირებას და პირიქით. შემდგომში ჩვენ დაგავინტერესებს მხოლოდ db -ს აბსოლუტური მნიშვნელობა და ამიტომ მინუს ნიშანს არ გავითვალისწინებთ.

ნაკადის განივკვეთი აღვნიშნოთ S -ით. მაშინ გამფანტავი კილიტის ზედაპირის ფართობზე ატომების რიცხვი, რომელიც ნაკადის გზაზე აღმოჩნდებიან იქნება nSd , სადაც n – მოცულობის ერთეულში ატომთა რიცხვია, ხოლო d – კილიტის სისქე. თუ ნაკადში α ნაწილაკები თანაბრად არიან განაწილებულნი და მათი რაოდენობა საკმარისად დიდია (რასაც ადგილი აქვს რეალურ ექსპერიმენტში), მაშინ რომელიმე ბირთვის მახლობლად $b, b + db$ სამიზნე პარამეტრის შესაბამისი ტრანექტორიის მქონე α ნაწილაკების ფარდობითი რიცხვი ტოლი იქნება



ნახ. 5.6. ნაკადის განივკვეთი

$$\frac{dN_\vartheta}{N} = \frac{ndS \cdot 2\pi b db}{S} = nd2\pi b db, \quad (5.14)$$

სადაც dN_{ϑ} - $\vartheta, \vartheta + d\vartheta$ კუთხეთა ინტერვალში გაბნეული α ნაწილაკების რიცხვია, N – ნაკადში α ნაწილაკების სრული რიცხვი. ორივე შემთხვევაში ნაწილაკთა რიცხვის ქვეშ იგულისხმება სათანადო ზედაპირის გამჭოლი ნაწილაკთა ნაკადი.

თუ ახლა (5.14) ფორმულაში (5.12) და (5.13) ფორმულებიდან შევიტანთ, b და db -ს შესაბამის მნიშვნელობებს მივიღებთ

$$\frac{dN_{\vartheta}}{N} = nd \left(\frac{2Ze^2}{m_{\alpha}v^2} \right)^2 2\pi \operatorname{ctg} \frac{\vartheta}{2} \frac{1}{\sin^2 \frac{\vartheta}{2}} \frac{d\vartheta}{2}. \quad (5.15)$$

ჩავატაროთ შემდეგი ტრიგონომეტრიული გარდაქმნა

$$\frac{\operatorname{ctg} \frac{\vartheta}{2}}{\sin^2 \frac{\vartheta}{2}} = \frac{\sin \frac{\vartheta}{2} \cos \frac{\vartheta}{2}}{\sin^4 \frac{\vartheta}{2}} = \frac{\sin \vartheta}{2 \sin^4 \frac{\vartheta}{2}}.$$

ამის შემდეგ (5.15) ფორმულა ასე გადაინერება

$$\frac{dN_{\vartheta}}{N} = nd \left(\frac{2Ze^2}{m_{\alpha}v^2} \right)^2 \frac{2\pi \sin \vartheta d\vartheta}{4 \sin^4 \frac{\vartheta}{2}}. \quad (5.16)$$

დაბოლოს, შევნიშნოთ, რომ $\vartheta, \vartheta + d\vartheta$ კუთხეთა ინტერვალში მოთავსებული სხეულოვანი კუთხე $d\Omega = 2\pi \sin \vartheta d\vartheta$ რის გათვალისწინებითაც (5.16) ფორმულა საბოლოოდ ღებულობს სახეს

$$\frac{dN_{\vartheta}}{N} = nd \left(\frac{2Ze^2}{m_{\alpha}v^2} \right)^2 \frac{d\Omega}{4 \sin^4 \frac{\vartheta}{2}}. \quad (5.17)$$

ეს უკანასკნელი ფორმულა წარმოადგენს α ნაწილაკებისთვის რეზერფორდის ფორმულას. 1913 წელს რეზერფორდის თანამშრომლებმა გადანყვიტეს ამ ფორმულის ექსპერიმენტულად შემოწმება. ამისათვის ეკრანის დაშორებას გამფანტავი ცენტრიდან უცვლელს ტოვებდნენ. იცვლებოდა მხოლოდ კილიტის მიმართ ეკრანის ორიენტაცია, რაც უზრუნველყოფდა ერთსა და იმავე სხეულოვან კუთხეზე გაბნეული ნაწილაკების აღრიცხვას. კილიტის მიმართ სხვადასხვა კუთხით ფიქსირებულ ეკრანზე სცინტილაციების რიცხვი რეზერფორდის ფორმულის თანახმად $1/\sin^4 \frac{\vartheta}{2}$ -ის პროპორციული უნდა ყოფილიყო. ეს შედეგი კარგად დადასტურდა ექსპერიმენტულად. გაფანტული ნაწილაკების რიცხვის დამოკიდებულება კილიტის სისქესა და α ნაწილაკების სიჩქარეზე ასევე თანხმობაში აღმოჩნდა რეზერფორდის ფორმულასთან.

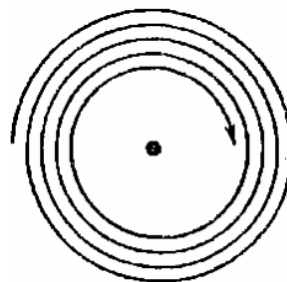
ესპერიმენტულად დადასტურებულ თეორიულ მოსაზრებებზე დაყრდნობით შესაძლებელია დასკვნის გამოტანა, რომლის თანახმადაც თვით უკუცემული α ნაწილაკებიც კი ვერ აღწევენ ატომბირთვის შიგნით, იქ სადაც ატომის დადებითი ელექტრობაა თავმოყრილი. გავიხსენოთ ტომსონის მოდელი, რომლის თანახმადაც პირიქით დადებითი ელექტრობა მთელს ატომის მოცულობაში იყო განაწილებული. ადვილი მისახვედრია, რომ თუკი α ნაწილაკი ნულოვანი სამიზნე პარამეტრით იმოძრაებს კილიტის ბირთვებისკენ, მაშინ იარსებებს რაღაც მინიმალური მანძილი, რომელზედაც ასეთი α ნაწილაკი მიუახლოვდება ბირთვს. ეს მანძილი შეიძლება ვიპოვოთ თუ გამოვიყენებთ ენერჯის შენახვის კანონს და ერთმანეთს გავუტოლებთ α ნაწილაკისა და ბირთვის ურთიერთქმედების პოტენციურ ენერჯიასა ბირთვთან მინიმალურ მანძილზე მიახლოებისას და α ნაწილაკის სანყის კინეტიკურ ენერჯიას

$$\frac{m_\alpha v^2}{2} = \frac{2Ze^2}{r_{\min}}$$

თუ დავუშვებთ, რომ $Z=10$, $v=10^9$ სმ/წმ და $m_\alpha=4\cdot1,66\cdot10^{-24}$ გრ მივიღებთ

$$r_{\min} = \frac{4Ze^2}{m_\alpha v^2} = \frac{4\cdot10\cdot4,8^2\cdot10^{-20}}{6,6\cdot10^{-24}\cdot10^{18}} \approx 1,5\cdot10^{-12} \text{ სმ.}$$

ამრიგად, რეზერფორდის მიერ შემოთავაზებული ატომის აგებულების პლანეტარული მოდელი ატომის აგებულების შესასწავლ ყველაზე უფრო პერსპექტიულ მოდელს წარმოადგენდა. აღსანიშნავია ის ფაქტიც, რომ რეზერფორდის ფორმულის გამოყენებით ბირთვის ზომები დაახლოებით 30%-იანი ცდომილებით განისაზღვრებოდა. ამის მიზეზი, როგორც უკვე აღვნიშნეთ იყო ის, რომ რეზერფორდის ფორმულის გამოყვანისას ბირთვი წერტილოვან ნაწილაკად იყო მიჩნეული.



ნახ. 5.7. ელექტრონის ბირთვზე დაცემა

მიუხედავად ამისა, რეზერფორდის მოდელი კლასიკური ფიზიკის კანონებთან ძლიერ წინააღმდეგობაში მოდიოდა. მართლაც, რამდენადაც უძრავ მუხტთა სისტემა არ შეიძლება დარჩეს მდგრადი წონასწორობის მდგომარეობაში ამდენად რეზერფორდმა შემოგვთავაზა ატომის აგებულების დინამიური მოდელი, რომლის თანახმადაც ატომში ელექტრონები უნდა ასრულებდნენ ბირთვის ირგვლივ ჩაკეტილ ტრაექტორიაზე მოძრაობას. მაგრამ ასეთ შემთხვევაში ელექტრონი აჩქარებულად იმოძრაებს და კლასიკური ელექტროდინამიკის თანახმად უნდა ასხივებდეს უწყვეტად ელექტრომაგნიტურ ტალღებს. ამ გამოსხივებას, რა თქმა უნდა, თან უნდა ასხივებდეს ელექტრონის ენერჯის კარგვა და, საბოლოო ჯამში, ელექტრონი უნდა დაეცეს ბირთვს (იხილეთ ნახაზი 5.7). ამასთან ელექტრონის ორბიტის შემცირებასთან

ერთად $m_e v r = m_e r^2 \omega$ თანაფარდობის თანახმად უნდა იზრდებოდეს გამოსხივებული სინათლის სიხშირე.

ბორის პოსტულატები და შესაბამისობის პრინციპი

1913 წელს გამოჩენილმა დანიელმა ფიზიკოსმა ნილს ბორმა შემოგვთავაზა წყალბადის ატომში ელექტრონის ორბიტალური მოძრაობის მომენტის დაკვანტვის სქემა. ბორის თანახმად ენერჯიის მცირე კვანტების შემთხვევაში კვანტური თეორიის შედეგები უნდა ემთხვეოდეს კლასიკური ფიზიკის შედეგებს. მან ჩამოაყალიბა შემდეგი სამი პოსტულატი:

- ატომს შეუძლია იმყოფებოდეს მხოლოდ გარკვეულ სტაციონალურ მდგომარეობებში, რომლებიც ხასიათდებიან ენერჯიის E_i დისკრეტული მნიშვნელობებით. ელექტრონები მოძრაობენ რა აჩქარებულად (იგულისხმება ცენტრისკენული აჩქარება) შესაბამის დისკრეტულ წრიულ ორბიტებზე არ ასხივებენ ელექტრომაგნიტურ ტალღებს (კლასიკური მექანიკის თანახმად ნებისმიერი აჩქარებულად მოძრავი დამუხტული ნაწილაკი უნდა ასხივებდეს ელ.-მაგ. ტალღებს.).
- გამოსხივებას ან შთანთქმას ადგილი აქვს როდესაც ატომი ერთი ენერგეტიკული მდგომარეობიდან გადადის მეორეში, რასაც თან ახლავს

$$\hbar \omega_{mn} = E_n - E_m . \quad (5.18)$$

ელ.მაგ. გამოსხივების კვანტის შთანთქმა ან გამოსხივება.

- შესაბამისობის პრინციპის თანახმად მაღალ მეზობელ ენერგეტიკულ დონეებს შორის გადასვლისას ($n \gg 1$) გამოსხივებული ენერჯიის კვანტის $\omega_{n,n+1}$ სიხშირე n -ურ ორბიტაზე ელექტრონის ბრუნვის ω_n სიშირის ტოლია.

ამ პოსტულატებიდან გამომდინარეობს ელექტრონის მოძრაობის რაოდენობის მომენტის დაკვანტვის წესი

$$M = n \cdot \hbar \quad (5.19)$$

სადაც $n = 1, 2, 3, \dots$ შეიძლება ნებისმიერი ნატურალური რიცხვი იყოს. n რიცხვს მთავარი კვანტური რიცხვი ეწოდება.

(5.19) ფორმულის მისაღებად საჭიროა დონის ენერჯია მოძრაობის რაოდენობის მომენტის საშუალებით გამოვსახოთ. ზოგჯერ, მაგალითად, ასტრონომიული გაზომვებისას მოითხოვება ტალღის სიგრძეების მაღალი სიზუსტით ცოდნა (მძიმის მერე 6-8 ციფრის სიზუსტით). ამიტომ წყალბადის ატომის შესწავლისას პროტონის მასის უსასრულო დიდ სიდიდეთ ალება გარკვეულ მიახლოებას წარმოადგენს, რადგანაც უკვე მეოთხე ნიშანში იძლევა ცდომილებას. ამიტომ უფრო ზუსტი შედეგების მისაღებად საჭიროა პროტონის მოძრაობის გათვალისწინება. ამისათვის შემოყავთ დაყვანილი მასის ცნება.

კლასიკური წარმოდგენების თანახმად ელექტრონი ბირთვის გარშემო მოძრაობს ელექტროსტატიკური ძალის გავლენით

$$\mathbf{f} = -\frac{Ze^2}{r^3}\mathbf{r} \quad (5.20)$$

სადაც \mathbf{r} – ბირთვიდან გავლებული ელექტრონის რადიუს-ვექტორია, Z – ბირთვის ატომური ნომერი, ხოლო Ze და e შესაბამისად ბირთვის და ელექტრონის მუხტებია. ნიუტონის მესამე კანონის თანახმად ბირთვზე ელექტრონის მხრიდან მოქმედებს $-\mathbf{f}$ ძალა (ეს ძალა მოდულით ელექტრონზე მოქმედი ძალის ტოლია და მიმართულია ამ ძალის საპირისპიროდ). ელექტრონისა და ბირთვის მოძრაობების განტოლებები შესაბამისად ასე ჩაიწერება

$$m_e \frac{d\mathbf{v}_e}{dt} = \mathbf{f}; \quad m_Z \frac{d\mathbf{v}_Z}{dt} = -\mathbf{f} \quad (5.21)$$

სადაც m_e, \mathbf{v}_e და m_Z, \mathbf{v}_Z შესაბამისად ელექტრონისა და ბირთვის მასები და სიჩქარეებია. თუ შემოვიტანთ ელექტრონის სიჩქარეს ბირთვის მიმართ $\mathbf{v} = \mathbf{v}_e - \mathbf{v}_Z$ და აგრეთვე სისტემის მასათა ცენტრის სიჩქარეს $\mathbf{w} = (m_e \mathbf{v}_e + m_Z \mathbf{v}_Z)/(m_e + m_Z)$ (5.21) მოძრაობის განტოლებების შეკრებით მივიღებთ $\mathbf{w} = \text{const}$. ამრიგად ჩაკეტილი სისტემის მასათა ცენტრი მოძრაობს თანაბრად და წრფივად. თუ (5.21) პირველ და მეორე განტოლებებს შესაბამისად გავყოფთ m_e და m_Z -ზე და შემდეგ მეორეს გამოვაკლებთ პირველს მივიღებთ ელექტრონის ფარდობითი მოძრაობის სიჩქარისათვის შემდეგ განტოლებას

$$m \frac{d\mathbf{v}}{dt} = \mathbf{f} \quad (5.22)$$

სადაც

$$m = \frac{m_e m_Z}{m_e + m_Z} \quad (5.23)$$

ელექტრონის დაყვანილი მასაა. ამრიგად ორი ნაწილაკის მოძრაობის ამოცანა დაიყვანება ბირთვის ირგვლივ ელექტრონის ნაცვლად დაყვანილი მასის მქონე ნაწილაკის მოძრაობის ამოცანაზე.

წყალბადისმაგვარი ატომის ენერგია

რამდენადაც კულონური ძალა მიმართულია ურთიერთქმედი ნერტილოვანი მუხტების შემაერთებელი წრფის გასწვრივ ამ ძალის მოდული დამოკიდებულია მხოლოდ მუხტებს შორის r მანძილზე. შესაბამისად, (5.22) განტოლება აღწერს ცენტრალური სიმეტრიის ველში ნაწილაკის მოძრაობის განტოლებას, რომლის დროსაც ინახება როგორც ნაწილაკის ენერგია, ასევე მისი იმპულსის მომენტიც.

ბირთვის კულონური მიზიდულობის გავლებით მის გარშემო ელექტრონის წრიულ ორბიტაზე მოძრაობის პირობა ასე ჩაინერება:

$$\frac{mv^2}{r} = \frac{Ze^2}{r^2} \quad (5.24)$$

აქედან გამომდინარეობს, რომ ელექტრონის კინეტიკური ენერგია შებრუნებული ნიშნით უდრის მისი პოტენციური ენერგიის ნახევარს

$$\frac{mv^2}{2} = \frac{Ze^2}{2r} . \quad (5.25)$$

სრული ენერგია შესაბამისად იქნება

$$E = T + U = \frac{U}{2} = -T = -\frac{mv^2}{2} \quad (5.26)$$

როგორც ვხედავთ ენერგია უარყოფითია, რაც ასეც უნდა ყოფილიყო მდგრადი ბმული მდგომარეობებისათვის. თუ გავითვალისწინებთ $M = mVr$ მომენტის გამოსახულებას (5.24)-(5.26) ფორმულების გათვალისწინებით ენერგიისათვის საბოლოოდ მივიღებთ

$$E = -\frac{Z^2 me^4}{2M^2} \quad (5.27)$$

მივაქციოთ ყურადღება იმ ფაქტს, რომ ენერგია მომენტის ლუნი ხარისხის უკუპროპორციულია. როგორც შემდგომში ვნახავთ, ბორის თეორიაში, ამ ფაქტს უდიდესი მნიშვნელობა ექნება.

(5.27) ფორმულის დიფერენცირებით მივიღებთ კავშირს ენერგიისა და მომენტის მცირე ცვლილებებს შორის

$$\Delta E = \frac{Z^2 me^4}{M^2} \frac{\Delta M}{M} . \quad (5.28)$$

შესაბამისობის პრინციპის თანახმად ატომის მიერ გამოსხივებული (ან შთანთქმული) ფოტონის სიხშირე ელექტრონის წრიულ ორბიტაზე მიმოქცევის სიხშირის ტოლია

$$\Delta E = \hbar \omega_n = \hbar \frac{v_n}{r_n} . \quad (5.29)$$

ახლა თუ გავითვალისწინებთ $M_n = mv_n r_n$ თანაფარდობას და აგრეთვე (5.24) ფორმულას გამოვსახავთ $M_n V_n = Ze^2$ სახით (5.28) ფორმულიდან მომენტის ცვლილებისათვის მივიღებთ

$$\Delta M = \hbar . \quad (5.30)$$

ამ გამოსახულების ინტეგრებით მივიღებთ

$$M_n = n\hbar + \hbar C \quad (5.31)$$

და მოვითხოვთ, რომ C მუდმივა იყოს $0 \leq C < 1$ ინტერვალში. თუ C -ს მნიშვნელობა გასცდება აღნიშნულ ინტერვალს ადვილად შეიძლება მისი ინტერვალში დაბრუნება (5.31) ფორმულაში მომენტის მნიშვნელობების უბრალოდ გადანომრვით. ამიტომ აღნიშნული უტოლობა არავითარ დამატებით შეზღუდვას არ ადებს მომენტის მნიშვნელობებს.

ცნობილია, რომ ფიზიკური კანონები ყველა ათვის სისტემაში ერთნაირი უნდა იყოს. თუ გადავალთ დეკარტეს მარჯვენა სისტემიდან მარცხენაზე ენერგია, როგორც ნებისმიერი სკალარული სიდიდე არ იცვლის ნიშანს $E \rightarrow E$, ხოლო იმპულსის მომენტი, როგორ აქსიალური ვექტორი იცვლის ნიშანს $M \rightarrow -M$. რამდენადაც, როგორც უკვე აღვნიშნეთ (5.28) ფორმულის თანახმად ენერგია მომენტის კვადრატის უკუპროპორციულია, ამდენად იგი ინვარიანტული უნდა იყოს მომენტის პროექციის ნიშნის ცვლილების მიმართ. ამრიგად, მომენტის ყოველი დადებითი მნიშვნელობისათვის აუცილებლად უნდა არსებობდეს მომენტის სიდიდით ტოლი, მაგრამ ნიშნით საპირისპირო მნიშვნელობა, რომელთაც ენერგიის ერთი და იგივე მნიშვნელობა შეესაბამება

$$-M_{-m} = M_n \quad (5.32)$$

ამ ფორმულიდან (5.31) ფორმულის გათვალისწინებით მივიღებთ

$$C = \frac{m-n}{2} \quad (5.33)$$

ადვილად მივხვდებით, რომ ზემოაღნიშნულ უტოლობას მხოლოდ $C=0$ და $C=1/2$ მნიშვნელობები აკმაყოფილებენ. მართლაც, (5.32) პირობის დაკმაყოფილება მხოლოდ ამ ორ მნიშვნელობას შეუძლია. ყველა სხვა მნიშვნელობისათვის შეიძლება დაკმაყოფილდეს უტოლობა, მაგრამ არ დაკმაყოფილდება (5.33) პირობა.

ექსპერიმენტულ მონაცემებთან თანხვედრა ბორმა შესძლო მხოლოდ $C=0$ მნიშვნელობის არჩევით. მაშინ ელექტრონის ორბიტალური მომენტის დაკვანტვისათვის მიიღება (5.19) ფორმულა. მაგრამ აზრის აქვს ასევე $C=1/2$ მნიშვნელობის აღებასაც. იგი აღწერს ელექტრონის საკუთარ მომენტს ანუ სპინს, რომლის შინაარსაც უფრო დეტალურად სხვა თავებში შევისწავლით. ხშირად ატომის პლანეტარულ მოდელს (5.19) ფორმულის საშუალებით აყალიბებენ, მაგრამ ისტორიულად იგი სწორედ შესაბამისობის პრინციპიდან გამომდინარეობდა.

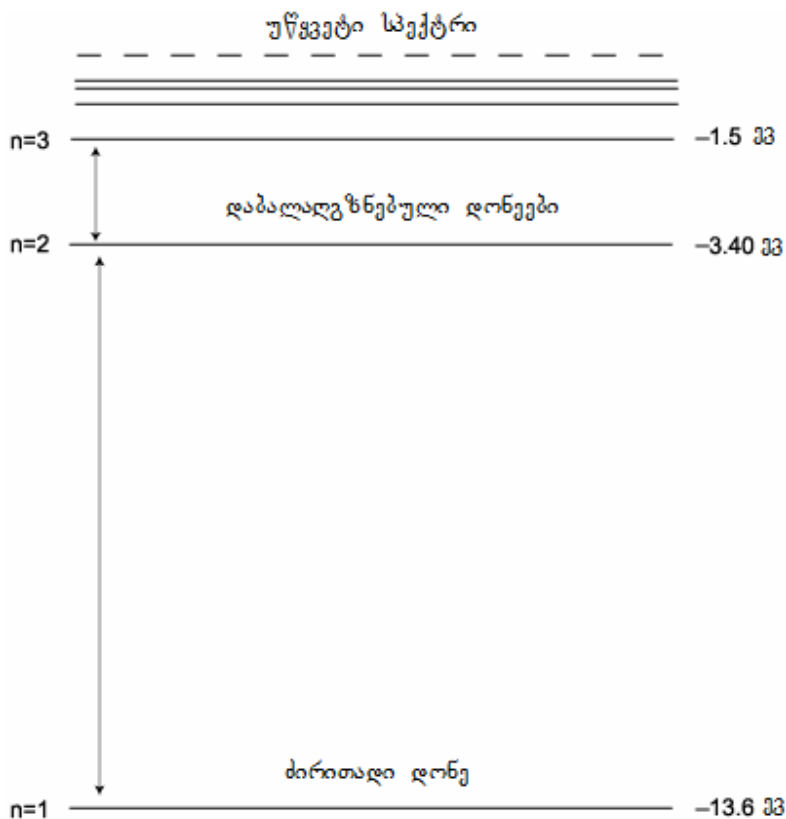
(5.19) (5.25) და (5.27) ფორმულების გამოყენებით შესაძლებელია ელექტრონის ორბიტის რადიუსისა და სიჩქარის დაკვანტვა

$$r_n = \frac{n^2 \hbar^2}{Zme^2} = \frac{n^2}{Z} a_0, \quad v_n = \frac{Ze^2}{n\hbar} = \alpha \frac{Z}{n} c. \quad (5.34)$$

ელექტრონის სრული ენერგია იკვანტება და (5.26) და (5.34) ფორმულების გათვალისწინებით ღებულობს სახეს

$$E_n = -\frac{me^4 Z^2}{2\hbar^2 n^2} = -Ry \frac{Z^2}{n^2} \quad (5.35)$$

ამრიგად ჩვენ მივიღეთ, წყალბადის ატომისა და წყალბადისმაგვარი იონისათვის ელექტრონული მდგომარეობების დისკრეტული კრებული (სპექტრი). თუ $n=1$ გვაქვს ე.წ. ძირითადი მდგომარეობა, ყველა დანარჩენი კი – ე.წ. ალგზნებული მდგომარეობებია. როცა $n \gg 1$ გვაქვს ე.წ. ძლიერად ალგზნებული მდგომარეობები. ნახაზ 5.8-ზე წარმოდგენილია წყალბადის ატომის ენერგეტიკული სპექტრი. თითოეული უწყვეტ ხაზს შეესაბამება მოცემული დონის ენერგიის მნიშვნელობა. წყვეტილი ხაზი გვიჩვენებს დისკრეტული დონეების საზღვარს, ანუ ელექტრონის ნულოვან ენერგიას, რომლის მაღლაც ელექტრონი მოსწყდება ატომბირთვს და გადადის უწყვეტ სპექტრში. ეს ნიშნავს, რომ ადგილი აქვს ატომის იონიზაციას. ნახაზიდან კარგად ჩანს, რომ უწყვეტი სპექტრის მახლობლად ადგილი აქვს აგრეთვე ენერგეტიკული დონეების „შესქელებას“. უსასრულოდ ბევრი დონეები აქვს მხოლოდ იზოლირებულ ატომს. რეალურ გარემოში მეზობელ ატომებთან სხვადასხვა



ნახ. 5.8. წყალბადის ატომის ენერგეტიკული სპექტრი

სახის ურთიერთქმედებებს მივყავართ იქამდე, რომ ატომს მხოლოდ სასრული რაოდენობის ენერგეტიკული დონეები რჩება. მაგალითად, ვარსკვლავურ სივრცეში ატომებს მხოლოდ უმდაბლესი 20-30 დონე რჩებათ, ხოლო ვარსკვლავთშორის გაიშვიათებულ სივრცეში დონეების რაოდენობა ასეულებს აღწევს.

(5.35) ფორმულაში ჩვენ შემოვიტანეთ ენერჯიის განზომილების მქონე სისტემ-გარეშე სიდიდე, რომელსაც რიდბერგი ეწოდება. ეს სიდიდე პრინციპში დამოკიდებულია m_e/m_Z თანაფარდობაზე

$$Ry = \frac{Ry_\infty}{1 + \frac{m_e}{M_Z}} \quad (5.36)$$

სადაც

$$Ry_\infty = \frac{m_e e^4}{2\hbar^2} = 2.17992 \cdot 10^{-18} \text{ ჯოული} = 13,60583 \text{ ევ} \quad (5.37)$$

ბირთვის და ელექტრონის მასებს შორის დიდი განსხვავების გამო ეს დამოკიდებულება საკმაოდ სუსტია, მაგრამ ზოგიერთ შემთხვევებში მისი უგულებელყოფა არ შეიძლება. თუ ბირთვის მასას უსასრულოდ გავზრდით, მაშინ $Ry \rightarrow Ry_\infty$.

ამრიგად პლანეტარული მოდელის თანახმად, ბმულ მდგომარეობაში ელექტრონის ორბიტაზე მიმოქცევის სიხშირე, ორბიტის რადიუსი და ელექტრონის ენერჯია მოცემულ ორბიტაზე მოძრაობისას იკვანტება და ლებულობს მთავარი კვანტური რიცხვის მიხედვით დისკრეტულ მნიშვნელობებს. უწყვეტ სპექტრში კი ელექტრონის მოძრაობა ინფინიტურია და მხოლოდ იმპულსის მომენტის დისკრეტული მნიშვნელობებით ხასიათდება. სხვა ფიზიკური სიდიდეები როგორც არის იმპულსი და ენერჯია შეიძლება უწყვეტად ლებულობდეს შენახვის კანონებით განსაზღვრულ ნებისმიერ დადებით მნიშვნელობას. იმპულსის მომენტი მიკროსამყაროში ყოველთვის იკვანტება.

მიღებული ფორმულების გამოყენებას გარკვეული შეზღუდვები ედება. პირველ რიგში, შედეგები მიღებულია რელატივისტური ეფექტების გათვალისწინების გარეშე, რაც იძლევა $(V/c)^2$ რიგის შესწორებებს. რელატივისტური ეფექტების ნვლილი იზრდება Z^4 -ს პროპორციულად და რკინის ერთელექტრონიანი იონისათვის უკვე დაახლოებით ერთ პროცენტს აღწევს. გარდა მთავარი კვანტური რიცხვისა, დონის ენერჯია განისაზღვრება ასევე ელექტრონის ორბიტალური და შინაგანი (სპინური) მომენტებით, რაც თავის მხრივ ატომური დონეების რამდენიმე ქვედონედ გახლეჩას იწვევს. ამ გახლეჩის სიდიდე ასევე Z^4 -ს პროპორციულია და მძიმე იონებში უკვე შესამჩნევი ხდება.

დისკრეტული დონეების ყველა თავისებურება გათვალისწინებულია თანმიმდევრულ კვანტურ-მექანიკურ თეორიაში. მიუხედავად ამისა ბორის მარტივი თეორია წყალბადის ატომისა წყალბადისმაგვარი იონების შესწავლის მარტივ, მოსახერხებელ და საკმარისად ზუსტ მეთოდს წარმოადგენს.

წყალბადის ატომის იზოელექტრონული მიმდევრობა

იონებს, რომლებიც შედგებიან ბირთვისა და მის გარშემო მოძრავი ერთი ელექტრონისაგან წყალბადისმაგვარი იონები ეწოდებათ, ანუ ისინი მოეკუთვნებიან წყალბადის იზოელექტრონულ მიმდევრობას. ასეთი იონები სტრუქტურულად ძალიან გვანან წყალბადის ატომს და მათი ენერგიების გამოთვლა, თუ ბირთვის მუხტი ძალიან დიდი არ არის $Z < 10$ (5.35) ფორმულით არის შესაძლებელი. როდესაც $Z > 20$ ანუ მრავალმუხტიანი იონების შემთხვევაში ენერგიის (5.35) ფორმულაში თავს იჩენს რაოდენობრივი ხასიათის ცვლილებები, რაც რელატივისტურ ეფექტებთან არის დაკავშირებული. კერძოდ ელექტრონის მასა სიჩქარეზე დამოკიდებული ხდება და აგრეთვე სპინ-ორბიტალური ურთიერთქმედება იჩენს თავს.

გამოვივალოთ ელექტრონის წრიულ ორბიტაზე მოძრაობა ელექტრონის მასის სიჩქარეზე დამოკიდებულების გათვალისწინებით

$$\frac{mv^2}{r \cdot \sqrt{1-\beta^2}} = \frac{Ze^2}{r^2} \quad (5.38a)$$

$$\frac{mvr}{\sqrt{1-\beta^2}} = n\hbar \quad (5.38b)$$

სადაც $\beta = v/c$. თუ (5.38a)-ს გავამრავლებთ r^2 -ზე გავყოფთ (5.38b) ტოლობაზე მივიღებთ

$$V = \frac{Ze^2}{n\hbar}, \quad \beta = \frac{Z}{n}\alpha. \quad (5.39)$$

აქ $\alpha = e^2/\hbar c$ ფაქიზი სრუქტურის მუდმივაა. ვიცით რა ელექტრონის სიჩქარე შეგვიძლია გამოვთვალოთ ორბიტის რადიუსი

$$r = \frac{n\hbar\sqrt{1-\beta^2}}{mc\beta}. \quad (5.40)$$

ფარდობითობის სპეციალურ თეორიაში სხეულის კინეტიკური ენერგია განისაზღვრება როგორც სხეულის სრულ და უძრაობის ენერგიებს შორის სხვაობა

$$T = mc^2 \left(\frac{1}{\sqrt{1-\beta^2}} - 1 \right) \quad (5.41)$$

მაშინ ელექტრონის სრული ენერგიისათვის ვღებულობთ

$$E = T + U = mc^2 \left(\sqrt{1-\beta^2} - 1 \right) = mc^2 \left(\sqrt{1 - \left(\frac{Z\alpha}{n} \right)^2} - 1 \right) \quad (5.42)$$

მაგალითად, რკინის ერთელექტრონიანი იონისათვის $\beta^2 = 0.04$. უფრო მსუბუქი ელემენტების იონებისათვის β შესაბამისად უფრო მცირე იქნება. ამიტომ, როცა $\beta \ll 1$, სამართლიანია გაშლა

$$E = -mc^2 \left(\frac{1}{2}\beta^2 + \frac{1}{8}\beta^4 \right). \quad (5.43)$$

ამ ფორმულის პირველი შესაკრები პირდაპირ იძლევა წყალბადისმაგვარი იონის ენერჯის (5.35) ფორმულას, ხოლო მეორე წარმოადგენს სწორედ საძიებელ რელატივისტურ შესწორებას

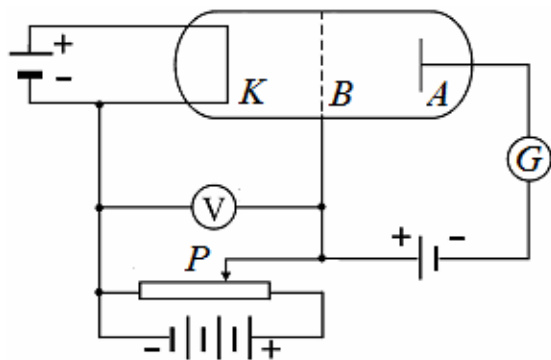
$$E^{(R)} = -\frac{\alpha^2 Z^4}{4n^4} Ry. \quad (5.44)$$

ამრიგად ენერჯის რელატივისტური შეწორება $\alpha^2 Z^4$ -ს პროპორციულია. ელექტრონის მასის სიჩქარეზე დამოკიდებულების გათვალისწინებას მივყავართ ენერგეტიკული დონეების სიდიდის ზრდამდე. ეს აიხსნება იმით, რომ მოძრავი ელექტრონი უფრო მძიმეა უძრავთან შედარებით. კვანტური რიცხვის ზრდასთან ერთად ეფექტის შესუსტება იმით აიხსნება, რომ აღზნებულ მდგომარეობაში ელექტრონის ორბიტაზე მოძრაობის სიჩქარე კლებულობს. ბირთვის მუხტზე ძლიერ დამოკიდებულებას კი განაპირობებს ძლიერ ველში მოძრავი ელექტრონის მაღალი სიჩქარე. შემდგომში ამ შესწორებას ჩვენ კვანტურ-მექანიკური მიდგომით დავითვლით და მივიღებთ ახალ შედეგს – გადაგვარების მოხსნას ორბიტალური კვანტური რიცხვის მიხედვით.

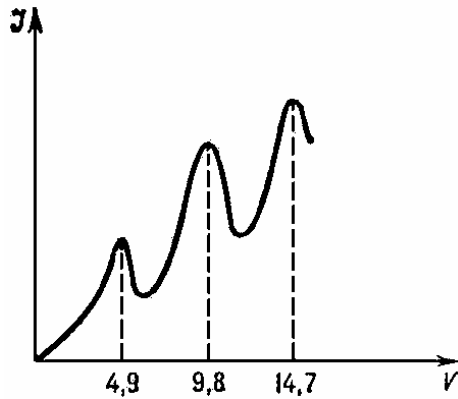
ფრანკისა და ჰერცის ცდა

ატომის დისკრეტული ენერგეტიკული სტრუქტურის არსებობა შესანიშნავად იქნა ექსპერიმენტულად დამტკიცებული ფრანკისა და ჰერცის მიერ. ნახაზ 5.9-ზე მოცემულია ამ ექსპერიმენტის სქემა. ვაკუუმურ მილაკში, რომლიდანაც ჰაერი იყო ამოტუმბული და შეშვებული იყო ვერცხლისწყლის ორთქლი, ძალიან დაბალი (დაახლოებით 1 მმ ვერცხლისწყლის სვეტის სიმაღლე) წნევით ჩარჩილულია სამი ელექტროდი: K კათოდი, B მეტალის ბადე და A ანოდი. თერმოელექტრული ემისიის შედეგად კათოდიდან ამოტყორცნილი ელექტრონები აჩქარდებოდნენ კათოდსა და ბადეს შორის მოდებული პოტენციალთა სხვაობით, რომლის რეგულირება შესაძლებელი იყო P პოტენციომეტრის საშუალებით. ბადესა და ანოდს შორის მოდებული იყო მცირე (დაახლოებით 0.5 ვოლტი) დამამუხრუჭებელი პოტენციალი, რაც ინვევდა ანოდისაკენ მიმავალი ელექტრონების დამუხრუჭებას. ცდის შედეგად აკვირდებოდნენ G გალვანომეტრში გამავალი დენის ძალის დამოკიდებულებას კათოდსა და ბადეს შორის მოდებულ ძაბვაზე, რომელიც V ვოლტმეტრით იზომებოდა. მიღებული ვოლტ-ამპერული მახასიათებელი ნახაზ. 5.10-ზეა ნაჩვენები. თავდაპირველად დენის ძალა ძაბვის ზრდასთან ერთად მონოტონურად იზრდება და 4,9 ვოლტზე აღ-

ნევს მაქსიმალურ მნიშვნელობას. ძაბვის შემდგომი ზრდის მიუხედავად დენის ძალა მკვეთრად მცირდება და აღწევს მინიმალურ მნიშვნელობას, რის შემდეგაც ძაბვის მომატებასთან ერთად დენი კვლავ იწყებს ზრდას და აღწევს მეორე (9.8 ვოლტზე), მესამე (14.7 ვოლტზე) და ა.შ. მაქსიმუმებს. მრუდის ასეთი ყოფაქცევა გამომწვეულია იმით, რომ ატომის ენერგეტიკული დონეების დისკრეტულობის გამო ატომს შეუძლია აღიქვას ენერგია მხოლოდ დისკრეტული პორციების სახით: $\Delta E_1 = E_2 - E_1$, ან $\Delta E_2 = E_3 - E_2$ და ა.შ. სადაც $E_1, E_2, E_3 \dots$ ატომის პირველი, მეორე, მესამე და ა.შ. სტაციონალური მდგომარეობების ენერგიაა. სანამ ელექტრონის ენერგია ΔE_1 -ზე ნაკლებია, ელექტრონებსა და ატომებს შორის დაჯახებებს დრეკადი ხასიათი აქვთ, თანაც რამდენადაც ელექტრონის მასა ატომის მასაზე გაცილებით ნაკლებია დაჯახების შედეგად ელექტრონის ენერგია პრაქტიკულად უცვლელი რჩება. ელექტრონების ნაწილი ბადეს ეჯახება, ხოლო დანარჩენები კი ანოდისაკენ მოძრაობას განაგრძობენ. ეს ბადეში გასული ელექტრონები აღწევენ ანოდს, რის გამოც გალვანომეტრში გაივლის დენი. რაც უფრო მეტია კათოდსა და ბადეს შორის მოდებული ამარქარებელი ძაბვის მნიშვნელობა, მით მეტი იქნება ბადეში გასული ელექტრონების რაოდენობა და, შესაბამისად, გალვანომეტრში გამავალი დენის ძალაც. როდესაც ელექტრონების ენერგია მიაღწევს ანდა გადააჭარბებს $\Delta E_1 = 4,9$ -ევს, მაშინ უკვე ელექტრონების ვერცხლისწყლის ატომებთან შეჯახებებს უჩნდებათ არადრეკადი ხასიათი, ანუ ელექტრონები ატომებს გადასცემენ ΔE_1 -ის ტოლ ენერგიას და შემდგომ შემცირებული ენერგიით აგრძელებენ მოძრაობას. ეს ენერგიაგამოცლილი ელექტრონები თუკი შეძლებენ კიდევ ბადეში გავლას და მათი ნარჩენი ენერგია 0.5 ევ-ზე ნაკლები აღმოჩნდება ისინი მაინც ვერ გადალახავენ ანოდსა და ბადეს შორის არსებულ დამამუხრუჭებელ პოტენციალს, ვერ მიაღწევენ ანოდამდე და კვლავ ბადეს დაუბრუნდებიან. ეს გამოიწვევს ელექტრონების მხრიდან მიღებული ენერგიის ხარჯზე გადავლენ პირველ აღზნებულ მდგომარეობაში და დაახლოებით 10^{-8} წმ-ის შემდეგ $\omega = \Delta E_1 / \hbar$ სიხშირის კვანტის გამოსხივების შედეგად დაუბრუნდებიან თავიანთ ძირითად მდგომარეობას.



ნახ. 5.9. ფრანკისა და ჰერცის ცდის სქემა



ნახ. 5.10. ფრანკისა და ჰერცის ცდის ვოლტ-ამპერული მახასიათებელი

როდესაც კათოდსა და ბადეს შორის მოდებული ძაბვა 9.8 ვოლტს გადააჭარბებს ელექტრონები უკვე ასწრებენ იმდენი ენერგიის შეძენას, რომ თავიანთი გავრცელების გზაზე მათ შეუძლიათ ვერცხლისწყლის ორი ატომის ალგზნება და, საერთო ჯამში, ორივე ატომზე 9.8 ევ ენერგიის გადაცემა. მხოლოდ ამის შემდეგ ასეთ ენერგიაგამოცლილი ელექტრონები კვლავ ველარ აღწევენ ანოდს და ადგილი აქვს ანოდური დენის კიდევ ერთხელ შემცირებას. ადვილი მისახვედრია, რომ ძაბვის 14.7 ვოლტამდე გაზრდით მიიღება სურთი, რომლის დროსაც ელექტრონებს შეეძლება უკვე ვერცხლისწყლის სამი ატომის ალგზნება და შემდეგ პროცესი კვლავ წინანდებურად განვითარდება.

ამრიგად, ფრანკისა და ჰერცის ცდით უშუალოდ მტკიცდება ატომის დისკრეტული ენერგეტიკული სტრუქტურის არსებობა.

თავი 6

წყალბადისმაგვარი სისტემების სპექტრები

ბორის პოსტულატების თანახმად, ატომის ორ ენერგეტიკულ დონეებს შორის გადასვლისას ხდება სპექტრალური ხაზის გამოსხივება ან შთანთქმა. წინა თავში მიღებული ფორმულების დახმარებით შესაძლებელია შევიქმნათ წარმოდგენა წყალბადის ატომისა და წყალბადისმაგვარი იონების სპექტრების შესახებ.

წყალბადის ატომის სპექტრალური სერიები

ზედა ენერგეტიკული დონიდან საერთო ქვედა დონეზე დასაშვები გადასვლების ერთობლიობას *სპექტრალური სერია* ეწოდება. მაგალითად, წყალბადის ატომისა და წყალბადისმაგვარი იონებისათვის *ლაიმანის* სერია ეწოდება ყველა იმ დასაშვებ გადასვლათა ერთობლიობას, რომელიც პირველ დონეზე ხდება. დონის მთავარი კვანტური რიცხვი შეიძლება იყოს $n = 2, 3, 4, 5, \dots$, ბალმერის სერიისათვის კი გადასვლა მეორე დონეზე ხდება ანუ $n > 2$. 6.1 ცხრილში მოყვანილია წყალბადის ატომის პირველი რამოდენიმე სერიის დასახელებები. ლაიმანის სერია მთლიანად სპექტრის ვაკუუმურ ულტრაიისფერ არეშია განლაგებული. ბალმერის სერია მოთავსებულია სპექტრის ხილულ დიაპაზონში, ხოლო პაშენის სერია ინფრანითელ დიაპაზონში. ნებისმიერი სერიის პირველი რამოდენიმე ხაზი ლათინური ანბანის შესაბამისად ინომრება, როგორც ეს 6.2 ცხრილშია ნაჩვენები.

ცხრილი 6.1

წყალბადის ატომის სპექტრალური სერიები

სერია	დასახელება
$n \rightarrow 1$	ლაიმანი (Ly)
$n \rightarrow 2$	ბალმერი (H)
$n \rightarrow 3$	პაშენი (P)
$n \rightarrow 4$	ბრეკეტი (B)
$n \rightarrow 5$	პფუნდი (Pf)
$n \rightarrow 6$	ხემფრი
$n \rightarrow 7$	ხანსენ-სტრონგი

ცხრილი 6.2

პირველი სპექტრალური ხაზების აღნიშვნები

Δn	1	2	3	4	5	6	7	8
ინდექსი	α	β	γ	δ	ϵ	ζ	η	θ

რომელიმე ზედა n -ური დონიდან რაიმე ქვედა m -ურ დონეზე სპონტანური გადასვლისას ატომი ასხივებს კვანტს ენერგიით

$$E_{nm} = E_n - E_m \quad (6.1)$$

რადიაციული გადასვლებისას ქვედა m -ური დონიდან ზედა n -ურ დონეზე შთაინთქმება ასეთივე ენერგიის კვანტი. წყალბადის ატომის პლანეტარული მოდელის თანახმად დონის ენერგია გამოითვლება (5.35) ფორმულით, სადაც $Z = 1$

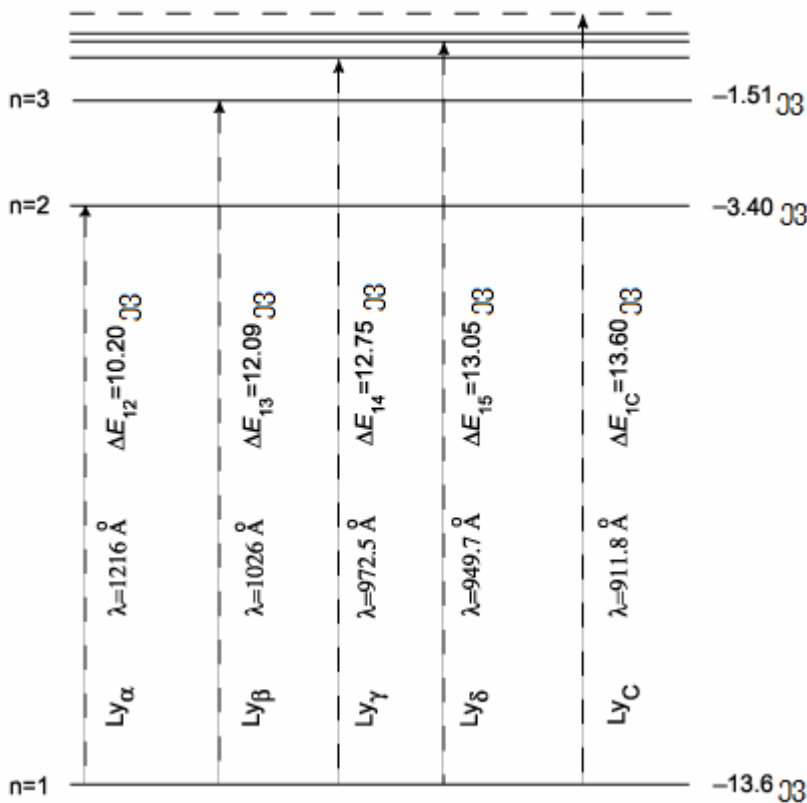
$$E_{nm} = Ry \cdot \left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right), \quad (6.2)$$

თუ ამ ფორმულას hc -ზე გავყოფთ მივიღებთ გადასვლის შესაბამის ტალღურ რიცხვს

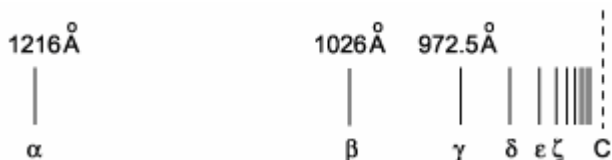
$$k_{nm} = R_H \left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad (6.3)$$

ვაკუუმში ტალღური რიცხვის შებრუნებული სიდიდე ტალღის სიგრძეა

$$\lambda_{nm} = \frac{1}{k_{nm}} \quad (6.4)$$



ნახ. 6.1. გადასვლები წყალბადის ატომის ლაიმანის სერიაში



ნახ. 6.2 წყალბადის ატომის ლაიმანის სერია

ზედა n -ური დონის ნომრის გაზრდასთან ერთად ტალღის სიგრძე მონოტონურად მცირდება. ამასთან, სპექტრალური ხაზები შეუზღუდავად უახლოვდებიან ერთმანეთს. არსებობს სერიის ტალღის სიგრძის

ქვედა საზღვარი, რომელსაც იონიზაციის ზღურბლი ეწოდება. ნახაზ 6.1 და 6.2-ზე იგი აღნიშნულია ინდექსი "C"-ს საშუალებით. (6.3) და (6.4) ფორმულების გამოყენებით შესაძლებელია წყალბადის ატომის ნებისმიერი სერიის ტალღის სიგრძის გამოთვლა.

ცხრილ 6.3-ში მოყვანილია ვაკუუმში ლაიმანის სერიის ტალღის სიგრძეები. თეორიული შედეგი მიღებული ატომის პლანეტარული მოდელის გამოყენებით. ექსპერიმენტულ მონაცემებთან

ცხრილი 6.3

წყალბადის ატომის ლაიმანის სერიის ტალღის სიგრძეები

n	გადასვლა	E_{12}, eV	E_{12}, Ry	ტალღის სიგრძე \AA	
				$\lambda_{\text{ექს}}$	$\lambda_{\text{თეორ}}$
2	L_{α}	10.20	0.75	1215.67	1215.68
3	L_{β}	12.09	0.89	1025.72	1025.73
4	L_{γ}	12.75	0.94	972.537	972.548
5	L_{δ}	13.05	0.96	949.743	949.754
∞	L_c	13.60	1.00	—	911.763

კარგი რაოდენობრივი თანხვედრა მიუთითებს ბორის თეორიის საფუძვლების გონივრულობაზე. მცირეოდენი განსხვავების არსებობა აიხსნება რელატივისტური ეფექტებით, რომელზედაც მოგვიანებით ვისაუბრებთ.

საინტერესოა წყალბადის მძიმე იზოტოპის – დეიტერიუმის ბალმერის სპექტრის შედარება წყალბადის ბალმერის სპექტრთან. ეს შედარება მოცემულია 6.4 ცხრილში

ცხრილი 6.4

წყალბადისა და დეიტერიუმის ბალმერის სპექტრები

გადასვლა	წყალბადი	დეიტერიუმი
H_{α}	6562.78	6561.06
H_{β}	4861.27	4859.99
H_{γ}	4340.40	4339.28
H_{δ}	4101.66	4100.62

დეიტერიუმისათვის რიბბერგის მუდმივა მეტია წყალბადის რიბბერგის მუდმივასთან შედარებით. ამიტომაც დეიტერიუმის სპექტრი წანაცვლებული სპექტრის ცისფერი არისკენ. ტრიტიუმის მასა დაახლოებით სამის ტოლია. ამიტომ მისი სპექტრიც დაახლოებით 0.6\AA იქნება წანაცვლებული დეიტერიუმის მიმართ სპექტრის ცისფერი არისკენ.

კორპუსკულურ-ტალღური დუალიზმი

მე-19 საუკუნის ბოლომდე ითვლებოდა, რომ გამოსხივება ხასიათდება მხოლოდ ტალღური ბუნებით. მიუხედავად ამისა, ჰიპოთეზა სინათლის კორპუსკულური ბუნების არსებობის შესახებ არაერთხელ იქნა გამოთქმული. ამ მოსაზრებას ეთანხმებოდა ნიუტონიც. მაგრამ მე-19 საუკუნის დასაწყისში ფრენელისა და იუნგის მიერ სინათლის ტალღების ინტერფერენციისა და დიფრაქციის მოვლენების გამოკვლევამ და მოგვიანებით მაქსველის ელექტრომაგნიტური თეორიის ჩამოყალიბებამ საბოლოოდ დაამკვიდრა ტალღური კონცეპცია. მაგრამ მე-19 საუკუნის ბოლოსა და მე-20 საუკუნის დასაწყისისთვის თავი იჩინეს ისეთმა ფაქტებმა, რომლებიც მიუთითებდნენ გამოსხივების კვანტური ბუნების ანუ კორპუსკულური წარმოდგენების სასარგებლოდ.

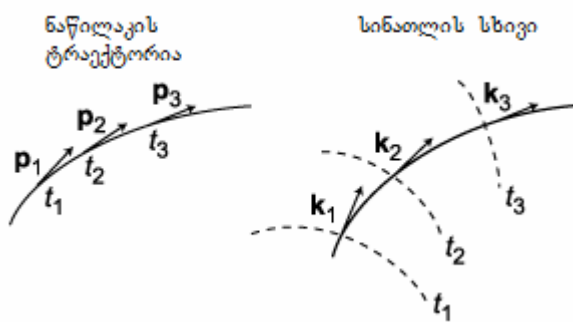
ნაწილაკთა ტალღური თვისებები

როგორც უკვე ვნახეთ კომპტონის და ფოტოეფექტის მოვლენები ადასტურებენ გამოსხივების კორპუსკულური ბუნების არსებობას. ახლა დავრწმუნდეთ იმაში, რომ გარკვეულ პირობებში ნაწილაკებიც ავლენენ ტალღურ ბუნებას. ამ საკითხში გასარკვევად უმჯობესია გამოვიყენოთ გეომეტრიულ ოპტიკასა და მექანიკას შორის არსებული ანალოგია.

მოკლე ტალღის სიგრძის შემთხვევაში სინათლის გავრცელება შეიძლება აღვწეროთ გეომეტრიული ოპტიკის მიახლოებაში. ამ შემთხვევაში შესაძლებელია სინათლის ტალღური ბუნების სრული უგულებელყოფა და შეიძლება შემოვიტანოთ ე.წ. სინათლის სხივების ცნება. ეს სხივები წარმოადგენენ ისეთ წირებს, რომელთა მხებიც ნებისმიერ წერტილში ემთხვევა ტალღის გავრცელების მიმართულებას. გეომეტრიულ ოპტიკაში ტალღის ფრონტის გავრცელების ნაცვლად განიხილავენ სინათლის სხივის გავლას ლინზაში, პრიზმაში და სხვა ოპტიკურ ხელსაწყოებში. გეომეტრიული ოპტიკის მიახლოება სამართლიანია, როცა ტალღის სიგრძე λ გაცილებით ნაკლებია გასანათებელი ობიექტის L გეომეტრიულ ზომებთან შედარებით (აგრეთვე გარემოს არაერთგვაროვნების ზომებთან შედარებით). როცა $\lambda \sim L$ თავს იჩენს ინტერფერენციული მოვლენები. ეს არის წმინდა ტალღური ოპტიკის არსებობის არე. გეომეტრიულ ოპტიკასა და მექანიკას შორის არსებობს ღრმა ანალოგია იმ შემთხვევაში როდესაც, თეორიული მიდგომები შეიძლება ავაგოთ უმცირესი ქმედების პრინციპზე დაყრდნობით. კლასიკურ მექანიკაში სამართლიანია ლაგრანჟ-ეილერის ვარიაციული პრინციპი, რომლის თანახმადაც ნაწილაკის მოძრაობის ტრაექტორია განისაზღვრება ქმედების ვარიაციის ნულთან ტოლობის პირობიდან

$$\delta S = 0, \text{ სადაც } S = \int_1^2 p dl . \text{ აქ ინტეგრალი აღებულია ნაწილაკის იმპულსით ნაწილა-}$$

კის «1» ნერტილიდან «2»-ში გადაადგილებისას. ოპტიკაში სამართლიანია ფერმას პრინციპი $\delta\Psi=0$, სადაც $\Psi = \int_1^2 k dl$, ხოლო ინტეგრალი აღებულია ტალღური ვექტორიდან ოპტიკური სხივის ტრაექტორიის გასწვრივ. განმარტებიდან ნათელია, რომ ეიოკონალი წარმოადგენს ფაზას. როგორც ვხედავთ კლასიკური მექანიკის განტოლებები და გეომეტრიული ოპტიკის განტოლებები ფორმალურად ერთმანეთს ემთხვევა თუ $\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{p}$. ასეთი ცვლილების აზრი ილუსტრირებულია ნახ. 7.1-ზე. მართლაც ნაწილაკის ტრაექტორია მოიცემა თუ ცნობილია დროის სხვადასხვა მომენტში მისი იმპულსი. ანალოგიურად სხივის გავრცელების მიმართულება ასოცირდება ტალღის ფრონტის მართობულად ტალღური ვექტორის გავრცელების მიმართულებასთან. ნახაზზე დროის სხვადასხვა მომენტში ტალღის ფრონტის მდებარეობა ნაჩვენებია წყვეტილი ხაზებით. რამდენადაც $k = 2\pi/\lambda$, ხოლო ტალღის სიგრძე თავის მხრივ უკუპროპორციული n გარემოს გარდატეხის მაჩვენებლის მივიღებთ $\lambda = \lambda_0/n$, სადაც λ_0 – ტალღის სიგრძეა ვაკუუმში. შესაბამისად $\Psi \propto \int_1^2 n dl$. ერთგვაროვან გარემოში გარდატეხის მაჩვენებელი მუდმივი სიდიდეა და გვექნება $\delta\Psi \sim n|\delta l|=0$. ამრიგად ჩვენ ვხედავთ, რომ გეომეტრიული ოპტიკიდან კლასიკურ მექანიკაზე გადასვლა და პირიქით დაიყვანება $n \leftrightarrow p$ ფორმალურ ცვლილებაზე. ეს ანალოგია საფუძვლად ელექტრონულ ოპტიკას.

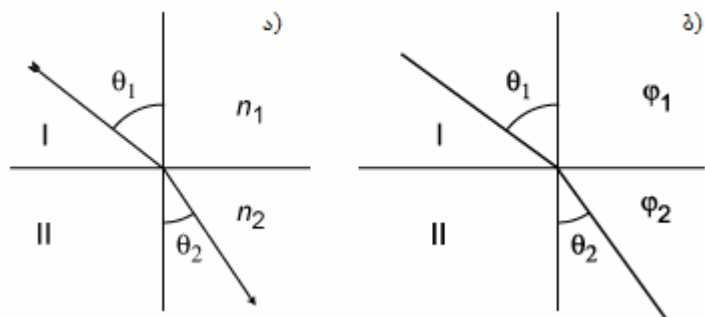


ნახ. 7.1. ანალოგია ნაწილაკსა და სინათლის სხივის შორის

კავშირი იმპულსსა და გარდატეხის მაჩვენებელს შორის

ვაჩვენოთ ანალოგია მექანიკაში ნაწილაკის იმპულსსა და ოპტიკაში სხივის გარდატეხის მაჩვენებელს შორის. როგორც ნახ.7.2ა-დან ჩანს ორი სახვადასხვა გარდატეხის მაჩვენებლის მქონე გარემოს გამყოფ საზღვარზე სხივის გავრცელებისადგილი აქვს სხივის გავრცელების მიმართულების ცვლილებას. სნელიუსის კანონის თანახმად $n_1 \sin\theta_1 = n_2 \sin\theta_2$, სადაც n_1 და n_2 თითოეული გარემოს გარდა-

ტების მაჩვენებელია. ახლა განვიხილოთ p იმპულსის მქონე ელექტრონი, რომელიც მოძრაობს ორი გარემოს გამყოფ საზღვარზე, რომელთა შორის პოტენციალთა სხვაობაა $\Delta\varphi$ (ნახ.7.2ბ).



ნახ. 7.2. ორი გარემოს გამყოფ საზღვარზე სხივის გავრცელების მიმართულებისა და ელექტრონის მოძრაობის ნრფივი ტრაექტორიის გარდატეხა

ორი გარემოს გამყოფ საზღვარზე უცვლელია იმპულსის ტანგენციალური მდგენელი $p_{11} = p_{12}$, ხოლო ნორმალური მდგენელი კი იცვლება საიდანაც გამომდინარეობს $p_1 \sin\theta_1 = p_2 \sin\theta_2$. ამრიგად მივიღეთ, რომ ორი გარემოს გამყოფ საზღვარზე ნაწილაკის იმპულსი იქცევა ისე, როგორც სხივის გარდატეხის მაჩვენებელი. რამდენადაც ელექტრონის p იმპულსსა და ამაჩქარებელ φ პოტენციალს შორის არსებობს ცალსახა თანაფარდობა $p^2/2m = e\varphi$ შესაძლებელია პოტენციალის სათანადოდ შერჩევით დამუხტული ნაწილაკებისათვის მივიღოთ გარემო გარდატეხის სასურველი მაჩვენებლით, რაც ელექტრო ოპტიკური ხელსაწყოების დაპროექტების საშუალებას იძლევა.

დე-ბროილის ტალღა

ოპტიკურ-მექანიკური ანალოგია გვკარნახობს იმ აზრს, რომ ერთმანეთს დაუკავშიროთ ტალღის სიგრძე და იმპულსი. ოპტიკიდან ცნობილია, რომ ტალღური რიცხვი და გარდატეხის მაჩვენებელი ტალღის სიგრძის უკუპროპორციულია

$$n \sim k \sim 1/\lambda. \tag{7.1}$$

ზემოთქმულიდან გამომდინარე, ნაწილაკის იმპულსი გარდატეხის მაჩვენებლის ან ტალღური რიცხვის ანალოგიაა. ამიტომ შეიძლება დავუშვათ, რომ არსებობს რაღაც სიგრძის განზომილების მქონე სიდიდე, რომელიც ნაწილაკის p იმპულსთან შემდეგნაირად არის დაკავშირებული

$$p \sim 1/\lambda \tag{7.2}$$

ფოტონისათვის სამართლიანია თანაფარდობა

$$p = \hbar k = h / \lambda. \tag{7.3}$$

თუ ამ ფორმულას შევაბრუნებთ და (5.13)-ს შევუსაბამებთ მივიღებთ

$$\lambda_D = h/p = h / (mv), \quad (7.4)$$

სადაც λ_D – ნაწილაკის ტალღის სიგრძეა. პირველად λ_D სიდიდე ლუი დე-ბროილის მიერ იქნა შემოტანილი 1924 წელს. ერთი შეხედვით მოსაზრება ნაწილაკის ტალღური ბუნების არსებობის შესახებ არცთუ ისე დამაჯერებელია, რამეთუ ჩვეულებრივ მაკროსკოპული მასშტაბის სხეულები ტალღურ თვისებებს არსად ავლენენ. ამის მიზეზია ის, რომ პლანკის მუდმივა ძალიან პატარა სიდიდეა, ხოლო მაკროსხეულების მასები კი დიდია. ამიტომ მაკროსამყაროში λ_D სიდიდე გაცილებით ნაკლებია ნებისმიერი რეალური ობიექტის ზომებზე.

განვიხილოთ რამდენიმე მაგალითი, საიდანაც ნათელი გახდება თუ როდის შეიძლება გამოვლინდეს ნაწილაკთა ტალღური ბუნება. მტვრის ნაწილაკი, რომლის მასა 10^{-3} გ რიგისაა, ჰაერში მოძრაობს $v=1$ მკმ/წმ სიჩქარით. ამ შემთხვევაში (7.4) ფორმულის თანახმად $\lambda_D \sim 7 \cdot 10^{-20}$ სმ. ასეთი ზომები კი არ შეესაბამება არცერთ რეალურ ობიექტს. ცხადია თუ მაკროობიექტის მასა და სიჩქარეს კიდევ უფრო გავზრდით λ_D სიდიდე კიდევ უფრო შემცირდება. ამრიგად შეგვიძლია დავასკვნათ, რომ მაკროსკოპული ობიექტებისათვის შეუძლებელია მათ ტალღურ თვისებებზე დაკვირვება. ახლა განვიხილოთ ელექტრონი, რომელიც აჩქარებულია ϕ პოტენციალთა სხვაობის ველში და გააჩნია $p = \sqrt{2me\phi}$ იმპულსი. მაშინ მისი დე-ბროილის ტალღის სიგრძე იქნება

$$\lambda_D = \frac{h}{p} = \frac{h}{\sqrt{2me\phi}}. \quad (7.5)$$

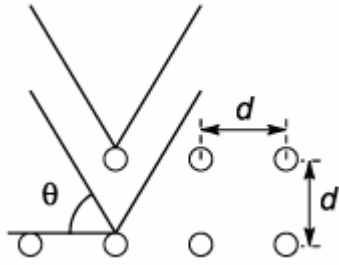
თუ პოტენციალს ვოლტებში გავზომავთ, ხოლო ტალღის სიგრძეს ანგსტრემებში მივიღებთ ფორმულას

$$\lambda_D = \frac{12.3}{\sqrt{\phi}}. \quad (7.6)$$

ელექტრონს შეუძლია გამოავლინოს ტალღური თვისებები კრისტალებზე ელექტრონის დიფრაქციისას. ამისათვის λ_D სიდიდე კრისტალური მესრის მუდმივას ანუ დაახლოებით ერთი ანგსტრემის რიგის უნდა იყოს. ასეთ ტალღის სიგრძეს კი შეესაბამება $\phi \sim 100$ ვ რიგის პოტენციალი, რაც სავსებით რეალისტურია.

ელექტრონების დიფრაქცია

ზემოთ ჩვენ ჩამოვაცალიბეთ ნაწილაკის ტალღური ბუნების არსებობის თეორიული საფუძვლები. ახლა განვიხილოთ ამ ფაქტის დამადასტურებელი ზოგიერთი ექსპერიმენტი.



ნახ. 7.3. ელექტრონების გაფანტვა კრისტალებზე

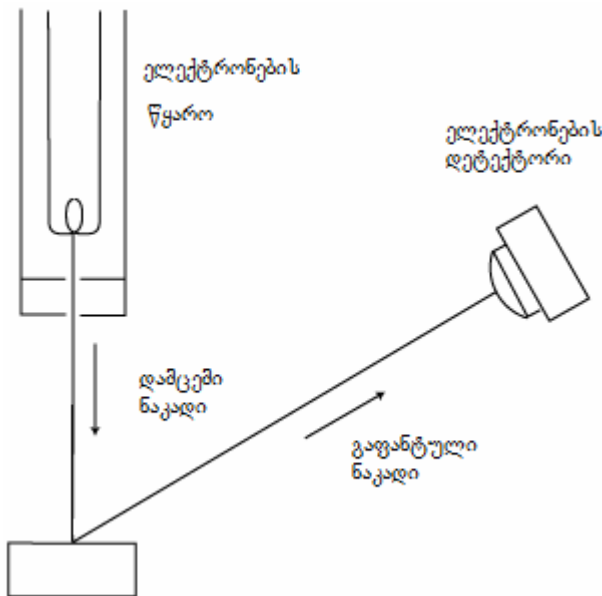
ნახ.7.3-ზე სქემატურად გამოსახულია θ სრილის კუთხით დაცემული ელექტრონული ტალღის გაფანტვა d მუდმივას მქონე კრისტალურ მესერზე. ნახაზიდან ნათელია, რომ კრისტალური მესრის ორი მეზობელი სიბრტყიდან არეკლილ სხივებს შორის სვლათა სხვაობა Δ ტოლია

$$\Delta = 2 d \sin\theta. \quad (7.7)$$

იმ მიმართულებით, სადაც Δ ტალღის სიგრძის მთელი რიცხვის ტოლია

$$2d \sin\theta = n \lambda_p \quad (7.8)$$

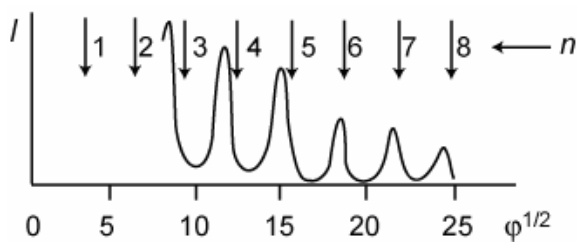
შეიმჩნევა გაფანტული ელექტრონების ნაკადის გაძლიერება. (7.8) ტოლობას ეწოდება ვულფ-ბრეგის ფორმულა. ეს ფორმულა სრულად შეესაბამება თხელი ფენებიდან სინათლის არეკლისას წარმოქმნილ ინტერფერინციული სურათის მაქსიმუმების განაწილების პირობას.



ნახ. 7.4. დევისონის და ჯერმერის ექსპერიმენტი

ელექტრონების დიფრაქციის მოვლენა პირველად 1927 წელს აღმოაჩინეს კ. დევისონმა და ლ. ჯერმერმა (ამ აღმოჩენისათვის ავტორები დაჯილდოვდნენ ნობელის პრემიით). ამ ექსპერიმენტის სქემა გამოსახულია ნახ. 7.4-ზე. ექსპერიმენტის შედეგად მიღებულ გაფანტული ელექტრონების პოლარულ დიაგრამაზე ნათლად გამოიკვეთა დიფრაქციული სურათი. ამ განაწილების ახსნა ავტორებმა შესძლეს ვულფ-ბრეგის (7.8) ფორმულისა და (7.4) დებროილის თანაფარდობის გამოყენებით. ელექტრონების დიფრაქ-

ციის ექსპერიმენტებში შესაძლებელი იყო ელექტრონების უცვლელი ენერგიების შემთხვევაში შეეცვალათ θ სრიალის კუთხე. ასევე შესაძლებელი იყო ფიქსირებული θ სრიალის კუთხის შემთხვევაში შეეცვალა ϕ პოტენციალთა სხვაობა. ამ შემთხვევაში $2d \sin \theta = nh / \sqrt{2me\phi}$ თანაფარდობის თანახმად n -ური რიგის ინტერფერენციულ მაქსიმუმს შეესაბამება სათანადო ϕ პოტენციალი. ნახ. 7.5-ზე ნაჩვენებია ელექტრონების დენის ძალის დამოკიდებულება ამაჩქარებელ პოტენციალთა სხვაობაზე. ისრებით ნაჩვენებია (7.6) ფორმულით მიღებული მნიშვნელობები. მცირე n -ებისათვის ექსპერიმენტულ და თეორიულ მონაცემებს შორის განსხვავება აიხსნება იმით, რომ გამოთვლებში გათვალისწინებული არ არის ელექტრონების ტალღების გამფანტავ გარემოში გადასვლისას არსებული გარდატეხის მაჩვენებელი.



ნახ. 7.5. ვულფ-ბრეგის ფორმულის შემოწმება

ამრიგად ექსპერიმენტულად იქნა დამტკიცებული ელექტრონების ტალღური ბუნების არსებობა. მოგვიანებით დამზერილ იქნა ასევე სხვა ელემენტარული ნაწილაკების პროტონების, ნეიტრონების დიფრაქციული მოვლენები. ანალოგიური შედეგი მიიღება ექსპერიმენტებში, რომლებშიც ნაცვლად ელექტრონების ნაკადისა გამოყენებულია ატომური და მოლეკულური ნაკადები. ამით მტკიცდება, რომ ტალღური ბუნების გამოვლენა დამახასიათებელია ზოგადად ყველა მიკრონაწილაკისათვის. დასასრულს უნდა აღინიშნოს, რომ ელექტრონის დე-ბროილის ტალღის საშუალებით შესაძლებელია ბორის ატომური ორბიტების დაკვანტის იდეის გააზრება. მართლაც, ელექტრონის ტალღის გავრცელება ატომბირთვის ველში შეგვიძლია განვიხილოთ, როგორც ტალღის არაერთგვაროვან გარემოში გავრცელება. ოპტიკურ-მექანიკური ანალოგიიდან შეგვიძლია დავასკვნათ, რომ ელექტრონული ტალღისთვის გარდატეხის ეფექტური მაჩვენებელი ბირთვიდან დაშორების მიხედვით $\sqrt{\phi}$ -ის პროპორციულად მცირდება. ამიტომ ტალღის გავრცელების ფრონტის გარე ნაწილები უნდა გადაადგილდებოდნენ უფრო მაღალი სიჩქარით ვიდრე შიდა ნაწილები. ეს ქმნის ელექტრონის მრუდწირულ ტრაექტორიაზე მოძრაობის წინაპირობას. სფერული სიმეტრიის შემთხვევაში ეს ტრაექტორია წრიული იქნება. წრიულ ტრაექტორიაზე მოძრავი ტალღა არ მიიღევა თუ საწყის წერტილში იგი იგივე ფაზით დაბრუნდება ანუ

$$2\pi r = n\lambda_D = n\frac{h}{mv} \quad (7.9)$$

ამრიგად, (7.9) პირობა, რომელიც განსაზღვრავს დასაშვებ ორბიტებს შეიძლება ჩაინეროს შემდეგნაირად

$$mvr = n\frac{h}{2\pi}. \quad (7.10)$$

ეს ფორმულა კი წარმოადგენს ელექტრონის ორბიტების დაკვანტვის ბორისეულ წესს.

თავი 8

ტალღური პაკეტი

მე-7 თავში ჩვენ დავრწმუნდით, რომ გარკვეულ პირობებში ნაწილაკები ავლენენ ტალღურ ბუნებას. მეორე მხრივ ექსპერიმენტებით ასევე დადასტურებულია გამოსხივების კორპუსკულური ბუნების არსებობაც. ამიტომ ისმის კითხვა როგორ შეეთავსება ობიექტის ტალღური და კორპუსკულური ბუნება ერთმანეთს? ნაწილაკი ხომ სივრცეში ლოკალიზებული ობიექტია, ხოლო ტალღა კი მთელ სივრცეში განფენილი წარმონაქმნია. მაგალითად, მონოქრომატული ტალღა მთელს სივრცეში არის განფენილი და მისი ადგილმდებარეობის დადგენა აზრს მოკლებული მცდელობაა. მიუხედავად ამისა შესაძლებელი აღმოჩნდა ტალღური პროცესების სივრცეში ლოკალიზება. ამისათვის საჭიროა შეიქმნას ე.წ. ტალღური პაკეტი – სხვადასხვა სიხშირისა და ტალღის სიგრძის მქონე რხევათა ჯამი.

ფაზური სიჩქარე

ჩავწეროთ x ღერძის დადებითი მიმართულებით გავრცელებადი მონოქრომატული ტალღა

$$\psi(x, t) = A \cos(kx - \omega t) \quad (8.1)$$

სადაც ψ – ნებისმიერი სიდიდეა, რომელიც აღწერს ტალღურ მოძრაობას. $\varphi = kx - \omega t$ არგუმენტს ეწოდება ტალღის ფაზა. ჩვენ შეგვიძლია კოორდინატა გავმოვსახოთ ფაზისა და დროის საშუალებით

$$x = \frac{\varphi}{k} + \frac{\omega}{k} t. \quad (8.2)$$

თუ დავაფიქსირებთ ფაზას, მაშინ კოორდინატა დროის წრფივი ფუნქცია იქნება. $V_{ფ} = \frac{\omega}{k}$ სიდიდეს ეწოდება ტალღის ფაზური სიჩქარე. ფაზური სიჩქარის ფიზიკური აზრი შემდეგში მდგომარეობს. დამკვირვებლისთვის, რომელიც მოძრაობს ტალღის გავრცელების მიმართულებით $V_{ფ}$ სიჩქარით ψ სიდიდე უცვლელი რჩება და თითქოს მის მიმართ ტალღა „იყინება“. ხშირ შემთხვევაში შესაძლებელია ფაზური სიჩქარე სინათლის სიჩქარეზე მეტი აღმოჩნდეს. მაგრამ ეს არ ეწინააღმდეგება ფარდობითობის პრინციპს, რადგანაც ტალღის მიერ ენერგიის გადატანა ფაზური სიჩქარით არ ხდება.

ჯგუფური სიჩქარე

ტალღის ჯგუფური სიჩქარის ცნება უკავშირდება სხვადასხვა სიხშირის რხევათა ინტერფერენციის მოვლენას. განვიხილოთ ორი ტალღა ერთნაირი ამპლიტუდითა და სხვადასხვა მაგრამ ახლოს მყოფი სიხშირეებით:

$$\begin{aligned}\Psi_1 &= A \cos(kx - \omega t), \\ \Psi_2 &= A \cos[(k + \Delta k)x - (\omega + \Delta \omega)t],\end{aligned}\tag{8.3}$$

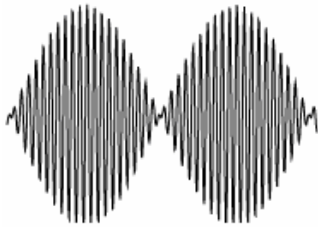
სადაც

$$|\Delta k| \ll k, \quad |\Delta \omega| \ll \omega$$

ამ ორი ტალღის ჯამი ინება

$$\Psi(x, t) = \Psi_1 + \Psi_2 \approx 2A \cos(kx - \omega t) \cdot \cos\left(\frac{\Delta k}{2}x - \frac{\Delta \omega}{2}t\right).$$

აქ პირველ კოსინუსში $\Delta \omega$ და Δk უგულვებელყოფილია 2ω და $2k$ -თან შედარებით. ნახ. 8.1-ზე ნაჩვენებია $\Psi(x)$ ფუნქციის გრაფიკი დროის რალაც მომენტში. მი-



ნახ. 8.1. ტალღა მოდულირებული ამპლიტუდით

ლებული რხევა წარმოადგენს პრაქტიკულად იგივე სიხშირისა და ტალღური რიცხვის მქონე ტალღას, მოდულირებული ამპლიტუდით. თუ დამკვირვებელი ტალღის გავრცელების გასწვრივ იმოძრავებს

$$V_x = \frac{\Delta \omega}{\Delta k}\tag{8.4}$$

სიჩქარით ნებისმიერი მიმართულებით, მაშინ დამკვირვებლისათვის მიიღება მოდულაციის უძრავი სურათი. ამ სურათს *ძგერის* სურთი ეწოდება, ხოლო

მოვლენას *ძგერის* მოვლენა. რა თქმა უნდა, ძგერის მოვლენა აღიძვრება არა მხოლოდ ერთგანზომილებიან, არამედ ორ და მეტ განზომილებიან რხევათა მსგავსი მეთოდით შეკრების შედეგადაც, მაგრამ მიღებული სურათი გაცილებით რთული ხასიათისაა და ძნელად წარმოსადგენია. ეს შედეგი ჯერ კიდევ განსხვავდება სივრცეში ლოკალიზებულ ნაწილაკზე არსებული წარმოდგენებისაგან. ტალღური პაკეტის სივრცეში ლოკალიზაციისათვის აუცილებელია არა ერთი სიხშირე და ტალღური რიცხვი, არამედ სიხშირეთა და ტალღურ რიცხვთა უწყვეტი განაწილება. მაშინ სიხშირე შეიძლება განვიხილოთ როგორც ტალღური რიცხვის ფუნქცია

$$\omega = \omega(\mathbf{k})\tag{8.5}$$

ე.წ. დისპერსიული თანაფარდობა. სწორედ ასეთი ფუნქციისათვის შემოდის *ჯგუფური სიჩქარის* ცნება

$$V_x = \frac{d\omega}{dk}\tag{8.6}$$

ჯგუფური სიჩქარე არის ნებისმიერი სიგნალის გავრცელების სიჩქარე. ასევე იგი აღწერს ენერგიის, მასის და სხვა ანალოგიური სიდიდეების გავრცელების სიჩქარეს. ჯგუფური სიჩქარე არასოდეს არ აღემატება ვაკუუმში სინათლის გავრცელების სიჩქარეს.

ტალღური პაკეტი (8.3) დამოკიდებულების შემთხვევაში წარმოადგენს მონოქრომატურული ტალღების უწყვეტი განაწილებიდან ინტეგრალს

$$\Psi(x, t) = \frac{1}{2\Delta k} \int_{k_0 - \Delta k}^{k_0 + \Delta k} A(k) e^{i(kx - \omega t)} dk. \quad (8.7)$$

სადაც $\Delta k \ll k_0$. (8.7) ფორმულაში გამოყენებულია ტალღის ექსპონენციალურად ჩანერის ფორმა და დამატებულია ასევე $1/(2\Delta k)$ ნორმირების კოეფიციენტი. საზოგადოდ A , ამპლიტუდა დამოკიდებულია ტალღურ რიცხვზე, მაგარამ მომავალში სიმარტივისათვის დაუშვებთ, რომ იგი მუდმივია და გავიტანთ ინტეგრების ნიშნის გარეთ.

განვიხილოთ სიხშირეთა უწყვეტი განაწილების შემთხვევაში რხევათა მოდულაცია და გავშალოთ იგი $\Delta k = k - k_0$ სიმცირის პარამეტრის მიხედვით

$$\omega(k) = \omega_0 + V_{r0} \cdot \Delta k + \dots, \quad (8.8)$$

სადაც

$$V_{r0} = \left(\frac{\partial \omega}{\partial k} \right)_{k=k_0}, \quad \omega_0 = \omega(k_0) \quad (8.9)$$

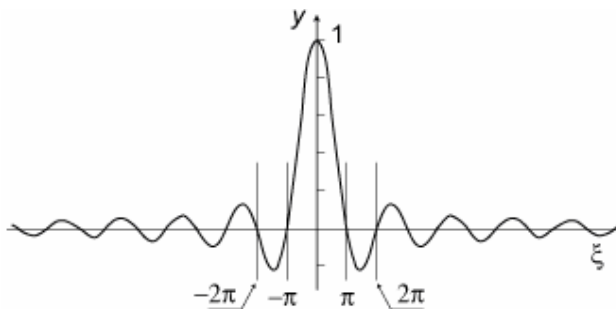
შევიტანოთ (8.9) და (8.8) (8.7)-ში და მოვახდინოთ ინტეგრება მივიღებთ

$$\begin{aligned} \Psi(x, t) &= \frac{A}{2\Delta k} \int_{-\Delta k}^{\Delta k} \exp[i(k_0 x - \omega_0 t)] \times \exp[i(x - V_{r0} t) \Delta k] d\Delta k = \\ &= \frac{A}{2\Delta k} \exp[i(k_0 x - \omega_0 t)] \int_{-\Delta k}^{\Delta k} \exp[i(x - V_{r0} t) \Delta k] d\Delta k = \\ &= A \frac{\sin[(x - V_{r0} t) \Delta k]}{(x - V_{r0} t) \Delta k} \exp[i(k_0 x - \omega_0 t)]. \end{aligned} \quad (8.10)$$

მივიღეთ ისევ ბრტყელი ტალღის გამოსახულება, ოღონდ ამჯერად მოდულაცია განხორციელებულია ფუნქციით

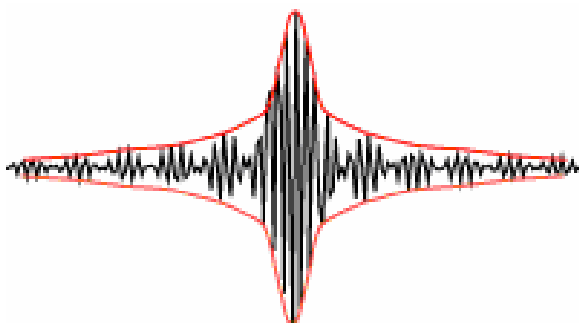
$$f(\xi) = \frac{\sin \xi}{\xi}, \quad \xi = (x - V_{r0} t) \Delta k, \quad (8.11)$$

ნახ. (8.2)-ზე მოცემულია (8.11) ფუნქციის გრაფიკი. ეს ფუნქცია ხასიათდება შემდეგი თვისებებით: $f(\xi)$ ფუნქცია თავის მაქსიმალურ მნიშვნელობას აღწევს სათავეში $f(0) = 1$. გარდა ამისა, მსგავსად სინუსისა ამ ფუნქციას გააჩნია ფესვების უსასრულო რა-



ნახ. 8.2. $y = \sin(\xi)/\xi$ ფუნქციის გრაფიკი

ოდენობა $f(\xi) = 0$ როცა $\xi = \pm \pi n$ $n = 1, 2, \dots$ დაბოლოს, ნულებს შორის ინტერვალში $\xi = \pi/2 \pm \pi n$, $n = 1, 2, \dots$ ნერტილებში ფუნქციის მოდულს გააჩნია ლოკალური ექსტრემუმები, რომელთა სიმალეც ξ -ის უკუპროპორციულად მცირდება. ნახ. 8.3-ზე ნაჩვენებია (8.11) მოდულირებული ტალღური პაკეტი. იგი პრაქტიკულად პირველ მაქსიმუმშია ლოკალიზებული. ნახაზზე ძირითადი რხევები შეესაბამება და სიხშირით რხევას. მას შეესაბამება $V_{\text{ფ}} \approx \frac{\omega_0}{k_0}$ ფაზური სიჩქარე. მომვლები მრუდი კი გადაადგილდება სივრცეში (8.9) ფორმულით გამოსახული ჯგუფური სიჩქარით.



ნახ. 8.3. მოდულირებული ტალღური პაკეტი

ნაწილაკი როგორც ტალღური პაკეტი

ამრიგად, ზემოთქმულიდან გამომდინარე, ნაწილაკის მოძრაობა სივრცეში შეგვიძლია გავაიგივოთ სივრცეში ტალღური პაკეტის გავრცელებასთან. განვიხილოთ ელექტრონი და გამოვითვალოთ მისი შესაბამისი ტალღური პაკეტის მახასიათებელი სიდიდეები. კერძოდ, ელექტრონს შევუსაბამოთ ტალღური პაკეტი, რომლის სიხშირეც ელექტრონის დე-ბროილის ტალღის სიგრძით გამოისახება. შედეგად ფაზური სიჩქარისთვის მივიღებთ

$$V_{\text{ფ}} = \frac{\omega}{k} = \frac{\hbar\omega}{\hbar k} = \frac{E}{p} = \frac{\gamma m_e c^2}{\gamma m_e v} = \frac{c^2}{v} \geq c \quad (8.12)$$

აქედან ჩანს, რომ ფაზურ სიჩქარეს არა აქვს არანაირი კავშირი ნაწილაკის მოძრაობის სიჩქარესთან. ტალღური პაკეტის ჯგუფური სიჩქარისთვის კი გვექნება

$$V_{\text{გ}} = \frac{d\omega}{dk} = \frac{d\hbar\omega}{d\hbar k} = \frac{dE}{dp} = \frac{Ev}{pc^2} \frac{dE}{dp} = \frac{v}{c^2} \frac{d(E^2)}{d(p^2)} = \frac{v}{c^2} \frac{d(p^2 c^2 + m^2 c^4)}{d(p^2)} = v \quad (8.13)$$

(გამოყვანისას ვისარგებლეთ $E = pc^2/v$ თანაფარდობით, რაც ნაწილაკის ენერგიასა და იმპულსს შორის არსებული რელატივისტური თანაფარდობებიდან გამომდინა-

რეობს). ამრიგად მივიღეთ, რომ ნანილაკის მოძრაობის სიჩქარე უდრის ტალღური პაკეტის მოძვლების გავრცელების სიჩქარეს, ანუ ე.წ. ჯგუფურ სიჩქარეს.

ტალღური პაკეტის განშლადობა

ტალღური პაკეტის სიხშირესა და ტალღურ რიცხვს შორის ნრფივი დამოკიდებულების შემთხვევაში ფაზური და ჯგუფური სიჩქარეები ერთმანეთს ემთხვევა. მაგალითად, ვაკუუმში ელექტრომაგნიტური ტალღისთვის დისპერსიული თანაფადობა აღინერება $\omega = kc$ კანონით. ამიტომ $V_{ფ} = V_{გ} = c$. მაგრამ ტალღის რაიმე გარემოში გავრცელების შემთხვევაში სიხშირესა და ტალღურ ვექტორს შორის კავშირი შეიძლება ნრფივი აღარ აღმოჩნდეს. ასეთ შემთხვევაში იტყვიან, რომ გარემო ხასიათდება გარკვეული დისპერსიით. $\omega(k)$ არანრფივი დამოკიდებულების შემთხვევაში ფაზური და ჯგუფური სიჩქარეები ერთმანეთისგან განსხვავდებიან.

რამდენადაც ტალღური პაკეტი შედგება სხვადასხვა ფაზურ სიჩქარის მქონე ტალღებისაგან, დროთა განმავლობაში ასეთი ტალღური პაკეტი უნდა „გაიშალოს“, ანუ განერთხას მთელს სივრცეში. დრო, რომლის განმავლობაშიც ეს პროცესი მოხდება შეიძლება შევაფასოთ შემდეგი მოსაზრებიდან: თუ (6.6) გაშლაში მეორე რიგის წევრებსაც გავითვალისწინებთ, მივიღებთ

$$\omega(k) = \omega_0 + v_{r0} \cdot \Delta k + \frac{(\Delta k)^2}{2} \frac{d^2 \omega}{dk^2} + \dots \quad (8.14)$$

მაშინ (8.7) ფორმულის ექსპონენტის მაჩვენებლისთვის გვექნება

$$kx - \omega t = k_0 x - \omega_0 t + \underbrace{\Delta k \cdot (x - v_{r0} t)}_{\xi} + \delta \cdot t, \quad (8.15)$$

სადაც

$$\delta = \frac{(\Delta k)^2}{2} \frac{d^2 \omega}{dk^2}. \quad (8.16)$$

ეს უკანასკნელი ფაზის დამატებით ნაზრდს იძლევა. ვიტყვი, რომ ტალღურმა პაკეტმა τ დროის განმავლობაში განიცადა საგრძნობი განშლადობა, თუ $\delta \cdot \tau \sim \pi$. აქედან შეიძლება შევაფასოთ ტალღური პაკეტის განშლადობის დრო

$$\tau \sim \frac{\pi}{\delta} \sim \frac{\pi}{(\Delta k)^2 \left(\frac{d^2 \omega}{dk^2} \right)} \sim \frac{(\Delta x)^2}{\left(\frac{d^2 \omega}{dk^2} \right)}. \quad (8.17)$$

დისპერსიის ნრფივი კანონის შემთხვევაში (8.14) ფორმულაში ბოლო წევრი არ გვაქვს და ამიტომაც ტალღური პაკეტის განშლადობას ადგილი არ აქვს, ისე როგორც მაგალითად, ვაკუუმში გავრცელებული ფოტონის შემთხვევაში. განვიხილოთ M მასის არარელატივისტური ნანილაკი. მაშინ გვექნება

$$\frac{d^2\omega}{dk^2} = \hbar \frac{d^2(\hbar\omega)}{d(\hbar k)^2} = \hbar \frac{d^2 E}{dp^2} = \frac{\hbar}{M}. \quad (8.18)$$

შესაბამისად ტალღური პაკეტის განშლადობის დროისათვის მივიღებთ

$$\tau \sim \frac{(\Delta x)^2 M}{\hbar}. \quad (8.19)$$

კლასიკურ ზღვარში, როდესაც $\hbar \rightarrow 0$ განშლადობის მოვლენა არ დაიმზირება. მაგალითისთვის განვიხილოთ $M = 1$ გრ მასისა და $\Delta x \sim 1$ სმ ზომის სხეული. მისთვის (8.19) ფორმულით მივიღებთ $\tau \sim 10^{18}$ წელს. ეს სიდიდე სამყაროს ასაკზე გაცილებით მეტია. ამრიგად მაკროსამყაროს ობიექტები თავიანთი არსებობის მანძილზე ვერ ასწრებენ „განშლადობას“. თუ იგივე (8.19) გამოსახულებას გამოვიყენებთ ელექტრონისთვის დროის წამებში, ხოლო მანძილის სანტიმეტრებში გაზომვის შემთხვევაში (8.19) გამოსახულება მიიღებს სახეს $\tau_e \sim (\Delta x)^2$. ელექტრონის ტიპური კლასიკური რადიუსისათვის ($2,818 \cdot 10^{-13}$ სმ) მივიღებთ $\tau_e \sim r_e^2 \sim \tau \sim 10^{-26}$ წმ. ანუ ელექტრონი პრაქტიკულად მყისიერად „ჩნდება“ სხვა ადგილას. ელექტრონის კლასიკური რადიუსი სიდიდით ახლოს არის ბირთვის ზომებთან. აქედან ნათელია თუ რატომ არ შეიძლება ატომბირთვში ელექტრონის არსებობა. რაც შეეხება ატომურ ელექტრონს იგი ლოკალიზებულია $\Delta x \sim a_0 \sim 10^{-8}$ სმ არეში, საიდანაც „განშლადობის“ დროისთვის 10^{-16} წმ-ს მივიღებთ. ეს დრო კი შესაძარია ელექტრონის ბირთვის გარშემო ორბიტაზე მიმოქცევის პერიოდთან.

ჩვენ განვიხილეთ ელექტრონის მოძრაობა მიკროსკოპულ მასშტაბებში. ახლა განვიხილოთ ელექტრონის მაკროსკოპიულ მასშტაბებში მოძრაობის მაგალითი. ვთქვათ ელექტრონულ-სხივურ მილაკში ამაჩქარებელ პოტენციალთა სხვაობა 20 კილოვოლტია. ასეთ ველში ელექტრონი შეიძენს დაახლოებით 10^{10} სმ/წმ სიჩქარეს. თუ ეკრანზე გამოსახულების სიმკვეთრის მახასიათებლად მივიჩნევთ $\Delta x \sim 0.1$ მმ-ს და ტალღური პაკეტის ზომას ამ სიდიდეს შევუსაბამებთ, მაშინ ტალღური პაკეტის „განშლადობის“ დროისათვის მივიღებთ 10^{-4} წმ-ს. ამ დროის განმავლობაში ელექტრონი გაივლის დაახლოებით 10 კმ მანძილს. ეს მანძილი კი გაცილებით აღემატება ელექტრონულ-სხივური მილაკის გეომეტრიულ ზომებს.

ამრიგად, ტალღური პაკეტის განშლადობა მნიშვნელოვანია მიკრომასშტაბებში მოძრავი მიკრონანილაკებისათვის, ანუ იქ სადაც კლასიკური მექანიკის კანონები არ მოქმედებს.

დოპლერის გაგანიერება

როგორც ცნობილია ელექტრომაგნიტური გამოსხივება ხასიათდება \mathbf{k} ტალღური ვექტორისა და ω სიხშირის საშუალებით, ხოლო შესაბამისი ბრტყელი ტალღა კი მოიცემა ფორმულით

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \psi_0 \exp[i(\mathbf{k}\mathbf{r} - \omega t)], \quad (8.20)$$

სადაც Ψ – ნებისმიერი სიდიდეა, რომელიც მონაწილეებს ტალღურ მოძრაობაში, ხოლო Ψ_0 – მისი ამპლიტუდაა.

შევეცადოთ ახლა გადავიდეთ ტალღური პროცესის კვანთურ აღწერაზე, ანუ დავწეროთ ფორმულა, რომელიც აღწერს ობიექტის როგორც ტალღურ, ასევე კორპუსკულურ მახასიათებლებს. პლანკისა და აინშტაინის თანახმად კვანტის ენერგია და სიხშირეს შორის არის შემდეგი კავშირი

$$E = \hbar \omega, \tag{8.21}$$

ხოლო იმპულსსა და ტალღურ ვექტორს შორის კი სამართლიანია თანაფარდობა

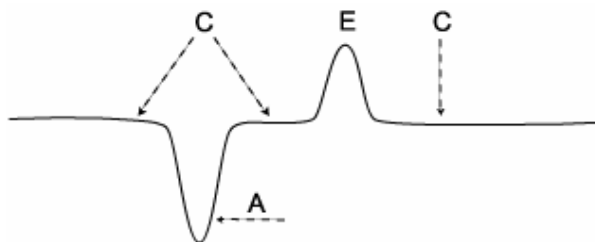
$$\mathbf{p} = \hbar \mathbf{k} . \tag{8.22}$$

შედეგად (8.20) ფორმულის კორპუსკულარული ინტერპრეტაცია ასე გამოიყურება

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \psi_0 \exp \left[\frac{i}{\hbar} (\mathbf{p}\mathbf{r} - Et) \right] \tag{8.21}$$

(8.21) ფორმულა გამოხატავს კორპუსკულურ-ტალღური დუალიზმის არსს: ტალღის აღმწერ გამოსახულებაში პარამეტრების სახით შედიან ნაწილაკის ენერგია და იმპულსი.

(8.20) ფორმულა აღწერს მონოქრომატურლ გამოსხივებას, ანუ შემთხვევას, როდესაც გამოსხივება ხასიათდება მკაცრად განსაზღვრული ერთი სიხშირითა და ტალღის სიგრძით. ასეთი გამოსხივების მაგალითად გამოდგება იდეალიზირებული წარმოდგენა სპექტრალური გამოსხივების ხაზებზე – გადასვლა ატომის დისკრეტულ დონეებს შორის. სინამდვილეში სპექტრალურ ხაზებს გააჩნიათ გარკვეული სიგანე, ანუ შეიცავენ ბევრ სიხშირეებს. ასეთ მოვლენას ეწოდება *სპექტრალური ხაზების გაგანიერება*. არსებობს ამ გაგანიერების ბევრი მიზეზი. ჩვენ განვიხილავთ ერთ-ერთ მათგანს – ატომების სითბურ მოძრაობას.



ნახ. 8.4. C – „კონტინუმი“, A – „აბსორბციული“ ხაზი E – „ემისიური“ ხაზი

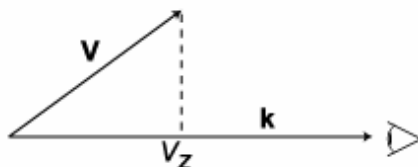
სპექტრალური ხაზების ნანაცვლების ამოცანა, როგორც წესი, ყალიბდება სპექტრის შედარებით ვიწრო უბნებისათვის, რომლებიც გამოიყოფიან ნაკადის ლოკალური გაძლიერების ან შესუსტების შედეგად (იხილეთ ნახ.8.4). სპექტრის უმეტესი ნაწილი სიხშირის ცვლილების მიმართ სუსტად იცვლება და მას „უწყვეტ სპექტრს“

ანუ „კონტინიუმს“ უწოდებენ. იმ არეს სადაც ნაკადი მკვეთრად სუსტდება „შთანთქმის“ ხაზი ანუ „აბსორბციული“ ხაზი ეწოდება, ხოლო შესაბამისად ნაკადის გაძლიერების არეს „ემისიური“ ხაზი ეწოდება.

ნაკადში ფოტონების ტალღის სიგრძეების ანდა სიხშირეების მიხედვით განაწილების ფუნქციას სპექტრალური ხაზების „პროფილი“ ანუ „კონტური“ ეწოდება. ყოველი პროფილი ხასიათდება რამოდენიმე პარამეტრით. მაგალითად, ხაზის ცენტრალური ω_0 (λ_0) სიხშირით (ტალღის სიგრძით) და ასევე პროფილის სიგანით.

ნახაზ 8.5-ზე სქემატურად გამოსახულია ატომი, რომელიც ასხივებს დამკვირვებლის მიმართ მოძრაობის პროცესში. მოძრავი წყაროს მიერ გამოსხივებული სინათლის ω სიხშირე უდრის

$$\omega = \omega_0 \left(1 + \frac{V_z}{c} \right). \quad (8.22)$$



ნახ. 8.5. სინათლის წყაროს მოძრაობა დამკვირვებლის მიმართ

სადაც ω_0 – უძრავი წყაროს მიერ გამოსხივებული სინათლის სიხშირეა, ხოლო V_z – წყაროს მოძრაობის სიჩქარის პროექციაა დაკვირვების ღერძზე. თუ წყარო უახლოვდება დამკვირვებელს პროექცია დადებითია.

განვიხილოთ ატომების მოუწესრიგებელი მოძრაობა და dP -თი აღვნიშნოთ ალბათობა იმისა, რომ ატომის სიჩქარის პროექცია აღმოჩნდება V_z , $V_z + dV_z$ დიაპაზონში. დავუშვათ, რომ V_z სიდიდე აკმაყოფილების მაქსიმალური განაწილებას

$$dP = \sqrt{\frac{M}{2\pi T}} \exp\left(-\frac{M V_z^2}{2T}\right) dV_z, \quad (8.23)$$

სადაც M – ატომის მასაა, T – გაზის ტემპერატურა. ტოლობის მარჯვენა მხარე ერთზეა ნორმირებული. ამაში ადვილად დარწმუნდებით თუ გამოვიყენებთ ცხრილის

ინტეგრალს $\int_0^\infty \exp(-\alpha x^2) dx = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}$ თუ შემოვიტანთ $\Delta\omega = \omega - \omega_0$ სიდიდეს (8.22) ფორ-

მულიდან მივიღებთ

$$V_z = \frac{c}{\omega_0} \Delta\omega. \quad (8.24)$$

ამრიგად, სპექტრალური ხაზების პროფილი შეიძლება გამოისახოს როგორც სიხშირეთა, ასევე სიჩქარეთა სკალაზე

$$dP = a_\omega d\omega = f(V_z) dV_z, \quad (8.25)$$

ამასთან ორივე ფუნქცია ერთზეა ნორმირებული

$$\int f(v_z)dv_z = \int a(\omega)d\omega = 1. \quad (8.26)$$

შემოვიტანოთ ე.წ. სიჩქარის სითბური მასშტაბი $v_0 = \sqrt{2T/M}$ და ე.წ. დოპლერის ნახევარსიგანე $\Delta\omega_D = \omega_0 \sqrt{2T/Mc^2}$. მათი გამოყენებით ატომთა განაწილების $f(v_z)$ ფუნქცია და ხაზის პროფილი $a(\omega)$ შემდეგნაირად ჩაინერება

$$\begin{aligned} f(x)dx &= \frac{1}{\sqrt{\pi}} \exp(-x^2) dx \\ a_\omega(y)dy &= \frac{1}{\sqrt{\pi}} \exp(-y^2) dy \end{aligned} \quad (8.27)$$

სადაც $x = v_z/v_0$, $y = \Delta\omega/\Delta\omega_D$. $\Delta\omega_D$ -ს ხაზის ცენტრიდან გადახრას შეესაბამება a_ω -ს $e = 2.718...$ ჯერ შემცირება.

დოპლერის პროფილის გარდა არსებობს სპექტრალური ხაზების სასრული სიგანის არსებობის სხვა მიზეზებიც. როგორც წესი ისინი განპირობებული არიან ატომთა ურთიერთქმედებებით მათ გარემომცველ ნაწილაკებთან – იონებთან, ელექტრონებთან, მოლეკულებთან და ატომებთან.

გრავიტაციული წითელი ნანაცვლება

აინშტაინის ფორმულის თანახმად ფოტონს შეიძლება მივანიჭოთ მასა $m_f = \hbar\omega/c^2$. ფოტონისთვის მასის მინიჭება ნიშნავს, რომ ამ მასამ თავი უნდა გამოავლინოს გრავიტაციულ ურთიერთქმედებაში. ამიტომ ვარსკვლავის ზედაპირზე ფოტონის პოტენციური ენერგია იქნება

$$U_0 = -G \frac{Mm_f}{R} = -G \frac{M\hbar\omega}{Rc^2}, \quad (8.28)$$

სადაც M და R – შესაბამისად ვარსკვლავის მასა და რადიუსია. ვარსკვლავიდან შორ მანძილზე ფოტონის პოტენციური ენერგია ნულის ტოლია და ენერგიის შენახვის კანონიდან ვღებულობთ

$$\hbar\omega_0 - G \frac{M\hbar\omega_0}{Rc^2} = \hbar\omega. \quad (8.29)$$

აქედან კი მიიღება გრავიტაციული წითელი ნანაცვლება (ანუ ე.წ. ფოტონის ასაკი)

$$Z_g = \frac{\omega_0 - \omega}{\omega} = \frac{GM}{Rc^2}. \quad (8.30)$$

მაგალითად, მზისთვის Z_g სიდიდე $\approx 2 \cdot 10^{-6}$ რიგისაა. შევაფასოთ $\lambda = 5000 \text{ \AA}$ ტალღის სიგრძის გამოსხივების გრავიტაციული წანაცვლება. თუ გამოვიყენებთ ტოლობას

$$\left| \frac{\Delta \lambda}{\lambda} \right| = \left| \frac{\Delta \omega}{\omega} \right|, \quad (8.31)$$

რომელიც გამომდინარეობს $\lambda = 2\pi c/\omega$ თანაფარდობიდან მივიღებთ $\Delta \lambda \approx 5 \cdot 10^3 \cdot 2 \cdot 10^{-6} \text{ \AA} = 0.01 \text{ \AA}$. მზის ფოტოსფეროსათვის $T \sim 0.5 \text{ eV}$ ტემპერატურის დროს წყალბადის ატომისათვის დოპლერის ნახევარსიგანე უდრის

$$\frac{\Delta \omega_D}{\omega_0} \approx 3 \cdot 10^{-5}, \quad (8.32)$$

რაც დაახლოებით ხუთი რიგით მეტია, ვიდრე წითელი წანაცვლება. ამრიგად მზეზე ფოტონის „განთლება“ გადაფარულია სპექტრალური ხაზების დოპლერის გაგანიერების ეფექტით.

მაგრამ არსებობენ ისეთი ობიექტები, რომელთათვისაც გრავიტაციული წითელი წანაცვლება შეიძლება მნიშვნელოვანი აღმოჩნდეს. მაგალითად ე.წ. თეთრ ჯუჯა ვარსკვლავებში, რომელთა რადიუსიც მზის მასის ტოლ შემთხვევაში დაახლოებით ასჯერ ნაკლებია მზის რადიუსთან შედარებით. (6.29) ფორმულის თანახმად გრავიტაციული წანაცვლება პროპორციულია ვარსკვლავის მასისა და რადიუსის ფარდობის. ამიტომ Z_g სიდიდე $\approx 2 \cdot 10^{-4}$ რიგისაა, რაც შესადარია სპექტრალური ხაზების დოპლერის გაგანიერების სიდიდესთან.

აინშტაინმა Z_g -სთვის გამოიყვანა უფრო ზუსტი ფორმულა

$$Z_g = \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{2GM}{Rc^2}}} - 1, \quad (8.33)$$

რომლიდანაც როცა $GM / (Rc^2) \ll 1$ მიიღება უკვე ცნობილი შედეგი $Z_g \approx \frac{GM}{Rc^2}$.

$R_g = \frac{2GM}{c^2}$ სიდიდეს ეწოდება შვარცშილდის რადიუსი. თუ რაიმე ობიექტის რადიუსი ნაკლებია შვარცშილდის რადიუსზე, მაშინ ფოტონს არ შეუძლია ასეთი ობიექტიდან გამოსხივება. მაგალითად მზისთვის R_g სამი კილომეტრის ტოლია, ხოლო დედამიწისათვის ერთი სანტიმეტრის.

თავი 9

განუზღვრელობის თანაფარდობები

ჰაიზენბერგის მიერ ჩამოყალიბებული იქნა თანაფარდობები, რომელთაც ფუნდამენტური მნიშვნელობა აქვთ მიკროსამყაროში მიმდინარე ფიზიკური პროცესებში და ამავდროულად ხსნიან კვანტური თეორიის ბევრ წარმოსახვით პარადოქსს. ამ თანაფარდობების თანახმად, ატომურ მასშტაბებში აზრს კარგავს ნაწილაკის კლასიკური ტრაექტორიის ცნება. აზრი აქვს მხოლოდ შენახვად სიდიდეებს, როგორც არის მაგალითად, ნაწილაკის ენერგია, იმპულსი, იმპულსის მომენტი. კვანტურ მექანიკაში პირდაპირ განისაზღვრება ნაწილაკის ენერგიის შესაძლო მნიშვნელობები ყოველგვარი მოძრაობის ტრაექტორიის წინასწარი განსაზღვრის გარეშე.

კვანტურ-მექანიკური მიდგომა კლასიკურისგან განსხვავებით ხასიათდება ამოცანის ამოხსნის ტექნიკური მხარის მნიშვნელოვანი გართულებით. ამიტომ მიზანშეწონილია ატომური ფიზიკის ამა თუ იმ ასპექტების განხილვა კლასიკურ წარმოდგენებზე დაყრდნობით და ფიზიკურ სიდიდეთა რიგის შეფასებით დავინწყოთ.

კლასიკურიდან კვანტურ მექანიკაზე გადასვლა

თუ დავაკვირდებით მე-8 თავის ნახაზ. 8.2-ს დავინახავთ, რომ ტალღური პაკეტის ზომა ძირითადად ცენტრალური მაქსიმუმის სიგანით განისაზღვრება. ამიტომ შეგვიძლია დავწეროთ

$$\Delta k \Delta x \geq 2\pi. \quad (9.1)$$

უტოლობის ნიშანი იმაზე მიუთითებს, რომ ტალღური პაკეტის მცირედი ნაწილი ძირითადი მაქსიმუმის მიღმაც არსებობს. ახლა შევაფასოთ თუ რა დრო დასჭირდება ტალღურ პაკეტს მაგალითად, კოორდინატა სათავისთვის ჩასაველელად. როგორც (8.10) და (8.11) ფორმულებიდან ჩანს ტალღური ფუნქციის ხანგრძლივობა, ისევე როგორც მისი სივრცეში განფენილობა, განისაზღვრება ფაზის 2π სიდიდით ცვლილებით ანუ

$$\Delta \omega \Delta t \geq 2\pi. \quad (9.2)$$

მიღებული თანაფარდობები კარაგად არიან ცნობილნი რხევათა თეორიაში. მაგალითად, მონოქრომატული ტალღა (ანუ ტალღური პაკეტი, ტალღური ვექტორის ძალზედ ვიწრო ინტერვალით) სახიათდება სივრცეში ძალზედ ვრცელი განფენილობით. მეორე მხრივ ხანმოკლე იმპულსების ($\Delta t \rightarrow 0$) რეგისტრაციისათვის ფართო-ზოლოვანი მიმღების გამოყენებაა საჭიროა. იმისათვის, რომ განვსაზღვროთ ტალღის სიგრძე λ აუცილებელია, როგორც მინიმუმ, ტალღის ორი მეზობელი მაქსიმუმის დაფიქსირება. ამასთან λ -ს განსაზღვრის სიზუსტე მით უფრო მაღალი იქნება

($\Delta\lambda \rightarrow 0$, $\Delta k \rightarrow 0$), რაც უფრო მეტი მაქსიმუმების დაფიქსირებას შევძლებთ ($\Delta x \rightarrow \infty$). ანალოგიურად, მაგალითად ქანქარის რხევის სიხშირის განსასაზღვრავად გაზომვები უნდა ჩატარდეს მინიმუმ რხევის ერთი პერიოდის განმავლობაში. სიხშირის გაზომვის სიზუსტე მით უფრო მაღალი იქნება ($\Delta\omega \rightarrow 0$), რაც უფრო გავზრდით დაკვირვებადი პერიოდების რიცხვს ($\Delta t \rightarrow \infty$). თუ (9.1) და (9.2) ფორმულებს ორივე მხარეს გავამრავლებთ პლანკის მუდმივაზე და გამოვიყენებთ ფოტონისთვის (8.21) და (8.22) თანაფარდობებს მივიღებთ

$$\Delta p \cdot \Delta x > h, \tag{9.3a}$$

$$\Delta E \cdot \Delta t > h. \tag{9.3b}$$

(9.3) ტიპის თანაფარდობები შეიძლება ჩავწეროთ კოორდინატის თითოეული კომპონენტისთვის

$$\Delta p_x \cdot \Delta x \geq h,$$

$$\Delta p_y \cdot \Delta y \geq h, \tag{9.4}$$

$$\Delta p_z \cdot \Delta z \geq h.$$

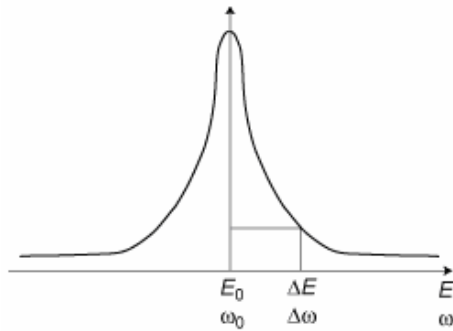
($h = \hbar/2\pi$). ენერგია-დროისა და იმპულსი-კოორდინატას „წყვილებს“ კანონიკურად შეუღლებული სიდიდეები ეწოდებათ. (9.4) თანაფარდობა გვეუბნება, რომ შეუძლებელია ერთდროულად განისაზღვროს ნაწილაკის იმპულსი და კოორდინატი. კერძოდ, თუ ჩვენ გავზომავთ ნაწილაკის კოორდინატას Δx სიზუსტით, მაშინ იმპულსის პროექცია სათანადო ღერძზე აუცილებლად მინიმუმ $\hbar/\Delta x$ სიდიდის ცვლილებას განიცდის. მართალია (9.3)-(9.4) თანაფარდობების მისაღებად ჩვენ გამოვიყენეთ ფოტონის, როგორც კორპუსკულური ნაწილაკის თვისებები, მაგრამ კორპუსკულურ ტალღური დუალიზმის გათვალისწინებით (9.3)-(9.4) თანაფარდობები სამართლიანი იქნება აგრეთვე ელექტრონისა და ზოგადად ყველა მიკონაწილაკისათვის, რომლებიც ლოკალიზებულნი არიან სივრცეში ატომურ (ანგსტრემის რიგის) მასშტაბებში და მათი მასა ატომის მასის შესადარია. კლასიკურ ზღვარში, როცა $h = \hbar/2\pi \rightarrow 0$ კანონიკურად შეუღლებულ „წყვილთა“ განსაზღვრისას ცდომილება შეგვიძლია რაგინდ მცირე სიდიდე გავხადოთ – განუზღვრელობის თანაფარდობები აღარ ადებენ არავითარ შეზღუდვას იმპულსისა და კოორდინატის ერთდროულად გაზომვის სიზუსტეს. ამდენად, შესაძლებელი ხდება ნაწილაკის ტრაექტორიის განსაზღვრა. კვანტურ ფიზიკაში კი ჩვენ იძულებულნი ვართ უარი ვთქვათ ნაწილაკის ტრაექტორიაზე და გადავიდეთ ნაწილაკის მოძრაობის ყოფაქცევის ალბათურ, ანუ სტატისტიკურ აღწერაზე.

სპექტრული ხაზების რადიაციული გაგანიერება

(9.3b) თანაფარდობა უმნიშვნელოვანეს როლს თამაშობს სპექტრული ხაზების სასრული სიგანის არსებობის საკითხში. იგი ერთმანეთთან აკავშირებს აღზნებულ მდგომარეობაში ატომის სიცოცხლის ხანგრძლივობასა და შესაბამისი ენერგეტიკუ-

ლი დონის სიგანეს, ანუ დონის ენერჯიის განუზღვრელობას. მიუხედავად იმისა, რომ გარეგნულად (9.3ა) და (9.3ბ) თანაფარდობები ძალიან წააგავს ერთმანეთს, მათ საკმაოდ განსხვავებული ფიზიკური შინაარსი აქვთ. (9.3ა) თანაფარდობა გვეუბნება, რომ შეუძლებელია ერთდროულიად მიკრონაწილაკის იმპულსისა და კოორდინატის ზუსტი მნიშვნელობების ცოდნა, ხოლო (9.3ბ) კი ეხება დროის სხვადასხვა მომენტებში გაზომილ ენერჯიის მნიშვნელობებს შორის განსხვავებას. იმისათვის, რომ ზუსტად განვსაზღვროთ რაიმე მდგომარეობის ენერჯია გაზომვები უსასრულოდ დიდი დროის განმავლობაში უნდა მიმდინარეობდეს. თუ τ ატომის სიცოცხლის ხანგრძლივობის მახასიათებელი დროა, მაშინ $\Delta E \sim h / \tau$ იქნება ის გარდაუვალი ცდომილება, რომელიც ატომის მოცემული მდგომარეობის შესაბამისი ენერჯიის განსაზღვრისას დაფიქსირდება.

თუმცა გაზომვის თითოეულ აქტში ენერჯიის ზუსტი მნიშვნელობა დაფიქსირდება. ΔE სიდიდეს სპექტრალური ხაზების ბუნებრივი, ანუ რადიაციული სიგანე ეწოდება. გაზომვების მრავალჯერადად გამეორების შემთხვევაში ჩვენ მივიღებთ ნახ. 9.1-ზე გამოსახულ ენერჯეტიკულ სპექტრს. მიღებული შედეგი სტატისტიკური აზრით უნდა გვესმოდეს. მაგალითად, თუ გვაქვს 1000 ალგზნებული ატომი 600 მათგანის ენერჯიას ცენტრალური მაქსიმუმის E_0 -ის სიახლოვეს აღმოვაჩინოთ, 100 ატომის ენერჯია $E_0 \pm \Delta E$ ნახევარსიგანის დიაპაზონში მოთავსდება, ხოლო 50 ატომში – ამ დიაპაზონის გარეთ. შესაძლებელია ასევე ერთი და იგივე ატომი მიმდევრობით მრავალჯერ ალვაგზნოთ. მაშინ საუბარი იქნება იმ ცდების რიცხვზე, რომლებშიც დაფიქსირდებიან ენერჯიის ესა თუ ის მნიშვნელობები (ამ შემთხვევაში გასათვალისწინებელია სპექტრალური ხაზების კონტურის ფარგლებში ამ ენერჯიების სიხშირეთა მიხედვით გადანაწილება). რამდენადაც ძირითად მდგომარეობაში მყოფი ატომის სიცოცხლის ხანგრძლივობა პრაქტიკულად უსასრულოა, ამიტომ შესაბამისი დონის სიგანე ნულის ტოლია.



ნახ. 9.1. სპექტრული ხაზების რადიაციული გაგანიერება

ნაწილაკი და ტალღა – როგორც ობიექტის ორი ზღვრული შემთხვევა

განუზღვრელობის თანაფარდობები გვაიძულებენ „შევეგუოთ“ ერთი მხრივ ნაწილაკის ტალღური და მეორე მხრივ გამოსხივების კორპუსკულური ბუნების არსებობის ფაქტებს. თუ ჩვენ ზუსტად გავზომეთ ნაწილაკის იმპულსი მაშასადამე ზუსტად გვეცოდნია ნაწილაკის შესაბამისი დე-ბროილის ტალღის სიგრძეც. მაგრამ ამ შემთხვევაში არაფერია ცნობილი ნაწილაკის კოორდინატის შესახებ. ასეთ სურათს ადგილი აქვს მონოქრომატული ტალღის შემთხვევაში. პირიქით, თუ ჩვენ მოვახ-

დენტ ობიექტის მკაცრად ლოკალიზებას სივრცეში ამით უსასრულოდ დიდ ცდომილებას შევიტანთ მისი იმპულსის განსაზღვრაში, ანუ დავეკარგავთ ყოველგვარ ინფორმაციას ნაწილაკის დე-ბროილის ტალღის სიგრძის შესახებ. ქვემოთ მოყვანილი ცხრილი ობიექტის ტალღური და კორპუსკულური წარმოდგენის გააზრებას გაგვიმარტივებს. ატომური ელექტრონისათვის მისი სივრცითი ლოკალიზაციის სიზუსტე $a_0 = 0.5 \cdot 10^{-8}$ სმ ბორის რადიუსით განისაზღვრება. განუზღვრელობის თანაფარდობიდან შევაფასებთ ატომში ელექტრონის სიჩქარეს

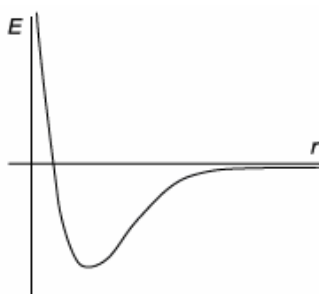
$\Delta p \rightarrow 0$ λ – ზუსტი	$\Delta x \rightarrow \infty$ x – განუსაზღვრელი	ტალღა
$\Delta x \rightarrow 0$ ლოკალიზებული	$\Delta p \rightarrow \infty$ λ – განუსაზღვრელი	კორპუსკულა

$$\Delta V \sim \frac{h}{m_e a_0} \sim 10^8 \text{ სმ/წმ.}$$

აქედან გამომდინარეობს, რომ ატომში ელექტრონი ძირითად მდგომარეობაშიც კი არ არის უძრავი. მისი სიჩქარე იმავე რიგისაა, რაც ბორის პირველ ორბიტაზე ელექტრონის მოძრაობის სიჩქარე $V_0 = 2.1877 \cdot 10^8$ სმ/წმ.

ატომის მდგრადობის საკითხი

განუზღვრელობის თანაფარდობის დახმარებით შეიძლება აიხსნას ატომის მდგრადობის საკითხი და შეფასდეს ძირითად მდგომარეობაში მისი ენერგია. განვიხილოთ Ze ბირთვის მუხტის მქონე წყალბადისმაგვარ იონში ელექტრონის წრიულ ორბიტაზე თანაბარი მოძრაობა. მაშინ მისი კინეტიკური ენერგია იქნება



ნახ. 9.2 ატომში ელექტრონის სრული ენერგია

$$T = \frac{p^2}{2m_e}, \quad (9.5)$$

ხოლო ბირთვის ველში მოძრაობის პოტენციური ენერგია

$$U = -\frac{Ze^2}{r}. \quad (9.6)$$

ელექტრონის სრული ენერგია იქნება

$$E = T + U = \frac{p^2}{2m_e} - \frac{Ze^2}{r}. \quad (9.7)$$

თუ Δr -ით აღვნიშნავთ ელექტრონის ატომში ელექტრონის მოძრაობის მახასიათებელ არეს, ხოლო Δp -თი ატომში ელექტრონის საშუალო იმპულსს, მაშინ პირველ მიახლოებაში გვექნება

$$\Delta r \sim r, \Delta p \sim p.$$

თუ ამ შეფასებებს შევიტნთ (9.3ა) განუზღვრელობის თანაფარდობაში მივიღებთ

$$pr \sim \hbar.$$

აქედან გამომდინარეობის სრული ენერგიის როგორც r -ის ფუნქციის ფორმულა

$$E \sim \frac{\hbar^2}{2m_e r^2} - \frac{Ze^2}{r}. \quad (9.8)$$

როგორც ნახაზ 9.2-დან ჩანს ამ ფუნქციას აქვს მინიმუმი. ბირთვიდან შორ მანძილებზე სრული ენერგია თითქმის პოტენციური ენერგიის ტოლია, იგი უარყოფითია და ფუნქციის გრაფიკის ყოფაქცევა $1/r$ კანონით ხასიათდება. ცენტრთან ახლოს კი პირიქით, დომინირებს წმინდა კვანტური წარმოშობის კინეტიკური ენერგია. იგი დადებითია და განუზღვრელობის თანაფარდობის თანახმად ბირთვიდან მანძილის შემცირებათან ერთად $1/r^2$ კანონით იზრდება. (9.8) გამოსახულების r -ის მიხედვით ექსტრემუმის პირობა გვაძლევს

$$\frac{dE}{dr} \sim -\frac{\hbar^2}{m_e r^3} + \frac{Ze^2}{r^2} = 0. \quad (9.9)$$

საიდანაც წყალბადისმაგვარი იონის რადიუსის შეფასებისთვის მიიღება

$$r_{\min} = \frac{1}{Z} \frac{\hbar^2}{m_e e^2} = \frac{a_0}{Z}. \quad (9.10)$$

თუ მიღებულ გამოსახულებას შევიტანთ (7.8) ფორმულაში მივიღებთ ელექტრონის ენერგიის მნიშვნელობის შეფასებას

$$E = -\frac{m_e^2 Z^2 e^4}{2\hbar^2}. \quad (9.11)$$

მიღებული გამოსახულება ზუსტად დაემთხვა წყალბადისმაგვარ იონში ელექტრონის ძირითადი დონის ენერგიის კვანტურ-მექანიკური მიდგომით მიღებულ მნიშვნელობას. ამის მიზეზი კულონური პოტენციალის ე.წ. „ფარული სიმეტრიაა“, რომელიც არ გააჩნიათ სხვა ცენტრალური სიმეტრიის მქონე პოტენციალებს. მაგალითად, ოსცილატორის პოტენციალისთვის ვერ მივიღებთ ზუსტ კვანტურ-მექანიკური მიდგომით მიღებულ შედეგს. ჩვენი მიზანი იყო გვეჩვენებინა, თუ როგორ შეიძლება განუზღვრელობის თანაფარდობებზე დაყრდნობით ატომის მდგრადობის საკითხის ახსნა.

თავი 10

კვანტური მექანიკის ელემენტები

ატომური ფიზიკის ამოცანები კლასიკური მექანიკის მიდგომებისგან პრინციპულად განსხვავებული კვანტური მექანიკის მეთოდების გამოყენებით იხსნება. როგორც ცნობილია, მაკროსკოპული სხეულის მოძრაობის აღწერა ნიუტონის მეორე კანონზე დაყრდნობით ხორცილედება. კერძოდ, თუ ცნობილია სხეულზე მოქმედი ძალები ჩვენ შეგვიძლია ვიპოვოთ ამ სხეულის აჩქარება, ხოლო შემდგომ განვსაზღვროთ სხეულის მოძრაობის ტრაექტორია და მოძრაობის მახასიათებელი სხვა ფიზიკური სიდიდეები. ატომურ მასშტაბებში ნაწილაკის ტრაექტორიის ცნება აზრს კარგავს. თავის მნიშვნელობებს ინარჩუნებენ მხოლოდ მოძრაობის ინტეგრალები, როგორებიც არიან ენერგია, იმპულსი, იმპულსის მომენტი და ლუნობა. კვანტურ მექანიკაში ეს სიდიდეები განისაზღვრებიან ყოველგვარი ტრაექტორიის ცნების შემოტანის გარეშე. გამოთვლებს საფუძვლად უდევს შრედინგერის განტოლება, რომელიც კვანტურ მექანიკაში კლასიკური ნიუტონის მეორე კანონის „ანალოგიაა“. შრედინგერის განტოლების ამოხსნით ვღებულობთ მოცემულ პოტენციურ ველში მოძრავი ნაწილაკის ენერგეტიკულ დონეებს (ე.წ. ენერგეტიკულ სპექტრს) და ასევე ვღებულობთ სტატისტიკური ხასიათის ინფორმაციას სივრცის მოცემულ ნერტილში ნაწილაკის შესაძლო მდებარეობის შესახებ.

შრედინგერის განტოლება

შრედინგერის განტოლების მათემატიკურად მკაცრი გამოყვანა შეუძლებელია. ამ განტოლების მიღება ექპერიმენტული ფაქტების ანალიზის შედეგია. ატომურ მასშტაბებში შრედინგერის განტოლება ნაწილაკის ტალღური ბუნების აღმწერი განტოლებაა. ვაჩვენოთ თუ როგორ შეიძლება დაუკავშიროთ ერთმანეთს ჩვენ მიერ მე-8 თავში განხილული ტალღური პაკეტი და შრედინგერის განტოლება. ამისათვის ჩავწეროთ ტალღური პაკეტის განტოლება

$$\Psi(x,t) = \int_{-\Delta k}^{\Delta k} B \cdot \exp[i(kx - \omega t)] dk, \quad (10.1)$$

სადაც B (ამპლიტუდაა. ჩავთვალოთ რომ B ამპლიტუდა ყველგან სადაც $k < -\Delta k$ და $k > \Delta k$ ნულის ტოლია, მაშინ ინტეგრაცია შეიძლება გავავრცელოთ მთელს რიცხვით ღერძზე. თუ გამოვიყენებთ მე-8 თავის (8.21) და (8.22) ფორმულებს მივიღებთ

$$\Psi(x,t) = \int A \cdot \exp\left[\frac{i}{\hbar}(px - Et)\right] dp, \quad (10.2)$$

სადაც $A = B/\hbar$. მიღებული ფორმულის დროით დიფერენცირების შედეგად მივიღებთ

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \int E(p) \cdot A \cdot \exp\left[\frac{i}{\hbar}(px - Et)\right] dp. \quad (10.3)$$

ინტეგრალქვეშა ფუნქციაში ენერჯიის გაჩენას შეესაბამება დიფერენცირების ოპერატორი

$$E \rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t}. \quad (10.4)$$

ამ ოპერატორს ეწოდება *ენერჯიის* ოპერატორი. ანალოგიურად (10.2) გამოსახულების x კოორდინატით დიფერენცირების შედეგად მიიღება

$$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \Psi}{\partial x} = \int p \cdot A \cdot \exp\left[\frac{i}{\hbar}(px - Et)\right] dp, \quad (10.5)$$

ე.წ. *იმპულსის* ოპერატორი

$$p \rightarrow -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}. \quad (10.6)$$

ჩვენ განვიხილავთ გარე ველის არარსებობისას არარელატივისტურ ნაწილაკს ენერჯიით $p^2/2m$. ამ სიდიდეს შეესაბამება კოორდინატით ორჯერადი დიფერენცირების ოპერატორი

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = \int \frac{p^2}{2m} \cdot A \cdot \exp\left[\frac{i}{\hbar}(px - Et)\right] dp, \quad (10.7)$$

საიდანაც

$$T = \frac{p^2}{2m} \rightarrow \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2}. \quad (10.8)$$

თუ ახლა (10.3) და (10.5) ფორმულების მარჯვენა და მარცხენა მხარეებს სათანადოდ ერთმანეთს გამოვაკლებთ მივიღებთ

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = \int A \left(E - \frac{p^2}{2m} \right) \cdot \exp\left[\frac{i}{\hbar}(px - Et)\right] dp. \quad (10.9)$$

ამ გამოსახულების მარჯვენა მხარეს მდგომი წევრი $E = p^2/2m$ ტოლობის გამო ნულის ტოლია. ამიტომ

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2}. \quad (10.10)$$

მივიღეთ თავისუფალი ნაწილაკის შრედინგერის სტაციონალური მდგომარეობის განტოლება ერთგანზომილებიან შემთხვევაში. თუ ახლა გავითვალისწინებთ გარეშე პოტენციალური ველის არსებობას

$$E = \frac{\hbar^2}{2m} + U, \quad (10.11)$$

სადაც $U = U(x, t)$ პოტენციური ენერგიაა. შესაბამისად ვღებულობთ შრედინგერის განტოლებას

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + U\Psi. \quad (10.12)$$

შრედინგერის განტოლების განზოგადება სამგანზომილებიანი მოძრაობისათვის დაიყვანება ლაპლასის ოპერატორით X კოორდინატით განარმოების ჩანაცვლებაზე

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} \rightarrow \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} = \Delta. \quad (10.13)$$

რის შემდეგაც შრედინგერის განტოლება მიიღებს სახეს

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi + U(\mathbf{r}, t)\Psi. \quad (10.14)$$

სამგანზომილებიან შემთხვევაში იმპულსის ვექტორს შეესაბამება

$$\nabla = \mathbf{e}_x \frac{\partial}{\partial x} + \mathbf{e}_y \frac{\partial}{\partial y} + \mathbf{e}_z \frac{\partial}{\partial z}, \quad (10.15)$$

გრადიენტის ოპერატორი, სადაც $\mathbf{e}_x, \mathbf{e}_y, \mathbf{e}_z$ წარმოადგენენ სათანადო საკოორდინატო ღერძების გასწვრივ ერთეულოვან ვექტორებს (ორტებს).

კვანტური მექანიკის ძირითადი პოსტულატის თანახმად კავშირი ფიზიკური სიდიდეების შესაბამის ოპერატორებს შორის ისეთივეა, როგორც თვით ამ ფიზიკურ სიდიდეებს შორის კლასიკურ მექანიკაში. ამიტომ

$$\left\{ \begin{array}{l} \hat{E} \rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t}, \\ \hat{\mathbf{p}} \rightarrow \frac{\hbar}{i} \nabla, \\ \hat{T} = \frac{\hat{P}^2}{2m} \rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta. \end{array} \right. \quad (10.16)$$

ნაწილაკის სრული ენერგიის ოპერატორი, ანუ ჰამილტონიანი გამოისახება შემდეგნაირად

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{U} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U. \quad (10.17)$$

(10.17)-ის გათვალისწინებით შრედინგერის განტოლება ასე ჩაიწერება

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hat{H}\Psi. \quad (10.18)$$

შრედინგერის განტოლება შეიცავს წარმოსახვით ერთიანს. ამით იგი განსხვავდება კლასიკური ტალღური განტოლებისგან. ამის გამო ამ განტოლების ამონახსნი Ψ საზოგადოდ კომპლექსური ფუნქცია იქნება. ამაში ადვილად დავრწმუნდებით, თუ (10.10) განტოლებაში შევიტანთ $\Psi = u + iV$ კომპლექსურ ფუნქციას, რის შედეგადაც მივიღებთ

$$i\hbar \frac{\partial u}{\partial t} - \hbar \frac{\partial V}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - i \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 V}{\partial x^2}.$$

ეს განტოლება ეკვივალენტურია სისტემის

$$\begin{cases} \hbar \frac{\partial u}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 V}{\partial x^2}, \\ \hbar \frac{\partial V}{\partial t} = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}, \end{cases}$$

საიდანაც ვხედავთ, რომ u და V ფუნქციები ერთმანეთს „გადაებნენ“. მკითხველი ადვილად დარწმუნდება, რომ ანალოგიური მსჯელობით კლასიკური ტალღური განტოლების გამოყენებით მივიღებთ, რომ u და V ფუნქციები განცალდებიან, ანუ კლასიკურ შემთხვევაში არ არის ტალღური ფუნქციის კომპლექსურად წარმოდგენის პრინციპული აუცილებლობა (თუმცა ზოგჯერ გამოთვლების მოხერხებულობის მიზნით კომპლექსური ტალღური ფუნქციებითაც სარგებლობენ).

შრედინგერის განტოლება განსაზღვრავს ტალღური ფუნქციის კოორდინატზე და დროზე დამოკიდებულებას. ისევე როგორც ნიუტონის მეორე კანონი აღწერს ნაწილაკის მოძრაობის ტრაექტორიას, ანალოგიურად შრედინგერის განტოლება აღწერს ტალღური ფუნქციის დროსა და სივრცეში ევოლუციას. ტალღურ ფუნქციას მოეთხოვება, რომ იგი უწყვეტად და ცალსახად იყოს განსაზღვრული მისი საწყისი მნიშვნელობების საშუალებით ტალღური ფუნქციის მოქმედების მთელ არეში. ასევე მას უნდა გააჩნდეს უწყვეტი პირველი რიგის წარმოებულთა. შესაბამისად, განტოლება უნდა შეიცავდეს ტალღური ფუნქციის მხოლოდ პირველი რიგის დროით წარმოებულს. განვიხილოთ ახლა ტალღური ფუნქციის ფიზიკური შინაარსი.

ტალღური ფუნქცია

ჩინა პარაგრაფში ჩატარებული გამოთვლები ეყრდნობოდა ტალღური პაკეტის შესახებ კლასიკური მექანიკის წარმოდგენებს. შრედინგერის განტოლებაში $\Psi(\mathbf{r}, t)$

ფუნქცია ახალ აზრს იძენს. მას ეწოდება ტალღური ფუნქცია და აღწერს უკვე არა რხევების სუპერპოზიციას, არამედ რეალური ნაწილაკის მდგომარეობას. კვანტურ მექანიკაში ნაწილაკის მდგომარეობის შესახებ მთელი ინფორმაცია ტალღურ ფუნქციაშია თავმოყრილი. კერძოდ, ტალღური ფუნქციის მოდულის კვადრატი ნაწილაკის სივრცის მოცემულ წერტილში დროის მოცემულ მომენტში აღმოჩენის W ალბათობის პროპორციულია:

$$W(\mathbf{r}, t) \propto |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 = \Psi^* \cdot \Psi. \quad (10.19)$$

თუ სივრცის შორეულ წერტილებში ნაწილაკის აღმოჩენის ალბათობა უსასრულოდ მცირეა, მაშინ მთელ სივრცეში აღებული

$$\int |\Psi|^2 d\mathbf{r} \quad (10.20)$$

ინტეგრალი კრებადია. ამის გამო (10.19) გამოსახულება მიიღებს სახეს

$$W(\mathbf{r}, t) = |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2. \quad (10.21)$$

პირიქით, თავისუფლად მოძრავი ნაწილაკი შეიძლება აღმოვაჩინოთ სივრცის ნებისმიერ წერტილში. შესაბამისად (10.20) ინტეგრალი იქნება განშლადი და $|\Psi|^2$ არ შეიძლება იყოს არანაირი სიდიდის აღმოჩენის ალბათობა. ამ შემთხვევაში სამართლიანია შემდეგი თანაფარდობა

$$\frac{|\Psi(\mathbf{r}_1, t)|^2}{|\Psi(\mathbf{r}_2, t)|^2} = \frac{W(\mathbf{r}_1, t)}{W(\mathbf{r}_2, t)}, \quad (10.22)$$

რომელიც (10.19) ფორმულიდან გამომდინარეობს. ფიზიკურ ამოცანებში ხშირად გვხვდება ისეთი მდგომარეობები, რომელთა აღმწერი ტალღური ფუნქციის მოდულის კვადრატი ან არ მიისწრაფვის ნულისკენ ან ძალზედ ნელა კლებულობს უსასრულობაში. მიუხედავად ამისა, ასეთ შემთხვევებში სივრცის სხვადასხვა წერტილებში W სიდიდეთა შეფარდება ამ წერტილებში ნაწილაკის აღმოჩენის ალბათობების შეფარდების ტოლი იქნება.

შრედინგერის (10.14) განტოლება წარმოადგებს ტალღური ფუნქციის მიმართ წრფივ განტოლებას. ამიტომ ნებისმიერი წრფივი კომბინაცია

$$\Psi = C_1 \Psi_1 + C_2 \Psi_2 \quad (10.23)$$

ასევე იქნება (10.14) განტოლების ამონახსენი. ამრიგად ტალღური ფუნქციების წრფივი კომბინაცია აუცილებლად აღწერს ნაწილაკის (ან ნაწილაკთა სისტემის) რაიმე მდგომარეობას. კერძოდ, როცა $C_2 = 0$ ვლებულობთ, რომ შრედინგერის განტოლების ამონახსენი მუდმივის სიზუსტით არის ცნობილი.

ნაწილაკის სივრცის მოცემულ წერტილში აღმოჩენის ალბათობა, თავისი შინაარსიდან გამომდინარე, ერთზე უნდა იყოს ნორმირებული, ანუ

$$\int W(\mathbf{r}, t) d\mathbf{r} = 1. \quad (10.24)$$

თუ ნაწილაკის მოძრაობა ფინიტურია, ანუ იგი ლოკალიზებულია სივრცის გარკვეულ არეში, მაშინ უნდა არსებობდეს ინტეგრალი

$$\int \Psi^*(\mathbf{r}, t) \cdot \Psi(\mathbf{r}, t) d\mathbf{r} = C. \quad (10.25)$$

ამ უკანასკნელი ტოლობის შესრულებისას ტალღური ფუნქცია შეგვიძლია ისე გარდავეყმნათ, რომ

$$\int \Psi^*(\mathbf{r}, t) \cdot \Psi(\mathbf{r}, t) d\mathbf{r} = 1 \quad (10.26)$$

ტოლობას ადგილი ჰქონდეს მაშინაც კი როდესაც $C \neq 1$. ამისათვის საკმარისია შემოვიტანოთ ახალი

$$\Phi = \frac{\Psi}{\sqrt{C}} \quad (10.27)$$

ფუნქცია. ცხადია Φ და Ψ ფუნქციები აღწერენ ნაწილაკის ერთსა და იმავე მდგომარეობას. Ψ -დან Φ -ზე გადასვლის პროცესს ტალღური ფუნქციის ნორმირების პროცედურა ეწოდება, ხოლო Φ ფუნქციას ნორმირებული ტალღური ფუნქცია.

ფიზიკურ სიდიდეთა შესაბამისი ოპერატორები

ამ პარაგრაფში თავს მოვუყრით ყველაზე უფრო მნიშვნელოვან ფიზიკურ სიდიდეთა ოპერატორების გამოსახულებებს. ძირითადი ფიზიკური სიდიდეების ოპერატორები მოცემულია ცხრილში

ენერგიის ოპერატორი	$\hat{E} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$
იმპულსის მდგენელების ოპერატორი	$\hat{p}_x = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}, \hat{p}_y = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial y}, \hat{p}_z = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial z}$
იმპულსის ოპერატორი	$\hat{\mathbf{p}} = \frac{\hbar}{i} \nabla$
კინეტიკური ენერგიის ოპერატორი	$\hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta$
კოორდინატის ან მისი რაიმე ფუნქციის ოპერატორი	$\hat{x}^n = x^n;$ $\hat{U} = U(\mathbf{r})$

მათემატიკური თვალსაზრისით შრედინგერის განტოლება გარკვეული სასაზღვრო პირობების გათვალისწინებით წრფივი დიფერენციალური განტოლების ამოხსნაზე დაიყვება

$$\hat{G}\Psi_i = G_i \cdot \Psi_i. \quad (10.28)$$

სადაც Ψ_i და G_i შესაბამისად \hat{G} ოპერატორის საკუთარი ფუნქციები და საკუთარი მნიშვნელობებია. (10.28) გამოსახულების ფიზიკური აზრი შემდეგში მდგომარეობს: გაზომვის შედეგად შეიძლება აღმოვაჩინოთ ფიზიკური სიდიდის მხოლოდ ის მნიშვნელობები, რომლებიც შედიან მოცემული ფიზიკური სიდიდის ოპერატორის საკუთარი მნიშვნელობების სპექტრში.

საკუთარი მნიშვნელობების სპექტრი შეიძლება იყოს როგორც უწყვეტი, ასევე დისკრეტული. მაგალითად თავისუფლად მოძრავი ნაწილაკის იმპულსის ოპერატორის სპექტრი უწყვეტია. ამაში ადვილად დავრწმუნდებით თუ (10.28) ფორმულაში შევიტანთ ერთგანზომილებიანი თავისუფალი მოძრაობის შესაბამის იმპულსის ოპერატორს. საკუთარი ფუნქციისთვის მივიღებთ

$$\Psi = C \exp\left(\frac{i}{\hbar} px\right). \quad (10.29)$$

აღვნიშნოთ ამ ფუნქციის მნიშვნელოვანი თავისებურება. კერძოდ, მისი მოდულის კვადრატი უდრის $|C|^2$ -ს. შესაბამისად თავისუფლად მოძრავი ნაწილაკი თანაბარი ალბათობით შეიძლება აღმოჩნდეს სივრცის ნებისმიერ წერტილში. როგორც წინა პარაგრაფში აღვნიშნეთ, ასეთი ფუნქციის ნორმირება (10.26) პირობით არ შეიძლება. ამრიგად, (10.29) წარმოადგენს ისეთი ტალღური ფუნქციის მაგალითს, რომლის მოდულის კვადრატი ალბათობის პროპორციულია (10.22) აზრით, მაგრამ (10.19) ტოლობას ადგილი არ აქვს.

ფიზიკური სიდიდის საშუალო მნიშვნელობა

თუ დავუშვებთ, რომ ტალღური ფუნქცია კვადრატულად ინტეგრებადია, ანუ თუ აკმაყოფილებს (10.25) პირობას, მაშინ ოპერატორებისთვის, რომლებიც მხოლოდ კოორდინატის ფუნქციები არიან სამართლიანია საშუალოს განმარტების შემდეგი ფორმულა

$$\langle f \rangle = \int \Psi^*(x) \cdot f(x) \cdot \Psi(x) dx. \quad (10.30)$$

ზოგად შემთხვევაში, როცა ფიზიკური სიდიდე კოორდინატის ფუნქცია არ არის (მაგალითად იმპულსი) მისი საშუალო მნიშვნელობა ასე განისაზღვრება

$$\langle G \rangle = \int \Psi^*(x) \cdot \hat{G}\Psi(x) dx. \quad (10.31)$$

ინტეგრალქვეშა გამოსახულება ორი თანამამრავლისგან შედგება: $\Psi^*(x)$ და $\hat{G}\Psi(x)$, რომელიც წარმოადგენს ოპერატორის $\Psi(x)$ ფუნქციაზე მოქმედების შედეგს. (10.30) წარმოადგენს (10.31)-ის კერძო შემთხვევას, როცა $\hat{f}(x) = f(x)$.

დავუშვათ სისტემა იმყოფება მდგომარეობაში, რომელსაც შეესაბამება G_i საკუთარი მნიშვნელობა და Ψ_i საკუთარი ფუნქცია. თუ G ფიზიკურ სიდიდეს Ψ_i ფუნქციებით გავსაშუალებთ მივიღებთ $\langle \hat{G} \rangle = G_i$. ამაში ადვილად დავრწმუნდებით (10.28)-ის (10.31)-ში შეტანით.

შრედინგერის სტაციონალური განტოლება

თუ შრედინგერის (10.14) განტოლებაში პოტენციური ენერგია დროზე არ არის დამოკიდებული, მაშინ ასეთი სისტემის E ენერგია ინახება. სისტემის სათანადო მდგომარეობებს კი სტაციონალური მდგომარეობები ეწოდება. რამდენადაც ამ შემთხვევაში სისტემის ჰამილტონიანი დროზე ცხადად აღარ არის დამოკიდებული შესაძლებელია (10.14) შრედინგერის განტოლებაში ცვლადების განცალკევა. მართლაც, მოდით ამ შემთხვევაში (10.14) განტოლების ამონახსნი შემდეგი სახით ვეძებოთ

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = f(t) \cdot \psi(\mathbf{r}). \quad (10.32)$$

$f(t)$ მამრავლი ნაწილაკის ტალღურ ბუნებას გამოსახავს. ამაში მისი ცხადი სახის გამოსახულების მიღებისას დავრწმუნდებით. შევიტანოთ (10.32) შრედინგერის (10.18) განტოლებაში

$$i\hbar \cdot \psi(\mathbf{r}) \cdot \frac{df(t)}{dt} = f(t) \cdot \hat{H}\psi(\mathbf{r}) \quad (10.33)$$

და ტოლობის ორივე მხარე $f(t) \cdot \psi(\mathbf{r})$ ნამრავლზე გავყოთ, რის შედეგადაც მივიღებთ

$$i\hbar \frac{df(t)}{dt} \frac{1}{f} = \frac{\hat{H}\psi(\mathbf{r})}{\psi(\mathbf{r})}. \quad (10.34)$$

(10.34)-ის მარცხენა მხარე მხოლოდ დროზეა დამოკიდებული, მარჯვენა კი მხოლოდ კოორდინატზე. შესაბამისად, ორივე მხარე შეგვიძლია ერთსა და იმავე მუდმივ სიდიდეს გავუტოლოთ

$$i\hbar \frac{df(t)}{dt} \frac{1}{f} = \frac{\hat{H}\psi(\mathbf{r})}{\psi(\mathbf{r})} = E. \quad (10.35)$$

ადვილად დავრწმუნდებით იმაში, რომ ამ მუდმივას ენერგიის განზომილება უნდა ჰქონდეს. ამრიგად, ვღებულობთ ორ განტოლებას

$$\begin{aligned} \frac{df}{dt} &= -\frac{i}{\hbar} E \cdot f, \\ \hat{H}\psi &= E \cdot \psi. \end{aligned} \quad (10.36)$$

მეორე განტოლება ადასტურებს იმას, რომ ზემოაღნიშნული მუდმივა მართლაც სისტემის ენერჯიის ტოლია, ხოლო პირველი განტოლების ამოხსნით კი ვლუბობთ ტალღური ფუნქციის დროზე დამოკიდებულებას

$$f(t) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}Et\right). \quad (10.37)$$

ამრიგად სტაციონალური მდგომარეობის ტალღური ფუნქციის დროითი მამრავლი დროის ოსცილირებადი ფუნქციაა. მე-8 თავის (8.21) ფორმულის თანახმად E ენერჯიას $\omega = E/\hbar$ სიხშირე შეესაბამება. შესაბამისად, (10.37) ფორმულა იმდენად აღწერს E ენერჯიის მქონე სტაციონალურ მდგომარეობას, რამდენადაც $\exp(i\omega t)$ აღწერს ω სიხშირით რხევას.

რაც შეეხება (10.36)-ის მეორე განტოლებას (10.17) ტოლობის გათვალისწინებით შეიძლება მივცეთ შემდეგი სახე

$$\Delta\psi + \frac{2m}{\hbar^2}[E - U(\mathbf{r})]\psi = 0. \quad (10.38)$$

რომელსაც შრედინგერის სტაციონალური განტოლება ეწოდება. სრული ტალღური ფუნქცია ასე ჩაინერება

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}Et\right) \cdot \psi(\mathbf{r}). \quad (10.39)$$

სტაციონალურ მდგომარეობაში ალბათობის სიმკვრივე აღარ არის დროზე დამოკიდებული. მართლაც, რადგანაც

$$\left|\exp\left(-\frac{i}{\hbar}Et\right)\right|^2 = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}Et\right) \cdot \exp\left(+\frac{i}{\hbar}Et\right) = 1 \quad (10.40)$$

ნაწილაკის სივრცის მოცემულ წერტილი ალმოჩენის ალბათობა არ არის დროზე დამოკიდებული და მხოლოდ ტალღური ფუნქციის კოორდინატული ნაწილით განისაზღვრება

$$W(\mathbf{r}) \propto |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 = |\psi(\mathbf{r})|^2. \quad (10.41)$$

(10.41) ფორმულა საბოლოოდ გამოხატავს $f(t)$ ფუნქციის აზრს. ეს უკანასკნელი აღწერს სტაციონალური მდგომარეობის ტალღურ თვისებებს, მაგრამ ვერანაირ გავლენას ვერ ახდენს ნაწილაკის მდებარეობაზე.

შრედინგერის (10.38) სტაციონალური განტოლების ამოხსნა დამოკიდებულია მასში შემავალი პოტენციური ენერჯიის კონკრეტულ სახეზე. არსებობს პოტენციალთა მხოლოდ გარკვეული კლასი, რომლეთათვისაც ხერხდება ამ განტოლების ანალიზური ამოხსნა. სხვა შემთხვევებში უნდა მივმართოთ ამონახსნის პოვნის მიახლოებით ან რიცხვით მეთოდებს. ჩვენ აქ არ განვიხილავთ ამ პოტენციალთა კონ-

კრეტული სახისთვის თუ როგორ შეიძლება (10.38) განტოლების ამოხსნა. მაგალითისთვის განვიხილავთ მხოლოდ თავისუფალი ნაწილაკის შემთხვევას, ანუ როდესაც პოტენციალი ნულის ტოლია

$$\psi'' + \frac{2m}{\hbar^2} E \psi = 0. \quad (10.42)$$

სიმარტივისთვის განვიხილავთ ერთგანზომილებიან შემთხვევას და შესაბამისად (10.42)-ში ორი შტრიხი x კოორდინატით მეორე წარმოებულს აღნიშნავს. თუ შემოვიტანთ $k = \sqrt{2mE}/\hbar$ მივიღებთ ჰარმონიული ფუნქციის განტოლებას

$$\psi'' + k^2 \psi = 0, \quad (10.43)$$

რომელსაც ორი წრფივად დამოუკიდებელი ამონახსნი გააჩნია

$$\psi_1 = C_1 \exp(ikx), \quad \psi_2 = C_2 \exp(-ikx). \quad (10.44)$$

ამრიგად (10.37) და (8.22) ფორმულების გათვალისწინებით სრული ტალღური ფუნქცია შეიძლება ასე წარმოვიდგინოთ

$$\Psi(x, t) = C_1 \exp[i(kx - \omega t)] + C_2 \exp[i(kx + \omega t)]. \quad (10.45)$$

მიღებული ამონახსნი წარმოადგენს ურთიერთსაწინააღმდეგო მიმართულებით გავრცელებულ ორი ბრტყელი ტალღის სუპერპოზიციას. (10.45) ფორმულა კიდევ ერთხელ გვიჩვენებს მიკროსამყაროს მნიშვნელოვან თავისებურებას: ენერგიის ერთსა და იმავე მნიშვნელობას შეიძლება შეესაბამებოდეს რამდენიმე კვანტური მდგომარეობა. ენერგიის ასეთ დონეებს გადაგვარებული დონეები ეწოდება, ხოლო კვანტური მდგომარეობების რაოდენობას გადაგვარების ხარისხი, ანუ სტატისტიკური წონა. ჩვენს შემთხვევაში სტატისტიკური წონა ორის ტოლია, ტალღის გავრცელების ორი შესაძლო მიმართულების არსებობის გამო.

ახლა დავუშვათ, რომ ზემოთ განხილულ მაგალითში ენერგიის ერთსა და იმავე მნიშვნელობას ორი სხვადასხვა კვანტური მდგომარეობა ψ_1 და ψ_2 შეესაბამება. მაშინ ცხადია, რომ სამართლიანი იქნება შემდეგი ტოლობა

$$\frac{\psi_1''}{\psi_1} = \frac{2m}{\hbar^2} (U - E) = \frac{\psi_2''}{\psi_2}, \quad (10.46)$$

ანუ

$$\psi_1'' \cdot \psi_2 - \psi_2'' \cdot \psi_1 = 0. \quad (10.47)$$

უკანასკნელი ტოლობის მარცხენა მხარეს დავუმატოთ და გამოვაკლოთ $\psi_1' \cdot \psi_2'$ სიდიდე. ამის შედეგად მიღებული გამოსახულება წარმოადგენს შემდეგი გამოსახულების წარმოებულს

$$\psi_1' \cdot \psi_2 - \psi_2' \cdot \psi_1 = \text{const}. \quad (10.48)$$

დავუშვათ, რომ X ლერძის ერთ-ერთი მიმართულებით მოძრაობა შეზღუდულია. ამ მიმართულებით ცხადია ვერც ერთი ნაწილაკი ვერ იმოძრაებს და, შესაბამისად, ორივე ტალღური ფუნქცია ნულის ტოლი იქნება. ეს კი ნიშნავს, რომ (10.48) გამოსახულებაში მუდმივა ნულის ტოლი იქნება, ანუ

$$\frac{\Psi_1'}{\Psi_1} = \frac{\Psi_2'}{\Psi_2}. \quad (10.49)$$

ამ უკანასკნელი ტოლობის ინტეგრებით კი მივიღებთ,

$$\Psi_2 = C \cdot \Psi_1. \quad (10.50)$$

(10.23) სუპერპოზიციის პრინციპის თანახმად კი ტალღური ფუნქციები, რომლებიც განსხვავდებიან მხოლოდ მუდმივი სიდიდით აღწერენ ერთსა და იმავე ეკვანტურ მდგომარეობას.

ამრიგად, ერთგანზომილებიანი მოძრაობის შემთხვევაში მდგომარეობის გადაგვარება იხსნება თუ კი ნაწილაკის მოძრაობა შეიზღუდება რომელიმე ერთი მიმართულებით.

თავი 11

ორბიტალური კუთხური მომენტი

ატომის ენერგეტიკული დონეების კლასიფიკაცია მნიშვნელოვანწილად განისაზღვრება კუთხური მომენტის კვანტური რიცხვების საშუალებით. კუთხური, ანუ მახრუნებელი მომენტის განზომილება ემთხვევა ქმედების განზომილებას, ამიტომ მიღებულია, რომ იგი გამოისახოს \hbar პლანკის მუდმივას საშუალებით. ამ თავში ჩვენ გამოვიყვანთ კუთხური მომენტის დაკვანტვის წესებს.

ორბიტალური კუთხური მომენტის ოპერატორი

კლასიკური მექანიკის თანახმად მოძრაობის რაოდენობის მომენტი, ანუ კუთხური მომენტი განიმარტება, როგორც ნაწილაკის რადიუსვექტორისა და იმპულსის ვექტორული ნამრავლი

$$\mathbf{M} = [\mathbf{r}\mathbf{p}] \quad (11.1)$$

როგორც მე-10 თავში აღვნიშნეთ, კვანტური მექანიკის ძირითადი პოსტულატის თანახმად კავშირი ფიზიკური სიდიდეების შესაბამის ოპერატორებს შორის ისეთივეა, როგორც თვით ამ ფიზიკურ სიდიდეებს შორის კლასიკურ მექანიკაში. ამიტომ იმპულსის ოპერატორის (10.16) განმარტების დახმარებით ორბიტალური მომენტის ოპერატორი კვანტურ მექანიკაში ასე ჩაინრება

$$\hat{\mathbf{M}} = \hbar \hat{\mathbf{I}} = \frac{\hbar}{i} [\mathbf{r}\nabla] \quad (11.2)$$

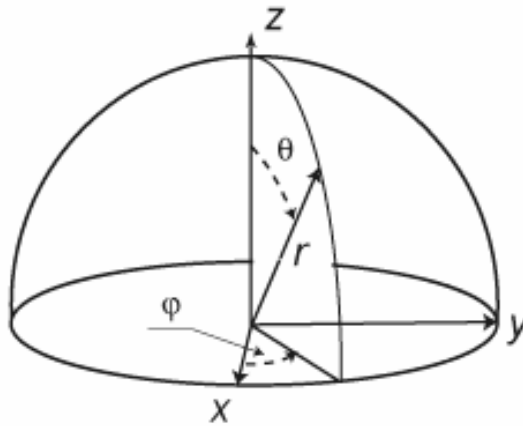
ან მატრიცული სახით

$$\hat{\mathbf{I}} = -i \begin{vmatrix} \mathbf{e}_x & \mathbf{e}_y & \mathbf{e}_z \\ x & y & z \\ \frac{\partial}{\partial x} & \frac{\partial}{\partial y} & \frac{\partial}{\partial z} \end{vmatrix} \quad (11.3)$$

სადაც $\mathbf{e}_x, \mathbf{e}_y, \mathbf{e}_z$ – შესაბამისად x, y, z ღერძების გასწვრივ მიმართული ორტებია. (11.3) ფორმულის დახმარებით შესაძლებელია ცხადი სახით ამოვწეროთ კუთხური მომენტის პროექციები x, y, z ღერძებზე

$$\begin{aligned}\hat{l}_x &= -i \left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right), \\ \hat{l}_y &= -i \left(z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right), \\ \hat{l}_z &= -i \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right).\end{aligned}\tag{11.4}$$

ატომთა თეორიაში გადამწყვეტ როლს თამაშობს ცენტრალური სიმეტრიის ველის მიახლოება. ცნობილია, რომ ცენტრალური სიმეტრიის შემთხვევაში ინახება როგორც ნაწილაკის ენერგია, ასევე მისი მექანიკური მომენტის ვექტორი. ამასთან დაკავშირებით მოსახერხებელია შემოვიტანოთ ნახ. 11.1-ის მიხედვით განმარტებული ე.წ. სფერულ კოორდინატთა სისტემა, რომელშიც სივრცეში ნაწილაკის მდებარეობა განისაზღვრება კოორდინატთა სათავიდან ნაწილაკამდე r მანძილითა და ორი კუთხით: პოლარული θ და აზიმუტური φ კუთხეებით. კავშირი დეკარტეს კოორდინატთა სისტემასა და სფერულ კოორდინატთა სისტემას შორის შემდეგნაირად გამოისახება



ნახ. 11.1. სფერულ კოორდინატთა სისტემა

$$\begin{cases} x = r \sin \theta \cos \varphi, & 0 \leq \theta \leq \pi \\ y = r \sin \theta \sin \varphi, & 0 \leq \varphi \leq 2\pi \\ z = r \cos \theta. & 0 \leq r \leq \infty \end{cases}\tag{11.5}$$

განვიხილოთ ჯერ \hat{l}_z ოპერატორი და ვაჩვენოთ, რომ იგი სფერულ კოორდინატთა სისტემაში $\partial/\partial\varphi$ -ის პროპორციულია. მართლაც

$$\frac{\partial}{\partial\varphi} = \frac{\partial x}{\partial\varphi} \frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial y}{\partial\varphi} \frac{\partial}{\partial y} + \frac{\partial z}{\partial\varphi} \frac{\partial}{\partial z}.$$

(11.5) -ის გამოყენებით ადვილად მივიღებთ

$$\begin{aligned}\frac{\partial y}{\partial \varphi} &= r \sin \theta \cos \varphi = x, \\ \frac{\partial x}{\partial \varphi} &= -r \sin \theta \sin \varphi = -y,\end{aligned}$$

ანუ

$$\frac{\partial}{\partial \varphi} = x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x}.$$

საიდანაც გამომდინარეობს, რომ

$$\hat{l}_z = -i \frac{\partial}{\partial \varphi} \quad (11.6)$$

ახლა განვსაზღვროთ (11.6) ოპერატორის საკუთარი ფუნქციები და საკუთარი მნიშვნელობები. ეს ამოცანა დაიყვანება

$$\hat{l}_z \Phi = l_z \cdot \Phi \quad (11.7)$$

ან (11.6) ფორმულის გათვალისწინებით

$$\frac{\partial \Phi}{\partial \varphi} = i l_z \cdot \Phi \quad (11.8)$$

დიფერენციალური განტოლების ამოხსნაზე, სადაც (10.28)-ის თანახმად l_z წარმოადგენს \hat{l}_z ოპერატორის საკუთარ მნიშვნელობას. (11.8) განტოლების ამოხსნა არ წარმოადგენს სირთულეს და ამონახსნისათვის ვღებულობთ

$$\Phi(\varphi) = N \exp(i l_z \varphi). \quad (9.9)$$

როგორც მე-10 თავში აღვნიშნეთ ტალღურ ფუნქციას მოეთხოვება სასრულობა და ცალსახობა, რის გამოც l_z -ის დასაშვებ მნიშვნელობათა კრებული

$$\Phi(\varphi + 2\pi) = \Phi(\varphi) \quad (11.10)$$

პირობიდან განისაზღვრება, საიდანაც გამომდინარეობს, რომ

$$\exp(i 2\pi l_z) = 1. \quad (11.11)$$

კომპლექსურ რიცხვთა თეორიიდან გავიხსენოთ, რომ

$$\exp(i\alpha) = 1$$

განტოლებას აქვს უამრავი ამონახსენი

$$\alpha = 2\pi m, \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots$$

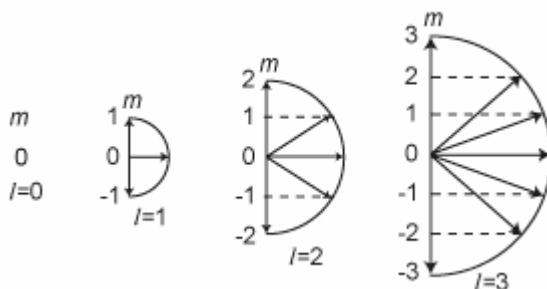
მაგრამ თუ დავაფიქსირებთ მომენტის ვექტორის მოდულს (ვგულისხმობთ, რომ მომენტი სასრული სიდიდეა), მაშინ ცხადია, რომ მისი რომელიმე პროექციაც ასევე სასრული სიდიდე უნდა იყოს და არ უნდა აღემატებოდეს თვით ამ ვექტორის მოდულს. შესაბამისად $|m|$ ზემოდან იქნება შემოსაზღვრული მისი l მაქსიმალური მნიშვნელობით. მაშინ (11.11) ფორმულიდან გამომდინარეობს კუთხური მომენტის დაკვანტვის წესი

$$l_z = m \quad (11.12)$$

სადაც m ლებულობს $-l$ -დან l -მდე ნულის ჩათვლით ყველა მთელ, დადებით და უარყოფით მნიშვნელობებს

$$m = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots, \pm l, \quad (11.13)$$

ანუ სულ $2l+1$ სხვადასხვა პროექციებს. კვანტურ მექანიკაში l -ს სიდიდეს ორბიტალური კვანტური რიცხვი ეწოდება ან ხშირად უბრალოდ მომენტსაც უწოდებენ.



ნახ. 11.2. კუთხური მომენტის ვექტორის პროექციები

ნახაზ 11.2-ზე ნაჩვენებია მომენტის პროექციები $l = 0, 1, 2, 3$ -სთვის. m სიდიდე ცალსახად განსაზღვრავს l_z , ოპერატორის საკუთარ მნიშვნელობებს, ხოლო (11.9) ფორმულაში შემავალ ნორმირების N კოეფიციენტი განისაზღვრება პირობიდან

$$\int_0^{2\pi} |\Phi_m|^2 d\varphi = 1$$

საიდანაც

$$N = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}.$$

ამრიგად, ნორმირებული ტალღური ფუნქცია განსაზღვრული l_z -ით მოიცემა შემდეგნაირად

$$\Phi_m(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp(im\varphi) \quad (11.14)$$

ალბათობის სიმკვრივე

$$W_m(\varphi) = |\Phi_m(\varphi)|^2 = \left| \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp(im\varphi) \right|^2 = \frac{1}{2\pi} \quad (11.15)$$

ყველა φ -სთვის ერთნაირია. ეს ნიშნავს, რომ სივრცეში გამოყოფილი მიმართულების შემთხვევაში ნაწილაკის აღმოჩენის სრულ ალბათობას ახასიათებს აქსიალური სიმეტრია. გამოყოფილი მიმართულება სივრცეში შეიძლება მოგვეცეს ერთგვაროვანი ელექტრული ან მაგნიტური ველის მიმართულებამ. სფერული სიმეტრიის შემთხვევაში Z ღერძის მიმართულება წინასწარ არაფრით არ არის განსაზღვრული. ამიტომ გარეშე ველის არარსებობის შემთხვევაში სხვადასხვა m -ის შესაბამისი სტაციონალური მდგომარეობების ენერგიები ერთმანეთს ემთხვევა, ანუ ადგილი აქვს მდგომარეობების $2l + 1$ ჯერად გადაგვარებას.

ახლა (11.4) ფორმულების გამოყენებით გამოვითვალოთ \hat{I}^2 ოპერატორი (11.5) სფერულ კოორდინატებში. მარტივი, მაგრამ გრძელი გამოთვლების ჩატარების შედეგად მივიღებთ

$$\hat{I}^2 = \hat{I}_x^2 + \hat{I}_y^2 + \hat{I}_z^2 = -\Delta_{\theta,\varphi} = -\frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\theta} \left(\sin\theta \frac{\partial}{\partial\theta} \right) - \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} \quad (11.16)$$

სფერული სიმეტრიის შემთხვევაში მომენტის კვადრატის პროექციების საშუალო მნიშვნელობები ერთმანეთის ტოლია

$$\langle I_x^2 \rangle = \langle I_y^2 \rangle = \langle I_z^2 \rangle$$

რის გამოც

$$\langle I^2 \rangle = 3 \langle I_z^2 \rangle. \quad (11.17)$$

მეორე მხრივ, როგორც კვანტური მექანიკიდან არის ცნობილი, განსაზღვრული მომენტის მქონე მდგომარეობაში მომენტის კვადრატის მნიშვნელობა ემთხვევა მის საკუთარ მნიშვნელობას

$$\langle I^2 \rangle = I^2$$

(11.13) ფორმულის გათვალისწინებით შეგვიძლია გამოვითვალოთ მომენტის I_z პროექციის კვადრატის საშუალო მნიშვნელობა

$$\langle I_z^2 \rangle = \frac{2(1^2 + 2^2 + 3^2 + \dots + l^2)}{2l+1} = \frac{2}{2l+1} \cdot \frac{1}{6} l(l+1)(2l+1) = \frac{1}{3} l(l+1).$$

ამ გამოსახულების (9.17) ფორმულაში შეტანით საბოლოოდ მომენტის კვადრატის ოპერატორის საკუთარი მნიშვნელობისათვის მივიღებთ

$$I^2 = l(l+1). \quad (11.18)$$

ამრიგად l პარამეტრი ცალსახად განსაზღვრავს მომენტის კვადრატის მნიშვნელობას. ამიტომ სიმარტივისათვის l -ს უწოდებენ „მომენტს“ ან „მომენტის აბსოლუტურ მნიშვნელობას“ (11.18) აზრით.

მომენტის საკუთარი ფუნქციები და საკუთარი მნიშვნელობები

$$\hat{\mathbf{I}}^2 Y = \mathbf{I}^2 \cdot Y \quad (11.19)$$

განტოლების ამოხსნით განისაზღვრება, რაც საკმაოდ რთულ მათემატიკურ ამოცანას წარმოადგენს. ამიტომ დამტკიცების გარეშე მოვიყვანთ (11.19) განტოლების ამონახსნებს (11.13) და (11.18) პირობების გათვალისწინებით

$$\Delta_{\theta, \varphi} Y_{l,m} = -l(l+1) \cdot Y_{l,m}, \quad (11.20)$$

სადაც $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ ე.წ. *სფერული ფუნქციებია*. ეს ფუნქციები შეიძლება ორი თანამამრავლის სახით წარმოვიდგინოთ, რომელთაგან ერთი მხოლოდ θ , ხოლო მეორე მხოლოდ φ ცვლადებზეა დამოკიდებული

$$Y_{l,m}(\theta, \varphi) = \Theta_{l,m}(\theta) \cdot \Phi_m(\varphi), \quad (11.21)$$

სადაც $\Phi_m(\varphi)$ (11.14) ფორმულით არის განსაზღვრული. რაც შეეხება $\Theta_{l,m}(\theta)$ ფუნქციას იგი მათემატიკიდან კარგად ცნობილ *ლეჟანდრის მიკავშირებული პოლინომებით* გამოსახება

$$\Theta_{l,m}(\theta) = (-1)^m \sqrt{\frac{(2l+1)(l-m)!}{2(l+m)!}} P_l^m(\cos \theta), \quad m \geq 0 \quad (11.22)$$

m -ს უარყოფითი მნიშვნელობებისათვის უნდა მოვახდინოთ ცვლილება

$$\Theta_{l,-|m|} = (-1)^m \cdot \Theta_{l,|m|}. \quad (11.23)$$

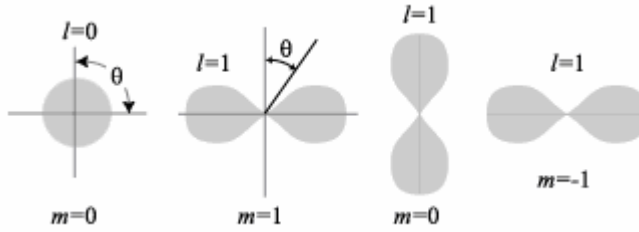
ამრიგად, საბოლოოდ კუთხური მომენტის ოპერატორის ნორმირებული საკუთარი ფუნქციებისათვის მივიღებთ

$$Y_{l,m}(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi} \cdot \frac{(l-m)!}{(l+m)!}} P_l^m(\cos \theta) \cdot \exp(im\varphi). \quad (11.24)$$

ამოვნეროთ ცხადი სახით რამოდენიმე სფერული ფუნქცია

$$\begin{aligned} Y_{0,0} &= \frac{1}{\sqrt{4\pi}}, \\ Y_{1,0} &= \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta, \\ Y_{1,\pm 1} &= \mp \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta \cdot \exp(\pm i\varphi). \end{aligned}$$

და მათი შესაბამისი პოლარული დიაგრამები (იხილეთ ნახაზი 11.3).



ნახ. 11.3. სფერული ფუნქციების პოლარული დიაგრამები

რამდენადაც (11.24) ფორმულით განსაზღვრული ფუნქციის მოდულის კვადრატული ფუნქციონალი არ არის დამოკიდებული, ამდენად სივრცის გარკვეულ მოცულობაში ნაწილაკის აღმოჩენის ალბათობა θ პოლარული კუთხით განისაზღვრება (იხილეთ ნახაზი. 11.3).

მდგომარეობის ლუნობა

საკოორდინატო ღერძების სათავის მიმართ არეკვლის შედეგად სისტემის მდგომარეობის აღმწერმა ფუნქციამ შეიძლება შეიცვალოს ან არ შეიცვალოს თავისი ნიშანი. პირველ შემთხვევაში ვიტყვით, რომ სისტემის ლუნობა უარყოფითია, ხოლო მეორე შემთხვევაში კი – დადებითი. ახლა ვნახოთ როგორი იქნება l მომენტით განსაზღვრული მდგომარეობის ლუნობა. საკოორდინატო ღერძების ინვერსიის შედეგად

$$x \rightarrow -x, y \rightarrow -y, z \rightarrow -z. \quad (11.25)$$

ცხადია, რომ (11.25) გარდაქმნისას $r \rightarrow r$. შემდგომ $z \rightarrow -z$ პირობიდან (11.5)-ის გათვალისწინებით სამართლიანია ტოლობა $\cos\theta \rightarrow -\cos\theta$ რაც ნიშნავს, რომ $\theta \rightarrow \pi - \theta$ ($\theta \rightarrow \pi + \theta$ შემთხვევა ეწინააღმდეგება (11.5)-ს პირველი სტრიქონის შესრულების პირობას. შესაბამისად $x \rightarrow -x$ და $y \rightarrow -y$ გარდაქმნებისას, როგორც ამას (11.5) გამოსახულების პირველი და მეორე სტრიქონი მიგვითითებს $\sin\varphi$ და $\cos\varphi$ ფუნქციებისათვის მოითხოვება ერთდროულად ნიშნის ცვლილება

$$\begin{aligned} \sin\varphi &\rightarrow -\sin\varphi, \\ \cos\varphi &\rightarrow -\cos\varphi, \end{aligned}$$

რაც მხოლოდ $\varphi \rightarrow \varphi + \pi$ შემთხვევაშია შესაძლებელი. როგორც (11.24) ფორმულიდან ჩანს ტალღური ფუნქციის კუთხურ დამოკიდებულებას განსაზღვრავს $P_l^m(\cos\theta) \cdot \exp(im\varphi)$ მამრავლი. $\varphi \rightarrow \varphi + \pi$ ცვლილებისას ექსპონენტა მრავლდება $(-1)^m$ მამრავლზე, ხოლო $\theta \rightarrow \pi - \theta$ ცვლილებისას $P_l^m(-\cos\theta) = (-1)^{l-m} P_l^m(\cos\theta)$, ანუ ჩნდება $(-1)^{l-m}$ მამრავლი. ამრიგად სრული ტალღური ფუნქცია მრავლდება $(-1)^{l-m} \cdot (-1)^m = (-1)^l$ მამრავლზე, რაც ნიშნავს, რომ ამ შემთხვევაში მდგომარეობის ლუნობა განისაზღვრება $(-1)^l$ მამრავლით. ლუნი l -ებისათვის მდგომარეობის ტალღური ფუნქცია ლუნია, ხოლო კენტი l -ებისათვის – კენტი.

თავი 12

წყალბადის ატომის კვანძურ მექანიკური აღწერა

ამ თავში განიხილება კეპლერის ამოცანის ამოხსნა შრედინგერის ფორმალიზმის გამოყენებით. ჩვენ დავრწმუნდებით იმაში, რომ რელატივისტური შესწორებების გათვალისწინების გარეშე შრედინგერის განტოლების გამოყენებით შესაძლებელია წყალბადის ატომის ენერგეტიკული სპექტრის მიღება. მიღებული ენერგეტიკული დონეები ემთხვევა ბორ-ზომერფელდის დაკვანტვით მიღებულ დონეებს, მაგრამ ტალღური ფუნქციის მეშვეობით განსაზღვრული ორბიტალების ფორმა მკვეთრად განსხვავდება ელექტრონის კლასიკური ტრაექტორიისგან. კულონური პოტენციალის შემთხვევაში ტალღური ფუნქციებისთვის არსებობს ანალიზური გამოსახულებები, რაც ფიზიკური სიდიდეების საშუალო მნიშვნელობების გამოთვლის საშუალებას იძლევა და ასევე გვიქმნის წარმოდგენას სხვადასხვა მდგომარეობებში ატომის ზომების შესახებ.

კვანძური მექანიკის ფარგლებში ჩატარებული ანალიზი საშუალებას გვაძლევს განვსაზღვროთ ნებისმიერი ატომის ძირითადი მდგომარეობის ბუნება, ავხსნათ ენერგეტიკული დონეების შესქელების მიზეზი იონიზაციის საზღვართან სიახლოვეში და ასევე ენერგეტიკული დონეების გადაგვარების მოვლენა. კუთხური მომენტის შესაბამისი კვანძური რიცხვის მნიშვნელობებით განისაზღვრება მრავალელექტრონიანი ატომების ტალღური ფუნქციის სტრუქტურა, რომლის ცოდნაც აუცილებელია რთული ატომების სპექტრის კლასიფიკაციისათვის, რომელთათვისაც შრედინგერის სათანადო განტოლების ანალიზურად ამოხსნა შეუძლებელია.

დაყვანილი მასა

განვიხილოთ ორი კულონურად ურთიერთქმედი ნაწილაკის ამოცანა და ჩავწეროთ შრედინგერის განტოლება მიზიდვის $U = -Ze^2/r$ პოტენციალისთვის

$$\frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{\partial^2 \psi_{\text{sys}}}{\partial \mathbf{r}_e^2} + \frac{\hbar^2}{2m_Z} \frac{\partial^2 \psi_{\text{sys}}}{\partial \mathbf{r}_Z^2} + \left(E_{\text{tot}} + \frac{Ze^2}{r} \right) \psi_{\text{sys}} = 0 \quad (12.1)$$

სადაც \mathbf{r}_e და \mathbf{r}_Z შესაბამისად ელექტრონისა და ბირთვის რადიუსვექტორებია, ხოლო E_{tot} – სისტემის სრული ენერგია. შემოვიყვანოთ სისტემის მასათა ცენტრისა და ელექტრონის ბირთვის მიმართ მოძრაობის რადიუსვექტორები

$$\mathbf{R} = \frac{m_e \mathbf{r}_e + m_Z \mathbf{r}_Z}{m_e + m_Z}, \quad (12.2)$$

$$\mathbf{r} = \mathbf{r}_e - \mathbf{r}_Z. \quad (12.3)$$

მოვახდინოთ (12.1) განტოლებაში ლაპლასის ოპერატორების ჩანერა (12.2) და (12.3) კოორდინატებში

$$\frac{\partial^2}{\partial \mathbf{r}_e^2} = \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{r}^2} + \left(\frac{m_e}{m_e + m_z} \right)^2 \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{R}^2}, \quad (12.4)$$

$$\frac{\partial^2}{\partial \mathbf{r}_z^2} = \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{r}^2} + \left(\frac{m_z}{m_e + m_z} \right)^2 \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{R}^2}.$$

(12.4) გამოსახულებების (12.1) განტოლებაში შეტანით მივიღებთ

$$\frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{1}{m_e} + \frac{1}{m_z} \right) \frac{\partial^2 \Psi_{\text{sys}}}{\partial \mathbf{r}^2} + \frac{\hbar^2}{2} \cdot \frac{1}{m_e + m_z} \cdot \frac{\partial^2 \Psi_{\text{sys}}}{\partial \mathbf{R}^2} + \left(E_{\text{tot}} + \frac{Ze^2}{r} \right) \Psi_{\text{sys}} = 0. \quad (12.5)$$

მიღებულ განტოლებაში შესაძლებელია მოვახდინოთ ცვლადთა განცალკეება თუ საძიებელ ტალღურ ფუნქციას შემდეგი სახით წარმოვადგენთ

$$\Psi_{\text{sys}} = \Psi(\mathbf{r}) \cdot \Psi(\mathbf{R}). \quad (12.6)$$

ამ ფუნქციის (12.5) განტოლებაში შეტანით და განტოლების Ψ_{sys} ფუნქციაზე გაყოფით ადვილად მივიღებთ

$$\frac{1}{\Psi(\mathbf{r})} \frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{1}{m_e} + \frac{1}{m_z} \right) \frac{\partial^2 \Psi(\mathbf{r})}{\partial \mathbf{r}^2} + \left(E_{\text{tot}} + \frac{Ze^2}{r} \right) = - \frac{1}{\Psi(\mathbf{R})} \frac{\hbar^2}{2} \cdot \frac{1}{m_e + m_z} \cdot \frac{\partial^2 \Psi(\mathbf{R})}{\partial \mathbf{R}^2}. \quad (12.7)$$

რამდენადაც (12.7) ტოლობის მარჯვენა და მარცხენა მხარეები სხვადასხვა ცვლადის ფუნქციებია (12.7) ტოლობას ადგილი ექნება მხოლოდ მაშინ, როდესაც ტოლობის ორივე მხარე ერთი და იგივე მუდმივის ტოლი იქნება. სისტემის სრული ენერგია E_{tot} შედგება სისტემის შინაგანი E ენერგიისა და ელექტრონისა და ბირთვის მასათა ცენტრის მოძრაობის E_{mc} ენერგიის ჯამისგან

$$E_{\text{tot}} = E + E_{\text{mc}}. \quad (12.8)$$

მასათა ცენტრის თანაბარი მოძრაობა აღინერება განტოლებით

$$\frac{\hbar^2}{2} \cdot \frac{1}{m_e + m_z} \cdot \frac{\partial^2 \Psi(\mathbf{R})}{\partial \mathbf{R}^2} + E_{\text{mc}} = 0,$$

ხოლო

$$\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(\mathbf{r})}{\partial \mathbf{r}^2} + \left(E + \frac{Ze^2}{r} \right) \Psi(\mathbf{r}) = 0 \quad (12.9)$$

განტოლება კი წარმოადგენს ელექტრონისა და ბირთვის ფარდობითი მოძრაობის

საძიებელ განტოლებას. აქ $m = \frac{m_e m_z}{m_e + m_z}$ ბირთვისა და ელექტრონის დაყვანილი მა-

საა. ამრიგად, ისევე როგორც კლასიკურ მექანიკაში ორი სხეულის ამოცანა დაიყვანება ბირთვის ველში ელექტრონის მაგივრად დაყვანილი მასის მქონე ნაწილაკის მოძრაობაზე.

ახალი პარამეტრები

როგორც ცნობილია ბმულ მდგომარეობაში ნაწილაკის ენერგია უარყოფითია. ამიტომ შემოჰყავთ ე.წ. „დე-ბროილის“ ტალღური რიცხვი

$$k^2 = -\frac{2mE}{\hbar^2}, \quad (12.10)$$

და

$$b = \frac{2Zme^2}{\hbar^2} = \frac{2Z}{a_0} \frac{m}{m_e} \quad (12.11)$$

სიგრძის მასშტაბური გარდაქმნა, სადაც a_0 ბორის პირველი ორბიტის რადიუსია. ამ აღნიშვნებში (12.9) განტოლება ასე ჩაიწერება

$$\Delta\psi + \left(-k^2 + \frac{b}{r}\right)\psi = 0 \quad (12.12)$$

სფერულ კოორდინატებში გადასვლის შემდეგ (16.12) განტოლებაში შემავალი ლაპლასის ოპერატორი ასე გამოისახება

$$\Delta = \Delta_r + \frac{1}{r^2} \Delta_{\theta,\varphi} \quad (12.13)$$

სადაც

$$\Delta_r = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right), \quad (12.14)$$

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

წარმოადგენენ შესაბამისად ლაპლასიანის „რადიალურ“ და „კუთხურ“ ნაწილს. აღსანიშნავია, რომ კუთხური ნაწილი ნიშნის სიზუსტით ემთხვევა მოძრაობის რადიუსის მომენტის l^2 -ის ოპერატორს.

სფერული ცვლადების განცალგება

(12.12) განტოლების ამონახსნი შემდეგი სახით ვეძებთ

$$\psi(\mathbf{r}) = R(r) \cdot Y(\theta, \varphi) \quad (12.15)$$

თუ აქაც ისეთსავე მსჯელობას ჩავატარებთ, როგორც (12.7) ტოლობის მიღებისას, ადვილად დავწმუნდებით, რომ ადგილი ექნება შემდეგ ტოლობას

$$r^2 \left[\frac{\Delta_r R}{R} - k^2 + \frac{b}{r} \right] = -\frac{\Delta_{\theta, \varphi} Y}{Y}.$$

ამ ტოლობის ორივე მხარეს კვლავ სხვადასხვა ცვლადზე დამოკიდებული გამოსახულებებია და მათი ტოლობა დასაშვებია მხოლოდ იმ შემთხვევაში თუ თითოეული გამოსახულება ერთი და იგივე მუდმივას ტოლია

$$r^2 \left[\frac{\Delta_r R}{R} - k^2 + \frac{b}{r} \right] = \lambda \quad (12.16)$$

$$-\frac{\Delta_{\theta, \varphi} Y}{Y} = \lambda \quad (12.17)$$

უკანასკნელი განტოლება ემთხვევა მე-9 თავის (9.20) განტოლებას და ამდენად წარმოადგენს იმპულსის მომენტის ოპერატორის საკუთარი მნიშვნელობებისა და საკუთარი ფუნქციების განტოლებას. (9.10) და (9.11) ფორმულების თანახმად ამ განტოლებას გააჩნია ცალსახა ამონახსნი $Y = Y_{lm}(\theta, \varphi)$ ფუნქციების სახით მხოლოდ მაშინ, როდესაც $\lambda = l(l+1)$, $l = 0, 1, 2, \dots$ λ -ს ამ მნიშვნელობის (12.16) განტოლებაში შეტანით მივიღებთ დიფერენციალურ განტოლებას რადიალური ტალღური ფუნქციისათვის

$$\Delta_r R + \left[-k^2 + \frac{b}{r} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] R = 0. \quad (12.18)$$

სანამ გადავალთ (12.18) განტოლების ამოხსნაზე, გავეცნოთ რადიალური მოძრაობის ზოგიერთ თვისებას.

ეფექტური პოტენციალი

(12.18) განტოლებაში (12.10) და (12.11) ფორმულების შეტანით მივიღებთ

$$\Delta_r R + \left[E + \frac{Ze^2}{r} - \frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2} \right] R = 0 \quad (12.19)$$

ჩასმით

$$R(r) = \frac{\chi(r)}{r} \quad (12.20)$$

მივიღებთ

$$\frac{d^2 \chi}{dr^2} + \left[E + \frac{Ze^2}{r} - \frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2} \right] \chi = 0 \quad (12.21)$$

ეს უკანასკნელი განტოლება აღწერს ელექტრონის მოძრაობას

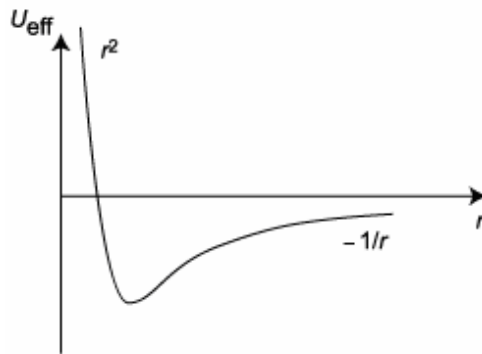
$$U_{\text{eff}} = -\frac{Ze^2}{r} + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2} \quad (12.22)$$

ეფექტური პოტენციალის ველში. (12.22) გამოსახულების პირველი წევრი წარმოადგენს ელექტრონის კულონური ურთიერთქმედების პოტენციალს, ხოლო მეორე წევრის მრიცხველში კი არის მომენტის კვადრატის საკუთარი მნიშვნელობა. ამის გამო

$$U_{\text{cf}} = \frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2} \quad (12.23)$$

სიდიდეს ისევე, როგორც კლასიკურ მექანიკაში „ცენტრგამზიდი“ პოტენციალი ეწოდება. ეფექტური პოტენციალის პროფილი ნაჩვენებია ნახაზ 12.1-ზე. ბირთვიდან შორ მანძილებზე დომინირებს კულონური პოტენციალი, ხოლო მცირე მანძილებზე კი – ცენტრგამზიდი პოტენციალი. ამ პოტენციალის r -ზე დამოკიდებულება მოგვაგონებს უსასრულო კედლებიან პოტენციურ ორმოს, მაგრამ ორმოსგან განსხვავებით პოტენციალის კედლები უფრო ნაკლებად დამრეცია.

(12.18) განტოლება გვიჩვენებს, რომ კულონურ ველში რადიალური მოძრაობის ამოცანა დადის ცალმხივად შემოსაზღვრულ არეში ერთგანზომილებიან მოძრაობის ამოცანაზე. კვანტურ მექანიკაში მტკიცდება, რომ შემოსაზღვრული ერთგანზომილებიანი მოძრაობა არ არის გადაგვარებული. ამრიგად, როგორც შემდგომში ვნახავთ კულონურ ტალღური ფუნქციების გადაგვარება მხოლოდ ტალღური ფუნქციის კუთხური ნაწილის გადაგვარებით აიხსნება.



ნახ. 12.1. კულონურ ველში რადიალური მოძრაობის შესაბამისი ეფექტური პოტენციალი

რადიალური ტალღური ფუნქციის გამოთვლა

თუ (12.14) ლაპლასიანის რადიალურ ნაწილს გავშლით, მაშინ (12.18) განტოლება შემდეგ სახე მიიღებს

$$R'' + \frac{2}{r}R' + \left[-k^2 + \frac{b}{r} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] R = 0 \quad (12.24)$$

მოვხდებით ამ განტოლებაში განსაკუთრებული წერტილების გამოყოფა. მართლაც (12.24) განტოლებას ახასიათებს ორი განსაკუთრებული წერტილი: $r \rightarrow \infty$ და $r = 0$. R_∞ -ით აღვნიშნოთ ტალღური ფუნქცია უსასრულობაში, ხოლო R_0 -ით ნულთან ახლოს. თუ (12.24) განტოლებაში გადავალთ $r \rightarrow \infty$ ზღვარზე მივიღებთ

$$R_\infty'' - k^2 R_\infty = 0 \quad (12.25)$$

რომლის ზოგადი ამონახსნიც არის

$$R_\infty = C_{\infty 1} \cdot e^{-kr} + C_{\infty 2} \cdot e^{kr} . \quad (12.26)$$

ტალღური ფუნქციების სასრულობის მოთხოვნიდან გამომდინარე $C_{\infty 2} = 0$ და ამიტომ გვექნება

$$R_\infty = C_{\infty 1} \cdot e^{-kr} . \quad (12.27)$$

რაც შეეხება ტალღური ფუნქციის $r = 0$ -თან სიახლოვეში ყოფაქცევას, ის (12.24) განტოლების სწორედ იმ წევრებით განისაზღვრება, რომელიც წინა შემთხვევაში გადავადეთ. თუ დავუშვებთ, რომ $l > 0$ და (12.24)-ის კვადრატულ ფრჩხილებში დავიტოვებთ მხოლოდ ცენტრგამზიდ წევრს, მივიღებთ

$$R_0'' + \frac{2}{r} R_0' - \frac{l(l+1)}{r^2} R_0 = 0 \quad (12.28)$$

ამ უკანასკნელი განტოლების ამონახსნს ვეძებთ ხარისხოვანი ფუნქციის სახით

$$R_0 = Cr^\mu \quad (12.29)$$

(12.29)-ის (12.28)-ში შეტანის შემდეგ ვღებულობთ μ -ს მიმართ კვადრატულ განტოლებას

$$\mu(\mu + 1) = l(l + 1)$$

რომელსაც აქვს ორი ფესვი

$$\mu_1 = l, \quad \mu_2 = -(l + 1) .$$

ამრიგად, (12.24) განტოლების ზოგად ამონახსნს $r = 0$ -თან სიახლოვეში აქვს სახე

$$R_0 = C_{01} \cdot r^l + C_{02} \cdot r^{-(l+1)}$$

ანალოგიურად, ტალღური ფუნქციის სასრულობის მოთხოვნიდან გამომდინარე $C_{02} = 0$ და საბოლოოდ გვექნება

$$R_0 = C_{01} r^l . \quad (12.30)$$

როცა $l = 0$ მაშინ $R_0 = \text{const}$.

ახლა მოვწახოთ (12.24) განტოლების ამონახსნი რადიალური კოორდინატის ცვლილების მთელს დიაპაზონში, რისთვისაც ამონახსნი ვეძებთ შემდეგი სახით

$$R(r) = R_0(r) \cdot f(r) \cdot R_\infty(r) = r^l \cdot f(r) \cdot e^{-kr} \quad (12.31)$$

შევნიშნოთ, რომ C_{01} და $C_{\infty 1}$ მუდმივები ახლა უკვე $f(r)$ საძიებელ ფუნქციაშია გაერთიანებული. ეს ფუნქცია ვეძებთ შემდეგი ხარისხოვანი მწკრივის სახით

$$f(r) = \sum_v A_v r^v \quad (12.32)$$

ანუ

$$R(r) = e^{-kr} \sum_v A_v r^{v+l}. \quad (12.33)$$

(12.20) გარდაქმნის გათვალისწინებით ანალოგიური გაშლა შეიძლება მივიღოთ $\chi(r)$ ფუნქციისათვის

$$\chi(r) = e^{-kr} \sum_v A_v r^{v+l+1} \quad (12.34)$$

და

$$\Delta_r R = \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d\chi}{dr} \right) = \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} (r\chi' - P) = \frac{\chi''}{r}$$

ტოლობის გათვალისწინებით (12.18)-დან გაშლის A_v კოეფიციენტებისათვის მივიღებთ განტოლებათა უსასრულო სისტემას

$$\begin{aligned} \sum_v (v+l+1)(v+l) A_v r^{v+l-1} - 2k \cdot \sum_v (v+l+1) A_v r^{v+l} + \\ + b \cdot \sum_v A_v r^{v+l} - l(l+1) \cdot \sum_v A_v r^{v+l-1} = 0. \end{aligned} \quad (12.35)$$

რადგანაც ამ უკანასკნელ გამოსახულებაში აჯამვა უსასრულობამდე ვრცელდება, შესაძლებელია (12.35) გამოსახულების პირველ და უკანასკნელ ჯამში აჯამვის ინდექსი ერთით გავზარდოთ და შემდგომ ფრჩხილებს გარეთ გავიტანოთ r^{v+l} მამრავლი, რის შედეგადაც მივიღებთ

$$\begin{aligned} \sum_v \{ [(v+l+2)(v+l+1) - l(l+1)] A_{v+1} - \\ - [2k(v+l+1) - b] A_v \} r^{v+l} = 0 \end{aligned} \quad (12.36)$$

რამდენადაც ეს უკანასკნელი ტოლობა ნებისმიერი r -თვის უნდა სრულდებოდეს, ამიტომ საჭიროა მოვითხოვოთ r^{v+l} -ის წინ მდგომი კოეფიციენტების ნულთან ტო-

ლობა. ეს კი თავის მხრივ გვაძლევს A_v კოეფიციენტების გამოსათვლელ რეკურენტულ ფორმულას

$$\frac{A_{v+1}}{A_v} = \frac{2k(v+l+1)-b}{(v+l+1)(v+l+2)-l(l+1)}. \quad (12.37)$$

A_0 -ის მნიშვნელობის მიცემით (16.37) ფორმულით შესაძლებელია (12.33) გამოსათვლელ ნებისმიერი კოეფიციენტის პოვნა.

ვაჩვენოთ ახლა, რომ $R(r)$ ფუნქციის სასრულობის მოთხოვნას აკმაყოფილებს მხოლოდ (12.32) გამოსახულებაში სასრული წევრების დატოვება და არა უსასრულო მწკრივი. ამისათვის საჭიროა მხოლოდ ვაჩვენოთ, რომ (12.32) მწკრივი უფრო განშლადია ვიდრე e^{kr} . მართლაც, (12.37) გამოსახულება v -ს უსასრულოდ გაზრდის შემთხვევაში მიისწრაფვის

$$\frac{A_{v+1}}{A_v} \xrightarrow{v \rightarrow \infty} \frac{2k}{v}. \quad (12.38)$$

ექსპონენტის გამოსათვის კი გვაქვს

$$e^{kr} = \sum_{v=0}^{\infty} \frac{1}{v!} (kr)^v = \sum_v B_v r^v, \quad B_v = \frac{k^v}{v!} \quad (12.39)$$

და კოეფიციენტების შეფარდებისთვის მივიღებთ

$$\frac{B_{v+1}}{B_v} = \frac{k}{v+1} \xrightarrow{v \rightarrow \infty} \frac{k}{v} \quad (12.40)$$

(12.38) და (12.40) გამოსახულებების შედარებით ვასკვნით, რომ $R(r)$ ფუნქცია არ მიისწრაფვის ნულისკენ ბირთვიდან უსასრულოდ დაშორების შემთხვევაში. ფიზიკური აზრი აქვს მხოლოდ სასრული მწკრივის სახით ჩანერილ (12.24) განტოლების ამონახსნს. სასრულ მწკრივში არსებობს ისეთი $v = n_r$ ნომერი, რომლის შემდეგაც

$$A_{n_r} \neq 0, \quad A_{n_r+1} = 0. \quad (12.41)$$

n_r -ს ეწოდება რადიალური კვანტური რიცხვი. (12.37)-ის თანახმად ამონახსნი არსებობს მხოლოდ მაშინ, როცა $2k(n_r+l+1)-b=0$. ამრიგად, ელექტრონის ტალღური რიცხვი იკვანტება $k = k_n = \frac{b}{2n}$: მისი მნიშვნელობები განისაზღვრება

$$n = n_r + l + 1, \quad (12.42)$$

მთელი მნიშვნელობებით, რომელსაც მთვარი კვანტური რიცხვი ეწოდება. თუ ახლა გავიხსენებთ (7.10) ფორმულას და მასში შევიტანთ k_n -ის მნიშვნელობებს, საბოლოოდ წყალბადის ატომში ელექტრონის ენერჯისათვის მივიღებთ

$$E = E_n = -\frac{(\hbar k_n)^2}{2m} = -\frac{1}{2m} \left(\frac{Z\hbar}{na_0} \right)^2 = -\frac{Z^2}{n^2} \frac{me^4}{2\hbar^2} \quad (12.43)$$

ეს უკანასკნელი ფორმულა გვაძლევს ჩვენი ამოცანის საძიებელ საკუთარ მნიშვნელობებს.

საკუთარი ფუნქციები დამოკიდებულია სამ (r, θ, φ) კოორდინატზე და სამ (n, l, m) კვანტურ რიცხვზე

$$\Psi_{n,l,m}(r, \theta, \varphi) = R_{nl}(r) \cdot Y_{lm}(\theta, \varphi), \quad (12.44)$$

სადაც Y_{lm} – ტალღური ფუნქციის კუთხური ნაწილია, ხოლო R_{nl} – რადიალური მამრავლი

$$R_{nl}(r) = \exp(-k_n r) \cdot r^l \cdot \sum_{\nu=0}^{n-l-1} A_{\nu}^{(n)} r^{\nu} \quad (12.45)$$

აქ ჯამის კოეფიციენტები ერთმანეთთან შემდეგი რეკურენტული თანაფარდობით არიან დაკავშირებულნი

$$\frac{A_{\nu+1}^{(n)}}{A_{\nu}^{(n)}} = 2k_n \frac{\nu - n_r}{(\nu + l + 1)(\nu + l + 2) - l(l + 1)} \quad (12.46)$$

საიდანაც ვხედავთ, რომ რადგანაც $\nu \leq n_r$ -ზე (12.45) მწკრივი ნიშანმონაცვლეა.

(12.42) ფორმულიდან ნათელია, რომ $l \leq l_{\max} = n - 1$. მეორე მხრივ კუთხური მომენტის დაკვანტვის თეორიიდან ცნობილია, რომ $l \geq 0$. გამოდის რომ l -ის ცვლილების დიაპაზონია

$$l = 0, 1, 2, \dots, n - 1. \quad (12.47)$$

(12.42) ფორმულიდან ასევე ნათელია, რომ $n_{\min} = 1$, ანუ

$$n = 1, 2, 3, \dots \quad (12.48)$$

აღსანიშნავია, რომ ენერჯიის (12.43) გამოსახულებაში არ გვაქვს ცხადი სახით l -ზე დამოკიდებულება, მიუხედავად იმისა, რომ (12.24) შრედინგერის განტოლება l -ს შეიცავს. ეს ფაქტი წარმოადგენს კულონური პოტენციალის განსაკუთრებულად მაღალი ხარისხის სიმეტრიის შედეგს, უფრო მაღალი ვიდრე უბრალოდ ცენტრალური სიმეტრიის შემთხვევაში გვაქვს. საზოგადოდ, ცენტრალური სიმეტრიის ველის შემთხვევაში ენერჯია l -ზე დამოკიდებულია. არსებობს აღნიშვნების სპეციალური სისტემა l ორბიტალური მომენტის მქონე მდგომარეობის დასახასიათებლად.

მოცემული l -ის მქონე მდგომარეობების აღნიშვნები

მნიშვნელობა l	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
აღნიშვნა	s	p	d	f	g	h	i	k	l	m	n

ტალღური ფუნქციის ნორმირება და ელექტრონის აღმოჩენის ალბათობა

მოვითხოვთ (12.44) ფორმულით განსაზღვრული ტალღური ფუნქციის ნორმირებისათვის შემდეგი პირობა

$$\int |\Psi_{nlm}(r, \theta, \varphi)|^2 d\mathbf{r} = 1, \quad (12.48)$$

რაც, თავის მხრივ, ტალღური ფუნქციის რადიალური და კუთხური ნაწილების ნორმირებისათვის იძლევა პირობებს

$$\int_0^\infty R_{nl}^2 r^2 dr = 1, \quad \int_{4\pi} |Y_{lm}(\theta, \varphi)|^2 \sin \theta d\theta d\varphi = 1. \quad (12.49)$$

ცნობისათვის მოვიყვანოთ (16.49) პირობით ნორმირებული რადიალური ტალღური ფუნქციის გამოსახულება ლაგერის განზოგადებული პოლინომების გამოყენებით

$$R_{nl}(r) = -\frac{(n-l-1)!}{\sqrt{[(n+l)!]^3} 2n} (2k_n)^{3/2} e^{-k_n r} (2k_n r)^l L_{n+l}^{2l+1}(2k_n r), \quad (12.50)$$

$$L_n^m(x) = (-1)^m \frac{n!}{(n-m)!} e^x \cdot x^{-m} \frac{d^{n-m}}{dx^{n-m}} (e^{-x} x^n).$$

ასევე შესაძლებელია რადიალური ფუნქციების ჩანერა გადაგვარებული ჰიპერგეომეტრიული მწკრივის გამოყენებითაც

$$R_{nl}(r) = \frac{1}{(2l+1)! \sqrt{(n-l-1)!} 2n} (2k_n)^{3/2} \exp(-k_n r) (2k_n r)^l \times \times F(-n_r, 2l+2, 2k_n r). \quad (12.51)$$

სადაც

$$F(\alpha, \beta, z) = 1 + \frac{\alpha z}{\beta 1!} + \frac{\alpha(\alpha+1) z^2}{\beta(\beta+1) 2!} + \frac{\alpha(\alpha+1)(\alpha+2) z^3}{\beta(\beta+1)(\beta+2) 3!} + \dots$$

გადაგვარებული ჰიპერგეომეტრიული ფუნქციაა, რომელიც კრებადია ნებისმიერი სასრული z -სთვის; α პარამეტრი ნებისმიერია, ხოლო β კი არ უნდა უდრიდეს ნულს ან მთელ უარყოფით რიცხვს. თუ α უდრის ნულს ან მთელ უარყოფით რიცხვს, მაშინ $F(\alpha, \beta, z)$ $|\alpha|$ -ს რიგის პოლინომზე დაიყვანება.

ლიტერატურაში შეიძლება შეგვხვდეს (12.50) ფუნქციისგან ერთის ტოლი მოდულის მქონე კომპლექსური მუდმივით განსხვავებული გამოსახულებებიც. ეს განსხვავება მნიშვნელოვანი არ არის, რადგანაც ფიზიკური აზრი მხოლოდ ტალღური ფუნქციის მოდულის კვადრატს აქვს და არა თვით ტალღურ ფუნქციას. შევნიშნოთ, რომ (12.50) ფუნქციას $m^{-d/2}$ განზომილება აქვს, სადაც d ამოცანის განზომილებაა. ჩვენს შემთხვევაში განზომილება განისაზღვრება $(2k_n)^{3/2}$ მამრავლით. დანარჩენი თანამამრავლები უგანზომილებოებია $Y_{l,m}$ ფუნქციების ჩათვლით.

შევვცადოთ ვიპოვოთ სივრცის ერთეულოვან მოცულობაში ელექტრონის აღმოჩენის ალბათობა. იგი შემდეგნაირად განიმარტება

$$W(r, \theta, \varphi) d\mathbf{r} = R_{nl}^2 r^2 dr |Y_{lm}|^2 d\Omega . \quad (12.52)$$

ამ გამოსახულების კუთხეებით ინტეგრაციის შემდეგ მივიღებთ r და $r + dr$ რადიუსების სფეროებს შორის არსებულ სფერულ შრეში ელექტრონის აღმოჩენის ალბათობას

$$W_{nl}(r) dr = R_{nl}^2 r^2 dr .$$

განვიხილოთ სფერული ორბიტები, ანუ ისეთი შემთხვევები, როდესაც $n_r = 0$, $l = n - 1$ და რადიალურ ფუნქციას კვანძები არ გააჩნიათ

$$R_{n,n-1} \sim \exp(-k_n \cdot r) \cdot r^{n-1} .$$

მას შეესაბამება ალბათობა

$$W_{n,n-1} \sim \exp(-2k_n r) \cdot r^{2n} ,$$

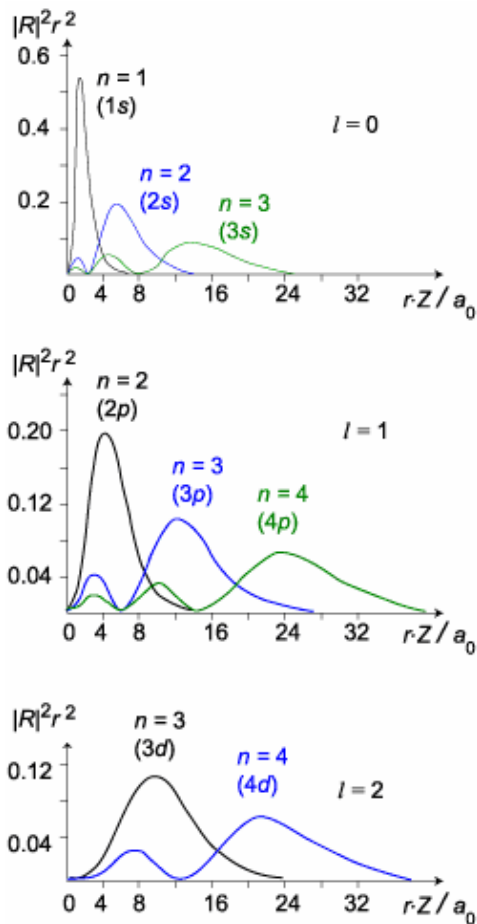
რომლის მაქსიმუმიც მოდის $r_n = \frac{n}{k_n}$ მანძილებზე. თუ ახლა ამ გამოსახულებაში

შევიტანთ k_n -ის მნიშვნელობებს განსაზღვრულს (12.43)-ის მესამე და მეოთხე ტოლობებიდან მივიღებთ

$$r_n = \frac{n^2}{Z} a_0 \quad (12.53)$$

მიღებული გამოსახულება წარმოადგენს n -რი ორბიტის ბორის რადიუსს. ნახაზ 12.2-ზე ნაჩვენებია ცალკეული კვანტური მდგომარეობებისთვის $W(r)$ ალბათობის პროფილები. გრაფიკის აბსცისთა ღერძთან შეხების წერტილები განსაზღვრავს კვანძების რაოდენობებს. როგორც გრაფიკებიდან ჩანს $1s$, $2p$ და $3d$ მდგომარეობებისთვის, სადაც არ გვაქვს ოსცილაციები, შესამჩნევია ელექტრონის ბირთვიდან დაშორება კუთხური მომენტის ზრდასთან ერთად. ამრიგად, კვანტური მექანიკის „რეცეპტების“ გამოყენებით გამოთვლილი წყალბადის ატომის ენერგეტიკული სპექტრი ემთხვევა ბორის პოსტულატებზე დაყრდნობით მიღებულ ენერჯის მნიშვნე-

ლობებს. პრინციპულად ახალი არის ტალღური ფუნქციის ცნების შემოტანა, რისი დახმარებითაც სისტემის მახასიათებელი ნებისმიერი ფიზიკური სიდიდის საშუალოს გამოთვლა არის შესაძლებელი.



ნახ. 12.2. ალბათობის სიმკვრივის რადიალური განაწილება

თავი 13

წყალბადის ატომის სპექტრის ფაქიზი და გეფაქიზი სტუქტურა. სპინ-ორბიტალური ურთიერთქმედება

წყალბადის ატომის პრობლემა არ ამოიწურება მე-12 თავში აღწერილი კულონური ველის მოდელის განხილვით. სხვადასხვა ფიზიკური ფაქტორების გათვალისწინებას მივდივართ ორბიტალური კვანტური რიცხვით გადაგვარების მოხსნამდე. ამ თავში განიხილება ორი მათგანი: სპინ-ორბიტალური ურთიერთქმედება და მოძრავი ელექტრონის მასის გაზრდა. პირველი პროცესის გათვალისწინებისათვის აუცილებელია ელექტრონის შინაგანი მაგნიტური მომენტის და მასთან მჭიდროდ დაკავშირებული ელექტრონის საკუთარი მექანიკური მომენტის, ანუ სპინის ცნების შემოტანა.

მაგნიტომექანიკური მოვლენები

კლასიკური გაგებით ჩაკეტილ ორბიტაზე მოძრავი q მუხტის მქონე ნაწილაკი ელექტრული დენის მსგავსად გარემომცველ სივრცეში აღძრავს მაგნიტურ ველს, რომელიც ეკვივალენტურია μ მაგნიტური მომენტის მქონე მაგნიტის მიერ შექმნილი ველისა

$$\mu = \frac{1}{c} \frac{q}{T} S \quad (13.1)$$

სადაც S – ელექტრონის ორბიტის მიერ შემოსაზღვრული ფართობია, ხოლო T – ელექტრონის ორბიტაზე მიმოქცევის პერიოდი. თუ სიმარტივისათვის დავუშვებთ, რომ ორბიტა წრიულია, მაშინ მივიღებთ

$$\mu = \frac{q\pi r^2}{cT} = \frac{qrv}{cT}, \quad (13.2)$$

სადაც v ნაწილაკის ორბიტაზე მოძრაობის სიჩქარეა, ხოლო r – ორბიტის რადიუსი. ახლა თუ გავითვალისწინებთ, რომ $M = m_q v r$, სადაც M და m_q შესაბამისად ნაწილაკის მექანიკური მომენტი და მასაა, მივიღებთ

$$\mu = \frac{q}{2m_q c} M. \quad (13.3)$$

სიდიდეს $\gamma_q = \frac{\mu}{M} = \frac{e}{2m_q c}$ გირომაგნიტური თანაფარდობა ეწოდება. თუ იმასაც გავითვალისწინებთ, რომ ატომის შემთხვევაში (13.3) ფორმულაში q ელექტრონის

მუხტს აღნიშნავს და იგი უარყოფითია ელექტრონისათვის სამართლიანი იქნება ტოლობა

$$\bar{\mu} = -\frac{e}{2m_e c} \bar{M} , \quad (13.4)$$

ანუ ელექტრონის ორბიტალური მექანიკური და მაგნიტური მომენტები ურთიერთსაპირისპიროდ მიმართული ვექტორებია.

როგორც ცნობილია, კვანტურ მექანიკაში ოპერატორებს შორის თანაფარდობა ისეთივეა როგორც თვით ამ ოპერატორების შესაბამის ფიზიკურ სიდიდეებს შორის კლასიკურ მექანიკაში. ამიტომ შეგვიძლია დავწეროთ

$$\hat{\mu} = -\frac{e}{2m_e c} \hat{M}, \quad (13.5)$$

თუ ახლა გავითვალისწინებთ (9.1) და (9.18) ფორმულებს, მაშინ ელექტრონის ორბიტალური მაგნიტური მომენტისა და მისი Z პროექციის საკუთარი მნიშვნელობებისათვის ადვილად მივიღებთ

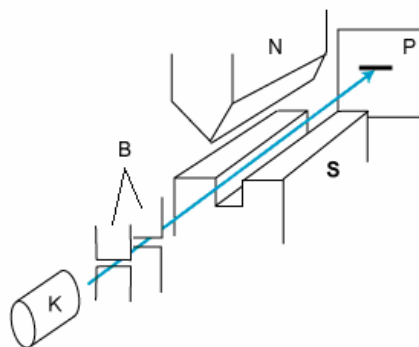
$$\mu = \mu_0 \sqrt{l(l+1)}, \quad \mu_z = \mu_0 m \quad (13.6)$$

სადაც $\mu_0 = \frac{e\hbar}{2m_e c}$ -ს ეწოდება ბორის ატომური მაგნეტონი. (13.6)-ის მეორე ფორმულაში ნიშანს მნიშვნელობა აღარ აქვს რამდენადაც (9.13)-ის თანახმად m ლეზულობს როგორც დადებით, ასევე უარყოფით მნიშვნელობებს. ამრიგად, ელექტრონის სტაციონალური ორბიტის შესაბამისი მაგნიტური მომენტი ბორის ატომური მაგნეტონის ჯერადაა. შესაბამისად $\bar{\mu}$ -ს პროექციას გარეშე ერთგვაროვანი მაგნიტური ველის მიმართულებაზე თანახმად (9.13) -სა შეუძლია მიიღოს $2l+1$ მნიშვნელობა.

შტერნისა და გერლახის ცდა

ამ ცდამ დიდი როლი ითამაშა ატომური ფიზიკის შემდგომი განვითარების საქმეში. ცდაში შტერნი და გერლახი აკვირდებოდნენ არაერთგვაროვან მაგნიტურ ველში გავლისას ატომური ნაკადების გადახრის მოვლენას. ამ ცდის სქემა ნახაზ (13.1)-ზეა ნაჩვენები.

მაღალი ვაკუუმის მქონე ჭურჭელში K გამახურებლიდან ამოიტ-



ნახ. 13.1. შტერნისა და გერლახის ცდის სქემა.

ყორცნებიან რაიმე ქიმიური ელემენტის ატომები. \mathbf{B} დიაფრაგმების საშუალებით იქმნება ამ ატომთა მკვეთრად შეზღუდული ნაკადი, რომელიც \mathbf{P} ფოტოფირზე მოხვედრამდე გაივლის \mathbf{N} და \mathbf{S} პოლუსებიანი მაგნიტის მიერ შექმნილ არაერთგვაროვან მაგნიტურ ველში. მაგნიტური ველის მხრიდან ატომთა ნაკადზე მოქმედი ძალა ტოლია

$$\vec{F} = -\vec{\nabla}U = -\vec{\nabla}(\vec{\mu} \cdot \vec{H}) \quad (13.7)$$

სადაც \vec{H} მაგნიტური ველის დაძაბულობის ვექტორია. რამდენადაც (13.7)-ით განსაზღვრული ძალის მნიშვნელობა \vec{H} და $\vec{\mu}$ ვექტორებს შორის კუთხეზეა დამოკიდებული, ამდენად მოსალოდნელია ატომთა სანყისი ნაკადის გახლეჩა $2l+1$ კომპონენტად. შტერნისა და გერლახის ცდაში მართლაც დაიმზირებოდა ატომთა ნაკადის გახლეჩა, რითაც დადასტურდა კუთხური მომენტის კვანტური ბუნების არსებობა. აღსანიშნავია, რომ წყალბადის ატომებისა და ტუტე მეტალთა ატომებისათვის, აგრეთვე ოქროსა და ვერცხლის ატომთა ნაკადებისათვის რომელთა ორბიტალური მომენტი ნულის ტოლია, დაიმზირებოდა ნაკადის ორ ნაწილად გაყოფის ეფექტი. ამასთან ფოტოფირზე დატოვებულ კვალებს შორის მანძილი ორჯერ აღემატებოდა არანულოვანი მომენტის მქონე გახლეჩილ ატომთა ნაკადის მიერ დატოვებულ კვალებს შორის მანძილებს (იხილეთ ნახაზი 13.2).



ნახ. 13.2. ნაკადის გახლეჩის ორი ვარიანტი:
მარცხნივ – $l=2$, მარჯვნივ – $l=0$

როგორც ნახ.13.2-დან ჩანს $l=2$ შემთხვევაში ნაკადი ხუთ ნაწილად გაიხლიჩება (რაც შეესაბამება $2 \cdot 2 + 1 = 5$ -ს), ხოლო $l=0$ შემთხვევაში კი ნაკადი ორად გაიხლიჩება, ამასთან მაგნიტური ველის იგივე მნიშვნელობისათვის გახლეჩის სიდიდე წინა შემთხვევაზე ორჯერ უფრო მეტია.

ელექტრონის საკუთარი მექანიკური მომენტი

მომენტის პროექციის ლუწი რაოდენობა მიიღება მხოლოდ მაშინ, როდესაც თვით მომენტის აბსოლუტური მნიშვნელობა ნახევრის ჯერადი სიდიდეა. 1925 წელს ულენბეკმა და გაულსმიტმა შემოგვთავაზეს ელექტრონის შინაგანი საკუთარი მაგნიტური მომენტის, ანუ სპინის ჰიპოთეზა. თუ ელექტრონის ორბიტალური მომენტის შესაბამის \mathbf{l} ვექტორის მსგავსად შემოვიტანთ ელექტრონის საკუთარი მექანიკური მომენტის აღმწერ უგანზომილებო \mathbf{s} ვექტორს, მაშინ ცხადია, რომ ამ ვექტორის აბსოლუტური მნიშვნელობები ნულის ჩათვლით მთელი დადებითი ან მთელის ჯერადი დადებითი რიცხვები იქნება

$$s = 0, 1/2, 1, 3/2, 2, 5/2, 3, \dots \quad (13.8)$$

s -ისა და l -ის მთელ მნიშვნელობებს შეესაბამება პროექციების კენტი რაოდენობა, რომელთა შორის აუცილებლად არსებობს ნულის ტოლი კომპონენტი. ნახევრის ჯერადი სპინის შემთხვევაში პროექციების რაოდენობა გამოდის ლუწი და შესაბამისად არ გვაქვს ნულოვანი კომპონენტი. ამრიგად ზემოჩამოთვლილი ატომებისათვის შტერნისა და გერლახის ცდის შედეგი აიხსნება იმ დაშვებით, რომ $s=1/2$.

ელექტრონის სპინისათვის გირომაგნიტური თანაფარდობა ორჯერ მეტია ორბიტალურთან შედარებით

$$\mu = -2\mu_0 s. \quad (13.9)$$

სპინი წარმოადგენს ელექტრონის მასასა და მუხტთან ერთად მის ახალ მახასიათებელ სიდიდეს. სპინი წარმოადგენს უფრო ფუნდამენტურ სიდიდეს, ვიდრე ელექტრონის ორბიტალური მომენტი, რომელსაც, ექსპერიმენტის პირობებიდან გამომდინარე, შეუძლია მიიღოს სხვადასხვა მნიშვნელობები. ნებისმიერი ნაწილაკის სპინი კი ყოველთვის ინარჩუნებს თავის მნიშვნელობას და იცვლება მხოლოდ სივრცეში გამოყოფილ მიმართულებაზე მისი პროექცია.

ამრიგად ელექტრონის შინაგანი მექანიკური მომენტი უგანზომილებო s ვექტორის საშუალებით შემდეგნაირად გამოსახება

$$\mathbf{M} = \hbar \mathbf{s}, \quad (13.10)$$

რომლის მოდულის კვადრატი

$$|\mathbf{s}|^2 = s(s+1), \quad (13.11)$$

ხოლო პროექციებისათვის კი გვექნება

$$s_z = -1/2, 1/2. \quad (13.12)$$

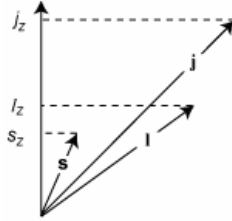
ორბიტალური მომენტისაგან განსხვავებით, ნებისმიერი ნაწილაკის და, შესაბამისად, ნაწილაკთა სისტემის სპინი შემოსაზღვრული სიდიდეა. ეს შემდეგნაირად უნდა გავიგოთ: ელექტრონის ორბიტალური მომენტი პრინციპში არ არის შემოსაზღვრული სიდიდე. ამიტომ კლასიკურ არეში გადასვლისას, ანუ როდესაც ორბიტალური მომენტის შესაბამისი კვანტური რიცხვი $l \gg 1$, სპინური კვანტური რიცხვი s , l -თან შედარებით მცირე სიდიდედ შეიძლება ჩაითვალოს. ამ გაგებით შეიძლება ითქვას, რომ კლასიკურ ზღვარში, როცა $l \gg 1$ სპინი, ისევე როგორც პლანკის მუდმივა, ნულისკენ მიისწრაფვის. ამრიგად, სპინი წარმოადგენს მხოლოდ წმინდა კვანტურ ცნებას და მას კლასიკური ანალოგია არ გააჩნია.

ელექტრონის სრული მექანიკური მომენტი

ელექტრონის l ორბიტალური და s სპინური მომენტები იკრიბება ელექტრონის j სრულ მექანიკურ მომენტად

$$\mathbf{j} = \mathbf{l} + \mathbf{s}. \quad (13.13)$$

მოცემული l -ისა და s -თვის j -ის შესაძლო მნიშვნელობები მომენტთა შეკრების წესით განისაზღვრება. j -ის პროექცია კი l -ისა და s -ის პროექციების ჯამის ტოლია $j_z = l_z + s_z$.



ნახ. 13.3. მომენტთა და პროექციათა შეკრების წესი

ჩვენს მიერ მე-9 თავში შემოყვანილი m ორბიტალური მომენტის პროექციის კვანტური რიცხვის გარდა ახლა უკვე დამატებით გავიჩინებთ სპინის პროექციისა და სრული მექანიკური მომენტის პროექციის კვანტური რიცხვები ანუ სულ გვექნება სამი ვექტორის პროექციების შესაბამისი კვანტური რიცხვები

$$m_l = -l, -l+1, -l+2, \dots, -1, 0, 1, \dots, l-2, l-1, l, \quad (13.14)$$

$$m_s = -s, -s+1, -s+2, \dots, s-2, s-1, s, \quad (13.15)$$

$$m_j = -j, -j+1, -j+2, \dots, j-2, j-1, j. \quad (13.16)$$

ოთხი კვანტური რიცხვი: n, l, s, j ცალსახად განსაზღვრავენ ატომში ელექტრონის მდგომარეობას, ანუ ატომის ენერგეტიკულ დონეებს. ახლა ვიპოვოთ j -ს შესაძლო მნიშვნელობები. განვიხილოთ ჯერ $l=0$ შემთხვევა. ამ შემთხვევაში სრული მომენტის მნიშვნელობა ემთხვევა სპინის მნიშვნელობას, ხოლო პროექციების მნიშვნელობები ცხადია იმეორებს სპინის პროექციებს $j_z = \pm 1/2, j = 1/2$. ახლა განვიხილოთ შემთხვევა როცა $l > 0$, ანუ როცა ორბიტალური მომენტი სპინურზე მეტია. ამ შემთხვევაში j -სთვის ცალსახა მნიშვნელობები არ მიიღება. მართლაც, გამომდინარე იქიდან, რომ l -ისა და s -ის მაქსიმალური პროექციები შესაბამისად იქნება $l_z = l$ და $m_s = 1/2$ j -სთვის მაქსიმალური მნიშვნელობა იქნება $j = l+1/2$. მაგრამ ამ მნიშვნელობისათვის პროექციათა რაოდენობა $2l+2$ -ის ტოლია, მაშინ როდესაც ორბიტალურ და სპინურ მომენტებს შეუძლიათ შექმნან $2(2l+1)$ პროექციების წყვილი. ეს კი ნიშნავს, რომ $2l$ პროექციების რაოდენობას უნდა შეესაბამებოდეს j -ს სხვა მნიშვნელობა. ადვილად მიხვდებით, რომ ეს მნიშვნელობაა $j = l-1/2$. ამრიგად, $l \geq 1$ შემთხვევისათვის ყოველთვის იარსებებს j -ს მინიმუმ ორი სხვადასხვა მნიშვნელობა $j = l \pm 1/2$, ანუ ატომს გააჩნია მინიმუმ ორი დონე.

ჩვენ ვაჩვენეთ, რომ $s=1/2$ შემთხვევაში, როცა $l \geq s$, მდგომარეობას მოცემული l -ით აქვს $2s+1$ დონე. სიდიდეს $2s+1$ ეწოდება მულტიპლეტობა. ჩვენ ასევე დავ-

რწმუნდით, რომ $l < s$ შემთხვევაში დონეების რიცხვი არ უდრის $2s+1$ -ს. დონეების დასახასიათებლად შემოჰყავთ შემდეგი აღნიშვნა n^{2s+1} სიმბოლო l_j . მაშინ ამ აღნიშვნებში შესაბამისი დონეები ასე ჩაინერება $n^2p_{1/2}$, $n^2p_{3/2}$, $n^2d_{3/2}$, $n^2d_{5/2}$, $n^2f_{5/2}$, $n^2f_{7/2}$ ა.შ. ამ აღნიშვნებში სიმბოლოს ზედა მარცხენა კუთხეში ყოველთვის $2s+1$ მულტიპლეთობა იწერება.

სპინ-ორბიტალური ურთიერთქმედება

თუ დავაკვირდებით (13.7) ფორმულას ადვილად დავინახავთ, რომ $\vec{\mu}$ მაგნიტური მომენტსა და \vec{H} მაგნიტურ ველს შორის ურთიერთქმედების პოტენციური ენერგია შემდეგნაირად გამოისახება

$$V = -(\vec{\mu} \cdot \vec{H}). \quad (13.17)$$

აქ \vec{H} მაგნიტური ველი აღიძვრება ბირთვის ელექტროსტატიკურ ველში მოძრავ ელექტრონთან დაკავშირებულ ათვლის სისტემაში. თუ ელექტრონის მოძრაობის v სიჩქარე ისეთია, რომ $v/c \ll 1$ მაშინ სამართლიანია ფორმულა

$$\vec{H} = \frac{1}{c} [\vec{E} \times \vec{v}]. \quad (13.18)$$

სადაც \vec{E} ლაბორატორიულ სისტემაში ბირთვის მიერ შექმნილი ელექტრული ველის დაძაბულობის ვექტორია

$$\vec{E} = \frac{Ze}{r^3} \vec{r}. \quad (13.19)$$

შევიტანოთ (13.19) და (13.18) (13.17)-ში და მივიღებთ

$$V = -\frac{Ze^2}{cr^3} (\vec{\mu} [\vec{r} \times \vec{v}]). \quad (13.20)$$

ამ უკანასკნელ ფორმულის მარჯვენა მხარის მრიცხველისა და მნიშვნელის ელექტრონის მასაზე გამრავლების და (13.10)-ის გათვალისწინებით შეიძლება დავწეროთ

$$V = -\frac{Ze^2}{m_e cr^3} (\vec{\mu} \cdot \vec{M}) = -\frac{Ze^2 \hbar}{m_e cr^3} (\vec{\mu} \cdot \vec{l}) = \frac{2\mu_0 Ze \hbar}{m_e cr^3} (\vec{s} \cdot \vec{l}). \quad (13.21)$$

თუ ახლა (13.21) ფორმულაში r -ის ნაცვლად შევიტანთ (10.16) ფორმულით განსაზღვრულ მნიშვნელობას და უგულებელვყოფთ ელექტრონის მასასა და ბირთვისა და ელექტრონის დაყვანილ მასას შორის განსხვავებას, მივიღებთ

$$V \sim \frac{Ze^2 \hbar^2}{m_e^2 c^2} \left(\frac{Zm_e^2}{n^2 \hbar^2} \right)^3 \sim \alpha^2 \frac{Z^4}{n^6} \text{Ry}. \quad (13.22)$$

მიღებული (13.22) ფორმულის (10.26)-თან შედარება გვიჩვენებს, რომ სპინ-ორბიტალური ურთიერთქმედება, ისევე როგორც ელექტრონის მასის სიჩქარეზე და მოკიდებულება, ორივე ეს ფაქტორი ერთნაირად არიან დამოკიდებულნი α -ზე და Z -ზე. შესაბამისად ორივე ეს რელატივისტური ფაქტორი მკვეთრად მცირდება ატომის ალგზნებულ მდგომარეობაში გადასვლისას. აქ კლასიკური მექანიკის ფორმულები ძალზედ არაზუსტია და აუცილებელია კვანტურ-მექანიკური გამოთვლების ჩატარება.

კვანტურ მექანიკაში r -ის ხარისხის ნაცვლად საჭიროა შემოვიტანოთ სათანადო ოპერატორის კვანტურ-მექანიკური საშუალო

$$\frac{1}{r^3} \rightarrow \left\langle r^{-3} \right\rangle_{nl}. \quad (13.23)$$

შემდგომ გამოვსახოთ ცხადი სახით სპინ-ორბიტალური ურთიერთქმედების j -ზე დამოკიდებულება. ამისათვის (13.9) ფორმულა ავიყვანოთ კვადრატში და გავა-საშუალოთ. შედეგად ($\vec{l} \vec{s}$) სკალარული ნამრავლის საშუალოსათვის მივიღებთ

$$\langle \vec{l} \vec{s} \rangle = 1/2 \{ j(j+1) - l(l+1) - s(s+1) \}. \quad (13.24)$$

გამოყვანის გარეშე მოვიყვანოთ ΔE_{nl}^{sl} ენერჯის შესწორებისათვის ფორმულას

$$\Delta E_{nl}^{(sl)} = \langle U \rangle = \frac{1}{2} \frac{Ze^2 \hbar^2}{m_e^2 c^2} \left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle_{nl} \frac{1}{2} \{ j(j+1) - l(l+1) - s(s+1) \}. \quad (13.25)$$

ეს ფორმულა სამართლიანია წყალბადის ატომისა და წყალბადისმაგვარი იონისათვის. $\left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle_{nl}$ საშუალო (12.51) ფუნქციებით გამოთვლება. ამ ინტეგრალის აღება შესაძლებელია ანალიზურად (იხილეთ ლანდაუს „არარელატივისტური მექანიკა“)

$$\langle r^{-3} \rangle = \frac{1}{n^3 l(l + \frac{1}{2})(l+1)} \left(\frac{Z}{a_0} \right)^3 = \frac{1}{r_n^3} \frac{n^3}{l(l+1/2)(l+1)}. \quad (13.26)$$

შედეგად მივიღებთ

$$\Delta E_{nl}^{(sl)} = \alpha^2 \frac{j(j+1) - l(l+1) - 3/4}{2l(l+1)(l + \frac{1}{2})} \frac{Z^4}{n^3} \text{Ry}. \quad (13.27)$$

აქ გათვალისწინებულია, რომ $s(s+1) = 3/4$. ეს ფორმულა $l = 0$ -თვის არ გამოდგება, თუმცა (13.21)-ის თანახმად ამ შემთხვევაში სპინ-ორბიტალური ურთიერთქმედება ნულის ტოლია. ამრიგად სპინ-ორბიტალური ურთიერთქმედების გამო ატომის nl დონე ორ $j = l + 1/2$ და $j = l - 1/2$ კომპონენტებად გაიხლიჩება. ამ გახლეჩას ეწოდება ფაქიზი, ანუ მულტიპლეტური გახლეჩა. ის ნაწილობრივ ხსნის კულონურ გადაგვარებას.

ზეფაქიზი სტუქტურა

ელექტრონის მსგავსად ბირთვისაც გააჩნია მაგნიტური მომენტი. ბირთვის მაგნიტური მომენტის არსებობა უკავშირდება პროტონისა და ნეიტრონის ანომალურად დიდ მაგნიტური მომენტების არსებობას (იხილეთ დანართი). ეს კი, თავის მხრივ, პროტონებისა და ნეიტრონების კვარკული აგებულების სტუქტურით აიხსნება. ბირთვის მაგნიტური მომენტი ბირთვულ მაგნეტონების ერთეულებში გამოიხატება, რომელიც ასე აღინიშნება

$$\frac{e\hbar}{2m_p c} = \left(\frac{m_e}{m_p} \right) \mu_0 \quad (13.28)$$

სადაც m_p – პროტონის მასაა, ხოლო μ_0 – ბორის ატომური მაგნეტონი. ამ ერთეულებში პროტონის მაგნიტური მომენტი ტოლია

$$\vec{\mu}_p = g_l \vec{I} + g_s \vec{S}; \quad g_l = 1, \quad g_s = 5.58. \quad (13.29)$$

ბირთვის მაგნიტური მომენტი ასევე მოიცემა გირომაგნიტური თანაფარდობის საშუალებით

$$\vec{\mu} = g_l \vec{I} \quad (13.30)$$

სადაც l – ბირთვის სპინია. ბირთვის მაგნიტური მომენტის ქვეშ, როგორც წესი, იგულისხმება მაგნიტური ველის გასწვრივ $\vec{\mu}$ ვექტორის მაქსიმალური პროექცია

$$\mu = g_l I. \quad (13.31)$$

ელექტრონისა და ბირთვის მაგნიტური მომენტების ურთიერთქმედებას მივყავართ იქამდე, რომ იხატება ატომის სრული მომენტი, ანუ ჯამი

$$\vec{F} = \vec{I} + \vec{J} \quad (13.32)$$

და არა ცალკეული შესაკრები. შედეგად მოცემული \vec{J} მომენტის მქონე დონე გაიხლიჩება გარკვეული რაოდენობის ქვედონეებად, რომლებიც შეესაბამებიან ატომის სრული მომენტის გარკვეულ მნიშვნელობას. ამ გახლეჩას ეწოდება *ზეფაქიზი* გახლეჩა. ის გაცილებით ნაკლებია სპინ-ორბიტალურ გახლეჩაზე, რადგანაც გახლეჩა ელექტრონისა და პროტონის მასათა ფარდობის პროპორციულია.

თავი 14

წყალბადის ატომის დისკრეტულ დონეებს შორის გადასვლებით გამოწვეული გამოსხივება

კვანტურ მექანიკაში გამოსხივების ველის ძირითადი მახასიათებელი თავისებურებების ახსნა შესაძლებელია კლასიკური ელექტროდინამიკის კანონებთან ანალოგიის გამოყენებით. როგორც კლასიკური ელექტროდინამიკიდან არის ცნობილი ელექტრული და მაგნიტური ველის დაძაბულობის ვექტორები $\exp[i(\mathbf{kr} - \omega t)]$ ექპონენციალური მამრავლის პროპორციულია, სადაც გამოსხივების ω სიხშირე და ტალღური k ვექტორი ერთმანეთთან $\omega = kc$ თანაფარდობით არიან დაკავშირებული. შესაძლებელია ელექტრული და მაგნიტური ტიპის გამოსხივების მიღება, რომელთაგანაც თითოეულს გააჩნია ე.წ. დიპოლური, კვადრუპოლური, ოქტუპოლური და უფრო მაღალი სიმეტრიის მქონე მდგენელები, მაგრამ როგორც წესი გამოსხივების თეორია შემოისაზღვრება მხოლოდ დიპოლური და კვადრუპოლური წევრების განხილვით. მნიშვნელოვანია α ფაქტიზი სტუქტურის როლი გამოსხივების თეორიაში, რადგანაც მისი სიმცირე უზრუნველყოფს ადგენებულ მდგომარეობაში მყოფი ატომების სიცოცხლის მეტ ხანგრძლივობას ელექტრონის წრიულ ორბიტაზე კლასიკური მომოქცევის პერიოდთან შედარებით. ამიტომ გამოსხივებაში ძირითადად დიპოლური მდგენელი დომინირებს.

ელექტრული დიპოლური გამოსხივება

განვიხილოთ ელექტრული დიპოლი, რომელიც ასრულებს ჰარმონიულ რხევას. დავწეროთ დიპოლური მომენტი ელექტრონებისათვის, რადგანაც სწორედ ატომის ბირთვის მასასთან შედარებით მათი მცირე მასის გამო ისინი ატომში წონაწილის მახლობლად ასრულებენ ჰარმონიულ რხევებს

$$\vec{d} = -e\vec{r} \quad (14.1)$$

სადაც \vec{r} წონაწილური მდგომარეობიდან გადახრაა, რომელიც მონოქრომატურლი გამოსხივების შემთხვევაში ასე გამოსახება

$$\vec{r} = \vec{r}_0 \exp(-i\omega t) \cdot \quad (14.2)$$

როგორც კლასიკური ელექტროდინამიკიდან არის ცნობილი თუ გავითვალისწინებთ (14.1) და (14.2) ფორმულებს კლასიკური დიპოლის გამოსხივების სიმძლავრისთვის მივიღებთ

$$W = \frac{2}{3c^3} \left| \ddot{\vec{d}} \right|^2 = \frac{2}{3} \frac{e^2 \omega_{mn}^4}{c^3} r_0^2 \quad (14.3)$$

(აქ დიპოლური მომენტის ვექტორის თავზე თითოეული ნერტილი ამ ვექტორის დროით წარმოებულს აღნიშნავს, ხოლო $\omega_{mn} = (E_m - E_n)/\hbar$ ატომის დონეებს შორის გადასვლისას გამოსხივებულ სიხშირეს). თუ ახლა (14.3) ფორმულით გამოსახულ სიმძლავრეს გავყოფთ კვანტის $\hbar\omega_{mn}$ ენერგიაზე მივიღებთ ორ დონეს შორის დროის ერთეულში გადასვლის ალბათობას

$$A_{mn} = \frac{W}{\hbar\omega_{mn}} = \frac{2}{3} \frac{e^2 \omega_{mn}^3}{\hbar c^3} r_0^2, \quad (14.4)$$

ანუ დროის ერთეულში ატომის მიერ გამოსხივებული კვანტების რაოდენობას. (14.4) ფორმულა შემდეგნაირად ჩავწეროთ

$$A_{mn} = \frac{2}{3} \frac{e^2}{\hbar c} \omega_{mn} \frac{\omega_{mn}^2}{c^2} r_0^2 = \alpha \omega_{mn} (k_{mn} r_0)^2 \quad (14.5)$$

თუ ახლა (14.5) ფორმულაში სიხშირეს წყალბადისამაგვარი იონის დონის ენერგიით გამოვსახავთ, ხოლო ორბიტის რადიუსს ბორის თეორიის თანახმად წყალბადისამაგვარი იონის ან წყალბადის ატომის ზომას გავუტოლებთ მივიღებთ

$$k_{mn} r_0 = k_{mn} a_0 = \frac{Ry}{\hbar c} \cdot \frac{\hbar^2}{m_e e^2} = \frac{m_e e^4}{2\hbar^3 c} \cdot \frac{\hbar^2}{m_e e^2} = \frac{e^2}{2\hbar c} = \frac{\alpha}{2} \quad (14.6)$$

ეს კი ნიშნავს, რომ

$$A_{mn} \propto \alpha^3 \omega_{mn} \quad (14.7)$$

ოპტიკური გამოსხივების დიაპაზონში $\omega_{mn} \propto 10^{15}$ ნმ⁻¹ შესაბამისად $A_{mn} \sim 10^9$ ნმ⁻¹. (10.16) და (10.17) ფორმულების თანახმად წყალბადისამაგვარი იონების შემთხვევაში

$$\omega_{mn} \propto Z^2, \quad a_0 \propto 1/Z. \quad (14.8)$$

რამდენადაც (14.4)-ის თანახმად $A_{mn} \propto \omega_{mn}^3 a_0^2$ (14.8)-ის გათვალისწინებით გადასვლის ალბათობისათვის მივიღებთ

$$A_{mn} \propto Z^4. \quad (14.9)$$

ამრიგად სპონტანური გამოსხივების ალბათობა Z -ის ზრდასთან ერთად მკვეთრად იზრდება.

ელექტრო-დიპოლურ გამოსხივებას, რომელიც E1-ით აღინიშნება ადგილი აქვს მხოლოდ გარკვეული პირობების შესრულების შემთხვევაში, რომელთაც შერჩევის წესები ეწოდებათ. თუ აღნიშნული წესები არ არის დაკმაყოფილებული და გამოსხივებას მაინც აქვს ადგილი, ეს ნიშნავს, რომ უნდა გავითვალისწინოთ სხვა უფრო ნაკლებად ალბათური პროცესებიც, როგორც არის ელექტონულ-კვადრუპოლური E2 და მაგნიტურ-დიპოლური M1 გადასვლები. რამდენადაც ატომის ზომები გაცილებით ნაკლებია მის მიერ გამოსხივებული სინათლის ტალღის სიგრძესთან შედარებით.

რებით, ტალღის სივრცითი ნაწილის ექსპონენტაში $kr \ll 1$ შესაძლებელია შემდეგი სახის გაშლის დანერა

$$\exp(ikr) \approx 1 + ikr - (kr)^2 \dots \quad (14.10)$$

აქ მიახლოებითი ტოლობის მარჯვენა მხარეს ერთიანი შეესაბამება დიპოლურ გამოსხივებას, ხოლო გაშლის მომდევნო ორი წევრი გამოსახავს შესაბამისად M1 და E2 ტიპის გამოსხივებებს. ელექტონულ-კვადრუპოლური გამოსხივების სიმძლავრე, რომელიც Q კვადრუპოლური მომენტით განისაზღვრება, შემდეგნაირად გამოისახება

$$W_{E2} = \frac{1}{180c^5} |\ddot{Q}|^2 \quad (14.11)$$

Q კვადრუპოლური მომენტი წარმოადგენს

$$Q_{\alpha\beta} = e \left(x_\alpha x_\beta - \frac{1}{3} \delta_{\alpha\beta} r^2 \right) \quad (14.12)$$

კვადრუპოლური ტენზორის $Q = Q_{zz}$ მნიშვნელობას. აქ α და β ინდექსები ლებულობენ $\alpha, \beta = x, y, z$ მნიშვნელობებს, ხოლო x_α, x_β \vec{r} რადიუსვექტორის საკოორდინატო ღერძებზე პროექციებს შეესაბამება.

M1 მაგნიტო-დიპოლური გამოსხივების სიმძლავრე (14.3) ფორმულის ანალოგიურად განისაზღვრება

$$W_{M1} = \frac{2}{3c^3} |\ddot{\mu}|^2 = \frac{2\omega^4}{3c^3} |\mu|^2. \quad (14.13)$$

რამდენადაც $d \sim er$, $Q \sim er^2$, $r \sim e^{i\omega t}$, (14.4) და (14.11) ფორმულების გათვალისწინებით შეგვიძლია დავწეროთ

$$\frac{W_{E2}}{W_{E1}} \propto \frac{1}{c^2} \frac{|\ddot{Q}|^2}{|\ddot{d}|^2} \sim \frac{1}{c^2} \left(\frac{\omega^3 r^2}{\omega^2 r} \right)^2 = \left(\frac{\omega}{c} r \right)^2 = (kr)^2 \sim \alpha^2 \ll 1. \quad (14.14)$$

შესაბამისად კვანტის ერთი და იგივე ენერგიისათვის E2 გამოსხივების ალბათობა დაახლოებით ოთხი რიგით ნაკლებია E1 გამოსხივების ალბათობასთან შედარებით

$$\frac{A_{E2}}{A_{E1}} = \frac{W_{E2}}{W_{E1}} \propto \alpha^2 \leq 10^{-4}. \quad (14.15)$$

ანალოგიურად შეგვიძლია გამოვივალოთ მაგნიტო-დიპოლური და ელექტრო-კვადრუპოლური გამოსხივებების ალბათობების შეფარდებაც

$$\frac{W_{M1}}{W_{E2}} = \frac{W_{M1}}{W_{E2}} = \frac{|\ddot{\mu}|^2}{|\ddot{d}|^2} \propto \left(\frac{\omega^2 \mu_0}{\omega^2 e a_0^2} \right)^2 \propto \alpha^2 \ll 1. \quad (14.16)$$

აქ μ_0 ბორის ატომური მაგნეტონია.

ამრიგად (14.14) და (14.16) შეფასებები გვიჩვენებს, რომ E1, E2 და M1 ტიპის გამოსხივებებს შორის ყველაზე ინტენსიურია ელექტრო-დიპოლური E1 ტიპის გამოსხივება.

შერჩევის წესები

აღმოჩნდა, რომ კვანტურ მექანიკაში დიპოლური გამოსხივების ალბათობა კლასიკური (14.4) ფორმულისგან განსხვავებით ნაცვლად $2/3$ -სა მხოლოდ $4/3$ მამრავლს შეიცავს, ხოლო რადიუს ვექტორი კი შეცვლილია რადიუს ვექტორის მატრიცული ელემენტით

$$A_{mn}^{(E1)} = \frac{4 e^2 \omega_{mn}^3}{3 \hbar c^3} |\bar{r}_{mn}|^2, \quad (14.17)$$

$$\bar{r}_{mn} = \int \psi_m^* \vec{r} \psi_n d\mathbf{r}.$$

ψ_n (12.44) ფორმულით განსაზღვრული ატომური ტალღური ფუნქციებია.

შერჩევის წესები გამომდინარეობს (14.17) ფორმულაში შემავალი მატრიცული ელემენტების ნულისგან განსხვავებულობის პირობიდან. ჩვენ აქ არ შევუდგებით ამ მატრიცული ელემენტების გამოთვლას, რადგანაც ეს საკითხი გარკვეულ დონეზე კვანტური-მექანიკის ელემენტების გამოყენებას მოითხოვს და სცილდება ზოგადი ატომური ფიზიკის კურსის ფარგლებს. აღვნიშნავთ მხოლოდ, რომ შერჩევის წესები მხოლოდ (12.44) ტალღური ფუნქციის კუთხური დამოკიდებულებით განისაზღვრება. მიუხედავად ამისა, (14.17) ფორმულაში შემავალი \bar{r}_{mn} მატრიცული ელემენტის გამოთვლის გარეშეც შესაძლებელია ორბიტალური კვანტური რიცხვის შერჩევის წესის მიღება. მე-9 თავში შემოტანილი ლუნობის თანახმად ინვერსიის $\mathbf{r} \rightarrow -\mathbf{r}$ ოპერატორის მოქმედების შედეგად \bar{r}_{mn} მატრიცული ელემენტი თუ ψ_m, ψ_n ტალღურ ფუნქციებს ერთნაირი ლუნობა აქვთ იცვლის ნიშანს

$$\bar{r}_{mn} = \int \psi_m^*(\vec{r}) \vec{r} \psi_n(\vec{r}) d\vec{r} = - \int \psi_m^*(\vec{r}) \vec{r} \psi_n(\vec{r}) d\vec{r} = -\bar{r}_{mn} \quad (14.18)$$

ეს კი შესაძლებელია მხოლოდ როცა $\bar{r}_{mn} = 0$. ამრიგად, ერთი და იგივე ლუნობის მქონე მდგომარეობებს შორის გადასვლის დიპოლური მატრიცული ელემენტი ნულის ტოლია. ეს მტკიცება მათემატიკურად ნიშნავს იმას, რომ (12.44) ფორმულით განსაზღვრული ტალღური ფუნქციის კუთხური ნაწილი ინვერსიის გარდაქმნის შედეგად მრავლდება $(-1)^l$ მამრავლეზე, რომელიც ნიშანს იცვლის მხოლოდ l ის ერთით ცვლილებისას. ზემოთქმულიდან ნათელია, რომ გამოსხივებული ფოტონის სრული მომენტი ერთის ტოლია.

ამრიგად, ჩამოვყალიბოთ წყალბადის ატომისა და წყალბადისმაგვარი იონისათვის l ორბიტალური მომენტის შერჩევის წესი: ელექტრო-დიპოლური მომენტი ნულისგან განსხვავებულია მხოლოდ მაშინ როდესაც შესრულებულია პირობა

$$\Delta l = \pm 1. \quad (14.19)$$

შემდგომში ვნახავთ, რომ ეს წესი უფრო რთულ ატომებზედაც ვრცელდება. იგი სამართლიანია ცენტრალური სიმეტრიის ველში ერთელექტრონიანი გადასვლებისთვისაც.

როგორც მე-13 თავში აღვნიშნეთ სპინ-ორბიტალური ურთიერთქმედება იწვევს კულონურ ველში გადაგვარების ნაწილობრივ მოხსნას, ანუ $\hbar l$ ორბიტალური მომენტი უკვე აღარ არის მოძრაობის ინტეგრალი. გარეშე ველების არარსებობისას მოძრაობის ინტეგრალია $\hbar j$ ატომის სრული მექანიკური მომენტი. ამიტომ იზოლირებული ატომისთვის არსებობს სრული მომენტის შერჩევის წესი, რომელსაც ახლა გამოვიყვანთ.

კვანტურ ელექტროდინამიკაში მტკიცდება, რომ გამოსხივების ყოველ არხს შეესაბამება თავისი გამოსხივების კვანტის (ფოტონის) შინაგანი მომენტის მნიშვნელობა $\hbar Q$. დიპოლური გამოსხივებისათვის $Q_{E1} = 1$. დაფუძვით კვანტის შთანთქმის შედეგად ატომი j მომენტი იცვლება j' მომენტით. მომენტის შენახვის კანონიდან გამომდინარე სამართლიანია ტოლობა

$$j' = j + Q. \quad (14.20)$$

ფოტონის მომენტის პროექცია ღებულობს სამ მნიშვნელობას $Q_z = -1, 0, +1$. აქ საჭიროა განვიხილოთ ორი შემთხვევა: $j < 1$ და $j \geq 1$. პირველ შემთხვევაში ცხადია, რომ წყალბადის ატომისა და წყალბადისმაგვარი იონის ერთელექტრონიანი სისტემისათვის $j \neq 0$ და ამიტომ მათთვის შესაძლებელია განხილვა დაგვეწყო პირდაპირ $j = 1/2$ -დან. მაგრამ ჩვენ მიერ გამოყვანილი შერჩევის წესი სამართლიანი უნდა იყოს სხვა მრავალელექტრონიანი ატომებისთვისაც, რომელთათვისაც j შეიძლება ნულის ტოლიც იყოს. ამიტომ $j = 0$ -თვის j_z ღებულობს მხოლოდ ნულის ტოლ მნიშვნელობას და ამიტომ $j'_z = -1, 0, 1$ ანუ ემთხვევა Q_z -ის მნიშვნელობებს. შესაბამისად $j' = 1$ და

$$j' = j + 1. \quad (14.21)$$

მე-13 თავში განხილული მომენტთა შეკრების წესის გამოყენებით $j = 1/2$ -ის შემთხვევაში ადვილად დავწმუნდებით, რომ

$$j' = 1/2, 3/2. \quad (14.22)$$

რაც შეეხება $j \geq 1$ შემთხვევას Q_z და j_z პროექციების ყველა შესაძლო $3 \cdot (2j+1)$ მნიშვნელობიდან $2j+3 = 2 \cdot (j+1) + 1$ პროექცია შეესაბამება j' მომენტის $j' = j + 1$ მნიშვნელობას, $2j+1$ პროექცია მომენტის $j' = j$ მნიშვნელობას და $2j-1 = 2(j-1) + 1$ პროექ-

ცია კი შეესაბამება მომენტის $j' = j - 1$ მნიშვნელობას. ამრიგად j' -ს შეუძლია მიიღოს შემდეგი მნიშვნელობები

$$j' = j - 1, j, j + 1. \quad (14.23)$$

ახლა თუ გავაერთიანებთ (19.28)-(19.30) ფორმულებს შეგვიძლია დავწეროთ შერჩევის წესი სრული მომენტისათვის

$$\begin{aligned} \Delta j &= 0, \pm 1 \\ j + j' &\geq 1 \end{aligned} \quad (14.24)$$

ანალოგიური მსჯელობით შეიძლება ვაჩვენოთ, რომ E_2 კვადრუპოლური გამოსხივებისათვის, რომლის კვანტის მომენტი $Q_{E_2} = 2$, სამართლიანია შემდეგი შერჩევის წესები

$$\Delta j = 0, \pm 1, \pm 2. \quad (14.25)$$

დანიტერესებული მკითხველი ალბათ თავად შესძლებს ამ შერჩევის წესების გამოყვანას (მითითება: რადგანაც ამ შემთხვევაში $Q_z = -2, -1, 0, +1, +2$ განიხილეთ $j \geq 2$ და $j < 2$ შემთხვევები).

დასასრულს, საინტერესოა განვიხილოთ ე.წ. ორფოტონიანი გამოსხივება. მართლაც $2s \rightarrow 1s$ გადასვლა აკრძალულია ორბიტალური მომენტის შერჩევის წესით როგორც დიპოლური, ასევე კვადრუპოლური გამოსხივებისათვის. ცხადია, რომ მაღალი რიგის გადასვლების განხილვა კვანტის მომენტის უფრო მეტი მნიშვნელობებით კიდევ უფრო გააძლიერებს აკრძალვის კანონს. მიუხედავად ამისა, გამოსხივებას მაინც აქვს ადგილი, ოღონდაც ამ შემთხვევაში ერთი კვანტის ნაცვლად წყალბადის ატომი ასხივებს ორ კვანტს ჯამური ენერგიით E_{21} , რომელიც მეორედან პირველ დონეზე გადასვლას შეესაბამება, ხოლო ამ კვანტების მომენტთა პროექციების ჯამი ნულის ტოლია. ასეთ გადასვლებს ორფოტონიანი გადასვლები ეწოდება. ორფოტონიანი გამოსხივების სპექტრი უწყვეტია. შესაბამისი გადასვლების ალბათობები დაახლოებით 7-8 რიგით მცირეა შერჩევის წესებით დასაშვებ გადასვლათა ალბათობებზე. მიუხედავად ამისა, ასეთი გადასვლების წვლილი საკმარისად შესამჩნევია, მაგალითად, ვარსკვლავთაშორისი გაიშვიათებული გაზის სითბური გამოსხივების სპექტრში.

მრავალელექტრონიანი ატომები

ამ თავში ერთელექტრონიანი წყალბადის ატომისათვის მიღებულ ელექტრონის მახასიათებელ ფიზიკურ სიდიდეებს გავავრცელებთ მრავალელექტრონიანი ატომების შემთხვევისათვის. რა თქმა უნდა, მრავალელექტრონიანი ატომებისთვის საზოგადოდ არ შეიძლება შემოვიფარგლოთ მხოლოდ ერთი ელექტრონის მოძრაობის განხილვით, მაგრამ ზოგიერთი ატომებისთვის ეს მიახლოება საკმარისად საიმედო შედეგებს იძლევა. გარდა ამისა მრავალელექტრონიანი ატომების მდგომარეობების დასახასიათებლად, როგორც აღმოჩნდა, შესაძლებელია წყალბადის ატომის შესწავლისას შემოტანილი მდგომარეობების კლასიფიკაციის გავრცობა, რის გაკეთებასაც ამ თავში შევუდგებით.

მრავალელექტრონიანი ატომის სრული მექანიკური მომენტი

მრავალელექტრონიანი ატომის ყოველ ელექტრონს გააჩნია \vec{M}_i ორბიტალური მექანიკური მომენტი და \vec{M}_s საკუთარი სპინური მექანიკური მომენტი. როგორც უკვე ვნახეთ, მექანიკური მომენტები დაკავშირებულნი არიან სათანადო მაგნიტურ მომენტებთან. \vec{M}_i და \vec{M}_s მომენტები იჯამება ატომის \vec{M}_j სრულ მექანიკურ მომენტად. ამასთან შესაძლებელია ორი ვარიანტი:

- 1) \vec{M}_i მომენტები ერთიმეორესთან ურთიერთქმედებენ უფრო ძლიერად ვიდრე \vec{M}_s მომენტებთან, რომლებიც თავის მხრივ ერთმანეთთან უფრო ძლიერად არიან ბმულნი ვიდრე \vec{M}_i -თან. ამის გამო თითოეული ელექტრონის ორბიტალური \vec{M}_i მომენტები იჯამება ატომის ჯამურ \vec{M}_L მომენტად, ხოლო \vec{M}_s სპინური მექანიკური მომენტები კი – \vec{M}_s ჯამურ მომენტად. ამის შემდეგ ატომის ჯამური \vec{M}_j სრული მექანიკური მომენტი \vec{M}_L და \vec{M}_s მომენტების შეკრებით მიიღება. ასეთი ტიპის ბმას რასელ-საუნდერსის ანუ LS ბმა ეწოდება. ასეთი ტიპის ბმა ატომებში უფრო ხშირად გვხვდება.
- 2) თითოეული ელექტრონის \vec{M}_i და \vec{M}_s მომენტები ჯამდება და მიიღება ერთი ელექტრონი სრული მექანიკური მომენტი \vec{M}_j , ხოლო შემდგომ ყველა ელექტრონის \vec{M}_j ჯამდება და მიიღება ატომის სრული \vec{M}_j მექანიკური მომენტი. ასეთი ტიპის ბმას ეწოდება jj ბმა და იგი მძიმე ატომებში დაიმზირება.

განვიხილოთ რასელ-საუნდერსის ბმა. რადგანაც თითოეული ელექტრონის ორბიტალური მომენტის შესაბამისი კვანტური რიცხვი l მთელია ან ნულის ტოლია ასევე მთელი ან ნულის ტოლი იქნება იქნება ატომის სრული ორბიტალური მომენ-

ტის შესაბამისი L კვანტური რიცხვიც. მაგალითად, თუ ატომი შედგება ორი ელექტრონისგან სათანადო ორბიტალური მომენტებით l_1 და l_2 მაშინ ატომის ჯამური L მომენტი მე-13 თავში განსაზღვრული მომენტთა შეკრების წესის თანახმად მიიღებს შემდეგ მნიშვნელობებს $L = l_1 + l_2, l_1 + l_2 - 1, \dots, |l_1 - l_2|$. რაც შეეხება \vec{M}_S სრული სპინური მომენტის შესაბამის S კვანტური რიცხვის მნიშვნელობებს იგი შეიძლება იყოს ნულის ან მთელი რიცხვის ტოლი ელექტრონების ლუნი რაოდენობისათვის და ნახევრის ან ნახევრისჯერადის ტოლი ატომში ელექტრონების კენტი რაოდენობისათვის. ატომის \vec{M}_J სრული მექანიკური მომენტის შესაბამისი J კვანტური რიცხვი კი მიიღებს შემდეგი მნიშვნელობებიდან ერთ-ერთს $J = L + S, L + S - 1, \dots, |L - S|$. ამასთან J იქნება მთელი თუ S მთელია.

ატომის ენერგია დამოკიდებული იქნება \vec{M}_l მომენტების ურთიერთორიენტაციაზე (ანუ L -ზე), \vec{M}_s მომენტების ურთიერთორიენტაციაზე (ანუ S -ზე) და ასევე \vec{M}_L და \vec{M}_S მომენტების ურთიერთორიენტაციაზე (ანუ J -ზე).

მრავალელექტრონიანი ატომის მდგომარეობის დასახასიათებლად შემოაქვთ მდგომარეობის თერმის სიმბოლო $^{2S+1}L_J$. აქ 12.1 ცხრილის აღნიშვნების ანალოგიურად L ლებულობს მნიშვნელობებს $L = S, P, D, F, \dots, J$. მაგალითად, $^3P_0, ^3P_1, ^3P_2$ თერმებისათვის $L=1, S=1$ და $J=0, 1, 2$. თუ $S < L$, მაშინ $2S + 1$ გვაძლევს თერმის მულტიპლეტობას, ანუ J -თი განსხვავებული ქვედონეების რაოდენობას, ხოლო თუ $S > L$, მაშინ მულტიპლეტობა არის $2L + 1$.

ატომის მაგნიტური მომენტი

როგორც მე-13 თავში ერთი ელექტრონისათვის შემოვიტანეთ მაგნიტური მომენტის ცნება სრულიად ანალოგიურად მრავალელექტრონიანი ატომებისთვისაც შემოვიტანოთ ორბიტალური მაგნიტური მომენტი

$$\vec{\mu}_L = -\frac{e}{2m_e c} \vec{M}_L \quad (15.1)$$

რომელიც \vec{M}_L ვექტორის ანტიპარალელურია და მოდულით ტოლია

$$\mu_L = -\mu_0 \sqrt{L(L+1)} \quad (15.2)$$

სადაც μ_0 ბორის ატომური მაგნეტონია. Z ლერძზე μ_L -ის პროექციებისათვის გვექნება

$$\mu_{Lz} = -\mu_0 m_L \quad (15.3)$$

როგორც უკვე აღვნიშნეთ სპინის გაორმაგებული დამაგნიტებულობის გამო სპინური გირომაგნიტური თანაფარდობა ორჯერ მეტია ორბიტალურთან შედარებით, რის გამოც გვექნება

$$\mu_S = -2\mu_0 \sqrt{S(S+1)} \quad (15.4)$$

ამის გამო სრული მექანიკური და სრული მაგნიტური მომენტების გირომაგნიტური თანაფარდობა μ_J/M_J იქნება L, S, J კვანტური რიცხვების ფუნქცია

$$\mu_J = -\mu_0 g \sqrt{J(J+1)} \quad (15.5)$$

სადაც

$$g = 1 + \frac{J(J+1) + S(S+1) - L(L+1)}{2J(J+1)} \quad (15.6)$$

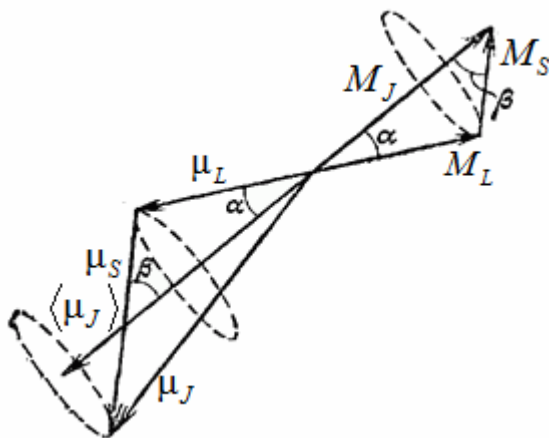
სიდიდეს ლანდეს ფაქტორი ეწოდება. თუ $S=0$, მაშინ $J=L$ და $g=1$. თუ $L=0$, მაშინ $J=S$ და $g=2$. თუ $L=3, S=2, J=1$, მაშინ $g=0$ ანუ ატომის სრული მაგნიტური მომენტი ნულის ტოლია, ხოლო ორბიტალური მაგნიტური მომენტი კი განსხვავებულია ნულისგან.

ატომის მაგნიტური მომენტის Z ღერძზე პროექციებისათვის გვექნება

$$\mu_{J_z} = -\mu_0 g m_J; \quad m_J = (-J, -J+1, \dots, J-1, J). \quad (15.7)$$

ატომის ვექტორული მოდელი

ატომური ფიზიკის ზოგიერთი საკითხი შეიძლება განხილული იქნას ე.წ. ატომის ვექტორული მოდელის ფარგლებში. ასეთი მოდელის აგებისას ატომის მექანიკური და მაგნიტური მომენტები გამოსახულია მიმართული მონაკვეთების, ანუ ვექტორების სახით. მკაცრად რომ ვთქვათ, ასეთი მიდგომა პრინციპში არამართებულია, რამეთუ, როგორც ცნობილია, კვანტურ ვექტორს სივრცეში განსაზღვრული მიმართულება არ გააჩნია. ამიტომ ვექტორული მოდელის ქვეშ უნდა გვესმოდეს, როგორც გარკვეული წესების ერთობლიობა, რომელთა საშუალებითაც მიღებული შედეგები მტკიცდება მკაცრი კვანტურ-მექანიკური გამოთვლებით.



ნახ. 15.1. ატომის ვექტორული მოდელი

ნახაზ 15.1-ზე ატომის ვექტორული მოდელის ფარგლებში წარმოდგენილია \vec{M}_L , \vec{M}_S და \vec{M}_J ვექტორები და შესაბამისი $\vec{\mu}_L$, $\vec{\mu}_S$ და $\vec{\mu}_J$ მაგნიტური მომენტები. მასშტაბი ისეა შერჩეული, რომ \vec{M}_L და $\vec{\mu}_L$ ვექტორები ერთი და იგივე სიგრძისაა, ხოლო $\vec{\mu}_S$ ვექტორი \vec{M}_S ვექტორზე ორჯერ გრძელია. ამის მიზეზია ზემოხსენებული სპინის ორმაგი დამაგნიტებულობა, რაც ნიშნავს, რომ μ_0 ბორის ატომური მაგნეტონის ერთეულებში \vec{M}_L და $\vec{\mu}_L$ ვექტორები ტოლი სიგრძისაა, ხოლო $\vec{\mu}_S$ ვექტორი ორჯერ გრძელია \vec{M}_S -ზე. \vec{M}_L და \vec{M}_S ვექტორები \vec{M}_J -ის ირგვლივ პრეცესირებენ და ამის გამო $\vec{\mu}_J$ ვექტორიც პრეცესირებს. ხანგრძლივი დროით დაკვირვების შემდეგ შესაძლებელია μ_J -ის საშუალოს $\langle \mu_J \rangle$ დაფიქსირება. ვიპოვოთ ამ ვექტორის პროექცია \vec{M}_J -ის მიმართულებაზე

$$\mu_J = -\mu_L \cos \alpha - \mu_S \cos \beta \quad (15.8)$$

თუ გამოვიყენებთ კოსინუსების თეორემას 15.1 ნახაზიდან ადვილად მივხვდებით, რომ

$$M_S^2 = M_J^2 + M_L^2 - 2M_L M_S \cos \alpha \quad (15.9)$$

საიდანაც

$$\cos \alpha = \frac{M_J^2 + M_L^2 - M_S^2}{2M_L M_S} = \frac{J(J+1) + L(L+1) - S(S+1)}{2\sqrt{J(J+1)L(L+1)}} \quad (15.10)$$

$\cos \beta$ -ს კი შემდეგნაირად ვიპოვოთ

$$M_L^2 = M_J^2 + M_S^2 - 2M_J M_S \cos \beta$$

$$\cos \beta = \frac{M_J^2 + M_S^2 - M_L^2}{2M_J M_S} = \frac{J(J+1) + S(S+1) - L(L+1)}{2\sqrt{J(J+1)S(S+1)}} \quad (15.11)$$

თუ ახლა (15.10) და (15.11) ფორმულებს (15.8)-ში შევიტანთ და გავითვალისწინებთ (15.2), (15.4) და (15.5) ფორმულებს მივიღებთ

$$\mu_J = -\mu_0 \sqrt{J(J+1)} \frac{3J(J+1) + S(S+1) - L(L+1)}{2J(J+1)} \quad (15.12)$$

ადვილი დასანახია, რომ (15.12) ფორმულა ზუსტად ემთხვევა ჩვენ მიერ ზევით მოყვანილ (15.6) ფორმულას.

ამრიგად, ვექტორული მოდელის ფარგლებში მართლაც შესაძლებელი შეიქმნა ატომის სრული მომენტის გამოთვლა.

პაულის პრინციპი

პირველ მიახლოებაში შეიძლება ითქვას, რომ ატომში ყველა ელექტრონი მოძრაობს ცენტრალური სიმეტრიის მქონე არაკულონურ ველში. ამ შემთხვევაში ელექტრონის მდგომარეობა ატომში განისაზღვრება ოთხი კვანტური რიცხვით:

მთავარი კვანტური რიცხვი n ($n = 1, 2, 3, \dots$)

ორბიტალური კვანტური რიცხვი l ($l = 0, 1, 2, \dots, n-1$)

მაგნიტური კვანტური რიცხვი m_l ($m_l = -l, \dots, -1, 0, 1, \dots, +l$)

სპინური კვანტური რიცხვი m_s ($m_s = -1/2, \dots, +1/2$)

ატომის მდგომარეობის ენერგია ძირითადად n და l კვანტურ რიცხვებზეა დამოკიდებული. სპინ-ორბიტალური ურთიერთქმედების სისუსტის გამო, ენერგიის m_l და m_s კვანტურ რიცხვებზე დამოკიდებულება სუსტია. ზოგიერთი გამონაკლისის გარდა, ატომში მდგომარეობის ენერგია n -ის ზრდის მიხედვით უფრო ძლიერად იზრდება, ვიდრე l -ის ზრდის მიხედვით. ამიტომ როგორც წესი მაღალი n -ის შესაბამისი მდგომარეობის ენერგია აღემატება სათანადო l -ის შესაბამის ენერგიას.

შეიძლება გვეგონოს, რომ ატომის ყველა ელექტრონი უნდა იმყოფებოდეს ენერგეტიკულად ერთი შეხედვით ყველაზე დაბალ ენერგეტიკულ დონეზე. თუმცა ექპერიმენტი ამას არ ადასტურებს.

ატომის Z რიგითი ნომრის ზრდასთან ერთად მიმდინარეობს ატომის ელექტრონული მდგომარეობების მკაცრად განსაზღვრული კანონზომიერებით შევსება. ამ კანონზომიერების ახსნა 1940 წელს შესძლო პაულიმ და ჩამოაყალიბა ე.წ. პაულის პრინციპი, რომლის თანახმადაც ერთსა და იმავე ატომში (ან რაიმე კვანტურ სისტემაში) ნებისმიერ კვანტურ მდგომარეობაში შეიძლება იმყოფებოდეს მხოლოდ ერთი ელექტრონი. სხვა სიტყვებით რომ ვთქვათ, ატომში არ შეიძლება არსებობდეს ერთზე მეტი ელექტრონი ისეთ მდგომარეობაში, რომელშიც n, l, m_l და m_s კვანტური რიცხვებიდან ერთი მაინც არ იქნება განსხვავებული. ამის გამო ძირითად მდგომარეობაში მყოფი ატომის ყოველი მომდევნო ელექტრონი უნდა იკავებდეს შეუვსებელი გარსის ყველაზე უფრო დაბალენერგეტიკულ მდგომარეობას.

თუ გავიხსენებთ წყალბადის ატომის ენერგეტიკული სპექტრის (12.43) ფორმულას დავინახავთ, რომ ადგილი აქვს ენერგეტიკული დონეების გადაგვარებას. კერძოდ რამდენადაც ენერგია მხოლოდ n -ზეა დამოკიდებული ყოველ n -ის შესაბამის l -ისთვის არსებობს m_l -ის $2l+1$ მნიშვნელობა. შესაბამისად მოცემული n -ის შესაბამისი სხვადასხვა მდგომარეობების რაოდენობა სპინის გათვალისწინებით იქნება

$$2 \sum_{l=0}^{n-1} (2l+1) = 2n^2. \quad (15.13)$$

ამრიგად, წყალბადის ატომის თითოეული დონე $2n^2$ ჯერადად არის გადაგვარებული. ანალოგიური მიდგომა ვრცელდება მრავალელექტრონიანი ატომის თითოეული ელექტრონისათვის. ერთნაირი n და l კვანტური რიცხვების მქონე ელექტრონები ქმნიან ე.წ. ატომურ ქვეგარსებს, ხოლო ერთნაირი n -ის მქონე ქვეგარსების რაოდენობა კი ერთიანდება ე.წ. გარსებში. 12.1 ცხრილში შემოტანილი აღნიშვნების ანალოგიურად შეგვიძლია შემოვიტანოთ გარსების სიმბოლური აღნიშვნები, რომლებიც 15.1 ცხრილის პირველ სვეტშია წარმოდგენილი. მეორე სვეტში მოცემულია ქვეგარსების კლასიფიკაციები l და m_l კვანტური რიცხვების საშუალებით. მესამე სვეტში ნაჩვენებია კონკრეტულ ქვეგარსებზე შესაბამისი ელექტრონების მაქსიმალური რაოდენობა და ტიპები. მეოთხე სვეტში ნაჩვენებია შევსებული გარსების მქონე ატომების შესაბამისი ქიმიური ელემენტების აღნიშვნები. მეხუთე სვეტში წარმოდგენილია სათანადო გარსსა და შესაბამისი ქვეგარსებზე ელექტრონული კონფიგურაციები. მეექვსე სვეტში კი მოცემულია კონკრეტული ტიპის ჩაკეტილი გარსის ელექტრონების რაოდენობა. როგორც ცხრილი 15.1-დან ჩანს, ბოლომდე შევსებული ელექტრონული გარსების შესაბამისი სპინური და ორბიტალური მომენტები ნულის ტოლია.

ცხრილი 15.1

ატომური გარსებისა და ქვეგარსების კლასიფიკაცია

K	$\underline{n=1}, l=0, m_l=1$ აბ.	1s] 2 ელ.	He	1s ²	2
L	$\underline{n=2}, \begin{cases} l=0, m_l=1 \text{ აბ.} \\ l=1, m_l=3 \text{ აბ.} \end{cases}$	$\left. \begin{array}{l} 2s] 2 \text{ ელ.} \\ 2p] 6 \text{ ელ.} \end{array} \right\} 8$	Ne	2s ² 2p ⁶	8
M	$\underline{n=3}, \begin{cases} l=0, m_l=1 \text{ აბ.} \\ l=1, m_l=3 \text{ აბ.} \\ l=2, m_l=5 \text{ აბ.} \end{cases}$	$\left. \begin{array}{l} 3s] 2 \text{ ელ.} \\ 3p] 6 \text{ ელ.} \\ 3d] 10 \text{ ელ.} \end{array} \right\} 18$	Ar	3s ² 3p ⁶	18

დავრწმუნდეთ ამაში 3d ქვეგარსის მაგალითზე. როგორც ცხრილიდან ვხედავთ 3d ქვეგარსზე ელექტრონთა მაქსიმალური რაოდენობა 10-ის ტოლია. პაულის პრინციპის თანახმად ეს 10 ელექტრონი ისე უნდა განთავსდეს 3d ქვეგარსებზე, რომ ყოველი ელექტრონის მდგომარეობის მახასიათებელი n, l, m_l და m_s კვანტური რიცხვებიდან ერთი მაინც იყოს განსხვავებული

$$m_s = \begin{matrix} \uparrow & \uparrow & \uparrow & \uparrow & \uparrow & \downarrow & \downarrow & \downarrow & \downarrow & \downarrow & 0 \\ + & + & + & + & + & - & - & - & - & - & 0 \\ m_l = & -2 & -1 & 0 & 1 & 2 & -2 & -1 & 0 & 1 & 2 & 0 \end{matrix}$$

ეს კი შესაძლებელია მხოლოდ მაშინ, როდესაც ათი ელექტრონიდან, ხუთი სპინის მიმართულება დანარჩენი ხუთი ელექტრონის სპინის მიმართულების საპირისპიროა (d ელექტრონებისთვის m_l ლებულობს 5 განსხვავებულ მნიშვნელობას. იხილეთ ცხრილი 15.1-ის მეორე სვეტის და მესამე სტრიქონის გადაკვეთა). ადვილად მივხვდებით ასევე, რომ $m_L = \sum_{-2}^{+2} m_l = -2 - 1 + 0 + 1 + 2 = 0$. შესაბამისად ატომის სრული $L = 0$, $S = 0$ და როგორც შედეგი სრული $J = 0$. ამრიგად, ატომის L -ის და S -ის განსაზღვრისას ატომის შევსებული გარსები და ქვეგარსები შეიძლება მხედველობაში არ მივიღოთ.

მენდელეევის პერიოდული სისტემა

მენდელეევის პერიოდული სისტემის აგებულება ეყრდნობა ატომთა გარსული ელექტრონული აღნაგობის იდეას. სისტემის პირველი ელემენტი არის წყალბადის ატომი ერთი ელექტრონით და $Z = 1$ ბირთვის მუხტით, ანუ პროტონით. ყოველი მომდევნო ატომი მიიღება ბირთვის მუხტის ერთი ერთეულით გაზრდით და ატომისთვის ერთი ელექტრონის დამატებით, რომელიც პაულის პრინციპის დაცვით უნდა განთავსდეს ენერგეტიკულად უმდაბლეს შესაძლო მდგომარეობაში. წყალბადის ატომში ერთი ელექტრონი ძირითად მდგომარეობაში სპინის ნებისმიერი ორიენტაციით შეიძლება იმყოფებოდეს. ამიტომ მე-18 თავში შემოყვანილი მდგომარეობათა კლასიფიკაციის მიხედვით წყალბადის ატომის ძირითადი თერმი იქნება $^2S_{1/2}$ (იხილეთ ნახაზი 15.2). თუ წყალბადის ატომის ბირთვის მუხტს ერთით გავაძიდებთ და დავუმატებთ კიდევ ერთ ელექტრონს მივიღებთ ჰელიუმის ატომს. ჰელიუმის ატომში ორივე ელექტრონი შეიძლება K გარსზე იმყოფებოდეს ოღონდ ანტიპარალელური ორიენტაციის სპინებით. ასეთი ატომის ელექტრონული კონფიგურაცია ასე ჩაინერება: $1s^2$ (აქ პირველი ციფრი აღნიშნავს n მთავარ კვანტურ რიცხვს, სიმბოლო s შეესაბამება $l=0$ მდგომარეობას, ხოლო ინდექსი „2“ ნიშნავს, რომ გვაქვს ორი s ელექტრონი). ასეთი ატომის ძირითადი თერმი იქნება 1S_0 ($L = S = J = 0$).

2p					↑
2s			↑	↑↓	↑↓
1s	↑	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓
	H	He	Li	Be	B
	$^2S_{1/2}$	1S_0	$^2S_{1/2}$	1S_0	$^2P_{1/2}$

ნახ. 15.2. ატომთა ელექტრონული აღნაგობის სქემა

ჰელიუმის ატომით მთავრდება K გარსის შევსება. ლითიუმის ატომის მესამე ელექტრონს შეუძლია მხოლოდ $2s$ დონე დაიკავოს. შესაბამისად, ლითიუმის ატომის ელექტრონული კონფიგურაცია იქნება $1s^2 2s$. ძირითადი თერმი იქნება $^2S_{1/2}$ ($L=0, S=1/2$). ეს მესამე ელექტრონი ლითიუმის ატომში იკავებს უფრო მაღალ ენერგეტიკულ დონეს, ვიდრე დანარჩენი ორი ელექტრონი. შესაბამისად ეს ელექტრონი უფრო სუსტად ბმულია ვიდრე დანარჩენი ორი. შედეგად სწორედ ეს მაღალენერგეტიკულ მდგომარეობაში მყოფი ელექტრონი განსაზღვრავს ლითიუმის ატომის ოპტიკურ და ქიმიურ თვისებებს.

ცხრილი. 15.2

მედელეევის პერიოდული სისტემის პირველი 22 ელემენტის ელექტრონული აგებულება და ძირითადი თერმები

ელემენტი Z	K			L			M			N		ძირითადი თერმი
	1s	2s	2p	3s	3p	3d	4s	4p				
1 H	1	-	-	-	-	-	-	-	-	-	$^2S_{1/2}$	
2 He	2	-	-	-	-	-	-	-	-	-	1S_0	
3 Li	2	1	-	-	-	-	-	-	-	-	$^2S_{1/2}$	
4 Be	2	2	-	-	-	-	-	-	-	-	1S_0	
5 B	2	2	1	-	-	-	-	-	-	-	$^2P_{1/2}$	
6 C	2	2	2	-	-	-	-	-	-	-	3P_0	
7 N	2	2	3	-	-	-	-	-	-	-	$^4S_{3/2}$	
8 O	2	2	4	-	-	-	-	-	-	-	3P_2	
9 F	2	2	5	-	-	-	-	-	-	-	$^2P_{3/2}$	
10 Ne	2	2	6	-	-	-	-	-	-	-	1S_0	
11 Na	2	2	6	1	-	-	-	-	-	-	$^2S_{1/2}$	
12 Mg	2	2	6	2	-	-	-	-	-	-	1S_0	
13 Al	2	2	6	2	1	-	-	-	-	-	$^2P_{1/2}$	
14 Si	2	2	6	2	2	-	-	-	-	-	3P_0	
15 P	2	2	6	2	3	-	-	-	-	-	$^4S_{3/2}$	
16 S	2	2	6	2	4	-	-	-	-	-	3P_2	
17 Cl	2	2	6	2	5	-	-	-	-	-	$^2P_{3/2}$	
18 Ar	2	2	6	2	6	-	-	-	-	-	1S_0	
19 K	2	2	6	2	6	-	1	-	-	-	$^2S_{1/2}$	
20 Ca	2	2	6	2	6	-	2	-	-	-	1S_0	
21 Sc	2	2	6	2	6	1	2	-	-	-	$^2D_{3/2}$	
22 Ti	2	2	6	2	6	2	2	-	-	-	3F_2	

პერიოდული სისტემის მეოთხე ელემენტი არის ბერილიუმი. ბერილიუმში სრულად ივსება $2s$ ქვეგარსი. ამიტომაც, როგორც უკვე ითქვა ჩაკეტილი გარსების ან ქვეგარსების თერმები ყოველთვის იქნება 1S_0 . ბერილიუმის შემდგომ ექვს ელემენტში (B, C, N, O, F, Ne) ხდება $2p$ ქვეგარსის თანმიმდევრული შევსება, რის შედეგადაც Ne -ს გააჩნია სრულიად შევსებული K გარსი ორი ელექტრონით და L გარსი რვა ელექტრონით, რაც ჯამში ათი ელექტრონით ქმნის ჰელიუმის მსგავს მდგრად სისტე-

მას, რითაც არის განპირობებული ინერტული აირების სპეციფიკური თვისებები. პერიოდული სისტემის მე-11 ელემენტი ნატრიუმი შედგება სრულად შევსებული K და L გარსებისაგან და კიდევ $3s$ ქვეგარზე ერთი დამატებითი ელექტრონისაგან. სათანადო ელექტრონული კონფიგურაცია იქნება $1s^2 2s^2 2p^6 3s$. $3s$ ელექტრონი ბირთვთან შედარებით სუსტად ბმული ელექტრონია და წარმოადგენს ე.წ. სავალენტო, ანუ ოპტიკურ ელექტრონს. ამის გამო ნატრიუმის ქიმიური და ოპტიკური თვისებები ლითიუმის მსგავსია. როგორც ცხრილი 15.3-დან ჩანს კალიუმის ატომამდე გარსებისა და ქვეგარსების შევსების თანმიმდევრობას „იდეალური“ ხასიათი აქვს. ჩამოყალიბებული შევსების წესიდან პირველი „გადახრა“ კალიუმის ატომში გვხვდება. $3d$ ქვეგარსი აღმოჩნდა ენერგეტიკულად უფრო მაღლა, ვიდრე $4s$ ქვეგარსი. ასე რომ, ჯერ ივსება $4s$ ქვეგარსი და შემდგომ ივსება $3d$ ქვეგარსი. შემდგომში დრო და დრო კვლავაც დაიზიარება გარსების შევსების ჩვეულებრივი თანმიმდევრობიდან გადახრის ანალოგიური შემთხვევები, მაგრამ ამასთან სრულად შევსებული გარსებისა და ქვეგარსების მიღმა პერიოდულად მეორდება მსგავსი ელექტრონული კონფიგურაციები ($1s, 2s, 3s$ და ა.შ.) რითაც განპირობებულია ატომთა ქიმიური და ოპტიკური თვისებების პერიოდულად განმეორებადობა.

კვანტურმექანიკური გამოთვლები აჩვენებს, რომ d და უფრო მეტად f მდგომარეობებში, ელექტრონი გაცილებით ახლოს იმყოფება ბირთვთან, ვიდრე s და p მდგომარეობებში. შესაბამისად $4f$ ელექტრონები განლაგდებიან ატომის შიდა არეებში. ამიტომ ელემენტები რიგითი ნომრით 58-დან 71-მდე, რომელთაც იშვიათმიან ელემენტები, ანუ ლანთანოიდები ეწოდებათ, $6s^2$ გარე ქვეგარსი პრაქტიკულად ერთნაირი აქვთ. ამიტომაც ლანთანოიდები ხასითდებიან მსგავსი ქიმიური თვისებებით, რაც გარე სავალენტო ელექტრონებით განისაზღვრება. მსგავსი ქიმიური თვისებების მქონე ელემენტთა ჯგუფს მიეკუთვნებიან ასევე ე.წ. აქტინოიდების ჯგუფი რიგითი ნომრით 90-დან 103-მდე, რომელთაც ევსებათ $5f$ ქვეგარსი $7s^2$ შევსებული ქვეგარსის შემთხვევაში.

ჰუნდის წესი

მენდელეევის პერიოდული სისტემის პირველი ოთხი ელემენტისათვის 15.2 ცხრილში მოყვანილი მდგომარეობის ძირითადი თერმების განსაზღვრა სირთულეს არ წარმოადგენს. მაგრამ უკვე მეხუთე ელემენტისათვის წარმოიშვება განუზღვრელობა: ერთ p ელექტრონს შეესაბამება $l=1$ და $s=1/2$ საიდანაც $j=3/2$ ან $j=1/2$. რომელი მათგანი შეესაბამება ძირითად მდგომარეობას ამ კითხვაზე პასუხს გვაძლევს ნახევრადემპირიული ჰუნდის წესი. ეს წესი ეხება ერთ ქვეგარსში არსებულ ეკვივალენტურ ელექტრონთა სისტემას (ეკვივალენტური ეწოდება ერთი და იგივე n და l -ის მქონე ელექტრონებს).

- მოცემული ელექტრონული კონფიგურაციისათვის მინიმალური ენერგია შეესაბამება თერმს, რომელიც ხასიათდება მაქსიმალური S სპინით და ამ სპინის-

თვის შესაძლო მაქსიმალური L -ით;

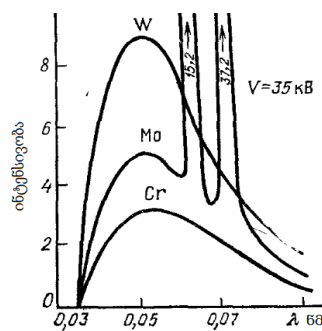
- ამასთან $J = |L - S|$ თუ ქვეგარსი ნახევარზე ნაკლებად არის შევსებული და $J = L + S$ ყველა დანარჩენ შემთხვევაში.

მაგალითისთვის ჰუნდის წესის გამოყენებით ვიპოვოთ ჟანგბადის ატომის ძირითადი თერმი. ჟანგბადის ატომის ელექტრონული კონფიგურაციაა $1s^2 2s^2 2p^4$, ანუ ქვეგარსი ნახევარზე მეტად არის შევსებული. ოთხი p ელექტრონისათვის ცხადია, რომ პაულის პრინციპის დაცვით მაქსიმალური სპინი $S = 1$, ხოლო მაქსიმალური $L = 1$ ($m_L^{\max} = 1 + 0 - 1 + 1 = 1$). ასე რომ, ჰუნდის წესის თანახმად $J = 1 + 1 = 2$ და ძირითადი მდგომარეობის თერმი იქნება 3P_2 .

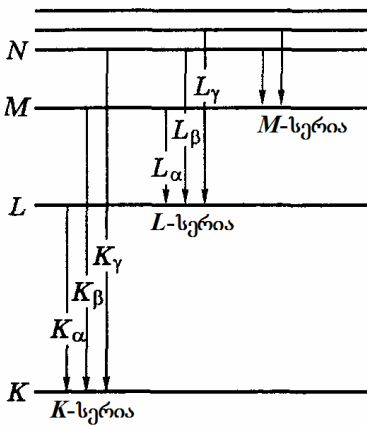
მახასიათებელი რენტგენული გამოსხივება

რენტგენული გამოსხივების სპექტრი, რომელიც სწრაფი ელექტრონებით ანოდის ბომბარდირებისას აღიძვრება, არის ორი ტიპის: უწყვეტი და ხაზოვანი. უწყვეტი სპექტრი, როგორც უკვე მე-4 თავში აღვნიშნეთ, მიიღება რენტგენის მილში სწრაფი ელექტრონების ანტიკათოდზე (ანოდზე) დამუხრუჭებისას და მას დამუხრუჭრებითი რენტგენული გამოსხივება ეწოდება.

რენტგენის მილზე ძაბვის შემდგომი მომატებისას უწყვეტ სპექტრთან ერთად ჩნდება ხაზოვანი სპექტრიც (იხილეთ ნახ 15.3). ეს ხაზოვანი სპექტრი შედგება ცალკეული ხაზებისგან, რომელთა გვარობაც ანოდის შემადგენელ ნივთიერებაზეა დამოკიდებული. ყოველი ელემენტისათვის არსებობს მისთვის დამახასიათებელი სპექტრი. ამიტომაც ასეთ სპექტრებს *მახასიათებელი სპექტრები* ეწოდება. რენტგენის მილზე ძაბვის გაზრდით რენტგენის გამოსხივების უწყვეტი სპექტრის მოკლეთალღოვანი საზღვარი წაინაცვლებს, ხოლო მახასიათებელი გამოსხივების სპექტრის ადგილმდებარეობა უცვლელი რჩება, მხოლოდ იზრდება მისი ინტენსივობა. მახასიათებელი გამოსხივება აღიძვრება რენტგენის მილაკზე ძაბვის გარკვეული მნიშვნელობის მერე, რომელიც მხოლოდ ანოდის მასალაზეა დამოკიდებული. რენტგენული სპექტრები განსაკუთრებული სიმარტივით გამოირჩევიან. ისინი შედგებიან რამოდენიმე სერიისაგან, რომლებიც აღინიშნებიან ლათინური ასოებით K, L, M, N (იხილეთ ნახაზი 15.4). ყოველი სერია შედგება გარკვეული რაოდენობის ხაზებისგან, რომლებიც შესაბამისი ტალღის სიგრძეების კლების მიხედვით აღინიშნებიან ინდექსებით: $\alpha, \beta, \gamma \dots$ ($K_\alpha, K_\beta, K_\gamma \dots L_\alpha, L_\beta, L_\gamma \dots$) და ა.შ. სხვადასხვა ელემენტების სპექტრებს მსგავსი სტრუქტურა გააჩნიათ. ელემენტის Z ატომური ნომრის ზრდასთან ერთად მახასიათებელი რენტგენული გამოსხივების სპექტრი მონოტონუ-



ნახ.15.3. მახასიათებელი რენტგენული გამოსხივების სპექტრი



ნახ.15.4. მახასიათებელი რენტგენული გამოსხივების წარმოქმნის სქემა

რად ინაცვლებს მოკლეთალოვანი არის მიმართულებით, ისე რომ არ იცვლება სპექტრის სტრუქტურა. ეს იმით აიხსნება, რომ მახასიათებელი რენტგენული გამოსხივების სპექტრები აღიძვრებიან ელექტრონების გადასვლით ატომის შიდა არეებში, რომელთაც მსგავსი აგებულება გაჩნიათ.

ატომის მიერ რომელიმე შიდა გარსის ელექტრონის ამოსაგდებად ან აღსაგზნებად საჭირო ენერჯიის პორციის შთანთქმის შედეგად წარმოიქმნება მახასიათებელი რენტგენული გამოსხივება. ეს ენერჯია ატომს შეიძლება გადაეცეს როგორც სწრაფი ელექტრონების დაჯახების შედეგად, ასევე რენტგენის კვანტის შთანთქმის შედეგად. სანამ დამჯახებელი ელექტრონების ენერჯია არ არის საკმარისი მახასიათებელი რენტგენული გა-

მოსხივების აღსაღზნებად ადგილი ექნება დამუხრუჭებითი რენტგენული გამოსხივების მოვლენას. ელექტრონების გარკვეული ენერჯიისათვის დამუხრუჭებითი გამოსხივების ფონზე გამოიკვეთება მახასიათებელი გამოსხივების სპექტრის მკვეთრი ხაზებიც. ამ ხაზების ინტენსივობა მრავალჯერადად აღემატება ფონის ინტენსივობას. ატომის აღგზნება მდგომარეობს იმაში, რომ ადგილი აქვს ატომის რომელიმე შიდა გარსის ელექტრონის ამოგდებას ატომზე გარეშე ელექტრონის ან ფოტონის დაჯახებისას. თუ ამ პროცესის შედეგად ხდება K გარსის ორი ელექტრონიდან რომელიმეს ამოგდება, მაშინ K გარსზე განთავისუფლებული ადგილი უნდა დაიკავოს ატომის რომელიმე გარე გარსის (L, M, N) ელექტრონმა. ამ გადასვლის დროს აღიძვრება K - სერია. ანალოგიურად აღიძვრებიან ასევე სხვა სერიებიც. გასაგებია, რომ K - სერიის აღგზნებისას აღიძვრებიან ასევე სხვა (L, M, N) სერიებიც, რადგანაც K - სერიის გამოსხივებისას თავისუფლდება დონეები L, M, N გარსებში, რომლებიც, თავის მხრივ, უფრო მაღალი გარსებიდან გადმოსული ელექტრონებით ივსება.

1913 წელს მოზლიმ დაადგინა მარტივი კანონი, რომელიც ერთმანეთთან აკავშირებს მახასიათებელი გამოსხივების სიხშირესა და მისი გამომსხივებელი ელემენტის ატომურ ნომერს:

$$\sqrt{\omega} = C(Z - \sigma). \tag{15.14}$$

როგორც (15.14) ფორმულიდან ვხედავთ სიხშირიდან კვადრატული ფესვი ელემენტის Z ატომური ნომრის წრფივი ფუნქციაა. σ ყოველი სერიის ფარგლებში მუდმივია ყველა ელემენტისათვის და იცვლება სერიიდან სერიაზე გადასვლისას. მაგალითად, მოზლის გაზომვების თანახმად K - სერიისათვის $\sigma = 1$, ხოლო L - სერიისათვის $\sigma = 7.5$. C მუდმივასაც ყოველი სერიისათვის თავისი მნიშვნელობა აქვს.

მოზლის კანონის დახმარებით შესაძლებელია რენტგენული გამოსხივების გაზომილი ტალღის სიგრძეების საშუალებით გამოვითვალოთ ელემენტის რიგითი ნომ-

მერი. ამ შესაძლებლობამ უდიდესი როლი შეასრულა ქიმიურ ელემენტთა პერიოდულ სისტემაში სწორად განლაგების საქმეში.

მოზლიმ მარტივი თეორიული ახსნა მისცა მის მიერ აღმოჩენილ კანონს. მან დაადგინა, რომ K_{α} სერიისათვის $C = \sqrt{\frac{3}{4}} R$, სადაც R -რიდბერგის მუდმივაა. შესაბამისად ამ ხაზისათვის სამართლიანი იქნება

$$\omega = R(Z-1)^2 \left(\frac{1}{1^2} - \frac{1}{2^2} \right) \quad (15.15)$$

სხვა ხაზებისათვის (20.15) ფორმულა ასე გადაინერება

$$\omega = R(Z-\sigma)^2 \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right) \quad (15.16)$$

ადვილია σ -ს ფიზიკური შინაარსის მიხვედრა: ელექტრონები, რომლებიც გადადიან ატომის მაღალენერგეტიკული დონეებიდან დაბალზე რენტგენის მახასიათებელი გამოსხივების თანხლებით განიცდიან ბირთვის მხრიდან მიზიდულობის ძალას, რომელიც ვარკვეულწილად შესუსტებულია ბირთვის გარშემო არსებული სხვა ელექტრონების ეკრანირების ფაქტორის გამო. სწორედ ეს ეფექტია გათვალისწინებული $Z-\sigma$ გამოსახულებაში.

თუ ავიღებთ ატომის შიდა გარსის რომელიმე ერთ ელექტრონს მაშინ მასზე სხვა ელექტრონების ზეგავლენა, რომლებიც უფრო გარე შრეებზე იმყოფებიან სუსტი იქნება. ეს გამონვეულია იმით, რომ ამ გარე შრეებზე მყოფი ელექტრონების მიერ შექმნილი ველი საშუალოდ ნულის ტოლი იქნება იქ სადაც შიდა გარსის ელექტრონი მდებარეობს (დამუხტული სფერული ზედაპირის შიგნით ველი ნულის ტოლია). ამიტომ შიდა გარსის ელექტრონები, ძირითადად, განიცდიან ზეგავლენას ბირთვისა და ბირთვთან ახლოს მყოფი ელექტრონებისგან. ამრიგად, σ შესწორებები, ძირითადად, განპირობებულია შედარებით „ღრმა“ ელექტრონების არსებობით და იმ მცირე შემოფოტებით, რომელსაც განიცდის შიდა გარსის ელექტრონი „გარე“ ელექტრონების მხრიდან.

როგორც ირკვევა (15.14) ფორმულა საჭიროებს დაზუსტებას. კერძოდ, ეს ფორმულა ეყრდნობა იმ დაშვებას, რომ σ შესწორებები (15.16) ფორმულაში შემავალი ორივე თერმისთვის ერთნაირია. რეალურად კი მაგალითად K - სერიისათვის ეკრანირების ეფექტი უფრო სუსტი იქნება ვიდრე L - სერიისათვის, რადგანაც L - გარსის ელექტრონს ეკრანირებას უკეთებს K - გარსის ორივე ელექტრონი და ასევე ამ ეკრანირებაში ნაწილობრივ თვით L - გარსის ელექტრონებიც მონაწილეობენ. K - გარსის შემთხვევაში კი ამ გარსის ერთ-ერთი ელექტრონის ეკრანირებას მხოლოდ ამავე გარსის მეორე ელექტრონი ახდენს. აღნიშნული შენიშვნების გათვალისწინებით (15.16) ფორმულა ასე ჩაინერება

$$\omega = R \left(\frac{(Z-\sigma_1)^2}{n_1^2} - \frac{(Z-\sigma_2)^2}{n_2^2} \right). \quad (15.17)$$

მიღებული შედეგის სამართლიანობას ადასტურებს ის ფაქტი, რომ ექსპერიმენტულ მონაცემებზე დაყრდნობით აგებული მოზლის მრუდი არ ატარებს აბსოლუტურად წრფივი დამოკიდებულების ხასიათს.

ტუტე მეტალთა ატომები

მენდელეევის პერიოდული სისტემის პირველი ჯგუფის ელემენტები: ლითიუმი (Li), ნატრიუმი (Na), კალიუმი (K), რუბიდიუმი (Rb), ცეზიუმი (Cs), ფრანციუმი (Fr) ტუტე ლითონებია. ეს სახელწოდება მათ შესაბამისი ჰიდროქსიდების – ტუტეებიდან მიიღეს. მენდელეევის სისტემის ყოველი პერიოდი, პირველის გარდა, ტუტე ლითონებით იწყება. ჯგუფში ატომური ნომრის ზრდასთან ერთად იზრდება ატომის რადიუსი, მცირდება იონიზაციის ენერგია, ე.ი. იზრდება ლითონთა ქიმიური აქტივობა. მათ ახასიათებთ ბზინვარება, თბოგამტარობა, ელექტროგამტარობა და პლასტიკურობა. ტუტე ლითონებისათვის დამახასიათებელია ალის შეფერადება წვისას, ალის ფერის მიხედვით შესაძლებელია მათი გამოცნობა: ნატრიუმი იძლევა ყვითელ, კალიუმი – იისფერ შეფერილობას და ა.შ. ტუტე ლითონები მაღალი აქტიურობის გამო თავისუფალი სახით ბუნებაში არ გვხვდება. Na და K ბუნებაში გავრცელებულია მნიშვნელოვანი შენაერთების (NaCl, KCl, NaCl-KCl...) სახით. ჰაერზე ტუტე მეტალები სწრაფად იჟანგება, ამიტომ მათ ნავთში ინახავენ.

ტუტე მეტალების გარე შრის აღნაგობა ერთნაირია (გარე შრეზე ერთი s ელექტრონია). ამიტომ ტუტე ლითონების თვისებები მსგავსია. მათ შეუძლიათ ადვილად გასცენ გარე შრის, ბირთვთან სუსტად დაკავშირებული ელექტრონი. თუ ტუტე მეტალის ატომს აქვს Z ელექტრონი, მაშინ შეიძლება ითქვას, რომ ატომის $Z-1$ ელექტრონები ქმნიან ინერტული აირების მსგავს ატომურ სტრუქტურას, ხოლო უკანასკნელი ელექტრონი კი ძალზედ სუსტად ბმულია, როგორც დანარჩენ ელექტრონებთან, ასევე ბირთვთან. ამიტომ შეიძლება ითქვას, რომ ტუტე მეტალთა ატომების $Z-1$ ელექტრონები და ბირთვი ქმნიან ე.წ. ეფექტურ ბირთვს, რომლის ველშიც მოძრაობს დარჩენილი ერთი ე.წ. სავალენტო ელექტრონი.

ამრიგად, ტუტე მეტალთა ატომები ძალიან ჰგვანან წყალბადისმაგვარ იონებს, მაგრამ მათ შორის მაინც არსებობს გარკვეული განსხვავება. საქმე იმაშია, რომ ტუტე მეტალთა ატომის გარე სავალენტო ელექტრონის არსებობა შიდა $Z-1$ ელექტრონების გარსების დეფორმირებას იწვევს. ამიტომაც სავალენტო ელექტრონის პოტენციური ენერგია ასე წარმოიდგინება

$$U = -Z_a e^2 \left\{ \frac{1}{r} + \frac{C_1}{r^2} + \frac{C_2}{r^3} + \dots \right\}. \quad (15.18)$$

სადაც $Z_a = Z - 1$, ხოლო (15.18) ფორმულის ფიგურული ფრჩხილების მეორე, მესამე და ა.შ. წევრები ტუტე მეტალების ატომთა ველის წყალბადის ატომის ველისგან გადახრას ითვალისწინებენ. ადვილი მისახვედრია, რომ (15.18) ფორმულაში $1/r$ -ის ხარისხების ზრდასთან ერთად მათი წვლილი პოტენციალში უნდა მცი-

რდებოდეს. ეს კი ნიშნავს, რომ $C_1, C_2 \dots$ კოეფიციენტები მცირე სიდიეები უნდა იყოს. რეალურ გამოთვლებში ტუტე მეტალთა გამოსხივების სპექტრის თავისებურებების ასახსნელად საკმარისია (15.18) ფორმულაში მხოლოდ მეორე წევრის შენარჩუნება. მაშინ ადვილი დასანახია, რომ ასეთი პოტენციალით აგებული შრედინგერის რადიალური განტოლება (12.21) განტოლების მსგავსი იქნება

$$\frac{d^2\chi}{dr^2} + \frac{2m_e}{\hbar^2} \left[E + \frac{Z_a e^2}{r} + C_1 \frac{Z_a e^2}{r^2} - \frac{l(l+1)\hbar^2}{2m_e r^2} \right] \chi = 0. \quad (15.19)$$

თუ შემოვიღებთ აღნიშვნას

$$C_1 \frac{Z_a e^2}{r^2} - \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2m_e r^2} = -\frac{\hbar^2 l^*(l^*+1)}{2m_e r^2}, \quad (15.20)$$

მივიღებთ

$$\frac{d^2\chi}{dr^2} + \frac{2m_e}{\hbar^2} \left\{ \left(E + \frac{Z_a e^2}{r} \right) - \frac{\hbar^2 l^*(l^*+1)}{2m_e r^2} \right\} R = 0. \quad (15.21)$$

(15.21) განტოლება ფორმალურად ზუსტად ემთხვევა წყალბადისმაგვარი იონის შესაბამის (12.21) განტოლებას. ამიტომ (12.43) ფორმულის ანალოგიურად შეიძლება დავწეროთ

$$E_{n,l} = -\frac{m_e Z_a^2 e^4}{2\hbar^2 (n_r + l^* + 1)^2} = -\frac{m_e Z_a^2 e^4}{2\hbar^2 (n + \Delta_l)^2}, \quad (15.23)$$

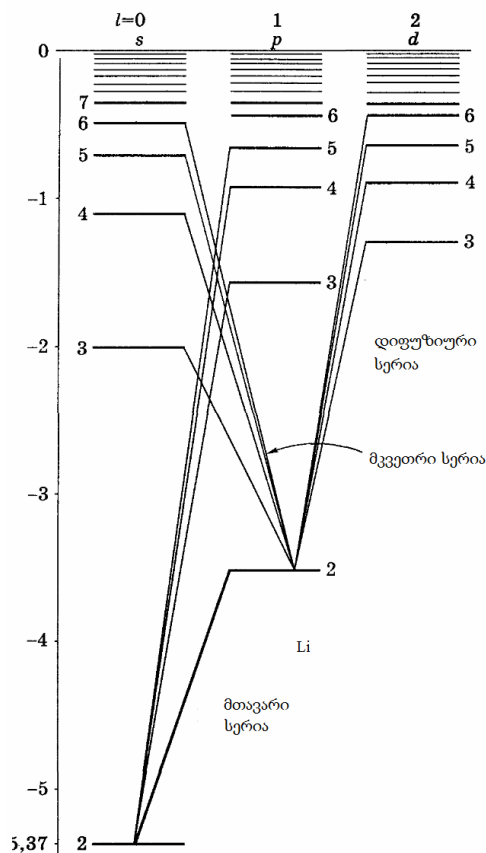
სადაც

$$l^* = -\frac{1}{2} + \sqrt{\left(l + \frac{1}{2} \right)^2 - \frac{2m_e}{\hbar^2} C_1 Z_a e^2} \quad (15.24)$$

$$\Delta_l = l^* - l$$

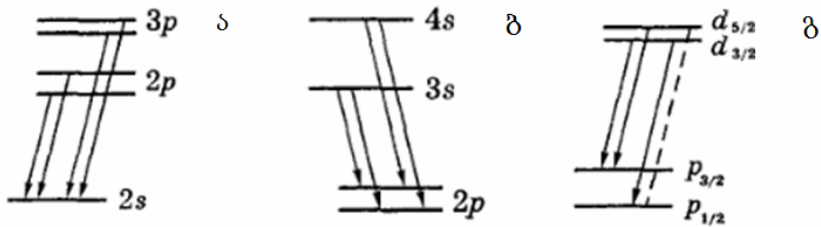
l^* -ის მიმართ (15.20) კვადრატული განტოლების ერთი ამონახსნია. მეორე ამონახსნი, რომელიც გადაგდებულია კვადრატული ფესვის წინ, მინუს ნიშნისაა. ეს ფესვი გამოუსადეგარია იმიტომ, რომ როცა $C_1 = 0$ უნდა გვექონდეს $l^* = l$. Δ_l სიდიდეს კვანტური დეფექტი ეწოდება. კვანტური დეფექტის მნიშვნელობები l -ზეა დამოკიდებული. ამიტომ არსებობს კვანტური დეფექტების ცხრილები, რომელშიც მოცემული ტუტე მეტალისათვის l -ის შესაბამისი კვანტური დეფექტები არის მოცემული.

ამრიგად, მივიღეთ, რომ ტუტე მეტალთა E_n ენერგეტიკული სპექტრი არა მხოლოდ n მთავარ კვანტურ რიცხვზე, არამედ, ასევე l ორბიტალურ კვანტურ რიცხვზეც არის დამოკიდებული. ამის გამო ტუტემეტალთა გამოსხივების სპექტრი წყალ-



ნახ.15.5. ლითიუმის ატომის სპექტრი

ბადისმაგვარი იონის გამოსხივების სპექტრისგან პრინციპულად განსხვავდება. ნახ. 15.5-ზე წარმოდგენილია ლითიუმის ატომის სპექტრი. ლითიუმის ატომის ძირითადი მდგომარეობაა $2s$ ($n=2, l=0$). ამ კვანტურ მდგომარეობაშია ლითიუმის ერთი სავალენტო ელექტრონი, ხოლო $n=1$ მდგომარეობა, პაულის პრინციპის თანახმად, უკვე დაკავებულია ლითიუმის ატომის დანარჩენი ორი ელექტრონის მიერ. ენერგეტიკულად უახლოესი მდგომარეობა არის $2p$ ($n=2, l=1$) მდგომარეობა (იხილეთ ნახაზი 15.5). $\Delta l = \pm 1$ და Δn - ნებისმიერი შერჩევის წესების თანახმად ლითიუმის ატომში გადასვლები ნახაზ 15.5-ზეა ნაჩვენები. ეს გადასვლები სამ ჯგუფად არიან გაყოფილი: ე.წ. მთავარი სერია, მკვეთრი სერია და დიფუზიური სერია. სპინ-ორბიტალური ურთიერთქმედების გამო, სავალენტო ელექტრონის მდგომარეობის შესაბამისი ნებისმიერი არანულოვანი მომენტის მქონე დონე ორად იხლიჩება. ამიტომ ყველა ორად გახლეჩილი p დონიდან s გაუხლეჩავ დონეზე გადასვლა ორი ერთმანეთთან ახლოს მდებარე სპექტრალური ხაზებით გამოისახება (იხილეთ ნახაზი 15.6ა). ახლა განვიხილოთ მკვეთრი სერია. ამ შემთხვევაში გახლეჩის სიდიდე ყველა ხაზისთვის ერთნაირია. ამის გამო თითოეულ დუბლეტში ხაზები მკვეთრად გამოხატულია (იხილეთ ნახაზი 15.6ბ). რაც შეეხება დიფუზიური სერიას (იხილეთ



ნახ.15.6. გადასვლის სქემა ფაქიზი სტრუქტურის გათვალისწინებით

ნახაზი 15.6გ) ამ სერიის გადასვლები d მდგომარეობებიდან $2p$ მდგომარეობაში გადასვლებით არის განპირობებული. საზოგადოდ d მდგომარეობების გახლეჩა $2p$ მდგომარეობის გახლეჩასთან შედარებით ბევრად ნაკლებია. ამასთან ნახაზ 15.6გ-ზე წყვეტილი ხაზით ნაჩვენებია გადასვლა $\Delta J = 0, \pm 1$ შერჩევის წესით არის აკრძალული. ამის გამო გამოსხივების სპექტრში სამი ერთმანეთთან ახლოს მდებარე ხაზი დაიმზირება. ამიტომაც ეს ხაზები, როგორც ერთი განრთხმული ხაზი, ისე აღიქმება. აქედან წარმოდგება დასახელება „დიფუზიური სერია“.

ამრიგად, ლითიუმის ატომის გამოსხივების სპექტრის დუბლეტური ხასიათი ელექტრონის სპინის არსებობით არის გამოწვეული. მაგრამ ეს არ არის გახლეჩის გამომწვევი ერთადერთი მიზეზი. რელატივისტური ეფექტების გათვალისწინებას გახლეჩის ზეფაქიზი სტრუქტურის არსებობამდე მივყავართ, რაც ბირთვის სპინისა და ელექტრონთა ორბიტალური მომენტის ურთიერთქმედებით არის გამოწვეული.

ჰელიუმის ატომი

წყალბადისმაგვარი ატომური სისტემების შემდეგ ყველაზე უფრო მარტივ ატომს წარმოადგენს ჰელიუმის ატომი, ლითიუმის იონი, ბერილიუმის ორჯერადად იონიზირებული იონი და სხვა ორელექტრონიანი სისტემები, რომელთა ელექტრონული გარსები მხოლოდ ორ ელექტრონს შეიცავენ. მიუხედავად ასეთი სისტემების შედარებითი სიმარტივისა, მათი თვისებების ბორის თეორიაზე დაყრდნობით ახსნის მცდელობები, უშედეგო აღმოჩნდა. უფრო, მეტიც როგორც შემდგომში გამოირკვა ბორის თეორიის ფარგლებში ჰელიუმის ატომის ამოცანის ამოხსნა პრინციპულად შეუძლებელი აღმოჩნდა. ეს გამოწვეული იყო ძირითადად იმით, რომ ბორის თეორია არ ითვალისწინებდა არც ელექტრონების იგიურობით გამოწვეულ ელექტრონებს შორის არსებულ გაცვლით ურთიერთქმედებებს და არც ელექტრონის სპინური თავისუფლების ხარისხებს.

შევუდგეთ ჰელიუმის ატომის სტაციონალური მდგომარეობების შესაბამისი ენერგიების კვანტურ-მექანიკური მიდგომით გამოთვლის პროცედურას. თუ ელექტრონების სპინებს არ გავითვალისწინებთ ამოცანა დაიყვანება ორელექტრონიანი სისტემის მდგომარეობის აღმწერი შრედინგერის სტაციონალური განტოლების ამოხსნაზე

$$(\hat{H}_1 + \hat{H}_2 + \hat{U}_{12})\psi = E\psi, \quad (15.25)$$

სადაც $\vec{r}_1(x_1, y_1, z_1)$ და $\vec{r}_2(x_2, y_2, z_2)$ ბირთვის მიმართ ელექტრონების რადიუს ვექტორებია, $\psi = \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ -ორელექტრონიანი სისტემის მდგომარეობის კოორდინატური ტალღური ფუნქციაა, E -სტაციონალური მდგომარეობის ენერგია, ხოლო $\hat{H}_1 = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \Delta_1 - \frac{Ze^2}{r_1}$ და $\hat{H}_2 = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \Delta_2 - \frac{Ze^2}{r_2}$ ერთელექტრონიანი ჰამილტონიანები, რომელშიც მხოლოდ ელექტრონების ბირთვთან ურთიერთქმედებები არის გათვალისწინებული. $\hat{U}_{12} = e^2/r_{12}$ - ელექტრონებს შორის ურთიერთქმედების ოპერატორია, Z - ბირთვის მუხტი. ჰელიუმის ამოცანის სირთულე სწორედ $\hat{U}_{12} = e^2/r_{12}$ ოპერატორით არის განპირობებული, რის გამოც (15.25) ჰამილტონიანში ვერ ხერხდება თითოეული ელექტრონის შესაბამისი ცვლადების განცალკეება. როგორც ირკვევა, ელექტრონებს შორის ურთიერთქმედების საშუალო ენერგია ჰელიუმის ატომის სრულ ენერგიათან შედარებით ნაკლებია. ასეთი შემთხვევებისათვის კვანტურ მექანიკაში შემუშავებულია მიდგომა, რომელიც შემფოთების თეორიის სახელით არის ცნობილი.

ამ თეორიის თანახმად, პირველ რიგში საჭიროა ელექტრონებს შორის ურთიერთქმედების გათვალისწინების გარეშე ვიპოვოთ სისტემის ენერგეტიკული დონეები და ტალღური ფუნქციები. ასეთ ნულოვან მიახლოებაში (15.25) განტოლება ღებულობს სახეს

$$(\hat{H}_1 + \hat{H}_2)\psi^0 = E^0\psi^0. \quad (15.26)$$

ადვილი დასანახია, რომ \hat{H}_1 და \hat{H}_2 ოპერატორების $\psi^0(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ ფუნქციაზე მოქმედება შესაბამისად მხოლოდ \vec{r}_1 და \vec{r}_2 ცვლადებით დიფერენცირებაზე დაიყვანება. ამიტომ (15.26) განტოლების ამონახსნი ორი ფუნქციის ნამრავლის სახით წარმოიდგინება

$$\psi_{nm}^0 = \psi_m^0(\vec{r}_1)\psi_n^0(\vec{r}_2), \quad (15.27)$$

სადაც $m, n = 1, 2, 3, \dots$ ერთელექტრონიანი წყალბადისმაგვარი იონის მდგომარეობის მახასიათებელი კვანტური რიცხვებია. თუ გავითვალისწინებთ, რომ

$$\hat{H}_1\psi_n^0 = \epsilon_n^0\psi_n^0, \quad \hat{H}_2\psi_m^0 = \epsilon_m^0\psi_m^0 \quad (15.28)$$

მაშინ (15.26) განტოლებაში (15.27) ფუნქციის შეტანით მივიღებთ

$$E_{nm}^0 = \epsilon_m^0 + \epsilon_n^0. \quad (15.29)$$

(15.28) განტოლებები ერთელექტრონიანი წყალბადისმაგვარი იონის მდგომარეობის აღმწერ შრედინგერის განტოლებებს წარმოადგენენ. ასეთი განტოლების საკუთარი ნიშვნელობების (12.43) ფორმულა, ასე ჩავწეროთ

$$\epsilon_n^0 = -\frac{Z^2}{n^2} A, \quad A = \frac{m_e e^4}{2\hbar^2} = 13.6 \text{ ევ} \quad (15.30)$$

შემფოთების თეორიის ნულოვან მიახლოებაში გამოდის, რომ ჰელიუმის ატომში ძირითადი ($n=1$) მდგომარეობიდან ერთი ელექტრონის მოსაცილებელი ენერგია, ანუ ჰელიუმის ატომის ერთჯერადი იონიზაციის ენერგია $Z^2 A = 54.4$ ევ-ს შეადგენს, ხოლო ორჯერადი იონიზაციის ენერგია, ანუ ორივე ელექტრონის მოსაცილებელად საჭირო ენერგია $2Z^2 A = 108.8$ ევ-ის ტოლი უნდა გამოსულიყო. რეალურად კი ელექტრონებს შორის მოქმედი კულონური განზიდვის გამო ჰელიუმის ატომის ერთჯერადი იონიზაციის ენერგია $24,4$ ევ-ია. ეს სიდიდე (15.30) ფორმულით მიღებული ენერგიის მნიშვნელობის დაახლოებით 40% -ს შეადგენს.

შემფოთების თეორიის ფარგლებში ზემოაღნიშნული ხარვეზის გამოსწორება შესაძლებელია თუ დავუშვებთ, რომ ელექტრონებს შორის ურთიერთქმედების საშუალო ენერგია შემფოთების თეორიის პირველ მიახლოებაში წარმოადგენს ნულოვანი მიახლოების ψ_{nm}^0 ტალღური ფუნქციებით აღებულ $\hat{U}_{12} = e^2/r_{12}$ ოპერატორის საშუალოს

$$\Delta E = \int \psi^0 * \hat{U}_{12} \psi^0 dx_1 dy_1 dz_1 dx_2 dy_2 dz_2 \quad (15.31)$$

(15.31) ფორმულაში (15.27) ფუნქციების შეტანით და იმის გათვალისწინებით, რომ წყალბადისმაგვარი იონის ძირითადი მდგომარეობის ტალღური ფუნქციაა $\psi_{1s} = C_{1s} e^{-\alpha r/2}$, სადაც $\alpha = 2m_e Z e^2 / \hbar^2$, მივიღებთ $\Delta E = \frac{5}{4} Z A$, ანუ შემფოთების თეორიის პირველ მიახლოებაში ორელექტრონიანი ატომის იონიზაციის ენერგიაა

$$E = \left(Z^2 - \frac{5}{4} Z \right) A. \quad (15.32)$$

ამ ფორმულის თანახმად, ჰელიუმის ატომისათვის ვღებულობთ $E = 20,4$ ევ, რაც საკმაოდ ახლოს არის ექსპერიმენტულად გაზომილ $24,4$ ევ სიდიდესთან (განსხვავება 10% -ზე ნაკლებია).

ამრიგად, ჰელიუმის ატომისათვის შემფოთების თეორიის პირველი მიახლოების გამოყენებით მიღებული შედეგი როგორც თვისობრივი, ასევე რაოდენობრივი თვალსაზრისით, საკმაოდ რეალისტურია. უფრო მაღალი რიგის შესწორებების გამოყენებით შესაძლებელია შედეგების მნიშვნელოვნად გაუმჯობესება. საზოგადოდ კვანტური მექანიკის მიდგომებით, ჰელიუმის ატომის ძირითადი მდგომარეობის ენერგიისათვის პრაქტიკულად ექსპერიმენტულად გაზომვადი მნიშვნელობის მიღებაა შესაძლებელი.

ახლა განვიხილოთ ჰელიუმის ატომის ალგზნებული მდგომარეობა. დავუშვათ, რომ ჰელიუმის ატომის ყველა ალგზნებული მდგომარეობები მიიღება მხოლოდ ერთ-ერთი ელექტრონის ალგზნებით. ეს ნიშნავს, რომ ალგზნებული მდგომარეობებისათვის (15.27) ფორმულა მიიღებს სახეს

$$\psi_{nlm}^0 = \psi_{1s}^0(\vec{r}_1) \psi_{nlm}^0(\vec{r}_2), \quad (15.33)$$

სადაც $\Psi_{nlm}^0(\vec{r}_2) = R_{nl}(r_2)Y_{lm}(\theta, \varphi)$. იმისათვის, რომ (15.33) ფუნქცია სწორად აღწერდეს ნულოვანი მდგომარეობის ტალღური ფუნქციას, აუცილებელია ელექტრონების იგივეურობის გათვალისწინება. მიკრონანილაკებს (ელექტრონებს, პროტონებს, ნეიტრონებს და ა.შ.) მაკრონანილაკებისგან განსხვავებით გააჩნიათ იგივეურობის თვისება. მაგალითად, ეს იმას ნიშნავს, რომ შეუძლებელია ერთმანეთისგან განვასხვაოთ ორი ელექტრონი. ორელექტრონიანი სისტემის თითოეული ელექტრონი შეიძლება იმყოფებოდეს შესაბამისად Ψ_{1s}^0 და Ψ_{nlm}^0 ფუნქციებით განსაზღვრულ კვანტურ მდგომარეობებში, ანუ (15.33) ფუნქციით აღწერილი მდგომარეობის გარდა, $\Psi_{1s}^0(\vec{r}_2)\Psi_{nlm}^0(\vec{r}_1)$ ფუნქციით აწერილი მდგომარეობაც აუცილებლად იარსებებს. პაულის პრინციპის თანახმად ფერმიონთა სისტემის მდგომარეობის აღმწერი სრული ტალღური ფუნქცია, სპინური და კოორდინატულ ცვლადების გადასმის მიმართ, ანტისიმეტრიული უნდა იყოს

$$\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \sigma_1, \sigma_2) = -\Psi(\vec{r}_2, \vec{r}_1, \sigma_2, \sigma_1). \quad (15.34)$$

რამდენადაც ჰელიუმის ატომში სპინ-ორბიტალური ურთიერთქმედება სუსტია, (ძირითად მდგომარეობაში $l=0$, ხოლო დაბალ აღგზნებულ მდგომარეობებში $l \neq 0$) $\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \sigma_1, \sigma_2)$ ფუნქცია $\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ კოორდინატული და $\Phi(\sigma_1, \sigma_2)$ სპინური ფუნქციების ნამრავლის სახით შეიძლება წარმოვიდგინოთ

$$\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \sigma_1, \sigma_2) = \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)\Phi(\sigma_1, \sigma_2) \quad (15.35)$$

ადვილი დასაანახია, რომ (15.25) შრედინგერის განტოლება ელექტრონის სპინზე დამოკიდებულ არცერთ ოპერატორს არ შეიცავს. ამიტომ (15.35) ფორმულის $\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ კოორდინატული ნაწილი სწორედ (15.25) შრედინგერის განტოლების ამონახსნი იქნება. ცხადია, რომ (15.35) ფუნქცია სიმეტრიულია თუ $\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ და $\Phi(\sigma_1, \sigma_2)$ სათანადო კოორდინატების გადასმის მიმართ ორივე ერთდროულად სიმეტრიული ან ანტისიმეტრიულია

$$\Psi_s(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \sigma_1, \sigma_2) = \Psi_s(\vec{r}_1, \vec{r}_2)\Phi_s(\sigma_1, \sigma_2) \quad (15.36a)$$

$$\Psi_a(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \sigma_1, \sigma_2) = \Psi_a(\vec{r}_1, \vec{r}_2)\Phi_a(\sigma_1, \sigma_2) \quad (15.36b)$$

შესაბამისად, თუ $\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ და $\Phi(\sigma_1, \sigma_2)$ ფუნქციებიდან ერთ-ერთი სიმეტრიულია, ხოლო მეორე კი ანტისიმეტრიული სათანადო კოორდინატების გადასმისას, მაშინ არსებობს ანტისიმეტრიული სრული ფუნქციის მიღების ორი შესაძლებლობა

$$\Psi_a(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \sigma_1, \sigma_2) = \Psi_s(\vec{r}_1, \vec{r}_2)\Phi_a(\sigma_1, \sigma_2) \quad (15.37a)$$

$$\Psi_s(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \sigma_1, \sigma_2) = \Psi_a(\vec{r}_1, \vec{r}_2)\Phi_s(\sigma_1, \sigma_2) \quad (15.37b)$$

ამრიგად ორელექტრონიანი სისტემის (კერძოდ ჰელიუმის ატომის) მდგომარეობა ორ ჯგუფად იყოფა: *პარამდგომარეობა*, რომელსაც შეესაბამება სიმეტრი-

ული კოორდინატული ტალღური ფუნქცია $\psi_s(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \psi_s(\vec{r}_2, \vec{r}_1)$ და *ორთომდგომარეობა*, რომელსაც შეესაბამება ანტისიმეტრიული კოორდინატული ტალღური ფუნქცია $\psi_a(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = -\psi_a(\vec{r}_2, \vec{r}_1)$. (15.26) ერთელექტრონიანი მიახლოების ფორმულის გათვალისწინებით გვექნება

$$\psi_s^0(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = C_s (\psi_m^0(\vec{r}_1)\psi_n^0(\vec{r}_2) + \psi_m^0(\vec{r}_2)\psi_n^0(\vec{r}_1)) \quad (15.38)$$

$$\psi_a^0(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = C_a (\psi_m^0(\vec{r}_1)\psi_n^0(\vec{r}_2) - \psi_m^0(\vec{r}_2)\psi_n^0(\vec{r}_1)) \quad (15.39)$$

სადაც, როცა $m \neq n$, $C_s = C_a = 1/\sqrt{2}$ და როცა $m = n$, $C_s = 1$.

კერძოდ, ჰელიუმის ძირითად მდგომარეობას $1s^2$ ელექტრონული კონფიგურაცია შეესაბამება. ამდენად ძირითად მდგომარეობაში ჰელიუმი პარამდგომარეობაშია. ნულოვან მიახლოებაში მას შეესაბამება $\psi_{1s}^0(\vec{r}_1)\psi_{1s}^0(\vec{r}_2)$ სიმეტრიული ტალღური ფუნქცია (ენერგიის გამოსათვლელად სწორედ ეს ფუნქცია გამოვიყენეთ).

მას შემდეგ, რაც ცნობილია (15.38) და (15.39) ტალღური ფუნქციები შემფორთების თეორია ჰელიუმის ატომის ნებისმიერი მდგომარეობის შესაბამისი ენერგიის მნიშვნელობების პირველი რიგის შესწორების გამოთვლის საშუალებას იძლევა. სიმეტრიული ტალღური ფუნქციებით დახასიათებული პარამდგომარეობის ენერგიის პირველი რიგის შესწორებისთვის გვექნება

$$\Delta E_s = \int \psi_s^0 * (\vec{r}_1) \hat{U}_{12} \psi_s^0(\vec{r}_2) d\tau = \int \frac{e^2}{r_{12}} |\psi_s^0|^2 d\tau_1 d\tau_2 \quad (15.40)$$

ხოლო *ორთომდგომარეობის* ენერგიის შესწორებისთვის მივიღებთ

$$\Delta E_a = \int \psi_a^0 * (\vec{r}_1) \hat{U}_{12} \psi_a^0(\vec{r}_2) d\tau = \int \frac{e^2}{r_{12}} |\psi_a^0|^2 d\tau_1 d\tau_2 \quad (15.41)$$

სადაც $d\tau_1 = dx_1 dy_1 dz_1$, $d\tau_2 = dx_2 dy_2 dz_2$. თუ ახლა (15.38) და (15.39) ფუნქციებს (15.40) და (15.41) ინტეგრალებში შევიტანთ, სათანადო ალგებრული მანიპულაციების შემდეგ მივიღებთ

$$\Delta E_s = I_c + I_{ex}, \quad (15.42)$$

$$\Delta E_a = I_c - I_{ex}, \quad (15.43)$$

სადაც

$$I_c = \int \frac{e^2}{r_{12}} |\psi_{1s}^0(\vec{r}_1)|^2 |\psi_{nlm}^0(\vec{r}_2)|^2 d\tau_1 d\tau_2 \quad (15.44)$$

$$I_{ex} = \int \frac{e^2}{r_{12}} \psi_{1s}^0(\vec{r}_1) \psi_{nlm}^0 * (\vec{r}_1) \psi_{nlm}^0(\vec{r}_2) \psi_{1s}^0 * (\vec{r}_2) d\tau_1 d\tau_2. \quad (15.45)$$

(15.44) ფორმულას კულონური ინტეგრალი ეწოდება. იგი წარმოადგენს $\rho_1 = e|\psi_{1s}^0|^2$ და $\rho_2 = e|\psi_{nlm}^0|^2$ სივრცული მუხტური განაწილების სიმკვრივეების მქონე ელექტრონების კულონური განზიდვის პოტენციურ ენერგიას. (15.45) ფორმულას კი წმინდა კვანტურ-მექანიკური შინაარსი აქვს: იგი არსებობს მხოლოდ ელექტრონთა იგივეობის გამო და გვიჩვენებს თუ რამდენად „გადაიფარებიან“ სხვადასხვა ელექტრონული მდგომარეობების აღმწერი ტალღური ფუნქციები. მას გაცვლითი ურთიერთქმედების ინტეგრალი ეწოდება. თუ (15.45) ფორმულაში ψ_{1s}^0 და ψ_{nlm}^0 ფუნქციების ცხად სახეს შევიტანთ დავინახავთ, რომ $I_{ex} > 0$. შეაბამისად გამოდის, რომ $\Delta E_s > \Delta E_a$. ამრიგად, პარაჰელუმის ენერგეტიკული დონეები უფრო მაღლა მდებარეობენ ვიდრე ორთოჰელიუმის დონეები. მაგალითად, $1s2s$ ელექტრონული კონფიგურაციას 1S_0 პარა და 3S_1 ორთო მდგომარეობები შეესაბამება. ამასთან პარამდგომარეობაში მყოფი ჰელიუმის ატომის ენერგია ორთომდგომარეობაში მყოფი ჰელიუმის ატომის ენერგიაზე დაახლოებით 0.8 ევ-ით მეტია.

როგორც ზემოთ აღვნიშნეთ, (15.37ა,ბ) ფორმულების თანახმად ანტისიმეტრიული ტალღური ფუნქციის აგების ორი შესაძლებლობა არსებობს. თუ ერთელექტრონიან მიახლოებას სპინური $\Phi(\sigma_1, \sigma_2)$ ტალღური ფუნქციისათვისაც გამოვიყენებთ, მაშინ სიმეტრიული სპინური ტალღური ფუნქციისათვის შეგვიძლია დავწეროთ

$$\begin{aligned}\Phi_s^1(\sigma_1, \sigma_2) &= \varphi^+(\sigma_1)\varphi^+(\sigma_2) \\ \Phi_s^2(\sigma_1, \sigma_2) &= \varphi^+(\sigma_1)\varphi^-(\sigma_2) + \varphi^-(\sigma_1)\varphi^+(\sigma_2) \\ \Phi_s^3(\sigma_1, \sigma_2) &= \varphi^-(\sigma_1)\varphi^-(\sigma_2),\end{aligned}\tag{15.46}$$

ხოლო ანტისიმეტრიული სპინური ფუნქციისათვის კი გვექნება

$$\Phi_a(\sigma_1, \sigma_2) = \varphi^+(\sigma_1)\varphi^-(\sigma_2) - \varphi^-(\sigma_1)\varphi^+(\sigma_2),\tag{15.47}$$

სადაც $\varphi^+(\sigma)$ და $\varphi^-(\sigma)$ წარმოადგენენ ელექტრონის მდგომარეობებს სათანადოდ სპინის $\hbar/2$ და $-\hbar/2$ პროექციებით. ამ განმარტების თანახმად $\Phi_s^1, \Phi_s^2, \Phi_s^3$ ფუნქციები აღწერენ ორელექტრონიანი სისტემის მდგომარეობას $S=1$ სპინური კვანტური რიცხვით, ხოლო Φ_a ფუნქცია კი შეესაბამება ორელექტრონიანი სისტემის $S=0$ კვანტური რიცხვის მქონე მდგომარეობას.

თუ გავითვალისწინებთ იმას, რომ პაულის პრინციპის თანახმად სიმეტრიულ სპინურ ფუნქციას უნდა შეესაბამებოდეს ანტისიმეტრიული კოორდინატული ფუნქცია და პირიქით, მაშინ გამოდის, რომ პარაჰელუმს შეესაბამება $S=0$ ე.წ. სინგლეთური მდგომარეობა, ხოლო ორთოჰელიუმს კი $S=1$ ტრიპლეთური მდგომარეობა შეესაბამება.

ამრიგად, თუ ელექტრონთა იგივეურობის თვისებასა და ელექტრონის სპინის არსებობას გავითვალისწინებთ (ორივე ეს თვისება მიკრონაწილაკის წმინდა კვანტური მახასიათებლებია) დავრწმუნდებით იმაში, რომ ბუნებაში არ არსებობს ორი სხვადასხვა ქიმიური ელემენტი: პარაჰელიუმი და ორთოჰელიუმი. ესენი ერთი ქიმიური ელემენტის, ჰელიუმის, სხვასხვა მდგომარეობები არიან. ექსპერიმენტზე ჰელიუმის სპექტრის შესწავლისას დაიმზირება გადასვლები პარაჰელიუმის მდგომარეობებს შორის, ასევე ორთოჰელიუმის მდგომარეობებს შორის. $\Delta S = 0$ შერჩევის წესის გამო პარაჰელიუმის ორთოჰელიუმში გადასვლა პრაქტიკულად არ ხორციელდება.

სპინ-ორბიტალური ურთიერთქმედების გათვალისწინებას მდგომარეობების J კვანტური რიცხვით გადაგვარების მოხსნამდე მივყავართ. ჰელიუმის ატომში სპინ-ორბიტალური ურთიერთქმედების ენერგია მცირეა ელექტრონებს შორის კულონური ურთიერთქმედების ენერგიასთან შედარებით და ამიტომაც მისი გათვალისწინებით ენერგეტიკული დონეების გახლეჩაც მცირე გამოდის. ისეთ ატომურ სისტემებში, რომლებშიც ძირითად მდგომარეობაში შევსებული გარსების გარეთ, კიდევ ორი ელექტრონი გააჩნიათ, სპინ-ორბიტალური ურთიერთქმედება უფრო ძლიერდება. ამის გამო $\Delta S = 0$ შერჩევის წესი შედარებით არამკაცრი ხდება და როგორც შედეგი ასეთი ატომების გამოსხივების სპექტრებში ე.წ. ინტერკომბინაციური, ანუ სინგლეტურ და ტრიპლეტურ მდგომარეობებს შორის გადასვლები დაბალი ინტენსივობით დაიმზირება.

ატომი გარეშე მაგნიტურ ველში

სინათლეზე მაგნიტური ველის გავლენის შესწავლა სათავეს ჯერ კიდევ მაიკლ ფარადეის შრომებიდან იღებს (1791-1867). როდესაც 1820 წელს ერსტედმა ელექტროდენის მოქმედებით მაგნიტური ისრის გადახრის მოვლენა აღმოაჩინა, ფარადეიმ თავის დღიურში ჩაწერა ცნობილი ფრაზა: „გადავაქციოთ მაგნიტიზმი ელექტროზად“. ამის შემდეგ ათი წლის შრომის შედეგად ფარადეიმ აღმოაჩინა ელექტრომაგნიტური ინდუქციის კანონი, დიამაგნეტიზმი და ელექტროლიზი. მანვე დაადგინა, რომ მაგნეტიზმს შეეძლო სინათლის სხივებზე ზემოქმედება და რომ ამ ორ ფენომენს შორის არსებობს ურთიერთგავლენა. დღეისათვის მსგავსი ეფექტების არსებობა ჩვეულებრივ მოვლენად გვეჩვენება, რადგანაც ცნობილია, რომ ელექტრონებს, ისევე როგორც ატომებს, გააჩნიათ მაგნიტური მომენტი, ანუ თავს ავლენენ როგორც მიკროსკოპული მაგნიტები. მე-19 საუკუნის ბოლოს ნიდერლანდელი ფიზიკოსის პიტერ ზეემანის მიერ ატომებზე ჩატარებული ექსპერიმენტების შედეგები მეტად საინტერესოდ გამოიყურებოდა. ამ თავში შევისწავლით გარეშე მაგნიტური ველის მხრიდან ატომთა გამოსხივების სპექტრზე ზეგავლენას, რომელიც ზეემანის ეფექტით არის ცნობილი.

ზეემანის ეფექტი

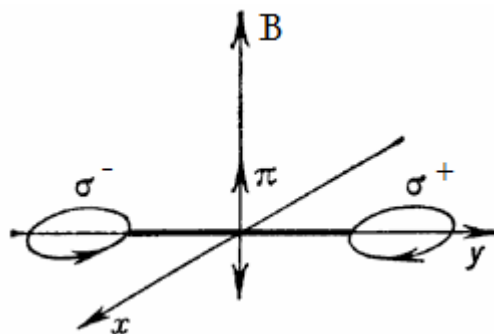
ზეემანმა მაგნიტის პოლუსებს შორის ნატრიუმის მცირე ნიმუში მოათავსა. გაამოირკვა, რომ სიხშირეთა ყველა ინტერვალისთვის მაგნიტური ველის გაძლიერებასთან ერთად ნატრიუმის ატომის გამოსხივების სპექტრალური ხაზები განირთხმეოდა, ანუ სპექტრში ახალი სიხშირის გამოსხივებები ჩნდებოდა. ამით პირველად დამტკიცდა ე.წ. *ზეემანის ეფექტის*, ანუ გარეშე მაგნიტურ ველში სპექტრალური ხაზების გახლეჩის მოვლენა.

ზეემანის ეფექტის ბუნებაში გარკვევა ყველაზე უფრო მარტივია ატომის აგებულების ბორის პლანეტარულ მოდელზე დაყრდნობით. მართლაც, ბორის თანახმად ელექტრონი ატომში ასრულებს რა ე.წ. „კვანტურ ნახტომს“, ანუ გადადის მაღალი ენერგეტიკული დონიდან დაბალზე, ატომი ასხივებს ფოტონს მკაცრად განსაზღვრული სიხშირით, რომელიც ზუსტად ამ ენერგეტიკულ დონეებს შორის სხვაობას შეესაბამება. ახლა თუ გავითვალისწინებთ, რომ ელექტრონი რეალურად წარმოადგენს მიკროსკოპულ მაგნიტს, ხოლო თვით ატომი მოთავსებულია გარეშე მაგნიტურ ველში ელექტრონის ენერგია დამოკიდებული იქნება მისი სპინის გარშე ველის მიმართ ორიენტაციაზე. თუ ელექტრონის ორბიტაზე მოძრაობისას მისი სპინი და გარეშე მაგნიტური ველი თანამიმართულია ელექტრონის აქვს ერთი ენერგია, ხოლო თუ სპინი ორიენტირებულია ველის საპირისპიროდ – სხვა. გამოდის რომ, ერთსა და იმავე ორბიტალზე მოძრავი სპინის სხვადასხვა ორიენტაციის მქონე

ელექტრონებს გააჩნიათ სხვადასხვა ენერგიები და შედეგად თითოეული ენერგეტიკული დონე იხლიჩება ორ ქვედონედ. შესაბამისად, იქ სადაც მაგნიტური ველის გარეშე არსებობდა კვანტური გადასვლის შესაბამისი მხოლოდ ერთი ენერგია, ველის არსებობისას ადგილი ექნება გადასვლის შესაბამის ოთხ შესაძლო ენერგიას. გამოსხივების სპექტრზე ეს აისახება იმაში, რომ ერთი მკვეთრად გამოხატული გამოსხივების ხაზის ნაცვლად გვექნება გამოსხივების ოთხი ერთმანეთისგან თანაბრად დაშორებული ხაზი. თუმცა ზემანის თავდაპირველ ექპერიმენტებში ამ ოთხი ხაზის ნაცვლად დაიმზირებოდა განრთხმული ხაზების ერთობლიობა. მაგრამ შემდგომში მაგნიტის სიმძლავრის გაზრდისა და სპექტროსკოპიური ხელსაწყოების გარჩევისუნარიანობის ამაღლების შედეგად გამოიკვეთა ზემოლნიშნული ოთხი ხაზი, ისე როგორც ამას თეორია წინანარმეტყველებდა.

ზემანის ეფექტის კლასიკური ახსნა

როგორც ზემოთ მოყვანილი მსჯელობიდან გამოიკვეთა ზემანის ეფექტი წმინდა კვანტური მოვლენაა და მისი სრული ახსნა მხოლოდ კვანტური მექანიკის გამოყენებით არის შესაძლებელი. თუმცა თავდაპირველად ზემანის ეფექტის ახსნას კლასიკური ფიზიკის გამოყენებით ლორენცი შეეცადა. სიმარტივისათვის განვიხილოთ წყალბადისმაგვარი ერთელექტრონიანი იონი ან წყალბადის ატომი. კლასიკური ფიზიკის თანახმად, ელექტრონი ატომში ასრულებს წრიულ ორბიტაზე მოძრაობას, რაც ეკვივალენტურია ელექტრონის მიერ უბრალო ჰარმონიული რხევითი მოძრაობის შესრულებისა. ასეთი მოძრაობის შესაბამისი გამოსხივების სპექტრი მკაცრად მონოქრომატული იქნება (განსაზღვრული სიხშირის მქონე გამოსხივებით). ამასთან თითოეული იზოლირებული ატომის მიერ გამოსხივებული სინათლე წრფივად პოლარიზებული აღმოჩნდება. მოვათავსოთ ატომი \vec{B} მაგნიტური ინდუქციის მქონე გარეშე ერთგვაროვან მაგნიტურ ველში. ელექტრონის ჰარმონიული რხევითი მოძრაობა დავყოთ ორად: მოძრაობის ერთი მდგენელი აღწერს ელექტრონის მოძრაობას \vec{B} ველის გასწვრივ, ხოლო მეორე – მოძრაობას ველის პერპენდიკულარულ სიბრტყეში (იხილეთ ნახაზი 16.1). ბიო-სავარის კანონის თანახმად ველის



ნახ. 16.1. ზემანის ეფექტის კლასიკური წარმოდგენა

გასწვრივ მოძრაობის მდგენელზე მაგნიტური ველის მხრიდან არავითარი ძალა ცხადია, რომ ელექტრონის წრიული მოძრაობის T პერიოდი დაემთხვევა ზემოაღნიშნული პარმონიული რხევის პერიოდს. ავღნიშნოთ R -ით ელექტრონის წრიული ორბიტის რადიუსი, ხოლო v_0 -თი ელექტრონის სიჩქარე. პარმონიული რხევითი მოძრაობა ეს არის მოძრაობა, რომელიც ცენტრისკენ მიმართული და წონასწორობიდან გადახრის პროპორციული ძალის მოქმედებით ხორციელდება $F = fr$, სადაც f პროპორციულობის კოეფიციენტი, ხოლო r – გადახრა წონასწორობიდან. როცა $r = R$ ეს ძალა უნდა გაუტოლდეს ცენტრიდანულ ძალას $fr = \frac{mv_0^2}{2}$. ელექტრონის

ორბიტაზე წრიული მოძრაობის სიჩქარე $v = \frac{2\pi R}{T} = 2\pi v_0 R$, სადაც v_0 ელექტრონის წრიულ ორბიტაზე მიმოქცევის პერიოდის შებრუნებული სიდიდე, ანუ სიხშირეა. ზემოაღნიშნულის თანახმად ეს მოძრაობა გაიგივებულია ელექტრონის რხევით მოძრაობასთან და ამიტომ ცნობილი ფორმულის თანახმად $T = 2\pi \sqrt{\frac{m_e}{f}}$, სადაც m_e

ელექტრონის მასაა. ადვილად შეგვიძლია f გამოვსახოთ v_0 -ისა და m_e -ს საშუალებით $f = 4\pi^2 v_0^2 m_e$. გარეშე მაგნიტურ ველის პერპენდიკულარულ სიბრტყეში წრიულ ორბიტაზე საათის ისრის მიმართულებით მოძრავ ელექტრონზე იმოქმედებს ლორენცის ძალა, რომელიც მიმართული იქნება ცენტრიდან და მოდულით ტოლია $F_L = evB$ (ეს ფორმულა ჩანერილია ერთეულთა საერთაშორისო SI სისტემაში, გაუსის ერთეულთა სისტემაში დამატება $1/c$ მამარავლი, სადაც c ვაკუუმში სინათლის სიჩქარეა). ამჯერად უკვე ელექტრონზე, გარდა fr ცენტრიდანული ძალისა, დამატებით იმოქმედებს ასევე F_L ცენტრიდანული ძალაც, რაც ჯამში კვლავ უნდა დაკომპენსირდეს ცენტრისკენული ძალით, ანუ

$$\frac{m_e v_1^2}{R} = fr + evB. \quad (16.1)$$

ოღონდ ამ შემთხვევაში სიჩქარე უკვე სხვა იქნება $v_1 = 2\pi v_1 R$. თუ ახლა (16.1) ფორმულაში შევიტანთ v_1 -ისა და f -ის გამოსახულებებს და ასევე შემოვიტანთ კუთხურ სიჩქარეს, $\omega = 2\pi\nu$ თანაფარდობით მივიღებთ

$$\omega_1^2 - \omega_0^2 = \omega_1 \Omega_L \quad (16.2)$$

სადაც $\Omega_L = \frac{eB}{2m_e}$ -ს ლარმორის სიხშირე ეწოდება. ლაბორატორიულ პირობებში მიღწევადი მაგნიტური ველის მნიშვნელობები ისეთია, რომ შესრულებულია პირო-

ბა $\Omega_L \ll \omega_0$ და ამიტომ (16.2) კვადრატული განტოლების მიახლოებითი ამონახსნი ასე გამოიყურება

$$\omega_1 = \omega_0 + \Omega_L. \quad (16.3)$$

სრულიად ანალოგიურად მივიღებთ, რომ საათის ისრის საწინააღმდეგო მიმართულებით მბრუნავი ელექტრონისთვის ადგილი ექნება ტოლობას

$$\omega_1 = \omega_0 - \Omega_L. \quad (16.4)$$

ამრიგად, ატომის გარეშე მაგნიტურ ველში შეტანისას ელექტრონი, ნაცვლად ბირთვის გარშემო წრიულ ორბიტაზე ბრუნვისა, მაგნიტური ველის მიმართულების ირგვლივ ასრულებს რთული ტრაექტორის მქონე მოძრაობას, რომელიც შეიძლება წარმოვიდგინოთ სამი მოძრაობის ერთობლიობად: \vec{B} ველის გასწვრივ ω_0 სიხშირის ჰარმონიულ რხევად და \vec{B} -ს პერპენდიკულარულ სიბრტყეში ორი ურთიერთსაპირისპირო მიმართულებით ω_1 და ω_2 სიხშირეებით ბრუნვად. ამასთან ატომის ელექტრონული განაწილების ღრუბელი \vec{B} მაგნიტური ველის ირგვლივ პრეცესირებს ლარმორის სიხშირით.

თუ გამოსხივებას დავაკვირდებით \vec{B} მაგნიტური ველის გასწვრივ, მაშინ ω_0 სიხშირის ჰარმონიული რხევის შესაბამის გამოსხივებას ვერ დავინახავთ, რადგანაც სინათლის ტალღები განივი ტალღებია და ვრცელდება რხევითი მოძრაობის პერპენდიკულარულად. რაც შეეხება \vec{B} -ს პერპენდიკულარულ სიბრტყეში ორი ურთიერთსაპირისპირო მიმართულებით ბრუნვას, მათ შეესაბამება სათანადოდ ω_1 და ω_2 სიხშირეების წრიულად პოლარიზებული გამოსხივებები. ამასთან საათის ისრის მიმართულებით ბრუნვას შეესაბამება ω_1 სიხშირე, ხოლო საათის ისრის საწინააღმდეგო მიმართულებით ბრუნვას – ω_2 (ე.წ. σ^+ და σ^- კომპონენტები იხილეთ ნახაზი 16.1). რადგანაც ელექტრონის მუხტი უარყოფითია ამიტომ $\omega_1 < \omega_0$ და σ^+ ანუ საათის ისრის მიმართულებით პოლარიზებული გამოსხივების ω_1 სიხშირე წაინაცვლებს სპექტრის ინფრანითელი არისკენ, ხოლო σ^- ანუ საათის ისრის მოძრაობის საპირისპირო წრიული პოლარიზაციის გამოსხივების ω_2 სიხშირე წაინაცვლებს სპექტრის ულტრაიისფერი არისკენ. ამრიგად, მაგნიტური ველის გასწვრივ დაკვირვებისას ერთი სპექტრალური ხაზის ნაცვლად დაიმზირება ორი ურთიერთსაპირისპიროდ წრიულად პოლარიზებული გამოსხივება. ისინი საწყისი ω_0 სიხშირის მიმართ სიმეტრიულად იქნებიან წანაცვლებული Ω_L ლარმორის სიხშირით.

თუ გამოსხივებას დავაკვირდებით \vec{B} მაგნიტური ველის პერპენდიკულარულად, მაშინ ველის გასწვრივ რხევა მოგვცემს წრფივად პოლარიზებულ ω_0 სიხში-

რის რხევას, ხოლო ველის პერპენდიკულარულ სიბრტყეში α_1 და α_2 სიხშირეებით რხევას კი შეესაბამება ასევე ნრფივად პოლარიზებული გამოსხივება, რადგანაც ველის პერპენდიკულარულ სიბრტყეში ბრუნვითი მოძრაობა ველის მიმართ პერპენდიკულარულად დაკვირვებისას აღიქმება რხევით მოძრაობად. ამრიგად, ველის პერპენდიკულარულად დაკვირვებისას, ნაცვლად ერთი სპექტრალური ხაზისა, იარსებებს სამი ხაზი: ერთი ძირითადი α_0 სიხშირის შესაბამისი ველის გასწვრივ ნრფივად პოლარიზებული გამოსხივება (ე.წ. π კომპონენტი) და ორი ნანაცვლებული α_1 და α_2 სიხშირეების მქონე ველის პერპენდიკულარულად ურთიერთსაპირისპირო ნრფივი პოლარიზაციის მქონე გამოსხივებები (ე.წ. σ კომპონენტები).

ზეემანის ექსპერიმენტები ძალიან დიდ სირთულეებს უკავშირდებოდა. საკმარისია აღინიშნოს, რომ დაახლოებით 25000 გაუსი მაგნიტური ველის ინდუქციის დროს ნატრიუმის ატომის $\lambda = 5000 \text{ \AA}$ ტალღის სიგრძის შესაბამის ე.წ. ზეემანის ტრიპლეტის კომპონენტებს შორის სხვაობა დაახლოებით $\Delta\lambda = 0.3 \text{ \AA}$ -ის ტოლი იყო. მაგრამ მიუხედავად ამისა, ზეემანმა შესძლო ექსპერიმენტულად გაეზომა $\Delta\lambda$ და შემდეგ
$$\Delta\lambda = \frac{eB\lambda_0^2}{4\pi m_e c}$$
 ფორმულიდან განესაზღვრა $\frac{e}{m_e}$ შეფარდება. აღმოჩნდა, რომ ცდომილების ფარგლებში ამ შეფარდების მნიშვნელობა დაემთხვა სხვა ფიზიკური დაკვირვების შედეგად მიღებულ ამავე შეფარდების მნიშვნელობას ($e/m_e = 1.764 \cdot 10^7$ მიღებული ზეემანის ეფექტით ფორტრას მიერ და $e/m_e = 1.769 \cdot 10^7$ მიღებული მილიკენის მიერ ელექტრონული გაზომვებით). როგორც ვხედავთ თანხვედრა საკმარისად შთამბეჭდავია).

ზეემანის ეფექტის კვანტური ახსნა

წინა პარაგრაფში მიღებული შედეგი მხოლოდ ნაწილობრივ ხსნის ზეემანის ეფექტს, ანუ სპექტრალური ხაზების სამად გახლეჩას ე.წ. ზეემანის ნორმალურ ეფექტს. მაგრამ აღმოჩნდა, რომ არსებობს გარეშე მაგნიტური ველის მნიშვნელობების ისეთი ინტერვალის, სადაც ადგილი აქვს სპექტრალური ხაზების არა სამ, არამედ უფრო მეტ კომპონენტებად გახლეჩას. ეს ეფექტი ცნობილია ზეემანის (ანომალური) რთული ეფექტის სახელწოდებით. საერთოდ ზეემანის ეფექტის კვანტურ ახსნაში გადამწყვეტი როლი სწორედ გარეშე მაგნიტური ველის სიდიდეს ენიჭება. კერძოდ, თუ ატომის გარეშე მაგნიტურ ველთან ურთიერთქმედებით გამოწვეული დონეთა გახლეჩა სპინ-ორბიტალური ურთიერთქმედებით გამოწვეულ დონეთა გახლეჩაზე ნაკლებია ასეთ შემთხვევაში ვიტყვი, რომ გარეშე ველი სუსტია, ხოლო თუ პირიქით – მაშინ ველი ძლიერია.

სუსტი ველის შემთხვევაში, როცა ადგილი აქვს LS ბმას, გარეშე მაგნიტური ველი ატომს, როგორც J მომენტის მქონე ობიექტს, ისე „აღიქვამს“. ამიტომ ატო-

მის გარეშე მაგნიტურ ველში შეტანისას მაგნიტური მომენტის ველთან ურთიერთქმედების შედეგად ატომი დამატებით იძენს ენერგიას

$$\Delta E = -(\vec{\mu}_J \vec{B}) = -\mu_0 g B m_J \quad (16.5)$$

სადაც m_J (15.7) ფორმულით განსაზღვრული ატომის სრული მაგნიტური მომენტის გარეშე ველის მიმართულებაზე პროექციაა (იგულისხმება, რომ Z ღერძი \vec{B} ველის გასწვრივ არის მიმართული). აქედან გამომდინარეობს, რომ J კვანტური რიცხვის შესაბამისი ენერგეტიკული დონეები გარეშე მაგნიტურ ველში ერთმანეთისგან თანაბრად დაშორებულ $2J+1$ ქვედონედ იხლიჩება. ამასთან გახლეჩის სიდიდე g ლანდეს ფაქტორზეა დამოკიდებული. ამრიგად გარეშე მაგნიტური ველის მიერ დონეების გახლეჩის გამო იხსნება ატომის ენერგეტიკული დონეების m_J კვანტური რიცხვით გადაგვარება.

აუცილებელია აგრეთვე გავითვალისწინოთ, რომ ზეემანის სხვადასხვა დონეების ქვედონეებს შორის დასაშვებია მხოლოდ ისეთი გადასვლები, რომლებიც $\Delta m_J = 0, \pm 1$ შერჩევის წესებით არის ნებადართული. ω_0 სიხშირის გამოსხივების ω სიხშირის ზეემანის კომპონენტები გამოითვლება ფორმულით

$$\begin{aligned} \omega &= \frac{E_2 + \Delta E_2}{\hbar} - \frac{E_1 + \Delta E_1}{\hbar} = \\ &= \frac{E_2 - E_1}{\hbar} + \frac{\Delta E_2 - \Delta E_1}{\hbar} = \omega_0 + \Delta\omega \end{aligned} \quad (16.6)$$

სადაც $\Delta\omega$ ზეემანის წანაცვლება ω_0 -ის მიმართ ტოლია

$$\Delta\omega = (m_2 g_2 - m_1 g_1) \mu_0 B / \hbar \quad (16.7)$$

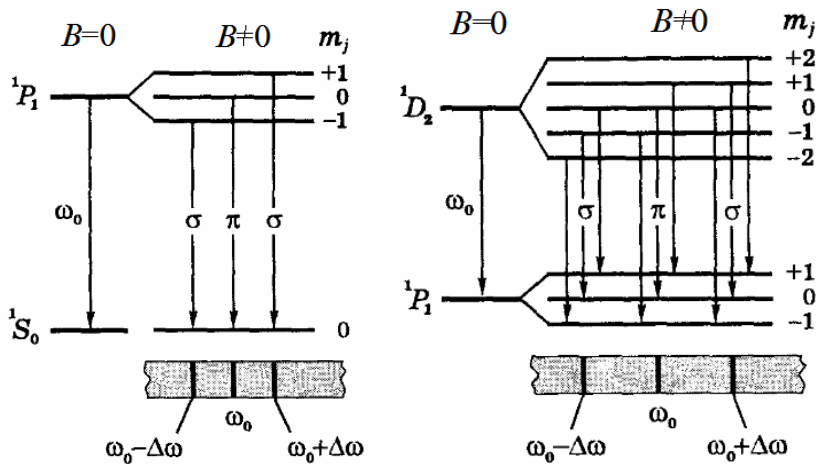
ზეემანის მარტივი ეფექტი

ასე ეწოდება ზეემანის ეფექტს, როდესაც მაგნიტური ველის პერპენდიკულარულად დაკვირვებისას სპექტრალური ხაზები სამად იხლიჩება. მარტივი ეფექტი დამახასიათებელია იმ სპექტრალური ხაზებისათვის, რომელთაც არ გააჩნიათ ფაქიზი სტრუქტურა. ეს ხაზები ჩნდებიან სინგლეტურ მდგომარეობებს შორის გადასვლისას $S = 0, J = L, g = 1$. ამ შემთხვევაში (16.7) ფორმულა ასე გამარტივდება

$$\Delta\omega = \Delta m_L \mu_0 B / \hbar$$

სადაც $\Delta m_L = 0, \pm 1$, ანუ მართლაც მიიღება ზეემანის სამი კომპონენტი

$$\Delta\omega = \mu_0 B / \hbar, \quad 0, \quad -\mu_0 B / \hbar. \quad (16.8)$$



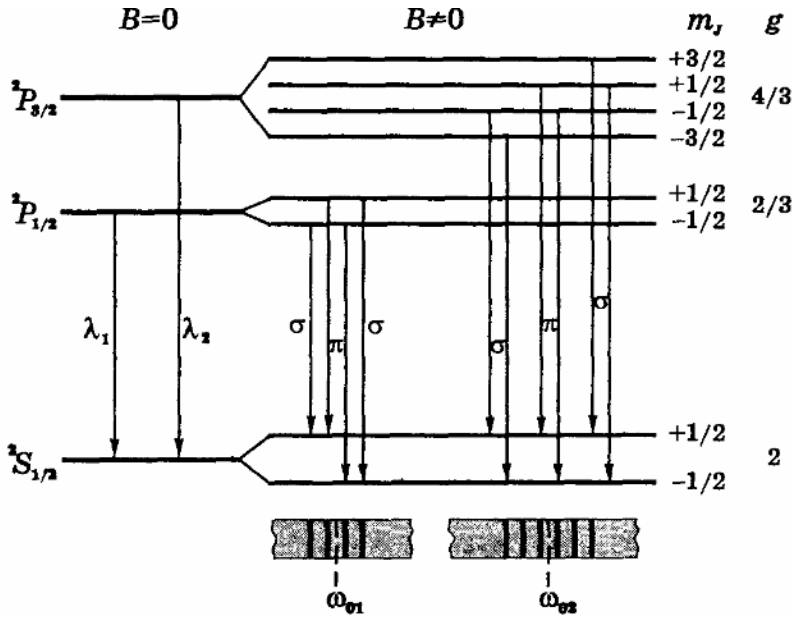
ნახ. 16.2. ზეემანის მარტივი ეფექტი

ნახაზ 16.2-ის მარცხენა ნახაზზე ნაჩვენებია $^1P \rightarrow ^1S$ გადასვლით გამოწვეული ზეემანის კომპონენტები. შედარებით რთული შემთხვევა წარმოდგენილი ნახ. 16.1-ის მარჯვენა ნახაზზე სადაც ნაჩვენებია $^1D \rightarrow ^1P$ გადასვლებით გამოწვეული ზეემანის კომპონენტები. თუმცა შერჩევის წესების გათვალისწინებით აქაც ადგილი აქვს სპექტრალური ხაზების სამად გახლეჩის მოვლენას.

ზეემანის რთული (ანომალური) ეფექტი

ასე ეწოდება ეფექტს, როდესაც სპექტრალური ხაზები სამზე მეტ კომპონენტებად იხლიჩება (საზოგადოდ ზეემანის რთული ეფექტის შემთხვევაში ხაზების რიცხვი რამოდენიმე ათეულსაც კი აღწევს). ეს განპირობებულია ელექტრონის სპინის არსებობით და მისი გაორმაგებული დამაგნიტებულობით. მათემატიკურად ეს აისახება იმაში, რომ ლანდეს ფაქტორი უკვე განსხვავებულია ერთისგან. ზეემანის რთული ეფექტის ახსნა შესაძლებელია იმ დაშვებით, რომ ადგილი აქვს LS ბმას. ეს დაშვება ექსპერიმენტულად მტკიცდება.

ნახაზ 16.3-ზე მარცხენა მხარეს ნაჩვენებია დონეების სპინ-ორბიტალური ურთიერთქმედებით გამოწვეული ბუნებრივი გახლეჩა (λ_1 და λ_2 კომპონენტები). მარჯვენა მხარეს კი წარმოდგენილია $\Delta m_j = 0, \pm 1$ შერჩევის წესების გათვალისწინებით გამოწვეული ზეემანის კომპონენტები. ზეემანის რთული ეფექტი დაიმზირება სუსტ მაგნიტურ ველებში, როდესაც ზეემანისეული გახლეჩა ნაკლებია ფაქიზი სტრუქტურის კომპონენტებს შორის ინტერვალზე (ანუ $\lambda_1 - \lambda_2$ სხვაობაზე). თუ როგორ ეფექტს (მარტივს თუ რთულს) ექნება ადგილი ატომის სუსტ მაგნიტურ ველში შეტანისას, დამოკიდებულია იმაზე თუ როგორია დონეების შესაბამისი ლანდეს ფაქტორები. კერძოდ, თუ $g_1 = g_2$ მაშინ ადგილი აქვს მარტივ, ხოლო თუ $g_1 \neq g_2$ – რთულ ეფექტს.



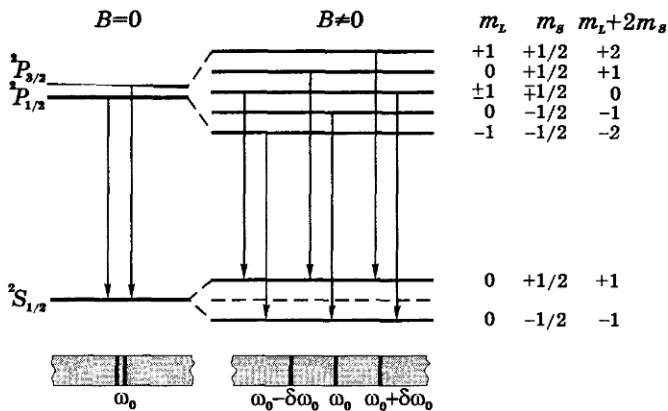
ნახ. 16.3. ზემანის რთული ეფექტი

პაშენ-ბაკის ეფექტი

ძლიერი მაგნიტური ველის შემთხვევაში (მეორე ზღვრული შემთხვევა) M_L და M_S მომენტებს შორის კავშირი წყდება და ისინი ერთმანეთისგან დამოუკიდებლად ურთიერთქმედებენ გარეშე მაგნიტურ ველთან. ამ შემთხვევაში (16.4) ფორმულის ნაცვლად გვექნება

$$\Delta E = -\mu_0 B (m_L + 2m_S) \quad (16.9)$$

და $\Delta m_L = \pm 1$, $\Delta m_S = 0$ შერჩევის წესებით დასაშვები გადასვლები ნახაზ 16.4-ზეა წარმოდგენილი.



ნახ. 16.4. პაშენ-ბაკის ეფექტი

როგორც ვხედავთ ამ შემთხვევაში კვლავ მიიღება ზეემანისეული ტრიპლეტი. თუ ძლიერი მაგნიტური ველით გამოწვეული გახლეჩა აღემატება ფაქიზი სტუქტურის დონეებს შორის ინტერვალს, მაშინ ვიტყვით, რომ ადგილი აქვს პაშენ-ბაკის ეფექტს.

ამრიგად, მაგნიტური ველის ინდუქციის ზრდასთან ერთად ჩვენ ჯერ დავაკვირდებით ზეემანის მარტივ ეფექტს, შედგომი ველის გაძლიერება გამოიწვევს ზეემანის მარტივი ეფექტის რთულში გადასვლას, ხოლო ძლიერი ველების შემთხვევაში კი კვლავ მიიღება ზეემანის ტრიპლეტი პაშენ ბაკის-ეფექტი, ანუ რთული ეფექტის მარტივში გადასვლის მოვლენა.

დაბოლოს, აღსანიშნავია, რომ გახლეჩის სიდიდე საკმაოდ მცირეა ლაბორატორიულ პირობებში შესაძლო ძლიერი ველების მიღების შემთხვევაშიც კი. ამიტომ ასეთი მცირე გახლეჩის ეფექტების აღმოსაჩენად საჭიროა მაღალი გარჩევის უნარიანობის მქონე ოპტიკური ხელსაწყოები, მაგალითად როგორც არის ე.წ. ფაბრი-პეროს ინტერფერომეტრი.

ელექტრონულ პარამაგნიტური რეზონანსი

ატომის ელექტრონული გარსები პირობითად შეიძლება წარმოვიდგინოთ, როგორც ელექტრონების წრიული დენებისგან შემდგარი მდგომარეობები. ეს წრიული დენები ატომში ქმნიან საკუთარ მაგნიტურ ველებს. ელექტრულ დენზე გავლენას ახდენს გარეშე მაგნიტური ველი, რომლის მოქმედების შედეგად მოსალოდნელია ან მაგნიტური ველის გაძლიერება, თუ ატომური მაგნიტური ველები გარეშე ველის თანამიმართულია ან პირიქით ველის შესუსტება თუ ატომური ველები გარეშე ველის საპირისპიროდ არიან ორიენტირებული. ნივთიერებებს, რომლებშიც ადგილი აქვს გარეშე ველის გაძლიერების ეფექტს *პარამაგნიტური* ნივთიერებები ეწოდება. პარამაგნიტურ ნივთიერებებს განეკუთვნებიან მეტალები (Al) ალუმინი, (Pt) პლატინა ასევე ტუტე მეტალები და მათი შენაერთები, (O₂) ჟანგბადი, (NO) აზოტის ოქსიდი, (MnO) მარგანეცის ოქსიდი და ა.შ. პარამაგნიტური ნივთიერებები ძალზედ სუსტად აძლიერებენ გარეშე მაგნიტურ ველს. ეს გამოწვეულია იმით, რომ ასეთ ნივთიერებებს ძალზედ დაბალი მაგნიტური შეღწევადობა ახასიათებთ. ამის გამო ყოველდღიურ პრაქტიკაში პარამაგნიტური ნივთიერებები განიხილებიან როგორც ნივთიერებები, რომლებიც არ განიცდიან გარეშე მაგნიტური ველის მხრიდან ზემოქმედებას. მაგრამ, მიუხედავად ამისა, პარამაგნიტურ ნივთიერებებში მაინც დაიმზირება ე.წ. *პარამაგნიტური რეზონანსის მოვლენა (ეპრ)*, ანუ მოვლენა, რომლის დროსაც ადგილია აქვს პარამაგნიტური ნივთიერების ატომების გარშე ერთგვაროვან მაგნიტურ ველში მოთავსებისას ელექტრომაგნიტური გამოსხივების შთანთქმას.

როგორც ზევით ვნახეთ, J კვანტური რიცხვის შესაბამისი ენერგეტიკული დონეები გარეშე მაგნიტურ ველში ერთმანეთისგან თანაბრად დაშორებულ $2J + 1$ ქვედონედ იხლიჩება. ამასთან მეზობელ ქვედონეებს შორის ენერგეტიკული ინტერ-

ვალი $\delta E = \mu_0 g B$ სიდიდის ტოლია. თუ ასეთ მდგომარეობაში მყოფ ატომს დავასხივებთ ელექტრომაგნიტური გამოსხივებით, რომლის სიხშირეც $\hbar\omega = \delta E = \mu_0 g B$ ტოლობით განისაზღვრება, მაშინ ელექტრომაგნიტური ტალღის მაგნიტური მდგენელის გავლენით და $\Delta m_j = 0, \pm 1$ შერჩევის წესების გათვალისწინებით ადგილი ექნება ატომის ერთსა და იმავე დონის შესაბამის ზემანის ქვედონეებს შორის გადასვლას. ამაში მდგომარეობს ელექტრონული პარამაგნიტური რეზონანსის მოვლენა, რომელიც 1944 წელს ე.კ. ზავოისკის მიერ იქნა აღმოჩენილი. ადვილად შეეძლებოდა აღნიშნული გადასვლების შესაბამისი რეზონანსული სიხშირის გამოთვლასაც. მართლაც ლაბორატორიულ პირობებში მიღებული ტიპიური მაგნიტური ველები დაახლოებით $B \cong 10^4$ გაუსის, ანუ 1 ტესლას რიგისაა. თუ დავუშვებთ, რომ $g \cong 1$ საძიებელი სიხშირისათვის მივიღებთ

$$\nu = \frac{\omega}{2\pi} = \frac{\mu_0 B}{2\pi\hbar} \cong 10^{10} \text{ ჰერცი}$$

რასაც შეესაბამება დაახლოებით რამდენიმე სანტიმეტრის რიგის ტოლი ტალღის სიგრძე. მივიღეთ, რომ რეზონანსული სიხშირეები მდებარეობენ სპექტრის რადიოსიხშირეულ დიაპაზონში ე.წ. ზემაღალ სიხშირეთა დიაპაზონში. აღსანიშნავია, რომ რეზონანსის მოვლენისას ენერგია არა მხოლოდ ატომს გადაეცემა არამედ პირიქითაც – ატომის მხრიდან ველს, თუ გადასვლა ხდება ზემანის უფრო მაღალი ქვედონიდან დაბალზე. მაგრამ სითბური წონასწორობისას ნაკლები ენერგიის მქონე ატომების რიცხვი აღემატება მეტი ენერგიის მქონე ატომების რიცხვს. ამიტომ ატომის ენერგიის გაზრდით მიმდინარე გადასვლები აჭარბებს პირიქით გადასვლებს. ასე რომ, შედეგად პარამაგნიტური ნივთიერება შთანთქმავს ველის ენერგიას და თბება.

ეპრ ექსპერიმენტები ატომის მაგნიტური მომენტის განსაზღვრის შესაძლებლობას იძლევა. მართლაც თუ გავზომავთ B მაგნიტური ველისა და რეზონანსული ν სიხშირის მნიშვნელობებს, რეზონანსის $\hbar\omega = \delta E = \mu_0 g B$ ფორმულიდან ვიპოვიტ g -ს და შესაბამისად ატომის მაგნიტურ მომენტს J კვანტური რიცხვის შესაბამის მდგომარეობაში. აღსანიშნავია, რომ ეპრ ერთ-ერთი ყველაზე მარტივი და ფართოდ გავრცელებული რადიოსპექტროსკოპიული კვლევის მეთოდია, რომლითაც შესაძლებელია ნივთიერების აგებულების ბევრი თავისებურებების შესწავლა. მისი სიზუსტე ასეულათასჯერ აღემატება ოპტიკური მეთოდების გარჩევისუნარიანობას.

ორატომიანი მოლეკულა

მართალია მოლეკულა ელექტრულად ნეიტრალური ატომებისგან შედგება, მაგრამ ამ ატომების მოლეკულაში შემაკავებელი ძალები მაინც ელექტრომაგნიტური ბუნებისაა. მოლეკულის აგებულების, მისი ენერგეტიკული სპექტრის, ელექტრული და მაგნიტური თვისებების და ა.შ. თეორიული შესწავალა პრინციპში არ განსხვავდება ატომის სათანადო თვისებების შესწავლისგან, მაგრამ მოლეკულათა თეორიაში მაინც არსებობს გარკვეული მოდელეები და გამოთვლის მეთოდები, რომლებიც არ გვხვდება ატომურ თეორიებში.

წყალბადის მოლეკულა

როგორც პირველ თავში აღვნიშნეთ, მოლეკულა წარმოადგენს ორი ან მეტი ატომისაგან შემდგარ სისტემას. მოლეკულაში ატომების შემაკავებელი ძალების არსებობა ატომების გარე გარსებზე არსებული ელექტრონების ურთიერთქმედებით არის გამოწვეული. ამას ადასტურებს მძიმე ელემენტების რენტგენული სპექტრების შესწავლა, საიდანაც ირკვევა, რომ რენტგენული სპექტრის სახე არ არის დამოკიდებული იმაზე თუ რომელ ქიმიურ ნაერთს ქმნის მოცემული ელემენტი.

არსებობს მოლეკულური ბმის ორი ტიპი: ერთი მათგანი ხორციელდება მაშინ, როდესაც მოლეკულაში ელექტრონების გარკვეული რაოდენობა ორივე ბირთვის ირგვლივ მოძრაობს (ჩვენ მხოლოდ ორატომიან მოლეკულებს განვიხილავთ). ასეთ ბმას *ჰომეოპოლარული* ან *კოვალენტური* ბმა ეწოდება. ეს ბმა ორი ურთიერთსაპირისპირო სპინის ორიენტაციის მქონე ელექტრონების მიერ წარმოიქმნება. ასეთ მოლეკულებს მიეკუთვნებიან ერთნაირბირთვიანი მოლეკულები H_2 , N_2 , O_2 და სხვადასხვა ბირთვიანი მოლეკულები მაგალითად, CN . ერთნაირბირთვიან მოლეკულაში ელექტრონები სიმეტრიულად არიან განლაგებულნი, სხვადასხვა ბირთვიან მოლეკულაში კი ელექტრონთა განლაგებაში არსებობს გარკვეული ასიმეტრია, რის გამოც ასეთ მოლეკულებს გააჩნიათ დიპოლური მომენტი. რაც შეეხება მეორე ტიპის მოლეკულურ ბმას იგი მაშინ ხორციელდება, როდესაც მოლეკულაში ელექტრონები იყოფიან ორ ჯგუფად, რომელთაგანაც თითოეული ყოველთვის ერთი რომელიმე ბირთვის სიახლოვეში იმყოფება. მოლეკულაში ელექტრონები ისე გადანაწილდებიან, რომ ერთ-ერთი ბირთვის სიახლოვეში ყოველთვის იქნება ელექტრონთა სიჭარბე, ხოლო შესაბამისად მეორე ბირთვის სიახლოვეში ყოველთვის ელექტრონთა ნაკლებობა გვექნება. ამგვარად ასეთი მოლეკულა შეიძლება წარმოვიდგინოთ, როგორც ორი ურთიერთსაპირისპირო ნიშნით დამუხტული იონების ერთობლიობა, რომლებიც მიიზიდავენ ერთმანეთს. ასეთი ტიპის ბმას *იონური*, ანუ *ჰეტეროპოლარული* ბმა ეწოდება. ჰეტეროპოლარული მოლეკულის მაგალითებია $NaCl$, KBr , HCl და ა.შ. ჰომეოპოლარული ბმის უმარტივეს მაგალითს წარმოადგენს

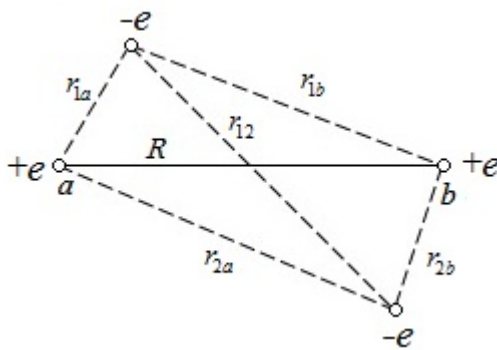
წყალბადის მოლეკულა H_2 . 1927 წელს ჰაიტლერმა და ლონდონმა შესძლეს წყალბადის მოლეკულის კვანტურ-მექანიკური გამოთვლა. მათ მოახერხეს ორი პროტონისაგან და ორი ელექტრონისაგან შემდგარი სისტემის აღმწერი შრეინგერის განტოლების ამოხსნა. ასეთი სისტემის ურთიერთქმედების პოტენციალურ ენერგიას აქვს სახე

$$U = -\frac{e^2}{r_{1a}} - \frac{e^2}{r_{2a}} - \frac{e^2}{r_{1b}} - \frac{e^2}{r_{2b}} + \frac{e^2}{r_{12}} + \frac{e^2}{R} \quad (17.1)$$

სადაც e ელექტრონის მუხტის სიდიდეა, ხოლო $r_{1a}, r_{2a}, r_{1b}, r_{2b}$ წარმოადგენენ სათანადოდ პირველი და მეორე ელექტრონების კოორდინატებს, შესაბამისად a და b ბირთვების მიმართ, r_{12} – ელექტრონებს შორის ფარდობითი კოორდინატაა, ხოლო R კი a და b ბირთვებს შორის მანძილი (იხილეთ ნახაზი 17.1). ამ სისტემის მდგომარეობის აღმწერი ტალღური ფუნქცია, რომელიც დამოკიდებული იქნება ორივე ელექტრონის კოორდინატზე და ასევე R ბირთვებს შორის მანძილზე, წარმოადგენს შემდეგი შრეინგერის განტოლების ამონახსნს

$$(\Delta_1 + \Delta_2)\psi + \frac{2m_e}{\hbar^2}[E - U]\psi = 0 \quad (17.2)$$

სადაც Δ_1 და Δ_2 სათანადოდ პირველი და მეორე ელექტრონის კოორდინატების შემცველი ლაპლასის ოპერატორებია, m_e – ელექტრონის მასა, \hbar – პლანკის მუდმივა, ხოლო E – სისტემის სრული ენერგია. თითოეული ელექტრონის სპინის პროექციას შეიძლება ჰქონდეს ორი მნიშვნელობა $\pm 1/2$.

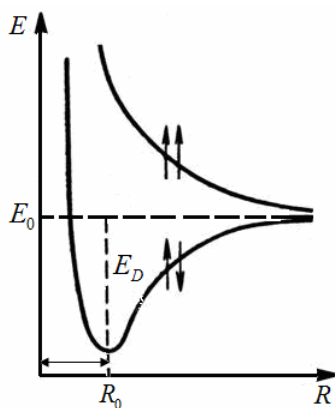


ნახ. 17.1. წყალბადის მოლეკულა

ამიტომ ორი ელექტრონის სპინი შეიძლება თანამიმართული ან ანტიპარალელური იყოს. როგორც (17.2) განტოლების ამოხსნა გვიჩვენებს ამ განტოლების საკუთარი მნიშვნელობა $E = E(R)$ ასევე ბირთვებს შორის მანძილზეც იქნება დამოკიდებული. ამასთან ამ დამოკიდებულების ხასიათი სხვადასხვა იქნება ელექტრონების პარალელური და ანტიპარალელური სპინების შემთხვევაში. მოლეკულის შექ-

მნა შესაძლებელია მხოლოდ იმ შემთხვევაში, როცა წყალბადის ატომები ერთმანეთს ელექტრონთა ანტიპარალელური სპინებით უახლოვდებიან (იხილეთ ნახ. 17.2). ენერგიის E_0 ასიმპტოტური მნიშვნელობა, რომლისკენაც მიისწრაფვის ორივე მრუდი როცა $R \rightarrow \infty$, ორი იზოლირებული წყალბადის ატომის ენერგიის ჯამის ტოლია. E_D კი არის მოლეკულის მბმის ენერგია. იგი ტოლია იმ მუშაობისა, რომელიც უნდა შეასრულოს გარეშე ძალამ, რათა მოხდეს მოლეკულის დაშლა ცალკეულ ატომებად, ანუ მოლეკულის დისოციაცია. ანალოგიური მდგომარეობაა სხვა ორატომიანი მოლეკულების შემთხვევაშიც. ელექტრონული მდგომარეობების მოცემული კონფიგურაციით გამოწვეულ ენერგიას R_0 -ზე აქვს მინიმუმი. ელექტრონული კონფიგურაციის ცვლილება (ანუ მოლეკულის ალგზნება) იწვევს ელექტრონული ენერგიის R -ზე დამოკიდებულების მრუდის ცვლილებას. ასევე იცვლება ენერგიის ასიმპტოტური მნიშვნელობაც, რომელიც ახალ კვანტურ მდგომარეობებში მყოფი ორი იზოლირებული ატომის ენერგიათა ჯამის ტოლი იქნება.

$$E_D = 4.52 \text{ ევ}, R_0 = 0.074 \text{ ნმ}, E_0 = 27.21 \text{ ევ}.$$



ნახ. 17.2. ენერგეტიკული თერმების ყოფაქცევა წყალბადის ორი ატომის დაახლოებისას

ძირითადად, მოლეკულის ენერგეტიკული მარაგის ცვლილება ისევე, როგორც ატომში მოლეკულის პერიფერიულ არეში ელექტრონთა კონფიგურაციის ცვლილების ხარჯზე ხდება. მოცემული ელექტრონული კონფიგურაციის დროს მოლეკულის ბირთვებს საერთო ინერციის ცენტრის მიმართ შეუძლიათ შეასრულონ როგორც რხევითი, ასევე ბრუნვითი მოძრაობები. ამ ტიპის მოძრაობებს უკავშირდება მოლეკულის რხევითი და ბრუნვითი ენერგეტიკული მარაგების არსებობა. პირველ მიახლოებაში მოლეკულის ცალკეული ტიპის მოძრაობები შეიძლება ერთმანეთისგან დამოუკიდებლად განვიხილოთ და ამიტომ მოლეკულის რომელიმე სტაციონალური მდგომარეობის ენერგია ასე წარმოვიდგინოთ

$$E = E_e + E_v + E_r, \quad (17.3)$$

სადაც E_e, E_v, E_r შესაბამისად მოლეკულის ელექტრონული, რხევითი და ბრუნვითი ენერგიებია. როგორც ცდები გვიჩვენებს ყველა ამ ენერგიას მხოლოდ დისკრეტული მნიშვნელობების მიღება შეუძლია.

კვანტურ მექანიკაში მტკიცდება, რომ ჰარმონიულ ოსცილატორის, ანუ კვაზიდრეკადი ძალის გავლენით მოძრავი ნაწილაკის ენერგია იკვანტება და შემდეგ დისკრეტულ მნიშვნელობებს იღებს

$$E_v = \left(v + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega_v, \quad (17.4)$$

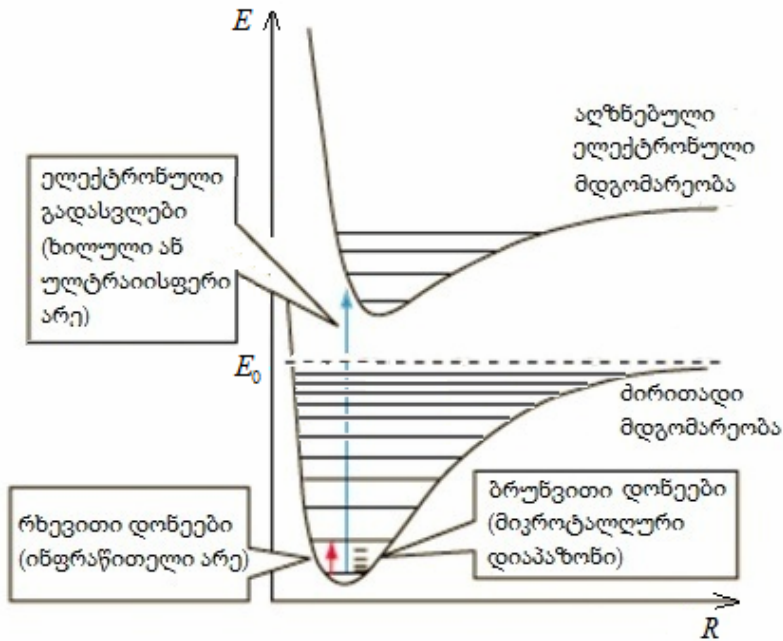
სადაც v -ს რხევითი კვანტური რიცხვი ეწოდება და ღებულობს ნულის ჩათვლით მთელ დადებით 0, 1, 2 და ა.შ. მნიშვნელობებს. ამის გამო, როგორც (17.4) ფორმულიდან ჩანს, ოსცილატორის ენერგეტიკული დონეები ეკვიდისტანტურები, ანუ ერთმანეთისგან თანაბარი სიდიდით დაშორებულები იქნებიან. რხევითი კვანტური რიცხვისთვის სამართლიანია შემდეგი შერჩევის წესი $\Delta v = \pm 1$ (აქ იგულისხმება რხევით დონეებს შორის გადასვლები ფიქსირებული ელექტრონული კონფიგურაციის დროს). ამიტომ ჰარმონიული ოსცილატორის ენერგია შეიძლება მხოლოდ $\hbar \omega_v$ პორციებით შეიცვალოს. ეს შედეგი კვანტურ მექანიკაში ბუნებრივად მიიღება და თვისობრივად ემთხვევა პლანკის მიერ შემოთავაზებულ ჰიპოთეზას, რომლის თანახმადაც ოსცილატორის რხევითი ენერგია $\hbar \omega_v$ დისკრეტული პორციების პროპორციულად იცვლება. განსხვავება მხოლოდ იმაშია, რომ პლანკის თანახმად ოსცილატორის მინიმალური ენერგია ნულის ტოლია, ხოლო კვანტური მექანიკის თანახმად კი მინიმალური რხევითი ენერგია $E_{v=0} = \hbar \omega_v / 2$ -ის ტოლია. ენერგიის ამ მნიშვნელობას *ნულოვანი ენერგია* ეწოდება. ნულოვანი ენერგიის არსებობა ექსპერიმენტულად მტკიცდება. ასეთ ექსპერიმენტებში დაბალ ტემპერატურებზე სინათლის კრისტალებზე გაბნევა შეისწავლებოდა. აღმოჩნდა, რომ გაბნეული სინათლის ინტენსივობა ტემპერატურის შემცირებასთან რაღაც სასრული სიდიდისაკენ მიისწრაფვის, რაც იმაზე მიუთითებს, რომ თვით აბსოლუტურ ნულზეც კი კრისტალურ მესერში ატომები არ წყვეტენ რხევით მოძრაობებს.

როგორც ნახაზი 17.3-დან ჩანს მოლეკულის პოტენციური ენერგიის მრუდი პარარაბოლას მხოლოდ მცირე რხევების შემთხვევაში წარმოადგენს. რხევითი მოძრაობის ინტენსივობის ზრდასთან ერთად თავს იჩენს რხევების ანჰარმონიულობა, რასაც რხევითი დონეების ერთმანეთთან შერწყმამდე მივყავართ. დისოცირებული მოლეკულის E_0 ენერგია წარმოადგენს ზღვარს, რომლისკენაც მიისწრაფვიან შერწყმული დონეები (იხილეთ ნახაზი 17.3).

ახლა განვიხილოთ მოლეკულის ბრუნვითი ენერგია. როგორც ცნობილია I ინერციის მომენტისა და ω_r კუთხური სიჩქარით მბრუნავი სისტემის ენერგია ტოლია

$$E_r = \frac{I\omega_r^2}{2} = \frac{(I\omega_r)^2}{2I} = \frac{M}{2I}, \quad (17.5)$$

სადაც $M = I\omega_r$ -სისტემის იმპულსის მომენტი.



ნახ. 17.3. ორატომიანი მოლეკულის ბრუნვითი, რხევითი და ელექტრონული დონეები

კვანტურ მექანიკაში კი იმპულსის მომენტი იკვანტება და შემდეგ დისკრეტულ მნიშვნელობებს ლებულობს $M = \hbar\sqrt{L(L+1)}$, სადაც L იმპულსის მომენტის კვანტური რიცხვია. შესაბამისად, ორატომიანი მოლეკულის ბრუნვითი ენერგია მხოლოდ დისკრეტულ მნიშვნელობებს იღებს

$$E_r = \frac{\hbar^2 L(L+1)}{2I} \quad (17.6)$$

სადაც I მოლეკულის ინერციის ცენტრზე გამავალი ღერძის ირგვლივ ბრუნვის ინერციის მომენტია. ამრიგად (17.3) ფორმულაში (17.4) და (17.6) გამოსახულებების შეტანით მოლეკულის სრული ენერგიისათვის მოვიღებთ

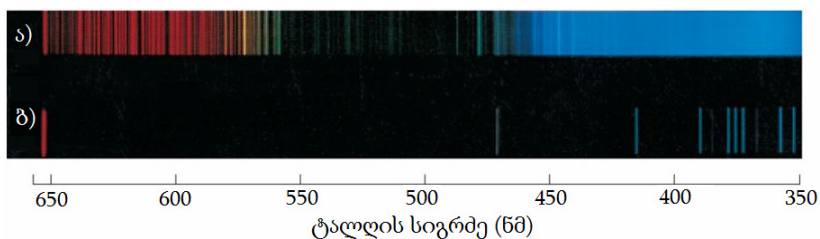
$$E = E_e + \left(\nu + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega_\nu + \frac{\hbar^2 L(L+1)}{2I} \quad (17.7)$$

ექსპერიმენტები გვიჩვენებს, რომ ბრუნვით დონეებს შორის მანძილი რხევით დონეებს შორის მანძილზე გაცილებით ნაკლებია, ხოლო თავის მხრივ, რხევით დონეებს შორის მანძილი ელექტრონულ მდგომარეობებს შორის ენერგეტიკულ სხვაობაზე გაცილებით მცირეა (იხილეთ ნახაზი 17.3). ეს ადვილად აიხსნება შემდეგი მსჯელობით: როგორც ზემოთ აღვნიშნეთ, ორატომიან მოლეკულაში ბირთვებს საერთო ინერციის ცენტრის მიმართ შეუძლიათ შეასრულონ როგორც რხევითი, ასე-

ვე ბრუნვითი მოძრაობები. ორი ურთიერთქმედი ბირთვის ამოცანა ყოველთვის შეგვიძლია დავიყვანოთ ცენტრალური სიმეტრიის ველში ერთი M_p დაყვანილი მასის მქონე ნაწილაკის მოძრაობაზე. მაშინ ადვილად მივხვდებით, რომ ბირთვების რხევითი მოძრაობის ω , სიხშირე, როგორც ჰარმონიული ოსცილატორის რხევის სიხშირე, $\sqrt{M_p}$ -ს უკუპროპორციული იქნება. ამიტომ ცხადია რხევით დონეებს შორის ინტერვალის $\Delta E_v \sim 1/\sqrt{M_p}$. (17.6) ფორმულის თანახმად, $\Delta E_r \sim 1/M_p$, რადგანაც I ინერციის მომენტი M_p -ს პროპორციულია, ხოლო ΔE_e ელექტრონული მდგომარეობებს შორის ინტერვალის, როგორც თვით ელექტრონული მდგომარეობები საერთოდ არ არის M_p -ზე დამოკიდებული. ყოველივე ზემოთქმულიდან გამომდინარე და იმის გათვალისწინებით, რომ m_e/M_p მცირე სიდიდეა, შეგვიძლია დავწეროთ $\Delta E_e \gg \Delta E_v \gg \Delta E_r$.

მოლეკულური სპექტრები

მოლეკულური სპექტრები ატომური სპექტრებისგან მნიშვნელოვნად განსხვავდებიან. მაშინ როდესაც ატომური სპექტრები ცალკეული ხაზებისგან შედგებიან, მოლეკულური სპექტრები საშუალო გარჩევისუნარიანობის ხელსაწყოთი დაკვირვებისას ზოლოვანი სახის სპექტრებად წარმოჩინდებიან. ეს ზოლები ერთი მხრიდან მკვეთრი საზღვრის არსებობით –კანტით ხასიათდებიან, ხოლო მეორე მხარე კი შედარებით განრთხმული აქვთ.



ნახ. 17.4 ა) წყალბადის მოლეკულის სპექტრი ბ) წყალბადის ატომის სპექტრი

ასეთი ზოლები სპექტრის ინფრანითელ, ხილულ და ულტრაიისფერ დიაპაზონებში გვხვდება (იხილეთ ნახაზი 17.4). მაღალი გარჩევისუნარიანობის მქონე ხელსაწყოების გამოყენებით დადგინდა, რომ ეს ზოლები, თავის მხრივ, შედგებიან ერთმანეთთან ძალზედ მჭიდროდ განლაგებული ხაზების ერთობლიობისაგან. ამ ხაზების ერთობლიობა ე.წ. ზოლოვან სერიებს ქმნიან. ხშირად სხვადასხვა ზოლოვანი სერიები ერთმანეთს გადაფარავენ, რის გამოც ასეთი სპექტრების გაშიფვრა ძალზედ რთულდება. პრინციპში კვანტური მექანიკა მოლეკულური სპექტრების შესწავლის შესაძლებლობას იძლევა, მაგრამ საზოგადოდ ეს საკმაოდ რთული ამოცანაა. ამიტომ ჩვენ მხოლოდ ორატომიანი მოლეკულის სპექტრების განხილვით შემოვიფარგლებით. ცხადია, რომ მოლეკულის ძირითად მდგომარეობაში ზემოაღნიშნული სამივე სახის ენერგია მინიმალურია. მოლეკულისთვის სათანადო ენერ-

გის გადაცემის შედეგად მოლეკულა გადადის ალგზნებულ მდგომარეობაში და შემდგომ შერჩევის წესების გათვალისწინებით უბრუნდება უფრო დაბალ ენერგეტიკულ მდგომარეობას

$$\begin{aligned} \hbar\omega = \Delta E_e + \Delta E_v + \Delta E_r = E_e' - E_e'' + \left(\nu' + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega'_v - \\ - \left(\nu'' + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega''_v + \frac{\hbar^2 L'(L'+1)}{2I'} - \frac{\hbar^2 L''(L''+1)}{2I''} \end{aligned} \quad (17.8)$$

რადგანაც როგორც უკვე აღვნიშნეთ $\Delta E_e \gg \Delta E_v \gg \Delta E_r$ ამიტომ ჯერ აღგზნება მოლეკულის როტაციული დონე, შემდგომ – რხევითი და ბოლოს იცვლება მოლეკულის ელექტრონული კონფიგურაციები. მართლაც, თუ მოლეკულის მცირე შეშფოთებებს განვიხილავთ, მაშინ (17.8) ფორმულაში შეიძლება დავიტოვოთ მხოლოდ უკანასკნელი ორი წევრი და თუ გავითვალისწინებთ ასევე $\Delta L = \pm 1$ შერჩევის წესს, გამოსხივებული ფოტონის სიხშირისათვის მივიღებთ

$$\omega = \frac{\Delta E_r}{\hbar} = \frac{\hbar}{2I} = \frac{\hbar}{I} L(L+1) = \Delta\omega L(L+1). \quad (17.9)$$

გავზომავთ რა ცდაზე ხაზებს შორის $\Delta\omega$ მანძილს, შეგვიძლია მოლეკულის I ინერციის მომენტის პოვნა. ამის შემდეგომ, ვიცით რა მოლეკულის შემადგენლობაში შემავალი ბირთვების მასები, შეიძლება განვსაზღვროთ ამ ბირთვების წონასწორულ მდგომარეობებს შორის მანძილი, ანუ ორატომიანი მოლეკულის ზომა.

განვიხილოთ მოლეკულის ერთი და იგივე ელექტრონული კონფიგურაციის შესაბამის ორ რხევით დონეს შორის გადასვლა. როგორც ნახაზ 17.3-დან ჩანს, თითოეული ამ დონის ალგზნებას თან ახლავს მთელი რიგი ერთმანეთთან მჭიდროდ განლაგებული ბრუნვითი დონეების ალგზნებაც. ამის გამო (17.8) ფორმულაში საჭიროა უკვე ბოლო ოთხი წევრის შენარჩუნება, რათა გამოვითვალოთ ორ რხევით დონეს შორის გადასვლით გამოწვეული გამოსხივების სპექტრი

$$\hbar\omega = \Delta E_v + \Delta E_r = \left(\nu' + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega'_v - \left(\nu'' + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega''_v + \frac{\hbar^2 L'(L'+1)}{2I'} - \frac{\hbar^2 L''(L''+1)}{2I''} \quad (17.10)$$

თუ (17.10) ფორმულაში გავითვალისწინებთ ν -სა და L -ს შერჩევის წესებს და ასევე იმას, რომ $\nu' > \nu''$ მივიღებთ როცა $L' > L''$

$$\omega = \omega_v + \frac{\hbar}{I} (L+1) = \omega_v + \Delta\omega (L+1), \quad (17.11a)$$

ხოლო როცა $L' < L''$

$$\omega = \omega_v - \frac{\hbar}{I} (L+1) = \omega_v - \Delta\omega (L+1). \quad (17.11b)$$

(17.11a) და (17.11b) ფორმულები შეიძლება გავაერთიანოთ და დავწეროთ

$$\omega = \omega_v \pm \Delta\omega (L+1). \quad (17.12)$$

სიხშირის რხევითი კომპონენტა ω , განსაზღვრავს სპექტრალურ არეს, რომელშიც ზოლოვანი სპექტრი განთავსდება. სიხშირის ბრუნვითი ნაწილი $\pm \Delta\omega \cdot k$, სადაც $k = 1, 2, 3, \dots$ სპექტრალური ზოლის ფაქიზ სტუქტურას განსაზღვრავს. ამ სპექტრს მოლეკულის როტაციულ-რხევითი ზოლი ეწოდება. (17.12) ფორმულიდან ნათელია, რომ ამ ზოლის ხაზები ω -ს მიმართ სიმეტრიულად განლაგდებიან. თვით ω , სიხშირის ხაზი არ გვექნება, რადგანაც $\Delta L = 0$ გადასვლა შერჩევის წესებით აკრძალულია. ამიტომაც $\omega = \omega_0 \pm \Delta\omega$ ცენტრალურ ხაზებს შორის ინტერვალი გაორმაგებული იქნება.

როტაციულ-რხევითი დონეების შესწავლა, ისევე როგორც როტაციული სპექტრის შესწავლა, ინფორმატიულია მოლეკულის ინერციის მომენტის გაგების თვალსაზრისით, რაც შემდგომ მოლეკულის ბირთვებს შორის ნონანორული მანძილის დადგენის საშუალებას იძლევა.

აღსანიშნავია, რომ კლასიკური მექანიკის თანახმად ორატომიანი მოლეკულის რხევით ან ბრუნვით მოძრაობას მხოლოდ მაშინ შეუძლია გამოსხივების აღძვრა, როდესაც მოლეკულის დიპოლური მომენტი ნულისგან განხვავებულია. ეს კი მხოლოდ სხვადასხვა ატომებიანი ორატომიანი მოლეკულისთვის არის სამართლიანი.

რაც შეეხება სიმეტრიულ მოლეკულებს, ანუ ერთნაირი ატომებისგან შემდგარ ორატომიან მოლეკულებს, მათი დიპოლური მომენტი ნულის ტოლია და, შესაბამისად, კლასიკური ელექტროდინამიკის თანახმად ასეთი მოლეკულის არც ბრუნვა და არც რხევა არ გამოიწვევს ელექტრომაგნიტური ტალღების გამოსხივებას. ანალოგიური შედეგი მიიღება ამ საკითხის კვანტურ-მექანიკური შესწავლითაც: სიმეტრიულ მოლეკულებში შესაბამისი გადასვლები სათანადო შერჩევის წესებით იკრძალება. ექსპერიმენტული მონაცემები სრულად ადასტურებს თეორიულ წინანარმეტყველებას: როტაციულ-ბრუნვითი ზოლები მხოლოდ სიმეტრიულ მოლეკულებში დაიმზირება.

რაც შეეხება მოლეკულის E_e ელექტრონული ენერჯიის ცვლილებით გამოწვეულ გამოსხივებას, იგი სპექტრის ხილულ ან ულტრაიისფერ არეში მდებარეობს. ელექტრონული ალგზნებისას იცვლება მოლეკულის ელექტრონული გარსის კონფიგურაცია, რის შედეგადაც იცვლება მოლეკულის ბირთვებს შორის ურთერთქმედების ძალა და როგორც შედეგი იცვლება ასევე მოლეკულის როგორც რხევითი, ასევე ბრუნვითი მოძრაობებიც. ელექტრონული გადასვლები ძალიან სწრაფად ხდება. ამისათვის საჭირო დრო მოლეკულის რხევითი მოძრაობის პერიოდის მხოლოდ მცირე ნაწილს შეადგენს. ამიტომ ითვლება, რომ ელექტრონული გადასვლების დროს მოლეკულის ატომები უძრავი რჩებიან, ანუ რჩებიან იმ ადგილებში, რომლებშიც ისინი ელექტრონული გადასვლის მომენტში იმყოფებოდნენ. ამ მიახლოებას ფრანკ-კონდონის პრინციპი ეწოდება. ფრანკ-კონდონის პრინციპის თანახმად ელექტრონული გადასვლები ბირთვებს შორის მანძილის ფიქსირებული მნიშვნელობისათვის ხორციელდება. ეს ნიშნავს, რომ ელექტრონული გადასვლები დასაშ-

ვებია მხოლოდ იმ სათანადო რხევით დონეებს შორის, რომლებიც სხვადასხვა ელექტრონული კონფიგურაციებს შეესაბამებიან და ერთ ვერტიკალზე მდებარეობენ (იხილიეთ ნახაზ 17.3-ზე ცისფერი ვექტორის ბოლოსა და სათავის შესაბამისი უახლოესი რხევითი დონეები). სხვა სიტყვებით, რომ ვთქვათ გადასვლები ხორციელდება სხვადასხვა კონფიგურაციის იმ რხევით დონეებს შორის, რომელთაც რხევითი მოძრაობის აღმწერი ტალღური ფუნქციების მაქსიმუმები ერთ ვერტიკალზე აქვთ განლაგებული. ამ პრინციპის გამოყენება საგრძნობლად ამარტივებს მოლეკულური სპექტრების გამოთვლას.

სინათლის კომბინაციური გაბნევა

სინათლის კომბინაციური გაბნევის მოვლენა მდგომარეობს იმაში, რომ სინათლის გაზურ, თხევად ან გამჭვირვალე კრისტალურ ნივთიერებებში გავლისას მოსავალზე გარდა თავდაპირველი α_0 სიხშირის შესაბამისი სპექტრალური ხაზისა გვხვდება ასევე ახალი სპექტრალური ხაზებიც, რომელთა სიხშირეებიც წარმოადგენენ α_0 სიხშირისა და გამფანტავი მოლეკულების ბრუნვითი ან რხევითი მოძრაობის α_i სიხშირეების წრფივ კომბინაციას $\omega = \alpha_0 \pm \alpha_i$. გამოდის, რომ კომბინაციური გაბნევის სპექტრში α_0 სიხშირის მიმართ სიმეტრიულად მარჯვნივ და მარცხნივ განლაგებული იქნებიან სათანადოდ $\alpha_0 + \alpha_i$ და $\alpha_0 - \alpha_i$ სიხშირის ე.წ. სატელიტი ხაზები, რომელთაც ხშირად შესაბამისად სტოქსისა და ანტისტოქსის კომპონენტებაც უწოდებენ. ჩვეულებრივ ოთახის ტემპერატურაზე სტოქსის კომპონენტების ინტენსივობა გაცილებით ნაკლებია ანტისტოქსის კომპონენტების ინტენსივობაზე. ტემპერატურის მომატებასთან ერთად დაიმზირება სტოქსის კომპონენტების ინტენსივობის მკვეთრი ზრდა.

ამ მოვლენას ადვილი კვანტურ-მექანიკური ახსნა მოეძებნება. მოლეკულების მიერ სინათლის გაბნევის პროცესი მოლეკულებზე ფოტონების არადრეკადი გაფანტვების სახით შეიძლება წარმოვიდგინოთ. მოლეკულებთან ურთიერთქმედებისას ფოტონმა შეიძლება გადასცეს მოლეკულას ან შეიძინოს მისგან ენერჯის ის ოდენობა, რომელიც მოლეკულის რაიმე ორი ენერგეტიკული დონის შესაბამისი ენერჯების სხვაობის ტოლია. თუ ფოტონი დაბალენერგეტიკულ მდგომარეობაში მყოფ მოლეკულას ეჯახება, მაშინ ფოტონის ენერჯის ნაწილი მოლეკულის ალგზნებაზე იხარჯება და გამოსავალზე ვლბულობთ შემცირებული სიხშირის მქონე ფოტონს. პირიქით, თუ ფოტონი უკვე რაიმე ალგზნებულ მდგომარეობაში მყოფ მოლეკულასთან ურთიერთქმედებს, მაშინ მოლეკულა შეიძლება გადავიდეს უფრო დაბალენერგეტიკულ მდგომარეობაში და ენერჯის სიჭარბე, რომელიც ენერგეტიკულ დონეებს შორის სხვაობით განისაზღვრება, ფოტონს გადაეცემა და მისი სიხშირე იზრდება. აღნიშნული ენერგეტიკული დონეები შეიძლება იყოს მოლეკულის სხვადასხვა რხევითი და ბრუნვითი დონეები. შედეგად მიიღება სწორედ ძირითადი სიხშირის მიმართ სიმეტრიულად განლაგებული სატელიტები.

შედარებით დაბალ ტემპერატურებზე აღზნებულ რხევით ან ბრუნვით მდგომარეობაში მყოფი მოლეკულათა რიცხვი, ძირითად მდგომარეობაში მყოფ მოლეკულათა რიცხვზე გაცილებით ნაკლებია. ასეთ შემთხვევაში მოლეკულის ენერჯის გაზრდით მიმდინარე დაჯახებები დომინირებენ, რითაც აიხსნება დაბალ ტემპერატურებზე სტოქსის კომპონენტების მაღალი ინტენსივობა. ტემპერატურის ზრდასთან ერთად იზრდება აღზნებულ მდგომარეობაში მყოფ მოლეკულათა რიცხვი, რასაც ანტისტოქსის კომპონენტების ინტენსივობის გაზრდამდე მივყავართ. ამ მოვლენაზე დაკვირვებით მოლეკულის შესახებ საკმაოდ ბევრი ინფორმაციის მიღება შესაძლებელია. კერძოდ, სწრაფად ხდება მოლეკულის საკუთარი რხევების სიხშირის დადგენა, რაც, თავის მხრივ, მოლეკულის სიმეტრიაზე იძლევა ინფორმაციას. სინათლის კომბინაციური გაბნევის საშუალებით ხდება რთული მოლეკულებისა და მოლეკულური ნაერთების ანალიზი. განსაკუთრებით ეს ეხება ორგანულ მოლეკულებს, რომელთა ანალიზიც ქიმიური მეთოდებით ბევრად რთულია და ზოგჯერ შეუძლებელიც კია.

ორთო და პარანყალბადი

მრავალრიცხოვანი ექსპერიმენტებით დადგენილია, რომ პროტონის სპინი 1/2-ის ტოლია. შესაბამისად, პროტონებისთვის სამართლიანია პაულის პრინციპი, ანუ ორი პროტონის ბმული მდგომარეობის აღმწერი სრული ტალღური ფუნქცია უნდა იყოს ანტისიმეტრიული. ამიტომ ამ ფუნქციის სპინური ნაწილი შესაბამისად, შეიძლება იყოს როგორც სიმეტრიული, ასევე ანტისიმეტრიული. ეს ნიშნავს, რომ ნყალბადის მოლეკულაში პროტონების სპინები შეიძლება იყოს ურთერთპარალელური (ასეთ შემთხვევაში ნყალბადის მოლეკულა იმყოფება ე.წ. *ორთონყალბადის* მდგომარეობაში) ან ანტიპარალელური (ე.წ. *პარანყალბადი*). ჩვეულებრივ ნყალბადში ორთონყალბადის მოლეკულათა რაოდენობის შეფარდება პარანყალბადის მოლეკულათა რაოდენობასთან არის 3:1. ამის მიზეზია ის, რომ ორთომდგომარეობაში პროტონების ჯამური სპინი, როგორც ვთქვით, ერთის ტოლია და შესაბამისად აქვს სამი პროექცია, მაშინ როდესაც პარამდგომარეობაში პროტონების ჯამური სპინი ნულია ერთადერთი პროექციის ნულოვანი მნიშვნელობით. ორთო და პარანყალბადის მოლეკულები იქცევიან, როგორც ორი დამოუკიდებელი ტიპის მოლეკულები. ჩვეულებრივ სითბური დაჯახებების შედეგად პროტონების სპინები პრაქტიკულად არასდროს არ იცვლიან თავის პროექციის მნიშვნელობებს და, შესაბამისად, ორთოდან პარანყალბადში ან პირიქით გადასვლის ეფექტები არ დაიმზირება.

კვანტური ბენერატორები

როგორც ატომის აგებულების ბორისეული მოდელი, ასევე ატომის წმინდა კვანტურ-მექანიკური აღწერა, ცალსახად ადასტურებს იმ ფაქტს, რომ ატომის გამოსხივებისა და შთანთქმის უნარი ატომის ელექტრონების მაღალი ენერგეტიკული დონიდან დაბალში ან პირიქით დაბლიდან მაღალ ენერგეტიკულ მდგომარეობაში გადასვლებით აიხსნება. როგორც აღმოჩნდა, არსებობს ამ გადასვლების მართვის ისეთი შესაძლებლობა, რომ გარკვეულ გარეშე პირობებში დაიმზირება ატომის მიერ გამოსხივებული ელექტრომაგნიტური გამოსხივების ინტენსივობის გაძლიერების ეფექტი. ამ თავში სწორედ ასეთ მოვლენებს შევისწავლით.

იძულებითი გამოსხივება და რეზონანსული შთანთქმა

გარდა ჩვენთვის უკვე ცნობილი ატომის მაღალი ენერგეტიკული მდგომარეობიდან უფრო დაბალ ენერგეტიკულ მდგომარეობაში სპონტანური, ანუ თავის-თავადი გადასვლის მოვლენისა, არსებობს აგრეთვე ატომზე გარეშე გამოსხივების ზემოქმედებით გამოწვეული ე.წ. *იძულებითი*, ანუ *ინდუცირებული* გადასვლები. სპონტანური გადასვლები დასაშვებია მხოლოდ ერთი მიმართულებით – უფრო მაღალიდან უფრო დაბალ ენერგეტიკულ მდგომარეობებში. იძულებითი გადასვლებისას კი ატომი – როგორც მაღალიდან დაბალ, ასევე დაბალიდან მაღალ ენერგეტიკულ მდგომარეობებში გადადის და ამ გადასვლების ალბათობები ერთნაირია. სინათლის ზემოქმედებით ატომის დაბალიდან მაღალ ენერგეტიკულ მდგომარეობაში გადასვლა მაშინ ხორციელდება, როდესაც დაცემული სინათლის კვანტის სიხშირე რეზონანსულად ემთხვევა ატომის E_n ენერგეტიკული მდგომარეობიდან E_m -ში გადასვლისას გამოსხივებულ კვანტის $\omega_{nm} = (E_n - E_m)/\hbar$ სიხშირეს (აქ $E_n > E_m$). ამ პროცესს *რეზონანსული* შთანთქმა ეწოდება. E_n ენერგეტიკულ მდგომარეობაში მყოფ ატომებზე სინათლის ω_{nm} სიხშირის კვანტის ზემოქმედებით ატომები შეიძლება გადავიდნენ E_m ენერგეტიკულ მდგომარეობაში – ამ დროს ატომები დამატებით ასხივებენ ფოტონებს. ამ დამატებით გამოსხივებულ ფოტონებს *ინდუცირებული*, ანუ *იძულებითი გამოსხივების* კვანტები ეწოდება. აღსანიშნავია, რომ ინდუცირებული კვანტის თვისებები თავდაპირველი დაცემული სინათლის კვანტის თვისებების იდენტურია. კერძოდ, ინდუცირებული კვანტის გავრცელების მიმართულება, სიხშირე, ფაზა და პოლარიზაცია ზუსტად ემთხვევა თავდაპირველი კვანტის ანალოგიურ მახასიათებლებს. ინდუცირებული გამოსხივების ეს თავისებურება საფუძვლად უდევს ელექტრომაგნიტური გამოსხივების გაძლიერების ზემოაღნიშნულ შესაძლებლობას. ინდუცირებული გამოსხივება სინათლის რეზონანსუ-

ლი შთანთქმის შებრუნებულ პროცესს წარმოადგენს. დროის ერთეულში გარეშე გამოსხივების გავლენით ატომის E_n ენერგეტიკული მდგომარეობიდან E_m -ში გადასვლის ალბათობა P_{nm} -ით აღვნიშნოთ. ეს სიდიდე დაცემული სინათლის ენერგიის მოცულობითი u_ω სიმკვრივის პროპორციულია

$$P_{nm} = B_{nm} u_\omega . \quad (18.1)$$

თუ (18.1) ფორმულას E_n მდგომარეობაში მყოფ ატომთა N_n რიცხვზე გავამრავლებთ, მაშინ მივიღებთ დროის ერთეულში n -დან m მდგომარეობაში იძულებით გადასულ ატომთა რიცხვს

$$\Delta N_{nm} = P_{nm} N_n = B_{nm} u_\omega N_n . \quad (18.2)$$

სრულიად ანალოგიურად შეგვიძლია დავწეროთ დროის ერთეულში სინათლის ზემოქმედებით m -დან n მდგომარეობაში გადასულ ატომთა რიცხვი

$$\Delta N_{mn} = P_{mn} N_m = B_{mn} u_\omega N_m , \quad (18.3)$$

სადაც N_m m -ურ მდგომარეობაში მყოფ ატომთა რიცხვია. ნივთიერებასა და გამოსხივებას შორის სითბური წონასწორობის დამყარება გულისხმობს იმას, რომ თითოეულ მდგომარეობაში მყოფ ატომთა რიცხვი დროში უცვლელი რჩება. ეს კი შესაძლებელია მხოლოდ მაშინ, როდესაც დროის ერთეულში m -დან n მდგომარეობაში გადასულ ატომთა რიცხვი n -დან m მდგომარეობაში გადასულ ატომთა რიცხვის ტოლია. $m \rightarrow n$ გადასვლები მხოლოდ სინათლის ზემოქმედებით არის შესაძლებელი, მაშინ როდესაც $n \rightarrow m$ გადასვლები შეიძლება განხორციელდეს როგორც სპონტანურად, ასევე იძულებით. თუ n -დან m მდგომარეობაში სპონტანურად გადასვლის ალბათობას A_{nm} -ით აღვნიშნავთ, მაშინ დროის ერთეულში სპონტანურად გადასულ ატომთა რიცხვი იქნება

$$\Delta N'_{nm} = A_{nm} N_n . \quad (18.4)$$

A_{nm} , B_{nm} და B_{mn} სიდიდეებს აინშტაინის კოეფიციენტები ეწოდება.

ნივთიერებასა და გამოსხივებას შორის სითბური წონასწორობის დამყარება ნიშნავს

$$\Delta N_{mn} = \Delta N_{nm} + \Delta N'_{nm} . \quad (18.5)$$

(18.5) ფორმულაში (18.2)-(18.4) ფორმულების შეტანით მივიღებთ

$$B_{mn} u(\omega, T) N_m = B_{nm} u(\omega, T) N_n + A_{nm} N_n , \quad (18.6)$$

სადაც $u(\omega, T)$ წონასწორულ მდგომარეობაში სითბური გამოსხივების ენერგიის მოცულობითი სიმკვრივეა. თუ $T \rightarrow \infty$ ანუ სისტემის ტემპერატურა ძალიან იზრდება, მყარდება ისეთი მდგომარეობა, როდესაც დროის ერთეულში n -დან m

მდგომარეობაში რეზონანსული შთანთქმის პროცესით გადასულ ატომთა რიცხვი დროის ერთეულში m -დან n მდგომარეობაში იძულებითი გამოსხივების გზით გადასულ ატომთა რიცხვს გაუტოლდება. ამ შემთხვევაში $A_{nm} \rightarrow 0$. ეს კი ნიშნავს, რომ $B_{nm} = B_{mn}$ და ამის გათვალისწინებით (18.6) ფორმულა ლებულობს სახეს

$$u(\omega, T) = \frac{A_{nm} N_n}{B_{nm} N_m - B_{nm} N_n} = \frac{A_{nm}}{B_{nm}} \frac{1}{\frac{N_m}{N_n} - 1}, \quad (18.7)$$

ატომების სხვადასხვა ენერგეტიკულ მდგომარეობებში ენერგიების მიხედვით განაწილება ბოლცმანის განაწილებით აღინერება

$$\frac{N_m}{N_n} = e^{\frac{E_n - E_m}{kT}} = e^{\frac{\hbar\omega_{nm}}{kT}}, \quad (18.8)$$

სადაც k ბოლცმანის მუდმივაა. (18.7) ფორმულაში (18.8) ფორმულის შეტანით მიიღება

$$u(\omega, T) = \frac{A_{nm}}{B_{nm}} \frac{1}{e^{\frac{\hbar\omega}{kT}} - 1}. \quad (18.9)$$

როგორც ვხედავთ (18.9) ფორმულა კოეფიციენტის სიზუსტით პლანკის (2.22) ფორმულას ემთხვევა. გამოსხივების ელემენტარული თეორია საკმაოდ არასრულყოფილია. მისი მთავარი ნაკლია ის, რომ ამ თეორიას არ შეუძლია აინშტაინის კოეფიციენტების გამოთვლა. ამ კოეფიციენტების გამოთვლა მხოლოდ, თანმიმდევრული კვანტური თეორიის გამოყენებით არის შესაძლებელი.

ნივთიერებაში გავლისას სინათლის ინტენსივობის გაძლიერების შესაძლებლობა. ბუგერის კანონი

დავუშვათ სინათლე ეცემა გარკვეული სისქის ოპტიკურად მკვრივ გარემოს. ჩვენი მიზანია დავადგინოთ, თუ როგორ შეიცვლება გარემოდან გამოსვლის შემდეგ დაცემული სინათლის ინტენსივობა. დაცემული სინათლის ინტენსივობა აღვნიშნოთ I_0 -ით. მაშინ გარემოში სინათლის გავრცელებისას სინათლის კვანტები გარემოს ატომებთან ურთიერთქმედებას განიცდიან. როგორც ცნობილია მოცემულ T ტემპერატურაზე, გარემოს ატომების სხვადასხვა ენერგეტიკულ მდგომარეობებში ენერგიების მიხედვით განაწილება ბოლცმანის (18.8) განაწილებით აღინერება.

ამიტომ სინათლის ნაკადის გარემოში მოძრაობისას მისი ინტენსივობის ცვლილება ორი ფაქტორით განისაზღვრება: გარემოს ატომების მიერ სინათლის რეზონანსული შთანთქმით და აღზნებულ მდგომარეობაში მყოფი გარემოს ატომების მიერ სინათლის ინდუცირებული გამოსხივებით. ამიტომ ადვილად შეგვიძლია გამოვიყვანოთ ინტენსივობის მანძილის მიხედვით ცვლილების კანონი. მართლაც, სიგრძის ერთეულზე ინტენსივობის ცვლილება შემდეგი განტოლებით აღინერება

$$\frac{dI}{dx} = \left(\frac{dI}{dx}\right)_{\text{რეზ}} + \left(\frac{dI}{dx}\right)_{\text{ინდ}} = -B_{nm}u(\omega, T)N_m\hbar\omega_{nm} + B_{nm}u(\omega, T)N_n\hbar\omega_{nm} = -B_{nm}u(\omega, T)\hbar\omega_{nm}(N_m - N_n), \quad N_m > N_n. \quad (18.10)$$

თუ (18.10) განტოლების მარჯვენა მხარეს c სინათლის სიჩქარეზე გავამრავლებთ და გავყოფთ და გავითვალისწინებთ, რომ $I = c \cdot u(\omega, T)$ სინათლის ინტენსივობაა, მივიღებთ

$$\frac{dI}{dx} = -\frac{B_{nm}\hbar\omega_{nm}I}{c}(N_m - N_n), \quad (18.11)$$

რომლის ამონახსნიც შემდეგნაირად მოიცემა

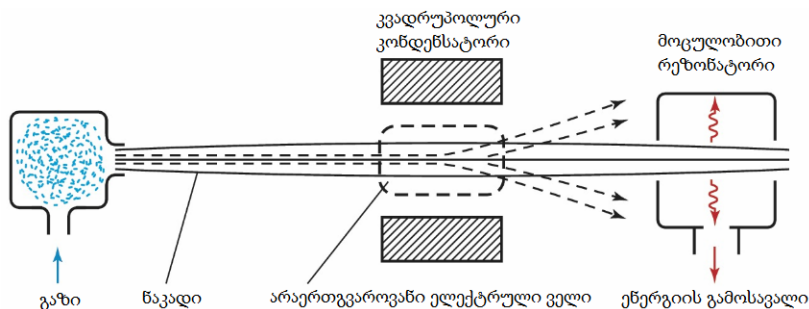
$$I(x) = I_0 e^{-k_{\omega_{nm}}x}, \quad k_{\omega_{nm}} = \frac{B_{nm}\hbar\omega_{nm}}{c}(N_m - N_n). \quad (18.12)$$

ამ კანონს ბუგერის კანონი ეწოდება. თუ გარემო თერმოდინამიკურ წონასწორობაში იმყოფება მაშინ, როგორც (18.12) ფორმულიდან ვხედავთ, გარემოდან გამოსვლის შემდეგ სინათლის ინტენსივობა ყოველთვის შეცირდება, ანუ გარემოს მიერ ყოველთვის მოხდება სინათლის შთანთქმა. გამოდის, რომ ერთადერთი გზა, რომლითაც გარემოს გამოსავალზე ინტენსივობის გაძლიერების ეფექტი შეიძლება მივიღოთ არის ის, რომ სისტემა გადავიყვანოთ ე.წ. არანონასწორულ მდგომარეობაში. სხვა სიტყვებით რომ ვთქვათ, მივალწიოთ იმას, რომ დაკმაყოფილდეს უტოლობა $N_m < N_n$, ანუ გარემოში მოცემულ ტემპერატურაზე მაღალ ენერგეტიკულ მდგომარეობაში მყოფ ატომთა რიცხვი, დაბალ ენერგეტიკულ მდგომარეობაში მყოფ ატომთა რიცხვზე მეტი იყოს. ეს ნიშნავს, რომ ფორმალურად გარემოს აბსოლუტური ტემპერატურა უარყოფითი გახდება. ასეთ შემთხვევაში ვიტყვით, რომ გარემოში ე.წ. ინვერსიულ დასახლებას აქვს ადგილი. ცხადია, არანონასწორულ მდგომარეობაში სისტემა ხანგრძლივად ვერ იარსებებს და გარკვეული დროის შემდეგ სათანადო კვანტების გამოსხივების გზით წონასწორულ მდგომარეობას დაუბრუნდება. ამაში მდგომარეობს ე.წ. კვანტური გენერატორის მუშაობის პრინციპი.

მოლეკულური გენერატორი (MASER)

მოლეკულური გენერატორი წარმოადგენს ელექტრომაგნიტური გამოსხივების კვანტურ გენერატორს, რომლის მუშაობის პრინციპი მოლეკულურ ნაკადში მიკროტალღურ არეში მოლეკულების იძულებითი გამოსხივების შესაძლებლობის გამოყენებას ემყარება. ისტორიულად პირველი მოლეკულური გენერატორი NH_3 ამიაკის მოლეკულების ნაკადზე შეიქმნა. სანტიმეტრული დიაპაზონის ტალღების გენერაცია NH_3 ამიაკის მოლეკულის ინვერსიულად დასახლებულ დონეებს შორის გადასვლით ხორციელდება. დონეების ინვერსიული დასახლება ამიაკის მოლეკულების ნაკადის კვადრუპოლური კონდენსატორის მიერ შექმნილ არაერთგვაროვან ელექტ-

რულ ველში გავლის შედეგად მიიღებოდა (იხილეთ ნახაზი 18.1. ჩვენ ნახაზის გამარტივების მიზნით არ მოგვყავს კვადრუპოლური კონდენსატორის სქემა. მიგვაჩნია, რომ მოვლენის ფიზიკური არსის გასაგებად ამის გაკეთება აუცილებელი არ არის).



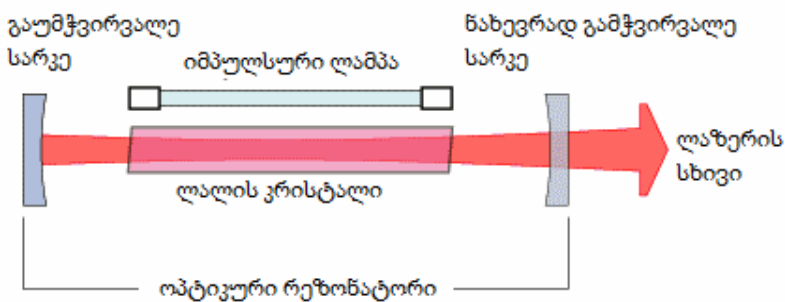
ნახ. 18.1. მოლეკულური გენერატორის ბლოკსქემა

ამიაკის მოლეკულები იმ თავისებურებით ხასიათდებიან, რომ მათ არანულოვანი ელექტრული დიპოლური მომენტი გააჩნიათ. უფრო მეტიც, ამიაკის მოლეკულას ძირითად და აღგზნებულ მდგომარეობებში დიპოლური მომენტის ურთიერთსაპირისპირო სივრცითი ორიენტაცია აქვს. ეს იმას ნიშნავს, რომ ამიაკის მოლეკულების ნაკადის არაერთგვაროვან ელექტრულ ველში გავლისას ნაკადი ორად გაიხლიჩება: აღგზნებულ მდგომარეობაში მყოფი მოლეკულები კვადრუპოლური კონდენსატორის ღერძის გასწვრივ განაგრძობენ სვლას (ნახაზ. 18.1-ზე მათი ტრაექტორია უწყვეტი წირებით არის ნაჩვენები), ხოლო ძირითად მდგომარეობაში მყოფი მოლეკულები კი კონდენსატორის ღერძიდან გადაიხრებიან (ნახაზ. 18.1-ზე მათი მოძრაობის ტრაექტორია წყვეტილი ხაზებით არის წარმოდგენილი). ამიტომ კონდენსატორის გამოსავალზე ნაკადი შედგება მხოლოდ აღგზნებულ მდგომარეობაში მყოფი ამიაკის მოლეკულებისგან. შემდგომ კონდენსატორიდან გამოსული ნაკადი შედის მოცულობით რეზონატორში, სადაც მიმდინარეობს სწორედ ინდუცირებული გამოსხივების პროცესი. კერძოდ, აღგზნებულ მდგომარეობაში მყოფი ერთ-ერთი მოლეკულა სპონტანური გადასვლით გადავა ძირითად მდგომარეობაში და გამოსახივებს ფოტონს, რომელსაც ჩაჭერს რეზონატორი. ამის შემდეგ პროცესი ზვავისებურად ვითარდება: რეზონატორში ჩაჭერილი ფოტონი ურთიერთქმედებს რა ამიაკის სხვა მოლეკულასთან, ამ მოლეკულის ძირითად მდგომარეობაში იძულებით გადასვლას გამოიწვევს, რის შედეგადაც რეზონატორში გაჩნდება უკვე ორი ერთნაირი ფოტონი. შემდგომში ეს ორი ფოტონი კვლავ გაიმეორებს იგივე პროცესს, რის შედეგადაც რეზონატორში უკვე ოთხი ერთნაირი ფოტონი იარსებებს და ა.შ. რეზონატორში ფოტონების რიცხვი გეომეტრიული პროგრესიით მოიმატებს. ეს კი ნიშნავს იმას, რომ რეზონატორში მკვეთრად გაიზრდება გამოსხივების ინტენსივობა, ანუ მივიღებთ მიკროტალღურ დიაპაზონში გამოსხივების გაძლიერების ეფექტს (Microwave Amplification by Stimulated Emission of Radiation, MASER). MASER-ების მთავარი მახასიათებელია მისი გამოსხივების სიხშირის მა-

ღალი სტაბილურობა, ანუ მაღალი რიგის მონოქრომატულობა. ეს გამოწვეულია იმით, რომ მოლეკულურ ნაკადში ურთიერთდაჯახებებს ადგილი არა აქვს, რასაც დოპლერის ეფექტის გამო სპექტრალური ხაზების გაგანიერება შეეძლო გამოეწვია. ამიაკის მოლეკულათა ნაკადზე პრაქტიკულად მომუშავე მოლეკულური გენერატორის გამოსხივების ტალღის სიგრძე 1.24 სმ ანუ 24.17 გჰც-ია, ხოლო სიხშირის არასტაბილურობა 10^{-11} -ს არ აღემატება. ამის გამო, ამიაკზე მომუშავე გენერატორები სიხშირის ეტალონად გამოიყენება და ასევე გამოიყენებიან, როგორც მაღალი გარჩევისუნარიანობის მქონე რადიოსპექტრომეტრები.

ლაზერი (LASER)

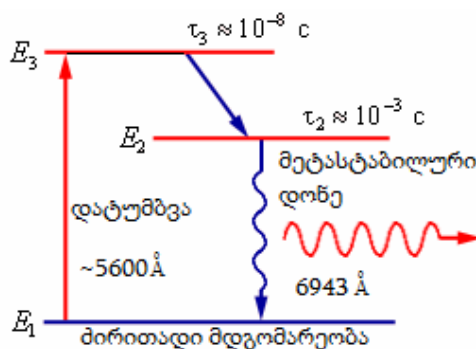
ზემოთ ჩვენ განვიხილეთ მიკროტალღური გამოსხივების გაძლიერების შესაძლებლობა. ანალოგიურ ხელსაწყოს, რომელსაც შეუძლია იძულებითი გამოსხივების გზით ოპტიკურ დიაპაზონში სინათლის გაძლიერება ლაზერი ეწოდება (Light Amplification by Stimulated Emission of Radiation, LASER). 1960 წელს აშშ-ში შეიქმნა პირველი ლაზერი. ლაზერის პრაქტიკული განხორციელება მას შემდეგ გახდა შესაძლებელი, რაც ნივთიერებებში ინვერსიული დასახლების შესაძლებლობები აღმოაჩინეს. პირველ ლაზერებში მუშა სხეულად გამოყენებული იყოს ლალის კრისტალისაგან შემდგარი ცილინდრული ფორმის 1 სმ დიამეტრისა და 5 სმ სიგრძის ღერო (იხილეთ ნახაზი 18.2).



ნახ. 18.2. ლალის ლაზერის აგებულების ბლოკსქემა

ღალი წარმოადგენს ალუმინის ჟანგს Al_2O_3 -ს, რომელშიაც ალუმინის ზოგიერთი ატომი Cr^{+++} ქრომის იონებით არიან ჩანაცვლებულნი. რაც მეტია ქრომის იონების კონცენტრაცია, კრისტალი მით უფრო წითლად არის შეფერილი. ლალის კრისტალურ ღეროს ასხივებენ ქსენონის იმპულსური ლამპით. თუ ამ დასხივების ინტენსივობა საკმარისად მაღალია, მაშინ ქრომის იონები ალგზნებულ მდგომარეობაში გადადიან. ამ პროცესს ლაზერის დატუმბვა ეწოდება. ნახაზ. 18.3-ზე ასეთი დატუმბვის სქემა ლალის ლაზერისთვის არის ნაჩვენები. დატუმბვის შედეგად ქრომის იონები E_3 ენერჯიის მქონე დონეებზე აღმოჩნდებიან, სადაც მათი სიცოცხლის

ხანგრძლივობა დაახლოებით 10^{-8} წამია. ამ დროის განმავლობაში ქრომის იონების ნაწილი სათანადო კვანტის გამოსხივებით კვლავ E_1 ენერჯიის მქონე ძირითად მდგომარეობას დაუბრუნდებიან, მაგრამ ქრომის აღზნებული იონების უმეტესობა E_2 ენერჯიის მქონე მეტასტაბილურ დონეზე გადავლენ, რომლის სიცოცხლის ხანგრძლივობა ხუთი რიგით მეტია E_3 ენერჯიის მქონე აღზნებული დონის სიცოცხლის ხანგრძლივობაზე. ამ მეტასტაბილურ დონეს ისე არჩევენ, რომ მასზე გადასვლის ალბათობა ძირითად დონეზე დაბრუნების ალბათობაზე გაცილებით მეტი იყოს. დატუმბვის საკმაოდ მაღალი ინტენსივობის შემთხვევაში მეტასტაბილურ დონეზე მყოფი ქრომის იონების რიცხვი გადააჭარბებს ძირითად მდგომარეობაში მყოფი იონების რიცხვს და ადგილი ექნება E_2 და E_1 ენერჯიების მქონე დონეების ე.წ. ინვერსიულ დასახლებას. შემდგომ მოვლენები მოლეკულური გენერატორის ანალოგიურად ვითარდება. კერძოდ, ერთ-ერთი ატომი სპონტანური გადასვლით გადადის მეტასტაბილურიდან ძირითად მდგომარეობაში, რასაც თან ერთვის სინათლის შესაბამისი კვანტის გამოსხივება. თუ ამ გამოსხივებული კვანტის მოძრაობის მიმართულება ლალის კრისტალური ღეროს ღერძის მიმართ მცირე კუთხეს ადგენს, მაშინ ეს ფოტონი მრავალჯერადად აირეკლება ლალის კრისტალის ღეროს ბოლოებთან არსებული ურთიერთპარალელური სარკეებიდან. ამიტომაც კრისტალში ასეთი ფოტონი დიდ მანძილს გაივლის. ასე რომ, კრისტალის ღერძის გასწვრივ წარმოიქმნება ფოტონების კასკადი, რომელიც სულ უფრო და უფრო ინტენსიური გახდება და გარკვეული ინტენსივობის მიღწევის შემდეგ გამოსხივება ნახევრადგამჭვირვალე სარკიდან გარეთ გამოდის (იხილეთ ნახაზი 18.2). სხვა მიმართულებით გამოსხივებული ფოტონები კი კრისტალის გვერდითი ზედაპირიდან გამოდიან და ვერ ხორციელდება იძულებითი გამოსხივების პროცესი.

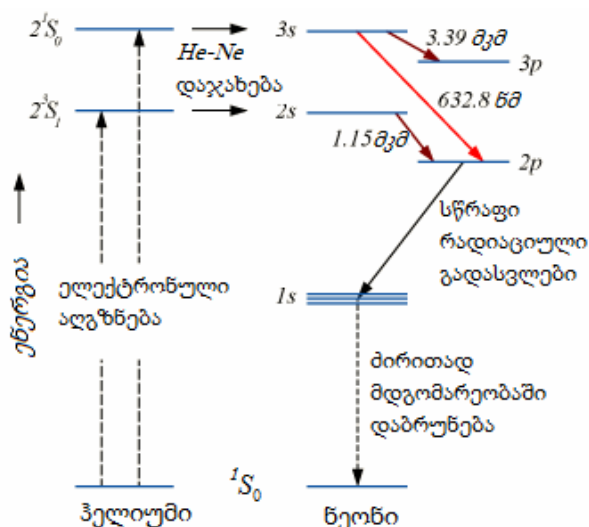


ნახ. 18.3. ლაზერის მუშაობის პრინციპი

ლალის ლაზერები იმპულსურ რეჟიმში მუშაობენ. კრისტალის შიგნით დიდი რაოდენობის სითბო გამოიყოფა, რის გამოც აუცილებელია კრისტალის ინტენსიური გაგრილება.

გაზური ლაზერი

გარდა მყარსხეულოვანი ლაზერებისა, პრაქტიკაში ფართო გამოყენება ჰპოვეს ე.წ. გაზურმა ლაზერებმაც. გაზურ ლაზერებში ატომთა ალგზნებას ნაწილაკთა არადრეკადი დაჯახების შედეგად აღწევენ. გაზური ლაზერის ტიპურ მაგალითს წარმოადგენს ჰელიუმისა და ნეონის ატომთა ნარევეზე დამზადებული ლაზერი. მოკლედ გავეცნოთ ასეთი ლაზერის მუშაობის პრინციპს (იხილეთ ნახაზი 18.4).



ნახ.18.4. გაზური ლაზერის მუშაობის პრინციპი

ჰელიუმსა და ნეონის ნარევი დაბალი წნევით (დაახლოებით რამოდენიმე მმ ვერცხლისწყლის სვეტი) მოთავსებულია გაზური განმუხტვის მილში. მილის გასწვრივ მოდებულია მაღალი ძაბვა, რაც იწვევს ატომთა იონიზაციას და მილში ელექტრონებისა და იონების გაჩენას. ელექტრულ ველში ელექტრონები სწრაფად აჩქარდებიან და გარკვეულ ენერგიაზე ჩნდება მათი ატომებთან არადრეკადი ურთიერთქმედების შესაძლებლობაც. საინტერესოა ასეთი დაჯახებების შედეგად ჰელიუმის ატომების 1^1S_0 ძირითადი მდგომარეობიდან 2^3S_1 და 2^1S_0 მეტასტაბილურ მდგომარეობებში ალგზნება. ჩვეულებრივ ალგზნებული მდგომარეობის 10^{-8} წმ სიცოცხლის ხანგრძლივობისგან განსხვავებით, მეტასტაბილურ მდგომარეობაში ატომის სიცოცხლის ხანგრძლივობა დაახლოებით 10^{-3} წმ-ის რიგისაა. შერჩევის წესები უკრძალავს ჰელიუმის ატომს გამოსხივების გზით დაუბრუნდეს ძირითად 1^1S_0 მდგომარეობას. ამიტომ ჰელიუმის ატომის ძირითად მდგომარეობაში დაბრუნების ერთადერთი გზა არის ჰელიუმ-ნეონის დაჯახებებისას ნეონის ატომების $2s$ და $3s$ მდგომარეობების რეზონანსული ალგზნება (იხილეთ ნახაზი 18.4). რაც უფრო მეტი ნეონის ატომი აღმოჩნდება რეზონანსულად ალგზებული, მით უფრო მეტად ინვერსიულად დასახლებულ ნეონის ატომებისაგან შემდგარ გარემოს მივიღებთ

(ინვერსიულია ნეონის ატომების დასახლება შესაბამისად ნეონის ატომის $2p$ და $3p$ ალგზნებული მდგომარეობების მიმართ). ამრიგად ლაზერული გამოსხივების გენერირებისთვის ხელსაყრელი პირობა იქმნება. შედეგად $3s \rightarrow 2p$ სპონტანურ გადასვლას თან სდევს ოპტიკური სპექტრის წითელ არეში 632.8 ნმ ტალღის სიგრძის ლაზერული გამოსხივების გენერირება, ხოლო $3s \rightarrow 3p$ და $2s \rightarrow 2p$ სპონტანურ გადასვლებს კი – ინფრანითელ არეში შესაბამისად 3.39 მკმ და 1.15 მკმ ლაზერული გამოსხივების გენერირება. ამის შემდეგ $2p$ მდგომარეობიდან სწრაფი რადიაციული გადასვლებით ნეონის ატომი $1s$ დონეს უბრუნდება, რომელიც მეტასტაბილურია. ამიტომაც, $1s$ დონიდან ნეონის ატომები ძირითად მდგომარეობას არა იმდენად რადიაციული გამოსხივებით, არამედ უფრო მეტად განმუხტვის მილის კედლებთან შეჯახების შედეგად უბრუნდებიან.

გაზური ლაზერების უპირატესობა მყარსხეულოვან ლაზერებთან შედარებით იმაში მდგომარეობს, რომ ისინი უწყვეტ რეჟიმში მუშაობენ და გამოირჩევიან კოჰერენტულობის მაღალი ხარისხით. გაზური ლაზერების ნაკლად შეიძლება ჩაითვალოს მათი შედარებით დიდი ზომები, რაც მათ გამოყენებას, ცალკეულ შემთხვევებში, მოუხერხებელს ხდის.

ლაზერული გამოსხივების მახასიათებელი – მაღალი კოჰერენტულობის ხარისხი ლაზერების გამოყენებას ფართო პერსპექტივას უქადის. კერძოდ, თუკი შესაძლებელი იქნება სინათლის მოდულაციის და დემოდულაციის საკითხების გადწყვეტა, მაშინ ლაზერულ სხივს შეუძლია სივრცის ერთი ნერტილიდან მეორეში კოლოსალურად დიდი რაოდენობის ინფორმაციის გადაცემა. ლაზერული გამოსხივების ფოკუსირების ხარისხი იმდენად მაღალია, რომ დედამიწიდან მთვარეზე გაშვებული ლაზერის სხივი მთვარის ზედაპირზე მხოლოდ 3 კილომეტრის განშლადობის ლაქას იძლევა. ლაზერული სხივის ფოკუსირებით მიღებული ენერჯის ნაკადის სიმკვრივე 1000 -ჯერ აღემატება ჩვეულებრივი მზის სინათლის შემკრები ლინზით ფოკუსირებისას მიღებულ ენერჯის ნაკადის სიმკვრივეს. მოცულობის ერთეულში ენერჯის ასეთი დიდი კონცენტრაცია საშუალებას იძლევა ლაზერის სხივი გამოვიყენოთ, როგორც ლითონების მექანიკური დამუშავებისა და შედუღების უნიკალური შესაძლებლობა.

ყოველივე ზემოთქმული სრულებითაც არ ამოწურავს ლაზერების გამოყენების არეალს. ახლო წარსულში ლაზერულმა სხივმა ფართო გამოყენება ჰპოვა მედიცინაში, სხვადასხვა სირთულის ქირურგიული ოპერაციების ჩატარების თვალსაზრისით. ლაზერული გამოსხივება წარმოადგენს სრულიად ახალი ტიპის გამოსხივებას და ჯერ კიდევ ძნელია წარმოვიდგინოთ ლაზერის გამოყენების ყველა შესაძლო არეალი.

გამოყენებული ლიტერატურა

1. Vasant Natarajan Modern Atomic Physics CRC Press Taylor & Francis Group (2015).
2. Robert L. Brooks The Fundamentals of Atomic and Molecular Physics Springer Science+Business Media New York (2013).
3. Christopher J. Foot Atomic Physics Oxford University Press (2005).
4. Walter R. Johnson Lectures on Atomic Physics Department of Physics, University of Notre Dame Indiana 4655, USA (2006)
<https://www3.nd.edu/~johnson/Publications/book.pdf>
5. Charles E. Burkhardt, Jacob J. Leventhal Topics in Atomic Physics Springer Science+Business Media, Inc (2006).
6. B.H. Bransden and C.J. Joachain Quantum Mechanics 2nd Edition Pearson Education Limited (2000).
7. Harald Friedrich Theoretical Atomic Physics Springer-Verlag Berlin Heidelberg (1990).
8. 1. Шпольский, Э.В. Атомная физика, т.т. 1; 2 / Э.В. Шпольский. М.: Наука, (1984)
9. Гольдин, Л.Л. Введение в квантовую физику / Л.Л. Гольдин, Г.И. Новикова. М.: Наука, (1988).
10. Иродов, И.Е. Квантовая физика. Основные законы / И.Е. Иродов. М-С.П.: Физматлит, (2001).
11. ჯ. მეზონია. ატომური ფიზიკა, თსუ გამომცემლობა (2003).
12. მ. მირიანაშვილი. ზოგადი ფიზიკის კურსი – ატომური ფიზიკა (1976).
13. Савельев, И.В. Курс общей физики, т.3 / И.В. Савельев. М.: Наука, (1982)
14. Борн, М. Атомная физика / М. Борн. М.:Мир, (1970).
15. Фейнман, Р. Фенмановские лекции по физике, вып. 3, 4 / Р. Фейнман, Р. Лейтон, М. Сэндс. М.: Мир, (1976).
16. Матвеев, А.Н. Атомная физика / А.Н. Матвеев. М.: Высшая школа, (1989).
17. Сивухин, Д.В. Общий курс физики, т.5, Часть 1. Атомная физика / Д.В. Сивухин. М.: Наука, (1986).
18. Барсуков, О.А. Основы атомной физики / О.А. Барсуков, М.А. Ельяшевич. М.: Научный мир,(2006).
19. Борщевский, А.Я. Строение атомных частиц. Водородо-добные атомы / А.Я. Борщевский. М.: Изд-во МГУ, (2010).
20. Бугрова, А.И. Излучение, атомная и ядерная физика / А.И. Бугрова и др. М.: МТУ, (2005).
21. Милантьев, В.П. Атомная физика: Учеб. пособие / В.П.Милантьев. М.: Изд-во РУДН, (1999).
22. Попов, А.М. Лекции по атомной физике / А.М. Попов, О.В. Тихонова. М.: Изд-во МГУ, (2007).

დამატება ა

გამოვითვალოთ შემდეგი ტიპის ინტეგრალები

$$I_n = \int_{-\infty}^{+\infty} x^n \exp\left(-\frac{x^2}{kT}\right) dx. \quad (\text{ა.1})$$

რადგანაც ჩვენს შემთხვევაში $n=0,2$ ინტეგრალქვეშა ფუნქციები ლუნია, $I_{0,2}$ ინტეგრალებისათვის გვექნება

$$I_n = 2 \int_0^{\infty} x^n \exp\left(-\frac{x^2}{kT}\right) dx, \quad n = 0, 2. \quad (\text{ა.2})$$

ამ უკანასკნელი ფორმულის საშუალებით კი შესაძლებელია (2.19) $\langle E \rangle$ საშუალო ენერჯიის გამოსახვა:

$$\langle E \rangle = \frac{2I_0 I_2}{I_0^2} = 2 \frac{I_0}{I_1}. \quad (\text{ა.3})$$

I_n ინტეგრალების გამოსათვლელად გამოვიყენოთ ეილერის გამა ფუნქციის განმარტება

$$\Gamma(\nu + 1) = \int_0^{\infty} t^{\nu} e^{-t} dt, \quad (\text{ა.4})$$

(ა.4) ინტეგრალში $t = x^2$ ცვლადის გარდაქმნის შედეგად, მივიღებთ:

$$\int_0^{\infty} t^{\nu} \exp(-at^2) dt = \frac{1}{2} \frac{\Gamma\left(\frac{\nu+1}{2}\right)}{a^{\frac{\nu+1}{2}}}; \quad a = \frac{1}{kT}. \quad (\text{ა.5})$$

მაშინ I_n შემდეგნაირად მოიცემა

$$I_n = \Gamma\left(\frac{n+1}{2}\right) \cdot (kT)^{\frac{n+1}{2}}. \quad (\text{ა.6})$$

საბოლოოდ $\langle E \rangle$ საშუალო ენერჯიისთვის მივიღებთ

$$\langle E \rangle = 2 \frac{\Gamma(3/2) (kT)^{3/2}}{\Gamma(1/2) (kT)^{1/2}} = 2 \frac{\sqrt{\pi}/2}{\sqrt{\pi}} \cdot kT = kT. \quad (\text{ა.7})$$

დამატება ბ

გამოვითვალოთ (3.1) ინტეგრალი

$$U = \frac{(kT)^4}{\pi^2 c^3 \hbar^3} \int_0^\infty \frac{x^3 dx}{e^x - 1}. \quad (\text{ბ.1})$$

ამ უკანასკნელი ფორმულის მარჯვენა ნაწილში დგას უგანზომილებო ინტეგრალი. ის წარმოადგენს შემდეგი ტიპის ინტეგრალების კერძო შემთხვევას

$$I_n = \int_0^\infty \frac{x^{n-1} dx}{e^x - 1}, \quad (\text{ბ.2})$$

$n=4$ -თვის ინტეგრალქვეშა გამოსახულების წილადი წამოვადგინოთ შემდეგი სახით :

$$\frac{1}{e^x - 1} = \frac{e^{-x}}{1 - e^{-x}} = e^{-x} \sum_{m=0}^\infty e^{-mx}. \quad (\text{ბ.3})$$

მაშინ საძიებელი ინტეგრალი წარმოიდგინება შემდეგი სახით

$$I_n = \sum_{m=0}^\infty \int_0^\infty e^{-(m+1)x} x^{n-1} dx, \quad (\text{ბ.4})$$

ამ ჯამის თითოეული წევრი ანალიზურად გამოისახება ეილერის გამა ფუნქციის საშუალებით

$$\int_0^\infty e^{-ax} x^v dx = \frac{\Gamma(v+1)}{a^{v+1}}. \quad (\text{ბ.5})$$

შესაბამისად,

$$I_n = \Gamma(n) \sum_{m=0}^\infty \frac{1}{(m+1)^n} = \Gamma(n) \sum_{k=1}^\infty \frac{1}{k^n}. \quad (\text{ბ.6})$$

ამ უკანასკნელი ფორმულის მარჯვენა მხარეს მდგომი ჯამი ცნობილია რიმანის ზეტა ფუნქციის სახელით:

$$\zeta(n) = \sum_{k=1}^\infty \frac{1}{k^n} = 1 + \frac{1}{2^n} + \frac{1}{3^n} + \dots \quad (\text{ბ.7})$$

ბ.1 ცხრილში მოცემულია ამ უკანასკნელი ფუნქციის მნიშვნელობები

$\zeta(n)$ ფუნქციის ზოგიერთი მნიშვნელობა

n	$\zeta(n)$	
	ანალიზური	რიცხვითი
2	$\pi^2/6$	1.645
3		1.202
4	$\pi^4/90$	1.082
5		1.037

ამრიგად, რადგანაც $\Gamma(n+1) = n!$ (ბ.6) ფორმულისა და ბ.1 ცხრილის დახმარებით მიიღება (3.2) ფორმულა.

დამატება გ

ზოგიერთი ფიზიკური მუდმივები და მათი საჭირო კომბინაციები

ფიზიკური მუდმივა	აღნიშვნა	რიცხვითი მნიშვნელობა SI სისტემაში
სინათლის სიჩქარე ვაკუუმში	c	$2.99792458 \cdot 10^8$ მ/წმ
პლანკის მუდმივა	h $\hbar = h/2\pi$	$6.626 \cdot 10^{-34}$ ჯ*წმ $hc = 1240$ ევ*წმ $1.054 \cdot 10^{-34}$ ჯ*წმ $\hbar c = 197$ ევ*წმ
ელემენტარული მუხტი	e	$1.602 \cdot 10^{-19}$ კ 1ევ = $1.602 \cdot 10^{-19}$ ჯ
მუდმივა კულონის კანონში	$k = 1/4\pi\epsilon_0$	$8.99 \cdot 10^9$ ნ*მ ² /კ ² $ke^2 = 1.44$ ევ*წმ
ფაიზი სტრუქტურის მუდმივა	$\alpha = ke^2/\hbar c$	$0.0729 \approx 1/137.035$
გრავიტაციული მუდმივა	G	$6.674 \cdot 10^{-11}$ ნ*მ ² /კგ ²
ავოგადროს რიცხვი	N_A	$6.022 \cdot 10^{23}$ /მოლ
რიდბერგის მუდმივა	R_∞	10973731.568508 მ ⁻¹
ფარადეის მუდმივა	$F = N_A e$	96485.33289 კ*მოლ ⁻¹
ბოლცმანის მუდმივა	k_B	$1.38 \cdot 10^{-23}$ ჯ/კელ = 25 მილიევ/კელ
სტეფან-ბოლცმანის მუდმივა	σ	$5.6703 \cdot 10^{-8}$ ვტ*მ ⁻² *კელ ⁻⁴
კომპტონის ტალღის სიგრძე ელექტრონისთვის	$\lambda_c = h/m_e c$	0.00243 ნმ
ბორის რადიუსი	$a_0 = \hbar^2/m_e k e^2$	$0.529 \overset{0}{\text{Å}}$ $1 \overset{0}{\text{Å}} = 10^{-10}$ მ
წყალბადის ატომის იონიზაციის ენერგია	$E_0 = m_e k^2 e^2 / 2\hbar^2$	13.6 ევ
ბორის მაგნეტონი	$\mu_B = e\hbar/2m_e$	$9.27 \cdot 10^{-24}$ ჯ/ტესლა 1 ტესლა = 10^4 გაუსი
ელექტრონის მაგნიტური მომენტი	μ_e	$1.41 \cdot 10^{-26}$ ჯ/ტესლა
პროტონის მაგნიტური მომენტი	μ_p	$9.28 \cdot 10^{-24}$ ჯ/ტესლა
ნეიტრონის მაგნიტური მომენტი	μ_n	$-0.97 \cdot 10^{-26}$ ჯ/ტესლა

ფიზიკური მუდმივა	აღნიშვნა	რიცხვითი მნიშვნელობა SI სისტემაში
ბორის ბირთვული მაგნეტონი	$\mu_N = e\hbar/2m_p$	$5.05 \cdot 10^{-27}$ ჯ/ტესლა
მასის ატომური ერთეული $m(^{12}\text{C})/12$	u	$1.66 \cdot 10^{-27}$ კგ = 931 მევ/ც ²
ელექტრონის მასა	m_e	$9.11 \cdot 10^{-31}$ კგ = 0.511 მევ/ც ²
პროტონის მასა	m_p	$1.67 \cdot 10^{-27}$ კგ = 938 მევ/ც ²
α ნაწილაკის მასა	m_α	$6.64 \cdot 10^{-27}$ კგ = 3727 მევ/ც ²

ზოგიერთი ატომის იონიზაციის ენერგია, ევ

ნახშირბადი	12	წყალბადი	13,6
ჟანგბადი	12,1	აზოტი	15,6
ოზონი	12,3	ჰელიუმი	24,5

ელექტრონის გამოსვლის მუშაობა, ევ

ვოლფრამი	4,50	პლათინა	5,29
კალიუმი	2,15	ვერცხლი	4,28
ლითიუმი	2,39	თუთია	3,74
ბარიუმის ოქსიდი	1,0	ცეზიუმი	1,89
ნატრიუმი	2,27	ალუმინი	3,74
კობალტი	4,25	მოლიბდენი	4,27
რკინა	4,36	სპილენძი	4,47
ოქრო	4,58	ბისმუტი	4,62
ნიკელი	4,84		

გამომცემლობის რედაქტორი	მაია ეჯიბია
გარეკანის დიზაინერი	ნინო ებრალიძე
კომპ. უზრუნველყოფა	ლალი კურდღელაშვილი

0179 თბილისი, ი. ჭავჭავაძის გამზირი 14
14, Iia Tchavtchavadze Ave., Tbilisi 0179
Tel: 995(32) 225 14 32
www.press.tsu.edu.ge

