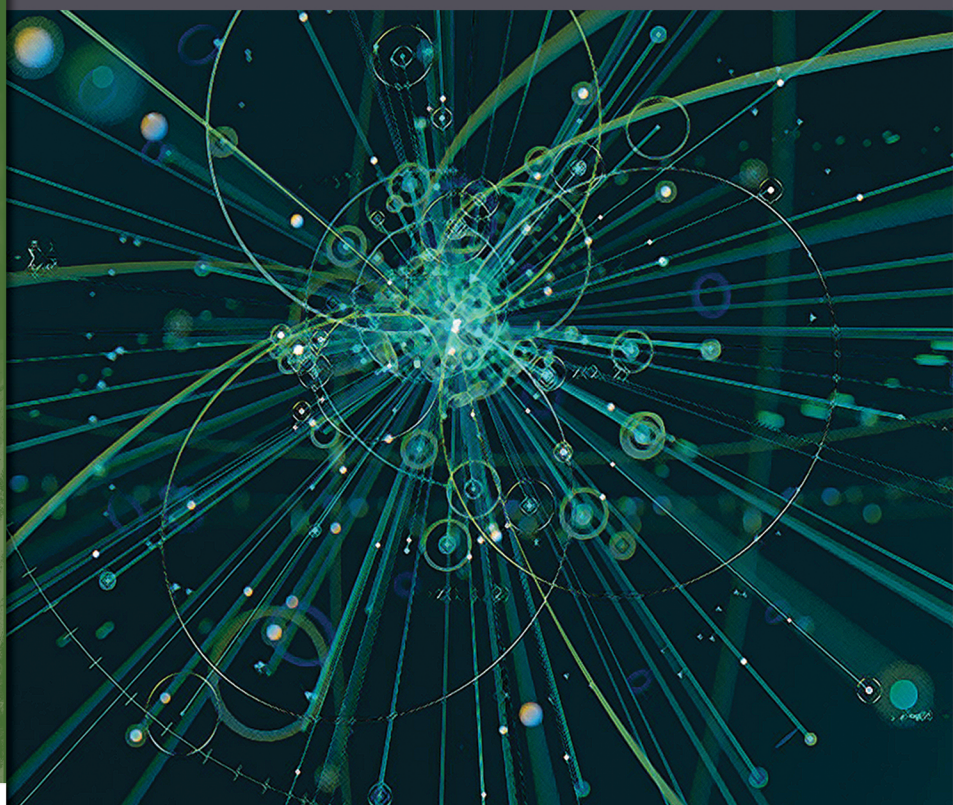


თამაზ კერესელიძე

ახომუხი ნანიტეხების დაჯახების თოოხიის საფუძვლები



საქართველოს ეკონომიკის და სტრუქტურული რეფორმების ეროვნული ადმინისტრაცია

**ატომური ნაწილაკების
დაჯახების თეორიის
საფუძვლები**

ივანე ჯავახიშვილის სახელობის
თბილისის სახელმწიფო უნივერსიტეტი
ფიზიკის დეპარტამენტი

თამაზ კერესელიძე

**ატომური ნაწილაკების
დაჯახების თეორიის
საფუძვლები**



უნივერსიტეტის
გამომცემლობა

ლექციების კურსი დაწერილია ფიზიკის დეპარტამენტის ფუნდამენტური მიმართულების მაგისტრატურის სტუდენტებისათვის და ეძღვნება ატომური ნაწილაკების (ელექტრონები, ფოტონები, ატომები, მოლეკულები და მათი იონები) დაჯახებისას მიმდინარე პროცესების შესწავლას. კურსი განკუთვნილია იმ სტუდენტებისათვის, რომლებიც სპეციალიზდებიან ატომურ და მოლეკულურ ფიზიკაში, მყარი სხეულების ფიზიკაში, კვანტურ ქიმიასა და ნანოფიზიკაში.

რეცენზენტები: პროფესორი მერაბ ელიაშვილი
ასისტენტ-პროფესორი მალხაზ გორჩიტაშვილი

სამეცნიერო რედაქტორი – ასისტენტ-პროფესორი მალხაზ გორჩიტაშვილი

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

© ივანე ჯავახიშვილის სახელობის თბილისის
სახელმწიფო უნივერსიტეტის გამომცემლობა, 2018
ISBN 978-9941-13-692-4 (pdf)

სარჩევი

თავი I. ძირითადი ცნებები და ზოგადი კანონზომიერებები	7
1. დიფერენციალური და სრული განივკვეთები	7
2. გაფანტვის განივკვეთის დამოკიდებულება სიჩქარესა და გაფანტვის კუთხეზე	10
2.1. კლასიკური აღწერა	11
2.2. კვანტური თავისებურებები. კლასიკური წარმოდგენების გამოყენების პირობები	13
თავი II. ატომები და ორატომიანი მოლეკულები.	
ატომურ ნაწილაკთა ურთიერთქმედების პოტენციალები	14
1. ატომები	14
2. ერთი ელექტრონი ცენტრალური სიმეტრიის მქონე პოტენციალურ ველში	15
3. მრავალელექტრონიანი ატომები	18
4. ორატომიანი მოლეკულები. ელექტრონული და ბირთვული მოძრაობების განცალკევება	19
5. ელექტრონული დონეები	21
6. რხევითი და ბრუნვითი დონეები	24
7. დიპოლური გადასვლები	26
8. ელექტრონულ-რხევითი გადასვლები. ფრანკ-კონდონის პრინციპი	27
9. ურთიერთქმედების პოტენციალები	29
თავი III. ელექტრონების გაფანტვა ატომებზე	30
1. ნელი ნაწილაკების დრეკადი გაფანტვა	30
2. გაფანტვა პოტენციალურ ორმოზე	36
3. სწრაფი ნაწილაკების დრეკადი გაფანტვა. ბორნის მიახლოება	41
4. სწრაფი ელექტრონების დრეკადი გაფანტვა ატომებზე	46
5. ელექტრონების არადრეკადი გაფანტვა ატომებზე. ამოცანის ზოგადი დასმა. ბორნის მიახლოება	48
თავი IV. ნელი ატომური ნაწილაკების დაჯახება	55
1. დრეკადი დაჯახება	55
2. არადრეკადი დაჯახებები. მძიმე ნაწილაკების დაჯახებების თავისებურებები	56
3. გადასვლები ნელი ატომური ნაწილაკების დაჯახებისას	60
4. შეშფოთების ადიაბატური თეორია	63
5. არადიაბატური გადასვლები	68
6. თერმების ფსევდოგადაკვეთა და გადაკვეთა. ლანდაუ-ზინერის ფორმულა	69
7. რეზონანსული პროცესები. რეზონანსული გადამუხტვა	74

8. კვაზირეზონანსული პროცესები. როზენ-ზინერის ფორმულა	80
თავი V. რეკომბინაცია და მასთან დაკავშირებული პროცესები	84
1. სამმაგი რეკომბინაცია ტომსონის სქემით	86
2. ელექტრონების იონებთან სამმაგი რეკომბინაცია	89
3. დისოციაციური რეკომბინაცია	90
4. დიელექტრონული რეკომბინაცია	95
5. ფოტორეკომბინაცია და დამუხრუჭებითი გამოსხივება	98
ლიტერატურა	100

თავი I. ძირითადი ცნებები და ზოგადი კანონზომიერებები

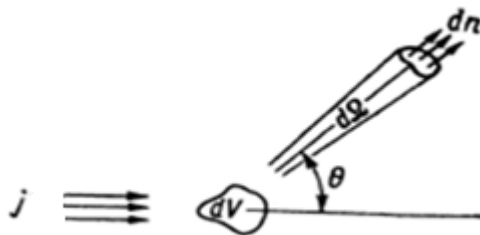
1. დიფერენციალური და სრული განივკვეთები

ატომური ნაწილაკების დაჯახებას თან სდევს ამ ნაწილაკების დამახასიათებელი პარამეტრების ცვლილება. დრეკადი დაჯახების დროს, ანუ ისეთი დაჯახებისას, როდესაც ნაწილაკთა შინაგანი ენერგია არ იცვლება, ასეთი პარამეტრი შეიძლება იყოს გაბნევის კუთხე, რომელიც ახასიათებს სიჩქარის მიმართულების ცვლილებას. არადრეკადი დაჯახების შემთხვევაში დაჯახების პარამეტრი შეიძლება იყოს დამჯახებელი ნაწილაკების მომენტი, მათი შინაგანი ენერგია და ა. შ. არადრეკადი დაჯახების შემთხვევაში შეიძლება შეიცვალოს რეაქციაში მონაწილე ნაწილაკთა რიცხვიც. პარამეტრების ცვლილების ალბათობას ახასიათებენ დიფერენციალური განივკვეთით. ეს სიდიდე შეიძლება განისაზღვროს ექსპერიმენტიდან. ექსპერიმენტი შედგება სამი ძირითადი ელემენტისაგან, ესენია: მონოენერგეტიკული ნაწილაკების წყარო, სამიზნე და დეტექტორი, რომელსაც შეუძლია სამიზნეზე გაბნეულ ნაწილაკთა დეტექტირება სხვადასხვა კუთხეზე.

ჩვენ გვინტერესებს წვეილური დაჯახების ერთჯერადი აქტები, ამიტომ სამიზნე უნდა იყოს „თხელი“. ეს ნიშნავს, რომ სამიზნეზე ერთხელ გაბნეულმა ნაწილაკმა უნდა დატოვოს სამიზნე შემდგომი გაბნევის გარეშე. ჩვეულებრივ გაბნევის ასეთი სურათი გვაქვს მაშინ, როდესაც ნაწილაკის თავისუფალი განარბენი სამიზნეში გაცილებით მეტია სამიზნის ზომაზე $\lambda \gg l$. ამ შემთხვევაში დროის ერთეულში სხეულოვანი კუთხის ელემენტში $d\Omega = \sin \vartheta d\vartheta d\varphi$ გაბნეული ნაწილაკების რიცხვი იქნება

$$dn(\vartheta) = d\sigma(\vartheta) j N dV \quad (1.1)$$

აქ N - გამბნევ ნაწილაკთა კონცენტრაციაა სამიზნეში, ხოლო ϑ - გაბნევის კუთხეა (იხილე ნახაზი 1).



ნახ. 1. ნაწილაკთა ნაკადის გაფანტვა სამიზნის ელემენტზე

წვეილური დაჯახების შემთხვევაში $d\sigma(\vartheta)$ დიფერენციალური განივკვეთი აკავშირებს დროის ერთეულში სამიზნის dV ელემენტის მიერ $d\Omega = \sin \vartheta d\vartheta d\varphi$ სხეულოვანი კუთხის ელემენტში გაბნეული ნაწილაკების რიცხვს $dn(\vartheta)$ სამიზნეზე

დაცემულ ნაწილაკთა ნაკადთან j . ამ განსაზღვრიდან გამომდინარეობს, რომ $d\sigma(\vartheta)$ განივკვეთი ახასიათებს დაბნევას სამიზნის ერთ ცალკე აღებულ ნაწილაკზე. თუ (1.1) ფორმულაში ორივე მხარეს გავყოფთ NdV , ანუ სამიზნის ნაწილაკთა სრულ რიცხვზე, მაშინ

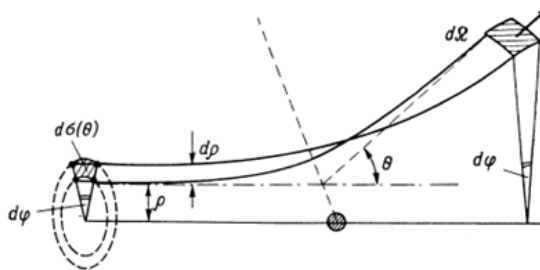
$$dn_1 = \frac{dn}{NdV} = jd\sigma. \quad (1.2)$$

ამ ფორმულაში $d\sigma$ აკავშირებს დაცემული ნაწილაკების ნაკადს j სამიზნის ერთ ნაწილაკზე გაბნეულ ნაწილაკთა რიცხვთან dn_1 . დიფერენციალური განივკვეთის ორივე განმარტება ეკვივალენტურია. დიფერენციალური განივკვეთი ასეც შეიძლება ჩაინეროს:

$$d\sigma(\vartheta) = \frac{dn_1}{j} = \frac{j_{scat}dS}{j} = \frac{j_{scat}r^2d\Omega}{j}, \quad (1.3)$$

სადაც j_{scat} გაბნეული ნაწილაკების სიმკვრივეა გამბნევი ცენტრიდან r მანძილზე. ხშირად გამოიყენება, აგრეთვე, გაბნევის დიფერენციალური განივკვეთი ერთეულოვან სხეულოვან კუთხეში $d\sigma/d\Omega$. დიფერენციალური განივკვეთის ზემოთ მოცემული განმარტება შეესაბამება დრეკად გაბნევას.

გაბნევის განივკვეთის გამოთვლის თეორიული მეთოდები შეიძლება დაიყოს კლასიკურ და კვანტურ მეთოდებად. მკაცრად თუ ვიმჯღელებთ, მხოლოდ კვანტური მეთოდებით არის შესაძლებელი მიკროსამყაროში მიმდინარე პროცესების ადეკვატური აღწერა. კლასიკურ მექანიკაში დიფერენციალური განივკვეთი განისაზღვრება დაჯახების პარამეტრით ρ (იხილეთ ნახაზი 2).



ნახ. 2. ნაწილაკთა მოძრაობის ტრაექტორია

ფართის ელემენტი მოთავსებული ρ და $\rho + d\rho$ შორის, რომელიც ტოლია $\rho d\rho d\varphi$ აღვნიშნოთ $d\sigma$ -თი. თუ ძალთა ცენტრს მარცხნიდან ეცემა ნაწილაკთა კონა, რომლის სიმკვრივეა j , მაშინ $d\sigma$ ფართში გამავალი იმ ნაწილაკების რიცხვი, რომლებიც შემდგომ აღმოჩნდებიან $d\Omega$ სხეულოვანი კუთხის ელემენტში, არის $dn_1 = jd\sigma$. ამ შემთხვევაში (1.2), ფორმულის მიხედვით, დიფერენციალური განივკვეთი იქნება

$$\frac{dn_1}{j} = d\sigma = \rho d\rho d\varphi = \frac{\rho(\vartheta)d\Omega}{\left|\frac{d\vartheta}{d\rho}\right| \sin \vartheta}. \quad (1.4)$$

დრეკადი გაბნევის სრულ განივკვეთს მივიღებთ, თუ (1.4)-ს ვაინტეგრებთ φ კუთხით ნულიდან 2π -მდე და ϑ კუთხით ნულიდან π -მდე

$$\sigma = \int_0^{2\pi} \int_0^{\pi} \frac{d\sigma}{d\Omega} \sin \vartheta d\vartheta d\varphi. \quad (1.5)$$

სრული განივკვეთი მნიშვნელოვნად განისაზღვრება დიფერენციალური განივკვეთის ყოფაქცევით მცირე კუთხეებზე.

ახლა დავადგინოთ, თუ რა სიდიდეებზეა ძირითადად დამოკიდებული დიფერენციალური განივკვეთი გაბნევის კვანტურ-მექანიკური აღწერისას. ამისათვის გამოვიყენოთ (1.3) ფორმულა, რომელშიც j და j_{sc} შევცვალოთ კვანტურ-მექანიკური ფორმულით გამოთვლილი ალბათობების ნაკადის სიმკვრივებით

$$\vec{j} = \frac{i\hbar}{2m} (\Psi \nabla \Psi^* - \Psi^* \nabla \Psi). \quad (1.6)$$

აქ m დაცემული ნაწილაკის მასაა, ხოლო Ψ ტალღური ფუნქციაა, რომელიც აღწერს ნაწილაკის მოძრაობას გამფანტავი ძალის ველში. ამ შემთხვევაში გაფანტვის პროცესი განიხილება უსასრულობიდან ძალთა ცენტრზე დაცემულ ბრტყელ ტალღად, რომელიც შემდგომ ვრცელდება, როგორც განშლადი სფერული ტალღა. აქედან ჩანს, რომ გაფანტვის პროცესის შესასწავლად აუცილებელია ვიცოდეთ ტალღური ფუნქცია ურთიერთქმედების არიდან საკმაოდ მოშორებით, ანუ ვიცოდეთ ტალღური ფუნქციის ასიმპტოტური ყოფაქცევა. გაფანტვის შემთხვევაში ტალღური ფუნქციის ასიმპტოტიკა z ღეძის გასწვრივ p_0 იმპულსით მოძრავი ნაწილაკების აღმწერი ბრტყელი ტალღის და გამფანტავი ცენტრიდან განშლადი სფერული ტალღის სუპერპოზიციაა. თუ გაბნევა დრეკადია, დაცემული და გაფანტული ნაწილაკების იმპულსები აბსოლუტური სიდიდით ტოლია, და ტალღური ფუნქცია ასე შეიძლება წარმოვიდგინოთ

$$\Psi \sim e^{ik_0 z} + f_0(\vartheta) \frac{e^{ik_0 r}}{r}, \quad (1.7)$$

რომელშიც $k_0 = p_0 / \hbar = \sqrt{2mE / \hbar^2}$ არის ტალღური რიცხვი, ხოლო E სრული ენერგიაა. სიდიდე $f_0(\vartheta)$ განსაზღვრავს ϑ კუთხეზე დრეკადი გაბნევის ალბათობას და ეწოდება გაბნევის ამპლიტუდა დრეკად არხში. თუ, გაფანტვის დრეკადი არხის გარდა, გვაქვს არადრეკადი არხებიც, მაშინ ტალღური ფუნქციის ასიმპტოტიკაში უნდა დავამატოთ წევრები რომლებიც აღწერენ არადრეკად გაფანტვას

$$\Psi \sim e^{ik_0 z} + f_0(\vartheta) \frac{e^{ik_0 r}}{r},$$

$$+ f_n(\vartheta) \frac{e^{ik_n r}}{r},$$
(1.8)

სადაც k_n არის არადრეკადი არხის შესაბამისი ტალღური რიცხვი. თუ ახლა (1.6) ფორმულით გამოვივლით j და $j_{\text{გაბ}}$ და ამისათვის გამოვიყენებთ (1.7) და (1.8) ასომბტოტურ გამოსახულებებს, შესაბამისად, დრეკადი და არადრეკადი დიფერენციალური განივკვეთებისათვის მივიღებთ

$$\frac{d\sigma_0}{d\Omega} = |f_0(\vartheta)|^2,$$
(1.9)

$$\frac{d\sigma_n}{d\Omega} = \frac{k_n}{k_0} |f_n(\vartheta)|^2.$$
(1.10)

გაფანტვის განივკვეთი განისაზღვრება ამპლიტუდით, ეს უკანასკნელი კი მიიღება ტალღური ფუნქციის ასიმბტოტური სახიდან, ამიტომ, ცხადი ხდება, რომ გაფანტვის ამოცანის კვანტურ-მექანიკური შესწავლისას საჭიროა, ამოიხსნას შრე-დინგერის განტოლება უწყვეტი სპექტრისათვის იმ პოტენციალით, რომელიც აღწერს დამჯახებელი ნაწილაკების ურთიერთქმედებას.

2. გაფანტვის განივკვეთის დამოკიდებულება სიჩქარეზე და გაფანტვის კუთხეზე

თუ დრეკად გაბნევაში მონაწილეობს ორი მყარი ბურთულა, ჩვენ როგორც არ უნდა ვცვალოთ ბურთულების ფარდობითი სიჩქარე, გაფანტვის სრული განივკვეთი არ შეიცვლება, რადგან მყარი ბურთულას რადიუსი არ არის დამოკიდებული სიჩქარეზე. ეს მტკიცებულება არ არის სამართლიანი, თუ ბურთულები არ არის მყარი, ანუ თუ მათი ურთიერთქმედების ძალა დამოკიდებულია მათ შორის მანძილზე. სწორედ ასეთი მოდელი – არააბსოლუტურად მყარი ბურთულების მოდელი – გაცილებით შეესაბამება რეალურ ნაწილაკებს. მათი „სიმყარის ხარისხი“ განისაზღვრება ურთიერთქმედების პოტენციალის სიდიდით, ხოლო განივკვეთი დამოკიდებულია სიჩქარეზე. თუ განივკვეთის სიჩქარეზე დამოკიდებულების ფაქტი ადვილად გასაგებია, არსებობს საკითხთა წყება, რომელიც საგანგებო განხილვას მოითხოვს. მაგალითად: ა) განივკვეთის სიჩქარეზე დამოკიდებულება როგორ უკავშირდება პოტენციალის სახეს; ბ) ერთნაირია თუ არა ეს დამოკიდებულება კლასიკური და კვანტური თეორიით გამოთვლისას; გ) თუ სხვადასხვაა, როგორია კლასიკური და კვანტური აღწერის გამოყენების არეები. განვიხილოთ ეს საკითხები თვისობრივად.

2.1. კლასიკური აღწერა

კლასიკურ მექანიკაში კავშირი გაბნევის ϑ კუთხეს და ამოცანის სანყის პირობებს შორის – სამიზნე მანძილს ρ და სანყის სიჩქარეს v_0 შორის – მოცემულია ცნობილი გამოსახულებით

$$\vartheta = \left| \pi - 2 \int_{r_{\min}}^{\infty} \frac{\rho dr}{r^2 \sqrt{1 - \frac{\rho^2}{r^2} - \frac{2U(r)}{\mu v_0^2}}} \right|. \quad (1.11)$$

აქ $U(r)$ ნაწილაკთა ურთიერთქმედების პოტენციალური ენერჯიაა; r_{\min} ის მინიმალური მანძილია, რომელზეც შეუძლიათ დაახლოვდნენ ნაწილაკები მოცემულ სანყის პირობებში; μ დაყვანილი მასაა.

ნებისმიერი პოტენციალისათვის ცხადი სახით ρ განსაზღვრა (1.11) განტოლებიდან არ ხერხდება. ამიტომ განივკვეთის ყოფაქცევის თვისობრივი კანონზომიერებების დასადგენად, როგორცაა დამოკიდებულება სიჩქარესა და გაბნევის კუთხეზე, საჭიროა, გამოვიყენოთ მიახლოებითი მეთოდები.

განსაკუთრებით მნიშვნელოვანია გაბნევა მცირე კუთხეებზე, რადგან სწორედ კუთხეების ეს არე განსაზღვრავს სრული განივკვეთის კრებადობას. განვსაზღვროთ მცირე კუთხეებზე გაბნევის განივკვეთის გამოსახულება $U(r) = \alpha / r^n$ სახის პოტენციალისათვის (პოტენციალის ნიშანს არ ვითვალისწინებთ). გაბნეული ნაწილაკის ტრაექტორია მიახლოებით ჩავთვალოთ სწორხაზობრივად, გაბნევის კუთხე კი შეიძლება შეფასდეს სიდიდით $\vartheta \approx p_{\perp} / p \ll 1$.



ნახ. 3. განივი იმპულსის კავშირი გაფანტვის კუთხესთან

განივი იმპულსი, რომელსაც ნაწილაკი იღებს დაჯახების შედეგად, შევაფასოთ სიდიდით

$$P_{\perp} \sim F(\rho) \Delta t \sim \frac{\partial U}{\partial \rho} \frac{\rho}{v} \sim \frac{U(\rho)}{\rho} \frac{\rho}{v}. \quad (1.12)$$

აქ $F(\rho) \sim U(\rho) / \rho$ ურთიერთქმედების არეში, რომლის ზომაც დაჯახების პარამეტრის რიგისაა, ჩავლის $\Delta t \sim \rho / v$ დროში ნაწილაკზე მოქმედი ძალის საშუალო მნიშვნელობაა. ამრიგად, გაბნევის კუთხისათვის მივიღებთ

$$\vartheta \sim \frac{U(\rho)}{p v} \sim \frac{U(\rho)}{\mu v^2}. \quad (1.13)$$

თუ გავითვალისწინებთ, რომ $U(\rho) \approx \alpha / \rho^n$, დაჯახების პარამეტრს გამოვხატავთ გაბნევის კუთხით და შევიტანთ (1.4) ფორმულაში, დრეკადი გაბნევის განივკვეთი ასე შეიძლება შეფასდეს:

$$d\sigma(\vartheta) \approx \frac{1}{n} \left(\frac{\alpha}{2\mu v^2} \right)^n \frac{d\Omega}{\vartheta^{2\left(1+\frac{1}{n}\right)}}. \quad (1.14)$$

მცირე კუთხეებზე გაბნევის უფრო ზუსტი ამოხსნა $U(r) = \alpha / r^n$ პოტენციალის შემთხვევაში, როდესაც განივი იმპულსი განისაზღვრება ტრანექტორიის გასწვრივ ინტეგრირებით, გვაძლევს (1.14)-სგან მხოლოდ რიცხვითი მამრავლით განსხვავებულ შედეგს, რომელიც ერთი რიგისაა.

ორი ერთნაირი e მუხტის მქონე ნაწილაკის ერთმანეთზე კულონური გაბნევისათვის გვექნება (ამ შემთხვევაში $n=1$)

$$d\sigma = \left(\frac{\alpha}{2\mu v^2} \right)^2 \frac{d\Omega}{\vartheta^4}. \quad (1.15)$$

დიფერენციალური განივკვეთის ზუსტ ფორმულას (რეზერფორდის ფორმულას) კი ასეთი სახე აქვს

$$d\sigma = \left(\frac{\alpha}{2\mu v^2} \right)^2 \frac{d\Omega}{\sin^4(\vartheta/2)}. \quad (1.16)$$

როგორც (1.14) ფორმულიდან ჩანს, პოტენციალში ნებისმიერი ხარისხის მაჩვენებლის შემთხვევაში სრული კლასიკური განივკვეთი განშლადია მცირე კუთხეებზე

$$\sigma \sim \left(\frac{\alpha}{\mu v^2} \right)^n \int \frac{\vartheta d\vartheta}{\vartheta^{2(1+1/n)}} \rightarrow \infty, \quad (1.17)$$

როცა $n \rightarrow \infty$ (1.17) ფორმულა ლოგარითმულად განშლადია.

კვანტურ-მექანიკური თვალსაზრისით, კლასიკური გაფანტვა დიდ სამიზნე მანძილებზე აზრს კარგავს. მართლაც, კლასიკური გაფანტვისას იგულისხმება, რომ გვაქვს ზუტად განსაზღვრული გაფანტვის კუთხე, რაგინდ მცირეც უნდა იყოს ის. დიდი სამიზნე მანძილებზე მნიშვნელოვან როლს ასრულებს დამჯახებელი ნაწილაკების ტალღური თვისებები, დიფრაქციული გაფანტვა უტოლდება კლასიკურს, ამიტომ ტრანექტორიის ცნება იკარგება (თავს იჩენს განუზღვრელობის პრინციპი). ამრიგად, დიდ სამიზნე მანძილებზე, ანუ მცირე გაფანტვის კუთხეებზე მიმდინარე გაფანტვის პროცესები უნდა განვიხილოთ კვანტურ-მექანიკურად.

2.2. კვანტური თავისებურებები. კლასიკური წარმოდგენების გამოყენების პირობები

განუზღვრელობის პრინციპი აპირობებს მოძრაობის ტრაექტორიის ცნების გამოყენების შესაძლებლობას. ეს პირობები მნიშვნელოვნად განსხვავებულია მსუბუქი (ელექტრონები) და მძიმე (ატომები) ნაწილაკებისათვის. შევაფასოთ სიჩქარის განუზღვრელობა, მაგალითად, არგონის ატომისათვის Ar , რომლის მასაა $M = 67 \cdot 10^{-24}$ გრ, და ელექტრონისათვის. თუ განუზღვრელობა კოორდინატის განსაზღვრაში არის ატომური მანძილების რიგის, ანუ $\Delta x = 10^{-8}$ სმ, მაშინ სიჩქარის განუზღვრელობა იქნება $\Delta v_{Ar} = 10^3$ სმ/წმ და $\Delta v_e = 10^8$ სმ/წმ.

თვითონ სიჩქარე, მაგალითად, ოთახის ტემპერატურაზე არის $\Delta v_{Ar} = (3T / M)^{1/2} = 3 \cdot 10^4$ სმ/წმ და $\Delta v_e = 10^7$ სმ/წმ. ამრიგად,

$$v_{Ar} \pm \Delta v_{Ar} = (10^4 \pm 10^3) \text{ სმ/წმ (ტრაექტორია არის),}$$

$$v_e \pm \Delta v_e = (10^7 \pm 10^8) \text{ სმ/წმ (ტრაექტორია არ არის).}$$

სიდიდე Δv განისაზღვრება ურთიერთქმედების არის a ზომით $\Delta v = \hbar / ma$, ასე რომ, სიჩქარე იქნება განსაზღვრული ($v \gg \Delta v$), ხოლო კლასიკური განხილვა დასაშვებია, თუ

$$\lambda = \frac{\hbar}{mv} \ll a. \quad (1.18)$$

აქ λ დე ბროილის ტალღის სიგრძეა. ეს პირობა აუცილებელი, მაგრამ არა საკმარისია, რადგან სიჩქარის შემცირებასთან ერთად გამოვლინდება გაფანტვის წმინდა ტალღური ბუნება, რომელიც უკავშირდება დიფრაქციის მოვლენას ატომურ ნაწილაკზე.

თავი II. ატომები და ორატომიანი მოლეკულები. ატომურ ნაწილაკთა ურთიერთქმედების კოტენსიალები

ნაწილაკთა ძალთა ცენტრის ველში მოძრაობის ზოგად ამოცანას აქვს ორი ტიპის ამონახსნი. პირველი ტიპის ამონახსნები აღწერს ინფინიტურ მოძრაობას და შეესაბამება გაფანტვას ან დაშლას, მეორე ტიპის კი შეესაბამება ფინიტურ მოძრაობას და აღწერს ბმულ მდგომარეობებს. კვანტური მექანიკის ენაზე ეს ამონახსნები მიეკუთვნება მოძრაობას, შესაბამისად, უწყვეტი და დისკრეტული ენერგეტიკული სპექტრის მნიშვნელობით. ამ ამონახსნებს შორის არსებობს ღრმა კავშირი, ამიტომ ძალზე მნიშვნელოვანია, ვფლობდეთ ინფორმაციას ატომურ ნაწილაკებზე არა მხოლოდ როგორც ძალთა ცენტრებზე, არამედ – მათ სტრუქტურასა და აღწერის მეთოდებზე. ამ თავში ამ საკითხებს მოკლედ მიმოვიხილავთ.

1. ატომები

შრედინგერის განტოლება, რომელიც ითვალისწინებს ყველა სახის ურთიერთქმედებას მრავალელექტრონიან ატომში, არც ანალიზურად იხსნება, არც რიცხობრივად. თუმცა ეს ურთიერთქმედებები შეიძლება განვალაგოთ გარკვეული იერარქიით და შემდგომ გავითვალისწინოთ ისინი თანმიმდევრობით შემოფოტების თეორიის ფარგლებში. თუ გავითვალისწინებთ მხოლოდ ელექტრონების ბირთვისა და ერთმანეთთან ელექტროსტატიკურ ურთიერთქმედებას, შრედინგერის განტოლება ასე შეიძლება ჩაწეროს:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \sum_i \nabla_i^2 - \sum_i \frac{Ze^2}{r_i} + \sum_{i>j} \frac{e^2}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} \right) \Psi = E\Psi. \quad (2.1)$$

აქ პირველი წევრი ელექტრონების კინეტიკური ენერჯის ოპერატორების ჯამია, ხოლო მეორე და მესამე წევრები ელექტრონების ბირთვისა და ერთმანეთთან ურთიერთქმედების პოტენციალური ენერჯის ოპერატორებია.

ელექტრონების ელექტროსტატიკური ურთიერთქმედება ბირთვთან წარმოადგენს ყველაზე მნიშვნელოვან ურთიერთქმედებას, რომელიც განსაზღვრავს ატომის გარსულ მოდელს. ამ ურთიერთქმედების ენერჯია დაახლოებით Z^2 -ის პროპორციულია. ელექტრონების ელექტროსტატიკური ურთიერთგანზიდვა დაახლოებით Z -ის პროპორციულია. განხილვის პირველ ეტაპზე შესაძლებელია ამ ურთიერთქმედების უგულვებლყოფა ან ჩანაცვლება ეფექტური ცენტრალური სიმეტრიის მქონე პოტენციალით. ამ გზით პოულობენ ერთელექტრონიან მდგომარეობებს – ენერჯებს და ტალღურ ფუნქციებს. ასეთი მიდგომით მრავალელექტრონიანი ამოცანა დაიშლება რამდენიმე ერთელექტრონიან ამოცანად, თითოეული ამოცანა თავისი ეფექტური პოტენციალით, ხოლო მრავალელექტრონიანი სისტემის ტალღურ ფუნქციას

ექნება ერთელექტრონიანი ტალღური ფუნქციების ნამრავლის სახე. ატომის ტალღური ფუნქციის სწორად ასაგებად აუცილებელია, გავითვალისწინოთ მიკროსამყაროს ფუნდამენტური პრინციპი – ერთი ბუნების ნაწილაკთა განურჩევლობა, ანუ იგივეობა. ნაწილაკთა იგივეობის გათვალისწინებას მივყავართ ტალღური ფუნქციების გარკვეულ სიმეტრიასთან ნაწილაკთა გადასმის მიმართ. მაგალითად, ნახევრის ტოლი სპინის მქონე ნაწილაკთა (როგორებიცაა ელექტრონები) ტალღური ფუნქციები ნიშანს იცვლის ორი ელექტრონის გადასმისას. ამას კი, თავის მხრივ, მივყავართ თვისობრივად ახალ ცნებამდე, როგორიც არის, მაგალითად, გაცვლითი ენერგია ან გაცვლითი ურთიერთქმედება, რომელთაც ანალოგი არ გააჩნიათ კლასიკურ ფიზიკაში.

არაელექტროსტატიკური ბუნების ურთიერთქმედებებიდან ყველაზე მნიშვნელოვანია ელექტრონის საკუთარი მაგნიტური მომენტის ურთიერთქმედება მაგნიტურ ველთან, რომელიც წარმოიშობა ელექტრონის მოძრაობისას ბირთვის ველში, ანუ სპინ-ორბიტალური ურთიერთქმედება. ეს ურთიერთქმედება რელატივისტური ბუნებისაა და სიდიდით $Z^4 \alpha^2 Ry$ რიგისაა, სადაც $\alpha = e^2 / \hbar c = 1/137$ ნაზი სტრუქტურის მუდმივაა, ხოლო $Ry = 13.6$ ელექტრონ-ვოლტს.

სპინ-ორბიტალური ურთიერთქმედების სიმცირე საშუალებას გვაძლევს, ტალღური ფუნქცია წარმოვადგინოთ ორი ფუნქციის ნამრავლის სახით, როცა ერთი ფუნქცია დამოკიდებულია მხოლოდ სპინურ, ხოლო მეორე – მხოლოდ სივრცულ ცვლადებზე. იმისათვის, რომ მთლიანი ტალღური ფუნქცია იყოს ანტისიმეტრიული, სივრცული ტალღური ფუნქცია უნდა იყოს სიმეტრიული, ხოლო სპინური – ანტისიმეტრიული, ან – პირიქით, ნებისმიერი ორი ელექტრონის ცვლადების გადასმის მიმართ.

2. ერთი ელექტრონი ცენტრალური სიმეტრიის მქონე პოტენციალურ ველში

ამ შემთხვევაში შრედინგერის განტოლებას ასეთი სახე აქვს:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U(r) - E \right) \Psi(\vec{r}) = 0. \quad (2.2)$$

ცენტრალური სიმეტრიის პოტენციალი საშუალებას გვაძლევს, განვაცალოთ ცვლადები სფერულ კოორდინატთა სისტემაში. ტალღური ფუნქცია წარმოვიდგინოთ, როგორც რადიალური და კუთხური ტალღური ფუნქციების ნამრავლი

$$\Psi(\vec{r}) = R(r) Y(\vartheta, \varphi). \quad (2.3)$$

სფერული ფუნქციები $Y(\vartheta, \varphi)$ აღწერს კუთხეებზე დამოკიდებულ მოძრაობას და წარმოადგენს იმპულსის მომენტის კვადრატის ოპერატორის $\hbar^2 \hat{L}^2$ და ამავე ოპე-

რატორის z ღერზე გეგმილის $\hat{h}l_z$ საკუთარ ფუნქციებს. სფერული ფუნქციები $Y(\vartheta, \varphi)$ აკმაყოფილებს განტოლებებს

$$\hat{h}^2 \hat{l}^2 Y_{lm}(\vartheta, \varphi) = \hat{h}^2 l(l+1) Y_{l \rightarrow l}(\vartheta, \varphi) \quad (2.4)$$

$$\hat{h}l_z Y_{lm}(\vartheta, \varphi) = \hbar m Y_{l \rightarrow l}(\vartheta, \varphi).$$

მათ ასეთი სახე აქვთ:

$$Y_{lm}(\vartheta, \varphi) = \sqrt{\frac{2l+1}{2\pi} \frac{(l-m)!}{(l+m)!}} P_l^m(\cos \vartheta) e^{im\varphi}, \quad (2.5)$$

სადაც $P_l^m(x)$ ლეჟანდრის მიერთებული ფუნქციაა. აქ $l=0,1,2,\dots$ მთელი რიცხვია, რომელსაც ორბიტალურ კვანტურ რიცხვს უწოდებენ. მოცემული l -ისთვის მაგნიტური კვანტური რიცხვი m იღებს $2l+1$ მნიშვნელობებს $m=0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l$.

ატომურ ფიზიკაში მდგომარეობებს, რომელთაც აქვთ იმპულსის მომენტის კვადრატის გარკვეული მნიშვნელობა, აღნიშნავენ ლათინური ასოებით ამ სქემის მიხედვით:

$$\begin{array}{cccccccc} l & 0 & 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & 6 & 7 \\ & s & p & d & f & g & h & i & j \end{array}$$

ორბიტალური მომენტის სიდიდის, ანუ l მოცემის შემდეგ, განტოლება რადიალური ტალღური ფუნქციისათვის ასე ჩაიწერება:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \left(U(r) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} \right) R = ER(r). \quad (2.6)$$

ამ განტოლების საკუთარი მნიშვნელობა არის სისტემის მოცემული მდგომარეობის ენერგია.

რადიალური ტალღური ფუნქციისათვის მიღებული (2.6) განტოლების მთელი სპექტრი იყოფა ორ ნაწილად: ბმული მდგომარეობების დისკრეტულ სპექტრად $E < 0$ და უწყვეტ სპექტრად $E > 0$, რომელიც შეესაბამება გაფანტვის ან დაშლის პროცესებს. მკვეთრად განსხვავებულია შესაბამისი ტალღური ფუნქციების ყოფაქცევა. მაგალითად, ძალთა ცენტრიდან დიდ მანძილზე რადიალური ტალღური ფუნქციების ასიმპტოტიკური ყოფაქცევა ასეთია

$$R_{cont} = a \frac{e^{-ik_0 r}}{r} + b \frac{e^{+ik_0 r}}{r}, \quad E > 0, \quad (2.7)$$

$$R_{disc} = a' \frac{e^{-\gamma r}}{r} + b' \frac{e^{\gamma r}}{r}, \quad E < 0 \quad (2.8)$$

სადაც $k_0 = \sqrt{2mE} / \hbar$ და $\gamma = \sqrt{-2mE} / \hbar$.

როდესაც $E > 0$, ტალღური ფუნქცია R_{cont} სასრულია და უწყვეტია a და b -ს ნებისმიერი მნიშვნელობისათვის. ის კრებადი და განშლადი ტალღების სუპერპოზიციაა და შეესაბამება ელექტრონის აპერიოდულ ინფინიტურ მოძრაობას – მოსვლას

უსასრულობიდან ძალთა ცენტრზე და შემდგომ წასვლას უსასრულობაში. უწყვეტ სპექტრში სწორედ ასეთი მოძრაობაა გაფანტვა. განხილულ შემთხვევაში გადასვლა ერთი მდგომარეობიდან მეორეში და ნაწილაკთა რიცხვის ცვლილება არ ხდება, ამიტომ გაფანტვა დრეკადია. ტალღური რიცხვი k_0 არ იცვლება, ხოლო დაცემული ნაწილაკების ნაკადი ტოლია გაფანტული ნაწილაკების ნაკადისა, ანუ $|a|=|b|$. ტალღური ფუნქციის ასიმპტოტური სახე (2.7) შეიძლება ჩავწეროთ მდგრადი ტალღის სახით ფაზის წანაცვლებით δ_0 დაცემული ტალღის ფაზის მიმართ. თუ (2.7)-ში დაუშვებთ, რომ $a = Be^{i\delta_0} / 2ik_0$ და $b = -Be^{-i\delta_0} / 2ik_0$, მაშინ R_{cont} -ის მიღებულ გამოსახულებაში

$$R_{cont} = \frac{B}{k_0 r} \sin(k_0 r + \delta_0) \quad (2.9)$$

ერთადერთი მინიშნება, რომ ელექტრონი ძალთა ცენტრზე გაიფანტა, არის ფაზის წანაცვლება δ_0 .

დისკრეტული სპექტრის შემთხვევაში, როდესაც $E < 0$, იმისათვის, რომ ტალღური ფუნქცია (2.8) იყოს სასრული, როდესაც $r \rightarrow \infty$, აუცილებელია, დაუშვათ, რომ $b' = 0$. მაშინ ფუნქცია

$$R_{disc} = a' \frac{e^{-\gamma r}}{r} \quad (2.10)$$

მიანიშნებს იმას, რომ ელექტრონი, ძირითადად, ძალთა ცენტრის ახლოსაა, რაც შეესაბამება ბმულ მდგომარეობას. როცა $E < 0$ (2.6) განტოლებას ექნება სასრული, უწყვეტი და ცალსახა ამონახსნები, რომელთაც აქვთ (2.10) ასიმპტოტიკური ყოფაქვევა, მხოლოდ ენერჯის დისკრეტული მნიშვნელობისთვის $E_{n,l}$. ეს მნიშვნელობები დამოკიდებულია პოტენციალის სახესა $U(r)$ და იმპულსის ორბიტალური მომენტის l სიდიდეზე.

წყალბადის ატომში და წყალბადისმაგვარ იონებში, ანუ ურთიერთქმედების კულონური პოტენციალის შემთხვევაში $U(r) = -Ze^2 / r$ (Z -ი ბირთვის მუხტია), ელექტრონის ენერგეტიკული დონეების დისკრეტული სპექტრს ასეთი სახე აქვს:

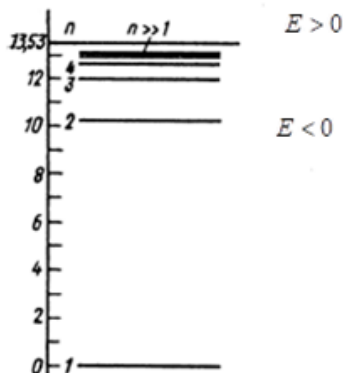
$$E_{ne} = -\frac{R_y Z^2}{(n_r + l + 1)^2} = -\frac{R_y Z^2}{n^2}; \quad R_y = \frac{me^4}{2\hbar^2} \quad (2.11)$$

$$n_r = 0, 1, 2, \dots \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

აქ n_r რადიალური კვანტური რიცხვია, ხოლო n - ე. წ. მთავარი კვანტური რიცხვი. მოცემული მთავარი კვანტური რიცხვის n -ის შემთხვევაში ორბიტალური კვანტური რიცხვი იღებს მნიშვნელობებს $l = 0, 1, 2, \dots, n-1$.

წყალბადის ატომის ენერგეტიკული დონეების დიაგრამა მოცემულია მეოთხე ნახაზზე. უწყვეტი სპექტრის საზღვართან მიმდებარე მდგომარეობები ($n \gg 1$) შეე-

საბამება სუსტად ბმულ ელექტრონს, რომელიც ძალზე დაშორებულია ძალთა ცენტრს



ნახ. 4. წყალბადის ატომის ენერგეტიკული დონეების დიაგრამა

თერმების დუბლეტური სტრუქტურის გათვალისწინების გარეშე, დონეების ენერგია დამოკიდებულია მხოლოდ n -ზე.

3. მრავალელექტრონიანი ატომები

მრავალელექტრონიანი ატომის ტალღური ფუნქცია აიგება ერთელექტრონიანი ტალღური ფუნქციებით ისე, რომ აგებული ფუნქცია იყოს ანტისიმეტრიული ნებისმიერი ორი ელექტრონის კოორდინატების გადასმის მიმართ. ერთელექტრონიანი ამოცანის ამოსახსნელად შემოჰყავთ სფერული სიმეტრიის მქონე ეფექტური პოტენციალი, რომელიც, ცხადია, არ არის კულონური ტიპის, თუნდაც იმიტომ, რომ ელექტრონები ახდენენ ბირთვის მუხტის ეკრანირებას. ამ შემთხვევაში კულონური ველისთვის დამახასიათებელი გადაგვარება ორბიტალური მომენტით იხსნება და ერთელექტრონიანი დონეები დამოკიდებული იქნება ორ კვანტურ რიცხვზე – n -ზე და l -ზე (სფერული სიმეტრიის ველში m_l -ით გადაგვარება ბუნებრივია რჩება).

ატომის ერთელექტრონიანი მდგომარეობების შევსება ელექტრონებით ხდება პაულის პრინციპის დაცვით, რომლის მიხედვითაც, ერთელექტრონიან მდგომარეობაში, რომელიც ხასიათდება ოთხი კვანტური რიცხვით n , l , m_l და m_s , შეიძლება მოთავსდეს მხოლოდ ერთი ელექტრონი. ელექტრონების განაწილებას n და l კვანტური რიცხვების მიხედვით, უწოდებენ ელექტრონულ კონფიგურაციას, და ის აღინიშნება ასე nl^k , სადაც k არის აღნიშნულ მდგომარეობაში მყოფი ელექტრონების რიცხვი. ეკვივალენტური ელექტრონების (n და l ერთნაირია) კონფიგურაცია შეიცავს არა უმეტეს $2(2l+1)$ ელექტრონს, რომელთაც აქვთ განსხვავებული ორბიტალური მომენტის გეგმილები ($2l+1$ მნიშვნელობა) და სპინის ორი პროექცია.

ინდივიდუალური ორბიტალური და სპინური მომენტები, ზოგადად, არ არის მოძრაობის ინტეგრალები. მოძრაობის ინტეგრალია ატომის სრული იმპულსის მომენტის მნიშვნელობა. უმეტეს შემთხვევაში ატომში რეალიზდება ე. წ. LS ბმა, რომლის დროსაც ატომის სრული იმპულსის მომენტი ატომის სრული ორბიტალური L და სრული სპინური S მომენტების ჯამია. თავის მხრივ, L და S მიიღება ელექტრონების ინდივიდუალური ორბიტალური მომენტებისა და სპინების აჯამებით. ეკვივალენტური ელექტრონების მომენტების აჯამვისას L -ის და S -ის ზოგი მნიშვნელობა შეიძლება, შეუთავსებელი აღმოჩნდეს პაულის პრინციპთან. ამიტომ ასეთი მნიშვნელობები გამოირიცხება.

ზემოთ განხილული სქემის ანალოგიურად მრავალელექტრონიანი ატომის თერმები აღინიშნება ლათინური ასოებით:

$$L \quad 0 \quad 1 \quad 2 \quad 3 \quad 4 \quad 5 \quad \dots \tag{2.12}$$

$$S \quad P \quad D \quad F \quad G \quad H \quad \dots$$

მარცხნივ მალა იწერება $2S+1$ სიდიდე, შესაბამისად, თერმის აღნიშვნა ასეთია ^{2S+1}L . სფერული სიმეტრიის მქონე პოტენციალის შემთხვევაში, როდესაც ელექტრონებს შორის ურთერთქმედება არ განიხილება, სრული ტალღური ფუნქცია წარმოადგენს ერთელექტრონიანი ტალღური ფუნქციის ნამრავლს, რომელთა ლუწობა განისაზღვრება ფორმულით $(-1)^l$. ამიტომ მთლიანი ტალღური ფუნქციის ლუწობა იქნება

$$P = (-1)^{\sum_i l_i}, \tag{2.13}$$

სადაც l_i ელექტრონების ორბიტალური მომენტების კვანტური რიცხვებია.

4. ორატომიანი მოლეკულები. ელექტრონული და ბირთვული მოძრაობების განცალკევება

მოლეკულა უფრო რთული სისტემაა, ვიდრე ატომი. სირთულე, ძირითადად, განპირობებულია იმით, რომ ბირთვების მიერ შექმნილი ელექტრონული ველი, რომელშიც მოძრაობენ ელექტრონები, არ არის სფერული სიმეტრიის, როგორც ეს იყო ატომებში. გარდა ამისა, ბირთვებიც მოძრაობენ, რასაც, ელექტრონების მოძრაობის გათვალისწინებით, მივყავართ ისეთ მათემატიკურ სიძნელეებთან, რომელთა გადაჭრა ზოგად შემთხვევაში შესაძლებელია მხოლოდ მიახლოებითი მეთოდებით. მასათა დიდი განსხვავების გამო, ბირთვები და ელექტრონები სუსტად დაკავშირებული ორი ქვესისტემაა - მძიმე და მსუბუქი.. ელექტრონებთან შედარებით ბირთვები მოძრაობენ იმდენად ნელა, რომ პირველ მიახლოებაში ისინი შეგვიძლია უძრავ ნაწილაკებად განვიხილოთ. პირველად ეს მიახლოება განხილული იყო ბორნისა და ოპენჰაიმერის მიერ ბირთვული და ელექტრონული ცვლადების განსაცალკევებლად მოლეკულის აღმწერ შრედინგერის განტოლებაში. ამისათვის მათ გამოიყენეს შემ-

ფოტების თეორია, სადაც მცირე პარამეტრი იყო $\frac{m}{M} \ll 1$ (m აქ ელექტრონის, ხოლო M ბირთვის მასებაა). ამ მიახლოებაში ძირითადი დაშვება ის არის, რომ სისტემის სრული ტალღური ფუნქცია $\Psi(\vec{r}, \vec{R})$ შეიძლება წარმოვიდგინოთ ორი ფუნქციის ნამრავლად $\psi_e(\vec{r}, \vec{R})\psi_n(\vec{R})$. აქ $\psi_n(\vec{R})$ ბირთვის მოძრაობის აღმწერი ტალღური ფუნქციაა, რომელიც დამოკიდებულია მხოლოდ ბირთვის კოორდინატებზე $\vec{R} \equiv \vec{R}_1, \vec{R}_2$, ხოლო $\psi_e(\vec{r}, \vec{R})$ ელექტრონების ტალღური ფუნქციაა, რომელიც დამოკიდებულია როგორც ელექტრონების $\vec{r} \equiv \vec{r}_i, \vec{r}_j, \dots$ ისე ბირთვის კოორდინატებზე \vec{R} , მაგრამ ბირთვის კოორდინატები $\psi_e(\vec{r}, \vec{R})$ ფუნქციაში შედიან მხოლოდ როგორც პარამეტრები. ორატომიან მოლეკულებში პარამეტრული დამოკიდებულება ბირთვის კოორდინატებზე ჩაინერება ბირთვებშორისი მანძილის R -ის შემოტანით, ასე რომ ელექტრონული ტალღური ფუნქციისათვის გვექნება $\psi_e = \psi_e(\vec{r}, R)$.

დავწეროთ შრედინგერის სტაციონარული განტოლება მთელი სისტემისათვის:

$$\hat{H}\Psi(\vec{r}, \vec{R}) = E\Psi(\vec{r}, \vec{R}). \quad (2.14)$$

აქ \hat{H} სისტემის ჰამილტონიანია

$$\hat{H} = -\sum_i \frac{\hbar^2}{2M_i} \nabla_i^2 - \sum_j \frac{\hbar^2}{2m} \nabla_j^2 + V_{nn} + V_{ne} + V_{ee}, \quad (2.15)$$

სადაც პირველი ორი წევრი ბირთვის და ელექტრონების კინეტიკური ენერჯიის ოპერატორებია, ხოლო V_{nn} , V_{ne} და V_{ee} აღწერენ ბირთვის – ერთმანეთთან, ელექტრონების – ბირთვებთან და ელექტრონების ერთმანეთთან ურთიერთქმედებას; M_i ბირთვის მასებაა. ბორნ-ოპენჰაიმერის მიახლოებაში თავდაპირველად უგულებელყოფენ ბირთვის კინეტიკური ენერჯიის ოპერატორებს. ამ შემთხვევაში შრედინგერის განტოლება აღწერს ელექტრონების მოძრაობას უძრავი ბირთვის ველში და ეს სახე აქვს:

$$\hat{H}_e \psi_e(\vec{r}, R) = E_e(R) \psi_e(\vec{r}, R), \quad (2.16)$$

სადაც

$$\hat{H}_e = -\sum_j \frac{\hbar^2}{2m} \nabla_j^2 + V_{nn} + V_{ne} + V_{ee}. \quad (2.17)$$

განტოლება (2.16)-ში $E_e(R)$ არის ელექტრონების სრული ენერჯიის და ბირთვის კულონური განზიდვის ენერჯიის ჯამი. ამ სიდიდეს უწოდებენ ელექტრონულ თერმს. ის არ არის მუდმივი სიდიდე მოცემულ სტაციონარულ მდომარეობაში, როგორც ეს ატომის შემთხვევაშია, და დამოკიდებულია ბირთვებშორის მანძილზე – R -ზე.

მხოლოდ ელექტრონების ენერჯია $E_e(R) - V_{nn}$ R -ის შემცირებასთან ერთად უნდა გადავიდეს „გაერთიანებული“ ატომის ენერჯიაში შერწყმული ბირთვებით. მაგალი-

თად, წყალბადის მოლეკულურ იონში H_2^+ ბირთვების შერწყმისას ელექტრონული ენერგია უნდა გადავიდეს ჰელიუმის იონის He^+ ელექტრონულ ენერგიაში. მეორე ზღვრულ შემთხვევაში, როდესაც $R \rightarrow \infty$ ელექტრონული ენერგია $E_e(R)$ უნდა გადავიდეს „განცალკევებული ატომების“ ელექტრონული ენერგიების ჯამში, ანუ იმ ატომების ელექტრონული ენერგიების ჯამში, რომლებზეც დისოცირდება მოლეკულა.

შემდეგი ნაბიჯი (2.14) განტოლების ამოხსნისას ბორნ-ოპენჰაიმის მიახლოებაში არის ბირთვების მოძრაობის გათვალისწინება. ამისათვის გამოვიყენოთ (2.16) განტოლება და გავითვალისწინოთ ის ფაქტი, რომ $\psi_n(\vec{R})$ -თან შედარებით $\psi_e(\vec{r}, R)$ წარმოადგენს R -ის ნელაცვლად ფუნქციას. შედეგად, (2.14) - დან მივიღებთ

$$\left[-\sum_i \frac{\hbar^2}{2M_i} \nabla_i^2 + E_e(R) \right] \psi_n(\vec{R}) = E \psi_n(\vec{R}). \quad (2.18)$$

მიღებულ განტოლებაში ელექტრონული ენერგია $E_e(R)$ ასრულებს ბირთვების პოტენციალური ენერგიის როლს. შემდგომ ამ სიდიდეს აღვნიშნავთ $U(R)$ -ით. (2.18) განტოლებაში ისე, როგორც (2.14) განტოლებაში, E არის მთელი სისტემის სრული ენერგია, ანუ ელექტრონების და ბირთვების ენერგია. ის უკვე აღარ არის დამოკიდებული R პარამეტრზე, კონსტანტაა, როგორც – ჩაკეტილი სისტემის სტაციონარულ მდგომარეობაში.

როგორც ცნობილია, მასათა ცენტრის სისტემაზე გადასვლით ორი სხეულის მოძრაობის ამოცანა (ჩვენს შემთხვევაში – ორი ბირთვის) დაიყვანება ერთი სხეულის მოძრაობის ამოცანაზე $U(R)$ ცენტრალური სიმეტრიის ველში დაყვანილი მასით $\mu = M_1 M_2 / (M_1 + M_2)$. თავის მხრივ, მოძრაობა ცენტრალური სიმეტრიის $U(R)$ ველში დადის ერთგანზომილებიან მოძრაობაზე ეფექტურ ველში, რომელიც წარმოადგენს $U(R)$ -ის და ცენტრიდანული ენერგიების ჯამს

$$U_{eff} = U(R) + BK(K+1), \quad (2.19)$$

სადაც $B = \hbar^2 / 2\mu R^2$ ბრუნვითი მუდმივაა, ხოლო K იღებს რიგ დისკრეტულ მნიშვნელობებს (ძირითადი ელექტრონული მდგომარეობის შემთხვევაში – $K = 0, 1, 2, \dots$, რაც შეესაბამება მყარი როტატორის კვანტურ რიცხვებს).

5. ელექტრონული დონეები

მოლეკულის ელექტრონული თემების დასადგენად საჭიროა (2.16) განტოლების ამოხსნა. ზოგად შემთხვევაში ეს ძალზე რთული მათემატიკური ამოცანაა. აქ ვთავაზობთ მხოლოდ ორატომიანი მოლეკულების თერმების თვისობრივ ანალიზს.

მოლეკულებში სფერული სიმეტრიის დარღვევის გამო ელექტრონების ორბიტალური მომენტი L არ ინახება, ამიტომ ატომებში მიღებული კლასიფიკაცია, L

კვანტური რიცხვის მიხედვით, აქ შეუძლებელია. ამოცანაში არსებული აქსიალური სიმეტრია უშვებს მხოლოდ სიმეტრიის ღერძის მიმართ ორბიტალური მომენტის პროექციის შენახვას. ამის შესაბამისად, ორატომიანი მოლეკულის ელექტრონული მდგომარეობების კლასიფიკაცია ხორციელდება მოლეკულარულ ღერძზე მომენტის პროექციის სიდიდის მიხედვით, რომელსაც Λ -თი აღნიშნავენ და რომელიც მოლეკულის ღერძზე ატომების ორბიტალური მომენტების ჯამის აბსოლუტური სიდიდის ტოლია

$$\Lambda = |M_{L_1} + M_{L_2}|. \quad (2.20)$$

თუ ელექტრონების ურთიერთქმედებას უგულვებლვყოფთ, ორატომიან მოლეკულაში ერთელექტრონიანი მდგომარეობების კლასიფიკაცია შესაძლებელია მოლეკულურ ღერძზე ცალკეული ელექტრონის იმპულსის მომენტის პროექციის აბსოლუტური სიდიდის მიხედვით, რომელსაც λ -თი აღნიშნავენ. (2.12) სქემის ანალოგიურად, ელექტრონის და მოლეკულის მდგომარეობებს ბერძნული ასოებით აღნიშნავენ

$$\begin{array}{ccccccc} \lambda & 0 & 1 & 2 & 3 \dots & & \\ \sigma & \pi & \delta & \phi \dots & & & \\ \Lambda & 0 & 1 & 2 & 3 \dots & & \\ \Sigma & \Pi & \Delta & \Phi \dots & & & \end{array} \quad (2.21)$$

მოლეკულას აქვს სიმეტრიის ელემენტების გაცილებით მეტი კრებული, რომლებიც მნიშვნელოვან როლს ასრულებენ მოლეკულის მდგომარეობების კლასიფიკაციისას.

წყალბადის მოლეკულური იონის H_2^+ -ის მაგალითზე განვიხილოთ ელექტრონული თერმების ყოფაქცევა. H_2^+ ერთდერთი მოლეკულაა, რომლისთვისაც დამაგრებული ბირთვების მიახლოებაში ცვლადები განცალდება სფეროიდალურ კოორდინატთა სისტემაში და (2.16) განტოლება შეიძლება ამოიხსნას შეშფოთების თეორიის გამოყენებლად. აქ, ამ საკითხის განხილვის გარეშე, მოდი, განვიხილოთ მხოლოდ საბოლოო შედეგები, რომლებიც შეიძლება მივიღოთ (2.16) განტოლების მიახლოებითი მეთოდებით ამოხსნით, მაგალითად, ატომური ორბიტალების წრფივი კომბინაციის მეთოდით (*LCAO*). ეს მიახლოება იმას გულისხმობს, რომ მოლეკულარული ტალღური ფუნქცია შეიძლება წარმოვადგინოთ ატომური ფუნქციების წრფივი კომბინაციად. მაგალითად, ძირითადი მდგომარეობისათვის შესაძლებელია ორი კომბინაცია:

$$\begin{aligned} \psi_1 &= c_a \psi_a + c_b \psi_b, \\ \psi_2 &= c_a \psi_a - c_b \psi_b, \end{aligned} \quad (2.22)$$

სადაც ψ_a და ψ_b - ატომური ფუნქციებია, რომლებიც შეესაბამება ელექტრონის ყოფნას a ბირთვის ან b ბირთვის ახლოს. მოლეკულური ფუნქციის $\psi_{1,2}$ წარმოდგენას ორი ატომური ფუნქციის წრფივი კომბინაციის სახით აქვს ღრმა ფიზიკური მნიშვნელობა: ნულისაგან განსხვავებული ალბათობით ელექტრონი შესაძლებელია,

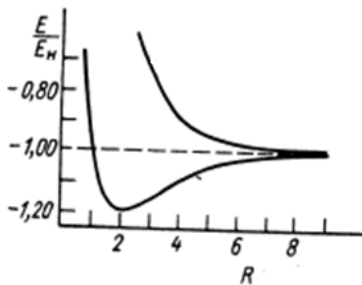
აღმოვაჩინოთ როგორც a ბირთვთან, ისე b ბირთვთან. კლასიკური წარმოდგენების ენაზე შეიძლება ითქვას, რომ ელექტრონი განუწყვეტლივ გადადის ერთი ბირთვიდან მეორეზე. აქ საქმე გვაქვს ატომებში უკვე განხილულ გაცვლით ეფექტთან, რომელიც დამახასიათებელია კვანტური სისტემებისათვის. ატომისაგან განსხვავებით, რომელშიც რამდენიმე განურჩეველი ელექტრონი ერთ პოტენციალურ ორმოშია, H_2^+ -ის შემთხვევაში გვაქვს ორი ერთნაირი პოტენციალური ორმო და ერთი ელექტრონი. ეს აისახა (2.22) ფორმულებში. სწორედ გაცვლითი მექანიზმი უდევს საფუძვლად ე. წ. კოვალენტური კავშირის არსებობას, რომელიც მოლეკულების უმრავლესობას ახასიათებს.

ყურადსაღებია, რომ (2.22)-ში წარმოდგენილია ორი ამონახსნი: ψ_1 – სიმეტრიული ფუნქცია იმ სიბრტყის მიმართ, რომელიც მოლეკულური ღერძის პერპენდიკულარულია და შუაზე ყოფს მას, და ψ_2 – ანტისიმეტრიული ფუნქცია იმავე სიბრტყის მიმართ. რადგან არსებობს ორი საკუთარი ფუნქცია, ზოგადად რომ ვთქვათ, უნდა არსებობდეს ორი საკუთარი მნიშვნელობაც, ანუ ამ ორი მდგომარეობის შესაბამისი ენერჯიის ორი მნიშვნელობა. ახლა მივმართოთ უმარტივეს მოლეკულას H_2^+ -ს, რომელიც უნდა წარმოვიდგინოთ ორ ერთნაირ პოტენციალურ ორმოდ, თითოეულში – ერთი ენერგეტიკული დონით. ერთ-ერთ ორმოში მოვათავსოთ ელექტრონი. შემდეგ დავიწყოთ პოტენციალური ორმოების მიახლოება და დავაკვირდეთ ენერგეტიკული დონეების ყოფაქცევას ორმოებში. ორმოები აბსოლუტურად იდენტურია, ამიტომ დიდ მანძილზე, როდესაც ორმოთა „ურთიერთქმედება“ შეიძლება უგულვებლყოფით, ენერგეტიკული დონეები სიდიდით ერთნაირია და ელექტრონი ერთ-ერთ ორმოშია. თუ საწყის მომენტში ელექტრონი იყო a ორმოში ($c_b = 0$), მაშინ $\psi_1 = \psi_2 = \psi_a$, ანუ სისტემის ტალღური ფუნქცია აღინერება მხოლოდ ერთი ორმოს ტალღური ფუნქციით. ამრიგად, ამ შემთხვევაში მოლეკულური ფუნქცია, როგორც ორი პოტენციალური ორმოსგან შედგენილი სისტემის აღმწერი ფუნქცია, არ არსებობს. ახლა დავიწყოთ ამ ორმოების მიახლოება. ამოცანა კლასიკურად რომ განვიხილოთ, ენერგეტიკული დონეების მდებარეობა ორმოებში არ შეიცვლება, ელექტრონი დარჩება თავის ორმოში და ნებისმიერ R -ზე გვექნება ისეთივე სურათი, როგორიც გვექონდა მაშინ, როცა $R = \infty$. კვანტურ მექანიკაში შესაძლებელია ელექტრონის გვირაბული გადასვლა ერთი ორმოდან მეორეში. ასეთი გადასვლის ალბათობა იზრდება R -ის შემცირებასთან ერთად. ახლა თუ შევხედავთ ენერგეტიკულ დონეებს ორმოებში, აღმოვაჩინოთ, რომ თითოეულ ორმოში შეიქმნა ორი დონე. თუ დიდი R -ებზე ეს დონეები პრაქტიკულად გადადის ერთ წინა დონეში, R -ს შემცირებასთან ერთად უფრო მეტად სცილდება ერთმანეთს. ეს ფაქტი იმას უკავშირდება, რომ ორმოებს შორის სასრული მანძილის შემთხვევაში ერთი ორმოდან მეორეში ელექტრონის გვირაბული გადასვლის შესაძლებლობის უგულვებლყოფა შეუძლებელია. ამ შემთხვევაში სისტემის ტალღურ ფუნქციას უნდა ჰქონდეს (2.22) სახე, სადაც ψ_1 -ს შეესაბამება ენერგია E_1 , ხოლო ψ_2 -ს - ენერგია E_2 . ჩვეულებრივ, E_1 მდებარეობს დონეების საწყის მდებარეობაზე ($R = \infty$) ქვევით, ხოლო E_2 – ზევით.

$E_{1,2}$ ენერგიის ცვლილება, R -ის ცვლილების მიხედვით, ნიშნავს მოლეკულური კავშირის გაჩენას, რაც, თავის მხრივ, გაცვლითი ურთიერთქმედების შედეგია.

ბირთვებს შორის R მანძილის ცვლილებისას H_2^+ -ის ელექტრონული თერმების ყოფაქცევა უნდა იყოს $E_{1,2}$ დონეების ყოფაქცევის ანალოგიური. კერძოდ, როცა

$R = \infty$, სისტემის ელექტრონული ენერგია ტოლია $E_e(H_2^+) = E_e(H^+) + E_e(H)$, ანუ ბმის ენერგის ტოლია ერთ რომელიმე ატომში. ბირთვებს შორის მანძილის შემცირებისას ენერგეტიკული დონე იხლიჩება ორ დონედ (იხ. ნახაზი 5). ერთი თემი, ქვედა, ქმნის ბმულ მდგომარეობას, ხოლო ზედა, გამზიდავი, ბმულ მდგომარეობას არ ქმნის. ამოცანის სიმეტრიიდან გამომდინარე, შეიძლება დავუშვათ, რომ (2.22)-ში $c_a = c_b$. მაშინ ბირთვებს შორის მანძილის ცენტრში, ანუ მარცხენა ბირთვიდან $R/2$ მანძილზე, ψ_2 -ს აქვს კვანძი და ამ წერტილში ელექტრონის ყოფნის ალბათობის სიმკვრივე ნულის ტოლია. პირიქით, ψ_1 -ს არ გააჩნია კვანძი, ასე რომ ელექტრონი, დიდი ალბათობით, იმყოფება ბირთვებს შორის და უზრუნველყოფს მათ მიზიდვას. მოლეკულური ლერძის პერპენდიკულარულ სიბრტყეში არეკვლის მიმართ ანტისიმეტრიული მდგომარეობები, რომელებსაც აქვთ კვანძი ბირთვებს შორის, ჩვეულებრივ არ ქმნიან ბმულ მდგომარეობას და ამიტომ მათ უწოდებენ „დამშლელ“ მდგომარეობებს.



ნახ. 5. წყალბადის მოლეკულური იონის H_2^+ თერმები ძირითად მდგომარეობაში

ჩვენ მიერ ჩატარებული H_2^+ -ის ტალღური ფუნქციების და ელექტრონული თერმების ყოფაქცევის თვისობრივი ანალიზი დასტურდება (2.16) განტოლების ამოხსნით.

6. რხევითი და ბრუნვითი დონეები

ქვედა რხევითი მდგომარეობები, ჩვეულებრივ, კარგად აღინერება ჰარმონიული ოსცილატორის ფორმულით

$$E_v = \hbar\omega \left(v + \frac{1}{2} \right),$$

სადაც ν – რხევითი კვანტური რიცხვი, ხოლო ω რხევის სიხშირეა. რხევითი კვანტური რიცხვის ზრდასთან ერთად მნიშვნელოვანი ხდება პოტენციალის არაჰარმონიული ხასიათი. რეალური პოტენციალის კარგი აპროქსიმაცია, რომელიც ითვალისწინებს არაჰარმონიულობის ფაქტს, მორსეს პოტენციალია

$$U(x) = D(e^{-2ax} - 2e^{-ax}); \quad x = R - R_0. \quad (2.23)$$

მორსეს პოტენციალი ორმოც ძირში მცირედით განსხვავდება ჰარმონიული ოსცილატორის პოტენციალისაგან

$$U(ax \ll 1) \approx -D + k \frac{x^2}{2}, \quad k = 2Da^2. \quad (2.24)$$

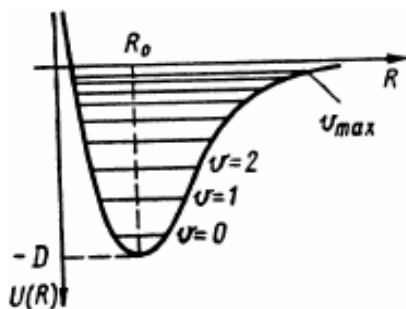
აქ D მოლეკულის დისოციაციის ენერგიაა, R_0 – წონასწორული ბირთვებშორისი მანძილი, ხოლო a – პარამეტრი, რომელიც ახასიათებს პოტენციალური ორმოს სიგანეს და კედლების დახრილობას. მორსეს ოსცილატორის ენერგეები მიიღება (2.23) პოტენციალისათვის შრედინგერის განტოლების ამოხსნით

$$E_\nu = -D + \hbar\omega \left(\nu + \frac{1}{2} \right) - \hbar\omega_x \left(\nu + \frac{1}{2} \right)^2. \quad (2.25)$$

ეს ენერგეები ნაჩვენებია ნახაზზე 6. ზედა ფორმულაში ν რხევითი კვანტური რიცხვია, ω – ოსცილატორის ძირითადი სიხშირე, ხოლო ω_x – შესწორება, რომელიც გამონეულია მორსეს პოტენციალის არაჰარმონიულობით

$$\omega = \sqrt{\frac{k}{\mu_n}} = \sqrt{\frac{2a^2 D}{\mu_n}}; \quad \omega_x = \frac{a^2 \hbar}{2\mu_n}; \quad \frac{\omega_x}{\omega} = \frac{1}{2\nu_{\max} + 1}; \quad (2.26)$$

აქ μ_n ბირთვების დაყვანილი მასაა, ν_{\max} – მორსეს ოსცილატორის დონეების რიცხვი (სასრული რაოდენობა), რომელიც განისაზღვრება პირობით $E_{\nu_{\max}} = 0$. ჩვეულებრივ, ν_{\max} , ანუ რხევითი დონეების რიცხვი, არ აღემატება რამდენიმე ათეულს.

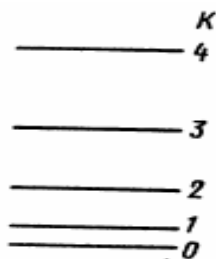


ნახ. 6. მორსეს ოსცილატორის რხევითი დონეები ქვედა დონეები თითქმის ეკვიდისტანტურია.

მოლეკულის ბრუნვა ინვეს ბრუნვითი დონეების გაჩენას, რაც, თავის მხრივ, ინვეს ბრუნვითი სტრუქტურის წარმოქმნას რხევით სპექტრში. ზოგადად, მოლეკულა არ არის მყარი სისტემა, ამიტომ ბრუნვითი მომენტის ზრდასთან ერთად ის რამდენადმე ინელევა, წარმოიშობა ე. წ. ცენტრიდანული წაგრძელება. ამ შემთხვევაში ბრუნვით ენერგიაში უნდა გავითვალისწინოთ დამატებითი წევრები

$$E_r = BK(K+1) - DK^2(K+1)^2 + \dots \quad (2.27)$$

სადაც B და D კონსტანტებია, ხოლო $D \ll B$.



ნახ. 7. ბრუნვითი დონეების განლაგება

უმარტივეს შემთხვევაში, ცენტრიდანული გაჭიმვის გათვალისწინების გარეშე, ბრუნვითი დონეები დონეების სისტემაა დონეებს შორის K -ს პროპორციულად ზრდადი მანძილით (იხ. ნახაზი 7).

7. დიპოლური გადასვლები

ზოგადი სახით, მოლეკულის სპექტრი ელექტრონულ-რხევით-ბრუნვითია, რაც იმას ნიშნავს, რომ გადასვლები ხორციელდება სხვადასხვა რხევითი დონეების შესაბამის ბრუნვით მდგომარეობებს შორის, რომლებიც განეკუთვნებიან სხვადასხვა ელექტრონულ თერმებს. ამ გადასვლების შესაბამისი სიხშირეები, როგორც წესი, მდებარეობენ ხილული და ულტრაიისფერი სპექტრის არეებში. რაც შეეხება წმინდა რხევით და წმინდა ბრუნვით სპექტრებს, ისინი მდებარეობენ ინფრარითელ არეში.

მოლეკულების შთანთქმისა და გამოსხივების სპექტრები, ძირითადად, განპირობებული არიან დიპოლური გადასვლებით. როგორც ატომებისთვის, აქაც შერჩევის წესები განისაზღვრება დიპოლური მომენტის მატრიცული ელემენტის ანალიზით

$$\int \Psi_1^* \vec{m} \Psi_2 d\vec{r}, \quad (2.28)$$

$$\vec{m} = e(\vec{i}x + \vec{j}y + \vec{k}z),$$

სადაც $d\vec{r}$ ყველა ელექტრონული და ბირთვული კოორდინატების ერთობლიობაა. შერჩევის წესებისთვის ჩვენ მოვიტანთ მხოლოდ საბოლოო შედეგებს რამდენადმე გამარტივებული სახით.

1. ელექტრონული გადასვლები

$$\Delta\Lambda = 0, \pm 1;$$

$$\Delta S = 0;$$

$$\Delta\Omega = 0, \pm 1;$$

$$\Sigma^+ \leftrightarrow \Sigma^+, \Sigma^- \leftrightarrow \Sigma^-;$$

$$g \leftrightarrow u.$$

2. ელექტრონულ-რხევითი გადასვლები

Δv – ნებისმიერია, ანუ ელექტრონული გადასვლების შერჩევის წესების გათვალისწინებით, შესაძლებელია ორი ელექტრონული თერმის რხევითი მდგომარეობების ნებისმიერი კომბინაცია.

გამოსხივების სიხშირე ელექტრონულ-რხევით-ბრუნვითი გადასვლებისას ტოლია

$$\nu = \frac{\Delta E_e}{\hbar} + \frac{\Delta E_v}{\hbar} + \frac{\Delta E_r}{\hbar}, \quad (2.29)$$

სადაც ν – ჯამის პირველი, მეორე და მესამე წევრები შეესაბამებინან ელექტრონულ, რხევით და ბრუნვით გადასვლებს.

8. ელექტრონულ-რხევით გადასვლები. ფრანკ-კონდონის პრინციპი

სიმეტრიის თვისებების გარდა, რომლებიც განსაზღვრავენ ნებისმიერი გადასვლის შერჩევის წესებს, ელექტრონულ-რხევით გადასვლებში დიდ როლს ასრულებს ბირთვების რხევითი მოძრაობის აღმწერი ტალღური ფუნქციების გადაფარვის ხარისხი.

განვიხილოთ დიპოლური გადასვლის მატრიცული ელემენტის სტრუქტურა

$$\langle e, v | \vec{m} | e', v' \rangle = \int \Psi_{e'v}^* \vec{m} \Psi_{ev} d\vec{r} d\vec{R}, \quad (2.30)$$

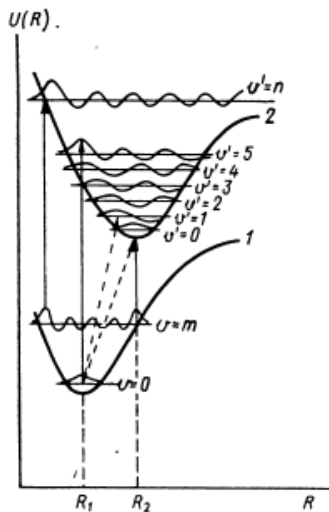
სადაც $\Psi_{ev} = \psi_e(\vec{r}, R) \psi_v(\vec{R})$, e ელექტრონული მდგომარეობის ინდექსია, ხოლო v – რხევითი მდგომარეობის კვანტური რიცხვი, რომელიც შეესაბამება მოცემულ ელექტრონულ მდგომარეობას e . $\psi_v(\vec{R})$ სწრაფად ოსცილირებადი ფუნქციაა (იხილეთ ნახაზი 8), ხოლო ψ_e ნელა იცვლება $\psi_v(\vec{R})$ -თან შედარებით R -ის ცვლილებებისას, ამიტომ ტალღური ფუნქციის ელექტრონული ნაწილი შეიძლება გავითვინოთ ინტეგრალის გარეთ და, შეგვიძლია, ინტეგრალი ასეთად წარმოვიდგინოთ:

$$\langle e, v | \vec{m} | e', v' \rangle = \langle e | \vec{m} | e' \rangle \int \psi_v^* \psi_{v'} d\vec{R}, \quad (2.31)$$

სადაც

$$\langle e | \vec{m} | e' \rangle = \int \psi_e^* \vec{m} \psi_{e'} d\vec{r}. \quad (2.32)$$

ამრიგად, დიპოლური გადასვლის მატრიცული ელემენტი პროპორციულია ინტეგრალის $\langle \psi_v | \psi_{v'} \rangle = \int \psi_v^* \psi_{v'} d\vec{R}$, რომლის სიდიდე დამოკიდებულია ბირთვული ტალღური ფუნქციების გადაფარვის ხარისხზე. ამ ინტეგრალს (ან მისი მოდულის კვადრატს) უწოდებენ ფრანკ-კონდონის ფაქტორს. როგორც ცნობილია, პოტენციალური ორმოს გარეთ ტალღური ფუნქცია ψ_v ექსპონენციალურად მცირდება, ამიტომ გადაფარვის ინტეგრალი, მაგალითად, ძირითადი რხევითი დონეებისათვის $v=0$ და $v'=0$, რომლებიც დამორებულიან არიან სიდიდით $(R_2 - R_1)$ (იხ. ნახაზი 8), ძალზე მცირეა. თუ ასეთი გადასვლა ხორციელდება, ეს იმას ნიშნავს, რომ ელექტრონული



ნახ. 8. ელექტრონულ-რხევითი ვერტიკალური გადასვლები, რომლებიც შეესაბამებიან ფრანკ-კონდონის პრინციპს

გადასვლის მცირე დროის განმავლობაში ბირთვები იცვლიან თავიანთ მდებარეობას $(R_2 - R_1)$ სიდიდით, რომელიც მოლეკულის ზომის რიგისაა, ეს კი ნაკლებად მოსალოდნელია.

ფრანკ-კონდონის ფაქტორის სიდიდე და, მაშასადამე, გადასვლის ალბათობაც მნიშვნელოვანია ისეთი საწყისი და საბოლოო მდგომარეობებისათვის, როდესაც მათ შორის გადასვლა შესაძლებელია ბირთვების კოორდინატების და იმპულსების ცვლილების გარეშე. სწორედ ეს არის ფრანკ-კონდონის პრინციპის არსი. ნახაზზე 8 ასეთი გადასვლები ნაჩვენებია ვერტიკალური ხაზებით (მათ სშირად „ვერტიკალურ“ გადასვლებს უწოდებენ): $v=0 \rightleftharpoons v'=3,4,5$; $v=m \rightleftharpoons v'=0$; $v=m \rightleftharpoons v'=n$. გადასვლები ბირთვების გადაადგილებით და იმპულსების ცვლილებით ნაკლებად მოსალოდნელია, მაგალითად, გადასვლა $v=0 \rightleftharpoons v'=0,1$.

იმ დონეებზე, რომელთათვისაც $\nu, \nu' \gg 1$, ბირთვების მოძრაობა კვაზიკლასიკურია. ამიტომ ბირთვები დროის უმეტეს ნაწილს ატარებენ მობრუნების წერტილის ახლოს და მათ აქვთ თითქმის ნულოვანი იმპულსი. სწორედ მობრუნების წერტილის ახლოს ხორციელდება ყველაზე ხშირად გადასვლა.

9. ურთიერთქმედების პოტენციალები

აღწერის მეთოდის მიუხედავად, იქნება ეს კვანტური თუ კლასიკური მიდგომა, პრაქტიკულად, გაფანტვის ნებისმიერი ამოცანა, მაგალითად ელექტრონის ატომზე გაფანტვა, მრავალი სხეულის ამოცანაა. ამ ამოცანაში ჩვენ ვიცით ცალკეული ნაწილაკების ურთიერთქმედების პოტენციალები, მაგრამ პრობლემის გადაჭრა ამოცანის გამარტივების გარეშე, როგორც წესი, შეუძლებელია. ხშირად ეს გამარტივება, განსაკუთრებით, თუ ეს ეხება დრეკად გაფანტვას, დაიყვანება ატომის სტრუქტურის არმქონე ნაწილაკად წარმოდგენაზე. ამრიგად, ჩვენ წინაშეა ელექტრონის ძალთა ცენტრზე გაფანტვის ამოცანა, როდესაც ურთიერთქმედების პოტენციალი წინასწარ არ არის ცნობილი და რომელიც როგორღაც (თეორიულად თუ ექსპერიმენტულად) უნდა დავადგინოთ. თუ ჩვენ სტრუქტურის მქონე ნაწილაკი შევცვალებთ სტრუქტურის არმქონე ნაწილაკით, რეალური პოტენციალის კარგი აპროქსიმაცია შესაძლებელია მხოლოდ გამფანტავი ცენტრიდან საკმაოდ დაშორებულ მანძილებზე, ანუ იქ, სადაც სამიზნე ატომის სტრუქტურული თავისებურებები ნაკლებმნიშვნელოვანია. აღმოჩნდა, რომ გაფანტვის მრავალ ამოცანაში, განსაკუთრებით მაშინ, როცა ვიხილავთ სრულ განივკვეთებს, რომლებიც მნიშვნელოვნად აღემატებიან გამფანტავი ნაწილაკის გეომეტრიულ ზომებს, ძირითად როლს ასრულებს დამჯახებელი და სამიზნე ნაწილაკების ურთიერთქმედება დიდ მანძილებზე. ეს ფაქტი გამოსადეგია, ჩვეულებრივ, პოტენციალის მულტიპოლებად გაშლის მეთოდით გამოთვლისას ანდა ასიმპტოტური მეთოდების გამოყენებისას (მაგალითად, ატომებს შორის გაცვლითი ურთიერთქმედების გამოთვლისას.) მაგრამ ასეთი მიდგომა ყოველთვის არ არის გამართლებული. ისიც უნდა აღინიშნოს, რომ მთელ რიგ ამოცანებში, მაგალითად, ორი ატომის დაჯახებისას მნიშვნელოვანია, ვიცოდეთ ურთიერთქმედების პოტენციალი არა მარტო – დიდ, არამედ ისეთ მანძილებზეც, რომლებიც ატომების ზომის რიგისაა. ეს ძალზე მნიშვნელოვანი პრობლემაა, განსაკუთრებით, თუ დამჯახებელი ნაწილაკები აგზნებულ მდგომარეობებში არიან. ზოგჯერ ასეთი ამოცანა შეიძლება გადაიჭრას მოდელური პოტენციალის სწორი შერჩევით.

ქვემოთ ჩვენ გავაანალიზებთ, ძირითადად, თვისობრივად, დიდ მანძილებზე ნაწილაკების ურთიერთქმედების ტიპურ შემთხვევებს და განვიხილავთ მოდელურ პოტენციალთა წყებას.

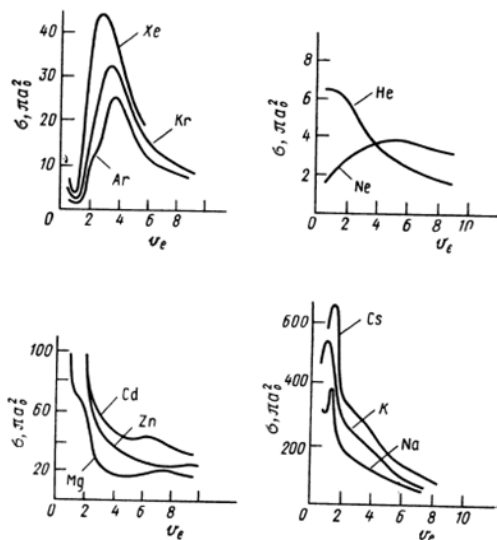
თავი III. ელექტრონების გაფანტვა ატომებზე

1. ნელი ნაწილაკების დრეკადი გაფანტვა

ელექტრონების ატომებზე დრეკადი გაბნევის სისტემატური ექსპერიმენტული შესწავლა დაიწყო გასული საუკუნის 20-იან წლებში რამზაუერის მიერ და უკვე მომდევნო ათწლეულში დადგენილი იქნა განივკვეთის ყოფაქცევის ძირითადი კანონზომიერებები. ნახაზზე 9 ნაჩვენებია ელექტრონების დრეკადი გაფანტვის სრული განივკვეთები ზოგიერთ ატომთა ჯგუფზე, რომლებიც მკვეთრად განსხვავდებიან ერთმანეთისაგან ელექტრონული სტრუქტურით.

ჩამოვთვალოთ განსაკუთრებით დამახასიათებელი თავისებურებები, რომლებიც ჩანს ნახაზზე:

1. გაფანტვის განივკვეთები დამოკიდებულია დამჯახებელი ელექტრონის ენერგიაზე არამონოტონურად;
2. Ar, Kr, Xe-ის ატომებზე გაფანტვის განივკვეთს აქვს მინიმუმი დამჯახებელი ელექტრონის მცირე სიჩქარეებზე (რამზაუერ-ტაუნსენდის ეფექტი);
3. ქიმიურად მსგავსი ელემენტების განივკვეთის მრუდები მსგავსია;
4. ინერტული გაზის ატომებიდან ტუტე ელემენტთა ატომებზე გადასვლისას განივკვეთი ერთი-ორი რიგით იზრდება.



ნახ. 9. ელექტრონების ატომებზე დრეკადი გაბნევის განივკვეთები

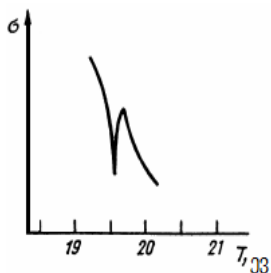
ჩამოთვლილი თავისებურებების პირველივე პუნქტები ეწინააღმდეგება კლასიკურ წარმოდგენებს, რომელთა მიხედვითაც, სიჩქარის გაზრდასთან ერთად დრეკადი გაფანტვის განივკვეთი მინოტონურად უნდა ეცემოდეს. აღსანიშნავია ის ფაქტიც, რომ არამონოტონური არეები ძირითადად მცირე სიჩქარეების არეშია, ანუ იქ,

სადაც განსაკუთრებით უნდა გამოჩნდეს ტალღური თვისებები. ქიმიურად მსგავსი ელემენტების განივკვეთების მსგავსება მიუთითებს იმაზე, რომ გაფანტვის პროცესში, ძირითადად, მონაწილეობენ სავალენტო ელექტრონები. ბუნებრივია, ამ ფაქტით აიხსნება ისიც, რომ რადგან ტუტე ატომების გეომეტრიული ზომები მნიშვნელოვნად აღემატება ინერტული ატომების ზომებს, ელექტრონების ტუტე ელემენტთა ატომებზე გაფანტვის განივკვეთებიც მეტია.

ამრიგად, ელექტრონების ატომებზე დრეკადი გაფანტვის განივკვეთის ყოფაქცევის პირველადი ანალიზი მიუთითებს იმაზე, რომ განივკვეთის ენერგიაზე კლასიკური დამოკიდებულება, როგორც უნდა იყოს, თავს იჩენს შედარებით მაღალ ენერგიებზე, ხოლო „ანომალია“ კი გვაქვს მცირე ენერგიებზე.

კიდევ ერთი მნიშვნელოვანი მოვლენა, რომელიც არ თავსდება კლასიკური აღწერის ჩარჩოებში, რეზონანსებია. არსებობენ მკვეთრი პიკები განივკვეთის სიჩქარეზე დამოკიდებულების მრუდზე, რომლებიც ჩნდებიან მხოლოდ მაშინ, როდესაც ელექტრონული ნაკადი ძალზე მონოენერგეტიკულია, ანუ როდესაც განსხვავება ელექტრონის ენერგიებს შორის არ აღემატება $10^{-1} - 10^{-2}$ ელექტრონ-ვოლტს.

ამ ტიპის რეზონანსები შეესაბამებიან ატომის კვანძოვანი მდგომარეობის შექმნას. ეს მდგომარეობა იქმნება მაშინ, როდესაც ატომი დაცემულ ელექტრონს ჩაიჭერს ავტოიონიზაციურ მდგომარეობაში, რომლის სიცოცხლის ხანგრძლივობაც გაცილებით მეტია ელექტრონის ატომთან დაჯახების დროზე.



ნახ. 10. რეზონანსი ელექტრონის ჰელიუმის ატომზე დრეკადი გაბნევის განივკვეთზე. T - ელექტრონის კინეტიკური ენერგიაა, ხოლო σ - გაბნევის განივკვეთია

ყოველივე ეს გვარწმუნებს იმაში, რომ ელექტრონების ატომებთან დაჯახების შესასწავლად უნდა გამოვიყენოთ კვანტურ-მექანიკური აპარატი. ამ აპარატის შესაქმნელად ჩვენ არ წავალთ ამოცანის ფორმალური და მკაცრი გადაჭრის გზით (ეს განხორციელდა კვანტური მექანიკის კურსის ფარგლებში), არამედ გამოვიყენებთ ანალოგიას კვანტურ და კლასიკურ შედეგებს შორის. ამ მიზნით, ვნახოთ, როგორ შეიძლება „შევასწოროთ“ დრეკადი გაბნევის კლასიკური გამოსახულება მისი კვანტურ-მექანიკური ანალოგის მისაღებად.

კვანტურ მექანიკაში ნაწილაკის მდგომარეობის დასახასიათებლად შემოდის ალბათობის ცნება. შესაბამისად, მოდი, განივკვეთის კლასიკურ გამოსახულებაში

შევიტანოთ ρ სამიზნე მანძილის მქონე ნაწილაკის აღმოჩენის ალბათობის სიმკვრივე, რომელიც აღვნიშნოთ $P(\rho)$ -თი. მაშინ

$$\sigma = 2\pi \int_0^{\infty} P(\rho) \rho d\rho = \frac{2\pi}{(\mu v_0^2)} \int_0^{\infty} P(|l|) |l| d|l|, \quad (3.1)$$

სადაც $|l| = \mu v_0 \rho$ იმპულსის მომენტი, ხოლო μ , v_0 – ელექტრონის მასა და სანყისი სიჩქარე (მასათა ცენტრის სისტემაში, რომელსაც ჩვენ, როგორც წესი, გამოვიყენებთ, ელექტრონის დაყვანილ მასას აღვნიშნავთ μ -ით). თუ გავითვალისწინებთ, რომ მომენტი $|l| = \hbar \sqrt{l(l+1)}$ დაკვანტულია და გადავალთ ინტეგრაციიდან l -ით აჯამვაზე, მივიღებთ

$$\sigma = \frac{\pi \hbar^2}{(\mu v_0^2)} \sum_{l=0}^{\infty} \omega(l) (2l+1) = \frac{\pi}{k_0^2} \sum_{l=0}^{\infty} \omega(l) (2l+1), \quad (3.2)$$

სადაც $k_0 = \mu v_0 / \hbar$ ტალღური რიცხვია ($k_0 = 1/\lambda$, სადაც $\lambda = \hbar / \mu v_0$ დე ბროილის ტალღის სიგრძეა). ჩატარებული გარდაქმნების შედეგად, $\omega(l)$ აღმოჩნდა დისკრეტული სიდიდის l -ის ფუნქცია. ის განსაზღვრავს ალბათობას, რომ ნაწილაკს აქვს მომენტი l . ამრიგად, ტალღური აღწერის დროს სამიზნე მანძილის როლში გამოდის $l\lambda$ სიდიდე:

$$\rho = \frac{|l|}{\mu v_0} \rightarrow \frac{\hbar \sqrt{l(l+1)}}{\mu v_0} \approx \frac{l\hbar}{\mu v_0} = l\lambda, \quad (3.3)$$

$$d\rho \rightarrow (l+1)\lambda - l\lambda = \lambda.$$

ფორმულა (3.2)-ით განსაზღვრული განიკვეთი ე. წ. პარციალური განიკვეთების ჯამია. ამ ჯამის ყოველი წევრი ხასითდება l მომენტის გარკვეული სიდიდით. იმისათვის, რომ გავიგოთ $\omega(l)$ სიდიდე, უნდა ამოვხსნათ შრედიანგერის განტოლება – ყოველ კონკრეტულ შემთხვევაში მოცემული პოტენციალით.

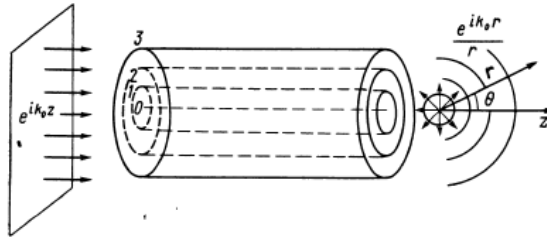
მოდ, განვიხილოთ საკითხი, როგორ განვსაზღვროთ სამიზნეზე დაცემული თავისუფალი ნაწილაკის მდგომარეობა. ნაწილაკისთვის ტალღური თვისებების მინიჭების შემდეგ შეგვიძლია, მხოლოდ ვინინასწარმეტყველოთ, რომ მას აღმოვაჩინოთ $l\lambda$ და $(l+1)\lambda$ -ს შორის. ამ დროს მნიშვნელოვანია, რომ ტალღა-ნაწილაკი ხასითდება l -ის არა – ერთი მნიშვნელობით, არამედ, ზოგადად, უსასრულო რაოდენობით $l = 0, 1, 2, \dots$. ამაში ადვილად დავრწმუნდებით, თუ გავიხსენებთ, რომ z ღერძის გასწვრივ $p_0 = \hbar k_0$ იმპულსით მოძრავი თავისუფალი ნაწილაკი აღინერება ბრტყელი ტალღით $\exp(ik_0 z)$. წარმოვადგინოთ ეს ფუნქცია პარციალური ტალღების მწკრივის სახით, ანუ $\psi_{l,m}(k_0 r)$ ფუნქციების მწკრივის სახით, რომლებიც აღწერენ თავისუფალი ნაწილაკის მოძრაობას გაკვეთილი იმპულსის მომენტით. აქ $\psi_{l,m}(k_0 r)$

ფუნქციები წარმოდგენენ (2.2) შრედინგერის განტოლების ამონახსნებს $U(r) = 0$ პოტენციალით. ბრტყელი ტალღა აქსიალურად სიმეტრიულია z ღერძის მიმართ, ამიტომ მის გაშლაში მონაწილეობენ ის ფუნქციები, რომლებიც არ არიან დამოკიდებულნი φ კუთხეზე, ე.ი. ფუნქციები $m = 0$ -ით. ამრიგად, $\psi_{l,0}(k_0 r) = R_l(k_0 r) Y_{l0}(\vartheta)$, სადაც $R_l(k_0 r)$ თავისუფალი მოძრაობის რადიალური ტალღური ფუნქციაა, რომელიც გამოისახება ბესელის სფერული ფუნქციებით $j_l(k_0 r)$. ყოველივე ამის გათვალისწინებით ბრტყელი ტალღის გაშლა შეიძლება ასე ჩაინეროს:

$$e^{ik_0 z} = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) i^l P_l(\cos \vartheta) j_l(k_0 r). \quad (3.4)$$

აქ $P_l(\cos \vartheta)$ ლეჟანდრის პოლინომებია, ხოლო $j_l(k_0 r) = \sqrt{\pi / 2k_0 r} J_{l+1/2}(k_0 r)$ ($J_{l+1/2}(k_0 r)$ – ბესელის ნახევრის რიგის ფუნქციებია); ϑ , r ჩვეულებრივი ცვლადებია სფერულ კოორდინატა სისტემაში. $j_l(k_0 r)$ ოსცილირებადი ფუნქციაა, რომელიც $k_0 r$ არგუმენტის ზრდასთან ერთად მცირდება. (3.4) ფორმულიდან ჩანს, რომ სივრცის ნებისმიერ წერტილში გამფანტავი ცენტრის ახლოს ტალღა-ნაწილაკი ხასიათდება მომენტების მთელი ერთობლიობით $l = 0$ -დან უსასრულობამდე, რომლებიც გაშლაში შედიან სხვადასხვა წონით. ყოველივე ამის ვიზუალიზაცია შეიძლება შემდეგნაირად: გამფანტავ ცენტრზე დაცემული ნაკადის მხრიდან სივრცე დავშალოთ რიგ კოაქსიალურ ცილინდრებად (იხ. ნახ. 11). დავინყოთ ღერძული ხაზით და გადავწოვოთ ცილინდრები ინდექსებით $l = 0, 1, 2, 3, \dots$ მაშინ, დიდი ალბათობით, s -ტალღას ($l = 0$) აღმოვაჩინოთ ცილინდრში $l = 0$ და $l = 1$ -ს შორის, p -ტალღას ($l = 1$) შრეში $l = 1$ და $l = 2$ შორის, d -ტალღას ($l = 2$) $l = 2$ და $l = 3$ შორის და ა.შ.

ბრტყელი ტალღის წარმოდგენით უსასრულო ტალღათა ერთობლიობით ჩვენ მნიშვნელოვნად გავართულებდით გაფანტვის ამოცანას, რომ არა ის შესაძლებლობა, რომ, ფიზიკური მოსაზრებიდან გამომდინარე, უსასრულო ჯამში შემოვიფარგლოთ წევრების მხოლოდ შედარებით მცირე რაოდენობით და ზოგჯერ – ერთი წევრითაც კი. უფრო გასაგები რომ გავხადოთ ნათქვამი, მოდი, განვიხილოთ ბილიარდის ორი ბურთის შუბლური დაჯახება. ამ პროცესის კვანტურ-მექანიკური აღწერისას (3.4) გაშლაში შეიძლება დავტოვოთ მხოლოდ პირველი წევრი. მართლაც, თუ ძალური ველი ხასიათდება a ქმედების რადიუსით, მაშინ გაფანტვაში ძირითადი წვლილი შეაქვთ დაჯახების პარამეტრებს $\rho \leq a$, ან მომენტების ენაზე – $\hbar l \leq \mu v a$. ამრიგად, დაჯახებაში ძირითადი წვლილი შეაქვთ იმ პარციალურ ტალღებს, რომელთა შესაბამისი მომენტებიც აკმაყოფილებენ პირობას $l \leq ka$. შუბლური დაჯახების დროს $\rho = 0$ და, მასასადამე, $l = 0$. ცხადია, რომ ნელი ნაწილაკების დაჯახებისას, თუ $ka \ll 1$ (3.4), გაშლაში შეიძლება დავტოვოთ ერთი ან ორი წევრი, ანუ განვიხილოთ მხოლოდ s - და p -ტალღების გაფანტვა.



ნახ. 11. პარციალური ტალღების გაფანტვა

დაუბრუნდეთ $\omega(l)$ ფუნქციის დადგენის საკითხს. ამისათვის განვიხილოთ გაფანტვა მცირე a რადიუსის მქონე სფერული სიმეტრიის მქონე პოტენციალურ ორმოზე, რომელიც ასეთი სახისაა:

$$U(r) = \begin{cases} -U_0, & r < a \\ 0, & r > a. \end{cases} \quad (3.5)$$

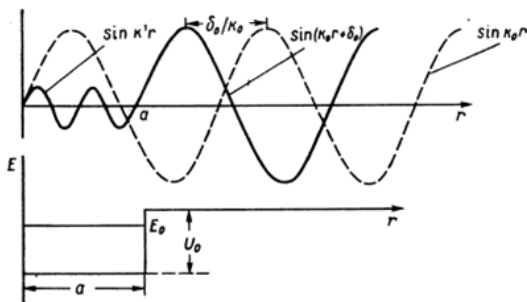
დაუშვათ, რომ შესრულებულია პირობა $a \ll \lambda$ (ან $ka \ll 1$). ამ შემთხვევაში მნიშვნელოვანი იქნება მხოლოდ s - ტალღის გაფანტვა. კლასიკური ფიზიკის თვალსაზრისით, ეს არის შუბლური დაჯახება. წინასწარ ცნობილია, რომ $\rho = 0$, ამიტომ ასეთი დაჯახების ალბათობა ერთის ტოლია $P_{cls} = 1$. კვანტური აღწერისას ეს ცხადი სულაც არ არის. მეტიც: გაფანტული ტალღის ფაზის ცვლილება შეიძლება იყოს ისეთი, რომ მოცემული პარციალური ტალღის გაფანტვის ალბათობა გამოვიდეს ნულის ტოლი. ვიპოვოთ ტალღის სიგრძე ორმოში და მის გარეთ

$$\lambda_1 = \frac{\hbar}{\sqrt{2\mu(E-U)}} = \frac{\hbar}{\mu v_0}, \quad r > a;$$

$$\lambda_2 = \frac{\hbar}{\sqrt{2\mu(E-U)}} = \frac{\hbar}{\sqrt{2\mu(E+U_0)}}, \quad r < a.$$

როგორც ვხედავთ, $\lambda_2 < \lambda_1$, საზღვარზე კი როდესაც $r = a$ ტალღები მდორედ უნდა შეერწყან ერთმანეთს, რაც იმას ნიშნავს, რომ ტალღური ფუნქცია და მისი წარმოებული უნდა იყოს უწყვეტი. მდორე შერწყმას მივყავართ გაფანტული ტალღის ფაზის წანაცვლებამდე. ამ დროს $r > a$ იმ ტალღასთან შედარებით, რომელიც გავრცელდებოდა გაფანტვის გარეშე (იხ. ნახ. 12). გაფანტულ ტალღას გაუფანტავი ტალღისგან განასხვავებს მხოლოდ ფაზის წანაცვლება, ამიტომ გაფანტვის ალბათობა უნდა იყოს ფაზის წანაცვლების δ_l -ის ფუნქცია, ჩვენს შემთხვევაში კი $-\delta_0$ -ის ფუნქცია (ვიხილავთ s - ტალღის გაფანტვას). π -ს ჯერადი ფაზის აღმოჩენა შეუძლებელია. ასე რომ, თუ $\delta_0 = n\pi$, გაფანტვა არ დაფიქსირდება და $\omega(0) = 0$. ასეთი სიტუაცია განმეორდება ყოველთვის, როდესაც გაფანტავი პოტენციალის მოქმედება მოგვცემს ნახევრის ჯერადი რიცხვის ტალღების მიმატებას ან გამოკლებას, ამიტომ $\omega(\delta_0)$ უნდა იყოს ფაზის წანაცვლების δ_0 -ის პერიოდული ფუნქცია.

იმავედროულად, $\omega(\delta_0)$ უნდა იყოს ყოველთვის დადებითი, ხოლო მისი მაქსიმალური სიდიდე – ერთის ტოლი – $\omega_{\max} = 1$. იოლი მისახვედრია, რომ უმარტივესი უწყვეტი ფუნქცია, რომელიც აკმაყოფილებს ამ მოთხოვნებს, არის $\sin^2 \delta_0$. მაშინ (3.2), ფორმულის თანახმად, მივიღებთ, რომ $\sigma_0 \sim \frac{\pi}{k_0^2} \sin^2 \delta_0$.



ნახ. 12. ტალღის ყოფაქცევა ორმოში და მის გარეთ და ფაზის ნანაცვლება გაუფანტავი ტალღის მიმართ

გაფანტვის ამოცანის შესაბამისი შრედინგერის განტოლების ასიმპტოტიკური ამონახსნის ანალიზი ადასტურებს ამ დაშვებას. უნდა აღინიშნოს, რომ ზუსტი პარციალური განივკვეთი ოთხჯერ მეტია და ამ სახისაა:

$$\sigma_l = \frac{4\pi}{k_0^2} (2l+1) \sin^2 \delta_l, \quad (3.6)$$

სრული განივკვეთი კი ტოლია

$$\sigma = \sum_{l=0}^{\infty} \sigma_l = \frac{4\pi}{k_0^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin^2 \delta_l. \quad (3.7)$$

დრეკადი გაფანტვის ამპლიტუდა შეიძლება დავაკავშიროთ პარციალურ ამპლიტუდებთან f_l , რომლებიც არ არიან დამოკიდებულნი ϑ კუთხეზე

$$f(\vartheta) = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) f_l P_l(\cos \vartheta), \quad (3.8)$$

$$f_l = \frac{1}{2ik_0} (e^{2i\delta_l} - 1). \quad (3.9)$$

ამრიგად, სრული განივკვეთიც შეიძლება დავაკავშიროთ პარციალურ ამპლიტუდებთან

$$\sigma = 4\pi \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) |f_l|^2. \quad (3.10)$$

უნდა აღინიშნოს, რომ მიღებული თანაფარდობები ჯერ კიდევ არ გვაძლევს შესაძლებლობას, გადავჭრათ გაფანტვის კონკრეტული ამოცანები. მაგრამ ამოცანად

დავისახავთ პარციალური ტალღებისთვის ფაზურ ნანაცვლებებზე დამოკიდებულების პოვნას. შედეგად წელი დაჯახებების შესწავლის მოხერხებულ მეთოდს. ამა თუ იმ კონკრეტულ ატომურ ნაწილაკზე ელექტრონების დრეკადი გაფანტვის განივკვეთის გამოთვლა წარმოადგენს რთულ და შრომატევად ამოცანას. ამიტომ ჩვენ განვიხილავთ უმარტივეს მოდეულ ამოცანებს და მათი საშუალებით დავადგენთ იმ კანონზომიერებებს, რომლებიც დამახასიათებელია რეალური ატომური ნაწილაკებისათვის.

2. გაფანტვა პოტენციალურ ორმოზე

ჩვენ გვინტერესებს მცირე სიჩქარეები, რაც შეესაბამება $k_0 a \ll 1$, ამიტომ განვიხილოთ მხოლოდ s -ტალღის გაფანტვა. ცხადია, რომ პარციალური ფაზა დამოკიდებული უნდა იყოს სიჩქარესა u_0 (ან k_0) და გამფანტავი ველის პარამეტრებზე, ჩვენს შემთხვევაში ორმოს სიღრმესა U_0 და მის რადიუსზე a . ეს დამოკიდებულება შეიძლება ვიპოვოთ შრედინგერის განტოლების ამონახსნის ასიმპტოტური სახის მეშვეობით, რომელიც აღწერს ელექტრონის მოძრაობას მოცემულ ველში. მეორე თავის პირველ პარაგრაფში ჩვენ განვიხილეთ ელექტრონის მოძრაობა ცენტრალური სიმეტრიის ველში $U(r)$. კუთხური ცვლადების გამოყოფის შემდეგ მიღებული იყო რადიალური განტოლება (2.6), რომელშიც გაფანტვის ამოცანისათვის უნდა განვიხილოთ ამონახსნები დადებითი ენერგიით $E > 0$. ეს ამონახსნები უნდა აკმაყოფილებდნენ სასაზღვრო პირობებს - იყვნენ სასრული სათავეში ($r = 0$) (ისე როგორც მთელ სივრცეში) და გააჩნდეთ ასიმპტოტური სახე

$$\Psi \sim e^{ik_0 z} + f(\vartheta) \frac{e^{ik_0 r}}{r}.$$

თუ საძიებელ ტალღურ ფუნქციას წარმოვადგენთ ასე $R_l(r) = \frac{\chi_l(r)}{r}$, (2.6), განტოლება ასეთი სახის იქნება:

$$\frac{d^2 \chi_l}{dr^2} + \left[k_0^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} - \frac{2\mu}{\hbar^2} U(r) \right] \chi_l = 0. \quad (3.11)$$

s -ტალღისათვის, ანუ $l = 0$ -ის გვექნება განტოლება

$$\frac{d^2 \chi_0}{dr^2} + k^2 \chi_0 = 0, \quad (3.12)$$

სადაც

$$k^2 = k_0^2 + k_1^2, \\ k_1^2 = -\frac{2\mu}{\hbar^2} U(r), \quad k_0^2 = \frac{2\mu}{\hbar^2} E.$$

(3.11) განტოლების ასიმპტოტური ამონახსნი შეიძლება ასე ჩავენროთ:

$$\chi_0 \sim \sin(k_0 r + \delta_0). \quad (3.13)$$

აქ δ_0 არის ფაზის წანაცვლება, რომელიც გვიჩვენებს რომ ტალღა გაიფანტა ორ-მოზე.

როდესაც პოტენციალს აქვს (3.5) სახე, (3.11) განტოლებას აქვს მარტივი და ზუსტი ამონახსნები:

$$\begin{aligned} \chi_0 &= C \sin k' r, & r < a, \\ \chi_0 &= \frac{B}{k_0} \sin(k_0 r + \delta_0), & r > a. \end{aligned} \quad (3.14)$$

გაფანტული ტალღა განსხვავდება გაუფანტავი ტალღისაგან ფაზის წანაცვლებით $r > a$ არეში - ეს ნაჩვენებია 12 ნახაზზე. პოტენციალი მიმზიდავია (ნაწილაკის სიჩქარე ორმოში იზრდება, ტალღის სიგრძე კი იკლებს), ამიტომ ფაზის წანაცვლება დადებითია. განმზიდავი პოტენციალისათვის გაფანტვის სურათი საწინააღმდეგოა. ორმოს საზღვარზე, როცა $r = a$, უნდა სრულდებოდეს ტალღური ფუნქციის და მისი წამოებულის უწყვეტობის პირობა:

$$C \sin k' a = \frac{B}{k_0} \sin(k_0 a + \delta_0), \quad (3.15)$$

$$\begin{aligned} C k' \cos k' a &= B \cos(k_0 a + \delta_0), \\ (r &= a). \end{aligned} \quad (3.16)$$

თუ ამ განტოლებებს ამოვხსნით δ_0 -ის მიმართ, მივიღებთ

$$\delta_0 = \arctg \left[\frac{k_0}{k'} \operatorname{tg}(k' a) \right] - k_0 a. \quad (3.17)$$

ამგვარად, ჩვენ წინაშეა საძიებელი დამოკიდებულება ორმოს პარამეტრებს, ფარდობითი მოძრაობის სიჩქარესა და ფაზის წანაცვლებას შორის. ახლა გავანალიზოთ, როგორ არის დამოკიდებული δ_0 , და, მაშასადამე, განიკვეთი ამ სიდიდეებზე მცირე ფარდობითი სიჩქარის u_0 -ის დროს. ამ მიზნით გამოვიკვლიოთ (3.17) გამოსახულების ყოფაქცევა როდესაც $k_0 \rightarrow 0^*$:

$$\lim \delta_0 = \begin{cases} n\pi, & \text{if } k_1 a \neq \frac{\pi}{2}(2n+1), \quad (a) \\ (2n+1)\frac{\pi}{2}, & \text{if } k_1 a = \frac{\pi}{2}(2n+1), \quad (b) \end{cases} \quad (3.18)$$

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

* (3.18) ფორმულის მიღებისას ჩვენ გამოვიყენეთ $\arctg x$ ფუნქციის ცნობილი თვისება:

$$\arctg x \rightarrow n\pi \quad \text{როცა } x \rightarrow 0$$

$$\arctg x \rightarrow (2n+1)\frac{\pi}{2} \quad \text{როცა } x \rightarrow \infty$$

მიღებული ფორმულიდან ჩანს, რომ როდესაც $k_0 \rightarrow 0$, იმის მიხედვით, შესაძლებელია თუ არა ბმული მდგომარეობის შექმნა ორმოში, δ_0 ფაზის სიდიდე მნიშვნელოვნად განსხვავებულია (მთელია ან ნახევრის ჯერადია π ერთეულებში). მართლაც, „მეჩხერ“ ან „ვინრო“ ორმოში, ანუ ისეთში, რომ $k_1 a \ll 1$ ელექტრონი ვერ ქმნის ბმულ მდგომარეობას, თუ ჩვენ გავზრდით ორმოს სიღრმეს, პირველი დონე $E_0 = 0$ ენერგიით გამოჩნდება მაშინ როდესაც $k_1 a = \pi/2$. ორმოს სიღრმის შემდგომი გაზრდისას E_0 დონე ქვევით დაეშვება, ხოლო როდესაც $k_1 a = 3\pi/2$ ორმოში გამოჩნდება შემდეგი დონე ენერგიით $E_1 = 0$. U_0 -ის გაზრდით ეს პროცესი გაგრძელდება, ორმო პერიოდულად შეივსება დონეებით ისე, რომ როდესაც $k_1 a = (2n+1)\frac{\pi}{2}$ ორმოში იქნება $n+1$ დონე. ორმოში დონის გამოჩენის მომენტში გაფანტვის განივკვეთი მკვეთრად იზრდება, შემდგომ დონის ქვემოთ დაწვევისას განივკვეთი მცირდება და ისევ მკვეთრად იზრდება შემდეგი დონის გამოჩენისას და ასე შემდეგ. ამრიგად, განივკვეთი მნიშვნელოვნად არის დამოკიდებული იმაზე თუ რომელი ზღვრისაკენ მიისწრაფვის δ_0 . იმ შემთხვევაში როდესაც $k_1 a \neq \pi(2n+1)/2$, განივკვეთი როგორც წესი სასრულოა და განისაზღვრება ორმოს ზომებით. თუმცა შესაძლებელია რეზონანსული ეფექტი: ფაზის მატება π -ს ჯერად სიდიდემდე ხდება, როდესაც $k_0 \neq 0$. ამ შემთხვევაში $\sigma_0 = 0$, და ეს არის სწორედ რამზაუერ-ტაუნსენდის ეფექტის ანალოგი ორმოზე გაფანტვის შემთხვევაში.

შემთხვევა (a): $k_1 a \neq (2n+1)\frac{\pi}{2}$.

როდესაც $k_0 \rightarrow 0$

$$\delta_0 \rightarrow \left(\frac{k_0}{k_1} \operatorname{tg} k_1 a - k_0 a \right) \rightarrow 0,$$

ხოლო განივკვეთი

$$\sigma_0 = \frac{4\pi}{k_0^2} \sin^2 \delta_0 = 4\pi a^2 \left(\frac{\operatorname{tg} k_1 a}{k_1 a} - 1 \right)^2 \quad (3.19)$$

არ არის დამოკიდებული სიჩქარეზე და პროპორციულია a^2 -ის. გაფანტვის სიგრძეს აღნიშნავენ L ასოთი და განსაზღვრავენ ფორმულით

$$\lim f_0 = \lim \frac{\delta_0}{k_0} = -L \quad (3.20)$$

$$k_0 \rightarrow 0.$$

ჩვენს შემთხვევაში

$$L = a \left(1 - \frac{\operatorname{tg} k_1 a}{k_1 a} \right). \quad (3.21)$$

ამრიგად

$$\sigma_0 = 4\pi L^2. \quad (3.22)$$

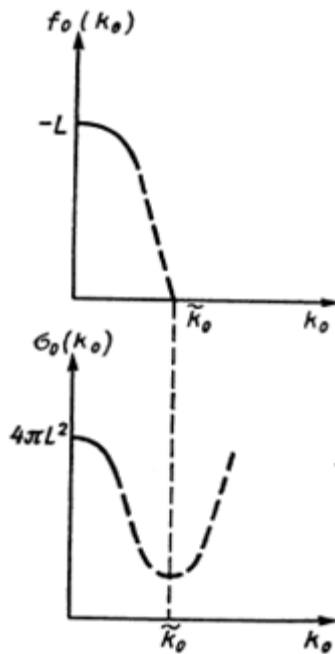
როდესაც $k_1 a \rightarrow 0$, ანუ ორმოს სიღრმის და ზომების ნულისაკენ მისწრაფებისას, L -იც მიისწრაფვის ნულისაკენ და, მაშასადამე, σ_0 -იც.

განივკვეთის სიჩქარეზე დამიკიდებულება რომ განვიხილოთ, δ_0 -ის გამლაში მცირე k_0 -ის მიხედვით დავიტოვოთ პირველი ორი წევრი. მაშინ ამპლიტუდისათვის მივიღებთ

$$f_0(k_0) = \frac{\delta_0}{k_0} = -L - \frac{1}{3k_1} \frac{k_0^2}{k_1^2} \operatorname{tg}^3 k_1 a + \dots,$$

საიდანაც ჩანს, რომ თუ გაფანტვის სიგრძე უარყოფითია, სიჩქარის გაზრდისას ამპლიტუდა მცირდება (თუ არ ვითვალისწინებთ გაშლის დანარჩენ წევრებს) და ხდება ნულის ტოლი (იხ. ნახაზი 13), როცა

$$\tilde{k}_0 = k_1 \sqrt{\frac{3k_1 |L|}{\operatorname{tg}^3 k_1 a}}.$$



ნახ. 13. პოტენციალურ ორმოზე ნელი ელექტრონის გაფანტვის ამპლიტუდის და განივკვეთის ყოფაქცევა

სრული განივკვეთი $\sigma = \sum_l \sigma_l$, რასაკვირველია, არ იქნება ნულის ტოლი, რადგან დანარჩენი პარციალური განივკვეთები შეიტანენ მცირე, მაგრამ არანულოვან წვლილს. თვისობრივად, მეტად მნიშვნელოვანია განივკვეთში მინიმუმის არსებობა არანულოვან (მაგრამ მცირე) k_0 -ზე, როდესაც გაფანტვის სიგრძე უარყოფითია, რაც შეესაბამება მიზიდვის პოტენციალს. განხილული მოვლენის არსი ის არის, რომ როცა $k = \tilde{k}_0$, ორმოში თავსდება მთლიანი ტალღის დამატებითი რიცხვი ისე, რომ ორმოს გარეთ ტალღური სურათი არ იცვლება. ეს მოვლენა არის რამზაუერ-ტაუნსენდის ეფექტის ანალოგი, რომელიც ვლინდება მიმზიდავ, მკვეთრად შემოსაზღვრულ პოტენციალზე გაფანტვისას. ატომებზე გაფანტვის გამოთვლისას ეს ეფექტი დაიმზირება იმ შემთხვევაში, თუ კი ატომის ახლოქმედ პოტენციალს ემატება შორსქმედი პოლარიზაციული პოტენციალი $\sim r^{-4}$, რომელიც იქმნება დამჯახებული ელექტრონის ველის მოქმედებით ატომზე.

შემთხვევა (b): $k_1 a \neq (2n+1) \frac{\pi}{2}$.

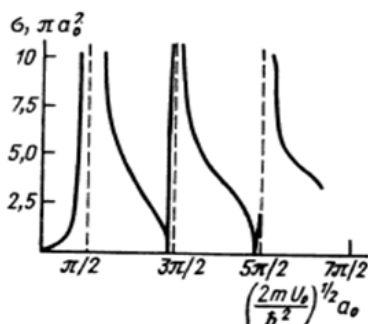
ავაგოთ განივკვეთის პოტენციალური ორმოს სიღრმეზე დამოკიდებულების გრაფიკი (3.19) ფორმულის გამოყენებით. ეს გრაფიკი მოცემულია 14 ნახაზზე. ნყვეტილი ხაზები ნახაზზე შეესაბამებიან ნულოვანი ენერჯის დონის გამორჩენას ორმოში. როგორც ვხედავთ, ამ წერტილების ახლოს განივკვეთი მკვეთრად იმატებს და მიისწრაფვის უსასრულობისკენ. ზოგად შემთხვევაში კი მცირე, მაგრამ არანულოვანი k_0 -თვის, განივკვეთი ასეთია:

$$\sigma_0 = \frac{4\pi}{k_0^2} \sin^2 \frac{\pi}{2} (2n+1) = 4\pi\lambda^2 \quad (3.23)$$

ის განისაზღვრება არა ორმოს ზომებით, არამედ – დე ბროილის ტალღის სიგრძით, რომელიც მცირე k_0 -თვის გაცილებით აღემატება ორმოს ზომებს. ასე რომ,

$$4\pi\lambda^2 \gg 4\pi L^2.$$

ამ ეფექტს ეწოდება რეზონანსული გაფანტვა.



ნახ. 14. განივკვეთის დამოკიდებულება ორმოს სიღრმეზე, როდესაც ელექტრონის სიჩქარე მცირეა

3. სწრაფი ნაწილაკების დრეკადი გაფანტვა. ბორნის მიახლოება

როგორც დავინახეთ, როცა ნაწილაკის სიჩქარე არ არის დიდი, ხოლო დე ბროილის ტალღის სიგრძე ბევრად აღემატება გამფანტავი არის ზომებს, ან იმავე რიგისაა, გაფანტვის ამპლიტუდაში წვლილი შეაქვს პარციალური ტალღების მცირე რაოდენობას, რაც მნიშვნელოვნად აადვილებს გაფანტვის ამოცანის ანალიზურ განხილვას.

სიჩქარის გაზრდასთან ერთად იზრდება იმ პარციალური ტალღების რიცხვი, რომლებიც უნდა გავითვალისწინოთ და, შესაბამისად, პარციალური ტალღების აჯამების ამოცანა ძალზე რთულდება. ინტუიციურად ცხადია, რომ იმ პარციალური ტალღების დიდი რაოდენობის შემთხვევაში, რომელთაც შეაქვთ წვლილი მოცემულ კუთხეზე გაფანტვის ამპლიტუდაში, ეს უკანასკნელი უნდა გადაიქცეს გარკვეულ ინტეგრალად, რომელიც აიღება გამფანტავი პოტენციალის მოქმედების არეში.

მოდით, მივიღოთ ინტეგრალური განტოლება, რომელიც შრედინგერის განტოლების ეკვივალენტური იქნება, და ვიპოვოთ ამ ინტეგრალური განტოლების ფორმალური ამონახსნი. შრედინგერის განტოლება ასე ჩავენეროთ:

$$\begin{aligned} (\Delta + k^2)\Psi(\vec{r}) &= V(\vec{r})\Psi(\vec{r}), \\ V(\vec{r}) &= \frac{2m}{\hbar^2}U(\vec{r}). \end{aligned} \tag{3.24}$$

აქ $U(\vec{r})$ გამფანტავი პოტენციალია, ხოლო $k = \frac{mv}{\hbar}$ – გაფანტული ნაწილაკის ტალღური ვექტორი.

განვიხილოთ დრეკადი გაფანტვა, როდესაც ნაწილაკის იმპულსის აბსოლუტური სიდიდე არ იცვლება გაფანტვის დროს. თუ გაფანტვა არ გვაქვს, ანუ თუ $U(\vec{r}) = 0$, ამონახსნია ბრტყელი ტალღა $\exp(i\vec{k}\vec{r})$, რაშიც ადვილად დავრწმუნდებით (3.24) განტოლებაში შეტანით:

$$(\Delta + k^2)e^{i\vec{k}\vec{r}} = 0. \tag{3.25}$$

(3.24) არაერთგვაროვანი განტოლების ამონახსნი ბრტყელ ტალღასთან ერთად უნდა შეიცავდეს ინტეგრალურ წევრს, რომელზეც $\Delta + k^2$ ოპერატორის მოქმედების შედეგად უნდა მივიღოთ (3.24) განტოლების მარჯვენა მხარე, ანუ $V(\vec{r})\Psi(\vec{r})$. თუ გამოვიყენებთ (3.25) განტოლებას და ლაპლასის ოპერატორის ცნობილ თვისებას

$$\Delta \frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}'|} = -4\pi\delta(\vec{r} - \vec{r}'), \tag{3.26}$$

რომელშიც $\delta(\vec{r})$ დირაკის დელტა ფუნქციაა, შეიძლება, დავრწმუნდეთ, რომ $\exp(i\vec{k}|\vec{r} - \vec{r}'|)/|\vec{r} - \vec{r}'|$ არის შემდეგი განტოლების ამონახსნი

$$\left(\Delta + k^2\right) \frac{e^{ik|\vec{r}-\vec{r}'|}}{|\vec{r}-\vec{r}'|} = -4\pi\delta(\vec{r}-\vec{r}'). \quad (3.27)$$

ახლა ადვილად შეგვიძლია მივიღოთ (3.24) განტოლების ფორმალური ამონახსნი, რომელსაც ექნება მოცემული ასიმპტოტური ყოფაქცევა გამფანტავი ცენტრიდან შორ მანძილზე:

$$\Psi(\vec{r}) = e^{ik_0\vec{r}} - \frac{1}{4\pi} \int \frac{e^{ik|\vec{r}-\vec{r}'|}}{|\vec{r}-\vec{r}'|} V(\vec{r}') \Psi(\vec{r}') d\vec{r}'. \quad (3.28)$$

აქ \vec{k}_0 დაცემული ბრტყელი ტალღის ტალღური ვექტორია, რომელიც სიდიდით k -ს ტოლია. მიღებული ამონახსნის სამართლიანობაში ადვილად დავრწმუნდებით, თუ (3.28)-ს შევიტანთ (3.24) განტოლებაში და გამოვიყენებთ (3.25)-(3.27) ფორმულებს. რეალურად (3.28) ინტეგრალური განტოლებაა ტალღური ფუნქციისათვის, რომელიც უნდა ამოიხსნას. თუმცა რიგ შემთხვევებში ეს განტოლება უფრო მოსახერხებელია ზოგადი საკითხების გამოსაკვლევად, ასევე – მიახლოებითი ამონახსნების საპოვნელად, მაგალითად, იტერაციის მეთოდით, ვიდრე – სანყისი (3.24) დიფერენციალური განტოლება.

გამფანტავი ცენტრიდან შორ მანძილზე, როდესაც $\vec{r} \rightarrow \infty$ სიდიდე $|\vec{r}-\vec{r}'|$ შეიძლება გავშალოთ r'/r ფარდობის ხარისხებად. რადიუს-ვექტორის გასწვრივ მიმართული ერთეულოვანი ვექტორის $\vec{n} = \frac{\vec{r}}{r}$ შემოტანის შემდეგ, შეგვიძლია, დავწეროთ

$$|\vec{r}-\vec{r}'| = r - \vec{n}\vec{r}'.$$

თუ ახლა (3.28) გამოსახულების მნიშვნელში უგულვებელვყოფთ r' -ს r -თან შედარებით, მივიღებთ ტალღურ ფუნქციას, რომელსაც ექნება საჭირო ასიმპტოტიკური სახე

$$\Psi(\vec{r}) \approx e^{ik_0\vec{r}} - \frac{e^{ikr}}{r} \frac{1}{4\pi} \int e^{-ik\vec{n}\vec{r}'} V(\vec{r}') \Psi(\vec{r}') d\vec{r}'. \quad (3.29)$$

მიღებული გამოსახულების შედარება (1.7) ფორმულასთან გვაძლევს გაფანტვის ამპლიტუდის საძიებელ ინტეგრალურ კავშირს ტალღურ ფუნქციასთან

$$f(\vartheta) = -\frac{1}{4\pi} \int e^{-ik\vec{n}\vec{r}'} V(\vec{r}') \Psi(\vec{r}') d\vec{r}'. \quad (3.30)$$

თუ გამფანტავი პოტენციალი საკმარისად სუსტია (პირობები იხ. ქვემოთ) და შესაძლებელია შეშფოთების თეორიის გამოყენება, მიღებული გამოსახულება ძალზე მოსახერხებელია იტერაციული მწკრივის ასაგებად. ინტეგრალური წევრი (3.29)-ში შეიძლება განვიხილოთ, როგორც შეშფოთების მოქმედების შედეგი, ანუ გამფანტავი პოტენციალის მოქმედების შედეგი შეუშფოთებელ თავისუფალ მოძრა-

ობაზე, რომელიც აღინერება სანყისი \vec{k}_0 მიმართულებით მოძრავი ბრტყელი ტალღით $e^{i\vec{k}_0\vec{r}}$. შეშფოთების თეორიის გამოყენების ფარგლებში ეს დამატებითი წევრი – გაფანტული სფერული ტალღა – მცირეა. ეს ფაქტი გვაძლევს საფუძველს, (3.29)-ის ინტეგრალქვეშა გამოსახულებაში $\Psi(\vec{r})$ ტალღური ფუნქცია შევცვალოთ ბრტყელი ტალღით $e^{i\vec{k}\vec{r}}$. ამის შედეგად მივიღებთ გაფანტვის ამპლიტუდის გამოსახულებას ე.წ. ბორნის პირველ მიახლოებაში

$$f_B(\vartheta) = -\frac{1}{4\pi} \int e^{-i(\vec{k}-\vec{k}_0)\vec{r}'} V(\vec{r}') d\vec{r}', \quad (3.31)$$

$$\vec{k} = k\vec{n}, \quad V(\vec{r}') = \frac{2m}{\hbar^2} U(\vec{r}').$$

ეს მიახლოება სამართლიანია მაშინ, როდესაც გაფანტული ტალღის ამპლიტუდა მცირეა დაცემული ბრტყელი ტალღის ამპლიტუდასთან შედარებით, გამფანტავი პოტენციალის მოქმედების არის „საზღვარზე“ კი.

ვთქვათ, გამფანტავი პოტენციალის მოქმედების არე a -ს რიგისაა. თუ დაცემული ნაწილაკის სიჩქარე იმდენად მცირეა, რომ $ka \ll 1$ და ექსპონენტა შეგვიძლია ჩავთვალოთ ერთის ტოლად (3.29)-ში, მაშინ ეს ინტეგრალი შეიძლება შევავასოთ, როგორც Va^3 (V ახასიათებს $V(\vec{r})$ პოტენციალის სიდიდეს). ამ შემთხვევაში ბორნის მიახლოების გამოყენების პირობა იქნება

$$\frac{1}{a} Va^3 \ll 1 \quad \text{ან} \quad |U| \ll \frac{\hbar^2}{ma^2}. \quad (3.32)$$

შევნიშნოთ, რომ (3.32)-ის საწინააღმდეგო პირობა უზრუნველყოფს m მასის ნაწილაკის ბმული მდგომარეობის არსებობას U პოტენციალურ ველში. ამრიგად, თუ პოტენციალს არ შეუძლია ჩაიჭიროს ნაწილაკი, მაშინ (3.32) პირობა უზრუნველყოფს ბორნის მიახლოების გამოყენების შესაძლებლობას დაცემული ნაწილაკის ნებისმიერი სიჩქარის შემთხვევაში.

დიდი სიჩქარის შემთხვევაში პოტენციალის სიდიდეზე დადებული პირობა შეიძლება შესუსტდეს. მართლაც, როდესაც $ka \gg 1$ ექსპონენტის სწრაფი ოსცილაციის გამო, ინტეგრალის სიდიდე მცირდება (3.29)-ში, და ის შეიძლება შეფასდეს, როგორც სიდიდე $\frac{1}{ka} Va^2$. მაშინ (3.32)-ის მაგივრად დიდი სიჩქარის შემთხვევაში ($ka \gg 1$) მივიღებთ უფრო შესუსტებულ პირობას:

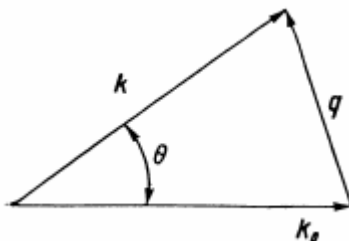
$$|U| \ll \frac{\hbar^2}{ma^2} ka \sim \frac{\hbar v}{a}, \quad (3.33)$$

სადაც $v = \frac{\hbar k}{m}$ ნაწილაკის სიჩქარეა.

აღვნიშნოთ ბორნის მიახლოების ორი დამახასიათებელი თავისებურება, რომლებიც მნიშვნელოვნად აადვილებენ ამპლიტუდისა და განივკვეთის დამოკიდებუ-

ლების თვისობრივ ანალიზს გაფანტვის კუთხეზე, ნაწილაკის სიჩქარესა და გამფანტავ პოტენციალზე.

ა) ნაწილაკის გაფანტვის კუთხე და სიჩქარე შედიან ამპლიტუდაში ექსპონენტის მაჩვენებელში $|\vec{k} - \vec{k}_0| = 2k \sin \vartheta / 2 = 2 \frac{mv}{\hbar} \sin \vartheta / 2$ სახით (იხ. ნახაზი 15).



ნახ. 15. იმპულსის ცვლილება დრეკადი დაჯახებისას

სიდიდე $\hbar \vec{q} = \hbar \vec{k} - \hbar \vec{k}_0$ არის გაფანტვის შედეგად ნაწილაკის მიერ მიღებული იმპულსი, შესაბამისად, $-\hbar \vec{q}$ იმპულსს იღებს სამიზნე (ატომი). ამრიგად, ამპლიტუდა დამოკიდებულია გაფანტვის კუთხესა და სიჩქარეზე $v \sin \frac{\vartheta}{2}$ ნამრავლის სახით. სრული განიკვეთის გამოთვლისას კუთხეებით ინტეგრირება შეიძლება შეიცვალოს ინტეგრირებით გადაცემული იმპულსის მიხედვით, რადგან $d\Omega = 2\pi \sin \vartheta d\vartheta = 2\pi q dq / k^2$. მინიმალური გადაცემული იმპულსი $\hbar q = 0$ შეესაბამება წინ გაფანტვას $\vartheta = 0$ კუთხეზე, მაქსიმალური $\hbar q = 2\hbar k$ - უკან გაფანტვას $\vartheta = \pi$ კუთხეზე. დრეკადი გაფანტვის სრული განიკვეთისათვის, ამრიგად, ვიღებთ

$$\sigma = \int |f_B(\vartheta)|^2 d\Omega = \frac{2\pi}{k^2} \int_0^{2k} |f_B(q)|^2 q dq. \quad (3.34)$$

ბ) ბორნის მიახლოებაში გაფანტვის ამპლიტუდის მეორე მნიშვნელოვანი თვისებაა ადიტიურობა პოტენციალის მიმართ: რამდენიმე პოტენციალზე გაფანტვის შემთხვევაში ამპლიტუდა ცალკეულ პოტენციალზე გაფანტვის ამპლიტუდების ჯამია. გაფანტვის ზუსტ ამპლიტუდას არ გააჩნია ეს თვისება. ამპლიტუდის ადიტიურობის თვისების გამოყენება მოსახერხებელია, მაგალითად, პოტენციალის წარმოდგენისას მულტიპოლების პოტენციალების ჯამის სახით. უნდა აღვნიშნოთ, რომ გაფანტვის განიკვეთს არ გააჩნია აღნიშნული თვისება; ამპლიტუდის კვადრეტი (3.34) ფორმულაში აუცილებლად შეიცავს ინტერფერენციულ წევრებს – თითოეულ პოტენციალზე გაფანტვის ამპლიტუდების ნამრავლს.

მნიშვნელოვანია წერტილოვანი მუხტის, მაგალითად, ელექტრონის, გაფანტვა სივრცეში განაწილებულ მუხტების სისტემაზე – ატომზე ან მოლეკულაზე. ამ შემთხვევაში (განსაზღვრულობისათვის ავიღოთ ელექტრონი) ურთიერთქმედების პოტენციალი შეიძლება ასე წარმოვიდგინოთ:

$$U(\vec{r}) = -e \int \frac{\rho(\vec{r}') d\vec{r}'}{|\vec{r} - \vec{r}'|}, \quad (3.35)$$

სადაც $\rho(\vec{r}')$ – მუხტების განაწილების სიმკვრივეა გამფანტავ სისტემაში. შეიძლება, ვაჩვენოთ, რომ სამართლიანია შემდეგი ფორმულა

$$\int \frac{e^{-i\vec{q}\vec{r}'} d\vec{r}'}{|\vec{r} - \vec{r}'|} = \frac{4\pi}{q^2} e^{-i\vec{q}\vec{r}}. \quad (3.36)$$

(3.36) ფორმულის გამოყენებით ელექტრონის გაფანტვის ამპლიტუდისათვის მივიღებთ

$$f_B(q) = \frac{2\mu e}{\hbar^2 q^2} \int e^{-i\vec{q}\vec{r}} \rho(\vec{r}) d\vec{r} = \frac{2\mu e}{\hbar^2 q^2} \mathbb{F}(q). \quad (3.37)$$

(3.37) ფორმულაში $\mathbb{F}_B(q)$ სიდიდეს ეწოდება ფორმფაქტორი, ის ითვალისწინებს გამფანტავი მუხტების სივრცულ განაწილებას.

ნერტილოვანი მუხტის $\pm e\delta(\vec{r})$ ფორმფაქტორი ტოლია $\pm e$ -ს. ამ შემთხვევაში ნერტილოვან დადებით მუხტზე ელექტრონის გაფანტვის ამპლიტუდა იქნება

$$f_B(q) = -\frac{2}{q^2} \frac{\mu e^2}{\hbar^2} = -\frac{2}{q^2 a_0}, \quad (3.38)$$

სადაც a_0 – არის ბორის რადიუსი. დიფერენციალური განიკვეთისათვის კი მივიღებთ რეზერფორდის ცნობილ ფორმულას

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f_B(\vartheta)|^2 = \left(\frac{e^2}{4E} \right)^2 \frac{1}{\sin^4 \vartheta / 2}, \quad (3.39)$$

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu}.$$

ფორმფაქტორით გაფანტვის ამპლიტუდის გამოსახვა საშუალებას გვაძლევს, როდესაც ეს შესაძლებელია, გამოვიყენოთ $\rho(\vec{r})$ -ს სიმეტრიის თვისება; მაგალითად, როდესაც მუხტების განაწილება სივრცეში ხასითდება სფერული სიმეტრიით $\rho(r)$, (3.37)-ში შეიძლება ჩატარდეს კუთხეებით ინტეგრირება, რის შედეგად მივიღებთ

$$\mathbb{F}_B(q) = \int d\Omega \int e^{-iqr \cos(\vec{q}\vec{r})} \rho(r) r^2 dr = -4\pi \int \frac{\sin qr}{qr} \rho(r) r^2 dr. \quad (3.40)$$

ზოგად შემთხვევაში ფორმფაქტორის გამოთვლის ამოცანა ძალზე რთულია.

4. სწრაფი ელექტრონების დრეკადი გაფანტვა ატომებზე

ზემოთ მიღებულ ზოგად ფორმულებში სწრაფი ნაწილაკის მუხტების სისტემაზე გაფანტვის ამპლიტუდის განსაზღვრის ამოცანა დავიყვანეთ ამ სისტემის ფორმფაქტორის გამოთვლის ამოცანამდე, რომელიც განისაზღვრა (3.37) ფორმულით. ამ პარაგრაფში შევაფასებთ ატომური ფორმფაქტორის ყოფაქცევას მცირე და დიდ კუთხეებზე და გავანალიზებთ ელექტრონების ატომებზე დრეკადი გაფანტვის განიკვეთის ყოფაქცევას ელექტრონის ენერგიის და გაფანტვის კუთხის ცვლილებისას.

მუხტის განაწილების სიმკვრივე ატომში წარმოვიდგინოთ შემდეგი სახით:

$$\rho(\vec{r}) = Ze\delta(\vec{r}) - en(\vec{r}) . \quad (3.41)$$

აქ პირველი წევრი ატომის ბირთვისა; Z ბირთვის მუხტია; $\delta(\vec{r})$ დელტა ფუნქციაა; $n(\vec{r})$ ელექტრონების სიმკვრივეა, რომელიც ნეიტრალურ ატომის შემთხვევაში ნორმირებულია პირობით

$$\int n(\vec{r})d\vec{r} = Z . \quad (3.42)$$

ბორნის გაფანტვის ამპლიტუდისათვის (3.37) ფორმულიდან პირდაპირ მივიღებთ

$$f_B(q) = \frac{2}{a_0q^2} [Z - \mathbb{F}_e(q)] , \quad (3.43)$$

$$q = 2k \sin \frac{\vartheta}{2} ,$$

სადაც სიდიდე

$$\mathbb{F}_e(q) = \int e^{-i\vec{q}\vec{r}} n(\vec{r})d\vec{r} \quad (3.44)$$

არის ელექტრონული ფორმფაქტორი.

ელექტრონის ატომზე გაფანტვის განიკვეთის ყოფაქცევის შეფასების გასამარტივებლად ჩავთვალოთ, რომ ელექტრონების სიმკვრივე ატომში ხასიათდება სფერული სიმეტრიით. მაშინ ელექტრონული ფორმფაქტორი ასე ჩაინერება

$$\mathbb{F}_e(q) = 4\pi \int \frac{\sin qr}{qr} n(r)r^2 dr . \quad (3.45)$$

მოდით, ჯერ შევაფასოთ ფორმფაქტორის სიდიდე მცირე გაფანტვის კუთხეების შემთხვევაში. მცირე გადაცემული იმპულსის შემთხვევაში, როდესაც $qa \ll 1$, (3.45) ფორმულაში ფორმფაქტორი შეიძლება გაიშალოს ამ მცირე სიდიდის მიხედვით. შედეგად მივიღებთ

$$\mathbb{F}_e(q) \approx \int \left(1 - \frac{(qr)^2}{3!} + \frac{(qr)^4}{5!} - \dots \right) n(r)r^2 dr , \quad (3.46)$$

ან ელექტრონების სიმკვრივის ნორმირების (3.42) ფორმულის გათვალისწინებით, შეიძლება დაწეროთ

$$Z - \mathbb{F}_e(q) = \frac{q^2 \langle r^2 \rangle}{6} \left(1 - \frac{q^2 \langle r^4 \rangle}{20 \langle r^2 \rangle} \right), \quad (3.47)$$

სადაც

$$\langle r^k \rangle = \int r^k n(r) r^2 dr. \quad (3.48)$$

მიღებული (3.47) ფორმულის ჩასმით (3.43)-ში, ვიღებთ გაფანტვის განივკვეთის გამოსახულებას მცირე კუთხეების შემთხვევაში

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} \Big|_{q \ll 1/a} = |f_B(q)|^2 = \left[\frac{\langle r^2 \rangle}{3a_0} \left(1 - \frac{q^2 \langle r^4 \rangle}{20 \langle r^2 \rangle} \right) \right]^2. \quad (3.48)$$

როგორც (3.48) ფორმულიდან ჩანს, მცირე კუთხეების შემთხვევაში (რაც შეესაბამება კლასიკურ გაფანტვას დიდი სამიზნე მანძილებით) ატომის ბირთვი სრულად ეკრანირდება ატომის ელექტრონული გარსით და გაფანტვის განივკვეთი განისაზღვრება ატომის მოცულობაზე გასაშუალოებული სიდიდეებით $\langle r^k \rangle$.

გაფანტვის დიდ კუთხეებზე (დიდ გადაცემულ იმპულსებზე) ელექტრონული ფორმფაქტორი მცირდება ბირთვის მუხტთან შედარებით და ამიტომ შესაძლებელია მისი უგულებლყოფა. ამ შემთხვევაში განივკვეთი გახდება ატომის ბირთვზე გაფანტვის რეზერვორდის განივკვეთის ტოლი:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f_B(q)|^2 = \frac{4Z^2}{a_0^2 q^4} = \left(\frac{Ze^2 \mu}{2\hbar^2 k^2} \right)^2 \frac{1}{\sin^4 \frac{\vartheta}{2}}. \quad (3.49)$$

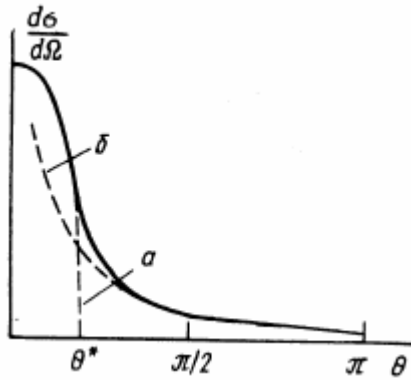
ამრიგად, გაფანტვის დიდ კუთხეებზე ელექტრონული გარსი არ უკეთებს ეკრანირებას ატომის ბირთვის და არ შეაქვს წვლილი გაფანტვის განივკვეთში.

გაფანტვის რეზერვორდის განივკვეთი $\vartheta = 1$ კუთხეებზე მცირეა წინ გაფანტვის განივკვეთთან შედარებით:

$$\frac{d\sigma_{Ruth} / d\Omega}{(d\sigma / d\Omega)_{q \ll 1/k}} \sim \frac{1}{(ka_0)^2} \ll 1. \quad (3.50)$$

როდესაც $qa_0 \approx 1$ ეს განივკვეთები ერთი და იმავე რიგის სიდიდეებია. გაფანტვის განივკვეთის თვისობრივი დამოკიდებულება გაფანტვის კუთხეზე ნაჩვენებია 16 ნახაზზე. გავიხსენოთ, რომ ბორნის მიახლოებაში განივკვეთის დამოკიდებულება ელექტრონის გაფანტვის კუთხესა და სიჩქარეზე ვლინდება მხოლოდ გადაცემული

იმპულსის სახით $q = 2k \sin \vartheta / 2 = 2 \frac{\mu v}{\hbar} \sin \vartheta / 2$.



ნახ. 16. ელექტრონის ატომზე დრეკადი გაფანტვის დიფერენციალური განიკვეთის დამოკიდებულება გაფანტვის კუთხეზე ϑ : ა) ფორმულა (3.48), ბ) რეზერფორდის განიკვეთი (3.49).

როგორც ნახაზიდან ჩანს, უკვე მცირე კუთხეებზე $\vartheta \sim \frac{1}{ka_0} \ll 1$ ($qa_0 = 1$) პარაბოლური დამოკიდებულება (რომელიც განისაზღვრება (3.48) ფორმულით) იცვლება რეზერფორდის დამოკიდებულებით. ამრიგად, სწრაფი ელექტრონები ($ka \gg 1$), ძირითადად, წინ გაიფანტებიან, ანუ გაიფანტებიან ვიწრო კონუსში, რომლის გაშლის კუთხე $1/ka$ -ს რიგისაა. ელექტრონის სიჩქარის გაზრდით კონუსი ვიწროვდება. გაფანტვის განიკვეთში ძირითადი წვლილი შეაქვს მცირე კუთხეების არეს, რომლის ზედა ზღვარი ϑ^* შეიძლება შეფასდეს (3.48) ფორმულის ნულამდე ექსტრაპოლაციით, საიდანაც ვიღებთ

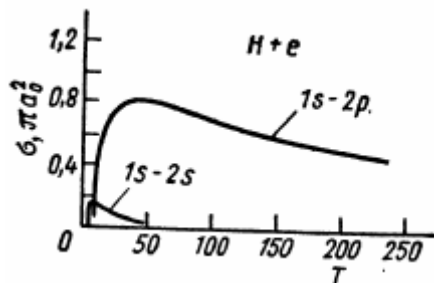
$$\vartheta^* = \frac{1}{k} \sqrt{\frac{20 \langle r^2 \rangle}{\langle r^4 \rangle}} \ll 1. \quad (3.51)$$

5. ელექტრონების არადრეკადი გაფანტვა ატომებზე. ამოცანის ზოგადი დასმა. ბორნის მიახლოება

ელექტრონების ატომებზე არადრეკადი გაფანტვის სრული განიკვეთის მახასიათებელი დამოკიდებულება, რომელიც ზოგადია ყველა ზღურბლური პროცესისათვის, იმით გამოიხატება, რომ ზღურბლურ ენერგიაზე ნაკლებ ელექტრონის ენერგიებზე განიკვეთი ნულის ტოლია, შემდეგ იზრდება, გადის მაქსიმუმზე და მაღალ ენერგიებზე მცირდება. მაღალ ენერგიებზე განიკვეთის შემცირება გამოწვეულია დაცემული ელექტრონის სამიზნის ელექტრონებთან ურთიერთქმედების დროის შემცირებით. ატომის ელექტრონული მდგომარეობების აგზნების მაქსიმუ-

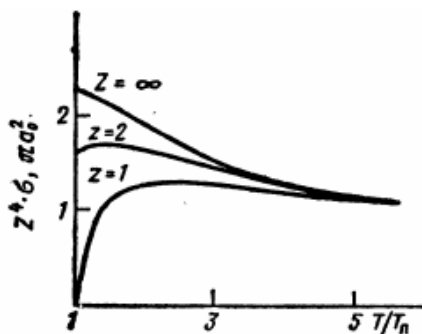
მი დაიმზირება დამჯახებელი ელექტრონების ისეთ სიჩქარეებზე, რომლებიც სიდიდით ატომის ბმული ელექტრონების სიჩქარეების რიგისაა.

ნახაზზე 17 ნაჩვენებია ექსპერიმენტზე გაზომილი წყალბადის ატომის $2p$ -მდგომარეობებში (ოპტიკურად ნებადართული გადასვლა $1s-2p$) და $2s$ -მდგომარეობებში (ოპტიკურად აკრძალული გადასვლა $1s-2s$) აგზნების განივკვეთები. აღვნიშნოთ ნებადართული გადასვლის უფრო ნელი ზრდა ზღურბლურ არეში, გაცილებით დიდი სიდიდე მაქსიმუმში და აგზნების ზღურბლიდან მაქსიმუმის უფრო შორი მდებარეობა.



ნახ. 17. ელექტრონული დარტყმით წყალბადის ატომის აგზნების განივკვეთები. T -ელექტრონის კინეტიკური ენერგიაა ელექტრონ-ვოლტებში, ხოლო σ გაზნების განივკვეთია.

ელექტრონების იონებთან არადრეკადი დაჯახებები განსხვავდება განივკვეთის სასრული სიდიდით ზღურბლურ ენერგიაზე, რაც გამოწვეულია იონის ველის მიერ ელექტრონების დამატებითი აჩქარებით. ნახაზზე 18 ნაჩვენებია $2p$ -მდგომარეობაში წყალბადისმაგვარი იონის (მისი ბირთვის მუხტი Z -ია) აგზნების განივკვეთები. იმავე ნახაზზე მოტანილია წყალბადის ატომის ($Z=1$) აგზნების განივკვეთი, რომელიც ზღურბლურ ენერგიაზე ნულს უდრის.



ნახ. 18. წყალბადისმაგვარი იონების $2p$ -მდგომარეობის აგზნების განივკვეთები. T/T_n კინეტიკური ენერგიის ზღურბლურ ენერგიასთან ფარდობაა.

დაჯახების შემდეგ ნაწილაკები შეიძლება აღმოჩნდნენ სხვადასხვა მდგომარეობაში, ან, როგორც ამბობენ, დაჯახება განხორციელდეს სხვადასხვა არხით. ეს არხები (დრეკადი არხის ჩათვლით) ერთმანეთს უკავშირდება, რაც ძალზე ართულებს ამოცანას ნაწილაკის ძალთა ცენტრზე დრეკადი გაფანტვის ამოცანასთან შედარებით.

შრედინგერის განტოლებას, რომელიც აღწერს ელექტრონის ატომზე გაფანტვას, ასეთი სახე აქვს:

$$\left[\hat{H}_a + \hat{H}_e + \hat{U}_{ea} - E \right] \Psi(\vec{r}_e, \vec{r}_a) = 0. \quad (3.52)$$

აქ \hat{H}_a - ატომის ჰამილტონიანია

$$\hat{H}_a = \sum_{i=1}^Z \left(-\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta_i - \frac{Ze^2}{r_i} \right) + \sum_{i < j} \frac{e^2}{r_{ij}}, \quad (3.53)$$

$\hat{H}_e = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta_e$ თავისუფალი ელექტრონის ჰამილტონიანია, \hat{U}_{ea} ელექტრონის ატომთან ურთიერთქმედების პოტენციალია (კოორდინატთა სისტემა დაკავშირებულია სამიზნის ბირთვთან):

$$\hat{U}_{ea} = U(\vec{r}_e, \vec{r}_a) = -\frac{Ze^2}{r_e} + \sum_{i=1}^Z \frac{e^2}{r_{ei}}, \quad (3.54)$$

\vec{r}_e გაფანტული ელექტრონის რადიუს-ვექტორია, \vec{r}_a ატომის Z ელექტრონის ერთობლივი კოორდინატია, \vec{r}_i და \vec{r}_j - მათი რადიუს-ვექტორებია.

სისტემის ტალღური ფუნქცია შეიძლება გაიშალოს შეუშფოთებელი ატომის $u_n(\vec{r}_a)$ და გაფანტული ელექტრონის $F_n(\vec{r}_e)$ ტალღური ფუნქციების სრულ ბაზისში

$$\Psi(\vec{r}_e, \vec{r}_a) = \left(\sum_n + \int \right) u_n(\vec{r}_a) F_n(\vec{r}_e). \quad (3.55)$$

ფუნქცია $u_n(\vec{r}_a)$ აკმაყოფილებს შეუშფოთებელი ატომის შრედინგერის განტოლებას

$$\hat{H}_a u_n(\vec{r}_a) = E_n u_n(\vec{r}_a), \quad (3.56)$$

სადაც E_n ატომის ენერგიაა.

ჩავესვათ (3.55)-ი (3.52)-ში, გავამრავლოთ $u_n^*(\vec{r}_a)$ -ზე და ვაინტეგრიროთ ატომის ელექტრონების კოორდინატებით; (3.56) ფორმულის გათვალისწინებით, მივიღებთ ბმულ განტოლებათა უსასრულო სისტემას, რომელიც ეკვივალენტურია საწყისი განტოლების

$$\left[\Delta_e + k_n^2 \right] F_n(\vec{r}_e) = \frac{2\mu}{\hbar^2} \int u_n^*(\vec{r}_a) U(\vec{r}_e, \vec{r}_a) \Psi(\vec{r}_e, \vec{r}_a), \quad (3.56)$$

$$k_n^2 = \frac{2\mu}{\hbar^2} (E - E_n).$$

უნდა აღვნიშნოთ, რომ მარჯვენა მხარეს ინტეგრალში ფიგურირებს ზუსტი ტალღური ფუნქცია $\Psi(\vec{r}_e, \vec{r}_a)$. (3.55) გაშლის გამოყენებით (3.56) სისტემა შეიძლება მივიყვანოთ ამ სახემდე:

$$\left(\Delta_e + k_n^2 + V_{nm}\right)F_n(\vec{r}_e) = \left(\sum_{m \neq n} + \int\right) V_{nm}(\vec{r}_e)F_m(\vec{r}_e), \quad (3.57)$$

$$V_{nm}(\vec{r}_e) = \frac{2\mu}{\hbar^2} \int u_n^*(\vec{r}_a)U(\vec{r}_e, \vec{r}_a)u_m(\vec{r}_a)d\vec{r}_a. \quad (3.58)$$

მიღებულ განტოლებათა სისტემა ეგრეთ წოდებული გაფანტვის მრავალარხიანი ამოცანაა, რომელშიც ნათლად ვლინდება გაფანტვის ყველა არხის კავშირი და რომელიც ხორციელდება ურთიერთქმედების პოტენციალის V_{nm} მატრიცული ელემენტების მეშვეობით. განტოლებათა ეს სისტემა ეკვივალენტურია შრედიנגერის საწყისი განტოლების და უმარტივეს – ელექტრონის ნყალბადის ატომზე გაფანტვის შემთხვევაშიც კი ზუსტად არ იხსნება.

ამ უსასრულო განტოლებათა სისტემის ამოხსნის სხვადასხვა მიახლოებითი მეთოდები, ჩვეულებრივ, დაფუძნებულია ამა თუ იმ მატრიცული ელემენტების V_{nm} უგულვებლყოფაზე, რათა შემცირდეს ბმულ განტოლებათა რიცხვი და (ან) განტოლებანი განცალკევდეს.

თუ უგულვებლყოფთ ყველა არადიაგონალურ მატრიცულ ელემენტს, ანუ დაუშვებთ, რომ ყველა $V_{n \neq m} = 0$, მიღებული განტოლებათა სისტემა აღწერს $V_{nn}(\vec{r}_e)$ ძალთა ცენტრის მიერ ნაწილაკის დრეკად გაფანტვას. ამრიგად, სწორედ არადიაგონალური მატრიცული ელემენტების გათვალისწინება უზრუნველყოფს გადასვლებს სამიზნეში ანუ – არადრეკად გაფანტვებს.

არსებული მრავალი მდგომარეობიდან გამოვყოთ ორი მათგანი: 1 და 2, და შესაბამისად დავიტოვოთ მხოლოდ ორი არადიაგონალური მატრიცული ელემენტი V_{12} და V_{21} . ამ შემთხვევაში დარჩენილი ორი ბმული განტოლებისაგან შემდგარ სისტემას შეუძლია, აღწეროს ოთხი პროცესი: დრეკადი გაფანტვა სამიზნეზე 1 და 2 მდგომარეობებში და ე. წ. პირდაპირი გადასვლები $1 \rightarrow 2$ და $2 \rightarrow 1$. გადასვლები შუალედური მდგომარეობის გავლით $1 \rightarrow m \rightarrow 2$, რომლებიც ითხოვენ V_{1m} და V_{2m} მატრიცული ელემენტების გათვალისწინებას, ასეთი მიდგომის დროს იგნორირებულია. ამ ორარხიან ამოცანაშიც კი ჩანს კავშირი არხებს შორის, რომელიც განპირობებულია როგორც დიაგონალური, ისე არადიაგონალური მატრიცული ელემენტების არსებობით ორივე განტოლებაში.

თვისობრივი ანალიზის ჩასატარებლად მრავალარხიანი ამოცანა რთული გამოსაყენებელია და, ჩვეულებრივ, გამოიყენება რიცხობრივი გამოთვლებისათვის.

უფრო მარტივია მიდგომა, რომელიც ეფუძნება გაფანტვის ამპლიტუდის ინტეგრალურ წარმოდგენას. როგორც (3.54) ფორმულიდან ჩანს, $U_{ea} \rightarrow 0$ როცა $r_e \rightarrow \infty$, ასე რომ, ატომისაგან ძალზე შორ მანძილზე (3.56) სისტემის თითოეული განტოლება აღწერს თავისუფალ ელექტრონს. სასრული r_e -ის შემთხვევაში ეს გან-

ტოლებები ფორმალურად (3.24) განტოლების ანალოგიურია, რაც აღწერს ძალთა ცენტრის მიერ ელექტრონის დრეკად გაფანტვას:

$$\left(\Delta_e + k_n^2\right) F_n(\vec{r}_e) = \Phi_n(\vec{r}_e). \quad (3.59)$$

აქ $\Phi_n(\vec{r}_e)$ აღნიშნავს (3.56) განტოლების მარჯვენა მხარეს.

ახლა შეგვიძლია გამოვიყენოთ (3.28) თანაფარდობა (3.59) განტოლების იმ ფორმალური ამონახსნის მისაღებად, რომელიც გამოირჩევა სათანადო ასიმპტოტიკური ყოფაქცევით, როცა $r_e \rightarrow \infty$:

$$F_n(\vec{r}_e \rightarrow \infty) \approx f_n(\vartheta) \frac{e^{ik_n r_e}}{r_e}. \quad (3.60)$$

ჩავთვალოთ, რომ $\Phi_n(\vec{r}_e)$ ცნობილია, მაშინ (3.59) განტოლების ამონახსნისათვის (3.28) ფორმულის დახმარებით მივიღებთ:

$$F_n(\vec{r}_e) = -\frac{1}{4\pi} \int \frac{e^{ik_n |\vec{r}_e - \vec{r}'|}}{|\vec{r}_e - \vec{r}'|} \Phi_n(\vec{r}'_e) d\vec{r}'_e. \quad (3.61)$$

როცა $r_e \gg r'_e$, შეგვიძლია, დავწეროთ, რომ

$$|\vec{r}_e - \vec{r}'_e| \approx r_e - \vec{n} \vec{r}'_e, \quad \vec{n} = \frac{\vec{r}_e}{r_e},$$

ახლა თუ მრიცხველში უგულებელვყოფთ r'_e , ვიპოვით (3.61) „ამონახსნის“ ასიმპტოტიკურ ყოფაქცევას:

$$F_n(\vec{r}_e) = -\frac{e^{ik_n r_e}}{r_e} \frac{\mu}{2\pi \hbar^2} \int e^{-ik_n \vec{n} \vec{r}'_e} u_n^*(\vec{r}'_a) U(\vec{r}'_e, \vec{r}'_a) \Psi(\vec{r}'_e, \vec{r}'_a) d\vec{r}'_e d\vec{r}'_a. \quad (3.62)$$

ამ გამოსახულების შედარება (3.60) ასიმპტოტიკურ გამოსახულებასთან საშუალებას გვაძლევს, ვიპოვოთ საძიებელი ინტეგრალური თანაფარდობა არადრეკადი გაფანტვის ამპლიტუდასა და ზუსტ ტალღურ ფუნქციას შორის:

$$f_n(\vartheta) = -\frac{\mu}{2\pi \hbar^2} \int e^{-ik_n \vec{n} \vec{r}'_e} u_n^*(\vec{r}'_a) U(\vec{r}'_e, \vec{r}'_a) \Psi(\vec{r}'_e, \vec{r}'_a) d\vec{r}'_e d\vec{r}'_a. \quad (3.63)$$

მიღებული თანაფარდობა (3.63) ზუსტია: ამპლიტუდების სრული კრებული ეკვივალენტურია შრედინგერის სანყისი განტოლებისა, რომელსაც აკმაყოფილებს $\Psi(\vec{r}_e, \vec{r}'_a)$ ფუნქცია. იმავედროულად, (3.63) მოსახერხებელია მიახლოებითი ამოხსნების იტერაციული მეთოდით ასაგებად. (3.63)-ში ზუსტი $\Psi(\vec{r}_e, \vec{r}'_a)$ ფუნქციის მაგივრად, სხვადასხვა მიახლოებითი საცდელი ფუნქციების გამოყენებით, შესაძლებელია, მივიღოთ მიახლოებითი ამონახსნები ენერჯის ამა თუ იმ არეში.

ბორნის მიახლოებაში საცდელ ფუნქციად შეირჩევა ისეთი მდგომარეობის ტალღური ფუნქცია, როდესაც დამჯახებელი ნაწილაკი არ ურთიერთქმედებს სა-მიზნესთან. ამ მდგომარეობაში ატომი აღინერება $u_0(\vec{r}'_a)$ ფუნქციით, დამჯახებელი

ელექტრონი – ბრტყელი ტალღით $\exp(i\vec{k}_0\vec{r}_e)$, ხოლო მთლიანი სისტემა – ამ ფუნქციების ნამრავლი:

$$u_0(\vec{r}_a) \exp(i\vec{k}_0\vec{r}_e).$$

$\Psi(\vec{r}_e, \vec{r}_a)$ ფუნქციის მაგივრად ამ ფუნქციის ჩასმით (3.63)-ის მარჯვენა მხარეს მივიღებთ ამპლიტუდების კრებულს, რომლებიც აღწერს $F_n(\vec{r}_e)$ ფუნქციების ასიმპტოტურ ყოფაქცევას; აქ თითოეულ $F_n(\vec{r}_e)$ ფუნქციას შეესაბამება ატომის მდგომარეობა, რომელიც აღინერება $u_n(\vec{r}_a)$ ფუნქციით. ამრიგად, $f_n(\vartheta)$ არის არადრეკადი გაფანტვის ამპლიტუდა, როდესაც სამიზნეში ხდება პირდაპირი გადასვლა $0 \rightarrow n$. ბორნის მიახლოებაში ეს ამპლიტუდა ასე ჩაინერება:

$$f_n^B(q) = -\frac{\mu}{2\pi\hbar^2} \int e^{-i\vec{q}_n\vec{r}_e} u_n^*(\vec{r}_a) U(\vec{r}_e, \vec{r}_a) u_0(\vec{r}_a) d\vec{r}_e d\vec{r}_a, \quad (3.64)$$

სადაც $\hbar\vec{q}_n = \hbar\vec{k}_n - \hbar\vec{k}_0$ ელექტრონის მიერ ატომისთვის გადაცემული იმპულსია. ეს გამოსახულება გახდება სრულიად ანალოგიური (3.31) გამოსახულებისა, რომელიც აღწერს ელექტრონის გაფანტვას ძალთა ცენტრზე, თუკი შემოვიტანთ ეფექტურ პოტენციალს, რომელსაც განვსაზღვრავთ ფორმულით

$$U_{n0}^{eff}(\vec{r}_e) = \int u_n^*(\vec{r}_a) U(\vec{r}_e, \vec{r}_a) u_0(\vec{r}_a) d\vec{r}_a. \quad (3.65)$$

შემოვიტანოთ სიდიდეც, რომელსაც ექნება სამიზნის ელექტრონების სიმკვრივის მნიშვნელობა

$$n_{n0}(\vec{r}) = Z \int u_n^*(\vec{r}, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_z) u_0(\vec{r}, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_z) d\vec{r}_2 \dots d\vec{r}_z. \quad (3.65)$$

აქ ინტეგრირება ხდება ყველა ელექტრონის კოორდინატით, გარდა ერთისა.

თუ ახლა (3.54) პოტენციალს ჩავსვამთ (3.65) გამოსახულებაში და გავითვალისწინებთ, რომ (3.54) პოტენციალის პირველი წევრი ქრება u_n და u_0 ფუნქციების ორთოგონალობის გამო, მივიღებთ, რომ (3.54) პოტენციალის დანარჩენი წევრები გვაძლევს გამოსახულებას, რომელიც ანალოგიურია (3.35) გამოსახულებისა, თუ კი მუხტის სიმკვრივე იქნება $\rho_{n0}(\vec{r}) = -en_{n0}(\vec{r})$:

$$U_{n0}^{eff}(\vec{r}_e) = -e \int \frac{\rho_{n0}(\vec{r})}{|\vec{r}_e - \vec{r}|} d\vec{r}. \quad (3.66)$$

ამრიგად, არადრეკადი გაფანტვის დიფერენციალური განივკვეთისათვის, როდესაც სამიზნე (ატომი) განიცდის გადასვლას $0 \rightarrow n$, მივიღებთ:

$$\frac{d\sigma_{n0}}{d\Omega} = \frac{k_n}{k_0} \frac{4}{a_0^2} \frac{|\mathbb{F}_{n0}(q)|^2}{q_n^4}, \quad (3.67)$$

სადაც ფორმფაქტორი $\mathbb{F}_{n0}(q)$ მოცემულია ასე:

$$\mathbb{F}_{n0}(q) = \int e^{-i\vec{q}_n\vec{r}} \rho_{n0}(\vec{r}) d\vec{r}. \quad (3.68)$$

არადრეკადი გაფანტვის სრული განივკვეთის პოვნისას უმჯობესია, კუთხეებით ინტეგრირებიდან გადავიდეთ იმპულსით ინტეგრირებაზე. გადაცემული იმპულსი \vec{q}_n და გაფანტვის კუთხე ϑ დაკავშირებულნი არიან თანაფარდობით

$$q_n^2 = k_0^2 + k_n^2 - 2\vec{k}_n\vec{k}_0, \quad (3.69)$$

ამიტომ მივიღებთ:

$$q_n dq_n = k_0 k_n \sin \vartheta d\vartheta \quad (3.70)$$

და

$$d\Omega = 2\pi \sin \vartheta d\vartheta = \frac{2\pi q_n dq_n}{k_0 k_n}. \quad (3.71)$$

გარდა ამისა, ელექტრონის სანყისი და საბოლოო იმპულსები უკავშირდება ენერგიის შენახვის კანონს

$$E_0 + \frac{\hbar^2 k_0^2}{2\mu} = E_n + \frac{\hbar^2 k_n^2}{2\mu}. \quad (3.72)$$

აქ მიჩნეულია, რომ ელექტრონის გაფანტვის შედეგად მძიმე ნაწილაკის (ატომის) მიერ მიღებული კინეტიკური ენერგია მცირეა, რომელიც შეიძლება უგულებელვყოთ.

თავი IV. ნელი ატომური ნაწილაკების დაჯახება

ატომების ატომებსა და ატომების იონებთან დაჯახებებს, ჩვეულებრივ, მძიმე ნაწილაკების დაჯახებებს უწოდებენ. ეს თავი, ძირითადად, დაეთმობა მძიმე ნაწილაკების არადრეკად დაჯახებებს. მძიმე ნაწილაკების არადრეკადი დაჯახებები მოიცავს უამრავ მრავალფეროვან პროცესს (რეაქციას), რომლებიც არ მიმდინარეობს ელექტრონების ატომებთან დაჯახებისას.

მძიმე ნაწილაკების დრეკადი დაჯახებები ხასიათდება იმავე კანონზომიერებებით, რომლებიც განვიხილეთ პირველ და მესამე თავებში, იმ განსხვავებით, რომ, მძიმე ნაწილაკის მასის ელექტრონის მასისაგან მნიშვნელოვანი განსხვავების გამო, კვანტური თვისებები თავს იჩენს მხოლოდ ფარდობითი მოძრაობის ძალზე დაბალი - სითბური სიჩქარეების დროს.

ამ თავში განხილული ენერგეტიკული არე, როგორც წესი, შეესაბამება ნელი ატომური ნაწილაკების დაჯახებების არეს. ნელს უწოდებენ ისეთ ნაწილაკებს, რომელთა სიჩქარეები გაცილებით მცირეა ატომური ელექტრონების სიჩქარეებთან შედარებით

$$v \ll u.$$

მომდევნო პარაგრაფებში, გარდა პირველი პარაგრაფისა, განვიხილავთ მხოლოდ არადრეკად დაჯახებებს.

1. დრეკადი დაჯახება

ატომების ერთმანეთზე გაფანტვისას ძალთა მოქმედების რადიუსი, რომელიც განაპირობებს გაფანტვას, იმავე რიგის სიდიდეა, რაც იყო ელექტრონების შემთხვევაში. ამავე დროს, ატომების დიდი მასის გამო, მათი დე ბროილის ტალღის სიგრძე ძალზე დაბალ ტემპერატურაზეც კი მცირეა ძალთა მოქმედების რადიუსთან შედარებით. შედეგად, გაფანტვის პროცესში მონაწილეობს პარციალური ტალღების დიდი რაოდენობა.

ამავე მიზეზის გამო, შესაძლებელია გაფანტვის პროცესის კლასიკური აღწერა. კლასიკური მექანიკის გამოყენების ერთი პირობა (1.18) სრულად სრულდება. მეორე, ანუ კლასიკური ტრაექტორიის არსებობის პირობა სრულდება მაშინ, თუკი გაფანტვის კუთხე ძალზე მცირე არ არის. მცირე კუთხეების არე, რომელიც განაპირობებს სრული განივკვეთის ინტეგრალის კრებადობას, მოითხოვს კვანტურ-მექანიკურ განხილვას.

მესამე თავში ნაჩვენები იყო, რომ დრეკადი გაფანტვის სრული განივკვეთი შესაძლებელია, გამოვსახოთ იმპულსის მომენტის სხვადასხვა მნიშვნელობის შესაბამისი პარციალური ტალღების ფაზათა ნანაცვლებით

$$\sigma = \frac{4\pi}{k_0^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin^2 \delta_l. \quad (4.1)$$

ამ მწკრივის კრებადობის (და, მაშასადამე, სრული განივკვეთის სასრულობის) ჩვენება შეიძლება დიდი იმპულსის მომენტის ($l \gg 1$) შესაბამისი პარციალური ტალღების სიდიდის შეფასებით, როდესაც გაფანტვის კუთხეები მცირეა, ხოლო ტრანექტორიები – თითქმის წრფივი.

2. არადრეკადი დაჯახებები. მძიმე ნაწილაკების დაჯახებების თავისებურებები

ატომური ნაწილაკების არადრეკადი დაჯახების პროცესები ძალზე მრავალფეროვანია: აგზნება, იონიზაცია, აგზნების გადაცემა, გადამუხტვა, ჩაჭერა, დაშლა, კომპლექსების შექმნა და ა. შ. განსხვავებით ადრე განხილული არადრეკადი ელექტრონ-ატომური დაჯახებებისაგან, ამ პროცესებში მონაწილე ყოველ პარტნიორს, როგორც წესი, აქვს თავისი შინაგანი სტრუქტურა, ხოლო მასა მნიშვნელოვნად აღემატება ელექტრონის მასას. ამ გარემოებებს შეაქვთ ახალი თავისებურებები გაფანტვის პროცესში, განსაკუთრებით, ნელი დაჯახებების დროს. იმისთვის, რომ უფრო გასაგები იყოს, რა თავისებურებებზეა ლაპარაკი, განვიხილოთ ორი დამახასიათებელი მაგალითი.

1. აგზნება. ვთქვათ, ატომები A და B საწყის მომენტში იმყოფებოდნენ თვითნებურად შერჩეულ მდგომარეობაში, ხოლო დაჯახების შემდეგ ერთ-ერთი მათგანი, მაგალითად, B , გადავიდა აგზნებულ მდგომარეობაში და აგზნების ენერგია სავალენტო ელექტრონის ბმის ენერჯის რიგისა:

$$A + B \rightarrow A + B^*.$$

ამ პროცესში ენერჯის ერთადერთი წყარო, რომელსაც შეუძლია, გამოიწვიოს ელექტრონის აგზნება, ატომების ფარდობითი მოძრაობაა. ამრიგად, ელექტრონის აგზნებისათვის საჭიროა, მძიმე ატომიდან ენერგია გადავიდეს მსუბუქ ელექტრონზე, რაც, ცხადია, განხორციელდება გაცილებით ნაკლები ეფექტურობით, ვიდრე ანალოგიური პროცესი როდესაც ატომი აღიგზნება ელექტრონული დარტყმით.

2. აგზნების გადაცემა. ვთქვათ, ატომი A , რომელიც საწყის მომენტში იმყოფება ძირითად მდგომარეობაში, ეჯახება ასეთივე ატომს A^* , რომელიც აგზნებულ მდგომარეობაშია. თუ დაჯახების შემდეგ ატომებმა გაცვალეს აგზნება, ამ პროცესს ეწოდება აგზნების რეზონანსული გადაცემა. მთლიანი სისტემის $A - A^*$ შინაგანი ენერგია არ შეცვლილა (ენერჯის დეფექტი $\Delta E = 0$), თუმცა სისტემის ცალკეულ ფრაგმენტთა შინაგანი ენერგია შეიცვალა. აქ A ატომის ელექტრონების აგზნების ენერჯის წყარო არა ბირთვების მოძრაობა, არამედ A^* ატომის ელექტრონული ენერგიაა. ამავე დროს, ორივე ნაწილაკს, როგორც „რხევით“ სისტემას, აქვს საკუთარი სიხშირე-

ბის ერთნაირი კრებული. ამიტომ „კონტაქტის“ დროს ერთის აგზნება რეზონანსულად გადაცემა მეორეს. ამ პროცესის ეფექტურობა, ცხადია, მით უფრო მეტია, რაც მეტია A და A^* ატომების ურთიერთქმედების დრო და – პირიქით: რაც მეტია ბირთვების სიჩქარე, მით უფრო ნაკლებეფექტურია აგზნების გადაცემის პროცესი.

განხილულ პროცესში სისტემის შინაგანი ენერგია არ იცვლება, ამიტომ ის უნდა ჩაგვეთვალო დრეკად პროცესად. მაგრამ, ჩვეულებრივ, რეზონანსული პროცესები მიმდინარეობს ელექტრონული მდგომარეობების ისეთი მნიშვნელოვანი გარდაქმნით, რომ უფრო მოსახერხებელია მათი განხილვა არადრეკად პროცესებად, ან, უფრო ზუსტად, არადრეკადი პროცესების ზღვრულ შემთხვევად, როცა $\Delta E \rightarrow 0$.

მოდი, ახლა გამოვავლინოთ ის დამახასიათებელი პარამეტრები, რომლებიც მნიშვნელოვან როლს ასრულებს მძიმე ნაწილაკების დაჯახების ამოცანაში. ამ მიზნით განვიხილოთ კლასიკური ოსცილატორი და ვნახოთ, როდის გადაცემა მას ენერგია.

ვთქვათ, ოსცილატორზე რომლის საკუთარი სიხშირე ν – ა, მოქმედებს დროზე დამოკიდებული გარეშე ძალა – $F(t)$. როგორც ცნობილია, ამ ძალის მიერ გადაცემული ენერგია პროპორციულია ოსცილატორის სიხშირეზე მისი ფურიე-კომპონენტის კვადრატისა

$$\Delta E = \frac{1}{2M} \left| \int F(t) e^{i\nu t} dt \right|^2 \quad (4.2)$$

და მაქსიმალურია, როცა

$$\nu \approx \frac{1}{\tau}.$$

აქ τ დროა, რომლის განმავლობაშიც მოქმედებს ძალა. ამრიგად, ოსცილატორის აგზნების ეფექტურობა დამოკიდებულია ν და τ პარამეტრებზე. შეიძლება, პირობითად გამოვყოთ ამ პარამეტრების მნიშვნელობების სამი არე, რომლებიც განსხვავდებიან გარეშე $F(t)$ ძალის მიერ ოსცილატორისათვის ენერგიის გადაცემის ეფექტურობით:

$$\nu\tau \gg 1, \nu\tau \approx 1, \nu\tau \ll 1. \quad (4.3)$$

ცხადია, რომ $\nu\tau \gg 1$ და $\nu\tau \ll 1$ დროს ენერგიის გადაცემის ეფექტურობა მცირეა. ეს პირობები გადავიტანოთ ნებისმიერი ატომური ნაწილაკის არადრეკადი დაჯახების შემთხვევაზე. ამ შემთხვევაში $\nu = \Delta E / h$ (ΔE - არის ატომური ნაწილაკების ელექტრონული ენერგიის ცვლილება), $\tau = a / v$, სადაც a - ატომური ნაწილაკების ურთიერთქმედების არის დამახასიათებელი ზომაა, ხოლო v - მათი ფარდობითი მოძრაობის სიჩქარე. მაშინ (4.3) პირობები ასე ჩამოყალიბდება:

$$\frac{\Delta E a}{h v} \gg 1, \frac{\Delta E a}{h v} \approx 1, \frac{\Delta E a}{h v} \ll 1. \quad (4.4)$$

თუ u - ელექტრონის დამახასიათებელი სიჩქარეა ატომურ ნაწილაკში, რომლის ზომა a -ს რიგისაა, მაშინ $v \approx \frac{u}{a}$ იქნება ატომური ნაწილაკის დამახასიათებელი სიხშირე. ამ შემთხვევაში (4.4) პირობები გვიჩვენებს ელექტრონული სისტემის აგზნების ეფექტურობის დამოკიდებულებას პროცესში მონაწილე ელექტრონების დამახასიათებელი სიჩქარის ფარდობაზე ატომური ნაწილაკების სიჩქარესთან

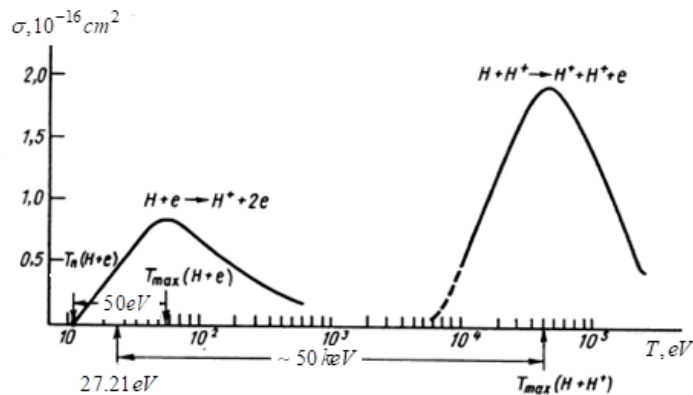
$$\frac{u}{v} \gg 1, \quad \frac{u}{v} \approx 1, \quad \frac{u}{v} \ll 1. \quad (4.5)$$

ეს პირობები თავს იჩენს ნებისმიერი არადრეკადი დაფანტვის განიკვეთის ენერგიაზე დამოკიდებულებაში. მაგალითად, 19 ნახაზზე ნაჩვენებია მრუდების მაქსიმუმები

ბი შეესაბამება პირობას $\frac{u}{v} \approx 1$, ხოლო არეები მაქსიმუმის მარცხნივ და მარჯვნივ

შეესაბამებინ პირობებს $u/v \gg 1$ და $u/v \ll 1$. ასეთი სიტუაცია დამახასიათებელია ატომების როგორც მსუბუქ, ისე მძიმე ნაწილაკებთან დაჯახებისათვის. მრუდების გარკვეულ მსგავსებასთან ერთად ჩანს მნიშვნელოვანი განსხვავებებიც.

პირველ რიგში, ეს ეხება მათი მაქსიმუმების მდებარეობას. $H + H^+$ პროცესის მაქსიმუმი დაშორებულია $H + e$ -ს მაქსიმუმისაგან თითქმის 50 კევ-ით. ორივე შემთხვევაში მაქსიმუმები შეესაბამება ერთსა და იმავე ფარდობით სიჩქარეს v , რომელიც ატომში ელექტრონის u სიჩქარის ტოლია, ამიტომ განსხვავება



ნახ. 19. წყალბადის ატომის იონიზაცია ელექტრონებით და პროტონებით

ენერგიებს შორის განპირობებულია ელექტრონის და პროტონის მასებს შორის განსხვავებით. რეაქციის ზღურბლური ენერგიის მნიშვნელობებიც განსხვავებულია.

ნებისმიერი მასის ნაწილაკისათვის ზღურბლური ენერგია ტოლია $T = I \left(1 + \frac{M_1}{M_2} \right)$,

სადაც I - ბმის ენერგიაა, M_1 - დამჯახებელი ნაწილაკის მასაა, ხოლო M_2 - სა-

მიზნე ნაწილაკის მასაა. $H + e \rightarrow H^+ + 2e$ რეაქციისათვის $T = I = 13.6eV$, ხოლო $H + H^+ \rightarrow 2H^+ + e$ რეაქციისათვის $T = 2I = 27.21eV$.

მძიმე ნაწილაკების დაჯახების შემთხვევაში განივკვეთის ზღურბლს და მაქსიმუმს შორის მოთავსებულია დაახლოებით ათასი ზღურბლური ენერგიის ტოლი ფართო ენერგეტიკული არე. ელექტრონებთან დაჯახების შემთხვევაში კი T და განივკვეთის მაქსიმუმის შესაბამისი ენერგია ერთი და იმავე რიგის სიდიდეებია.

ამრიგად, მსუბუქი და მძიმე ნაწილაკების არადრეკადი დაჯახების შედარებამ, შიდა თავისუფლების ხარისხებისათვის ენერგიის გადაცემის საერთო კანონზომიერებების არსებობის გარდა, გამოავლინა მნიშვნელოვანი თავისებურება: მძიმე ნაწილაკების დაჯახების შემთხვევაში არსებობს ნელი დაჯახებების არე, რომელსაც ადიაბატურ არეს უწოდებენ. აქ ხორციელდება არადრეკადი პროცესები დამჯახებელი ატომების ისეთ ფარდობით სიჩქარეებზე, რომლებიც გაცილებით ნაკლებია ელექტრონის მახასიათებელ სიჩქარეზე შედარებით ატომში

$$v \ll u.$$

ამ პროცესების ეფექტურობა, როცა სრულდება პირობა $v \ll u$, (4.4) ან (4.5) კრიტერიუმების მიხედვით, მცირე უნდა იყოს. მართლაც, 19 ნახაზზე $H + H^+ \rightarrow 2H^+ + e$ რეაქციისათვის ზღურბლიდან, რომელიც 27.21 ევ-ის ტოლია, დაახლოებით 10^4 ევ-მდე განივკვეთი მცირეა და ამიტომ არ არის ნაჩვენები.

ამრიგად, თუ სრულდება პირობა

$$\frac{\Delta E a}{\hbar v} \gg 1, \tag{4.6}$$

უნდა გვექონდეს მცირე განივკვეთები. (4.6) თანაფარდობას მესის ადიაბატურ კრიტერიუმს უწოდებენ, ხოლო სიდიდე $\xi = \frac{\Delta E a}{\hbar v}$ მესის პარამეტრია. სინამდვილეში სი-

ტუაცია ასე მარტივი არ არის და მესის ადიაბატური კრიტერიუმის შესრულება ყოველთვის როდი ნიშნავს რეაქციის დაბალ ეფექტურობას. ეს განპირობებულია იმით, რომ (4.6) თანაფარდობაში ფიგურირებს სიდიდე ΔE – ენერგიის დეფაქტი, რომელიც შეესაბამება დამჯახებელი ნაწილაკების შინაგანი ენერგიის სასრულ ცვლილებას მაშინ, როდესაც რეაქციის ფაქტობრივი ეფექტურობა განისაზღვრება $\Delta U(R)$ სიდიდის ყველა შესაძლებელი მნიშვნელობებით, ანუ სისტემის ელექტრონული ენერგიის იმ ცვლილებით, რომელსაც ის განიცდის ატომების დაახლოების ან დაშორების დროს. როდესაც $R \rightarrow \infty$, მაშინ $\Delta U(\infty) \equiv \Delta E$. თუ (4.6) გამოსახულებაში ΔE -ის მაგივრად ჩავსვამთ $\Delta U(R)$ -ს, ξ იქნება R -ის ფუნქცია (ფიქსირებული R -თვის $\xi(R)$ -ს, შეიძლება, ვუწოდოთ მესის ლოკალური პარამეტრი). მთელ რიგ რეაქციებში $\xi(R)$ -ი იმდენად მნიშვნელოვნად იცვლება R -ის ცვლილებისას, რომ ტრაექტორიის ზოგ წერტილში $R = R_0$. ის შეიძლება გახდეს ერთის რიგის, ძალზე მცირე ან ნულის ტოლი, მიუხედავად იმისა, რომ საწყისი პირობებით $\xi(\infty) \gg 1$. ასეთ წერტილებში ან არეებში ადიაბატურობა ირღვევა და, შესაბამისად, რეაქციის

ეფექტურობა შეიძლება, მნიშვნელოვნად გაიზარდოს. ამრიგად, მძიმე ნაწილაკების არადრეკადი დაჯახების ამოცანის მნიშვნელოვანი პარამეტრი საწყის სიჩქარესთან ერთად მესის ლოკალური პარამეტრია.

3. გადასვლები ნელი ატომური ნაწილაკების დაჯახებისას

A და B ატომური ნაწილაკების ადიაბატურად ნელი მიახლოებისას სწრაფად მოძრავი ატომური ელექტრონების ტალღური ფუნქციები ასწრებენ, განუწყვეტლივ შეეწყონ ატომების ფარდობითი მოძრაობით გამოწვეულ გარეშე ველის ცვლილებას. ბუნებრივია, ასეთი სისტემა წარმოვიდგინოთ კვაზიმოლეკულად, რომელიც განსხვავდება ჩვეულებრივი მოლეკულისაგან მხოლოდ ატომების ინფინიტური მოძრაობით, და გამოვიყენოთ ბორნ-ოპენჰაიმერის მიახლოება, რომელიც განაცალკევებს მსუბუქი (ელექტრონები) და მძიმე (ბირთვები) ქვესისტემების მოძრაობებს.

ამრიგად, ბირთვებს შორის მანძილის ადიაბატურად ნელი ცვლილებისას შეიძლება ჩავთვალოთ, რომ კვაზიმოლეკულის ელექტრონული მდგომარეობები უწყვეტად იცვლებიან და მათ შორის გადასვლები არ ხორციელდება. სწორედ ამ პრინციპს ეფუძნება ბორნ-ოპენჰაიმერის მიახლოება. ამ მიახლოებაში მიღებულ ტალღურ ფუნქციებს და ელექტრონულ თერმებს უწოდებენ ადიაბატურს ან მოლეკულურს. მათი განსაზღვრა, ჩვეულებრივ, კვანტური ქიმიის ამოცანაა. ჩვენს ამოცანას კი წარმოადგენს ელექტრონულ თერმებს შორის გადასვლის ალბათობების განსაზღვრა, რომელიც გამოწვეულია ბირთვების მოძრაობით. როდესაც $R \rightarrow \infty$, AB მოლეკულური თერმები გადადიან A და B ატომების თერმებში, გადასვლებს მოლეკულურ თერმებს შორის R -ის შუალედურ მნიშვნელობებზე საბოლოოდ მივყავართ გადასვლებამდე ატომურ თერმებს შორის.

გადასვლების ადიაბატური თეორიის ასაგებად გამოვიყენოთ ე. წ. კვაზიკლასიკური მიახლოება. ამ მიახლოების თანახმად, ბირთვების – მძიმე ქვესისტემის – ინფინიტური მოძრაობა აღვწეროთ კლასიკური კანონებით, ხოლო ელექტრონებისა – მსუბუქი ქვესისტემის – კვანტურად.

ბირთვების მოძრაობის კლასიკური აღწერა შესაძლებელია მაშინ, როცა ნაწილაკის დე ბროილის ტალღის სიგრძე $\hbar / \mu v$ გაცილებით ნაკლებია იმ a მანძილთან შედარებით, რომელზეც ხორციელდება გაფანტვა. ამრიგად, კვაზიკლასიკურობის პირობიდან გამოდის, რომ ბირთვების ფარდობითი მოძრაობის სიჩქარე უნდა იყოს

$$v \gg \frac{\hbar}{\mu a}, \quad (4.7)$$

სადაც μ არის A და B ნაწილაკების დაყვანილი მასა. ამრიგად, სიჩქარე აღმოჩნდა ზემოდან შემოსაზღვრული $v \ll u$ პირობით, ხოლო ქვემოდან კვაზიკლასიკურობის (4.7) პირობით. დავუშვათ, რომ ტრაექტორიის ყველა წერტილში სრულდება

პირობა $\xi(R) \sim \xi(\infty)$, მაშინ სიჩქარების ის არე, რომლისთვისაც ჩვენ ვაგებთ ადიაბატურ თეორიას, განისაზღვრება უტოლობით

$$\frac{\hbar}{\mu a} \ll v \ll \frac{\Delta U_{\infty} a}{\hbar}. \quad (4.8)$$

სინამდვილეში ეს არე კიდევ უფრო ვიწროა, რაც დაკავშირებულია, როგორც შემდგომ ვნახავთ, ტრაექტორიის არჩევის არაცალსახობასთან. სიჩქარეთა ამ არეში ბირთვების მოძრაობის განტოლება $U(\vec{R})$ ველში მოძრაობის ჩვეულებრივი კლასიკური განტოლებაა:

$$\mu \frac{d^2 \vec{R}}{dt^2} = -\nabla_{\vec{R}} U(\vec{R}). \quad (4.9)$$

ეს განტოლება განსაზღვრავს $\vec{R}(t)$ ტრაექტორიას.

ბირთვების ადიაბატური მოძრაობისას ელექტრონული ქვესისტემა აღინერება შრედინგერის იმავე სტაციონარული განტოლებით, რომლითაც ელექტრონების მოძრაობა მოლეკულაში ბორნ-ოპენჰაიმერის მიახლოებაში:

$$\hat{H} \psi_m(\vec{r}, R) = U_m(R) \psi_m(\vec{r}, R), \quad (4.10)$$

სადაც \hat{H} ჰამილტონიანი უნდა ითვალისწინებდეს ყველა ურთიერთქმედებას, მათ შორის – სპინ-ორბიტალურსაც, ორი ატომური ნაწილაკისაგან შექმნილ სისტემაში დამაგრებული ბირთვებით:

$$\hat{H} = \sum_i \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_i - \frac{Z_a e^2}{|\vec{r}_i - \vec{R}_a|} - \frac{Z_b e^2}{|\vec{r}_i - \vec{R}_b|} \right] + \sum_{i>k} \frac{e^2}{|\vec{r}_i - \vec{r}_k|} + \frac{Z_a Z_b e^2}{R} + \hat{V}_{ls}. \quad (4.11)$$

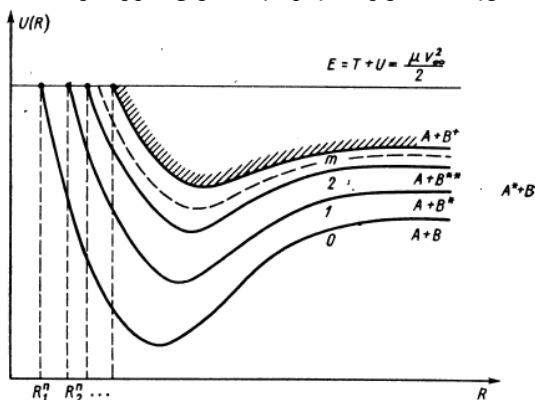
აქ \vec{r} ელექტრონების კოორდინატებია; \vec{R}_a და \vec{R}_b ბირთვების კოორდინატებია; $R = |\vec{R}_a - \vec{R}_b|$ - მანძილი ბირთვებს შორის; Z_a , Z_b - ბირთვების მუხტებია; ხოლო V_{ls} - ელექტრონების სპინ-ორბიტალური ურთიერთქმედების ოპერატორია. ბირთვებს შორის R მანძილის ნებისმიერი მნიშვნელობისას ადიაბატური ტალღური ფუნქციები $\psi_m(\vec{r}, R)$ ქმნის ორთო-ნორმირებულ სისტემას

$$\int \psi_n^*(\vec{r}, R) \psi_m(\vec{r}, R) d\vec{r} = \delta_{nm}.$$

უნდა გავითვალისწინოთ, რომ (4.10) ფორმულაში \hat{H} , U_m , ψ_m დამოკიდებული არიან t -ზე $R = R(t)$ თანაფარდობით, რომელიც განისაზღვრება (4.9) განტოლებით.

(4.10) განტოლების ამოხსნით ვპოულობთ AB კვაზიმოლეკულის ელექტრონული თერმების $U_m(R)$ სისტემას. ნახაზზე 20 ნაჩვენებია ელექტრონული თერმების სავარაუდო ყოფაქცევა. გაფანტვას შეესაბამება მოძრაობა დადებითი და უწყვეტი

ენერგიით, ამიტომ დამჯავახებელ ნაწილაკთა სრული ენერგია E მეტი უნდა იყოს $U_m(R)$ პოტენციალურ ენერგიაზე R -ის ყველა მნიშვნელობებისათვის $R > R_1$. R_1 მობრუნების წერტილია, რომელიც შეესაბამება ნაწილაკთა მაქსიმალურ მიახლოებას. სისტემის ელექტრონული ქვესისტემის კვანტურობის გამო, ელექტრონული თერმები, რომლებიც, იმავდროულად, ბირთვების პოტენციალური ენერგებია, ქმნიან დისკრეტულ კრებულს. ამიტომ ბირთვების მოძრაობის აღმწერ (4.9) კლასიკურ განტოლებაში $U(R)$ უნდა შეიცვალოს $U_m(R)$ -ით. ეს იმას ნიშნავს, რომ AB კვაზიმოლეკულის ყოველ მდგომარეობას უნდა შევუსაბამოთ თავისი ტრაექტორია $R_m(t)$. ასეთი მდგომარეობა იმიტომ შეიქმნა, რომ, კვაზიკლასიკური მიახლოების გამოყენებით, გავაერთიანეთ კვანტური და კლასიკური მიდგომები.



ნახ. 20. AB კვაზიმოლეკულის ელექტრონული თერმების განლაგება, როდესაც შესაძლებელია შემფოთების ადიაბატური თეორიის გამოყენება;

A^* , B^* - ავზნებული ატომებია

ახლა გადავიდეთ ელექტრონული გადასვლის აღბათობის განსაზღვრაზე. ბირთვორისი მანძილის ცვლილება დროში იწვევს გადასვლებს სხვადასხვა სტაციონარულ $\psi_m(\vec{r}, R)$ მდგომარეობებს შორის. გადასვლები უკავშირდება სტაციონარული მდგომარეობების დროით ევოლუციას, ამიტომ სისტემა უნდა აღვწეროთ შრედინგერის არასტაციონარული განტოლებით

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = \hat{H} \Psi(\vec{r}, t), \quad (4.12)$$

სადაც საძიებელი ტალღური ფუნქცია $\Psi(\vec{r}, t)$ გაშლილია სტაციონარული სისტემის საკუთარი ფუნქციების ბაზისში $\psi_m(\vec{r}, R)$:

$$\Psi(\vec{r}, t) = \sum_m c_m(t) \psi_m(\vec{r}, R) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t U_m(R(t')) dt'\right). \quad (4.13)$$

ახლა თუ (4.13)-ს ჩავსვამთ (4.12)-ში, გავამრავლებთ მარცხნიდან ψ_f^* -ზე და ვაინტეგრებთ ელექტრონული კოორდინატების მიხედვით, საბაზისო ψ_m ფუნქციების

ორთო-ნორმირების გათვალისწინების შემდეგ ამპლიტუდებისათვის მივიღებთ განტოლებათა შემდეგ სისტემას:

$$i\hbar \dot{c}_f(t) = \sum_m c_m(t) \left\langle f \left| -i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \right| m \right\rangle \exp \left(-\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t [U_m(t') - U_f(t')] dt' \right), \quad (4.14)$$

სადაც მატრიცული ელემენტი

$$\left\langle f \left| \frac{\partial}{\partial t} \right| m \right\rangle = \int \psi_f^*(\vec{r}, R(t)) \frac{\partial}{\partial t} \psi_m(\vec{r}, R(t)) d\vec{r} \quad (4.15)$$

ახორციელებს კავშირს ადიაბატურ მდგომარეობებს შორის, ასე რომ, ადიაბატურ სისტემაში ერთადერთი შემოფოთება, რომელიც იწვევს გადასვლებს, არის ოპერატორი $i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$. ვუნოდოთ მას არაადიაბატური კავშირის ოპერატორი, ხოლო (4.15)

მატრიცულ ელემენტს – არაადიაბატური კავშირის მატრიცული ელემენტი. ეს მატრიცული ელემენტი შეიძლება წარმოვიდგინოთ ამ სახით:

$$\begin{aligned} \left\langle f \left| i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \right| m \right\rangle &= \left\langle f \left| i\hbar \dot{R} \nabla_{\vec{R}} \right| m \right\rangle = v_R \left\langle f \left| i\hbar \frac{\partial}{\partial R} \right| m \right\rangle + \dot{\phi} \left\langle f \left| i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi} \right| m \right\rangle = \\ &= v_R \left\langle f \left| i\hbar \frac{\partial}{\partial R} \right| m \right\rangle + \omega \left\langle f \left| \hat{J}_{\perp} \right| m \right\rangle, \end{aligned} \quad (4.16)$$

ანუ $\partial / \partial t$ ოპერატორის რადიალური და ტანგენციალური მდგენელების მატრიცული ელემენტების ჯამის სახით. აქ $v_R = dR / dt$ რადიალური საჩქარეა; $\dot{\phi} = \omega$ - ბირთვებშორისი ლერძის მობრუნების კუთხური სიჩქარე; $i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi} = \hat{I}$ - მთელი სისტემის კუთხური მომენტის ოპერატორია, რომელიც პერპენდიკულარია დაჯახების სიბრტყის; \hat{J}_{\perp} - AB კვაზიმოლეკულის ელექტრონების კუთხური მომენტის ოპერატორის კომპონენტია რომელიც მიმართული \vec{J} -ის გასწვრივ. ორივე ოპერატორი, როგორც $i\hbar \frac{\partial}{\partial R}$, ისე \hat{J}_{\perp} , (4.16) გამოსახულებაში მოქმედებენ ელექტრონულ ფუნქციებზე $\psi_m(\vec{r}, R)$ მოძრავ, ანუ მოლეკულურ კოორდინატთა სისტემაში. \hat{J}_{\perp} -ს, ჩვეულებრივ, უწოდებენ ბრუნვით ან კორიოლისის ურთიერთქმედების ოპერატორს.

4. შემოფოთების ადიაბატური თეორია

განვხილოთ (4.14) განტოლებათა სისტემა მიღებული ამპლიტუდებისათვის. თუმცა ის სანყისი (4.12) შრედინგერის განტოლების ეკვივალენტურია, უფრო მოსახერხებელია მიახლოებითი ამოხსნების საპოვნელად. არაადიაბატური კავშირის

მატრიცული ელემენტი $i\hbar \left\langle f \left| \frac{\partial}{\partial t} \right| m \right\rangle$ შეიცავს პარამეტრს \dot{R} , რომელიც მცირეა, როდესაც ფარდობითი სიჩქარე v მცირეა. ამ შემთხვევაში სისტემა შეიძლება ამოვხსნათ თანდათანობითი მიახლოების (იტერაციის) მეთოდით. ნულოვან მიახლოებაში გადასვლები არ გაგვარჩნია. ამ შემთხვევაში დროის ნებისმიერ t მომენტში სისტემა იმყოფება იმავე მდგომარეობაში, როგორშიც საწყის მომენტში $t = -\infty$:

$$c_j^{(0)}(t) = c_j(-\infty).$$

თუ საწყის მომენტში სისტემა $m = n$ მდგომარეობაში იმყოფება, ხოლო ეს კი შეესაბამება პირობას

$$c_n^{(0)}(-\infty) = \delta_{mn},$$

მაშინ პირველ მიახლოებაში f მდგომარეობის ამპლიტუდა, რომელიც ახასიათებს $n \rightarrow f$ გადასვლის ალბათობას, იქნება

$$c_f^{(1)} \equiv c_f(\infty) = - \int_{-\infty}^{\infty} \left\langle f \left| \frac{\partial}{\partial t} \right| n \right\rangle e^{-\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t (U_n - U_f) dt'} dt. \quad (4.17)$$

მომდევნო იტერაციები მოგვცემენ მეორე $c_f^{(2)}$, მესამე $c_f^{(3)}$ და ა. შ. მიახლოებებს. ადიაბატური შეშფოთების თეორიის მწკრივის კრებადობა არ არის სწრაფი, ამიტომ, თუ შემოვისაზღვრებით პირველი $c_f^{(1)}$ მიახლოებით, შევაფასებთ მხოლოდ გადასვლის ალბათობის სიდიდეს.

ინტეგრალი (4.17) ფორმულაში შეიძლება გამოვიტვალოთ მხოლოდ ელექტრონული თერმების $U_n(R)$, ტალღური ფუნქციების $\psi_n(\vec{r}, R)$ და, (4.9) ფორმულიდან გამომდინარე, მათი t -ზე დამოკიდებულების კონკრეტული მოცემის შემდეგ. თუმცა ინტეგრალი შეიძლება შეფასდეს ამ სიდიდეების კონკრეტიზაციის გარეშეც. თუ $\Delta U(R) = U_n - U_f$ დიდი სიდიდეა, მაშინ (4.17) ფორმულაში ექსპონენტა სწრაფად ოსცილირებს, გარდა t -ს იმ მნიშვნელობებისა, სადაც ექსპონენტის წინ მდგარ მამრავლს აქვს განსაკუთრებული ადგილი. სწრაფი ოსცილაციების არეებში ინტეგრალის სიდიდე ახლოსაა ნულთან, ამიტომ მისი მთლიანი სიდიდე განისაზღვრება მნიშვნელობებით განსაკუთრებულ წერტილებში. იმისათვის, რომ გავიგოთ, რა განსაკუთრებულ წერტილებზეა საუბარი, (4.17) ფორმულაში არაადიაბატური კავშირის მატრიცული ელემენტი წარმოვიდგინოთ განსხვავებული სახით. ამისათვის (4.10) გავანარმოოთ t -თი:

$$\frac{\partial \hat{H}}{\partial t} \psi_n + \hat{H} \frac{\partial \psi_n}{\partial t} = \frac{dU_n}{dt} \psi_n + U_n \frac{\partial \psi_n}{\partial t}. \quad (4.18)$$

(4.18)-ის გამრავლებით მარცხნიდან ψ_f^* -ზე და ელექტრონული კოორდინატებით ინტეგრაციით, მივიღებთ

$$\left\langle f \left| \frac{\partial \hat{H}}{\partial t} \right| n \right\rangle + U_f \left\langle f \left| \frac{\partial}{\partial t} \right| n \right\rangle = \frac{dU_n}{dt} \delta_{fn} + U_n \left\langle f \left| \frac{\partial}{\partial t} \right| n \right\rangle.$$

აქედან კი მივიღებთ

$$\left\langle f \left| \frac{\partial}{\partial t} \right| n \right\rangle_{f \neq n} = \frac{\left\langle f \left| \frac{\partial \hat{H}}{\partial t} \right| n \right\rangle}{U_n - U_f}, \quad (4.19)$$

$$\left\langle f \left| \frac{\partial \hat{H}}{\partial t} \right| f \right\rangle = \frac{dU_f}{dt}. \quad (4.20)$$

(4.19)-ის შეტანით (4.17)-ში ვიღებთ

$$c_f^{(1)}(\infty) = - \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\left\langle f \left| \frac{\partial \hat{H}}{\partial t} \right| n \right\rangle}{U_n - U_f} e^{-\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t (U_n - U_f) dt'} dt'. \quad (4.21)$$

იმისათვის, რომ დავახასიათოთ გარდაქმნილი მატრიცული ელემენტი (4.19), გამოვიყენოთ ადიაბატური შეშფოთების თეორიის გამოყენების პირობა:

$$\xi(R) \gg 1.$$

ეს პირობა უნდა შესრულდეს ნებისმიერი R -სათვის: აქედან გამოდის, რომ თუ დაჯახების განმავლობაში სიჩქარე v მცირედ იცვლება, მცირედ იცვლება სხვაობა თერმებს შორისაც $\Delta U(R)$, რჩება რა სიდიდით ΔU_∞ რიგის (თერმების სწორედ ასეთი ყოფაქცევა არის ნაჩვენები 20 ნახაზზე). შესაბამისად, მატრიცული ელემენტი

$\left\langle f \left| \frac{\partial \hat{H}}{\partial t} \right| n \right\rangle$ დროში ნელა იცვლება, ხოლო თერმები U_n და U_f არსად რეალური

R -ის არეში არ გადაიკვეთებიან. ამრიგად, (4.21)-ში ინტეგრალქვეშა გამოსახულების განსაკუთრებული წერტილებია

$$U_n(t) - U_f(t) = 0 \quad (4.22)$$

განტოლების ფესვები. უმარტივეს შემთხვევაში ეს შეიძლება იყოს ნამდვილ ღერძთან ახლოს მდებარე ორი წერტილი $t_{1,2} = \pm i\tau$. თუ a არის სისტემის ის მახასიათებელი

ზომა, სადაც $U_n(R)$ შესამჩნევად იცვლება, მაშინ $\tau = \frac{a}{v}$. ცხადი სახით τ -ს მიღება

შეიძლება კონკრეტული $U(R)$ -თვის (4.9) განტოლების ამოხსნით და $U(t)$ -ს მიღებით. განსაკუთრებულ წერტილებში ინტეგრალქვეშა ფუნქციას აქვს მკვეთრი მაქსიმუმი, ამიტომ (4.21) ინტეგრალის მნიშვნელობა შეიძლება შეფასდეს მისი სიდიდით ინტეგრალქვეშა ფუნქციის ექსტრემუმის შემცველ არეში. მაგალითად, $t_1 = +i\tau$ -თვის

$$c_f^{(1)}(\infty) = - \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\left\langle f \left| \frac{\partial \hat{H}}{\partial t} \right| n \right\rangle}{U_n - U_f} e^{-\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t (U_n - U_f) dt'} dt' \sim e^{-\frac{i}{\hbar} \Delta_\infty t_1}$$

(ინტეგრალის შეფასებისას საწყისი პირობები ისეა შერჩეული, რომ $U_f > U_n$), ხოლო გადასვლის ალბათობა შეფასდება სიდიდით

$$P_{nf} = |c_f(\infty)|^2 \sim e^{-\frac{\Delta_\infty a}{\hbar v}}. \quad (4.23)$$

ამრიგად, საწყისი n მდგომარეობიდან საბოლოო f მდგომარეობაში გადასვლის ალბათობა შესაბამისი ადიაბატური თერმებით U_n და U_f ექსპონენციალურად მცირეა, ხოლო ექსპონენტის მაჩვენებელი მესის პარამეტრის ტოლია.

განვიხილოთ ორი A და B ატომური ნაწილაკის ურთიერთქმედება, რომელთა თერმებიც იქცევიან ისე, როგორც ეს ნაჩვენებია 20 ნახაზზე. დავუშვათ, რომ საწყის მომენტში ორივე ნაწილაკი იყო ძირითად მდგომარეობაში, რომელსაც შეესაბამება U_0 თერმი. ამ თერმზე მოძრაობისას (ე. ი. $U_n = U_0$ პოტენციალური ენერჯით (4.9) მოძრაობის განტოლებაში) $t = -\infty$ -დან $t = \infty$ -მდე AB კვაზიმოლეკულა შეიძლება გადავიდეს ნებისმიერ თერმზე ექსპონენციალურად მცირე ალბათობით. ეს გადასვლა არ არის ლოკალიზებული სივრცეში და შეიძლება მოხდეს ტრაექტორიის ნებისმიერ წერტილში თითქმის ერთნაირი ალბათობით, გარდა იმ წერტილებისა, სადაც ნაწილაკები იმდენად დაშორებული არიან ერთმანეთისაგან, რომ მათი ურთიერთქმედება და მაშასადამე გადასვლებიც შეიძლება უგულებელვყოთ. ამრიგად, მაგალითად, B ნაწილაკის აგზნების ალბათობა, რომელიც შეესაბამება $0 \rightarrow 1$ გადასვლას 20 ნახაზზე, შეიძლება შევაფასოთ სიდიდით

$$P_{01} \sim \exp\left[-\frac{\Delta U_\infty(0 \rightarrow 1)a}{\hbar v_\infty}\right],$$

ხოლო გადასვლის განივკვეთი

$$\sigma_{01} = 2\pi \int_0^\infty |c_1(v, \rho)|^2 \rho d\rho \sim P_{01} \rho_0^2 \sim e^{-\frac{\Delta U_\infty(0 \rightarrow 1)\rho_0}{\hbar v_\infty}} \rho_0^2 \quad (4.24)$$

სიდიდით. თუ დავუშვებთ, რომ

$$\frac{\Delta U_\infty(0 \rightarrow 1)\rho_0}{\hbar v_\infty} \geq 10$$

(რასაც მესის კრიტერიუმი ითხოვს), ხოლო მახასიათებელი სიდიდე $\rho_0 = a_0$ (ანუ, მივიჩნევთ, რომ ბორის რადიუსის რიგისაა), ადიაბატური გადასვლის განივკვეთისათვის მივიღებთ

$$\sigma_{01} < 10^{-5} a_0^2,$$

რაც ატომური ნაწილაკების გეომეტრიულ ზომაზე რამდენიმე რიგით ნაკლებია. უნდა აღინიშნოს, რომ ადიაბატურ პირობებში გადასვლის ალბათობების ექსპონენციალური სიმცირე ახასიათებს ყველა ადიაბატურ რეაქციას, ხოლო ადიაბატური შემოფოტების თეორიის შემდგომი წევრების გათვალისწინებას მივყავართ მხოლოდ ექსპონენტის წინ მდგომი მამრავლის დაზუსტებამდე.

ვთქვათ, გვაქვს ზუსტი ადიაბატური ჰამილტონიანი \hat{H} , რომელიც ითვალისწინებს კვაზიმოლეკულის ყველა ნაწილაკის ურთიერთქმედებას და, ვთქვათ, რომ ψ_n^0 -ც ადიაბატურია, მაგრამ უფრო უხეში ჰამილტონიანის საკუთარი ფუნქცია. ამრიგად, $\hat{H} = \hat{H}_0 + V$ და

$$\hat{H}_0 \psi_n^0 = U_n^0 \psi_n^0.$$

ცხადია, ψ_n^0 ბაზისში \hat{H} ოპერატორი დიაგონალური არ არის. არადიაგონალური მატრიცული ელემენტები $\langle \psi_n^0 | \hat{H} | \psi_f^0 \rangle = \langle \psi_n^0 | V | \psi_f^0 \rangle$ აკავშირებენ საწყისი ψ_n^0 ბაზისის სხვადასხვა მდგომარეობას. ამრიგად, ψ_n^0 ბაზისში და მასთან დაკავშირებულ U_n^0 თერმებზე გადასვლით, მდგომარეობების არაადიაბატური კავშირის გარდა, შემოგვაქვს დამატებითი კავშირი $\langle \psi_n^0 | V | \psi_f^0 \rangle$. ზოგჯერ ასეთ მატრიცულ ელემენტებს უწოდებენ დიაბატურს. აქ გათვალისწინებულია, რომ დიაბატური მატრიცული ელემენტი ზუსტი ადიაბატური მატრიცული ელემენტის ნაწილია (პირველი ასო ჩამოცილებულია, რომ მიახლოებითი მატრიცული ელემენტი განასხვავონ ზუსტისაგან). არასტაციონარული განტოლების $i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hat{H} \Psi$ ტალღური ფუნქცია გავშალოთ ψ_n^0 ფუნქციების ბაზისში:

$$\Psi = \sum_n c_n^0(t) \psi_n^0(\vec{r}, R) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int H_{nn} dt\right). \quad (4.25)$$

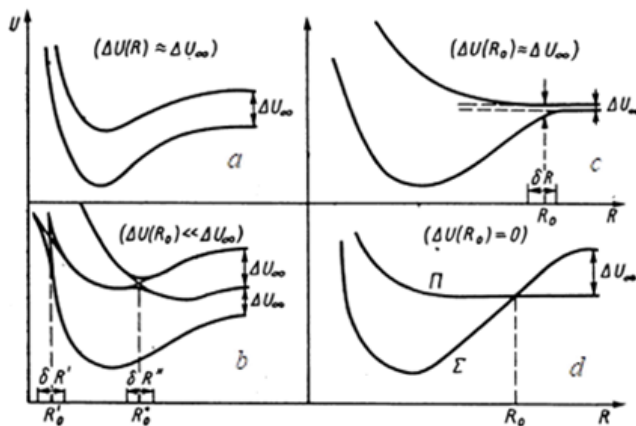
გაშლის კოეფიციენტებისთვის $c_n^0(t)$ მივიღებთ განტოლებათა სისტემას

$$i\hbar \frac{dc_f^0}{dt} = \sum_n c_n^0 \left(H_{fn} - i\hbar \langle f | \frac{\partial}{\partial t} | n \rangle \right) \exp\left[-\frac{i}{\hbar} \int (H_{nn} - H_{ff}) dt\right]. \quad (4.26)$$

როგორც ვხედავთ, განტოლებაში გამოჩნდა ორი არადიაგონალური მატრიცული ელემენტი $H_{fn} = \langle \psi_f^0 | \hat{H} | \psi_n^0 \rangle$ და $\langle \psi_f^0 | \frac{\partial}{\partial t} | \psi_n^0 \rangle$, რომლებიც განაპირობებენ გადასვლებს. თუ რაიმე მიზეზის გამო $H_{fn} \gg i\hbar \langle f | \frac{\partial}{\partial t} | n \rangle$, არადიაბატური კავშირი შეიძლება უგულებელვყოთ და $i\hbar \langle f | \frac{\partial}{\partial t} | n \rangle$ მატრიცული ელემენტი არ განვიხილოთ. მაშინ (2.26) განტოლებათა სისტემა განსაზღვრავს გადასვლებს დიაბატურ H_{nn}^0 და H_{ff}^0 თერმებს შორის. როგორც შემდგომ ვნახავთ, როდესაც თერმები მკვეთრად უახლოვდებიან ერთმანეთს, დიაბატური თერმების განხილვა უფრო მოსახერხებელია, ვიდრე – ადიაბატურის.

5. არაადიაბატური გადასვლები

წინა პარაგრაფში ნაჩვენები იყო, რომ გადასვლები ზუსტ ადიაბატურ მდგომარეობებს შორის განპირობებულია მხოლოდ ბირთვების მოძრაობით. ეს ფაქტი აისახა არაადიაბატური კავშირის მატრიცული ელემენტების $\langle \psi_f | \partial / \partial t | \psi_m \rangle$ არსებობით გადასვლის ამპლიტუდის განმსაზღვრელ (4.14) განტოლებებში. განვიხილოთ ადიაბატური თერმების ყოფაქცევის რამდენიმე ტიპური ვარიანტი და არაადიაბატური კავშირის ხასიათი ამ შემთხვევებში.



ნახ. 21. ელექტრონული თერმების სხვადასხვა ყოფაქცევა

ადრე აღვნიშნეთ, რომ თუ მესის ლოკალური პარამეტრი $\xi(R) \gg 1$, ადიაბატური თერმების არაადიაბატური კავშირი ძალზე სუსტია. ეს სიტუაცია დამახასიათებელია თერმების ისეთი ყოფაქცევისთვის, როდესაც თერმებს შორის სხვაობა მცირედ იცვლება ბირთვებს შორის მანძილის ცვლილებებისას და სიდიდით არის ერთი ან რამდენიმე ელექტრონ-ვოლტის რიგის. თერმების ასეთი ყოფაქცევა ნაჩვენებია ნახაზზე 20 და 21-ის პირველ ნახაზზე. იმავდროულად, თუ $U(R)$ არის $10^{-2} - 10^{-3}$ ელექტრონ-ვოლტის რიგის, მაშინ მცირე სიჩქარეების შემთხვევაშიც კი არაადიაბატური კავშირი ადიაბატურ თერმებს შორის მნიშვნელოვანია. ამრიგად, ნახაზ 20-ზე გამოსახული თერმების შემთხვევაშიც კი აგზნებული მდგომარეობის რიგითი ნომრის გაზრდასთან ერთად გადასვლის ალბათობა მეზობელ დონეებს შორის შეიძლება, მნიშვნელოვნად გაიზარდოს მაშინაც კი, როცა სიჩქარე არ იცვლება.

ზოგად შემთხვევაში ელექტრონული თერმების ყოფაქცევა ხასიათდება მნიშვნელოვანი მრავალფეროვნებით. მაგალითად, თერმები შეიძლება, მკვეთრად დაახლოვდნენ ან გადაიკვეთონ, როგორც ძალზე მცირე, ისე დიდ ბირთვშორის მანძილებზე. თერმების ასეთი ყოფაქცევა მნიშვნელოვან როლს თამაშობს გადასვლის ალბათობის გამოთვლისას. ადიაბატური თერმების მკვეთრი დაახლოების არეები,

როგორც წესი, გაზრდილი არაადიაბატური კავშირის არეებია. ამ არეებში ადიაბატურ თერმებს აქვთ გადაკვეთის ტენდენცია. თუმცა გადაკვეთებიან ისინი, თუ არა, დამოკიდებულია მათ სიმეტრიაზე (უფრო ზუსტად, ამ თერმების შესაბამისი მდგომარეობების სიმეტრიაზე). თუ მდგომარეობები ერთნაირი სიმეტრიისაა, ადიაბატური თერმები არ გადაიკვეთება, გვექნება ე. წ. ფსევდოგადაკვეთა (ან კვაზიგადაკვეთა). თუკი მდგომარეობები სხვადასხვა სიმეტრიისაა, ადიაბატური თერმები გადაიკვეთება. ნახაზზე 21 ბ ნაჩვენებია თერმების დაახლოება ორ $\delta R'$ და $\delta R''$ არეში $R = R_0'$ და $R = R_0''$ წერტილების მახლობლობაში. თუ სხვაობა თერმებს შორის $\Delta U(R)$ ისეთია, რომ ამ არეებში $\xi(R_0', \text{ან } R_0'') < 1$, ხოლო ამ არეების გარეთ $\xi(R) \approx \xi(\infty) \gg 1$, მაშინ $\delta R'$ და $\delta R''$ არეებში ხდება ადიაბატურობის დარღვევა და ეს არეები გადასვლის ლოკალური არეებია. ამრიგად, აღნიშნული არეების გარეთ გადასვლები ექსპონენციალურად მცირეა, და ისინი შიძლება, უგულვებლევყოთ იმ გადასვლებთან შედარებით, რომლებიც ხორციელდება არაადიაბატურ არეებში.

6. თერმების გადაკვეთა და ფსევდოგადაკვეთა. ლანდაუ-ზინერის ფორმულა

ელექტრონული თერმების ფსევდოგადაკვეთა და გადაკვეთა მკვეთრად ცვლის არაადიაბატური გადასვლის ალბათობას, განსაკუთრებით, თუ არაადიაბატურ არეში $\xi(R_0) = 1$. ვთქვათ, არაადიაბატური არის გარეთ ელექტრონი იმყოფება საწყისი i -ური მდგომარეობის ერთ-ერთ თერმზე პრაქტიკულად გადასვლის გარეშე. ბირთვების დაახლოების გამო, გარკვეულ მანძილზე $R = R_0$, რომელიც შეესაბამება „გადაკვეთის“ წერტილს, საწყისი i -ური და საბოლოო f მდგომარეობის ელექტრონული ველის პოტენციალები უტოლდება ერთმანეთს $U_i(R_0) \approx U_f(R_0)$. როცა ელექტრონი ხვდება ამ ველში, თითქმის ტოლი ალბათობითაა ორივე მდგომარეობაში. ასე რომ, „გადაკვეთის“ არიდან სისტემის გამოსვლის შემდეგ ელექტრონი დიდი ალბათობით (რასაკვირველია, არა უმეტეს $1/2$ -სა) შეიძლება f მდგომარეობაში იყოს.

აღვნიშნოთ კიდევ ერთი მნიშვნელოვანი ფაქტი. ერთნაირი პოტენციალური და სრული ენერჯის შემთხვევაში ერთნაირია ბირთვების იმპულსებიც. ასე რომ, გადაკვეთის არეში

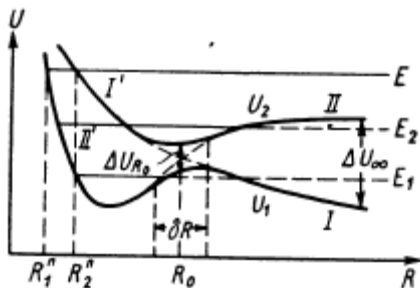
$$R_i = R_f, \quad p_i^n = p_f^n \quad (4.27)$$

სრულდება ფრანკ-კონდონის პრინციპი, რომლის თანახმადაც, „გადასვლის მომენტში“ ბირთვების იმპულსი და მათ შორის მანძილი უცვლელად რჩება.

ახლა გადავიდეთ გადასვლის ალბათობის და განიკვეთის განსაზღვრაზე.

თერმების ფსევდოგადაკვეთა $\left(\frac{\Delta U(R_0)}{\Delta U_\infty}\right) \ll 1$. ნახაზზე 22 ნაჩვენებია U_1 და U_2

ადიაბატური თერმების ფსევდოგადაკვეთა δR არეში. ბირთვებშორისი მანძილები R''_1 და R''_2 აღნიშნავენ მობრუნების წერტილებს U_1 და U_2 ადიაბატური თერმებზე მოძრაობისას E სრული ენერგიით. იმავე ნახაზზე E_1 და E_2 -ით ნაჩვენებია სრული ენერგიის ის მნიშვნელობები, როდესაც ვლინდება ფსევდოგადაკვეთის შედეგები. ასე მაგალითად, როდესაც $E = E_1$ ნაწილაკები $I - II'$ მრუდზე მოძრაობისას გადალახავენ ბარიერს, გვირაბის ეფექტით შეიძლება აღმოჩნდნენ ბმულ მდგომარეობაში (შესაძლებელია უკუპროცესიც - ბმული მდგომარეობის დაშლა). როდესაც $E = E_2$, თუ სისტემა საწყის მდგომარეობაში იმყოფებოდა $II - II'$ თერმის ბმულ მდგომარეობაში, δR არეში $I - I'$ თერმზე გადასვლით ის დაიშლება. ამ მოვლენას ეწოდება პრედისოციაცია.



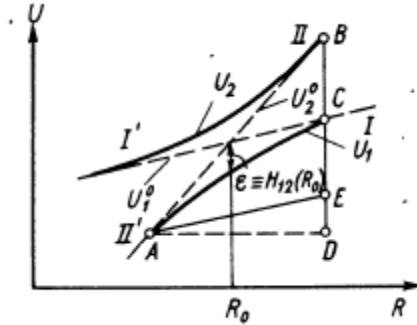
ნახ. 22. თერმების ფსევდოგადაკვეთა

ნახაზზე 23 ნაჩვენებია ფსევდოგადაკვეთის δR არე გადიდებული მასშტაბით. რომაული ციფრებით აღნიშნულია საწყისი და საბოლოო წერტილები თერმებზე. ადიაბატური თერმი U_2 შეესაბამება $II - I'$ -ს, დიაბატური თერმი U_2^0 შეესაბამება $III - II'$ -ს და ა. შ. რომელ ენაზე აღწერთ სისტემის ევოლუციას - U_{12} თერმების ენაზე, თუ U_{12}^0 თერმების ენაზე - არ არის მნიშვნელოვანი, მნიშვნელოვანია, დავადგინოთ კავშირი მათ შორის. მართლაც, მოძრაობა U_2^0 -ზე ნიშნავს რომ სისტემა დარჩა U_1 თერმზე. თუ $U_1^0 \rightarrow U_2^0$ გადასვლის ალბათობას აღვნიშნავთ P_{12}^0 -ით, ხოლო $U_1 \rightarrow U_2$ გადასვლის ალბათობას P_{12} -ით, მაშინ

$$1 - P_{12} = P_{12}^0. \quad (4.28)$$

ადრე ვთქვით, რომ გადასვლის ალბათობა დამოკიდებულია დამჯახებელი ნაწილაკების სიჩქარეზე ისე, რომ თუ δR არეს ნელა გაივლის, სისტემა ვითარდება ადიაბატურად, ხოლო δR არეს სწრაფად გაივლის - დიაბატურად.

ნახაზზე 23-ზე გამოსახული მრუდები $U_{1,2}$ და $U_{1,2}^0$ შეესაბამებიან ნელი და სწრაფი დაჯახებების ზღვრულ შემთხვევებს, როდესაც ორივე შემთხვევაში გადასვლის ალბათობა ძალზე მცირეა.



ნახ. 23. ფსევდოგადაკვეთის არე

გადასვლის ალბათობის გამოსათვლელად ვისარგებლოთ დიაბატური ფუნქციებით ψ_1^0 და ψ_2^0 , ანუ გამოვითვალოთ H_{11} და H_{22} გადამკვეთ თერმებს შორის გადასვლის ალბათობა. ჩვენ მივიღეთ განტოლებათა სისტემა ამპლიტუდისათვის ψ_n^0 ბაზისში (იხილეთ (4.26)). ჩვენ ვიხილავთ გადასვლებს ერთნაირი სიმეტრიის მქონე ორ თერმს შორის, ამიტომ არაადიაბატური კავშირის ოპერატორის ორი წევრიდან $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} = i\hbar \dot{R} \frac{\partial}{\partial R} + i\hbar \dot{\phi} \frac{\partial}{\partial \phi}$ უნდა დავიტოვოთ მხოლოდ პირველი, რადგან მეორე წევრი ერთნაირი სიმეტრიის მქონე თერმებს შორის გადასვლას არ გვაძლევს. ამ შემთხვევაში განტოლებათა სისტემა ორი მდგომარეობის ამპლიტუდებისათვის მიიღებს ამ სახეს:

$$\begin{aligned}
 i\hbar \dot{b}_1 &= b_2 \left(H_{12} - i\hbar \dot{R} \left\langle 1 \left| \frac{\partial}{\partial R} \right| 2 \right\rangle \right) \exp \left(-\frac{i}{\hbar} \int (H_{22} - H_{11}) dt \right), \\
 i\hbar \dot{b}_2 &= b_1 \left(H_{21} + i\hbar \dot{R} \left\langle 1 \left| \frac{\partial}{\partial R} \right| 2 \right\rangle \right) \exp \left(\frac{i}{\hbar} \int (H_{22} - H_{11}) dt \right),
 \end{aligned}
 \tag{4.29}$$

სადაც მატრიცული ელემენტები მოცემულია ასე:

$$\begin{aligned}
 H_{mn} &= \int \psi_n^0 \hat{H} \psi_m^0 d\vec{r} = U_n^0 + V_{mn}, \\
 H_{mn} &= \int \psi_m^0 \hat{H} \psi_n^0 d\vec{r} = \int \psi_m^0 V \psi_n^0 d\vec{r} = V_{mn}, \\
 \left\langle m \left| \frac{\partial}{\partial R} \right| n \right\rangle &= \int \psi_m^0 \frac{\partial}{\partial R} \psi_n^0 d\vec{r}.
 \end{aligned}
 \tag{4.30}$$

ჩვეულებრივ, ადიაბატური კავშირის მატრიცული ელემენტი H_{mn} გაცილებით ადრე-მატება მატრიცულ ელემენტს $\left\langle m \left| \frac{\partial}{\partial R} \right| n \right\rangle \dot{R}$, ამიტომ ეს უკანასკნელი შეიძლება უგულვებლყოთ. ამ შემთხვევაში მივიღებთ:

$$\begin{aligned} i\hbar \dot{b}_1 &= b_2 H_{12} \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int (H_{22} - H_{11}) dt'\right), \\ i\hbar \dot{b}_2 &= b_1 H_{21} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int (H_{22} - H_{11}) dt'\right). \end{aligned} \quad (4.31)$$

მიღებული განტოლებები უნდა ამოიხსნას საწყის პირობებთან ერთად

$$b_1(-\infty) = 1, \quad b_2(-\infty) = 0, \quad (4.32)$$

რაც იმას ნიშნავს, რომ დროის საწყის მომენტში სისტემა იმყოფებოდა U_1 ადიაბატურ თერმზე.

იმისათვის, რომ ამოვხსნათ (4.31) განტოლებათა სისტემა, საჭიროა, ვიცოდეთ H_{11} და H_{22} დიაბატური თერმების და H_{12} მატრიცული ელემენტის t -ზე დამოკიდებულება. ჩვეულებრივ, ზუსტი დამოკიდებულება უცნობია, ამიტომ გამოიყენება სხვადასხვა მოდელური წარმოდგენა. ერთ-ერთი მარტივი და სშირად გამოყენებადია წრფივი მოდელი. ამ მოდელის არსი ის არის, რომ გადაკვეთის δR არეში თერმები გადამკვეთი წრფეებია, ხოლო ადიაბატური კავშირის მატრიცული ელემენტი მუდმივი სიდიდეა, ტოლი მისი მნიშვნელობის გადაკვეთის წერტილში:

$$H_{11} - H_{22} = \alpha t, \quad (4.33)$$

$$H_{12} = H_{21} = \varepsilon = const. \quad (4.34)$$

$$\text{სადაც } \alpha = \left[\dot{R} \frac{\partial}{\partial R} (H_{11} - H_{22}) \right]_{R=R_0} = [(F_2 - F_1)v_R]_{R=R_0} = [\Delta F v_R]_{R=R_0}.$$

მოგვყავს (4.31) განტოლებათა სისტემის (4.33) და (4.34) პირობებით ამოხსნის საბოლოო შედეგი

$$P_{12}^0 = |b_2(\infty)|^2 = 1 - e^{-\left[\frac{2\pi\varepsilon^2}{\hbar\Delta F v_R} \right]_{R=R_0}}, \quad (4.35)$$

ან $U_1 \rightarrow U_2$ გადასვლისთვის

$$P_2 = 1 - P_{12}^0 = 1 - e^{-\left[\frac{2\pi\varepsilon^2}{\hbar\Delta F v_R} \right]_{R=R_0}}. \quad (4.36)$$

ჩვენ განვიხილეთ ერთგანზომილებიანი ამოცანა, რომელიც აღწერს მოძრაობას R -ის გასწვრივ. ნაწილაკი მოძრაობს ეფექტურ ველში, აღწევს მობრუნების წერტილს R_1^n და ბრუნდება უკან. ეს იმას ნიშნავს, რომ დაჯახებისას ბირთვები ორჯერ გაივლიან δR არაადიაბატურ არეს. ამ შემთხვევაში სისტემა საწყისი მდგომარეობიდან I მოხვდება საბოლოო მდგომარეობაში II ორი გზით. ადიაბა-

ტურ I თერმზე მოძრაობისას სისტემა აღწევს δR არეს და შეუძლია P_{12} ალბათობით გადასვლა ადიაბატურ თერმზე $II - I'$, R^n_2 ნერტილში მობრუნების შემდეგ და δR არის ხელმეორედ გავლისას სისტემას შეუძლია დარჩეს $II - I'$ თერმზე $(1 - P_{12})$ ალბათობით. ამრიგად, $I - I' - II$ გზით მოძრაობისას საბოლოო მდგომარეობაში სისტემა ხვდება $P_{12}(1 - P_{12})$ ალბათობით. სასტემის განვითარების მეორე ვარიანტი დაკავშირებულია $I - II' - II$ სქემასთან. ამ გადასვლის ალბათობა არის $(1 - P_{12})P_{12}$. თუ არაადიაბატურ δR არეს ორჯერ გაივლის, სრული ალბათობა იქნება

$$W_{12} = 2P_{12}(1 - P_{12}) = 2(1 - P_{12}^0)P_{12}^0. \quad (4.37)$$

მიღებული ფორმულა

$$W_{12} = 2e^{-\frac{2\pi\epsilon^2}{\hbar\Delta F v_{R_0}}} \left(1 - e^{-\frac{2\pi\epsilon^2}{\hbar\Delta F v_{R_0}}} \right) \quad (4.38)$$

არის ლანდაუ-ზინერის ფორმულა. მოდი, განვიხილოთ ეს ფორმულა. მისი სტრუქტურა ისეთია, რომ სრულ ალბათობას აქვს მაქსიმუმი $W_{\max} = 1/2$ როცა $P = 1/2$. მაქსიმუმიდან W_{12} მცირდება როგორც $P_{12} \rightarrow 1$, ისე $P_{12} \rightarrow 0$ შემთხვევაში. გადასვლის ალბათობა P_{12} მნიშვნელოვნად არის დამოკიდებული ამოცანის პარამეტრებზე:

ა) $\Delta F = \left| \frac{dH_{11}}{dR} - \frac{dH_{22}}{dR} \right|_{R=R_0}$ - ძალთა სხვაობაზე, ბ) $\Delta = 2\epsilon = 2H_{12}$ - თერმებს შორის მანძილზე, გ) v_{R_0} - რადიალურ სიჩქარეზე თერმების გადაკვეთის ნერტილში.

მცირე სიჩქარეებზე გადასვლის ალბათობა ექსპონენციალურად მცირეა

$W_{12} = \exp\left(-\frac{2\pi\epsilon^2}{\hbar\Delta F v_{R_0}}\right)$. მეორე ზღვრულ შემთხვევაში, ანუ დიდი სიჩქარეების შემთხვევაში, ექსპონენტა შეიძლება გაიშალოს მწკრივად, და პირველი ორი წევრის გათვალისწინებით მივიღებთ:

$$W_{12} \approx \frac{2\pi\epsilon^2}{\hbar\Delta F v_{R_0}}. \quad (4.39)$$

როგორც ვხედავთ, H_{11} და H_{22} თერმებს შორის გადაცვლის ალბათობა ამ შემთხვევაშიც მცირეა. მცირე სიჩქარეებისაგან განსხვავებით, გადასვლის ალბათობა არა ექსპონენციალურად, არამედ ხარისხობრივად მცირეა, რაც დამახასიათებელია შეშფოთების თეორიით მიღებული შედეგისთვის.

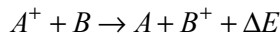
დაბოლოს, წრფივი მოდელის გამყენების არე განისაზღვრება ორი პირობით:

$$\frac{\Delta U(R_0)}{\Delta U_\infty} = \frac{2\varepsilon}{\Delta U_\infty} \ll 1, \quad \xi(R_0) \ll \xi(\infty), \quad (4.40)$$

ანუ მანძილი ადიაბატურ თერმების შორის δR არეში უნდა იყოს გაცილებით მცირე თერმებს შორის მანძილზე უსასრულობაში, ხოლო არაადიაბატური კავშირი უნდა იყოს ლოკალიზებული ფსევდოგადაკვეთის არეში.

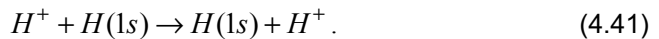
7. რეზონანსული გადამუხტვა

გადამუხტვა არის იონიდან ნეიტრალურ ატომზე ერთი ან რამდენიმე მუხტის გადატანის პროცესი



ამ პროცესში ხდება ელექტრონის გადასვლა B ატომიდან A^+ იონზე. ამ დროს თავდაპირველად ენერგია იხარჯება ელექტრონის B ატომიდან ამოგდებაზე, ხოლო შემდეგ ენერგია გამოიყოფა ელექტრონის A^+ იონთან ბმული მდგომარეობის შექმნის გამო. თუ A და B სხვადასხვა ატომებია, $\Delta E = I_B - I_A \neq 0$ და დაჯახების მცირე სიჩქარეებზე გადამუხტვის ალბათობა ექსპონენციალურად მცირეა (მესის პარამეტრი $\xi(R) \gg 1$).

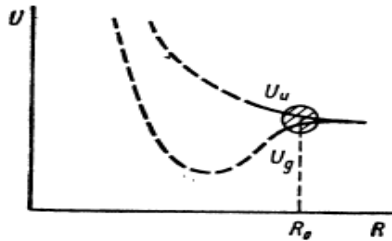
თუ კი $B \equiv A$ და $\Delta E = 0$, გვაქვს რეზონანსული გადამუხტვა. განვიხილოთ რეზონანსული გადამუხტვის უმარტივესი ვარიანტი – წყალბადის ატომის პროტონზე გადამუხტვა s – მდგომარეობაში



დიდ მანძილებზე, როდესაც ატომი და იონი პრაქტიკულად არ ურთიერთქმედებენ, ელექტრონი აღინერება ერთ-ერთ ბირთვზე ცენტრირებული ატომური ტალღური ფუნქციით. ბირთვების მიახლოების შემდეგ დანყებული გარკვეული R_0 მანძილიდან მნიშვნელოვანი ხდება ატომური ნაწილაკების ურთიერთქმედება. ამ მომენტიდან „ჩაირთვება“ მოლეკულური კავშირი და სისტემა უნდა აღინეროს მოლეკულური ფუნქციით. ამ მანძილიდან ელექტრონს შეუძლია, გადავიდეს ერთი პოტენციალური ორმოდან მეორეში, და ამიტომ ხდება „საერთო“. მდგომარეობის ასეთი ცვლა იწვევს ელექტრონული თერმის გახლეჩას U_g და U_u თერმებად. ამ თერმებს შორის სხვაობა გაცვლითი ურთიერთქმედების პოტენციალის ტოლია $U_{exc} = U_u - U_g$. ბირთვების შემდგომი მიახლოება იწვევს ელექტრონის ერთი ბირთვიდან მეორეზე გადახტომის სიხშირის U_{exc} / \hbar -ის ზრდას. ნაწილაკების მაქსიმალური დაახლოების და შემდგომ მათი დაშორებისას გადასვლის სიხშირე მცირდება და $R = R_0$ მანძილის მიღწევის შემდეგ ელექტრონი რჩება ერთ-ერთ ბირთვზე $P = 1/2$ ტოლი ალბათობით. ამრიგად, გადამუხტვის განივკვეთი შეიძლება შეფასდეს, როგორც

$$\sigma \approx \pi R_0^2, \quad (4.42)$$

ხოლო რეზონანსული გადამუხტვის ამოცანა დაყვანილი იქნას იმ R_0 მანძილის განსაზღვრამდე, რომელზეც ფორმირდება ასიმპტოტური მოლეკულური ფუნქცია. ასეთი ტალღური ფუნქცია აიგება ატომური ტალღური ფუნქციებით, როგორც მათი



ნახ. 24. ატომური ფუნქციების მოლეკულურ ფუნქციებად გადაწყობის არე

სიმეტრიული ψ_g და ანტისიმეტრიული ψ_u კომბინაციები. ნახაზზე 24 ნაჩვენებია ამ ფუნქციების შესაბამისი ელექტრონული თერმები. ცხადია, რომ ატომური ფუნქციების მოლეკულურ ფუნქციებად გარდაქმნის არე მდებარეობს იქ, სადაც თერმები იხლიჩება U_g და U_u კომპონენტებად, ხოლო ერთი ბირთვიდან მეორეზე ელექტრონის გადასვლის სიხშირე არ არის დაჯახების სიხშირეზე ნაკლები

$$\frac{U_{exc}}{\hbar} \approx \frac{\nu}{R_0}. \quad (4.43)$$

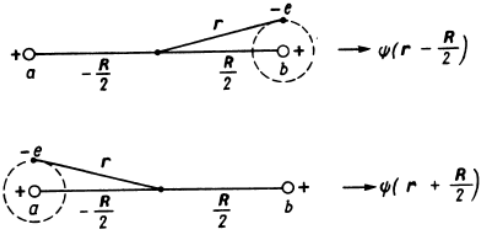
ამ არეში მანძილი U_g და U_u თერმებს შორის გაცილებით მცირეა მანძილზე მეზობელ ელექტრონულ თერმს შორის, ამიტომ ამ არეში გადასვლის ამოცანა შეიძლება განვიხილოთ სხვა მდგომარეობების გათვალისწინების გარეშე. ამრიგად, დროზე დამოკიდებული სრული ტალღური ფუნქცია შეიძლება წარმოვიდგინოთ ამ სახით:

$$\Psi = c_g(t)\psi_g e^{-\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t U_g dt'} + c_u(t)\psi_u e^{-\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t U_u dt'}, \quad (4.44)$$

სადაც

$$\psi_{g,u} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\psi \left(\vec{r} - \frac{\vec{R}}{2} \right) \pm \psi \left(\vec{r} + \frac{\vec{R}}{2} \right) \right].$$

აქ $\psi(\vec{r} - \vec{R}/2)$ აღწერს ელექტრონის მოძრაობას “b” ბირთვის ველში, ხოლო $\psi(\vec{r} + \vec{R}/2)$ – “a” ბირთვის ველში, როგორც ეს ნაჩვენებია 25-ე ნახაზზე.



ნახ. 25. ელექტრონის შესაძლო მდებარეობები და შესაბამისი ტალღური ფუნქციები

ორი დონის მიახლოებაში ამოცანის ამოსხნისას შემდგომი ნაბიჯი ჩვეულებრივ იყო $i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hat{H}\Psi$ განტოლებაში (4.44) გაშლის ჩასმით განტოლებების სისტემის მიღება ამპლიტუდებისათვის. ასეთი სისტემა ჩვენ მიერ უკვე მიღებული იყო (იხ. (4.14)). ვინაიდან გადასვლა U_g და U_u თერმებს შორის პრაქტიკულად შეუძლებელია სხვადასხვა სიმეტრიის გამო, თუ სისტემა საწყის მომენტში ($t = -\infty$) იმყოფება ψ_g მდგომარეობაში, იმავე მდგომარეობაში იქნება, როდესაც $t = +\infty$. იგივე შეიძლება ითქვას ψ_u მდგომარეობის შესახებ. ამრიგად,

$$c_{g,u}(t = -\infty) = \frac{1}{\sqrt{2}} \rightarrow c_{g,u}(t = +\infty) = \frac{1}{\sqrt{2}}$$

რაც იმას ნიშნავს, რომ მოლეკულური მდგომარეობების ამპლიტუდები არ იცვლება დაჯახების მთელი დროის განმავლობაში. ჩვენი ამოცანა კი ელექტრონის ერთი ბირთვიდან მეორეზე გადასვლის ალბათობის განსაზღვრა, ანუ ატომური ფუნქციების $\psi\left(\vec{r} - \frac{\vec{R}}{2}\right)$ და $\psi\left(\vec{r} + \frac{\vec{R}}{2}\right)$ გაშლის კოეფიციენტების განსაზღვრაა. ამ მიზნით სრული ტალღური ფუნქცია (4.44) საბოლოო მდგომარეობაში ჩავენროთ ისეთი სახით, რომ მასში ფიგურირებდნენ სასურველი კოეფიციენტები:

$$\begin{aligned} \Psi(+\infty) &= \frac{1}{2} \left[\psi\left(\vec{r} - \frac{\vec{R}}{2}\right) + \psi\left(\vec{r} + \frac{\vec{R}}{2}\right) \right] e^{-\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} U_g dt} + \\ &+ \frac{1}{2} \left[\psi\left(\vec{r} - \frac{\vec{R}}{2}\right) - \psi\left(\vec{r} + \frac{\vec{R}}{2}\right) \right] e^{-\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} U_u dt} = \\ &= \frac{1}{2} \left[e^{-\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} U_g dt} + e^{-\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} U_u dt} \right] \psi\left(\vec{r} - \frac{\vec{R}}{2}\right) + \\ &+ \frac{1}{2} \left[e^{-\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} U_g dt} - e^{-\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} U_u dt} \right] \psi\left(\vec{r} + \frac{\vec{R}}{2}\right). \end{aligned} \tag{4.45}$$

შემოვიტანოთ სანყისი პირობები. ვთქვათ, სანყის მომენტში $t = -\infty$ ელექტრონი იმყოფება b ბირთვთან (იხ. ნახაზი 25). ამ შემთხვევაში (4.45)-ში $\psi\left(\vec{r} - \frac{\vec{R}}{2}\right)$ -ის წინ მდგომი კოეფიციენტი განსაზღვრავს იონის ატომზე დრეკადი გაბნევის ამპლიტუდას (ელექტრონი რჩება საკუთარ ბირთვთან), $\psi\left(\vec{r} + \frac{\vec{R}}{2}\right)$ -ის წინ მდგომი კოეფიციენტი კი გვაძლევს საბოლოო მდგომარეობაში გადამუხტვის ამპლიტუდას. უნდა გვახსოვდეს, რომ მიღებული გამოსახულებები სამართლიანია ასიმპტოტიკაში, მაგრამ ეს არ ამცირებს მათ მნიშვნელობას, რადგან ატომურ ნაწილაკებს შორის გადამუხტვის პროცესები მიმდინარეობს დიდ მანძილებზე. ამრიგად, გადამუხტვის ალბათობა ტოლია

$$W = \left| \frac{1}{2} \left(e^{-\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} U_g dt} - e^{-\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} U_u dt} \right) \right|^2 = \sin^2 \frac{1}{\hbar} \int_0^{\infty} (U_u - U_g) dt. \quad (4.46)$$

დიდ მანძილებზე სხვაობა $U_{exc} = U_u - U_g$ ცნობილია:

$$U_u - U_g = A \operatorname{Re} e^{-R/a_0}, \quad (4.47)$$

სადაც

$$A = 4 \frac{e^2}{a_0^2} \exp(-1).$$

მიღებული (4.46) და (4.47) ფორმულებიდან ჩანს, რომ W ოსცილირებადი ფუნქციაა და რომ ოსცილირების სიხშირე იზრდება ბირთვშორის R მანძილის შემცირებისას. ეს საშუალებას გვაძლევს, გარკვეული $\rho < R_0$ შემდეგ W შევცვალოთ მისი საშუალო მნიშვნელობით

$$\bar{W}_{\rho \leq R_0} = \sin^2 \frac{1}{\hbar} \int_0^{\infty} (U_u - U_g) dt = \frac{1}{2}, \quad (4.48)$$

რაც შესაძლებელია, თუ ამ არეში სინუსის ფაზა

$$\Phi = \frac{1}{\hbar} \int_0^{\infty} (U_u - U_g) dt \equiv \frac{1}{\hbar} \int_0^{\infty} U_{exc} dt \gg 1. \quad (4.49)$$

შევაფასოთ ფაზის მნიშვნელობა, როცა $\rho \gg R_0$. ამისათვის შემოვიტანოთ დამოკიდებულება R -სა და t -ს შორის. დავუშვათ, რომ ტრაექტორიის წრფივი აპროქსიმაცია სავსებით დამაკმაყოფილებელია:

$$R^2 = \rho^2 + (vt)^2, \quad (4.50)$$

და

$$dt = \frac{RdR}{v\sqrt{R^2 - \rho^2}}.$$

თუ გამოვიყენებთ U_{exc} -ის (4.47) მნიშვნელობას, ფაზისათვის მივიღებთ

$$\Phi = \frac{A}{\hbar v} \int_{\rho}^{\infty} e^{-\frac{R}{a_0}} R^2 dR = [R = \rho(z+1)] = \frac{A\rho^2 e^{-\frac{\rho}{a_0}}}{\hbar v} \int_0^{\infty} e^{-\frac{\rho z}{a_0}} \frac{\rho z}{\sqrt{z(z+2)}} dz. \quad (4.51)$$

$z=0$ - განსაკუთრებული წერტილია. თუ ინტეგრალქვეშა გამოსახულებას გავშლით მწკრივად $z=0$ -ს ახლოს და შემოვიფარგლებით რამდენიმე საწყისი წევრით, მივიღებთ

$$\begin{aligned} \Phi(\rho, v) &= \frac{A\rho^2 e^{-\frac{\rho}{a_0}}}{\sqrt{2\hbar v}} \int_0^{\infty} e^{-\frac{\rho z}{a_0}} \frac{\rho z}{\sqrt{z}} dz = \frac{A\rho^2 e^{-\frac{\rho}{a_0}}}{\sqrt{2\hbar v}} \sqrt{\frac{a_0}{\rho}} \Gamma(1/2) = \\ &= \sqrt{\frac{\pi a_0}{2}} \frac{A}{\hbar v} \rho^{3/2} e^{-\frac{\rho}{a_0}} = \sqrt{\frac{\pi a_0 \rho}{2}} \frac{U_{exc}(\rho)}{\hbar v} \sim \frac{u}{v} e^{-\frac{\rho}{a_0}}. \end{aligned} \quad (4.52)$$

ამრიგად, როცა $\rho \gg R_0 \gg a_0$

$$\Phi(\rho, v) = \frac{1}{\hbar} \int_0^{\infty} U_{exc} dt \ll 1. \quad (4.53)$$

ბუნებრივია, დავუშვათ, რომ $\rho \approx R_0$ -სათვის

$$\Phi(\rho, v) = \frac{1}{\hbar} \int_0^{\infty} U_{exc} dt \approx 1, \quad (4.54)$$

რაც არის R_0 -ის განსაზღვრის პირობა.

პირობიდან (4.53) გამომდინარეობს, რომ

$$W(\rho \gg R_0) = \sin^2 \Phi(\rho, v) = \Phi^2(\rho, v) \ll 1. \quad (4.55)$$

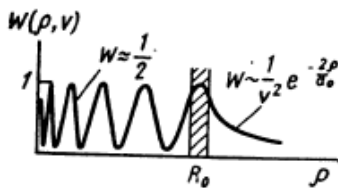
ასე რომ, შორეულ დაჯახებებს არ შეაქვთ წვლილი გადამუხტვის ალბათობაში. 26-ე ნახაზიდან ჩანს, რომ $\rho \approx R_0$ მნიშვნელობების არე ზემოდან შემოსაზღვრავს გადამუხტვის ალბათობაში მნიშვნელოვანი წვლილის შემომტან არეს. ამრიგად, გადამუხტვის განიკვეთი შეიძლება ამ სახით წარმოვიდგინოთ:

$$\sigma = 2\pi \int_0^{\infty} \rho d\rho \sin^2 \left(\int_0^{\infty} U_{exc} dt \right) = 2\pi \int_0^{R_0} \frac{1}{2} \rho d\rho = \frac{\pi R_0^2}{2}. \quad (4.56)$$

თუ გავითვალისწინებთ (4.54) და (4.52), მივიღებთ

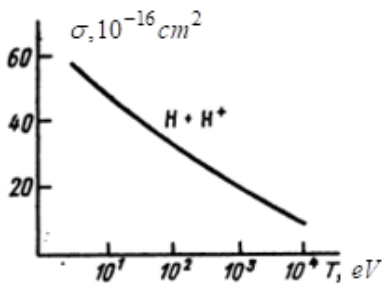
$$\begin{aligned} R_0 &\approx a_0 \ln \frac{u}{v}, \\ \sigma &= \frac{\pi R_0^2}{2} \approx a_0^2 \ln^2 \left(\frac{u}{v} \right), \end{aligned} \quad (4.57)$$

სადაც u ბმული ელექტრონის სიჩქარეა, ხოლო v დამჯახებელი ნაწილაკების ფარდობითი სიჩქარეა. ამრიგად, სიჩქარის შემცირებისას განიკვეთი იზრდება და მცირე მნიშვნელობებზე შეიძლება მნიშვნელოვნად გადააჭარბოს დამჯახებელი ნაწილაკების გეომეტრიულ განიკვეთს.

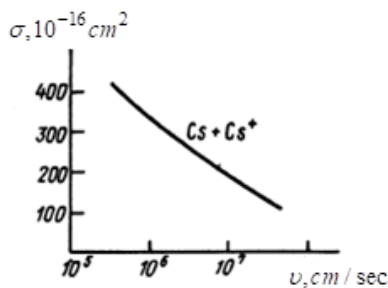


ნახ. 26. $W(\rho, v)$ -ს დამოკიდებულება ρ -ზე

ნახაზებზე 27 და 28 ნაჩვენებია წყალბადის და ცეზიუმის ატომების რეზონანსული გადამუხტვის განიკვეთები საკუთარ იონებზე. რეზონანსული გადამუხტვა შეიძლება განვასხვაოთ დრეკადი გაფანტვისაგან მხოლოდ იონების კუთხური განაწილებით. გადამუხტვის დროს შორეულ დაჯახებებს შეაქვთ



ნახ. 27. რეზონანსული გადამუხტვის განიკვეთი: $H + H^+$



ნახ. 28. რეზონანსული გადამუხტვის განიკვეთი: $Cs + Cs^+$

ძირითადი წვლილი განიკვეთში, ამიტომ იონი, რომელმაც ჩაიჭირა ელექტრონი, აგრძელებს მოძრაობას წინ როგორც ნეიტრალური ატომი, ხოლო წარმოქმნილი იონი მოძრაობს საწყისი მიმართულების მიმართ მართი კუთხით. ამრიგად, გადამუხტვის შედეგად მიღებული იონები ფიქსირდებიან მართი კუთხით მაშინ, როდესაც დრეკადად გაფანტული იონები, ძირითადად, წინ განიზნევიან.

8. კვაზირეზონანსული პროცესები. როზენ-ზინერის ფორმულა

ამ პარაგრაფში განვიხილავთ გადასვლის პროცესებს, როდესაც ელექტრონული თერმები უახლოვდებიან ერთმანეთს ატომურ ნაწილაკებს შორის მანძილის გაზრდისას. რეზონანსის დეფექტი თუმცა არ უდრის ნულს, მაგრამ იმდენად მცირეა, რომ სრულდება პირობა $\Delta E \ll \Delta U (R \sim a_0)$. თერმების ასეთი ყოფაქცევა ორი დონის შემთხვევაში ნაჩვენებია 21ვ ნახაზზე. როგორც ნახაზიდან ჩანს, დიდ მანძილებზე ($R = \infty$), იქ, სადაც ატომური ნაწილაკები არ ურთიერთქმედებენ, $\Delta U_\infty = \Delta E \neq 0$. ბირთვებს შორის მანძილის შემცირებისას ჩაირთვება ურთიერთქმედება, რომელიც იწვევს თერმების დაშორებას. $R = R_1$ მანძილზე, იქ, სადაც $\Delta U(R)$ დაახლოებით უტოლდება ΔE , მდებარეობს არაადიაბატური გადასვლების არე. გადამუხტვა, რომელსაც ჩვენ ვიხილავთ, წარმოადგენს კვაზირეზონანსული რეაქციის მაგალითს. მას ხშირად შემთხვევით რეზონანსსაც უწოდებენ. აქ გულისხმობენ იმას, რომ დამჯახებელი ნაწილაკები ისე შეიჩრა, რომ რეზონანსის დეფექტი შემთხვევით აღმოჩნდა მცირე.

გადამუხტვის ამოცანა მნიშვნელოვნად მარტივდება იმ ფაქტით, რომ $R \sim R_1$ მანძილზე თერმების გახლეჩა მნიშვნელოვნად ნაკლებია სისტემის ელექტრონული ენერჯის მახასიათებელ სიდიდეზე, ე.ი. $\Delta U(R_1) \ll \Delta U (R \sim a_0)$. ეს იმას ნიშნავს, რომ უახლოესი ენერგეტიკული დონეები მნიშვნელოვნად არიან დაშორებული. ამიტომ ისინი, შეიძლება, არ გავითვალისწინოთ. ორი s - მდგომარეობაში მყოფი ნაწილაკის გადამუხტვის შემთხვევაში მხოლოდ ორი მდგომარეობა არის ძლიერად დაკავშირებული. ამ შემთხვევაში დიაბატურ ბაზისში განტოლებათა სისტემა ამპლიტუდებისათვის ისეთივეა, როგორც (4.31)

$$\begin{aligned} i\hbar\dot{c}_1 &= c_2 H_{12} e^{-\frac{i}{\hbar} \int_0^t (H_{22} - H_{11}) dt'} , \\ i\hbar\dot{c}_2 &= c_1 H_{21} e^{-\frac{i}{\hbar} \int_0^t (H_{11} - H_{22}) dt'} . \end{aligned} \quad (4.58)$$

რასაკვირველია, ამ განტოლებათა სისტემაში პარამეტრები შეესაბამება მოცემულ ამოცანას. ზოგად შემთხვევაში გვექნება

$$H_{22} - H_{11} = \text{const} = \Delta E , \quad (4.59)$$

$$2H_{12} = U_{exc} \sim R^\gamma e^{-\frac{2}{a_0} R} .$$

არაადიაბატური კავშირის არის მდებარეობა და, შესაბამისად, კვაზირეზონანსული პროცესის მახასიათებელი ზომა განვსაზღვროთ პირობით

$$2H_{12}(R_1) = H_{22}(R_1) - H_{11}(R_1) . \quad (4.60)$$

როგორც რეზონანსული გადამუხტვის შემთხვევაში. მანძილი, რომელზეც ელექტრონი მნიშვნელოვანი ალბათობით გადადის ერთი ცენტრიდან მეორეზე, განისაზღვრება გადასვლის სიხშირის და დაჯახების „სიხშირის“ ტოლობის პირობით

$$\frac{1}{\hbar v} \sqrt{\frac{\pi a_0 R_0}{2\gamma}} U_{exc} = 0.28, \quad (4.61)$$

სადაც $\gamma = \left(\frac{I}{R_y}\right)^{1/2}$, ხოლო I ატომის იონიზაციის პოტენციალია.

გადასვლის R_1 არის ახლოს (4.58) განტოლებათა სისტემის ამოხსნა გადამუხტვის ალბათობისათვის არაადიაბატური არის ორჯერ გავლისას გვაძლევს

$$W = \frac{\sin^2 \eta}{ch^2 \left(\frac{\pi \Delta U_{\infty} a_0}{2\gamma \hbar v_R} \right)}, \quad (4.62)$$

სადაც

$$\eta = \frac{1}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} H_{12} dt. \quad (4.63)$$

ალბათობის ეს ფორმულა, როდესაც $\sin^2 \eta = 1/2$, ხოლო დამჯავებელი ნაწილაკები მოძრაობენ სწორხაზოვან ტრაექტორიებზე,

$$R^2 = \rho^2 + (vt)^2, \\ v_R = v \sqrt{1 - \frac{\rho^2}{R^2}},$$

მიიღეს როზენმა და ზინერმა.

გადამუხტვის განიკვეთის გამოსათვლელად

$$\sigma = 2\pi \int_0^{R_1} W \rho d\rho = 2\pi \int_0^{R_1} \frac{\sin^2 \eta}{ch^2 \left(\frac{\pi \Delta U_{\infty} a_0}{2\gamma \hbar v_R} \right)} \rho d\rho \quad (4.64)$$

$\sin^2 \eta$ დამოკიდებულება ρ -ზე წარმოვადგინოთ შემდეგი სახით

$$\sin^2 \eta = \begin{cases} \frac{1}{2}, & \rho < R_0, \\ 0, & \rho > R_0, \end{cases} \quad (4.65)$$

სადაც R_0 სამიზნე მანძილის ის ზღვრული მნიშვნელობაა, სადამდეც ფაზა η დიდა და $\sin^2 \eta$ შეიძლება შეიცვალოს $1/2$ -ით; $\sin^2 \eta$ ფუნქციის ასეთ აპროქსიმაციას მივყავართ გადამუხტვის განიკვეთის ორ მნიშვნელობამდე

$$\sigma = \begin{cases} \int_0^{R_0} \frac{\pi \rho d \rho}{ch^2 \left(\frac{\pi \Delta U_\infty a_0}{2\gamma \hbar v_R} \right)}, & R_0 < R_1, \\ \int_0^{R_1} \frac{\pi \rho d \rho}{ch^2 \left(\frac{\pi \Delta U_\infty a_0}{2\gamma \hbar v_R} \right)}, & R_0 > R_1. \end{cases} \quad (4.66)$$

ამრიგად, $R_0 < R_1$ შემთხვევაში გადამუხტვის განივკვეთი შეიძლება წარმოვიდგინოთ ამ სახით:

$$\sigma \approx \frac{\pi R_0^2}{2}, \quad (4.67)$$

სადაც R_0 განისაზღვრება (4.61) პირობით.

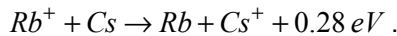
იმ შემთხვევაში, როცა $R_0 > R_1$

$$\sigma \approx \frac{\pi R_1^2}{2} f\left(\frac{\pi \Delta U_\infty a_0}{2\gamma \hbar v}\right), \quad (4.68)$$

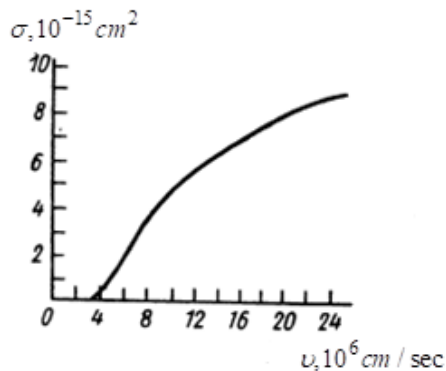
სადაც $f(\alpha)$ ტაბულირებული ფუნქციაა, რომელიც ტოლია

$$f(\alpha) = \int_0^1 \frac{2x dx}{ch^2\left(\frac{\alpha}{x}\right)}. \quad (4.69)$$

მცირე რეზონანსული დეფექტის არსებობისას არარეზონანსული გადამუხტვის განივკვეთის გამოთვლის საილუსტრაციოდ განვიხილოთ Rb იონის გადამუხტვა Cs ატომზე



ამ რეაქციის განივკვეთი გამოთვლილი (4.67) ტიპის ფორმულით ნაჩვენებია 29-ე ნახაზზე.

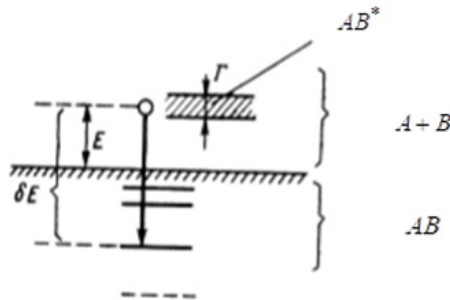


ნახ. 29. Rb^+ -ის იონის Cs -ის ატომზე გადამუხტვის განივკვეთი

27, 28 და 29 ნახაზებზე მოტანილი განივკვეთების შედარება გვიჩვენებს, რომ სიჩქარეზე დამოკიდებულების ხასიათი მნიშვნელოვნად განსხვავებულია. რეზონანსული გადამუხტვის განივკვეთი იზრდება სიჩქარის შემცირებისას, რაც, ჩვეულებრივ, დამახასიათებელია დრეკადი დაჯახებისათვის მაშინ, როდესაც არარეზონანსული გადამუხტვის განივკვეთი გადის მაქსიმუმზე. ეს დამახასიათებელია არადრეკადი გაფანტვისათვის. ორივე შემთხვევაში სიჩქარეთა განხილულ არეში განივკვეთი მნიშვნელოვნად აღემატება ატომების გეომეტრიულ ზომებს. ჩვენ განვიხილეთ შემთხვევა, როდესაც ორივე ნაწილაკი იმყოფებოდა s – მდგომარეობაში. თუ ერთი ნაწილაკი ან ორივე იმყოფება p – მდგომარეობაში, დონეების რაოდენობა იზრდება და ამოცანა რთულდება.

თავი V. რეკომბინაცია და მათან დაკავშირებული პროცესები

ტერმინი „რეკომბინაცია“ აერთიანებს ელემენტარულ პროცესებს, რომლებსაც მივყავართ ორი ურთიერთქმედებამდე თავისუფლად მოძრავი ნაწილაკის ბმული მდგომარეობის შექმნამდე. ამრიგად, რეკომბინაციის დროს ხდება გადასვლა უწყვეტი სპექტრის მდგომარეობიდან (თავისუფალი ფარდობითი მოძრაობა) დისკრეტული სპექტრის ერთ-ერთ მდგომარეობაში უფრო დაბალი ენერგიით, რომელიც ამ ნაწილაკების ბმული მდგომარეობაა; ანუ, როგორც ამბობენ, ხდება თავისუფალ-ბმული გადასვლა (იხილე ნახ. 30). სრული ენერგია უნდა შეინახოს, ამიტომ ენერგიის δE პორცია, რომელიც გამოიყოფა თავისუფალ-ბმული გადასვლისას უნდა გამისხივდეს კვანტის სახით η სიხშირით, ან გამოსხივების გარეშე გადაეცეს რომელიმე „მესამე სხეულს“, რომლის არსებობაც აუცილებელია სრული ენერგიის შესანახად.



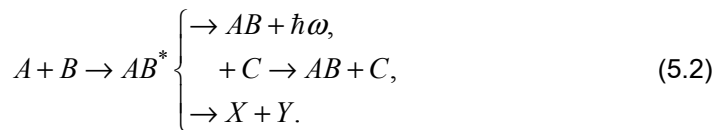
ნახ. 30. თავისუფალ-ბმული გადასვლა

ამგვარად, შესაძლებელია რეკომბინაციის რეაქციის ეს სქემები:

$$A + B \begin{cases} \rightarrow AB + \hbar\omega, \\ + C \rightarrow AB + C. \end{cases} \quad (5.1)$$

რეკომბინაციის პროცესი შეიძლება მიმდინარეობდეს შუალედური კომპლექსის წარმოქმნითაც. თუ AB სისტემას აქვს კვაზისტაციონარული მდგომარეობა AB^* ენერგიით E და სიგანით Γ (იხილე ნახ. 30), ხოლო ფარდობითი მოძრაობის ენერგია ახლოსაა E -თან (სიგანის სიზუსტით), მაშინ შესაძლებელია ამ მდგომარეობის შექმნა დაჯახების პროცესში. ამ აგზნებულ მდგომარეობას, რომელიც, ზოგადად რომ ვთქვათ, უწყვეტ სპექტრშია, აქვს დროის მარაგი $\tau \sim \hbar / \Gamma$, რათა მოხდეს სტაბილიზაცია – რაიმე პროცესი, რომელიც გაათავისუფლებს აგზნებულ AB^* სისტემას ზედმეტი ენერგიისაგან და, ამრიგად, „ჩამოსწევს“ AB სისტემის მდგომარეობას დისკრეტულ სპექტრში. სტაბილიზაციის პროცესი შეიძლება იყოს კვანტის გამოსხივება, დაჯახება ნაწილაკთან, ან AB^* აგზნებული სისტემის დაშლა შემადგენელ ნაწილაკებად, რომლებიც განსხვავდებიან სანყის ნაწილაკებისაგან. მხოლოდ სტაბილიზაციის ეტაპის შემდეგ შეიძლება ჩაითვალოს რეკომბინაცია შემდგარად. თუ

სტაბილიზაცია არ ხდება, AB^* სისტემა იშლება სანყის A და B ნაწილაკებად ფარდობითი მოძრაობის E ენერგიით. ამრიგად, ვიღებთ რეკომბინაციის პროცესის ამ სქემას:



რეკომბინაციის პროცესის წარმოდგენა დროში განცალკევებულ ორ აქტად – A ნაწილაკის ჩაჭერა B ნაწილაკის მიერ (ან პირიქით) და შემდგომი სტაბილიზაცია – საშუალებას გვაძლევს, რეკომბინაციის განივკვეთი წარმოვიდგინოთ, როგორც ჩაჭერის განივკვეთის (კვაზისტაციონარული მდგომარეობის შექმნა) ნამრავლი შემდგომი სტაბილიზაციის ალბათობაზე

$$\sigma_{recomb} = \sigma_{capt} P_{stab}. \quad (5.3)$$

უნდა აღვნიშნოთ, რომ (5.1) დ (5.2) რეაქციებში მესამე სხეული C შეიძლება იყოს ნებისმიერი ობიექტი რომლთანაც ურთიერთქმედებენ A და B ნაწილაკები: ელექტრონი, ატომი, მოლეკულა ან მაკროსკოპული სხეული, მაგალითად, ჭურჭლის კედელი, აეროზოლის მყარი ან თხევადი ნაწილაკი და ა. შ.

პლაზმის კინეტიკაში ძალზე მნიშვნელოვანია დამუხტული ნაწილაკების ელექტრონების, დადებითი და უარყოფით იონების წარმოქმნის და კვდომის რეაქციები. ამ რეაქციებს განვიხილავთ უფრო დანვრილებით.

(5.1) სქემის მიხედვით მიმდინარეობს ფოტორეკომბინაციის და სამმაგი რეკომბინაციის პროცესი ელექტრონზე:



(5.2) სქემას შეესაბამება ეს პროცესები: დიელექტრონული რეკომბინაცია



(A^{**} აღნიშნავს ატომის ავტოიონიზაციურ მდგომარეობას); მოლეკულური იონის დისოციაციური რეკომბინაცია



რეკომბინაციის პროცესების კლასს მიეკუთვნება მოლეკულური იონების შექმნაც ატომური იონებისაგან სამჯერადი დაჯახებების დროს



და მოლეკულების შექმნა ატომებისაგან (5.1) სქემით.

რეკომბინაციის თეორიის ამოცანაა წყვილური რეკომბინაციის პროცესების განვკვეთების განსაზღვრა და (ან) რეკომბინაციის კოეფიციენტის დადგენა, რომელიც ახასიათებს გარკვეული ტიპის ნაწილაკების გაქრობის სიჩქარეს. მაგალითად, ელექტრონების i ტიპის იონებთან რეკომბინაციის კოეფიციენტი α_{ei} განისაზღვრება ისე, რომ სიდიდე $\alpha_{ei} N_e N_i$ წარმოადგენს ელექტრონების i ტიპის იონებთან

რეკომბინაციის აქტების რიცხვს მოცულობისა და დროის ერთეულში. რეკომბინაციის სრული კოეფიციენტი α_e კი ერთგვაროვან და კვაზინეიტრალურ პლაზმაში განისაზღვრება თანაფარდობებით (მიჩნეულია, რომ იონიზაციის პროცესები არ ხორციელდება)

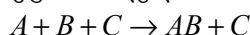
$$-\frac{dN_e}{dt} = N_e \sum_i \alpha_{ei} N_i^+ = N_e \alpha_e \sum_i N_i^+, \quad (5.9)$$

$$N_e = \sum_i N_i^+ Z_i, \quad \alpha_e = \sum_i \alpha_{ei} \frac{N_i^+}{\sum_j N_j^+}.$$

აქ N_e და N_i^+ ელექტრონების და i ტიპის იონების კონცენტრაციებია, ხოლო Z_i იონის მუხტია. ადვილი შესამჩნევია, რომ ნებისმიერი პროცესები, რომლებიც მოქმედებენ პლაზმაში იონების შემადგენლობაზე, იმავდროულად, მოქმედებენ ელექტრონების რეკომბინაციის კოეფიციენტზე.

1. სამმაგი რეკომბინაცია ტომსონის სქემით

სამმაგი რეკომბინაციის პროცესის ერთ-ერთი მარტივი და ძალზე პროდუქტიული მოდელია ტომსონის კლასიკური მოდელი, რომელიც სამჯერად პროცესს



აღწერს წყვილური დაჯახებებით.

ამ მოდელის თანახმად, ბმული მდგომარეობა AB წარმოიშობა ორი გზით (იხ. ნახ. 31):

- 1) ერთჯერადი წყვილური დაჯახებისას ენერგიის გაცვლით A და C ნაწილაკებს შორის B ნაწილაკის ველში და (ან)
- 2) ერთჯერადი წყვილური დაჯახებისას ენერგიის გაცვლით B და C ნაწილაკებს შორის A ნაწილაკის ველში.

რეკომბინაციის სიჩქარის K კონსტანტაში, რომელიც განიმარტება ამ თანაფარდობებით

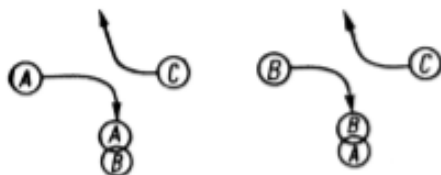
$$-\frac{d[A]}{dt} = -\frac{d[B]}{dt} = \frac{d[AB]}{dt} = K[A][B], \quad (5.10)$$

ბუნებრივია, წვლილი შეაქვს ორივე პროცესს (აქ $[A]$, $[B]$, ... აღნიშნავენ შესაბამისი ნაწილაკების სიმკვრივეებს).

ცნობილია, რომ მდორედ კლებადი ურთიერთქმედების პოტენციალის შემთხვევაში (U_{AC} ან U_{BC}) დამჯახებელი ნაწილაკები ადვილად ცვლიან ენერგიის მცირე პორციებს. ამიტომ ბმული მდგომარეობა იქმნება უწყვეტი სპექტრის საზღვართან მცირე ბმის ენერგიით (იხილეთ ნახ. 32). დრეკადი დაჯახებისას ენერგიის გაცვლა

განსაკუთრებით ეფექტურად მიმდინარეობს, თუ A და C და (ან) B და C ნაწილაკების მასები ერთი და იმავე რიგის სიდიდეებია.

რეკომბინაციის აქტი, შესაძლოა, მივიჩნიოთ დასრულებულად, თუკი შექმნილი AB ნაწილაკის ბმის ენერგია ისეთია, რომ იგი არ დაიშლება გარშემო მყოფ ნაწილაკებთან შემდგომი დაჯახებებისას. თუ U_{AB} არის ნაწილაკების ურთიერთქმედების პოტენციალი, AB ნაწილაკის ბმის ენერგია (სიდიდე, რომელიც პროპორციულია U_{AB} -ისა) მეტი უნდა იყოს გარშემო მყოფ ნაწილაკთა ტემპერატურაზე



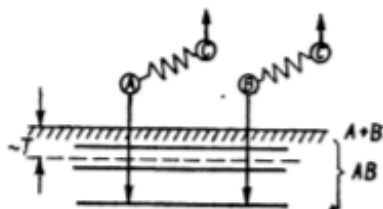
ნახ. 31. წყვილური დაჯახებები სამმაგი რეკომბინაციისას

$$U_{AB} > T.$$

ეს პირობა განსაზღვრავს შექმნილი AB სისტემის მაქსიმალურ ზომას; თუ $U_{AB} \sim Q_{AB} / R^n$, მაშინ

$$R_{\max}^{AB} \sim \left(\frac{Q_{AB}}{T} \right)^{1/n}. \quad (5.11)$$

ამრიგად, ბმული მდგომარეობა AB იქმნება მაშინ, როდესაც ნაწილაკები A და C , ან B და C ერთმანეთს ეჯახება ისეთ მანძილებზე, რომლებიც არ აღემატება R_{\max}^{AB} , ანუ იმ სფეროს შიგნით, რომლის რადიუსიცაა R_{\max}^{AB} და, შესაბამისად, რომლის ცენტრშიც იმყოფება ნაწილაკი B ან A .



ნახ. 32. თავისუფალ-ბმული გადასვლები სამმაგი რეკომბინაციისას

რეკომბინაციის სიჩქარის განმარტების თანახმად, ის შეიძლება წარმოვიდგინოთ ამ სახით

$$K \sim [A][C] \langle \sigma_{AC} v \rangle P_B + [B][C] \langle \sigma_{BC} v \rangle P_A. \quad (5.12)$$

აქ $\langle \sigma_{AC} \nu \rangle$ და $\langle \sigma_{BC} \nu \rangle$ დრეკადი დაჯახების სიჩქარის კონსტანტებია; P_A და P_B აღნიშნავენ ალბათობებს, რომ დაჯახებები მოხდება A ან B ნაწილაკის ახლოს. ეს სიდიდეები იმავე რიგისა, რაც R_{\max}^{AB} რადიუსის სფეროს მოცულობის ფარდობა იმ საშუალო მოცულობასთან, რომელიც მოდის A ან B ნაწილაკზე:

$$P_A \sim \frac{\left(R_{\max}^{AB}\right)^3}{(1/[A])}, \quad P_B \approx \frac{\left(R_{\max}^{AB}\right)^3}{(1/[B])} \quad (5.13)$$

(მამრავლი $\frac{4}{3}\pi$ არ არის გათვალისწინებული, რადგან ვაფასებთ მხოლოდ სიდიდის რიგს).

ჩავსვათ (5.13) (5.12)-ში და შევადართო (5.10)-ს, შედეგად, მივიღებთ

$$K \sim [C] \left(R_{\max}^{AB}\right)^3 \left[\langle \sigma_{AC} \nu \rangle + \langle \sigma_{BC} \nu \rangle\right]. \quad (5.14)$$

ამ ფორმულაში შემავალი განივკვეთები σ_{AC} და σ_{BC} განივკვეთებია დიდი გადაცემული ენერგიით, ანუ გაბნევის განივკვეთები ერთის რიგის კუთხეებზე.

ნაწილაკების წყვილური ურთიერთქმედების მოცემული პოტენციალებისათვის (5.14) ფორმულა გვაძლევს რეკომბინაციის სიჩქარის კონსტანტის სიდიდეს.

$U \sim \frac{Q}{r^n}$ ტიპის პოტენციალისთვის T -ს რიგის გადაცემული ენერგიით გაბნევის განივკვეთი არის

$$\sigma(T) \sim \left(\frac{Q}{T}\right)^{\frac{2}{n}}.$$

ამრიგად, პროცესის სიჩქარის კონსტანტას ასეთი სტრუქტურა აქვს:

$$K \sim \frac{[C] \left(R_{\max}^{AB}\right)^3}{T^{\frac{2}{n} - \frac{1}{2}}} \left[\frac{\left(Q_{AB}\right)^{\frac{2}{n}}}{\sqrt{\mu_{AB}}} + \frac{\left(Q_{BC}\right)^{\frac{2}{n}}}{\sqrt{\mu_{BC}}} \right]. \quad (5.15)$$

აქ μ_{AB} და μ_{BC} ატომთა შესაბამისი წყვილების დაყვანილი მასებია.

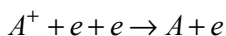
თვისობრივად მნიშვნელოვანია, რომ რეკომბინაციის სიჩქარის კონსტანტა იმ ნაწილაკთა სიმკვრივის პროპორციულია, რომლებიც „მესამე სხეულია“ (5.1) რექციონში. დაჯახებები A -ს C -თან და B -ს C -თან იქნებიან ერთჯერადი, თუ C ნაწილაკთა რიცხვი სფეროებში A -ს და B -ს ახლოს მცირე იქნება:

$$[C] \left(R_{\max}^{AB}\right)^3 \ll 1.$$

წარმოდგენილი მოდელი სასარგებლოა როგორც დამუხტული ნაწილაკების, ისე ნეიტრალური ატომების მონაწილეობით მიმდინარე სხვადასხვა პროცესების სიჩქარის კონსტანტის სიდიდის უხეშად შესაფასებლად.

2. ელექტრონების იონებთან სამმაგი რეკომბინაცია

ელექტრონების დადებით იონებთან სამმაგი რეკომბინაცია



განეკუთვნება იმ კლასის პროცესებს რომლებიც შეიძლება ჩავსვათ ტომსონის სქემაში. მასებში დიდი განსხვავების გამო რეკომბინაციისათვის ეფექტური იქნება მხოლოდ დაჯახებები ელექტრონებს შორის ბირთვის ველში. გამოვიყენოთ (5.14) ფორმულა და რეკომბინაციის სიჩქარე ჩავწეროთ შემდეგი სახით

$$-\frac{dN_e}{dt} = -\frac{dN_i}{dt} = \frac{d[A]}{dt} = N_e^2 \langle \sigma_{ee} v \rangle R_{ei}^3 N_i. \quad (5.16)$$

აქედან პირდაპირ გამოვყოფთ ელექტრონების (იონების) რეკომბინაციის კოეფიციენტს

$$\alpha \sim N_e \frac{\sigma_{ee} v_T e^6}{T^3}, \quad (5.17)$$

აქ $v_T \sim (T_e m)^{1/2}$ ელექტრონების სითბური სიჩქარეა, $\sigma_{ee} \sim \frac{e^4}{T^2}$ - ელექტრონის ელექტრონზე კულონური გაბნევის განივკვეთი ერთის რიგის კუთხეზე T_e -ს რიგის გადაცემული ენერგიით. საბოლოოდ, ვიღებთ

$$\alpha = const N_e \frac{e^{10}}{m^{1/2} T_e^{9/2}}. \quad (5.18)$$

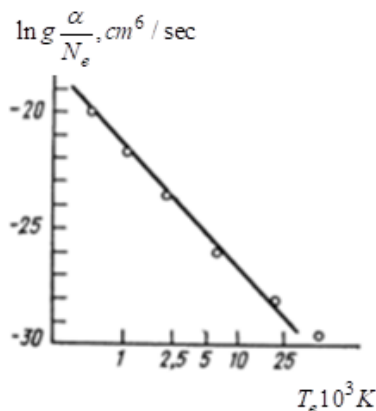
აქ შედის რიცხვითი მამრავლი, რომელიც განისაზღვრება ემპირიულად.

თუ ელექტრონების ტემპერატურა მცირეა ატომის იონიზაციის ენერგიასთან შედარებით, ელექტრონების „ჩაჭერის“ სიჩქარეში ძირითადი წვლილი შეაქვს რეკომბინაციას ატომის მაღალაგზნებულ სუსტადბმულ მდგომარეობებში, რომლებიც წყალბადისმაგვარი მდგომარეობებია. ამის გამო, სამმაგი რეკომბინაციის კოეფიციენტი (5.18) პრაქტიკულად დამოკიდებული არ არის იონების გვარობაზე პლაზმაში. სითბური ელექტრონების ჰელიუმის იონებთან რეკომბინაციის სიჩქარის გაზომვა გვაძლევს რიცხვითი კოეფიციენტის სიდიდეს $const = 4.6$ (5.18) ფორმულაში და ტემპერატურულ დამოკიდებულებას $\sim T_e^{-4.4}$, რომელიც ახლოსაა (5.18) ფორმულით გამოთვლილ სიდიდესთან $\sim T_e^{-4.5}$. ნახაზი 33 გვიჩვენებს, რომ (5.18) ფორმულა დამაკმაყოფილებლად ახორციელებს ექსპერიმენტულ მონაცემთა აპროქსიმაციას.

როგორც უკვე ითქვა, რეკომბინაციაში ძირითადი წვლილი შეაქვთ დაჯახებებს T_e -ს რიგის გადაცემული ენერგიით. ამიტომ, ელექტრონების დაჯახებები ნეიტრალურ ატომებთან ჩაჭერის არეში არ არის მნიშვნელოვანი, რადგან ასეთი დაჯახების

სას ენერგიის ცვლილება მცირეა $\sim \frac{m}{M} T_e$.

ზემოთ განხილული რეკომბინაციის სქემა, როდესაც ბმული მდგომარეობა იქმნება იონის ახლოს ელექტრონებს შორის ერთჯერადი დაჯახების შედეგად, მიახლოებითია. რეკომბინაციის ამოცანის უფრო ზუსტი ამოხსნა შეუძლებელია კინეტიკის აპარატის ჩართვის გარეშე. რეკომბინაციის ერთჯერადი აქტის შედეგად შექმნილი ძლიერ აგზნებული ატომი დაჯახებების შედეგად შეიძლება გადავიდეს როგორც უფრო მაღალ, ისე დაბალ დონეზე. ამ ატომში შეიძლება განხორციელდეს რადიაციული გადასვლებიც, ანუ გადასვლები სინათლის შთანთქმით და გამოსხივებით. ამ პროცესების გათვალისწინებისას მნიშვნელოვანია



სახ. 33. სამმაგი რეკომბინაციის კოეფიციენტის დამოკიდებულება ელექტრონების ტემპერატურაზე.
 წრფე - ფორმულა (5.18) სადაც $const = 4.6$;
 წერტილები - ექსპერიმენტი.

პლაზმის ოპტიკური სისქე. აღწერილ პროცესს უწოდებენ დაჯახებით-გამოსხივებით რეკომბინაციას.

3. დისოციაციური რეკომბინაცია

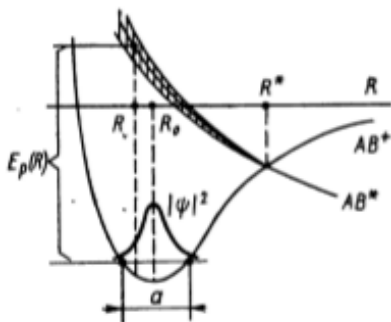
დისოციაციური რეკომბინაცია (5.7) ის ძირითადი პროცესია, რომელიც განაპირობებს ელექტრონების „გაქრობას“ მოლეკულური და ატომური გაზების პლაზმაში მაღალი სიმკვრივეების და დაბალი ტემპერატურის დროს, როდესაც ატომური იონები გარდაიქმნებიან მოლეკულურ იონებად სამჯერადი დაჯახებების შედეგად.

დისოციაციური რეკომბინაციის დროს ელექტრონი ჩაიჭირება ავტოიონიზაციურ მდგომარეობაში, რომელიც შემდგომ სტაბილიზდება მოლეკულის დისოციაციის გამო. ეს ხდება მაშინ, როდესაც აგზნებული AB^* მოლეკულის განმზიდავი ავტოიონიზაციური თერმი გადაკვეთს AB^+ მოლეკულური იონის საწყის თერმს გარკვეულ R^* ბირთვმორის მანძილზე და სტაბილურდება, როდესაც $R > R^*$.

მოლეკულური იონის მიერ ელექტრონის ჩაჭერა ხორციელდება ელექტრონული გადასვლებისათვის დამახასიათებელ მცირე დროში. ფრანკ-კონდონის პრინციპის თანახმად კი, ასეთ დროში ბირთვშორისი მანძილი ვერ ასწრებს შესამჩნევ ცვლილებას და, მაშასადამე, ჩაჭერის განივკვეთი დამოკიდებული უნდა იყოს საწყის ბირთვშორის მანძილზე.

ელექტრონის ჩაჭერის შედეგად მიღებული მდგომარეობის სტაბილიზაცია დისოციაციური რეკომბინაციის დროს ხორციელდება მოლეკულის ბირთვების მოძრაობისათვის ჭარბი ენერჯიის გადაცემის გზით.

AB^* მოლეკულის ავტოიონიზაციური მდგომარეობა სტაბილიზდება, თუკი ბირთვები მოასწრებენ, დაშორდნენ ერთმანეთს R^* -ზე მეტ მანძილებზე, სანამ მოლეკულა მოიშორებს ელექტრონს და ავტოიონიზდება. ამრიგად, როგორც ჩაჭერის განივკვეთი, ისე სტაბილიზაციის ალბათობა, დამოკიდებულია საწყის ბირთვშორის მანძილზე.



ნახ. 34. თერმების განლაგება დისოციაციური რეკომბინაციის დროს

მაშასადამე, დისოციაციური რეკომბინაციის განივკვეთი უნდა გასაშუალოვდეს საწყისი ბირთვშორისი მანძილების მიხედვით.

წარმოდგენილი მოდელის თანახმად, ჩავწეროთ დისოციაციური რეკომბინაციის განივკვეთი:

$$\sigma_{D,R}(E) = \int_0^{R^*} \sigma_{capt}(E,R) W(R,R^*) |\psi(R)|^2 dR. \quad (5.19)$$

აქ $\sigma_{capt}(E,R)$ ელექტრონის ჩაჭერის განივკვეთია, $W(R,R^*)$ – მოლეკულის „გადარჩენის“ ალბათობა, $|\psi(R)|^2$ – ბირთვების ერთმანეთისაგან R მანძილზე ყოფნის ალბათობის სიმკვრივე, რომელიც განისაზღვრება იონის რხევითი მდგომარეობით რეკომბინაციის წინ.

თუ ავტოიონიზაციური მდგომარეობის სიგანე $\Gamma(R)$ AB^+ იონის და AB^* მოლეკულის თერმების სხვაობაზე მცირეა, ჩაჭერა, ჩვეულებრივ, აღინერება ბრეიტ-ვიგნერის ფორმულით ერთადერთი რეზონანსით $E_r(R)$ ენერჯიაზე, რომელიც ტო-

ლია AB^+ და AB^* თერმების ენერგიებს შორის სხვაობისა R -ის გარკვეულ მნიშვნელობაზე (იხილე ნახაზი 34):

$$\sigma_{capt}(E, R) = \frac{\pi \hbar^2}{2mE} \frac{\Gamma^2(R)}{(E - E_r(R))^2 + \frac{\Gamma^2(R)}{4}}, \quad (5.20)$$

$$E_r(R) = \left[E(AB^*) - E(AB^+) \right]_R.$$

დისოციაციური რეკომბინაციის პროცესის მეორე ეტაპზე – სტაბილიზაციის ეტაპზე – ბირთვების მოძრაობა, ჩვეულებრივ, აღინერება კლასიკური მექანიკის მეთოდებით.

გავიგოთ $W(R, t)$ სიდიდე, ანუ იმის ალბათობა, რომ $t=0$ საწყის მომენტში R ბირთვშორის მანძილზე შექმნილი ავტოიონიზაციური მდგომარეობა არ დაიშლება t მომენტში. დროის dt ინტერვალში $W(R, t)$ სიდიდის შემცირება, ცხადია, ტოლია ამ ინტერვალში ავტოიონიზაციის ალბათობისა. ამრიგად, შეგვიძლია დავწეროთ

$$-dW(R, t) = W(R, t) \frac{\Gamma(R')}{\hbar} dt, \quad W(R, 0) = 1. \quad (5.21)$$

აქ ბირთვშორის მანძილი R' შეესაბამება დროის t მომენტს. ზედა განტოლება შეიძლება გადაინეროს ამგვარად:

$$-dW(R, R') = W(R, R') \frac{\Gamma(R')}{\hbar} \frac{dR'}{v(R, R')} dt, \quad W(R, R) = 1. \quad (5.22)$$

აქ $v(R, R')$ ბირთვების სიჩქარეა, რომლებმაც მოასწრეს R' მანძილზე დაშორება. თუ უგულებელვყოფთ ბირთვების საწყის სიჩქარეს ელექტრონის ჩაჭერის მომენტში, $v(R, R')$ -ს სიდიდე განისაზღვრება მოლეკულის $E(AB^*)$ გამფანტავი თერმის ყოფაქცევით:

$$v(R, R') = \sqrt{\frac{2}{\mu} (E_{AB^*}(R) - E_{AB^*}(R'))}, \quad (5.23)$$

სადაც μ – გაფანტული ბირთვების დაყვანილი მასაა.

ამრიგად, (5.22)-დან ვიპოვით ალბათობას, რომ ავტოიონიზაციური მდგომარეობა არ დაიშლება:

$$W(R, R') = \exp \left(- \int_R^{R'} \frac{\Gamma(R)}{\hbar} \frac{dR'}{v(R, R')} \right). \quad (5.24)$$

თუ ცნობილია მოლეკულური იონის თერმი $E_{AB^+}(R)$ და მოლეკულის თერმი $E_{AB^*}(R)$, (5.19), (5.20) და (5.24) ფორმულები განსაზღვრავენ დისოციაციური რეკომბინაციის განიკვეთს.

ბშირად დაშლადი თერმის დახრა მცირედ იცვლება ჩაჭერის R ნერტილიდან სტაბილიზაციის R^* ნერტილამდე მანძილზე; ამ შემთხვევაში ბირთვები თანაბარაჩქარებულად მოძრაობენ და R^* ნერტილის მიღწევის დრო ადვილად შეიძლება შეფასდეს:

$$t(R, R^*) \sim \left(\frac{2(R^* - R)\mu}{\frac{\partial E_{AB^*}}{\partial R}} \right)^{1/2} \quad (5.25)$$

აქ $\frac{\partial E_{AB^*}}{\partial R}$ - ძალაა, რომელიც განიზიდავს ატომებს AB^* მდგომარეობაში.

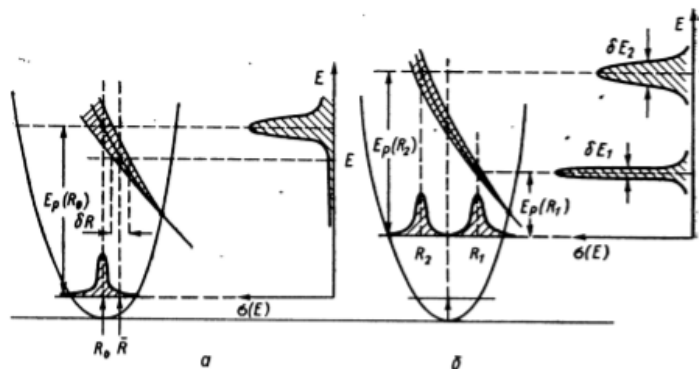
ახლა ადვილია, შევაფასოთ ავტოიონიზაციური სიგანის სიდიდე, რომლის ქვემოთ არდაშლის ალბათობა იქნება ერთი რიგის, ხოლო დისოციაციური რეკომბინაციის განივკვეთი კი - ჩაჭერის განივკვეთის რიგისა:

$$\Gamma < \frac{\hbar}{t(R_0, R^*)} \quad (5.26)$$

თუ, ამავე დროს, დაშლადი თერმი საკმაოდ „დამრეცია“ და მისი ენერგია შესამჩნევად იცვლება ბირთვების რხევითი მოძრაობის ამპლიტუდის რიგის a მანძილებზე (იხ. ნახაზი 35)

$$a \frac{\partial E_{AB^*}}{\partial R} \Big|_{R=R_0} \gg \Gamma(R_0),$$

მაშინ დისოციაციური რეკომბინაციის განივკვეთის ელექტრონის ენერგიაზე დამოკიდებულება მნიშვნელოვნად განისაზღვრება მოლეკულური იონის სანყისი რხევითი მდგომარეობით. ამ დამოკიდებულების თვისობრივი მხარე განვიხილოთ ავტოიონიზაციურ მდგომარეობაში ელექტრონის ჩაჭერის ორ შემთხვევაში: იონის ჩაჭერა ძირითადი და აგზნებული რხევითი მდგომარეობებიდან. ჩაჭერის სიგანე იყოს მცირე (იხ. ნახაზი 35).



ნახ. 35. დისოციაციური რეკომბინაცია ძირითადი (a) და აგზნებული რხევითი დონიდან (b).

ელექტრონის მოცემული E ენერგიის შემთხვევაში ჩაჭერის განივკვეთში ნვლილს შეიტანს მხოლოდ ბირთვშორისი მანძილის მცირე δR არე \bar{R} ნერტილის ახლოს, რომელიც განისაზღვრება თანაფარდობიდან

$$E_p(\bar{R}) = E. \quad (5.27)$$

ასეთ პირობებში (5.19) გამოსახულებაში ყველა ინტეგრალქვეშა ფუნქცია შეიძლება ჩავთვალოთ ნელა ცვლად ფუნქციად ჩაჭერის განივკვეთის მკვეთრ რეზონანსთან შედარებით; მაშინ (5.19) ფორმულა ჩაინერება ასე:

$$\sigma_{D.R.}(E) \sim \frac{W(R, R^*) |\psi(R)|^2}{dE_p(\bar{R}) / dR} \int_0^{R^*} \sigma_{capt}(E_p) dE_p \quad (5.28)$$

ან (5.20)-ის ჩასმის მერე

$$\sigma_{D.R.}(E) \sim \frac{\pi^2 \hbar^2}{mE} \left[\frac{\Gamma(R) |\psi(R)|^2 W(R, R^*)}{\frac{dE_p}{dR}} \right]_{R=\bar{R}}. \quad (5.29)$$

აქ (5.27) ფორმულის თანახმად \bar{R} სიდიდე დამოკიდებულია ელექტრონის ენერგიაზე. ამ ფორმულიდან გამომდინარე, ადვილი დასადგენია დისოციაციური რეკომბინაციის განივკვეთის ენერგიაზე დამოკიდებულების თვისობრივი სახე, რომელიც ნაჩვენებია 35 ნახაზზე. განივკვეთის მაქსიმუმები შეესაბამება ალბათობის სიმკვრივების მაქსიმუმებს $|\psi|^2$.

თუ ალბათობის სიმკვრივეს მაქსიმუმში შევასახებთ $|\psi|_{R_0}^2 \sim \frac{1}{a}$ სიდიდით და დავუშვებთ, რომ $W(R_0, R^*) \sim 1$, (5.29) ფორმულიდან მივიღებთ შეფასებას

$$\sigma^{\max} \sim \frac{\pi^2 \hbar^2}{mE_p(R_0)} \frac{\Gamma}{a \left(\frac{dE_p}{dR} \right)_{R_0}} \sim \frac{\pi^2 \hbar^2}{mE_p(R_0)} \frac{\Gamma}{\delta E}, \quad (5.30)$$

რომელიც განივკვეთის სიდიდეს მაქსიმუმში აკავშირებს პიკის სიგანესთან (იხ. ნახაზი 35a). ეს თანაფარდობა სამართლიანია ყოველი პიკისათვის 35b ნახაზზე, როდესაც გვაქვს იონის აგზნებული საწყისი მდგომარეობა:

$$\sigma_{1,2}^{\max} \sim \frac{\pi^2 \hbar^2}{mE_p(R_{1,2})} \frac{\Gamma}{\delta E_{1,2}}. \quad (5.31)$$

ავტოიონიზაციური სიგანის გაზრდა და დაშლადი თერმის დახრის შემცირება ასუსტებს დისოციაციური რეკომბინაციის განივკვეთის რეზონანსულ ხასიათს.

უნდა აღვნიშნოთ, რომ თუ დიდ ბირთვშორის მანძილებზე $E(A^* + B)_{R \rightarrow \infty}$ თერმი მდებარეობს AB^+ იონის თერმის ძირის ზევით, რეკომბინაციის პროცესი იქნება ზღურბლური ხასიათის.

რთულ მოლეკულეებში ელექტრონის ჩაჭერისას მის მიერ მოტანილი ენერგია სწრაფად გადანაწილდება შიდა დიდი თავისუფლების ხარისხის მიხედვით, რის შედეგადაც, დაშლის ალბათობა მკვეთრად მცირდება. ავტოიონიზაციური მდგომარეობების სიმრავლე აძნელებს ამ ტიპის პროცესების მარტივ აღწერას.

რთული მოლეკულური იონის შემთხვევაში დისოციაციური რეკომბინაციის განივკვეთის ზედა ზღვრის შეფასება შეიძლება, თუ კი ჩავთვლით, რომ როცა ნელი ელექტრონი მოხვდება იონის გარშემო R_{capt} რადიუსის სფეროში, სადაც R_{capt} არის იონის რამდენიმე რადიუსის რიგისა, ჩაიჭრება ერთის ტოლი ალბათობით. ამ პროცესის განივკვეთი შეიძლება შეფასდეს ფორმულით:

$$\sigma_{D.R.} \sim \frac{\pi e^2 R_{capt}}{E}. \quad (5.32)$$

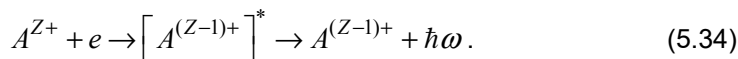
დისოციაციური რეკომბინაციის კოეფიციენტი მიიღება ელექტრონების ენერგეტიკული სპექტრის მიხედვით დისოციაციური რეკომბინაციის განივკვეთის გასაშუალოებით:

$$\langle \sigma_{D.R.} \nu \rangle = \int_0^\infty \sigma_{D.R.}(E) \nu(E) f(\nu) dE. \quad (5.33)$$

აქ ელექტრონების ენერგიის მიხედვით განაწილების ფუნქცია ნორმირებულია ერთზე, $\nu(E)$ ელექტრონის სიჩქარეა.

4. დიელექტრონული რეკომბინაცია

რთული იონის დიელექტრონული რეკომბინაცია მიმდინარეობს ამ სქემით:

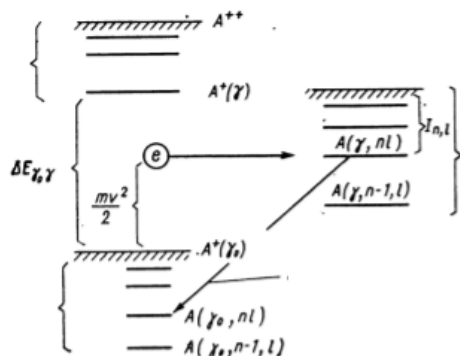


აქ A^{Z+} იონია, რომლის მუხტია Z , $A^{(Z-1)+}$ კი – იონი ერთით ნაკლები მუხტით. თავისუფალი ელექტრონის რეკომბინაციის შედეგად გამოყოფილი ენერგია ხმარდება იონის ერთ-ერთი ელექტრონის აგზნებას. ამრიგად, რეკომბინაციის საწყის სტადიაზე – თავისუფალი ელექტრონის ჩაჭერის სტადიაზე – მონაწილეობს ორი ელექტრონი; ჩაჭერის შედეგად მიიღება ნეიტრალური ატომი, ან ნაკლები მუხტის იონი ავტოიონიზაციურ მდგომარეობაში. რეკომბინაცია შესაძლებელია, თუ ელექტრონის კინეტიკური ენერგია აკმაყოფილებს პირობას

$$\frac{m\nu^2}{2} = \Delta E_{\gamma_0\gamma} - I_{nl}, \quad (5.35)$$

სადაც $\Delta E_{\gamma_0\gamma}$ იმ ელექტრონის აგზნების ენერგიაა, რომელიც იმყოფებოდა იონში; γ_0 მისი კვანტური რიცხვების ერთობლიობაა იონის ძირითად მდგომარეობაში, γ იგივეა მხოლოდ აგზნებულ მდგომარეობაში; I_{nl} ელექტრონის ბმის ენერგიაა, რო-

მელმაც განიცადა რეკომბინაცია მდგომარეობაში მთავარი კვანტური რიცხვით n და ორბიტალური კვანტური რიცხვით l .



ნახ. 36. ატომის და იონების დონეების და გადასვლების სქემა ელექტრონული რეკომბინაციისას

რეკომბინაციის პროცესი არ სრულდება ელექტრონის ჩაჭერის ეტაპზე: ჩაჭერის შედეგად წარმოქმნილი ავტოიონიზაციური მდგომარეობა იშლება ავტოიონიზაციური არხით (გამოიტყორცნება ელექტრონი), ან სტაბილიზდება, მაგალითად, კვანტის გამოსხივებით „შიდა“ ელექტრონის რადიაციული გადასვლისას $\gamma \rightarrow \gamma_0$.

განხილული ორსაფეხურიანი მოდელის თანახმად, დიელექტრონული რეკომბინაციის განივკვეთი შეიძლება წარმოვიდგინოთ ჩაჭერის განივკვეთის ნამრავლად სტაბილიზაციის ალბათობაზე. შემოვიფარგლოთ მხოლოდ ერთი – იონის აგზნებული მდგომარეობებიდან ყველაზე დაბალი მდგომარეობით, მაშინ (იხ. ნახაზი 36)

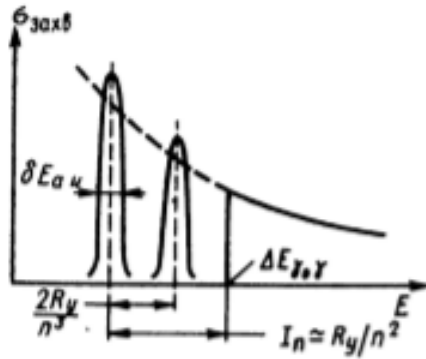
$$\sigma_{recom} \sim \sigma_{capt}(\gamma_0 \rightarrow \gamma) P_{stab}. \quad (5.36)$$

$\gamma \rightarrow \gamma_0$ რადიაციული გადასვლით სტაბილიზაციის გამო სიდიდე P_{stab} , როგორც ჩანს, განისაზღვრება ფორმულით

$$P_{stab} \approx \frac{A(\gamma_0 \rightarrow \gamma)}{A(\gamma_0 \rightarrow \gamma) + W_a(\gamma, nl)} \approx \frac{A(\gamma_0 \rightarrow \gamma)}{W_a(\gamma, nl)}. \quad (5.37)$$

აქ $A(\gamma_0 \rightarrow \gamma)$ რადიაციული დაშლის ალბათობაა; W_a - ავტოიონიზაციური არხით დროის ერთეულში დაშლის ალბათობა, რომელიც, ჩვეულებრივ, დომინირებს, თუ იონის მუხტი ძალზე დიდი არ არის.

ელექტრონის ჩაჭერის ალბათობა რეზონანსების ერთობლიობაა, იმ ენერგიებზე, რომლებიც დაშვებულია (5.35) თანაფარდობით; რეზონანსების სიგანე განისაზღვრება ავტოიონიზაციის ალბათობით $\delta E_a \approx \hbar W_a$ (იხ. ნახაზი 37). თუ ელექტრონი ჩაიჭირება საკმაოდ მაღალ წყალბადისმაგვარ დონეებზე, რეზონანსები დაშორებული არიან იონის აგზნების ზღურბლური ენერგიისაგან ($\Delta E_{\gamma_0 \gamma}$) სიდიდით $I_n \approx Ry / n^2$ (იხ. ნახაზი 37).



ნახ. 37. დიელექტრონული რეკომბინაციის დროს ელექტრონის ავტოიონიზაციურ დონეებზე ჩაჭერის განივკვეთები

ჩაჭერის განივკვეთის სიდიდეზე უხეში წარმოდგენა შეიძლება შეგვიქმნას $\gamma_0 \rightarrow \gamma$ აგზნების განივკვეთის ექსტრაპოლაციამ ზღურბლური ენერგიის წინა არეში ამ თანაფარდობით

$$\sigma_{capt}(\gamma_0 \rightarrow \gamma, nl)\Gamma \approx \sigma(\gamma_0 \rightarrow \gamma) \frac{Ry}{n^3}. \quad (5.38)$$

ჩვეულებრივ, რეზონანსები ვიწროა ენერგიის მიხედვით ელექტრონების განაწილების დამახასიათებელ $f(E)$ საგანესთან შედარებით, ამიტომ კონკრეტულ (γ, nl) დონეზე დიელექტრონული რეკომბინაციის კოეფიციენტი შეიძლება წარმოვიდგინოთ ამ სახით:

$$\langle \sigma v \rangle \approx v \sigma_{capt}(\gamma_0 \rightarrow \gamma, nl)\Gamma f(E). \quad (5.39)$$

დიელექტრონული რეკომბინაციის სრული კოეფიციენტი მიიღება (5.39)-დან ყველა γ მდგომარეობების მიხედვით აჯამებით და ყოველი γ -თვის n -ით აჯამებით n_{\min} -მდე, რომელიც განისაზღვრება ამ დამოკიდებულებით:

$$\Delta E_{\gamma_0\gamma} = \frac{Ry}{n_{\min}^2}. \quad (5.40)$$

საბოლოოდ, (5.37), (5.38) და (5.39) გამოყენებით, მივიღებთ

$$\langle \sigma v \rangle \approx \sum_{\gamma} \sum_{n > n_{\min}} \frac{2Ry}{n^3} \sigma(\gamma_0 \rightarrow \gamma) v f(E) \frac{A(\gamma \rightarrow \gamma_0)}{W_a(\gamma, nl)}. \quad (5.41)$$

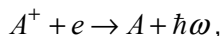
აქ ელექტრონების სიჩქარე და ენერგია $v f(E)$ მამრავლში განისაზღვრება (5.35) თანაფარდობით; ენერგიების მიხედვით ელექტრონების განაწილების ფუნქცია $f(E)$ ნორმირებულია ერთზე; იონის აგზნების $\gamma_0 \rightarrow \gamma$ განივკვეთი ზღურბლურ ენერგიაზე შეიძლება, უხეშად შეფასდეს სიდიდით

$$\sigma(\gamma_0 \rightarrow \gamma) \sim \frac{\pi e^4}{(\Delta E_{\gamma_0\gamma})^2}. \quad (5.42)$$

უნდა აღვნიშნოთ, რომ თუმცა ჩაჭერის განივკვეთები სიდიდით იმავე რიგისაა, რაც იონის დონეების აგზნების მახასიათებელი განივკვეთები, ანუ 10^{-16} სმ², სტაბილიზაციის ალბათობის სიმცირეს $P_{stab} \sim 10^8 s^{-1} / 10^{14} s^{-1} \sim 10^{-6}$ მიყვავართ დიელექტრონული რეკომბინაციის განივკვეთის მცირე სიდიდემდე - $10^{-22} sm^2$. მიუხედავად ამისა, გაიშვიათებულ პლაზმაში, რომელშიც სამი ნაწილაკის დაჯახების ალბათობა ნაკლებია ორი ნაწილაკის დაჯახების ალბათობაზე, ფოტო- და დიელექტრონული რეკომბინაციები დომინირებს. ასევე, თუ გვაქვს მრავალმუხტიანი იონები, დიელექტრონული რეკომბინაციის განივკვეთი შეიძლება მნიშვნელოვნად გაიზარდოს.

5. ფოტორეკომბინაცია და დამუხრუჭებითი გამისხივება

ფოტორეკომბინაციის პროცესი მიმდინარეობს (5.1) სქემით

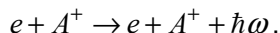


ზედმეტი ენერგია ამ შემთხვევაში მიაქვს სინათლის კვანტს.

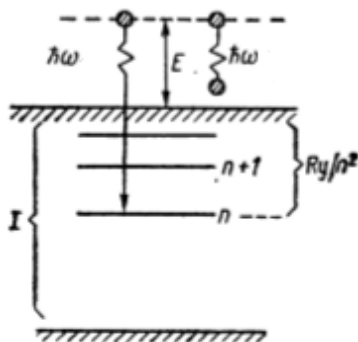
ელექტრონის ფოტორეკომბინაციის დროს ატომის დონეზე მთავარი კვანტური რიცხვით n (ჩავთვალოთ, რომ $n \gg 1$ და ატომის დონეები წყალბადისმაგვარია) გამოსხივდება სინათლის კვანტი, რომლის სიხშირეც განისაზღვრება ენერგიის შენახვის კანონით

$$\hbar\omega_{ph.R.} = E + \frac{Ry}{n^2},$$

სადაც E ელექტრონის ენერგიაა. ფოტორეკომბინაციის მსგავსი პროცესია ელექტრონის დამუხრუჭებითი გამოსხივება იონის ველში მისი გავლისას



პრინციპული განსხვავება ამ ორ პროცესს შორის ის არის, რომ დამუხრუჭებითი გამოსხივების დროს ელექტრონი რჩება თავისუფალი კვანტის გამოსხივების შემდეგ, ხოლო ფოტორეკომბინაციისას კვანტის გამოსხივების შემდეგ ელექტრონი გადადის ბმულ მდგომარეობაში (იხ. ნახაზი 38).



ნახ. 38. დონეების და გადასვლების სქემა ფოტორეკომბინაციის შემთხვევაში

თუ ფოტორეკომბინაციის და დამუხრუჭებითი გამოსხივებისას ელექტრონის საბოლოო მდგომარეობები იმყოფებიან უწყვეტი სპექტრის საზღვართან, ორივე პროცესი შეიძლება აღინეროს ერთიანი მიდგომით, ხოლო ფოტორეკომბინაციის პროცესი მივიჩნიოთ დამუხრუჭებითი გამოსხივების ზღვრულ შემთხვევად.

განვიხილოთ ნელი ელექტრონის დამუხრუჭებითი გამოსხივების პროცესი იონზე. დაცემული ელექტრონის კლასიკურად აღწერისათვის საჭიროა, რომ მისი იმპულსის მომენტი იყოს დიდი:

$$\frac{mv\rho}{\hbar} \gg 1, \quad (5.43)$$

სადაც v, ρ ელექტრონის სანყისი სიჩქარე და დაჯახების პარამეტრია. მაშინ კვანტის დამუხრუჭებითი გამოსხივების განივკვეთი, რომლის ω სიხშირეც მოთავსებულია $d\omega$ ინტერვალში, შეიძლება ასე ჩაინეროს:

$$d\sigma = 2\pi\rho d\rho P(\omega, \rho) = 2\pi\rho(\omega) \frac{d\rho}{d\omega} P(\omega, \rho) d\omega, \quad (5.44)$$

ან სიხშირის ერთეულოვან ინტერვალში გამოსხივებისათვის

$$\frac{d\sigma}{d\omega} = 2\pi\rho(\omega) \frac{d\rho}{d\omega} P(\omega, \rho). \quad (5.45)$$

(5.44) და (5.45) ფორმულებში $P(\omega, \rho)$ არის იონის ახლოს ელექტრონის ერთჯერადი ჩავლისას კვანტის გამოსხივების ალბათობა.

გამოსხივების მონანილეობით მიმდინარე პროცესების სიჩქარის ნახევრადკლასიკური შეფასებისას ფართოდ გამოიყენება ეს რეცეპტი: ალბათობის სიდიდე $P(\omega, \rho)$ უტოლდება პროცესის მიმდინარეობის მახასიათებელი დროის განმავლობაში გამოსხივებული კვანტების რიცხვს, ხოლო გამოსხივების სიმძლავრე აღინერება კლასიკური ელექტროდინამიკის მეთოდებით. ამ რეცეპტის მიხედვით, მივიღებთ

$$P(\omega, \rho) \sim \frac{e^2 |a|^2}{c^3 \hbar \omega} \tau. \quad (5.46)$$

აქ a აჩქარებაა, ხოლო τ – გამოსხივების ხანგრძლივობა. შეიძლება, დავუშვათ, რომ გამოსხივება, ძირითადად, ხდება ელექტრონის იონთან უკიდურესად მიახლოების მომენტში, როდესაც ელექტრონის აჩქარება მაქსიმალურია. სიხშირე და გამოსხივების ხანგრძლივობა შეიძლება შევაფასოთ ამ ფორმულებით:

$$\omega \sim \frac{v_0}{r_0}, \quad \tau \sim \frac{r_0}{v_0} \sim \frac{1}{\omega}, \quad (5.47)$$

სადაც r და v_0 – შესაბამისად მანძილია ელექტრონსა და იონს შორის და ელექტრონის სიჩქარეა იონთან უკიდურესად მიახლოების მომენტში. ჩავთვალოთ, რომ ელექტრონის იონთან უკიდურესად მიახლოებამდე ელექტრონის იმპულსის მომენტი და ენერგია ინახება:

$$v\rho = v_0 r_0, \quad \frac{mv^2}{2} = \frac{mv_0^2}{2} - \frac{e^2}{r_0}. \quad (5.48)$$

გარდა ამისა, თუ ჩავთვლით, რომ ელექტრონი ნელია და უგულებელვყოფთ სანყის ენერჯიას (5.48) -ის მეორე ფორმულაში, მივიღებთ

$$r_0 \sim \frac{mv^2}{2} \frac{\rho^2}{e^2}, \quad v_0 \sim \frac{2e^2}{mv\rho}. \quad (5.49)$$

ცენტრიდანული აჩქარება $a \sim \omega^2 r_0$ ჩავსვათ (5.46)-ში და გამოვიყენოთ (5.47) და (5.49), შედეგად, ვიპოვით დამუხრუჭებითი გამოსხივების (5.45) განიკვეთის

$$\frac{d\sigma}{d\omega} \sim \frac{8\pi}{3} \left(\frac{e^2}{\hbar c} \right)^3 \frac{\hbar^2}{m^2 v^2 \omega} \sim \frac{8\pi}{3} \alpha^3 \frac{\lambda^2}{\omega}. \quad (5.50)$$

აქ $\lambda = \frac{\hbar}{mv}$ - ელექტრონის დებროილის ტალღის სიგრძეა.

თუ იონის მუხტი არის Z , (5.46)-ში აჩქარება იქნება Z -ჯერ დიდი, ხოლო (5.50) -ში განიკვეთი იქნება Z^2 -ჯერ დიდი. $\alpha^3 \sim (1/137)^3$ მამრავლის გამოჩენა დამახასიათებელია გამოსხივების მონაწილეობით მიმდინარე მრავალი პროცესისათვის; (5.50) ფორმულაში რიცხვითი მამრავლი მცირედ განსხვავდება „ზუსტისგან“.

ფორმულებიდან (5.43), (5.47) და (5.49) ადვილად მივიღებთ შეზღუდვას გამოსხივების სიხშირეზე

$$Ry \left(\frac{v}{c\alpha} \right)^3 \ll \hbar\omega \ll Ry. \quad (5.51)$$

(5.50) ფორმულის ექსტრაპოლაციით ელექტრონის საბოლოო ბმულ მდგომარეობებზე, მივიღებთ ფოტორეკომბინაციის განიკვეთის შეფასებას. კვანტის სიხშირე ატომის იმ დონეზე რეკომბინაციისას, რომლის მთავარი კვანტური რიცხვიც $n \gg 1$, განისაზღვრება ფორმულით

$$\hbar\omega = \frac{mv^2}{2} + \frac{Ry}{n^2}. \quad (5.52)$$

(5.50) ფორმულის ტერმინებში n დონეზე რეკომბინაცია „შეესაბამება“ კვანტების დამუხრუჭებით გამოსხივებას (5.52) საშუალო სიხშირით სიხშირის იმ დიაპაზონში, რომელიც შეესაბამება ელექტრონის მოხვედრას ატომის n და $n+1$ დონეებს შორის (იხ. ნახაზი 38)

$$\Delta\omega_{n,n+1} \sim \frac{2Ry}{\hbar n^3}. \quad (5.53)$$

ფორმულებიდან (5.50), (5.52) და (5.53) ვიღებთ ატომის მაღალ ($n \gg 1$) წყალბადისმაგვარ დონეზე ელექტრონის ფოტორეკომბინაციის განიკვეთის შეფასებას

$$d\sigma_{Ph.R.}^{(n)} \sim \frac{16\pi}{3} \lambda^2 \alpha^3 \frac{1}{n \left(1 + \frac{mv^2}{2} \frac{n^2}{Ry} \right)}. \quad (5.54)$$

ფორმულებს (5.50) და (5.54) უნოდებენ კრამერსის ფორმულებს. ისინი გვაძლევს დამუხრუჭებითი გამოსხივებისა და ფოტორეკომბინაციის განიკვეთების დამაკმაყოფილებელ შეფასებას.

ლიტერატურა:

1. ი. ვაშაკიძე, ვ. მამასახლისოვი, გ. ჭილაშვილი, კვანტური მექანიკა, თსუ გამომცემლობა, თბილისი, 1978
2. გ. ჭილაშვილი, ორი და სამი ნაწილაკის კვანტური მექანიკა, თსუ გამომცემლობა, თბილისი, 1978
3. თ. კობალეიშვილი, დაჯახებათა თეორიის საფუძვლები, თსუ გამომცემლობა, თბილისი, 1975
4. N. F. Mott and H. S. W. Massey, The Theory of Atomic Collisions, Third Edition, Oxford At the Clarendon Press, 1965
5. R. G. Newton, Scatering Theory of Particles and Waves, McGraw-Hill Book Company, New York, Torono, London, Sydney
6. T. U. Wu and T. Ohmura, Quantum Theory of Scattering, Prentice-Hall Inc. New York, 1962

გამომცემლობის რედაქტორი

გია ჯოსხაძე

გარეკანის დიზაინერი

ნინო ებრალიძე

დამკაბადონებელი

ხათუთა ბადრიძე

გამოცემის მენეჯერი

მარია ერქომაიშვილი

0179, თბილისი, ი. ჭავჭავაძის გამზირი, 14
14, Ilia Tchavtchavadze Ave., Tbilisi 0179
Tel.: 995(32) 225 14 32
www.press.tsu.ge

