

ბრუნვითი იზომერიზაციის კვანტური თეორია და ჰილის განტოლება

ა.უგულავა, ზ.ტოკლიკიშვილი, ს.ჩხაიძე, რ.აბრამიშვილი, ლ.ჭოტორლიშვილი

წრფივი სამატომიანი მოლეკულებისთვის დამახასიათებელი ბრუნვითი იზომერიზაციის პროცესი აღიწერება ორი სხვადასხვა სიღრმის ორმოს მქონე პოტენციალის გამოყენებით. ამ პროცესის შესაბამისი კვანტურ-მექანიკური განტოლება წარმოდგენილია ჰილის განტოლების სახით. ჰილის განტოლების ანალიზი ტარდება ჯგუფთა თეორიის მეთოდებზე დაყრდნობით. ჰილის განტოლების სიმეტრია იზომორფულია აბსტრაქტული ოთხთა (კლეინის) ჯგუფის მიმართ, რომელიც სამ ინვარიანტულ ქვეჯგუფს შეიცავს. ამ ქვეჯგუფების არსებობა საშუალებას იძლევა წარმოვადგინოთ შერწყმისა და განშტოების წერტილების შემცველ პარამეტრზე დამოკიდებული სპექტრალური სურათი. ჰილ-შრედინგერის განტოლების ასიმპტოტიკურ ტალღურ ფუნქციას გააჩნია ორი იზოლირებული მაქსიმუმი, რომელიც ორ მდგრად მდგომარეობას შეესაბამება, ხოლო ქაოსური რხევები მაქსიმუმებს შორის მიანიშნებს იზომერიზაციის რეაქციის შესაძლებლობაზე.