VILNIAUS UNIVERSITETAS

Andrius Poškus

ATOMO FIZIKA

IR

BRANDUOLIO FIZIKOS EKSPERIMENTINIAI METODAI

(Priedai)

Vilnius 2008

Turinys

Priedai

A priedas. Trikdymų teorija

A.1. Trikdymų teorijos prielaidos ir pagrindinės sąvokos

Šrėdingerio lygtis

$$\hat{H}\Psi = -\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{\partial \Psi}{\partial t} \tag{A.1.1}$$

yra tiesinė diferencialinė lygtis, kurios sprendimo sudėtingumas priklauso nuo hamiltoniano $\hat{H}$ pavidalo. Dažniausiai ši lygtis sprendžiama artutiniais metodais. Vienas iš svarbiausių artutinių metodų, kurie naudojami kvantinėje mechanikoje, yra trikdymų teorija. Trikdymų teorija taikytina tais atvejais, kai tiriamosios kvantinės sistemos hamiltonianą $\hat{H}$ galima išreikšti suma hamiltoniano $\hat{H}^{(0)}$, kurio tikrinės funkcijos $\Psi^{(0)}$ ir tikrinės vertės $E^{(0)}$ yra žinomos, ir mažo dėmens $\hat{V}$, kuris vadinamas hamiltoniano ***trikdžiu***:

$$\hat{H} = \hat{H}^{(0)} + \hat{V}\,, \tag{A.1.2}$$

$$\hat{H}^{(0)}\Psi^{(0)} = E^{(0)}\Psi^{(0)}\,. \tag{A.1.3}$$

Pastaroji lygtis atspindi prielaidą, kad nesutrikdytasis hamiltonianas $\hat{H}^{(0)}$ išreikštu pavidalu nepriklauso nuo laiko, t. y. jo tikrinės funkcijos $\Psi^{(0)}$ atitinka (2.1.12) lygybę:

$$\Psi_n^{(0)} = \psi_n^{(0)} \exp\left(-\mathrm{i}\frac{E_n^{(0)}}{\hbar}t\right); \tag{A.1.4}$$

čia $\psi_n^{(0)}$ išreikštu pavidalu nepriklauso nuo laiko (apatinis indeksas – tai tikrinės funkcijos numeris; visos tikrinės funkcijos yra tiesiškai nepriklausomos). Kadangi tikrinės funkcijos $\Psi_n^{(0)}$ sudaro pilnąją funkcijų sistemą, tai (A.1.1) lygties sprendinius Ψ galima išreikšti „nesutrikdytojo“ hamiltoniano tikrinių funkcijų tiesiniu dariniu:

$$\Psi = \sum_n C_n \Psi_n^{(0)}\,. \tag{A.1.5}$$

Trikdymų teorija suformuluoja šių tiesinių darinių koeficientų C_n skaičiavimo metodą, kai trikdys $\hat{V}$ yra pakankamai mažas (trikdžio mažumo kriterijus bus suformuluotas šiek tiek vėliau). Sutrikdytosios banginės funkcijos apskaičiuojamos nuosekliųjų artinių metodu. T. y. prie tiksliojo sprendinio artėjama nuosekliai, žingsnis po žingsnio, ir kiekviename žingsnyje naudojami ankstesnio žingsnio rezultatai. Vienas toks žingsnis atitinka vieną ***artinį***. Nesutrikdytojo hamiltoniano $\hat{H}^{(0)}$ tikrinės funkcijos $\Psi^{(0)}$ ir tikrinės vertės $E^{(0)}$ atitinka ***nulinį artinį***. Taigi,

$$C_n = C_n^{(0)} + \sum_{l=1}^{\infty} C_n^{(l)} = \sum_{l=0}^{\infty} C_n^{(l)}\,; \tag{A.1.6}$$

čia $C_n^{(0)}$ yra n-tojo koeficiento vertė nuliniame artinyje (nesutrikdyta būsena), o $C_n^{(l)}$ su $l > 0$ nusako n-tojo koeficiento l-tojo artinio pataisą. Šios pataisos mažėja didėjant l, todėl apytikslėje analizėje kartais galima apsiriboti tik pirmojo artinio pataisa.

Įrašę (A.1.6) į (A.1.5), matome:

$$\Psi = \sum_n \Psi_n^{(0)} \sum_{l=0}^{\infty} C_n^{(l)}\,. \tag{A.1.7}$$

Trikdymų teorija yra dviejų rūšių: nuostovioji ir nenuostovioji. ***Nuostovioji trikdymų teorija*** aprašo sistemas, kuriose hamiltoniano trikdys išreikštu pavidalu nepriklauso nuo laiko (pvz., dviejų elektronų sąveikos energija (4.3.2)). ***Nenuostovioji trikdymų teorija*** aprašo sistemas, kuriose hamiltoniano trikdys išreikštu pavidalu priklauso nuo laiko t. Visų pirma aptarsime nuostoviąją trikdymų teoriją.

A.2. Nuostovioji trikdymų teorija

A.2.1. *Nuostoviosios trikdymų teorijos prielaidos*

Kadangi remiamės prielaida, kad hamiltonianas išreikštu pavidalu nepriklauso nuo t, tai sprendžiamoji lygtis yra nuostovioji Šrėdingerio lygtis (2.1.13). Jeigu trikdys $\hat{V}$ yra pakankamai silpnas, tada šios lygties visas tikrines funkcijas galima išreikšti (A.1.7) pavidalo begaline eilute:

$$\psi_m = \sum_n \psi_n^{(0)} \sum_{l=0}^{\infty} C_n^{(l)} \qquad (m = 1, 2, ...). \tag{A.2.1}$$

Šioje eilutėje sukeitus vietomis sumavimą n atžvilgiu ir sumavimą l atžvilgiu gaunama tokia išraiška:

$$\psi_m = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_n C_n^{(l)} \psi_n^{(0)} \equiv \sum_{l=0}^{\infty} \psi_m^{(l)} = \psi_m^{(0)} + \sum_{l=1}^{\infty} \psi_m^{(l)} \qquad (m = 1, 2, ...); \tag{A.2.2}$$

čia $\psi_m^{(l)}$ ($l = 1, 2, ...$) yra funkcijos, kurios nusako nesutrikdytosios tikrinės funkcijos $\psi_m^{(0)}$ mažas pataisas, kai yra trikdys:

$$\psi_m^{(l)} = \sum_n C_n^{(l)} \psi_n^{(0)} \qquad (l = 1, 2, ...). \tag{A.2.3}$$

Analogiškai visas (2.1.13) lygties tikrines vertes galima išreikšti šitaip:

$$E_m = \sum_{l=0}^{\infty} E_m^{(l)} = E_m^{(0)} + \sum_{l=1}^{\infty} E_m^{(l)} \qquad (m = 1, 2, ...); \tag{A.2.4}$$

čia $E_m^{(l)}$ ($l = 1, 2, ...$) yra mažos pataisos, kurias reikia pridėti prie nesutrikdytosios sistemos tikrinės energijos vertės $E_m^{(0)}$. Trikdžio mažumas pasireiškia tuo, kad $\psi_m^{(l)}$ ir $E_m^{(l)}$ yra ***l-tosios mažumo eilės dydžiai***. Tai reiškia, kad, apibrėžus mažą bedimensį parametrą λ, kuris proporcingas trikdžiui, galioja tokie proporcingumo sąryšiai:

$$|\psi_m^{(l)} / \psi_m^{(0)}| \sim \lambda^l, \text{ kai } \lambda << 1, \tag{A.2.5a}$$

$$E_m^{(l)} / E_m^{(0)} \sim \lambda^l, \text{ kai } \lambda << 1. \tag{A.2.5b}$$

Kadangi $\psi_m^{(l)}$ yra l-tosios mažumo eilės dydis, tai koeficientai $C_n^{(l)}$ taip pat yra l-tosios mažumo eilės dydžiai:

$$|C_n^{(l)} / C_n^{(0)}| \sim \lambda^l, \text{ kai } \lambda << 1. \tag{A.2.6}$$

A.2.2. *Nuostoviosios trikdymų teorijos pagrindinės lygybės išvedimas*

Pagal prielaidą funkcija ψ_m yra lygties

$$\hat{H}^{(0)}\psi + \hat{V}\psi = E\psi \tag{A.2.7}$$

tikrinė funkcija, kurios tikrinė vertė yra (A.2.4). Įrašę (A.2.1) ir (A.2.4) į (A.2.7) ir atsižvelgę į tai, kad funkcijos $\psi_n^{(0)}$ yra nesutrikdytojo hamiltoniano $\hat{H}^{(0)}$ tikrinės funkcijos (t. y. $\hat{H}\psi_n^{(0)} = E_n^{(0)}\psi_n^{(0)}$), matome:

$$\sum_n \left(E_n^{(0)} \psi_n^{(0)} \sum_{l=0}^{\infty} C_n^{(l)} \right) + \hat{V} \sum_n \left(\psi_n^{(0)} \sum_{l=0}^{\infty} C_n^{(l)} \right) = \left(\sum_{l=0}^{\infty} E_m^{(l)} \right) \left(\sum_n \psi_n^{(0)} \sum_{l=0}^{\infty} C_n^{(l)} \right). \tag{A.2.8}$$

Padauginame šios lygybės abi puses iš funkcijos, kuri yra nesutrikdytos sistemos tikrinės funkcijos $\psi_k^{(0)}$ ($k = 1, 2, ...$) kompleksiškai jungtinė funkcija, ir integruojame visoje šių funkcijų argumentų apibrėžimo srityje. Kadangi hamiltoniano tikrinės funkcijos yra ortonormuotos, tai funkcijų $\psi_n^{(0)}$ ir $\psi_k^{(0)*}$ sandaugos integralas yra lygus nuliui, kai $n \neq k$, ir yra lygus 1, kai $n = k$:

$$\int \psi_k^{(0)*} \psi_n^{(0)} \mathrm{d}\upsilon = \begin{cases} 1, & \text{kai } n = k; \\ 0, & \text{kai } n \neq k; \end{cases} \tag{A.2.9}$$

čia $\mathrm{d}\upsilon$ nusako integravimo srities tūrio elementą (tūris žymimas mažąja raide „υ“, kad nesipainiotų su trikdžio žymeniu $\hat{V}$). Atsižvelgus į (A.2.9), (A.2.8) lygybės dešiniojoje pusėje ir kairiosios pusės pirmajame dėmenyje nebelieka sumų n atžvilgiu:

$$E_k^{(0)} \sum_{l=0}^{\infty} C_k^{(l)} + \sum_n \left(V_{kn} \sum_{l=0}^{\infty} C_n^{(l)} \right) = \left(\sum_{l=0}^{\infty} E_m^{(l)} \right) \left(\sum_{l=0}^{\infty} C_k^{(l)} \right), \quad k = 1, 2, ...; \tag{A.2.10}$$

čia dydis V_{kn} – tai trikdžio hamiltoniano matricos elementas operatoriaus $\hat{H}^{(0)}$ tikrinių funkcijų bazėje (žr. 3.1.6 poskyrį):

$$V_{kn} \equiv \int \psi_k^{(0)*} \hat{V} \psi_n^{(0)} \mathrm{d}\upsilon \,. \tag{A.2.11}$$

Teigiame, kad trikdžio hamiltoniano matricos elementai V_{kn} yra pirmosios mažumo eilės dydžiai (vėliau ši sąlyga bus išreikšta kiekybiškai).

(A.2.10) yra pagrindinė nuostoviosios trikdymų teorijos lygybė. Naudojantis šia lygybe, galima nuosekliai apskaičiuoti visų eilių energijos pataisas $E_m^{(l)}$ ($l = 1, 2, ...$) ir kiekvienos eilės banginės funkcijos pataisos koeficientus $C_k^{(l)}$ ($k = 1, 2, ...$). Šie skaičiavimai remiasi šiais dviem teiginiais:

1) (A.2.10) lygybė galioja tik tada, kai vienodos mažumo eilės dėmenys kairiojoje ir dešiniojoje pusėje sutampa;

2) dviejų dydžių sandaugos mažumo eilė yra lygi abiejų dauginamų dydžių mažumo eilių sumai.

Šios dvi taisyklės išplaukia iš (A.2.5b) ir (A.2.6) lygybių. Mat, kai $\lambda \to 0$, (A.2.10) lygybės abi puses galima išreikšti parametro λ laipsnių suma (daugianariu). Kaip žinome, du daugianariai tapačiai sutampa tik tada, kai jų koeficientai prie atitinkamų laipsnių yra lygūs vienas kitam. Be to, yra žinoma, kad dviejų laipsnių sandaugos rodiklis yra lygus dauginamųjų laipsnių rodiklių sumai.

Aptarsime tik pirmąjį trikdymų teorijos artinį. Šiame artinyje (A.2.1) ir (A.2.4) reiškiniuose paliekami tik dėmenys su $l = 0$ ir $l = 1$:

$$\psi_m = \sum_n C_n^{(0)} \psi_n^{(0)} + \sum_n C_n^{(1)} \psi_n^{(1)} \qquad (m = 1, 2, ...), \tag{A.2.12}$$

$$E_m = E_m^{(0)} + E_m^{(1)} \qquad (m = 1, 2, ...). \tag{A.2.13}$$

Išreikšime pirmosios eilės pataisas $C_n^{(1)}$ ($n = 1, 2, \ldots$) ir $E_m^{(1)}$. Tam (A.2.10) lygybės kairiojoje ir dešiniojoje pusėse išskiriame pirmosios mažumo eilės dėmenis ($l = 1$) ir prilyginame juos vieną kitam:

$$E_k^{(0)} C_k^{(1)} + \sum_n V_{kn} C_n^{(0)} = E_m^{(0)} C_k^{(1)} + E_m^{(1)} C_k^{(0)}, \quad k = 1, 2, ... \tag{A.2.14}$$

Šios lygties sprendimas priklauso nuo to, ar nesutrikdytos sistemos energijos lygmuo $E_m^{(0)}$ yra neišsigimęs, ar išsigimęs.

A.2.3. *Nuostoviosios trikdymų teorijos pirmasis artinys, kai energijos lygmuo yra neišsigimęs*

Visų pirma tarkime, kad lygmuo $E_m^{(0)}$ yra neišsigimęs, t. y. kad jį atitinka viena tiksliai apibrėžta hamiltoniano $\hat{H}^{(0)}$ tikrinė funkcija. Matematiškai šis teiginys užrašomas šitaip:

$$C_k^{(0)} = \begin{cases} 1, & k = m; \\ 0, & k \neq m. \end{cases} \tag{A.2.15}$$

Todėl (A.2.12) reiškinį galima užrašyti šitaip:

$$\psi_m = \psi_m^{(0)} + \sum_n C_n^{(1)} \psi_n^{(1)} \qquad (m = 1, 2, ...). \tag{A.2.16}$$

Kai $k \neq m$, iš (A.2.15) išplaukia, kad (A.2.14) lygybės kairiosios pusės antrajame dėmenyje (sumoje) lieka tik vienas dėmuo su $n = m$, o dešiniosios pusės antrasis dėmuo tampa lygus nuliui:

$$E_k^{(0)} C_k^{(1)} + V_{km} = E_m^{(0)} C_k^{(1)}, \qquad k \neq m.$$

Išreiškiame $C_k^{(1)}$:

$$C_k^{(1)} = \frac{V_{km}}{E_m^{(0)} - E_k^{(0)}}, \qquad k \neq m. \tag{A.2.17}$$

(A.2.17) lygybė ne tik išreiškia banginės funkcijos koeficientų pirmosios mažumo eilės pataisas, bet ir leidžia kiekybiškai nusakyti trikdymų teorijos taikomumo sąlygą – trikdžio „mažumo“ sąlygą. Kadangi pagal prielaidą koeficientai $C_k^{(1)}$ yra pirmosios mažumo eilės dydžiai, tai trikdžio matricos elementai turi būti daug mažesni už atitinkamų nesutrikdytų energijos lygmenų skirtumą:

$$|V_{km}| << |E_m^{(0)} - E_k^{(0)}|. \tag{A.2.18}$$

Kai $k = m$, pirmieji dėmenys (A.2.14) lygybės abiejose pusėse tampa lygūs vienas kitam (t. y. susiprastina), o antrasis dėmuo dešiniojoje pusėje tampa lygus $E_m^{(1)}$. Todėl gauname:

$$E_m^{(1)} = V_{mm} \equiv \langle \hat{V} \rangle_m , \tag{A.2.19}$$

t. y. neišsigimusio energijos lygmens pokytis pirmajame trikdymų teorijos artinyje yra lygus trikdžio hamiltoniano vidurkiui, kai sistemos būseną nusako funkcija $\psi_m^{(0)}$ (žr. bendrąją vidurkio išraišką (3.1.11)). Lieka tik išreikšti koeficientą $C_m^{(1)}$. Šis koeficientas išvedamas iš banginės funkcijos normavimo sąlygos:

$$\int \psi_m^* \psi_m \mathrm{d}\upsilon = 1 . \tag{A.2.20}$$

Į šią sąlygą įrašę (A.2.16) funkciją ir palikę tik pirmosios mažumo eilės dėmenis bei atsižvelgę į tai, kad funkcijos $\psi_n^{(0)}$ yra ortonormuotos, gauname, kad vienintelis reikalavimas koeficientui $C_m^{(1)}$ yra šis: $C_m^{(1)*} = -C_m^{(1)}$. T. y. šio koeficiento realioji dalis turi būti lygi nuliui. Pvz., galima teigti, kad šis koeficientas lygus nuliui:

$$C_m^{(1)} = 0 . \tag{A.2.21}$$

A.2.4. *Nuostoviosios trikdymų teorijos pirmasis artinys, kai energijos lygmuo yra išsigimęs*

Dabar tarkime, kad nesutrikdytos sistemos energijos lygmuo $E_m^{(0)}$ yra išsigimęs, o jo išsigimimo laipsnis yra j. Tai reiškia, kad hamiltoniano $\hat{H}^{(0)}$ tikrinę vertę $E_m^{(0)}$ atitinka $j > 1$ ortonormuotų tikrinių funkcijų $\psi_k^{(0)}$ ($k = k_0,\ k_0 + 1,\ k_0 + 2,\ ...,\ k_0 + j - 1$). Kitaip sakant, (A.2.14) lygybės kairiojoje pusėje esančios $E_k^{(0)}$ vertės, kurios atitinka minėtąsias indekso k vertes, yra vienodos ir lygios $E_m^{(0)}$. Užrašę (A.2.14) lygybę, kai indeksas k lygus kiekvienai iš tų verčių, gauname j tokio pavidalo lygčių:

$$\sum_n V_{kn} C_n^{(0)} = E_m^{(1)} C_k^{(0)} , \quad k = k_0, k_0 + 1, ..., k_0 + j - 1. \tag{A.2.22}$$

Kai nesutrikdytoji sistema yra energijos lygmenyje $E_m^{(0)}$, jos banginė funkcija yra lygi tą lygmenį atitinkančių ortonormuotųjų tikrinių funkcijų tiesiniam dariniui. Tai reiškia, kad (A.2.22) lygybės kairiojoje pusėje visi koeficientai $C_n^{(0)}$, kurie atitinka $n < k_0$ arba $n > k_0 + j - 1$, yra lygūs nuliui. Vadinasi, lygčių sistemos (A.2.22) kairiojoje pusėje sumavimo indeksas n įgyja tas pačias j verčių kaip ir indeksas k. T. y. turime j lygčių sistemą j nežinomųjų koeficientų $C_n^{(0)}$ atžvilgiu. Kaip žinoma iš tiesinės algebros, ši homogeninių tiesinių lygčių sistema turi sprendinį tik esant tam tikroms dydžio $E_m^{(1)}$ vertėms. Šios vertės – tai sistemos charakteristinės lygties sprendiniai (charakteristinė lygtis – tai j-tosios eilės algebrinė lygtis, kuri gaunama prilyginus sistemos determinantą nuliui). Jie nusako pirmosios eilės energijos pataisas. Išsprendę (A.2.22) sistemą, kai $E_m^{(1)}$ yra lygus kiekvienai iš j leidžiamųjų verčių, gauname koeficientų $C_n^{(0)}$ rinkinius, kurie atitinka kiekvieną iš leidžiamųjų energijų $E_m^{(0)} + E_m^{(1)}$. Kiekvieną tokį rinkinį sudaro j koeficientų. Jeigu visos gautosios $E_m^{(1)}$ vertės yra skirtingos, tai reiškia, kad vienas j kartų išsigimęs lygmuo skyla į j neišsigimusių lygmenų. Taigi, tokiu atveju trikdys visiškai pašalina lygmens išsigimimą. Jeigu tarp $E_m^{(1)}$ verčių yra vienodų verčių, tai reiškia, kad atitinkama energijos vertė $E_m^{(0)} + E_m^{(1)}$ yra išsigimusi, tačiau jos išsigimimo laipsnis yra mažesnis. Taigi, pastaruoju atveju trikdys iš dalies pašalina išsigimimą. Gali atsitikti ir taip, kad visi lygčių sistemos (A.2.22) koeficientai yra lygūs nuliui. Tada išsigimimą pašalina aukštesnieji trikdymų teorijos artiniai (t. y. reikia skaičiuoti antrosios eilės arba aukštesniųjų eilių pataisas).

Taigi, kai energijos vertė yra išsigimusi, trikdymų teorijos pirmajame artinyje gauname, kad trikdys visiškai arba iš dalies pašalina energijos lygmens išsigimimą, tačiau banginės funkcijos išraiškoje neatsiranda pirmosios eilės pataisų. Jeigu išsigimimas pašalinamas visiškai, tada energijos lygmuo $E_m^{(0)}$ skyla į j energijos lygmenų, o trikdžio poveikis banginėms funkcijoms pasireiškia tuo, kad jis iš visų galimų funkcijų $\psi_k^{(0)}$ ($k = k_0,\ k_0 + 1,\ k_0 + 2,\ ...,\ k_0 + j - 1$) tiesinių darinių „atrenka“ j tiesinių darinių, kurie atitinka sutrikdytos sistemos energijos lygmenis.

A.3. Nenuostovioji trikdymų teorija

Dabar tarkime, kad trikdžio hamiltonianas $\hat{V}$ išreikštu pavidalu priklauso nuo laiko t. Veikiant tokiam trikdžiui, nuostovių būsenų nėra, todėl nėra ir energijos tikrinių verčių (t. y. negalioja nuostovioji Šrėdingerio lygtis (2.1.13), o banginių funkcijų neįmanoma išreikšti (2.1.12) pavidalu).

Šiuo atveju, sprendžiant (A.1.1) lygtį nuosekliųjų artinių metodu, reikia atsižvelgti į tai, kad (A.1.7) sumos koeficientai $C_n^{(l)}$ priklauso nuo laiko. Įrašome (A.1.2) ir (A.1.7) reiškinius į sprendžiamąją lygtį (A.1.1). Pritaikius sandaugos išvestinės formulę, dešiniojoje lygybės pusėje gaunamos dvi sumos:

$$-\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{\partial \Psi}{\partial t}=\left[\sum_n\left(-\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{\partial \Psi_n^{(0)}}{\partial t}\right)\sum_{l=0}^{\infty}C_n^{(l)}\right]-\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\sum_n\Psi_n^{(0)}\sum_{l=0}^{\infty}\frac{\mathrm{d}C_n^{(l)}}{\mathrm{d}t}. \tag{A.3.1}$$

Kadangi $\Psi_n^{(0)}$ yra nesutrikdytojo hamiltoniano tikrinės funkcijos, tai reiškinys laužtiniuose skliaustuose yra lygus

$$\sum_n\left(-\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{\partial \Psi_n^{(0)}}{\partial t}\right)\sum_{l=0}^{\infty}C_n^{(l)}=\sum_n\hat{H}^{(0)}\Psi_n^{(0)}\sum_{l=0}^{\infty}C_n^{(l)}.$$

Lygiai toks pat reiškinys atsiranda ir kairiojoje lygybės pusėje. Todėl ši suma susiprastina ir gauname tokią lygtį:

$$\hat{V}\sum_n\Psi_n^{(0)}\sum_{l=0}^{\infty}C_n^{(l)}=-\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\sum_n\Psi_n^{(0)}\sum_{l=0}^{\infty}\frac{\mathrm{d}C_n^{(l)}}{\mathrm{d}t}. \tag{A.3.2}$$

Padauginus šios lygybės abi puses iš bet kurios kompleksiškai jungtinės nesutrikdytojo hamiltoniano tikrinės funkcijos $\Psi_k^{(0)*}$, integravus visoje erdvėje ir atsižvelgus į funkcijų $\Psi_n^{(0)}$ tarpusavio ortonormuotumą, išvedama lygtis

$$\sum_n V_{kn}(t)\exp\left(\mathrm{i}\frac{E_k^{(0)}-E_n^{(0)}}{\hbar}t\right)\sum_{l=0}^{\infty}C_n^{(l)}=-\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\sum_{l=0}^{\infty}\frac{\mathrm{d}C_k^{(l)}}{\mathrm{d}t},\quad k=1,2,...; \tag{A.3.3}$$

čia $V_{kn}(t)$ yra trikdžio matricos elementas, kuris apibrėžiamas (A.2.11) reiškiniu.

(A.3.3) yra pagrindinė nenuostoviosios trikdymų teorijos lygybė. Koeficientų pataisos $C_n^{(l)}$ apskaičiuojamos tuo pačiu būdu, kaip ir sprendžiant pagrindinę nuostoviosios trikdymų teorijos lygtį (A.2.10). T. y. vienodos mažumo eilės dėmenys, kurie yra skirtingose lygybės pusėse, prilyginami vienas kitam (kaip minėta A.2 skyrelyje, V_{kn} yra pirmosios mažumo eilės dydis, o $C_n^{(l)}$ yra l-tosios mažumo eilės dydis). Šitaip išvedame rekurentinį sąryšį

$$-\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{\mathrm{d}C_k^{(l+1)}}{\mathrm{d}t}=\sum_n V_{kn}(t)\exp\left(\mathrm{i}\frac{E_k^{(0)}-E_n^{(0)}}{\hbar}t\right)C_n^{(l)};\quad l=0,1,2,... \tag{A.3.4}$$

Tarkime, kad nesutrikdytoji būsena yra viena iš nuostoviųjų būsenų, kurias nusako funkcija $\Psi_m^{(0)}$. T. y. $C_m^{(0)}=1$, o visi kiti koeficientai $C_n^{(0)}$ ($n\neq m$) yra lygūs nuliui:

$$C_n^{(0)}=\delta_{nm}\equiv\begin{cases}1, & n=m;\\ 0 & n\neq m.\end{cases} \tag{A.3.5}$$

Tada pagal (A.3.4) pirmojo artinio koeficiento $C_k(t)$ pataisa atitinka lygtį

$$-\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{\mathrm{d}C_k^{(1)}}{\mathrm{d}t}=V_{km}(t)\exp\left(\mathrm{i}\frac{E_k^{(0)}-E_m^{(0)}}{\hbar}t\right). \tag{A.3.6}$$

Taigi, jeigu trikdys atsiranda laiko momentu $t = 0$, tada

$$C_k^{(1)}(t)=-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_0^t V_{km}(\tau)\exp\left(\mathrm{i}\frac{E_k^{(0)}-E_m^{(0)}}{\hbar}\tau\right)\mathrm{d}\tau. \tag{A.3.7}$$

B priedas. Kai kurie vektorinės analizės sąryšiai ir apibrėžtys

Nagrinėjant fizikines sistemas, kurioms būdinga simetrija posūkio atžvilgiu (pvz., atomą arba atomo branduolį), daugelį skaičiavimų patogiausia atlikti sferinėje koordinačių sistemoje. Sferinės koordinatės yra paaiškintos B.1b pav. Sferinių koordinačių pavadinimai: r – ***radialioji koordinatė***, θ – ***polinis kampas***, ϕ – ***azimutinis kampas***. Kampai θ ir ϕ kartu vadinami ***kampinėmis koordinatėmis***. Kampo θ apibrėžimo intervalas yra $0 \leq \theta \leq \pi$, o kampo ϕ apibrėžimo intervalas yra $0 \leq \phi < 2\pi$.

Koordinatinės linijos – tai linijos, išilgai kurių dvi koordinatės yra pastovios. Dekarto sistemoje koordinatinės linijos yra lygiagrečios koordinačių ašims, o sferinėje sistemoje koordinatinės linijos – tai iš koordinačių pradžios taško išeinantys spinduliai (θ, ϕ = *const*), pusapskritimių šeima (r, ϕ = *const*) ir apskritimų šeima (r, θ = *const*). Trys vienetiniai vektoriai, kurie yra lygiagretūs su koordinatinių linijų liestinėmis duotajame taške, vadinami koordinačių sistemos ***baziniais vektoriais***. Dekarto ir sferinėje koordinačių sistemose baziniai vektoriai yra statmeni vienas kitam (žr. B.1 pav.). Vektorinės funkcijos $\boldsymbol{F}(\boldsymbol{r})$ išraiška Dekarto koordinačių sistemos baziniais vektoriais:

$$\boldsymbol{F}(\boldsymbol{r}) = F_x(\boldsymbol{r})\boldsymbol{e}_x + F_y(\boldsymbol{r})\boldsymbol{e}_y + F_z(\boldsymbol{r})\boldsymbol{e}_z\,. \tag{B.1}$$

Vektorinės funkcijos $\boldsymbol{F}$ ($\boldsymbol{r}$) išraiška sferinės sistemos baziniais vektoriais:

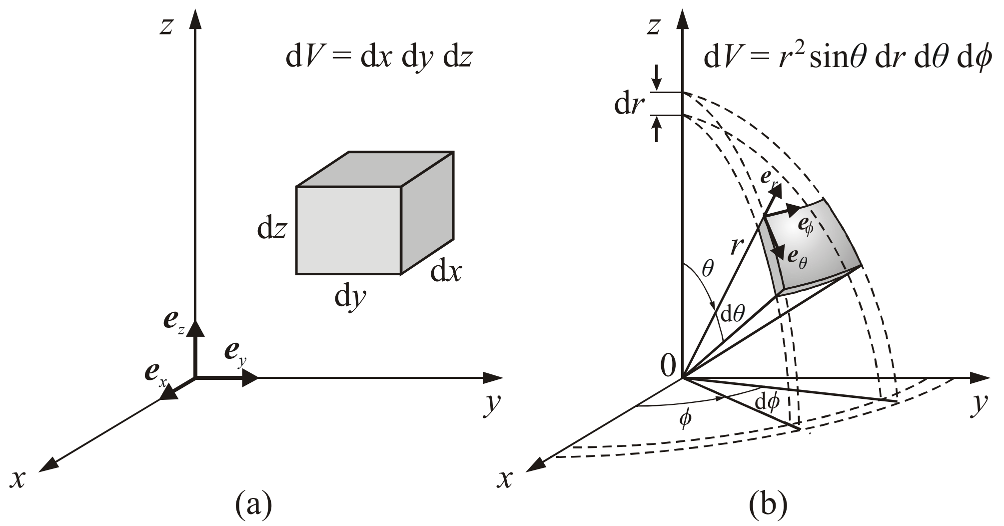
$$\boldsymbol{F}(\boldsymbol{r}) = F_r(\boldsymbol{r})\boldsymbol{e}_r + F_\theta(\boldsymbol{r})\boldsymbol{e}_\theta + F_\phi(\boldsymbol{r})\boldsymbol{e}_\phi\,; \tag{B.2}$$

čia $\boldsymbol{r}$ yra erdvės taško spindulys vektorius (t. y. koordinačių trejetas).

Dekarto koordinačių sistemos ypatybė yra ta, kad jos bazinių vektorių kryptys yra fiksuotos (jos lygiagrečios koordinačių ašims). Sferinės koordinačių sistemos bazinių vektorių kryptys nėra fiksuotos (žr. B.1b pav.). Todėl sferinėmis koordinatėmis išreiškiant bet kurio diferencialinio operatoriaus poveikį vektorinei funkcijai $\boldsymbol{F}(\boldsymbol{r})$ reikia atsižvelgti į tai, kad tas operatorius veikia ne tik tos funkcijos komponentes F_r, F_θ ir F_ϕ, bet ir bazinius vektorius. Sferinės koordinačių sistemos bazinių vektorių išvestinės sferinių koordinačių atžvilgiu yra pateiktos toliau:

$$\begin{aligned}
&\frac{\partial \boldsymbol{e}_r}{\partial r} = 0, &&\frac{\partial \boldsymbol{e}_\theta}{\partial r} = 0, &&\frac{\partial \boldsymbol{e}_\phi}{\partial r} = 0;\\
&\frac{\partial \boldsymbol{e}_r}{\partial \theta} = \boldsymbol{e}_\theta, &&\frac{\partial \boldsymbol{e}_\theta}{\partial \theta} = -\boldsymbol{e}_r, &&\frac{\partial \boldsymbol{e}_\phi}{\partial \theta} = 0;\\
&\frac{\partial \boldsymbol{e}_r}{\partial \phi} = \boldsymbol{e}_\phi \sin\theta, &&\frac{\partial \boldsymbol{e}_\theta}{\partial \phi} = \boldsymbol{e}_\phi \cos\theta, &&\frac{\partial \boldsymbol{e}_\phi}{\partial \phi} = -\boldsymbol{e}_r \sin\theta - \boldsymbol{e}_\theta \cos\theta.
\end{aligned} \tag{B.3}$$

B.1 ir B.2 lentelėse yra pateiktos kai kurių diferencialinių operatorių išraiškos Dekarto ir sferinėmis koordinatėmis (skaičiuojant kai kurių operatorių išraiškas sferinėmis koordinatėmis, buvo pasinaudota (B.3) sąryšiais). Norint gauti kurio nors operatoriaus poveikio funkcijai rezultatą, reikia operatoriaus išraiškoje vietoj daugtaškio įrašyti tos funkcijos išraišką (jeigu funkcija yra skaliarinė) arba tos funkcijos komponenčių išraiškas (jeigu funkcija yra vektorinė).



B.1 pav. Baziniai vektoriai ir tūrio elementai Dekarto koordinačių sistemoje (a) ir sferinėje koordinačių sistemoje (b)

B.1 lentelė. Kai kurių diferencialinių operatorių išraiškos Dekarto koordinačių sistemoje

Operatorius	Išraiška Dekarto koordinatėmis
Operatorius „nabla“ ∇; skaliarinės funkcijos gradientas **grad**(...) = ∇...	$\boldsymbol{e}_x \frac{\partial ...}{\partial x} + \boldsymbol{e}_y \frac{\partial ...}{\partial y} + \boldsymbol{e}_z \frac{\partial ...}{\partial z}$
Vektorinės funkcijos divergencija div (...) = ∇•(...)	$\frac{\partial (...)_x}{\partial x} + \frac{\partial (...)_y}{\partial y} + \frac{\partial (...)_z}{\partial z}$
Vektorinės funkcijos rotorius **rot** (...) = ∇×(...)	$\boldsymbol{e}_x \left(\frac{\partial (...)_z}{\partial y} - \frac{\partial (...)_y}{\partial z} \right) + \boldsymbol{e}_y \left(\frac{\partial (...)_x}{\partial z} - \frac{\partial (...)_z}{\partial x} \right) + \boldsymbol{e}_z \left(\frac{\partial (...)_y}{\partial x} - \frac{\partial (...)_x}{\partial y} \right) \equiv$ $\equiv \begin{vmatrix} \boldsymbol{e}_x & \boldsymbol{e}_y & \boldsymbol{e}_z \\ \frac{\partial}{\partial x} & \frac{\partial}{\partial y} & \frac{\partial}{\partial z} \\ (...)_x & (...)_y & (...)_z \end{vmatrix}$
Skaliarinės funkcijos laplasianas ∇^2...	$\frac{\partial^2 ...}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 ...}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 ...}{\partial z^2}$
(***r*** ×∇)... = ***r*** × **grad**(...)	$\boldsymbol{e}_x \left(y \frac{\partial ...}{\partial z} - z \frac{\partial ...}{\partial y} \right) + \boldsymbol{e}_y \left(z \frac{\partial ...}{\partial x} - x \frac{\partial ...}{\partial z} \right) + \boldsymbol{e}_z \left(x \frac{\partial ...}{\partial y} - y \frac{\partial ...}{\partial x} \right)$
(***r*** •∇)... = ***r*** · **grad**(...)	$x \frac{\partial ...}{\partial x} + y \frac{\partial ...}{\partial y} + z \frac{\partial ...}{\partial z}$

B.2 lentelė. Kai kurių diferencialinių operatorių išraiškos sferinėje koordinačių sistemoje

Operatorius	Išraiška sferinėmis koordinatėmis
Operatorius „nabla“ ∇; skaliarinės funkcijos gradientas **grad**(...) = ∇...	$\boldsymbol{e}_r \frac{\partial ...}{\partial r} + \boldsymbol{e}_\theta \frac{1}{r} \frac{\partial ...}{\partial \theta} + \boldsymbol{e}_\phi \frac{1}{r \sin\theta} \frac{\partial ...}{\partial \phi}$
Vektorinės funkcijos divergencija div (...) = ∇•(...)	$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r^2 (...)_r) + \frac{1}{r \sin\theta} \frac{\partial}{\partial \theta} ((...)_\theta \sin\theta) + \frac{1}{r \sin\theta} \frac{\partial (...)_\phi}{\partial \phi}$
Vektorinės funkcijos rotorius **rot** (...) = ∇×(...)	$\frac{\boldsymbol{e}_r}{r \sin\theta} \left[\frac{\partial}{\partial \theta} ((...)_\phi \sin\theta) - \frac{\partial (...)_\theta}{\partial \phi} \right] +$ $+ \frac{\boldsymbol{e}_\theta}{r} \left[\frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial (...)_r}{\partial \phi} - \frac{\partial}{\partial r} (r (...)_\phi) \right] + \frac{\boldsymbol{e}_\phi}{r} \left[\frac{\partial}{\partial r} (r (...)_\theta) - \frac{\partial (...)_r}{\partial \theta} \right]$
Skaliarinės funkcijos laplasianas ∇^2...= ∇•∇(...)	$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial ...}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin\theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin\theta \frac{\partial ...}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2\theta} \frac{\partial^2 ...}{\partial \phi^2}$
(***r*** ×∇)... = ***r*** × **grad**(...)	$\boldsymbol{e}_\phi \frac{\partial ...}{\partial \theta} - \frac{\boldsymbol{e}_\theta}{\sin\theta} \frac{\partial ...}{\partial \phi}$
(***r*** ·∇)... = ***r*** · **grad**(...)	$r \frac{\partial ...}{\partial r}$

Toliau pateikti keli sąryšiai, kurie nusako operatoriaus ∇ poveikį funkcijų sandaugoms (skaliarinės funkcijos žymimos Φ ir Ψ, o vektorinės funkcijos žymimos $\boldsymbol{F}$ ir $\boldsymbol{G}$):

$$\nabla(\Phi\Psi) = \Psi\ \nabla\Phi + \Phi\ \nabla\Psi\,, \tag{B.4}$$

$$\nabla(\boldsymbol{F}\cdot\boldsymbol{G}) = (\boldsymbol{F}\cdot\nabla)\boldsymbol{G} + (\boldsymbol{G}\cdot\nabla)\boldsymbol{F} + \boldsymbol{F}\times(\nabla\times\boldsymbol{G}) + \boldsymbol{G}\times(\nabla\times\boldsymbol{F})\,, \tag{B.5}$$

$$\nabla\cdot(\Phi\boldsymbol{F}) = \Phi\ \nabla\cdot\boldsymbol{F} + (\nabla\Phi)\cdot\boldsymbol{F}\,, \tag{B.6}$$

$$\nabla\cdot(\boldsymbol{F}\times\boldsymbol{G}) = \boldsymbol{G}\cdot(\nabla\times\boldsymbol{F}) - \boldsymbol{F}\cdot(\nabla\times\boldsymbol{G})\,, \tag{B.7}$$

$$(\boldsymbol{G}\cdot\nabla)(\Phi\boldsymbol{F}) = \boldsymbol{F}(\boldsymbol{G}\cdot\nabla\Phi) + \Phi(\boldsymbol{G}\cdot\nabla)\boldsymbol{F}\,, \tag{B.8}$$

$$\nabla\times(\Phi\boldsymbol{F}) = \Phi\,(\nabla\times\boldsymbol{F}) + (\nabla\Phi)\times\boldsymbol{F}\,, \tag{B.9}$$

$$\nabla\times(\boldsymbol{F}\times\boldsymbol{G}) = (\boldsymbol{G}\cdot\nabla)\boldsymbol{F} - (\boldsymbol{F}\cdot\nabla)\boldsymbol{G} + \boldsymbol{F}(\nabla\cdot\boldsymbol{G}) - \boldsymbol{G}(\nabla\cdot\boldsymbol{F})\,, \tag{B.10}$$

$$(\boldsymbol{G}\cdot\nabla)\boldsymbol{F} = \frac{1}{2}[\nabla\times(\boldsymbol{F}\times\boldsymbol{G}) + \nabla(\boldsymbol{F}\cdot\boldsymbol{G}) - \boldsymbol{F}(\nabla\cdot\boldsymbol{G}) + \boldsymbol{G}(\nabla\cdot\boldsymbol{F}) - \boldsymbol{F}\times(\nabla\times\boldsymbol{G}) - \boldsymbol{G}\times(\nabla\times\boldsymbol{F})]\,. \tag{B.11}$$

Antrosios eilės operacijos:

$$\left.\begin{aligned}
&\operatorname{div}\mathbf{grad}\,\Phi = \nabla\cdot(\nabla\Phi) = \nabla^2\Phi,\\
&\mathbf{grad}\operatorname{div}\boldsymbol{F} = \nabla(\nabla\cdot\boldsymbol{F}) = \nabla^2\boldsymbol{F} + \nabla\times(\nabla\times\boldsymbol{F}),\\
&\mathbf{rot}\,\mathbf{rot}\,\boldsymbol{F} = \nabla\times(\nabla\times\boldsymbol{F}) = \nabla(\nabla\cdot\boldsymbol{F}) - \nabla^2\boldsymbol{F},\\
&\mathbf{rot}\,\mathbf{grad}\,\Phi = \nabla\times(\nabla\Phi) = 0,\\
&\operatorname{div}\mathbf{rot}\,\boldsymbol{F} = \nabla\cdot(\nabla\times\boldsymbol{F}) = 0.
\end{aligned}\right\} \tag{B.12}$$

Operacijos su spinduliu vektoriumi $\boldsymbol{r}$:

$$\left.\begin{aligned}
&\operatorname{div}\boldsymbol{r} = \nabla\cdot\boldsymbol{r} = 3,\\
&\mathbf{rot}\,\boldsymbol{r} = \nabla\times\boldsymbol{r} = 0,\\
&(\boldsymbol{G}\cdot\nabla)\boldsymbol{r} = \boldsymbol{G},\\
&\nabla^2\boldsymbol{r} = 0,\\
&\mathbf{grad}\operatorname{div}\boldsymbol{r} = \nabla(\nabla\cdot\boldsymbol{r}) = 0.
\end{aligned}\right\} \tag{B.13}$$

Papildomus sąryšius galima gauti pasinaudojus (B.4)–(B.11) formulėmis.

B.3 lentelėje pateiktos kelios teoremos, kurios susieja tūrinius ir paviršinius integralus (paviršinio integralo integravimo paviršius gaubia tūrinio integralo integravimo tūrį). Paviršinio integralo išraiškoje „d$\boldsymbol{S}$“ reiškia vektorių, kurio modulis lygus ploto elementui dS, o kryptis statmena tam ploto elementui (ir nukreipta į išorę). d$\boldsymbol{S}$ ir bet kokios skaliarinės funkcijos Ψ gradiento skaliarinę sandaugą galima užrašyti šitaip:

$$\mathrm{d}\boldsymbol{S}\cdot\nabla\Psi \equiv \frac{\partial\Psi}{\partial n}\mathrm{d}S\,; \tag{B.14}$$

čia $\partial\Psi/\partial n$ yra funkcijos Ψ išvestinė integravimo paviršiaus normalės kryptimi.

B.3 lentelė. Tūrinių ir paviršinių integralų sąryšiai

Integravimas dalimis	$\int_V \Phi\,(\nabla\cdot\boldsymbol{F})\mathrm{d}V = \int_S \Phi\mathrm{d}\boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{F} - \int_V (\boldsymbol{F}\cdot\nabla\Phi)\mathrm{d}V$
Gauso ir Ostrogradskio teorema	$\int_V \nabla\cdot\boldsymbol{F}(\boldsymbol{r})\mathrm{d}V = \int_S \mathrm{d}\boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{F}(\boldsymbol{r})$
Rotoriaus teorema	$\int_V \nabla\times\boldsymbol{F}(\boldsymbol{r})\mathrm{d}V = \int_S \mathrm{d}\boldsymbol{S}\times\boldsymbol{F}(\boldsymbol{r})$
Gradiento teorema	$\int_V \nabla\Phi(\boldsymbol{r})\mathrm{d}V = \int_S \mathrm{d}\boldsymbol{S}\cdot\Phi(\boldsymbol{r})$
Gryno teoremos	$\int_V \nabla\Phi\cdot\nabla\Psi\,\mathrm{d}V + \int_V \Psi\,\nabla^2\Phi\,\mathrm{d}V = \int_S \mathrm{d}\boldsymbol{S}\cdot(\Psi\,\nabla\Phi) = \int_S \Psi\frac{\partial\Phi}{\partial n}\mathrm{d}S,$ $\int_V (\Psi\,\nabla^2\Phi - \Phi\,\nabla^2\Psi)\mathrm{d}V = \int_S \mathrm{d}\boldsymbol{S}\cdot(\Psi\,\nabla\Phi - \Phi\,\nabla\Psi) = \int_S\left(\Psi\frac{\partial\Phi}{\partial n} - \Phi\frac{\partial\Psi}{\partial n}\right)\mathrm{d}S$
Atskiri atvejai	$\int_V \nabla^2\Phi(\boldsymbol{r})\mathrm{d}V = \int_S \mathrm{d}\boldsymbol{S}\cdot\nabla\Phi(\boldsymbol{r}) = \int_S \frac{\partial\Phi}{\partial n}\mathrm{d}S$ (Gauso teorema), $\int_V \lvert\nabla\Phi\rvert^2\,\mathrm{d}V + \int_V \Phi\,\nabla^2\Phi\,\mathrm{d}V = \int_S \mathrm{d}\boldsymbol{S}\cdot(\Phi\,\nabla\Phi) = \int_S \Phi\frac{\partial\Phi}{\partial n}\mathrm{d}S$

C priedas. Judesio kiekio momento operatoriai ir jų tikrinės funkcijos[1]

C.1. Posūkiai ir judesio kiekio momentai

Judesio kiekio momento tvermės dėsnis yra susijęs su sistemos judėjimo lygčių simetrija (invariantiškumu) atžvilgiu koordinačių sistemos posūkio aplink bet kurią ašį. Tokia simetrija yra būdinga bet kuriai izoliuotai sistemai (pvz., atomui arba branduoliui). Tokia simetrija nėra būdinga sistemoms, kurias veikia išorinės jėgos (pvz., išorinis elektrinis arba magnetinis laukas). Išorinė jėga išskiria vieną ašį erdvėje (jėgos kryptį), todėl, pasukus koordinačių sistemą aplink bet kurią kitą ašį, judėjimo lygtys pasikeičia.

Tarkime, kad $\psi(x, y, z)$ yra vienos dalelės banginė funkcija (kvantinės judėjimo lygties sprendinys). Jeigu judėjimo lygtis yra simetriška posūkio aplink z ašį atžvilgiu, tada „pasuktoji“ funkcija ψ', kurios išraiška yra

$$\psi'(x,y,z) = \psi(x\cos\eta + y\sin\eta, y\cos\eta - x\sin\eta, z)\,, \tag{C.1.1}$$

taip pat yra judėjimo lygties sprendinys, nes ji skiriasi nuo ψ tik posūkiu kampu η aplink z ašį. Bet kurių dviejų sprendinių skirtumas taip pat yra judėjimo lygties sprendinys. Tarkime, kad posūkio kampas η yra nykstamasis dydis. Tada pirmuoju artutinumu $\cos\eta \approx 1$, $\sin\eta \approx \eta$, o funkciją ψ' galima išskleisti Teiloro eilute taško (x, y, z) aplinkoje ir palikti tik nulinės ir pirmosios mažumo eilės dėmenis. Atlikę šiuos pertvarkymus ir atėmę funkciją ψ iš funkcijos ψ', matome:

$$\psi' - \psi = \eta\left(y\frac{\partial\psi}{\partial x} - x\frac{\partial\psi}{\partial y}\right) \equiv -\mathrm{i}\eta\hat{L}_z\psi\,; \tag{C.1.2}$$

čia $\hat{L}_z$ yra diferencialinis operatorius

$$\hat{L}_z \equiv \mathrm{i}\left(y\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial y}\right). \tag{C.1.3}$$

Palyginę šią išraišką su (3.1.18), matome, kad šis operatorius – tai kvantinės mechanikos judesio kiekio projekcijos į z ašį operatorius, išreikštas $\hbar$ vienetais. Taigi, įsitikinome, kad funkcija $\hat{L}_z\psi$ yra judėjimo lygties sprendinys, jeigu ψ yra sprendinys ir jeigu judėjimo lygtis yra simetriška koordinačių sistemos posūkių atžvilgiu. Vadinasi, operatorius $\hat{L}_z$ komutuoja su sistemos hamiltonianu $\hat{H}$ (žr. 3.1.2 poskyrį). Šiuos teiginius galima apibendrinti ir daugelio dalelių sistemoms. Tada judesio kiekio momento projekcijos operatorius $\hat{L}_z$ yra skirtingų dalelių judesio kiekio momento projekcijų operatorių suma.

Operatorių $\hat{L}_x$ ir $\hat{L}_y$, kurie atitinka posūkius aplink x ir y ašis, išraiškos gaunamos analogiškai[2]. Padauginus kiekvieną operatorių $\hat{L}_x$, $\hat{L}_y$ ir $\hat{L}_z$ iš atitinkamo Dekarto koordinačių sistemos bazinio vektoriaus ($\boldsymbol{e}_x$, $\boldsymbol{e}_y$ ir $\boldsymbol{e}_x$) ir sudėjus gaunamas pilnutinio judesio kiekio operatorius, išreikštas $\hbar$ vienetais:

$$\hat{\boldsymbol{L}} = \hat{L}_x\boldsymbol{e}_x + \hat{L}_y\boldsymbol{e}_y + \hat{L}_z\boldsymbol{e}_z \equiv -\mathrm{i}(\boldsymbol{r}\times\nabla)\,. \tag{C.1.4}$$

Minėtieji trys skaliariniai operatoriai atitinka komutavimo sąryšius (3.1.19), tačiau be daugiklio $\hbar$:

$$\hat{L}_x\hat{L}_y - \hat{L}_y\hat{L}_x = \mathrm{i}\hat{L}_z\,,\ \ldots \tag{C.1.5}$$

Kiti du komutavimo sąryšiai gaunami cikliškai sukeitus indeksus. Šie komutavimo sąryšiai yra pagrindinė judesio kiekio momento operatorių savybė. Kiekvienas vektorinis operatorius $\hat{\boldsymbol{J}}$, kurio komponentės atitinka komutavimo sąryšius (C.1.5), gali būti laikomas judesio kiekio momento operatoriumi. Daugelį judesio kiekio momento projekcijos operatoriaus $\hat{J}_z$ ir judesio kiekio momento kvadrato operatoriaus $\hat{\boldsymbol{J}}^2$ savybių galima gauti remiantis vien tik komutavimo sąryšiais (C.1.5). Pvz., iš tų sąryšių išplaukia, kad $\hat{\boldsymbol{J}}^2$ komutuoja su $\hat{J}_z$. Tai reiškia, kad operatoriai $\hat{\boldsymbol{J}}^2$ ir $\hat{J}_z$ turi bendrą tikrinių funkcijų sistemą (žr. 3.1.2 poskyrį). Iš komutavimo sąryšių (C.1.5) gaunamos ir tų operatorių tikrinės vertės: operatoriaus $\hat{\boldsymbol{J}}^2$ tikrinės vertės yra $j\,(j + 1)$, kur j yra sveikasis arba pusinis skaičius (t. y. 0, 1/2, 1, 3/2, 2, ...), o operatoriaus $\hat{J}_z$ atitinkamos tikrinės vertės yra $m = -j, -j + 1, ..., -j$.

[1] Šiame priede pateikiamas sutrumpintas [5] knygos A priedas.

[2] $\hat{L}_x$ ir $\hat{L}_y$ išraiškas galima gauti cikliškai sukeitus indeksus x, y ir z operatoriaus $\hat{L}_z$ išraiškoje (C.1.3) („cikliniu sukeitimu“ vadinamas pakeitimas $x \to y$, $y \to z$, $z \to x$).

Diferencialinis operatorius $\hat{\boldsymbol{L}}$, kuris apibrėžiamas (C.1.4) sąryšiu, yra tik vienas iš daugelio judesio kiekio momento operatorių. Kitas judesio kiekio momento operatoriaus pavyzdys – tai elektrono arba nukleono sukinio operatorius. Šiuo atveju $j = 1/2$, $m = -1/2$ arba $1/2$, o sukinio projekcijų operatoriai išreiškiami Paulio matricomis (3.3.35).

C.2. Sferinės harmonikos

Išreiškus (C.1.4) lygybe apibrėžto operatoriaus $\hat{\boldsymbol{L}}$ Dekarto komponentes sferinėmis koordinatėmis, gaunami šie sąryšiai:

$$\hat{L}_z = -\frac{\partial}{\partial\phi}, \qquad \hat{L}_x \pm \mathrm{i}\hat{L}_y = \exp(\pm\mathrm{i}\phi)\left[\pm\frac{\partial}{\partial\theta} + \mathrm{i}\,\mathrm{ctg}\,\theta\frac{\partial}{\partial\phi}\right]. \tag{C.2.1}$$

Taip apibrėžto operatoriaus $\hat{\boldsymbol{L}}$ tikrinės funkcijos Y_{lm} – tai sferinės harmonikos $Y_{lm}(\theta,\phi)$, kurių išraiška pateikta 3.2.1 poskyryje (3.1 lentelė). Kiekviena sferinė harmonika yra operatorių $\hat{\boldsymbol{L}}^2$ ir $\hat{L}_z$ tikrinė funkcija, kuri atitinka operatoriaus $\hat{\boldsymbol{L}}^2$ tikrinę vertę $l(l+1)$ ir operatoriaus $\hat{L}_z$ tikrinę vertę m. Nors iš judesio kiekio momento projekcijų operatorių komutavimo sąryšių išplaukia, kad l gali būti ne tik sveikasis skaičius, bet ir pusinis skaičius (t. y. 1/2, 3/2, 5/2 ir t. y.), tačiau pusinės l vertės yra nepriimtinos, nes jas atitinkančios operatoriaus $\hat{\boldsymbol{L}}$ tikrinės funkcijos neturi fizikinės prasmės. Taigi, galimos l vertės yra 0, 1, 2, ...

Sferinės harmonikos, kurios atitinka $m = 0$, nepriklauso nuo azimutinio kampo ϕ, ir jas galima išreikšti vadinamaisiais Ležandro daugianariais P_l, kurie apibrėžiami šitaip[1]:

$$P_l(x) \equiv \frac{1}{2^l\,l!}\frac{\mathrm{d}^l}{\mathrm{d}x^l}[(x^2-1)^l].$$

Sąryšis tarp $Y_{l,0}(\theta)$ ir $P_l(\cos\theta)$ yra šitoks:

$$P_l(\cos\theta) = \left(\frac{4\pi}{2l+1}\right)^{1/2} Y_{l,0}(\theta) \quad \text{arba} \quad Y_{l,0}(\theta) = \left(\frac{2l+1}{4\pi}\right)^{1/2} P_l(\cos\theta). \tag{C.2.2}$$

Toliau pateiktos trijų mažiausio laipsnio Ležandro daugianarių išraiškos:

$$\begin{aligned} &P_0(\cos\theta) = 1, \\ &P_1(\cos\theta) = \cos\theta, \\ &P_2(\cos\theta) = \tfrac{1}{2}(3\cos^2\theta - 1). \end{aligned} \tag{C.2.3}$$

Sferinės harmonikos sudaro pilnąjį funkcijų rinkinį. Tai reiškia, kad bet kuri integruojamoji funkcija $g(\theta, \phi)$ gali būti išreikšta sferinių harmonikų tiesiniu dariniu. Be to, sferinės harmonikos yra ortonormuotos:

$$\int Y_{lm}^* Y_{l'm'}\mathrm{d}\Omega = \begin{cases} 1, & \text{kai } m = m' \text{ ir } l = l'; \\ 0, & \text{kai } m \neq m' \text{ arba } l \neq l'. \end{cases} \tag{C.2.4}$$

C.3. Plokščiosios bangos skleidinys sferinėmis bangomis

Kaip žinome, teigiamąja z kryptimi judančios apibrėžto judesio kiekio dalelės banginė funkcija yra plokščioji banga, kurios erdvinė dalis yra proporcinga funkcijai

$$\exp(\mathrm{i}kz) = \exp(\mathrm{i}kr\cos\theta),$$

kur k yra banginis skaičius (pvz., žr. (2.2.7) ir (3.1.14a) formules). Kadangi ši funkcija nepriklauso nuo azimutinio kampo ϕ, tai į jos skleidinį sferinėmis harmonikomis įeina tik funkcijos $Y_{l,0}(\theta)$:

$$\exp(\mathrm{i}kz) = \sum_{l=0}^{\infty} A_l(r) Y_{l,0}(\theta). \tag{C.3.1}$$

Koeficiento $A_l(r)$ išraiška gaunama padauginus abi (C.3.1) lygybės puses iš $Y_{l,0}^*(\theta)$, integravus erdvinio kampo Ω atžvilgiu ir pasinaudojus sferinių harmonikų ortonormuotumu (žr. (C.2.4)):

$$A_l(r) = \int Y_{l,0}^*(\theta)\exp(\mathrm{i}kr\cos\theta)\mathrm{d}\Omega = 2\pi\int_0^{\pi} Y_{l,0}^*(\theta)\exp(\mathrm{i}kr\cos\theta)\sin\theta\,\mathrm{d}\theta. \tag{C.3.2}$$

[1] Galioja tapatybė $P_l(x) \equiv P_l^0(x)$, kur $P_l^0(x)$ yra *jungtinis* Ležandro daugianaris $P_l^m(x)$ su $m = 0$. Jungtinių Ležandro daugianarių bendroji išraiška pateikta 3.2.1 poskyryje, 3.1 lentelėje.

Koeficientą $A_l(r)$ galima išreikšti Beselio funkcijomis:

$$A_l(r) = \mathrm{i}^l \sqrt{4\pi(2l+1)} \cdot j_l(kr) = \mathrm{i}^l \sqrt{4\pi(2l+1)} \sqrt{\frac{\pi}{2kr}} \cdot J_{l+\frac{1}{2}}(kr)\,; \tag{C.3.3}$$

čia $J_n(z)$ yra n-tosios eilės pirmosios rūšies Beselio funkcija (angl. *Bessel function of the first kind*), o $j_l(z)$ yra vadinamoji l-tosios eilės pirmosios rūšies „sferinė Beselio funkcija“, kuri apibrėžiama šitaip:

$$j_l(z) \equiv \sqrt{\frac{\pi}{2z}} J_{l+\frac{1}{2}}(z)\,.$$

l+1/2 eilės pirmosios rūšies Beselio funkcijas galima išreikšti elementariosiomis funkcijomis [15]:

$$J_{l+\frac{1}{2}}(z) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} z^{l+\frac{1}{2}} \left(-\frac{1}{z}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}z}\right)^l \frac{\sin z}{z}\,, \quad J_{-l-\frac{1}{2}}(z) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} z^{l+\frac{1}{2}} \left(\frac{1}{z}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}z}\right)^l \frac{\cos z}{z}\,. \tag{C.3.4}$$

Žemiausių eilių sferinių Beselio funkcijų išraiškos yra pateiktos C.1 lentelėje. Praktikoje dažnai reikia žinoti funkcijų $j_l(r)$ asimptotines išraiškas dideliems kr ir mažiems kr. Čia „didelės“ kr vertės reiškia $kr >> l$, o „mažos“ kr vertės reiškia $kr << l$. Tos asimptotinės išraiškos yra pateiktos po C.1 lentelės.

C.1 lentelė. Sferinės Beselio funkcijos

$j_0(kr) = \dfrac{\sin kr}{kr}$
$j_1(kr) = \dfrac{\sin kr}{(kr)^2} - \dfrac{\cos kr}{kr}$
$j_2(kr) = \dfrac{3\sin kr}{(kr)^3} - \dfrac{3\cos kr}{(kr)^2} - \dfrac{\sin kr}{kr}$
$j_l(kr) = \left(-\dfrac{r}{k}\right)^l \left(\dfrac{1}{r}\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\right)^l j_0(kr)$

$$j_l(kr) \approx \frac{(kr)^l}{(2l+1)!!} \qquad (kr << l); \tag{C.3.5}$$

$$j_l(kr) \approx \frac{\sin(kr - \frac{1}{2}l\pi)}{kr} \equiv \frac{\mathrm{i}}{2}\left[\frac{\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(kr - l\pi/2)}}{kr} - \frac{\mathrm{e}^{+\mathrm{i}(kr - l\pi/2)}}{kr}\right] \qquad (kr >> l); \tag{C.3.6}$$

čia žymuo „!!“ reiškia dvigubą faktorialą: $(2l+1)!! = 1 \cdot 3 \cdot 5 \cdot ... \cdot(2l-1)\cdot(2l+1)$. Kai $l = 0$, (C.3.6) lygybė yra tiksli (t. y. ji galioja visiems r).

Įrašę $A_l(r)$ išraišką (C.3.3) ir sferinių harmonikų $Y_{l,0}$ išraišką Ležandro daugianariais (C.2.2) į plokščiosios bangos skleidinį sferinėmis harmonikomis (C.3.1), gauname:

$$\exp(\mathrm{i}kz) = \sum_{l=0}^{\infty} \mathrm{i}^l (2l+1) P_l(\cos\theta)\, j_l(kr)\,. \tag{C.3.7}$$

Dalelių sklaidos analizėje būna svarbūs tik keli pirmieji šios sumos dėmenys (pvz., žr. 11.4 poskyrį). Jeigu $kr >> l$, kur $l+1$ yra tokių dėmenų skaičius, tada sferines Beselio funkcijas $j_l(kr)$ galima aproksimuoti (C.3.6) reiškiniu ir vietoj (C.3.7) turime:

$$\exp(\mathrm{i}kz) = \sum_{l=0}^{\infty} \mathrm{i}^{l+1} \left(l + \tfrac{1}{2}\right) P_l(\cos\theta) \left[\frac{\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(kr - l\pi/2)}}{kr} - \frac{\mathrm{e}^{+\mathrm{i}(kr - l\pi/2)}}{kr}\right]. \tag{C.3.8}$$

Bet kuri funkcija, kurios radialioji dalis proporcinga $\exp(\pm\mathrm{i}kr)/r$, nusako sferinę bangą (šitaip vadinamos bangos, kurių pastovios fazės paviršiai yra sferos). Taigi, (C.3.8) reiškinys – tai plokščiosios bangos skleidinys sferinėmis bangomis. Šios sferinės bangos vadinamos ***dalinėmis bangomis***. Kiekviena dalinė banga atitinka apibrėžtą dalelės judesio kiekio momentą taško $r = 0$ atžvilgiu. Tiksliau, l-toji dalinė sferinė banga atitinka orbitinio kvantinio skaičiaus vertę l (todėl dalinės bangos vadinamos taip pat kaip atomo elektrono būsenos su tuo pačiu orbitiniu kvantiniu skaičiumi: ***s bangos*** atitinka $l = 0$, ***p bangos*** atitinka $l = 1$ ir t. t.).

Praktikoje dažnai pakanka atsižvelgti tik į s bangas (pvz., žr. 11.4 ir 12.4.3 poskyrius). Įrašę $P_0(\cos\,\theta)$ ir $j_0(kr)$ išraiškas (žr. (C.2.3) ir C.1 lentelę) į (C.3.7) arba (C.3.8), gauname tokią plokščiosios bangos skleidinio sferinėmis bangomis „s dalies“ išraišką

$$\left[\exp(\mathrm{i}kz)\right]_{l=0} = j_0(kr) = \frac{\sin kr}{kr} = \frac{\mathrm{i}}{2}\left(\frac{\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kr}}{kr} - \frac{\mathrm{e}^{+\mathrm{i}kr}}{kr}\right). \tag{C.3.9}$$

C.4. Klebšo ir Gordano koeficientų sąvoka

Išnagrinėsime dviejų judesio kiekio momento operatorių $\hat{\boldsymbol{J}}_1$ ir $\hat{\boldsymbol{J}}_2$, kurie komutuoja tarpusavyje, sumą. Pvz., tai galėtų būti vienos dalelės orbitinio judesio kiekio momento ir sukinio operatoriai, dviejų elektronų sukinių operatoriai, fotono ir jį išspinduliavusio branduolio galutinio judesio kiekio momento operatoriai ir kt. Tarkime, kad duotos kvantinės būsenos operatoriaus $\hat{J}_1^2$ kvantinis skaičius yra j, jo projekcijos operatoriaus $\hat{J}_{1z}$ kvantinis skaičius yra m, operatoriaus $\hat{J}_2^2$ kvantinis skaičius yra j', o jo projekcijos operatoriaus $\hat{J}_{2z}$ kvantinis skaičius yra m'. Operatorių $\hat{J}_1^2$ ir $\hat{J}_{1z}$ tikrinę funkciją žymėsime $Y_{jm}(1)$, o operatorių $\hat{J}_2^2$ ir $\hat{J}_{2z}$ tikrinę funkciją žymėsime $Y_{j'm'}(2)$. Šių funkcijų sandauga $Y_{jm}(1)Y_{j'm'}(2)$ yra suminio judesio kiekio momento projekcijos į z ašį $J_z = J_{1z} + J_{2z}$ operatoriaus $\hat{J}_z = \hat{J}_{1z} + \hat{J}_{2z}$ tikrinė funkcija. Atitinkamas pastarojo operatoriaus kvantinis skaičius yra $M = m + m'$. Tačiau sandauga $Y_{jm}(1)Y_{j'm'}(2)$ nėra suminio judesio kiekio kvadrato $J^2 = (J_{1x} + J_{2x})^2 + (J_{1y} + J_{2y})^2 + (J_{1z} + J_{2z})^2$ operatoriaus tikrinė funkcija. Operatoriaus $\hat{J}_z = \hat{J}_{1z} + \hat{J}_{2z}$ tikrinę funkciją (su tikrine verte M), kuri kartu yra ir operatoriaus $\hat{J}^2$ tikrinė funkcija (su tikrine verte J), galima išreikšti visų tas pačias j ir j' vertes, tačiau skirtingas m ir $m' = M - m$ vertes atitinkančių sandaugų $Y_{jm}(1)Y_{j'm'}(2)$ tiesinio darinio pavidalu:

$$\mathscr{Y}_{Jjj'}^{M} = \sum_{m=-j}^{j} \sum_{m'=-j'}^{j'} C_{jj'}(J,M;m,m')Y_{jm}(1)Y_{j'm'}(2). \tag{C.4.1}$$

Šio tiesinio darinio koeficientai C vadinami ***Klebšo ir Gordano koeficientais*** (angl. *Clebsch-Gordan coefficients*). Jie yra realieji skaičiai. Kadangi $M = m + m'$, tai visi Klebšo ir Gordano koeficientai, kuriems $m' \neq M - m$, yra lygūs nuliui. Taigi, skaičiuojant (C.4.1) sumą, sumuojama tik m atžvilgiu, ir (C.4.1) lygybę galima užrašyti šitaip:

$$\mathscr{Y}_{Jjj'}^{M} = \sum_{m=-j}^{j} C_{jj'}(J,M;m,M-m)Y_{jm}(1)Y_{j',M-m}(2) \tag{C.4.2a}$$

arba šitaip:

$$\mathscr{Y}_{Jjj'}^{M} = \sum_{m'=-j'}^{j'} C_{jj'}(J,M;M-m',m')Y_{j,M-m'}(1)Y_{j'm'}(2). \tag{C.4.2b}$$

Kvantinio skaičiaus J galimos vertės yra

$$J = j + j', j + j' - 1, j + j' - 2, ..., |j - j'|. \tag{C.4.3}$$

Klebšo ir Gordano koeficientų išraiškos, kai $j' = 1/2$ ir kai $j' = 1$, yra pateiktos C.2 ir C.3 lentelėse. Bendroji Klebšo ir Gordano koeficientų išraiška yra gana sudėtinga, todėl ji čia nėra pateikta. Klebšo ir Gordano koeficientus, kurie atitinka $M < 0$, galima išreikšti koeficientais, kurie atitinka $M > 0$:

$$C_{jj'}(J,M;m,m') = (-1)^{J-j-j'}C_{jj'}(J,-M;-m,-m'). \tag{C.4.4}$$

C.2 lentelė. Klebšo ir Gordano koeficientai $C_{jj'}(J, M; M - m', m')$, kai $j' = 1/2$

	$m' = 1/2$	$m' = -1/2$
$J = j + \frac{1}{2}$	$\left[\frac{j+M+\frac{1}{2}}{2j+1}\right]^{1/2}$	$\left[\frac{j-M+\frac{1}{2}}{2j+1}\right]^{1/2}$
$J = j - \frac{1}{2}$	$-\left[\frac{j-M+\frac{1}{2}}{2j+1}\right]^{1/2}$	$\left[\frac{j+M+\frac{1}{2}}{2j+1}\right]^{1/2}$

C.3 lentelė. Klebšo ir Gordano koeficientai $C_{jj'}(J, M; M - m', m')$, kai $j' = 1$

	$m' = 1$	$m' = 0$	$m' = -1$
$J = j + 1$	$\left[\frac{(j+M)(j+M+1)}{(2j+1)(2j+2)}\right]^{1/2}$	$\left[\frac{(j-M+1)(j+M+1)}{(2j+1)(j+1)}\right]^{1/2}$	$\left[\frac{(j-M)(j-M+1)}{(2j+1)(2j+2)}\right]^{1/2}$
$J = j$	$-\left[\frac{(j+M)(j-M+1)}{2j(j+1)}\right]^{1/2}$	$\frac{M}{[j(j+1)]^{1/2}}$	$\left[\frac{(j-M)(j+M+1)}{2j(j+1)}\right]^{1/2}$
$J = j - 1$	$\left[\frac{(j-M)(j-M+1)}{2j(2j+1)}\right]^{1/2}$	$-\left[\frac{(j-M)(j+M)}{j(2j+1)}\right]^{1/2}$	$\left[\frac{(j+M+1)(j+M)}{2j(2j+1)}\right]^{1/2}$

D priedas. Daugiapolė spinduliuotė[1]

D.1. Vektorinės sferinės harmonikos

Tarkime, kad yra duotas vektorinis laukas $\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r})$, kurį apibrėžiančios diferencialinės lygtys (kartu su tų lygčių kraštinėmis sąlygomis) yra simetriškos koordinačių sistemos sukimo aplink bet kurią ašį atžvilgiu ir inversijos atžvilgiu. Tada tų diferencialinių lygčių pilnąją atskirųjų sprendinių (tikrinių funkcijų) sistemą galima sudaryti taip, kad tos funkcijos būtų to vektorinio lauko posūkio aplink z ašį nykstamu kampu θ operatoriaus $-\mathrm{i}\theta J_z$ tikrinės funkcijos. Šį operatorių galima išreikšti dviejų operatorių suma:

$$\hat{J}_z = \hat{L}_z + \hat{S}_z\,; \tag{D.1.1}$$

čia

$$\hat{L}_z = \mathrm{i}\left(y\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial y} \right), \tag{D.1.2}$$

o operatorius $\hat{S}_z$ apibrėžiamas sąryšiu

$$\hat{S}_z \begin{pmatrix} A_x \\ A_y \\ A_z \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} -\mathrm{i}A_y \\ \mathrm{i}A_x \\ 0 \end{pmatrix}. \tag{D.1.3}$$

$\hat{L}_z$ yra judesio kiekio momento projekcijos į z ašį operatorius, išreikštas $\hbar$ vienetais (plg. (D.1.2) ir trečiąją lygybę (3.1.18)). Todėl galima spėti, kad operatorius $\hat{J}_z$ yra lauko *pilnutinio* judesio kiekio momento projekcijos į z ašį operatorius (tai bus įrodyta D.3 skyrelyje), o dėmenys $\hat{L}_z$ ir $\hat{S}_z$ yra jo „orbitinė“ ir „sukininė“ dalys. Sukininė dalis atsiranda vien dėl to, kad laukas yra vektorinis. Sukininės komponentės projekcijos į z ašį tikrinės vertės yra -1, 0 ir 1. Vadinasi, bet kokio vektorinio lauko, kuriam būdinga anksčiau minėta simetrija, sukinio kvantinis skaičius yra lygus 1 (žr. (3.2.10b)). Operatoriaus $\hat{S}_z$ tikriniai vektoriai, kurie atitinka tas tris tikrines vertes, yra

$$\chi_1 = -\frac{1}{\sqrt{2}}(\boldsymbol{e}_x + \mathrm{i}\boldsymbol{e}_y)\,, \quad \chi_0 = \boldsymbol{e}_z\,, \quad \chi_{-1} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\boldsymbol{e}_x - \mathrm{i}\boldsymbol{e}_y)\,; \tag{D.1.4}$$

čia $\boldsymbol{e}_x$, $\boldsymbol{e}_y$ ir $\boldsymbol{e}_z$ yra Dekarto koordinačių sistemos baziniai vektoriai.

Kampų θ ir ϕ vektorinės funkcijos, kurios vienu metu yra operatoriaus $\hat{J}_z$ ir pilnutinio judesio kiekio momento kvadrato operatoriaus $\hat{J}^2$ tikrinės funkcijos, yra vadinamos ***vektorinėmis sferinėmis harmonikomis***. Vektorinės sferinės harmonikos klasifikuojamos pagal operatorių $\hat{J}^2$, $\hat{J}_z$ ir $\hat{L}_z$ tikrines vertes, kurios yra atitinkamai $J(J+1)$, M ir l. Galimos J vertės yra visi natūralieji skaičiai, galimos M vertės yra $-J$, $-J+1$, ..., $J-1$, J, o galimos l vertės (kai $J \neq 0$) yra $J-1$, J ir $J+1$ (priklausomai nuo $\hat{S}_z$ tikrinės vertės). Kadangi operatoriai $\hat{\boldsymbol{L}}$ ir $\hat{\boldsymbol{S}}$ komutuoja, šios vektorinės sferinės harmonikos gali būti išreikštos operatoriaus $\hat{\boldsymbol{L}}$ tikrinių funkcijų – skaliarinių sferinių harmonikų $Y_{lm}(\theta, \phi)$ (kur $m = -l, ..., l$) – ir operatoriaus $\hat{S}_z$ trijų tikrinių vektorių (D.1.4) sandaugų tiesiniu dariniu pasinaudojus vektorių sudėties dėsniu (C.4.1) arba (C.4.2a,b) (C priedas):

$$\boldsymbol{Y}_{Jl1}^{M}(\theta,\phi) = \sum_{m=-l}^{l}\sum_{m'=-1}^{1} C_{j1}(J,M;m,m')Y_{lm}(\theta,\phi)\boldsymbol{\chi}_{m'}\,. \tag{D.1.5}$$

Funkcijos $\boldsymbol{Y}_{Jl1}^{M}(\theta,\phi)$ lyginumas yra $(-1)^l$.

Vektorinės sferinės harmonikos sudaro pilnąjį ortonormuotų funkcijų rinkinį. Todėl bet kokį vektorinį lauką galima išreikšti funkcijų $\boldsymbol{Y}_{Jl1}^{M}(\theta,\phi)$ tiesiniu dariniu:

$$\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}) = \sum_{J=0}^{\infty}\sum_{M=-J}^{J}\sum_{l=J-1}^{J+1} c_{Jl}^{M}(r)\boldsymbol{Y}_{Jl1}^{M}(\theta,\phi) \equiv \sum_{J=0}^{\infty}\sum_{M=-J}^{J} \boldsymbol{A}(J,M;\boldsymbol{r})\,, \tag{D.1.6}$$

kur vektorinės funkcijos $\boldsymbol{A}(J,M;\boldsymbol{r})$ apibrėžiamos šitaip:

$$\boldsymbol{A}(J,M;\boldsymbol{r}) = \frac{1}{r}[f(J,M;r)\boldsymbol{X}_{JM} + g(J,M;r)\boldsymbol{Y}_{J,J+1,1}^{M} + h(J,M;r)\boldsymbol{Y}_{J,J-1,1}^{M}]\,; \tag{D.1.7}$$

---

[1] Šiame priede pateikiamas sutrumpintas [5] knygos B priedas.

čia

$$\boldsymbol{X}_{JM}(\theta,\phi) \equiv \boldsymbol{Y}_{JJ1}^{M}(\theta,\phi) = \frac{\hat{\boldsymbol{L}} Y_{JM}(\theta,\phi)}{\sqrt{J(J+1)}}, \tag{D.1.8}$$

kur $\hat{\boldsymbol{L}}$ yra diferencialinis operatorius

$$\hat{\boldsymbol{L}} = -\mathrm{i} \cdot \boldsymbol{r} \times \nabla, \tag{D.1.9}$$

o $Y_{JM}(\theta, \phi)$ yra skaliarinės sferinės harmonikos, kurios apibrėžtos 3.2.1 poskyryje. Kiekvienas dėmuo $\boldsymbol{A}(J,M;r)$ vadinamas „***grynuoju daugiapoliu lauku***" ir yra operatorių $\hat{J}^2$ ir $\hat{J}_z$ tikrinė funkcija:

$$\hat{J}^2 \boldsymbol{A}(J,M;\boldsymbol{r}) = J(J+1)\boldsymbol{A}(J,M;\boldsymbol{r}), \tag{D.1.10a}$$

$$\hat{J}_z \boldsymbol{A}(J,M;\boldsymbol{r}) = M \cdot \boldsymbol{A}(J,M;\boldsymbol{r}). \tag{D.1.10b}$$

Radialiosios funkcijos $f(J,M;r)$, $g(J,M;r)$ ir $h(J,M;r)$, kurios įeina į $\boldsymbol{A}(J,M;r)$ išraišką (D.1.7), pilnai apibūdina vektorinį lauką $\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r})$.

D.2. Elektrinio ir magnetinio laukų išraiška daugiapoliais laukais laisvoje erdvėje

Dabar pritaikysime skleidinį (D.1.7) elektromagnetiniam laukui. Apsiribosime periodiškai laike kintančio lauko atveju:

$$\boldsymbol{\mathcal{E}}(\boldsymbol{r},t) = \boldsymbol{\mathcal{E}}(\boldsymbol{r})\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t} + \boldsymbol{\mathcal{E}}^*(\boldsymbol{r})\mathrm{e}^{+\mathrm{i}\omega t} \tag{D.2.1a}$$

(lauko užrašymas dviejų kompleksiškai jungtinių funkcijų sumos pavidalu reikalingas tam, kad laukas būtų realioji funkcija). Analogiškai išreiškiamas ir magnetinio lauko stipris $\boldsymbol{H}(\boldsymbol{r},t)$:

$$\boldsymbol{H}(\boldsymbol{r},t) = \boldsymbol{H}(\boldsymbol{r})\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t} + \boldsymbol{H}^*(\boldsymbol{r})\mathrm{e}^{+\mathrm{i}\omega t}. \tag{D.2.1b}$$

Maksvelo lygtys laisvai erdvei yra

$$\nabla \times \boldsymbol{\mathcal{E}}(\boldsymbol{r},t) = -\mu_0 \frac{\partial \boldsymbol{H}(\boldsymbol{r},t)}{\partial t} = -\frac{1}{\varepsilon_0 c^2} \cdot \frac{\partial \boldsymbol{H}(\boldsymbol{r},t)}{\partial t}, \tag{D.2.2a}$$

$$\nabla \times \boldsymbol{H}(\boldsymbol{r},t) = \varepsilon_0 \frac{\partial \boldsymbol{\mathcal{E}}(\boldsymbol{r},t)}{\partial t}; \tag{D.2.2b}$$

čia „$\nabla \times$" yra rotoriaus operatorius (kitaip žymimas „**rot**"). Užrašant (D.2.2a) antrąją lygybę, pasinaudota tuo, kad šviesos greitis c išreiškiamas konstantomis ε_0 ir μ_0:

$$c = \frac{1}{\sqrt{\varepsilon_0 \mu_0}}, \tag{D.2.3}$$

t. y. $\mu_0 = 1/(\varepsilon_0 c^2)$. Įrašę (D.2.1b) į (D.2.2a), o (D.2.1a) – į (D.2.2b), ir atsižvelgę į tai, kad laiko funkcijos $\exp(-\mathrm{i}\omega t)$ ir $\exp(+\mathrm{i}\omega t)$ yra tiesiškai nepriklausomos, gauname:

$$\nabla \times \boldsymbol{\mathcal{E}}(\boldsymbol{r}) = \frac{\mathrm{i}\omega}{\varepsilon_0 c^2} \boldsymbol{H}(\boldsymbol{r}), \tag{D.2.4a}$$

$$\nabla \times \boldsymbol{H}(\boldsymbol{r}) = -\mathrm{i}\omega\varepsilon_0 \boldsymbol{\mathcal{E}}(\boldsymbol{r}). \tag{D.2.4b}$$

Toliau, rašant „$\boldsymbol{\mathcal{E}}$" arba „$\boldsymbol{H}$" be argumentų, bus turimos omenyje nepriklausančios nuo laiko amplitudės $\boldsymbol{\mathcal{E}}(\boldsymbol{r})$ ir $\boldsymbol{H}(\boldsymbol{r})$.

Kadangi $\boldsymbol{\mathcal{E}}$ ir $\boldsymbol{H}$ yra vektoriniai laukai, tai juos galima išskleisti vektorinėmis funkcijomis (D.1.7). Kaip anksčiau minėta, kvantiniai skaičiai J ir M nusako elektromagnetinio lauko pilnutinį judesio kiekio momentą ir jo projekciją. Žymenis J ir M pakeisime labiau įprastais žymenimis: vietoj J naudosime žymenį l (kuris anksčiau nusakė tik orbitinio judesio kiekio momentą), o vietoj M – žymenį m (kuris anksčiau nusakė tik orbitinio judesio kiekio momento projekciją). Elektromagnetinė spinduliuotė, kurios elektrinis ir magnetinis laukai išreiškiami viena iš vektorinių funkcijų $\boldsymbol{A}(l,m;\boldsymbol{r})$ (D.1.7), yra vadinama ***l, m* eilės daugiapole spinduliuote**, o jeigu m nėra apibrėžtas, tada – ***l*-tosios eilės daugiapole spinduliuote** arba **2^l-poline spinduliuote**. Pirmosios eilės ($l = 1$) daugiapolė spinduliuotė vadinama ***dipoline spinduliuote***, antrosios eilės ($l = 2$) – ***kvadrupoline spinduliuote***, trečiosios eilės ($l = 3$) – ***oktupoline spinduliuote*** ir t. t.

Kaip minėta 10.1 poskyryje, elektrinį ir magnetinį laukus, kurie atitinka Maksvelo lygtis, galima išreikšti lyginio ir nelyginio laukų suma (toks išskaidymas patogus todėl, kad elektromagnetinės spinduliuotės, kuri atsiranda kvantinio šuolio metu, elektrinis ir magnetinis laukai turi apibrėžtą lyginumą). Todėl kiekvieną iš funkcijų $\boldsymbol{A}(l,m;\boldsymbol{r})$ (D.1.7) išskaidysime į du priešingo lyginumo dėmenis: dėmenį, kuris yra proporcingas $\boldsymbol{X}_{lm}$ (šio dėmens lyginumas yra $(-1)^l$), ir dėmenį, kuris priklauso nuo kitų dviejų vektorinių sferinių harmonikų (jų lyginumas yra $(-1)^{l+1}$). Išreiškiant apibrėžto lyginumo lauką, funkcijų (D.1.7) išraiškose nelieka dėmenų, kurių lyginumas yra priešingas lauko lyginumui. *l, m* eilės daugiapolė spinduliuotė, kurios elektrinio lauko lyginumas yra $(-1)^{l+1}$, o magnetinio lauko lyginumas yra $(-1)^{l}$, vadinama ***elektrine daugiapole spinduliuote***. Tokios spinduliuotės magnetinis laukas yra proporcingas funkcijai $\boldsymbol{X}_{lm}$:

$$\boldsymbol{H}(\boldsymbol{r}) = \frac{f_{\mathrm{E}}(l,m;r)}{r}\boldsymbol{X}_{lm}(\theta,\phi), \tag{D.2.5}$$

o elektrinis laukas yra išreiškiamas funkcijų $\boldsymbol{Y}^{m}_{l,l+1,1}$ ir $\boldsymbol{Y}^{m}_{l,l-1,1}$ tiesiniu dariniu. Priešingo lyginumo *l, m* eilės daugiapolė spinduliuotė vadinama ***magnetine daugiapole spinduliuote***. Tokios spinduliuotės elektrinis laukas yra proporcingas funkcijai $\boldsymbol{X}_{lm}$:

$$\boldsymbol{\mathcal{E}}(\boldsymbol{r}) = \frac{f_{\mathrm{M}}(l,m;r)}{r}\boldsymbol{X}_{lm}(\theta,\phi), \tag{D.2.6}$$

o magnetinis laukas yra išreiškiamas funkcijų $\boldsymbol{Y}^{m}_{l,l+1,1}$ ir $\boldsymbol{Y}^{m}_{l,l-1,1}$ tiesiniu dariniu. Kadangi laisvoje erdvėje elektrinis ir magnetiniai laukai yra abipus vienareikšmiškai susiję vienas su kitu pagal Maksvelo lygtis (D.2.4a,b), tai pilnam elektromagnetinio lauko aprašymui pakanka turėti tik vieno iš tų laukų išraišką. Vadinasi, norint išsamiai apibūdinti *l, m* eilės elektrinę daugiapolę spinduliuotę, pakanka žinoti tik tos spinduliuotės magnetinio lauko išraiškos radialųjį daugiklį prieš $\boldsymbol{X}_{lm}(\theta, \phi)$, o norint pilnai apibūdinti *l, m* eilės magnetinę daugiapolę spinduliuotę, pakanka žinoti tik tos spinduliuotės elektrinio lauko išraiškos radialųjį daugiklį prieš $\boldsymbol{X}_{lm}(\theta, \phi)$. Kai $l = 0$, $\boldsymbol{X}_{lm}(\theta, \phi) \equiv 0$. Šis rezultatas išplaukia iš $\boldsymbol{X}_{lm}(\theta, \phi)$ išraiškos (D.1.8), atsižvelgus į tai, kad skaliarinė sferinė harmonika Y_{00} yra konstanta (žr. 3.2.1 poskyris, 3.1 lentelė). Vadinasi, nulinės eilės daugiapolė spinduliuotė neegzistuoja.

Visų pirma išnagrinėsime *l, m* eilės elektrinę daugiapolę spinduliuotę. Funkcija $f_{\mathrm{E}}(l,m;r)$ gaunama išsprendus laisvos erdvės banginę lygtį, kuri išplaukia iš Maksvelo lygčių (D.2.4a,b):

$$\nabla\times\nabla\times\boldsymbol{H} - k^2\boldsymbol{H} = 0\,; \tag{D.2.7}$$

čia k yra bangos skaičius:

$$k \equiv \frac{\omega}{c}. \tag{D.2.8}$$

Įrašius (D.2.5) į (D.2.7), gaunama tokio pavidalo radialioji lygtis:

$$\left[\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} + k^2\right] f(l,m;r) = 0\,. \tag{D.2.9}$$

Kadangi (D.2.9) yra antrosios eilės tiesinė diferencialinė lygtis, tai jos bendrąjį sprendinį galima išreikšti bet kurių dviejų tiesiškai nepriklausomų atskirųjų sprendinių tiesiniu dariniu. Tie du atskirieji sprendiniai dažnai apibrėžiami šitaip:

1) „Reguliarusis“ sprendinys $F_l(r)$ apibrėžiamas remiantis reikalavimu, kad jis turi būti realus ir lygus nuliui taške $r = 0$. Šio sprendinio asimptotinė išraiška dideliems r yra šitokia:

$$F_l(r) \approx \sin(kr - \tfrac{1}{2}l\pi) \qquad (kr >> l). \tag{D.2.10}$$

2) „Nereguliarusis“ sprendinys $G_l(r)$ apibrėžiamas remiantis reikalavimu, kad jis turi būti realus, o dideliems r jo asimptotinė išraiška turi būti šitokia:

$$G_l(r) \approx \cos(kr - \tfrac{1}{2}l\pi) \qquad (kr >> l). \tag{D.2.11}$$

Tikslios reguliariojo ir nereguliariojo sprendinių išraiškos yra tokios:

$$F_l(r) = \left(\frac{\pi kr}{2}\right)^{1/2} J_{l+1/2}(kr) \equiv kr\cdot j_l(kr), \tag{D.2.12}$$

$$G_l(r) = -\left(\frac{\pi kr}{2}\right)^{1/2} N_{l+1/2}(kr); \tag{D.2.13}$$

čia $J_n(z)$ yra n-tosios eilės (pirmosios rūšies) Beselio funkcija, $j_l(z)$ yra l-tosios eilės sferinė Beselio funkcija, o $N_n(z)$ yra n-tosios eilės Neimano (*Neumann*) funkcija (taip pat vadinama „antrosios rūšies Beselio funkcija“), kurią galima išreikšti eilių n ir $-n$ Beselio funkcijomis. Jeigu n nėra sveikasis skaičius, tada funkcijos $N_n(z)$ apibrėžiamos šitaip [15]:

$$N_n(z) = \frac{1}{\sin n\pi}[J_n(z)\cos(n\pi) - J_{-n}(z)]\,. \tag{D.2.14}$$

Pusinės eilės Beselio funkcijos ir atitinkamos sferinės Beselio funkcijos buvo apibrėžtos C priedo C.3 skyrelyje. Iš Beselio funkcijų savybių išplaukia, kad nė vienai l vertei nereguliarusis sprendinys (D.2.13) nėra lygus nuliui taške $r = 0$.

Mus domina (D.2.9) lygties sprendinys, kuris nusako išeinančios iš taško $r = 0$ elektromagnetinės spinduliuotės lauką (D.2.5). Tas sprendinys yra išreiškiamas šitaip:

$$u_l^{(+)}(r) = G_l(r) + \mathrm{i}F_l(r)\,. \tag{D.2.15}$$

Čia viršutinis indeksas „+" nurodo, kad šis sprendinys nusako spinduliuotę, kuri *išeina* iš taško $r = 0$ (sprendinys $u_l^{(-)}$, kuris nusako *įeinančią* į tašką $r = 0$ spinduliuotę, yra kompleksiškai jungtinis funkcijai (D.2.15)). Remiantis (D.2.10) ir (D.2.11), šio sprendinio asimptotinė išraiška, kai $kr >> l$, yra tokio pavidalo:

$$u_l^{(+)}(r) \approx \exp[\mathrm{i}(kr - \tfrac{1}{2}l\pi)] \qquad (kr >> l). \tag{D.2.16}$$

Taigi,

$$f_\mathrm{E}(l,m;r) = \frac{\varepsilon_0 c}{k} a_\mathrm{E}(l,m)\, u_l^{(+)}(r)\,, \tag{D.2.17}$$

todėl l, m eilės elektrinės daugiapolės spinduliuotės magnetinį lauką galima išreikšti šitaip:

$$\begin{aligned} \boldsymbol{H}(\boldsymbol{r}) &= a_\mathrm{E}(l,m)\cdot \boldsymbol{H}_\mathrm{E}(l,m;\boldsymbol{r}); \\ \boldsymbol{H}_\mathrm{E}(l,m;\boldsymbol{r}) &= \varepsilon_0 c \frac{u_l^{(+)}(r)}{kr} \boldsymbol{X}_{lm}(\theta,\phi). \end{aligned} \tag{D.2.18}$$

Papildomas daugiklis $\varepsilon_0 c/k$ reikalingas, kad amplitudė $a_\mathrm{E}(l,m)$ turėtų elektrinio lauko stiprio dimensiją (funkcijos $u_l^{(+)}(r)$, kr ir $\boldsymbol{X}_{lm}(\theta,\phi)$ yra bedimensės, todėl funkcijos $\boldsymbol{H}_\mathrm{E}(l,m;\boldsymbol{r})$ dimensija yra lygi dydžio $\varepsilon_0 c$ dimensijai, t. y. magnetinio ir elektrinio laukų stiprių santykio dimensijai). Atitinkamas elektrinis laukas gaunamas įrašius (D.2.18) į Maksvelo lygtį (D.2.4b):

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\mathcal{E}}(\boldsymbol{r}) &= a_\mathrm{E}(l,m)\cdot \boldsymbol{\mathcal{E}}_\mathrm{E}(l,m;\boldsymbol{r}), \\ \boldsymbol{\mathcal{E}}_\mathrm{E}(l,m;\boldsymbol{r}) &= \frac{\mathrm{i}}{\varepsilon_0\omega}\nabla\times \boldsymbol{H}_\mathrm{E}(l,m;\boldsymbol{r}) \equiv \frac{\mathrm{i}}{k}\nabla\times\left[\frac{u_l^{(+)}(r)}{kr}\boldsymbol{X}_{lm}(\theta,\phi)\right]. \end{aligned} \tag{D.2.19}$$

Analogiškai gaunamos ir l, m eilės magnetinės daugiapolės spinduoliuotės elektrinio bei magnetinio laukų išraiškos:

$$f_\mathrm{M}(l,m;r) = \frac{1}{k} a_\mathrm{M}(l,m)\, u_l^{(+)}(r)\,; \tag{D.2.20}$$

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\mathcal{E}}(\boldsymbol{r}) &= a_\mathrm{M}(l,m)\cdot \boldsymbol{\mathcal{E}}_\mathrm{M}(l,m;\boldsymbol{r}), \\ \boldsymbol{\mathcal{E}}_\mathrm{M}(l,m;\boldsymbol{r}) &= \frac{u_l^{(+)}(r)}{kr}\boldsymbol{X}_{lm}(\theta,\varphi); \end{aligned} \tag{D.2.21}$$

$$\begin{aligned} \boldsymbol{H}(\boldsymbol{r}) &= a_\mathrm{M}(l,m)\cdot \boldsymbol{H}_\mathrm{M}(l,m;\boldsymbol{r}), \\ \boldsymbol{H}_\mathrm{M}(l,m;\boldsymbol{r}) &= -\frac{\mathrm{i}\varepsilon_0 c^2}{\omega}\nabla\times \boldsymbol{\mathcal{E}}_\mathrm{M}(l,m;\boldsymbol{r}) \equiv -\varepsilon_0 c\frac{\mathrm{i}}{k}\nabla\times\left[\frac{u_l^{(+)}(r)}{kr}\boldsymbol{X}_{lm}(\theta,\phi)\right]. \end{aligned} \tag{D.2.22}$$

Čia $a_\mathrm{M}(l,m)$ turi elektrinio lauko stiprio dimensiją (funkcija $\boldsymbol{\mathcal{E}}_\mathrm{M}(l,m;\boldsymbol{r})$ yra bedimensė).

Iš vektorinės funkcijos $\boldsymbol{X}_{lm}(\theta,\phi)$ išraiškos (D.1.8) išplaukia, kad vektorius $\boldsymbol{X}_{lm}(\theta,\phi)$ yra statmenas spinduliui vektoriui $\boldsymbol{r}$ (nes vektorius, kuris lygus kitų dviejų vektorių vektorinei sandaugai, yra statmenas abiem dauginamiesiems vektoriams). Antra vertus, iš funkcijos $u_l^{(+)}(r)$ išraiškos (D.2.16) ir iš elektrinio bei magnetinio laukų išraiškų (D.2.18), (D.2.19), (D.2.21), (D.2.22) išplaukia, kad šių laukų radialioji dalis yra proporcinga $\exp(\mathrm{i}kr)$. Tai reiškia, kad toli nuo šaltinio daugiapolė spinduliuotė yra sferinių bangų pavidalo, o tų bangų fazinio greičio kryptis sutampa su $\boldsymbol{r}$ kryptimi[1]. Vadinasi, elektrinės daugiapolės spinduliuotės magnetinis laukas yra statmenas spinduliuotės faziniam greičiui (žr. (D.2.18)). Tokia spindu-

[1] Fazinis greitis – tai pastovios fazės paviršiaus judėjimo greitis. Sferinių elektromagnetinių bangų pastovios fazės paviršiai yra sferos, kurių priklausomybę nuo laiko nusako lygtis $kr - ct = const$. Kadangi šios sferos yra statmenos $\boldsymbol{r}$ krypčiai, tai jų judėjimo kryptis sutampa su $\boldsymbol{r}$ kryptimi, t. y. fazinio greičio vektorius yra lygiagretus $\boldsymbol{r}$.

liuotė kartais vadinama „TM spinduliuote“ (nuo angliško termino „transverse magnetic radiation“: „skersinė magnetinė spinduliuotė“). Analogiškai magnetinės daugiapolės spinduliuotės elektrinis laukas taip pat yra statmenas faziniam greičiui (žr. (D.2.21)). Tokia spinduliuotė kartais vadinama „TE spinduliuote“ (angl. *transverse electric radiation*). Tačiau elektrinės daugiapolės spinduliuotės *elektrinis* laukas ir magnetinės daugiapolės spinduliuotės *magnetinis* laukas *nėra* tiksliai statmenas faziniam greičiui (t. y. turi išilginę komponentę). Dėl šios priežasties daugiapolė spinduliuotė turi nenulinį judesio kiekio momentą atžvilgiu taško $r = 0$ (žr. kitą skyrelį).

D.3. Daugiapolės spinduliuotės energija ir judesio kiekio momentas

Apskaičiuosime daugiapolės spinduliuotės lauko energiją ir judesio kiekio momentą. Panagrinėkime tūrio V erdvės sritį aplink taškinį spinduliuotės šaltinį. Yra žinoma, kad elektrinio lauko energijos tankis yra lygus $\varepsilon_0\boldsymbol{\mathcal{E}}^2(\boldsymbol{r},t)/2$, o magnetinio lauko energijos tankis yra lygus $\varepsilon_0\boldsymbol{H}^2(\boldsymbol{r},t)/2$. Keliant kvadratu elektrinio ir magnetinio laukų stiprius (D.2.1a,b), atsiras dėmenys, kurie proporcingi $\mathrm{e}^{\pm 2\mathrm{i}\omega t}$, ir nepriklausantys nuo laiko dėmenys, kurie lygūs $2\boldsymbol{\mathcal{E}}^*(\boldsymbol{r})\boldsymbol{\mathcal{E}}(\boldsymbol{r})$ ir $2\boldsymbol{H}^*(\boldsymbol{r})\boldsymbol{H}(\boldsymbol{r})$. Priklausantys nuo laiko dėmenys neturi įtakos vidutinei energijai, nes jų laikinis vidurkis yra lygus nuliui. Todėl elektromagnetinio lauko energija tūryje V yra lygi

$$E = \int_V (\varepsilon_0\boldsymbol{\mathcal{E}}^*\boldsymbol{\mathcal{E}} + \mu_0\boldsymbol{H}^*\boldsymbol{H})\mathrm{d}V \equiv \int_V (\varepsilon_0 |\boldsymbol{\mathcal{E}}|^2 + \mu_0 |\boldsymbol{H}|^2)\mathrm{d}V \,. \tag{D.3.1}$$

Žinome, kad elektromagnetinio lauko energijos srauto tankį (energijos kiekį, kuris pereina pro ploto vienetą per laiko vienetą) nusako Pointingo vektorius

$$\boldsymbol{S}(\boldsymbol{r},t) = \boldsymbol{\mathcal{E}}(\boldsymbol{r},t)\times\boldsymbol{H}(\boldsymbol{r},t)\,. \tag{D.3.2}$$

Elektromagnetinio lauko judesio kiekio tankis (judesio kiekis tūrio vienete) yra lygus

$$\boldsymbol{g}(\boldsymbol{r},t) = \frac{1}{c^2}\boldsymbol{S}(\boldsymbol{r},t) = \frac{1}{c^2}\boldsymbol{\mathcal{E}}(\boldsymbol{r},t)\times\boldsymbol{H}(\boldsymbol{r},t)\ . \tag{D.3.3}$$

Lauko judesio kiekio *momento* tankis yra lygus spindulio vektoriaus $\boldsymbol{r}$ ir lauko judesio kiekio tankio $\boldsymbol{g}$ vektorinei sandaugai (pagal judesio kiekio momento apibrėžtį), o pilnutinis lauko judesio kiekio momentas tūryje V yra lygus tos sandaugos integralui tuo tūriu. Skaičiuojant pilnutinio momento laikinį vidurkį $\boldsymbol{G}$, vėl reikia atmesti priklausančius nuo laiko dėmenis. Todėl

$$\boldsymbol{G} = \frac{1}{c^2}\int_V \boldsymbol{r}\times(\boldsymbol{\mathcal{E}}^*\times\boldsymbol{H} + \boldsymbol{\mathcal{E}}\times\boldsymbol{H}^*)\mathrm{d}V\,. \tag{D.3.4}$$

Jeigu abu laukai $\boldsymbol{\mathcal{E}}$ ir $\boldsymbol{H}$ būtų tiksliai statmeni $\boldsymbol{r}$ („skersinė spinduliuotė“ arba „TEM spinduliuotė“) tada vektorinė sandauga $\boldsymbol{\mathcal{E}}\times\boldsymbol{H}$ būtų lygiagreti su $\boldsymbol{r}$. Kadangi dviejų lygiagrečių vektorių vektorinė sandauga lygi nuliui, tai tokiu atveju judesio kiekio momentas $\boldsymbol{G}$ (D.3.4) būtų lygus nuliui. Taigi, nenulinį judesio kiekio momentą taško $r = 0$ atžvilgiu gali turėti tik tokia spinduliuotė, kurios elektrinis arba magnetinis laukas turi komponentę $\boldsymbol{r}$ kryptimi (pvz., kaip minėta praeitame skyrelyje, ši savybė yra būdinga daugiapolei spinduliuotei). Tokios spinduliuotės judesio kiekio tankio vektorius (D.3.3) nėra lygiagretus su $\boldsymbol{r}$. Jeigu tokios spinduliuotės šaltinį įdėtume į centrą sferos, kuri sugeria visą į ją krintančią spinduliuotę, tada ta sfera pradėtų suktis, o jos judesio kiekio momentas būtų lygus sugertosios spinduliuotės judesio kiekio momentui.

Pasinaudojus Maksvelo lygtimis (D.2.4a,b) ir keliomis vektorinėmis tapatybėmis, galima įrodyti, kad integralo, kuris įeina į (D.3.4) reiškinį, z komponentė yra lygi

$$\left(\int_V \boldsymbol{r}\times(\boldsymbol{\mathcal{E}}^*\times\boldsymbol{H} + \boldsymbol{\mathcal{E}}\times\boldsymbol{H}^*)\mathrm{d}V\right)_z = \omega\int_V [\varepsilon_0\boldsymbol{\mathcal{E}}^*\cdot(\hat{J}_z\boldsymbol{\mathcal{E}}) + \mu_0\boldsymbol{H}^*\cdot(\hat{J}_z\boldsymbol{H})]\mathrm{d}V\,; \tag{D.3.5}$$

čia $\hat{J}_z$ yra D.1 skyrelyje apibrėžtasis pilnutinio judesio kiekio momento projekcijos operatorius, išreikštas $\hbar$ vienetais (kad galiotų (D.3.5) sąryšis, reikia, kad elektrinis ir magnetinis laukai būtų lygūs nuliui ant integravimo tūrio paviršiaus).

Grynojo daugiapolio lauko atveju $\hat{J}_z\boldsymbol{\mathcal{E}} = m\boldsymbol{\mathcal{E}}$, $\hat{J}_z\boldsymbol{H} = m\boldsymbol{H}$, todėl pagal (D.3.4), (D.3.5) ir (D.3.1)

$$G_z = \frac{m}{\omega}\int_V (\varepsilon_0 |\boldsymbol{\mathcal{E}}|^2 + \mu_0 |\boldsymbol{H}|^2)\mathrm{d}V = \frac{m}{\omega}E\,. \tag{D.3.6}$$

Jeigu lauke yra tik vienas šios daugiapolės spinduliuotės kvantas, tada $E = \hbar\omega$, ir pagal (D.3.6) judesio kiekio momento z komponentė yra lygi $\hbar m$. Taip pat galima įrodyti, kad šiuo atveju pilnutinio judesio kiekio momento kvadratas yra lygus $l(l+1)\hbar^2$. Taigi, daugiapolės spinduliuotės lauko kvanto pilnutinį judesio kiekio momentą ir jo projekciją nusako jos eilė *l, m* – lygiai taip pat kaip centriniame jėgų lauke judančios dalelės judesio kiekio momentą ir jo projekciją nusako kvantiniai skaičiai *l* ir *m*.

Didėjant *r*, daugiapolės spinduliuotės elektrinio ir magnetinio laukų išilginės komponentės (kurios sąlygoja nenulinį judesio kiekio momentą) sparčiai mažėja (jų amplitudės yra proporcingos r^{-2}, o skersinių komponenčių amplitudės yra proporcingos r^{-1}). Todėl, nagrinėjant daugelį kitų daugiapolės spinduliuotės savybių (pvz., spinduliuotės intensyvumo kampinį pasiskirstymą), galima neatsižvelgti į šį nuokrypį nuo idealiai skersinės spinduliuotės ir teigti, kad elektrinis ir magnetinis laukai yra statmeni $\boldsymbol{r}$, o energijos ir judesio kiekio pernašos kryptis yra lygiagreti su $\boldsymbol{r}$.

D.4. Daugiapolės spinduliuotės šaltiniai. Daugiapoliai momentai

Daugiapolės spinduliuotės amplitudės $a_{\mathrm{E}}(l,m)$ ir $a_{\mathrm{M}}(l,m)$, kurios įeina į (D.2.18) ir (D.2.21) reiškinius, priklauso nuo spinduliuotės šaltinio. Apskritai elektromagnetinės spinduliuotės šaltiniai yra priklausantys nuo laiko elektros krūviai (t. y. elektros srovė) ir priklausantys nuo laiko magnetiniai momentai. Todėl, skaičiuojant tas amplitudes, reikia atsižvelgti į elektros srovės tankio $\boldsymbol{j}$ (t. y. elektros krūvio, kuris pereina pro ploto vienetą per laiko vienetą) ir įmagnetėjimo $\boldsymbol{M}$ (t. y. tūrio vieneto magnetinio momento) pasiskirstymą spinduliuotės šaltinyje. Kai yra spinduliuotės šaltiniai, Maksvelo lygtys yra

$$\nabla\times\boldsymbol{\mathcal{E}}(\boldsymbol{r},t)=-\mu_0\left[\frac{\partial\boldsymbol{H}(\boldsymbol{r},t)}{\partial t}+\frac{\partial\boldsymbol{M}(\boldsymbol{r},t)}{\partial t}\right]=-\frac{1}{\varepsilon_0c^2}\left[\frac{\partial\boldsymbol{H}(\boldsymbol{r},t)}{\partial t}+\frac{\partial\boldsymbol{M}(\boldsymbol{r},t)}{\partial t}\right], \tag{D.4.1a}$$

$$\nabla\times\boldsymbol{H}(\boldsymbol{r},t)=\varepsilon_0\frac{\partial\boldsymbol{\mathcal{E}}(\boldsymbol{r},t)}{\partial t}+\boldsymbol{j}(\boldsymbol{r},t) \tag{D.4.1b}$$

(plg. su Maksvelo lygtimis laisvai erdvei (D.2.2a,b)). Be to, šias lygtis reikia papildyti tolydumo lygtimi

$$\nabla\cdot\boldsymbol{j}(\boldsymbol{r},t)=-\frac{\partial\rho(\boldsymbol{r},t)}{\partial t}; \tag{D.4.1c}$$

čia „$\nabla\cdot$“ yra divergencijos operatorius (kitaip žymimas „div“). Kaip ir anksčiau, remsimės prielaida, kad visų dydžių priklausomybė nuo laiko yra harmoninė, t. y. (D.2.1a,b) pavidalo. Tada pastarosios trys lygtys įgyja tokį pavidalą:

$$\nabla\times\boldsymbol{\mathcal{E}}(\boldsymbol{r})=\frac{\mathrm{i}\omega}{\varepsilon_0c^2}[\boldsymbol{H}(\boldsymbol{r})+\boldsymbol{M}(\boldsymbol{r})], \tag{D.4.2a}$$

$$\nabla\times\boldsymbol{H}(\boldsymbol{r})=-\mathrm{i}\omega\varepsilon_0\boldsymbol{\mathcal{E}}(\boldsymbol{r})+\boldsymbol{j}(\boldsymbol{r}), \tag{D.4.2b}$$

$$\nabla\cdot\boldsymbol{j}(\boldsymbol{r})=\mathrm{i}\omega\rho(\boldsymbol{r}). \tag{D.4.2c}$$

Be to, toliau bus reikalingos lygtys, kurios nusako tik vieną iš dviejų vektorių $\boldsymbol{\mathcal{E}}$ arba $\boldsymbol{H}$ (bet ne juos kartu). Šios lygtys išplaukia iš (D.4.2a,b) ir iš bangos skaičiaus *k* bei šviesos greičio *c* išraiškų (D.2.8) ir (D.2.3):

$$\nabla\times\nabla\times\boldsymbol{H}-k^2\boldsymbol{H}=\nabla\times\boldsymbol{j}+k^2\boldsymbol{M}, \tag{D.4.3a}$$

$$\nabla\times\nabla\times\boldsymbol{\mathcal{E}}-k^2\boldsymbol{\mathcal{E}}=\frac{\mathrm{i}k}{\varepsilon_0c}(\boldsymbol{j}+\nabla\times\boldsymbol{M}). \tag{D.4.3b}$$

Už šaltinio ribų $\boldsymbol{j}\equiv 0$ ir $\boldsymbol{M}\equiv 0$, todėl (D.4.3a,b) lygtys virsta laisvos erdvės bangine lygtimi (D.2.7).

Rasime (D.4.3a,b) lygčių sprendinius, kurių pavidalas yra toks pat kaip grynosios daugiapolės spinduliuotės lauko. Pradėsime nuo *l, m* eilės elektrinės daugiapolės spinduliuotės, kurios magnetinis laukas yra (D.2.5) pavidalo. (D.2.5) išraiška gauta remiantis vien lauko simetrijos savybėmis, todėl ji lieka galioti ir esant lauko šaltiniams. Tačiau diferencialinė lygtis, kuri nusako $f_{\mathrm{E}}(l,m;r)$, kai yra lauko šaltiniai, skiriasi nuo (D.2.9) lygties. Teisingoji lygtis gaunama įrašius (D.2.5) į (D.4.3a), skaliariškai padauginus abi lygties puses iš $\boldsymbol{X}^*_{lm}(\theta,\phi)$ ir integravus kampų θ ir ϕ atžvilgiu. Taip išvedama lygtis

$$\left[-\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2}+\frac{l(l+1)}{r^2}-k^2\right]f_{\mathrm{E}}(l,m;r)=K_{\mathrm{E}}(l,m;r)\,; \tag{D.4.4}$$

čia funkcija $K_{\mathrm{E}}(l, m; r)$ apibrėžiama sąryšiu

$$K_{\mathrm{E}}(l,m;r)=r\int\boldsymbol{X}^*_{lm}(\theta,\phi)\cdot(\nabla\times\boldsymbol{j}+k^2\boldsymbol{M})\mathrm{d}\Omega\,; \tag{D.4.5}$$

čia $\mathrm{d}\Omega\equiv\sin\theta\,\mathrm{d}\theta\,\mathrm{d}\phi$. Kadangi dydis $K_{\mathrm{E}}(l,m;r)$ nusako šaltinių įtaką spinduliuotės laukui, jį vadinsime ***šaltinio dėmeniu***.

Analogiškos išraiškos gaunamos ir nagrinėjant *l, m* eilės *magnetinę* daugiapolę spinduliuotę. Šiuo atveju elektrinis laukas išreiškiamas (D.2.6) reiškiniu. Funkcija $f_M(l,m;r)$ atitinka (D.4.4) pavidalo lygtį, tačiau su kitokiu šaltinio dėmeniu, kuris šiuo atveju išreiškiamas šitaip:

$$K_M(l,m;r) = \frac{\mathrm{i}k}{\varepsilon_0 c} \cdot r \int \boldsymbol{X}^*_{lm}(\theta,\phi) \cdot (\boldsymbol{j} + \nabla \times \boldsymbol{M}) \mathrm{d}\Omega \ . \tag{D.4.6}$$

Nehomogeninė diferencialinė lygtis (D.4.4) su šaltinio dėmeniu (D.4.5) arba (D.4.6) leidžia apskaičiuoti amplitudes $a_E(l,m)$ ir $a_M(l,m)$, kurios įeina į elektrinio ir magnetinio laukų išraiškas laisvoje erdvėje (už šaltinio ribų) (D.2.18), (D.2.19), (D.2.21), (D.2.22). Tam reikia nustatyti (D.4.4) lygties sprendinių f_E ir f_M asimptotinį pavidalą, kai r yra didelis. Palyginus šį asimptotinį funkcijos f_E pavidalą su (D.2.17), gaunama amplitudė a_E, o palyginus asimptotinį funkcijos f_M pavidalą su (D.2.20), gaunama amplitudė a_M.

Vienas iš tiesinių nehomogeninių diferencialinių lygčių (pvz., (D.4.4)) sprendimo būdų – tai vadinamasis ***Gryno funkcijų metodas***, kuris pagrįstas tuo, kad lygties sprendinį, kai yra bet kokio pavidalo šaltinio dėmuo, galima išreikšti sprendinių, kurie atitinka įvairiuose erdvės taškuose esančius *vienetinius taškinius* šaltinius, integralu tų šaltinių koordinačių atžvilgiu. Vienetinio taškinio šaltinio atveju (D.4.4) lygties dešinioji pusė būtų lygi $\delta(r - r')$, kur δ žymi Dirako delta funkciją (žr. E priedą), r' yra šaltinio radialioji koordinatė, o r yra stebėjimo taško radialioji koordinatė. (D.4.4) lygties sprendinys $G(r, r')$, kai dešinioji pusė yra $\delta(r - r')$, vadinamas tos lygties ***Gryno funkcija***. Nehomogeninės lygties (D.4.4) sprendinio išraiška remiantis Gryno funkcija $G(r,r')$ yra šitokia:

$$f_E(l,m;r) = \int_0^\infty G(r,r') K_E(r') \mathrm{d}r' \ . \tag{D.4.7}$$

(D.4.4) lygties Gryno funkciją $G(r,r')$ galima išreikšti atitinkamos homogeninės lygties sprendiniais. Tam reikalingi du sprendiniai: sprendinys $u_l^{(+)}(r)$, kuris nusako išeinančią iš taško $r = 0$ spinduliuotę (žr. (D.2.15)), ir „reguliarusis“ sprendinys $F_l(r)$ (žr. (D.2.10) ir (D.2.12)). (D.4.4) lygties Gryno funkcija yra

$$G(r,r') = \frac{1}{k} F_l(r_<) u_l^{(+)}(r_>) \ ; \tag{D.4.8}$$

čia žymuo „$r_<$“ reiškia mažesnę iš dviejų radialiųjų koordinačių r ir r', o žymuo „$r_>$“ reiškia didesnę iš dviejų koordinačių r ir r'.

(D.4.7) lygybė galioja esant bet kokioms r vertėms. Tačiau, kad šią išraišką būtų įmanoma palyginti su (D.2.17) reiškiniu, reikalingas tik asimptotinis sprendinio pavidalas, kai r yra didelis (šaltinio išorėje). Tada visos r' vertės, kurioms esant (D.4.7) integralo pointegralinė funkcija skiriasi nuo nulio, yra mažesnės už r, todėl, skaičiuojant tą integralą, Gryno funkcijos išraiškoje (D.4.8) galima laikyti, kad $r_< = r'$, o $r_> = r$. Vadinasi, šaltinio išorėje

$$f_E(l,m;r) = \frac{u_l^{(+)}(r)}{k} \int_0^\infty F_l(r') K_E(r') \mathrm{d}r' \ . \tag{D.4.9}$$

Palyginus (D.4.9) su (D.2.17), galima teigti, kad elektrinės daugiapolės spinduliuotės elektrinio lauko amplitudė yra lygi

$$a_E(l,m) = \frac{1}{\varepsilon_0 c} \int_0^\infty F_l(r) K_E(l,m;r) \mathrm{d}r \ . \tag{D.4.10}$$

Įrašius $K_E(r)$ išraišką (D.4.5) į (D.4.10) ir pasinaudojus tuo, kad tūrio elementas yra $\mathrm{d}V = r^2 \mathrm{d}r \mathrm{d}\Omega$, išvedama formulė

$$a_E(l,m) = \frac{1}{\varepsilon_0 c} \int_V r^{-1} F_l(r) \boldsymbol{X}^*_{lm} \cdot (\nabla \times \boldsymbol{j} + k^2 \boldsymbol{M}) \mathrm{d}V \ ; \tag{D.4.11}$$

čia integruojama šaltinio tūriu.

Visiškai analogiškai gaunama ir magnetinės daugiapolės spinduliuotės elektrinio lauko amplitudė šaltinio išorėje. Šiuo atveju reikia lyginti nehomogeninės lygties (D.4.4), kurioje šaltinio dėmenį nusako (D.4.6) reiškinys, sprendinio asimptotinį pavidalą su (D.2.20) reiškiniu. Šitaip randame:

$$a_M(l,m) = \int_0^\infty F_l(r) K_M(l,m;r) \mathrm{d}r = \frac{\mathrm{i}k}{\varepsilon_0 c} \int_V r^{-1} F_l(r) \boldsymbol{X}^*_{lm} \cdot (\boldsymbol{j} + \nabla \times \boldsymbol{M}) \mathrm{d}V \ . \tag{D.4.12}$$

Amplitudžių išraiškos (D.4.11) ir (D.4.12) šaltinio išorėje yra tikslios: jos galioja, kai yra bet kokia šaltinio matmenų ir spinduliuotės bangos ilgio santykio vertė. Tačiau dabar tarkime, kad spinduliuotės bangos ilgis yra daug didesnis už šaltinio matmenis, t. y. visame integravimo tūryje $kr << 1$. Tada reguliarųjį sprendinį $F_l(r)$ galima pakeisti jo asimptotine išraiška, kuri tinka, kai r yra mažas:

$$F_l(r) \approx \frac{(kr)^{l+1}}{(2l+1)!!} \tag{D.4.13}$$

(ši lygybė išplaukia iš $F_l(r)$ išraiškos (D.2.12) ir sferinių Beselio funkcijų asimptotinės išraiškos (C.3.5)). Įrašę $F_l(r)$ asimptotinę išraišką (D.4.13) ir funkcijos $\boldsymbol{X}_{lm}$ išraišką (D.1.8) į amplitudės $a_\mathrm{E}(l,m)$ išraišką (D.4.11), gauname:

$$a_\mathrm{E}(l,m) \approx \frac{k^{l+1}}{(2l+1)!!\sqrt{l(l+1)}} \cdot \frac{1}{\varepsilon_0 c} \int_V r^l (\hat{\boldsymbol{L}} Y_{lm})^* \cdot (\nabla \times \boldsymbol{j} + k^2 \boldsymbol{M}) \mathrm{d}V \,. \tag{D.4.14}$$

Kadangi operatorius $\hat{\boldsymbol{L}}$ yra Ermito operatorius, tai pastarąjį integralą galima užrašyti kitu pavidalu pasinaudojus Ermito operatorių savybe (3.1.2):

$$\begin{aligned} a_\mathrm{E}(l,m) &\approx \frac{k^{l+1}}{(2l+1)!!\sqrt{l(l+1)}} \cdot \frac{1}{\varepsilon_0 c} \int_V r^l Y_{lm}^* \cdot (\hat{\boldsymbol{L}} \cdot \nabla \times \boldsymbol{j} + k^2 \hat{\boldsymbol{L}} \cdot \boldsymbol{M}) \mathrm{d}V \equiv \\ &\equiv \frac{k^{l+1}}{(2l+1)!!\sqrt{l(l+1)}} \cdot \frac{1}{\varepsilon_0 c} I; \end{aligned} \tag{D.4.15}$$

čia I žymi integralą. Kadangi operatorius $\hat{\boldsymbol{L}}$ apibrėžiamas (D.1.9) sąryšiu, tai galioja šios vektorinės tapatybės:

$$\begin{aligned} &\hat{\boldsymbol{L}} \cdot \nabla \times \boldsymbol{j} = -\mathrm{i}[(\boldsymbol{r} \cdot \nabla + 2)(\nabla \cdot \boldsymbol{j}) - \nabla^2 (\boldsymbol{r} \cdot \boldsymbol{j})], \\ &\hat{\boldsymbol{L}} \cdot \boldsymbol{M} = \mathrm{i}\nabla \cdot (\boldsymbol{r} \times \boldsymbol{M}). \end{aligned} \tag{D.4.16}$$

Įrašius (D.4.16) į (D.4.15) ir išreiškus srovės tankio divergenciją $\nabla \cdot \boldsymbol{j}$ erdvinio krūvio tankiu pagal tolydumo lygtį (D.4.c), integralas I įgyją tokį pavidalą:

$$I = \int_V r^l Y_{lm}^*(\theta,\phi)[\omega(\boldsymbol{r} \cdot \nabla)\rho + 2\omega\rho + \mathrm{i}\nabla^2(\boldsymbol{r} \cdot \boldsymbol{j}) + \mathrm{i}k^2 \nabla \cdot (\boldsymbol{r} \times \boldsymbol{M})] \mathrm{d}V \,. \tag{D.4.17}$$

Tai yra keturių integralų suma. Pirmąjį integralą patogiausia skaičiuoti sferinėje koordinačių sistemoje (žr. B priedą). Sferinėse koordinatėse operatoriaus $(\boldsymbol{r} \cdot \nabla)$ išraiška yra šitokia: $(\boldsymbol{r} \cdot \nabla) = r(\partial/\partial r)$ (žr. B priedas, B.2 lentelė). Tada pirmasis integralas lygus

$$I_1 \equiv \omega \int_V r^{l+1} Y_{lm}^*(\theta,\phi) \frac{\partial \rho}{\partial r} \mathrm{d}V = \omega \int_V Y_{lm}^*(\theta,\phi) \left[\int_{r_1(\theta,\phi)}^{r_2(\theta,\phi)} r^{l+3} \frac{\partial \rho}{\partial r} \mathrm{d}r \right] \mathrm{d}\Omega \,;$$

čia $r_1(\theta,\phi)$ ir $r_2(\theta,\phi)$ yra taškų, kuriuose ašis (θ,ϕ) kerta integravimo srities paviršių, radialiosios koordinatės. Integralas laužtiniuose skliaustuose lengvai apskaičiuojamas integruojant dalimis:

$$\int_{r_1(\theta,\phi)}^{r_2(\theta,\phi)} r^{l+3} \frac{\partial \rho}{\partial r} \mathrm{d}r = r^{l+3} \rho(\boldsymbol{r}) \Big|_{r_1(\theta,\phi)}^{r_2(\theta,\phi)} - (l+3) \int_{r_1(\theta,\phi)}^{r_2(\theta,\phi)} r^{l+2} \rho(\boldsymbol{r}) \mathrm{d}r \,.$$

Pirmasis dėmuo lygus nuliui, nes integravimo sritis yra šaltinio išorėje, kur erdvinio krūvio nėra ($\rho = 0$). Vadinasi,

$$I_1 \equiv -(l+3)\omega \int_\Omega Y_{lm}^*(\theta,\phi) \left[\int_{r_1(\theta,\phi)}^{r_2(\theta,\phi)} r^{l+2} \rho \mathrm{d}r \right] \mathrm{d}\Omega = -(l+3)\omega \int_V r^l Y_{lm}^*(\theta,\phi) \rho(\boldsymbol{r}) \mathrm{d}V \,.$$

Trečiąjį integralą (D.4.17) reiškinyje lengviausia apskaičiuoti pagal antrąją Gryno teoremą (žr. B priedas, B.3 lentelė). Tos teoremos išraiškoje paviršinis integralas lygus nuliui, nes, kaip minėta, ant integravimo srities paviršiaus šaltinių nėra ($\boldsymbol{j} = 0$). Todėl

$$I_3 = \mathrm{i} \int_V \nabla^2 (r^l Y_{lm}^*) \cdot (\boldsymbol{r} \cdot \boldsymbol{j}) \mathrm{d}V \,.$$

Iš skaliarinių sferinių harmonikų savybių išplaukia, kad $\nabla^2 (r^l Y_{lm}^*) \equiv 0$. Taigi,

$$I_3 = 0.$$

Įrašę integralų I_1 ir I_3 išraiškas į (D.4.17), gauname:

$$I = -(l+1)\omega \int_V r^l Y_{lm}^*(\theta,\phi) \rho(\boldsymbol{r}) \mathrm{d}V + \mathrm{i}k^2 \int_V r^l Y_{lm}^*(\theta,\phi) \nabla \cdot (\boldsymbol{r} \times \boldsymbol{M}) \mathrm{d}V \,. \tag{D.4.18}$$

Įrašę (D.4.18) į (D.4.15) ir pasinaudoję tuo, kad $\omega = kc$, kur šviesos greitis c išreiškiamas (D.2.3) formule, išvedame galutinę *l, m* eilės elektrinės daugiapolės spinduliuotės magnetinio lauko amplitudės apytikslę išraišką, kai šaltinio matmenys yra daug mažesni už spinduliuotės bangos ilgį:

$$a_{\mathrm{E}}(l,m) \approx -\frac{1}{\varepsilon_0 (2l+1)!!}\left(\frac{l+1}{l}\right)^{1/2} k^{l+2}\left(Q_{lm} + Q'_{lm}\right); \tag{D.4.19}$$

$$Q_{lm} = \int_V r^l Y^*_{lm}(\theta,\phi)\rho(\boldsymbol{r})\mathrm{d}V\,, \tag{D.4.20}$$

$$Q'_{lm} = -\frac{\mathrm{i}k}{(l+1)c}\int_V r^l Y^*_{lm}(\theta,\phi)\nabla\cdot(\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{M})\mathrm{d}V\,. \tag{D.4.21}$$

Dydis Q_{lm} vadinamas ***l, m* eilės apibendrintuoju elektriniu daugiapoliu momentu**.

Analogiškai skaičiuojama ir magnetinės spinduliuotės elektrinio lauko stiprio amplitudė $a_{\mathrm{M}}(l,m)$, kai integravimo tūryje $kr \ll 1$. Palyginus (D.4.12) su (D.4.11), akivaizdu, kad, palyginti su $a_{\mathrm{E}}(l,m)$ išraiška, $a_{\mathrm{M}}(l,m)$ išraiškoje yra tokie pakeitimai: 1) yra papildomas daugiklis ik; 2) vietoj $\boldsymbol{j}$ reikia naudoti $\boldsymbol{M}$; 3) vietoj $\boldsymbol{M}$ reikia naudoti $\boldsymbol{j}/k^2$. Be to, kadangi skaičiuojant $a_{\mathrm{E}}(l,m)$ srovės tankio divergencija buvo pakeista dydžiu $\mathrm{i}\omega\rho(\boldsymbol{r})$ (pagal tolydumo lygtį (D.4.2c)), tai (D.4.20) reiškinyje vietoj $\rho(\boldsymbol{r})$ reikia rašyti $-\mathrm{i}\omega^{-1}(\nabla\cdot\boldsymbol{M})$. Šitaip gauname:

$$a_{\mathrm{M}}(l,m) \approx \frac{1}{\varepsilon_0 (2l+1)!!}\left(\frac{l+1}{l}\right)^{1/2} k^{l+2}\frac{1}{c}\left(M_{lm} + M'_{lm}\right); \tag{D.4.22}$$

$$M_{lm} = -\frac{1}{(l+1)}\int_V r^l Y^*_{lm}(\theta,\phi)\nabla\cdot(\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{j})\mathrm{d}V\,, \tag{D.4.23}$$

$$M'_{lm} = -\int_V r^l Y^*_{lm}(\theta,\phi)(\nabla\cdot\boldsymbol{M})\mathrm{d}V\,. \tag{D.4.24}$$

Dydis M_{lm} vadinamas ***l, m* eilės apibendrintuoju magnetiniu daugiapoliu momentu**.

Dydžių Q'_{lm}, M_{lm} ir M'_{lm} išraiškose pointegralinė funkcija yra lygi vektorinės funkcijos divergencijos ir skaliarinės funkcijos sandaugai. Tokio pavidalo integralus dažnai paprasčiausia apskaičiuoti integruojant dalimis pagal bendrąją formulę, kuri pateikta B priedo B.3 lentelėje. Kadangi aptariamuoju atveju viena iš dauginamųjų funkcijų (į kurią įeina $\boldsymbol{j}$ arba $\boldsymbol{M}$) yra tapačiai lygi nuliui ant integravimo srities paviršiaus, tai paviršinio integralo nelieka. Šitaip gauname tokias minėtų dydžių išraiškas:

$$Q'_{lm} = \frac{\mathrm{i}k}{(l+1)c}\int_V (\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{M})\cdot\nabla[r^l Y^*_{lm}(\theta,\phi)]\mathrm{d}V\,, \tag{D.4.25}$$

$$M_{lm} = \frac{1}{(l+1)}\int_V (\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{j})\cdot\nabla[r^l Y^*_{lm}(\theta,\phi)]\mathrm{d}V\,, \tag{D.4.26}$$

$$M'_{lm} = \int_V \boldsymbol{M}\cdot\nabla[r^l Y^*_{lm}(\theta,\phi)]\mathrm{d}V\,. \tag{D.4.27}$$

Dar viena magnetinio momento M_{lm} (D.4.23) išraiška gaunama pasinaudojus vektorine tapatybe $\nabla\cdot(\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{j}) = -\boldsymbol{r}\cdot(\nabla\times\boldsymbol{j})$:

$$M_{lm} = \frac{1}{(l+1)}\int_V r^l Y^*_{lm}(\theta,\phi)\boldsymbol{r}\cdot(\nabla\times\boldsymbol{j})\mathrm{d}V\,. \tag{D.4.28}$$

E priedas. Dirako delta funkcija

Simbolinė funkcija, kuri dažnai taikoma aproksimuojant siauro impulso pavidalo funkcijas, yra ***Dirako delta funkcija*** $\delta(x)$, kuri apibrėžiama sąryšiu

$$\int_{-\infty}^{\infty} w(x)\delta(x)\mathrm{d}x = w(0)\,; \tag{E.1}$$

čia $w(x)$ yra bet kokia funkcija, kuri yra tolydi taške $x = 0$. Kita Dirako δ funkcijos apibrėžtis yra tokia: Dirako delta funkcija – tai funkcija, kuri atitinka šias dvi lygybes:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x)\mathrm{d}x = 1\,, \tag{E.2a}$$

$$\delta(x) = \begin{cases} \infty, & x = 0; \\ 0, & x \neq 0. \end{cases} \tag{E.2b}$$

Iš (E.1) išplaukia, kad δ funkcijai yra būdinga tokia savybė:

$$\int_{-\infty}^{\infty} w(x)\delta(x - x_0)\mathrm{d}x = w(x_0)\,. \tag{E.3a}$$

Kadangi δ funkcija yra lyginė, tai (E.3a) lygybę galima perrašyti šitaip:

$$\int_{-\infty}^{\infty} w(x)\delta(x_0 - x)\mathrm{d}x = w(x_0)\,. \tag{E.3b}$$

Šios lygybės kairiojoje pusėje esantis integralas – tai funkcijų $w(x)$ ir $\delta(x)$ ***sąsūka***, kurios argumentas yra x_0. Vadinasi, šią δ funkcijos savybę žodžiais galima suformuluoti šitaip: *duotosios funkcijos w(t) ir δ funkcijos sąsūka sutampa su w(t).*

δ funkcija yra lyginė ($\delta(-x) = \delta(x)$). Dar viena δ funkcijos savybė:

$$\delta(ax) = \frac{1}{a}\delta(x) \qquad (a > 0). \tag{E.4}$$

Kartais naudojama δ funkcijos išraiška integralu:

$$\delta(x) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} e^{\pm jx\omega}\mathrm{d}\omega\,. \tag{E.5}$$

Ši formulė gaunama apskaičiavus δ funkcijos Furjė transformaciją (žr. F priedas, (F.1.1) formulė), o paskui apskaičiavus gautosios lygybės abiejų pusių atvirkštinę Furjė transformaciją (F.1.2). δ funkcijos (E.5) savybė žodžiais formuluojama šitaip: *δ funkcija – tai konstantos* $1/(2\pi)$ *tiesioginė Furjė transformacija arba vienetinės funkcijos (vieneto) atvirkštinė Furjė transformacija*[1].

Su Dirako δ funkcija susijusi ***vienetinė laiptinė funkcija*** $u(t)$, kuri apibrėžiama šitaip:

$$u(t) = \begin{cases} 1, & t > 0; \\ 0, & t < 0. \end{cases} \tag{E.6}$$

Vienetinė laiptinė funkcija ir Dirako δ funkcija susijusios sąryšiu

$$\int_{-\infty}^{t} \delta(\lambda)\mathrm{d}\lambda = u(t)\,, \tag{E.7}$$

iš kurio išplaukia

$$\frac{\mathrm{d}u(t)}{\mathrm{d}t} = \delta(t)\,. \tag{E.8}$$

Galima rasti tokią funkciją $\delta_a(x)$, kuri artėja prie Dirako δ funkcijos, kai jos parametras a artėja prie nulio, t. y. $\lim_{a\to 0}\delta_a(x) = \delta(x)$. Toliau pateiktos trys tokios ribinės išraiškos:

---

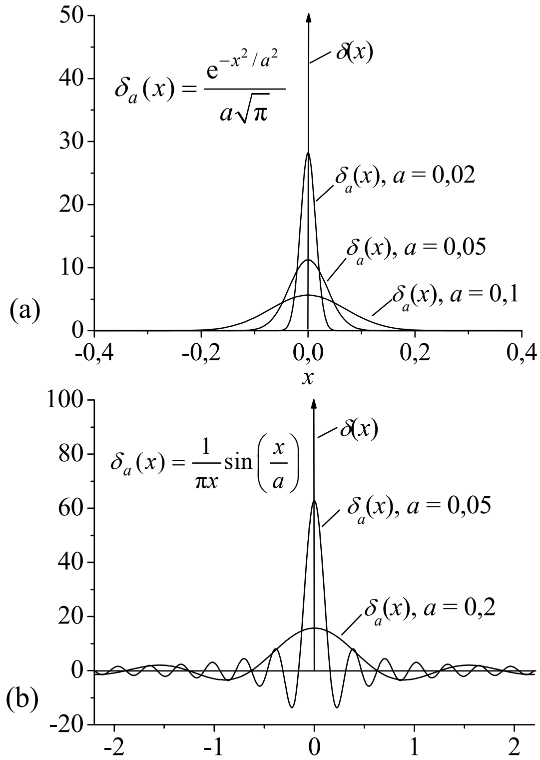
[1] Ši apibrėžtis galioja tik tada, kai tiesioginė ir atvirkštinė Furjė transformacijos apibrėžiamos taip kaip F priede. Vartojant kitas Furjė transformacijos apibrėžtis (jos paminėtos išnašoje F priedo pradžioje), δ funkcijos išraiškoje prieš Furjė transformaciją gali atsirasti papildomas daugiklis.

$$\delta(x)=\lim_{a\to 0}\frac{1}{a\sqrt{\pi}}\mathrm{e}^{-x^2/a^2}, \qquad \text{(E.9)}$$

$$\delta(x)=\lim_{a\to 0}\frac{1}{\pi}\frac{a}{a^2+x^2}, \qquad \text{(E.10)}$$

$$\delta(x)=\lim_{a\to 0}\frac{1}{\pi x}\sin\left(\frac{x}{a}\right). \qquad \text{(E.11)}$$

(E.9) formulę iliustruoja E.1a pav., o (E.11) formulę – E.1b pav.



E.1 pav. Dirako δ funkcijos asimptotinės išraiškos. (a) Dirako δ funkcija kaip Gauso skirstinio tikimybės tankio riba. (b) Dirako δ funkcija kaip funkcijos $\sin(x/a)/(\pi x)$ riba

F priedas. Signalų Furjė analizės elementai

F.1. Furjė transformacijos ir signalo spektro sąvokos

Laiko funkcijos $x(t)$ ***Furjė transformacija*** (angl. *Fourier transform*) – tai funkcija, kuri apibrėžiama šitaip:

$$X(\omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} x(t) e^{-\mathrm{i}\omega t} \mathrm{d}t ; \tag{F.1.1}$$

čia „i“ yra menamasis vienetas, o ω yra Furjė transformacijos argumentas, kurio dimensija sutampa su atvirkštinio laiko dimensija. (F.1.1) formulė kartu apibrėžia ir dažnio sąvoką: ***kampinis dažnis*** – tai Furjė transformacijos (F.1.1) parametras ω, kurį galima išreikšti šitaip: $\omega = 2\pi\nu$; čia ν yra įprastinis dažnis. Žinant Furjė transformaciją $X(\omega)$, pradinę funkciją $x(t)$ galima apskaičiuoti ***atvirkštinės Furjė transformacijos*** būdu:

$$x(t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} X(\omega) e^{\mathrm{i}\omega t} \mathrm{d}\omega . \tag{F.1.2}$$

Funkcijos $x(t)$ ir $X(\omega)$, kurios susijusios Furjė transformacija (F.1.1) ir (F.1.2), sudaro vadinamąją ***Furjė porą***[1]. Kai kurios Furjė transformacijos savybės yra pateiktos F.1 ir F.2 lentelėse, kurios yra šio priedo pabaigoje.

Toliau laiko funkciją $x(t)$ vadinsime „signalu“. Signalo $x(t)$ Furjė transformacija $X(\omega)$ taip pat vadinama ***signalo spektru***. Iš (F.1.1) ir (F.1.2) išplaukia, kad signalo išraiška $x(t)$ ir to signalo spektras $X(\omega)$ suteikia vienodą informaciją apie tiriamąjį signalą. Toliau Furjė transformacija bus panaudota, sprendžiant du uždavinius: 1) išreiškiant signalo energijos spektrinį tankį; 2) skaičiuojant detektoriaus signalą impulsinėje veikoje.

F.2. Signalo energijos spektrinis tankis

Bet koks baigtinės trukmės signalas turi tam tikrą baigtinę energiją E. Šios energijos fizikinis pavidalas skirtinguose signalo apdorojimo etapuose gali būti įvairus (pvz., sužadintųjų atomų vidinė energija, elektromagnetinių bangų energija, krūvininkų kryptingo judėjimo kinetinė energija, kondensatoriuje sukaupto krūvio sąveikos potencinė energija, rezistoriaus vidinė energija ir kt.), tačiau jos vertė yra tiksliai apibrėžta ir pastovi. Bet kokio realiojo arba kompleksinio signalo pilnutinė energija visada yra proporcinga signalo modulio kvadrato integralui laiko atžvilgiu nuo $-\infty$ iki $+\infty$:

$$E \sim \int_{-\infty}^{+\infty} |x(t)|^2 \, \mathrm{d}t . \tag{F.2.1}$$

Įsitikinsime šio teiginio teisingumu, kai signalas $x(t)$ yra elektros srovė arba įtampa tam tikroje ekvivalentinėje varžoje R. Tokie signalai dažnai pasitaiko praktikoje, nes, apdorojant daugelį kitokios prigimties signalų, jų energija (arba tos energijos dalis) paverčiama elektros srovės energija. Pvz., daugelio impulsinių jonizuojančiosios spinduliuotės detektorių signalo energija virsta elektros srovės energija ekvivalentinėje RC grandinėje (žr. 15.3 pav. 15.2.2 poskyryje), kurios kondensatorius C paskui išsikrauna per rezistorių R (t. y. kondensatoriuje C egzistavusio elektrinio lauko energija virsta rezistoriaus R vidine energija). Iš elektrinių grandinių teorijos yra žinoma, kad elektros srovės $i(t)$ momentinė galia (t. y. darbas, kurį elektros srovė atlieka per laiko vienetą) yra lygi

$$P(t) = U(t) i(t) = R i^2(t) = \frac{U^2(t)}{R} ; \tag{F.2.2}$$

čia $U(t)$ yra įtampos kritimas varžoje R. Pagal galios prasmę pilnutinė signalo energija yra lygi

[1] Naudojamos dar dvi Furjė transformacijos apibrėžtys: vienu atveju abiejų transformacijų išraiškose yra daugiklis $1/\sqrt{2\pi}$, o kitu atveju tiesioginės Furjė transformacijos argumento ir atvirkštinės Furjė transformacijos integravimo kintamojo vaidmenį atlieka ne ω, o ν (todėl šiuo atveju nėra daugiklio $1/(2\pi)$ atvirkštinės transformacijos išraiškoje). Visos toliau pateiktosios Furjė transformacijų išraiškos galioja tik tada, kai tiesioginė ir atvirkštinė Furjė transformacijos apibrėžiamos (F.1.1) ir (F.1.2) formulėmis, o transformacijos parametras yra ω.

$$E = \int_{-\infty}^{+\infty} P(t)\mathrm{d}t = R\int_{-\infty}^{+\infty} i^2(t)\mathrm{d}t = \frac{1}{R}\int_{-\infty}^{+\infty} U^2(t)\mathrm{d}t \,. \qquad \text{(F.2.3)}$$

Taigi, įsitikinome, kad pilnutinė signalo energija yra proporcinga jo kvadrato integralui laiko atžvilgiu (modulio ženklas šiuo atveju nereikalingas, nes srovė ir įtampa yra realieji dydžiai, kurių kvadratas visada yra teigiamas realusis dydis). Jeigu signalo vaidmenį atlieka įtampa $U(t)$, tada proporcingumo koeficientas yra $1/R$, o jeigu signalo vaidmenį atlieka srovė $i(t)$, tada proporcingumo koeficientas yra R.

Signalo ***energijos spektrinis tankis*** $\varepsilon(\nu)$ arba $\varepsilon(\omega)$ – tai signalo energijos kiekis, kuris atitinka vienetinį dažnių intervalą. T. y. pilnutinė signalo energija yra lygi

$$E = \int_{-\infty}^{\infty} \varepsilon(\nu)\mathrm{d}\nu = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} \varepsilon(\omega)\mathrm{d}\omega \,. \qquad \text{(F.2.4)}$$

Signalo energijos spektrinį tankį išreikšime naudodamiesi (F.2.1) sąryšiu ir Furjė transformacijos savybėmis. Tam pasinaudosime ***Parsevalio teorema***, kuri teigia, kad bet kurie du kompleksiniai signalai $x_1(t)$ ir $x_2(t)$ atitinka sąryšį

$$\int_{-\infty}^{\infty} x_1(t)x_2^*(t)\mathrm{d}t = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} X_1(\omega)X_2^*(\omega)\mathrm{d}\omega \,; \qquad \text{(F.2.5)}$$

čia $X_1(\omega)$ ir $X_2(\omega)$ yra signalų $x_1(t)$ ir $x_2(t)$ Furjė transformacijos (spektrai). Jeigu $x_1(t) = x_2(t) = x(t)$, iš (F.2.5) išplaukia

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\,x(t)\,|^2 \,\mathrm{d}t = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} |\,X(\omega)\,|^2 \,\mathrm{d}\omega \,. \qquad \text{(F.2.6)}$$

Šios lygybės kairioji pusė yra proporcinga signalo energijai (žr. (F.2.1)). Vadinasi, iš (F.2.6) išplaukia, kad signalo energija yra proporcinga jo spektro modulio kvadrato integralui dažnio atžvilgiu:

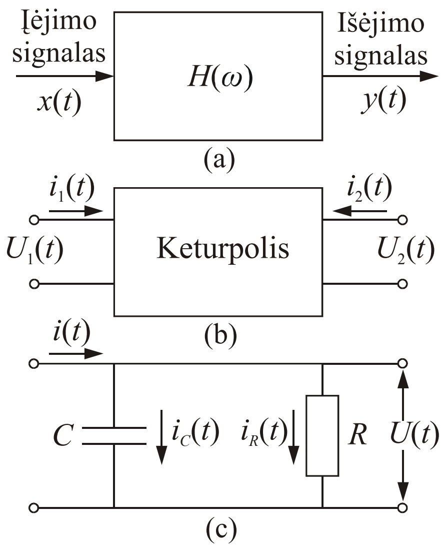
$$E \sim \int_{-\infty}^{\infty} |\,X(\omega)\,|^2 \,\mathrm{d}\omega \,. \qquad \text{(F.2.7)}$$

Palyginus (F.2.4) ir (F.2.7), galima teigti, kad signalo energijos spektrinis tankis yra proporcingas to signalo spektro modulio kvadratui:

$$\varepsilon(\omega) \sim |\,X(\omega)\,|^2 \,. \qquad \text{(F.2.8)}$$

F.3. Perdavimo funkcija ir impulsinis atsakas

Nagrinėsime sistemą, kuri tam tikru būdu transformuoja signalą. T. y. ***įėjimo signalas*** $x(t)$ pakeičiamas ***išėjimo signalu*** $y(t)$ (žr. F.1a pav.). Sistemos išėjimo signalas $y(t)$, kai duotas įėjimo signalas $x(t)$, taip pat yra vadinamas sistemos ***atsaku*** į įėjimo signalą $x(t)$. Tokios sistemos pavyzdys yra keturpolis – elektroninis įrenginys, kuris turi du įėjimo išvadus ir du išėjimo išvadus (žr. F.1b pav.). Keturpolio įėjimo signalo $x(t)$ vaidmenį gali atlikti įėjimo srovė $i_1(t)$ arba įėjimo įtampa $U_1(t)$. Išėjimo signalo $y(t)$ vaidmenį gali atlikti išėjimo srovė $i_2(t)$ arba išėjimo įtampa $U_2(t)$. Keturpolio pavyzdys – RC grandinė, kuri įeina į supaprastintą detektoriaus modelį impulsinėje veikoje (žr. F.1c pav. ir 15.3 pav. 15.2.2 poskyryje). Pastaruoju atveju įėjimo signalas yra detektoriaus momentinė srovė $i(t)$, o išėjimo signalas – įtampos kritimas varžoje R (žr. F.1c pav.).



F.1 pav. (a) Įėjimo ir išėjimo signalų sąvokos. (b) Keturpolio įėjimo signalu galima laikyti įėjimo srovę $i_1(t)$ arba įėjimo įtampą $U_1(t)$, o išėjimo signalu galima laikyti išėjimo srovę $i_2(t)$ arba išėjimo įtampą $U_2(t)$. (c) Keturpolio pavyzdys – lygiagrečioji RC grandinė. Šiuo atveju įėjimo signalas yra RC grandinės įėjimo srovė $i(t)$, o išėjimo signalas yra įtampos kritimas $U(t)$ varžoje R

Praktikoje dažnai pasitaiko sistemų, kurių atsakas į įėjimo signalą $x(t)$ yra tam tikros paprastosios tiesinės diferencialinės lygties su pastoviais koeficientais sprendinys:

$$a_n\frac{\mathrm{d}^n y}{\mathrm{d}t^n} + a_{n-1}\frac{\mathrm{d}^{n-1} y}{\mathrm{d}t^{n-1}} + \ldots + a_1\frac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}t} + a_0 y = x(t)\,; \qquad \text{(F.3.1)}$$

čia n yra lygties eilė, o a_k ($k = 0, 1, ..., n$) yra pastovieji koeficientai. Pvz., visų keturpolių, kurie sudaryti iš pasyviųjų elektroninių komponentų (rezistorių, kondensatorių ir ričių), atsakas į įėjimo signalą $x(t)$ yra (F.3.1) pavidalo diferencialinės lygties sprendinys. Tos lygties eilė ir koeficientų išraiškos priklauso nuokonkrečios elektrinės grandinės. Apskritai kuo didesnis mazgų skaičius grandinėje, tuo aukštesnės eilės diferencialinę lygtį reikia spręsti. Pvz., minėtoji RC grandinė aprašoma pirmosios eilės diferencialine lygtimi (ta lygtis bus sprendžiama kitame šio priedo skyrelyje).

Vienas iš (F.3.1) pavidalo diferencialinių lygčių sprendimo metodų – tai vadinamasis ***Furjė transformacijų metodas***. Atliksime (F.3.1) lygties Furjė transformaciją. Pasinaudojus diferencijavimo teorema (žr. F.1 lentelė, 8-oji eilutė), gaunama tokia lygybė:

$$(\mathrm{i}\omega)^n a_n Y(\omega) + (\mathrm{i}\omega)^{n-1} a_{n-1} Y(\omega) + ... + \mathrm{i}\omega \cdot a_1 Y(\omega) + a_0 Y(\omega) = X(\omega)\,; \qquad \text{(F.3.2)}$$

čia $X(\omega)$ yra įėjimo signalo Furjė transformacija (spektras), o $Y(\omega)$ yra išėjimo signalo spektras. Išreiškę $Y(\omega)$ iš (F.3.2), turime:

$$Y(\omega) = H(\omega) X(\omega)\,; \qquad \text{(F.3.3)}$$

čia $H(\omega)$ yra sistemos ***perdavimo funkcija***:

$$H(\omega) = \frac{1}{(\mathrm{i}\omega)^n a_n + (\mathrm{i}\omega)^{n-1} a_{n-1} + ... + \mathrm{i}\omega \cdot a_1 + a_0}\,. \qquad \text{(F.3.4)}$$

Matome, kad įėjimo ir išėjimo signalų spektrų $X(\omega)$ ir $Y(\omega)$ matematinis sąryšis yra daug paprastesnis negu pačių signalų $x(t)$ ir $y(t)$ sąryšis: išėjimo signalo spektras gaunamas tiesiog padauginus įėjimo signalo spektrą iš perdavimo funkcijos. Todėl atliekant signalų analizę dažnai patogiau operuoti signalų spektrais negu pačiais signalais. Išreiškus išėjimo signalo spektrą $Y(\omega)$, signalas $y(t)$ gali būti apskaičiuotas pagal atvirkštinę Furjė transformaciją (žr. (F.1.2) formulę).

Pagal (F.3.3), kai $X(\omega) \equiv 1$, $Y(\omega) \equiv H(\omega)$. Taigi, $H(\omega)$ yra tam tikro konkretaus išėjimo signalo spektras. Tas išėjimo signalas – tai sistemos atsakas į įėjimo signalą, kurio spektras yra tapačiai lygus vienetui. Atitinkamas įėjimo signalas – tai vieneto atvirkštinė Furjė transformacija, t. y. Dirako delta funkcija (žr. E priedas, (E.5) formulė). Sistemos atsakas į Dirako delta funkcijos pavidalo įėjimo signalą vadinamas sistemos ***impulsiniu atsaku***. Taigi, sistemos perdavimo funkcija $H(\omega)$ yra jos impulsinio atsako $h(t)$ spektras. Kitaip sakant, sistemos impulsinis atsakas yra perdavimo funkcijos atvirkštinė Furjė transformacija (F.1.2):

$$h(t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} H(\omega) e^{\mathrm{i}\omega t} \mathrm{d}\omega\,. \qquad \text{(F.3.5)}$$

Pagal signalų sąsūkos teoremą (žr. F.1 lentelė, 10-oji eilutė), spektrų sandaugos (F.3.3) atvirkštinė Furjė transformacija yra lygi atitinkamų signalų sąsūkai. Vadinasi, (F.3.2) pavidalo lygtimi aprašomos sistemos išėjimo signalas $y(t)$, kai yra bet koks įėjimo signalas $x(t)$, yra lygus impulsinio atsako $h(t)$ ir įėjimo signalo $x(t)$ sąsūkai[1]:

$$y(t) = \int_{-\infty}^{\infty} x(t') h(t - t') \mathrm{d}t' \equiv x(t) * h(t)\,; \qquad \text{(F.3.6)}$$

čia ženklas „*“ yra dviejų funkcijų sąsūkos operacijos žymuo.

F.4. Detektoriaus išėjimo impulso bendroji išraiška

Apskaičiuosime impulsinės veikos detektoriaus išėjimo signalą. 15.2.2 poskyryje buvo minėta, kad impulsinės veikos detektorių kartu su prie jo prijungta matavimo įranga galima pakeisti ekvivalentine grandine, kurią sudaro lygiagrečioji RC grandinė, prie kurios įėjimo prijungtas impulsinis srovės šaltinis. Šios grandinės įėjimo signalas yra detektoriaus momentinė srovė $i(t)$, o išėjimo signalas yra lygiagrečiosios RC grandinės įtampa $U(t)$ (žr. F.1c pav.). Detektoriaus srovė $i(t)$ pasiskirsto į srovę, kuri teka apkrovos rezistoriumi R, ir srovę, kuri teka ekvivalentiniu kondensatoriumi C (žr. F.1c pav.):

$$i(t) = i_R(t) + i_C(t)\,. \qquad \text{(F.4.1)}$$

Kondensatoriaus srovė yra lygi jame sukaupto krūvio Q_C kitimo spartai, t. y. laikinei išvestinei:

$$i_C(t) = \frac{\mathrm{d}Q_C}{\mathrm{d}t} = C\frac{\mathrm{d}U}{\mathrm{d}t} \qquad \text{(F.4.2)}$$

---

[1] Šis išėjimo signalo skaičiavimo būdas nėra vienintelis ir ne visada yra pats paprasčiausias. Optimalusis sistemos išėjimo signalo skaičiavimo būdas priklauso nuo konkrečios sistemos ir konkretaus įėjimo signalo.

(čia pasinaudota tuo, kad $Q_C(t) = C\cdot U(t)$). Rezistoriaus srovė yra lygi

$$i_R(t) = \frac{U(t)}{R} . \tag{F.4.3}$$

Įrašę (F.4.2) ir (F.4.3) į (F.4.1), gauname pirmosios eilės tiesinę diferencialinę lygtį:

$$C\frac{\mathrm{d}U}{\mathrm{d}t} + \frac{U(t)}{R} = i(t) . \tag{F.4.4}$$

Išėjimo signalą $U(t)$ apskaičiuosime kaip aprašyta F.3 skyrelyje. T. y. visų pirma apskaičiuosime sistemos impulsinį atsaką $h(t)$ (t. y. (F.4.4) lygties sprendinį, kai $i(t) = \delta(t)$). Tam rasime sistemos perdavimo funkciją (F.3.4), o paskui apskaičiuosime jos atvirkštinę Furjė transformaciją (F.3.5). Pasinaudosime perdavimo funkcijos bendrąja išraiška (F.3.4). Palyginus (F.4.4) ir (F.3.1) lygtis, akivaizdu, kad aptariamuoju atveju $n = 1$, $a_1 = C$, $a_0 = 1/R$. Įrašę šias koeficientų vertes į (F.3.4), gauname lygiagrečiosios RC grandinės perdavimo funkciją:

$$H(\omega) = \frac{1}{\mathrm{i}\omega\cdot C + (1/R)} = \frac{1}{C}\cdot\frac{RC}{1 + \mathrm{i}\omega\cdot RC} . \tag{F.4.5}$$

Ši dažnio funkcija yra tokio paties pavidalo kaip ir dažnio funkcija, kuri pateikta F.2 lentelės 8-joje eilutėje. Vadinasi, lygiagrečiosios RC grandinės impulsinis atsakas (perdavimo funkcijos $H(\omega)$ atvirkštinė Furjė transformacija) yra vienpusė eksponentinė funkcija:

$$h(t) = \begin{cases} \frac{1}{C}\exp\left(-\frac{t}{RC}\right), & t > 0; \\ 0, & t < 0. \end{cases} \tag{F.4.6}$$

Išėjimo įtampa – tai impulsinio atsako (F.4.6) ir RC grandinės įėjimo signalo $i(t)$ sąsūka (žr. (F.3.6)):

$$U(t) = \int_{-\infty}^{\infty} i(t')h(t-t')\mathrm{d}t' = \frac{1}{C}\int_0^t i(t')\exp\left(\frac{t'-t}{RC}\right)\mathrm{d}t' . \tag{F.4.7}$$

Jeigu įėjimo srovė $i(t)$ yra impulsas, kurio trukmė daug mažesnė už trukmės konstantą RC, tada eksponentinė funkcija pointegraliniame reiškinyje artima vienetui visame laikų intervale, kur $i(t) \neq 0$. Taigi, tokiu atveju tame laikų intervale išėjimo įtampa yra apytiksliai lygi įėjimo srovės integralui nuo 0 iki t, padalytam iš C. Todėl lygiagrečioji RC grandinė, kuri pavaizduota F.1c pav., vadinama ***srovės integratoriumi***.

F.1 lentelė. Kai kurios Furjė transformacijų teoremos

Nr.	Operacija	Laiko funkcija	Furjė transformacija
1.	Tiesinis darinys	$a_1x_1(t) + a_2x_2(t)$	$a_1X_1(\omega) + a_2X_2(\omega)$
2.	Vėlinimas	$x(t-\Delta t)$	$X(\omega)e^{-\mathrm{i}\omega\Delta t}$
3.	Mastelio pakeitimas	$x(at)$	$\frac{1}{\lvert a\rvert}X\left(\frac{\omega}{a}\right)$
4.	Kompleksinis jungimas	$x^*(t)$	$X^*(-\omega)$
5.	Dualumas	$X(t)$	$2\pi\cdot x(-\omega)$
6.	Kompleksinio signalo dažnio keitimas	$x(t)e^{\mathrm{i}\omega_0 t}$	$X(\omega-\omega_0)$
7.	Realiojo signalo dažnio keitimas	$x(t)\cos(\omega_0 t + \theta)$	$\frac{1}{2}[e^{j\theta}X(\omega-\omega_0) + e^{-j\theta}X(\omega+\omega_0)]$
8.	Diferencijavimas	$\frac{\mathrm{d}^n x(t)}{\mathrm{d}t^n}$	$(\mathrm{i}\omega)^n X(\omega)$
9.	Integravimas	$\int_{-\infty}^{t} x(\lambda)d\lambda$	$(\mathrm{i}\omega)^{-1}X(\omega) + \pi X(0)\delta(\omega)$
10.	Signalų sąsūka	$x_1(t) * x_2(t) \equiv \int_{-\infty}^{\infty} x_1(t')x_2(t-t')dt'$	$X_1(\omega)X_2(\omega)$
11.	Signalų daugyba	$x_1(t)x_2(t)$	$\frac{1}{2\pi}X_1(\omega) * X_2(\omega)$
12.	Daugyba iš t^n	$t^n x(t)$	$\mathrm{i}^n\frac{\mathrm{d}^n X(\omega)}{\mathrm{d}\omega^n}$

F.2 lentelė. Kai kurios Furjė poros

Nr.	Laiko funkcijos pavadinimas	Funkcijos išraiška	Furjė transformacija
1.	Stačiakampis impulsas	$\Pi\left(\frac{t}{T}\right)=\begin{cases}1, & \lvert t\rvert\le\frac{T}{2};\\ 0, & \lvert t\rvert>\frac{T}{2}.\end{cases}$	$\frac{\sin(\omega T/2)}{\omega/2}$
2.	Vienetinis šuolis	$u(t)\equiv\begin{cases}+1, & t>0\\ 0, & t<0\end{cases}$	$\pi\delta(\omega)+\frac{1}{\mathrm{i}\omega}$
3.	Konstanta	1	$2\pi\delta(\omega)$
4.	Impulsas laiko momentu $t = t_0$	$\delta(t-t_0)$	$\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t_0}$
5.	Kompleksinė eksponentė	$\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\omega_0 t+\varphi)}$	$2\pi\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi}\delta(\omega-\omega_0)$
6.	Harmoninė funkcija	$\cos(\omega_0 t+\varphi)$	$\pi\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi}\delta(\omega-\omega_0)+\pi e^{-\mathrm{i}\varphi}\delta(\omega+\omega_0)$
7.	Gauso funkcija	$\mathrm{e}^{-\pi(t/t_0)^2}$	$t_0\exp\left(-\frac{(\omega t_0)^2}{4\pi}\right)$
8.	Vienpusė eksponentinė funkcija	$\begin{cases}\mathrm{e}^{-t/T}, & t>0\\ 0, & t<0\end{cases}$	$\frac{T}{1+\mathrm{i}\omega T}$
9.	Dvipusė eksponentinė funkcija	$\mathrm{e}^{-\lvert t\rvert/T}$	$\frac{2T}{1+(\omega T)^2}$
10.	Begalinė impulsų vora	$\sum_{k=-\infty}^{k=\infty}\delta(t-kT)$	$\omega_0\sum_{n=-\infty}^{n=\infty}\delta(\omega-n\omega_0)$

G priedas. Dalelių skaičiavimo statistika

G.1. Matavimų paklaidos

Bet kurį fizikinį dydį (pvz., masę, ilgį, vidutinį įvykių skaičių) galima išmatuoti tik apytiksliai. Matuodami duotąjį fizikinį dydį, po skirtingų matavimų visada gausime šiek tiek skirtingas vertes, net jeigu visų matavimų sąlygos yra vienodos. Todėl matavimų metu galima gauti tik tam tikrą matuojamojo dydžio verčių *intervalą*, kuriam su žinoma tikimybe priklauso tikroji vertė. Kuo kruopščiau matuojama ir kuo tobulesnė matavimų įranga, tuo siauresnis matuojamojo dydžio galimųjų verčių intervalas.

Skirtumas tarp dydžio išmatuotos vertės ir tikrosios vertės vadinamas matavimų ***absoliučiąja paklaida*** arba tiesiog ***paklaida***. Absoliučiosios paklaidos ir tikrosios vertės santykis vadinamas ***santykine paklaida***. Pagal prigimtį paklaidos skirstomos į atsitiktines ir sistemingąsias. Kaip matyti iš pavadinimo, ***atsitiktines paklaidas*** sąlygoja atsitiktiniai veiksniai (pvz., šiluminis krūvininkų judėjimas matavimo įrangos puslaidininkiniuoe elementuose), o ***sistemingąsias paklaidas*** sąlygoja neatsitiktiniai veiksniai (pvz., netiksliai sugraduota liniuotė). Atsitiktinės paklaidos gali būti ir teigiamos, ir neigiamos, ir dažniausiai abiejų ženklų tikimybės yra vienodos. Sistemingosios paklaidos dažniausiai būna vieno ženklo, t. y. jos arba padidina visų matavimų rezultatus, arba sumažina visų matavimų rezultatus. Atsitiktinių paklaidų neįmanoma pašalinti; jas galima tik sumažinti tobulinant matavimų metodiką. Sistemingąsias paklaidas galima pilnai pašalinti, jeigu yra žinoma jų priežastis. Toliau bus aptariamos tik atsitiktinės paklaidos.

Anksčiau pateikta paklaidos apibrėžtis nėra naudinga praktiniu požiūriu, nes ji apibrėžia paklaidą atžvilgiu tikrosios vertės, kurią, kaip ką tik minėta, neįmanoma absoliučiai tiksliai nustatyti. Analizuojant matavimų duomenis, vietoj anksčiau apibrėžtos paklaidos siekiama nustatyti vadinamąją ***standartinę paklaidą***, kuri nusako pusplotį intervalo, kuriam su žinoma tikimybe priklauso tikroji matuojamojo dydžio vertė. Šio intervalo centras atitinka matavimo rezultatą x (arba kelių vienodomis sąlygomis atliktų matavimų rezultatų aritmetinį vidurkį), o visas intervalas nurodomas šitaip: $x \pm \Delta x$. Čia Δx yra dydžio X pavienio matavimo arba kelių matavimų vidurkio absoliučioji standartinė paklaida. (toliau raide „X“ žymėsime tam tikrą dydį, o raide „x“ – jo vertę). Santykinė standartinė paklaida lygi absoliučiosios standartinės paklaidos ir išmatuotosios vertės x modulio santykiui $\Delta x / |x|$.

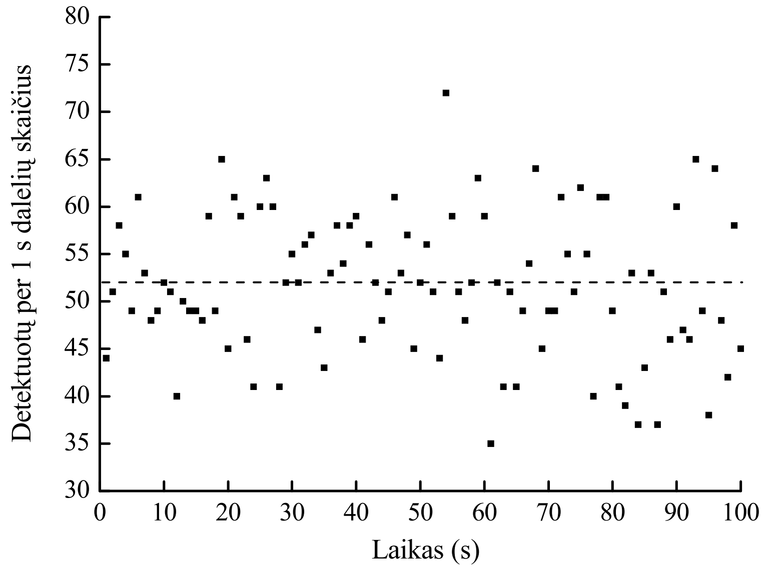
Matavimų rezultatas x yra bevertis, jeigu bent apytiksliai nėra žinoma jo standartinė paklaida. Ši paklaida apskaičiuojama matematinės statistikos metodais. Norint nustatyti matavimų rezultatų standartinę paklaidą, reikia žinoti matuojamojo dydžio skirstinį. Skirstinio sąvoka ir praktiniai taikymai aprašyti kituose šio priedo skyreliuose. Šiame įvadiniame skyrelyje paminėsime tik vieną svarbią išvadą: **jeigu pavienio matavimo standartinė paklaida lygi Δx, tada n vienodų matavimų vidurkio standartinė paklaida artėja prie $\Delta x/\sqrt{n}$, kai n artėja į begalybę.** Statistikoje standartinė paklaida vadinama „standartiniu nuokrypiu“. Standartinio nuokrypio tikslioji apibrėžtis bus pateikta G.3 skyrelyje. Jeigu matavimo rezultatai pasiskirstę pagal Gauso skirstinį, tada standartinis nuokrypis nusako pusplotį intervalo, kuriam su 68,3 % tikimybe priklauso tikroji matuojamojo dydžio vertė (žr. G.4.3 skyrelį).

G.2. Branduolių spinduliuotė ir statistika

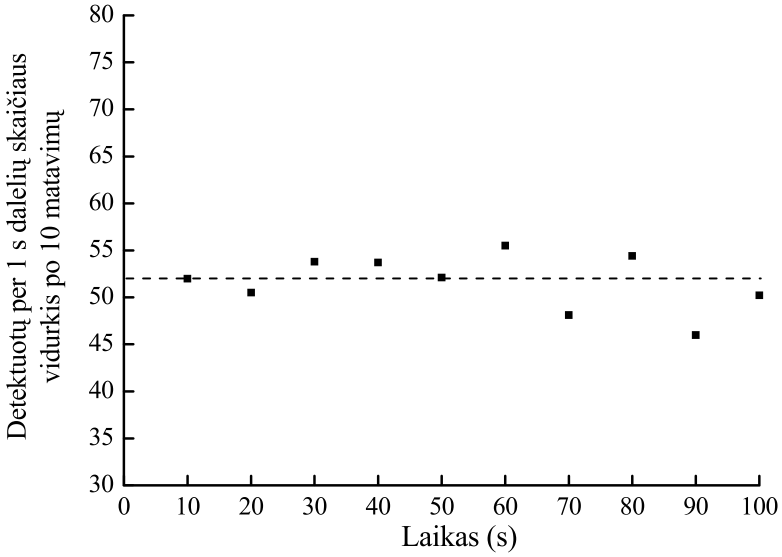
Branduolio fizikoje ir elementariųjų dalelių fizikoje statistiniai metodai turi ypatingą reikšmę, nes mikropasaulio reiškiniai yra statistinės prigimties (žr. 1.13 ir 1.15 poskyrius). Galima teigti, kad mikroskopinių ir makroskopinių dydžių matavimų paklaidos yra iš esmės skirtingos kilmės.

Makroskopinių dydžių, kurie apibūdina plika akimi regimus objektus, paklaidas galima laikyti tik matavimo metodikos netobulumo pasekme. T. y. galima laikyti, kad pats matuojamasis makroskopinis dydis objektyviai turi absoliučiai tiksliai apibrėžtą vertę, kurią būtų įmanoma nustatyti, jeigu matavimo įranga būtų tobula. Matuojant ***mikroskopinius dydžius***, kurie apibūdina mikropasaulio procesus (pvz., elektrono judėjimą atome arba atomo branduolio virsmus), matavimo rezultatų išsibarstymą sukelia ne tik netobula matavimų įranga, bet ir paties matuojamojo dydžio objektyvus neapibrėžtumas (žr. 1.13 poskyrį). Taigi, net jeigu matavimams būtų naudojama tobula įranga ir visi matavimai būtų atliekami visiškai vienodomis sąlygomis, skirtingų matavimų rezultatai vis tiek būtų išsibarstę tam tikrame intervale.

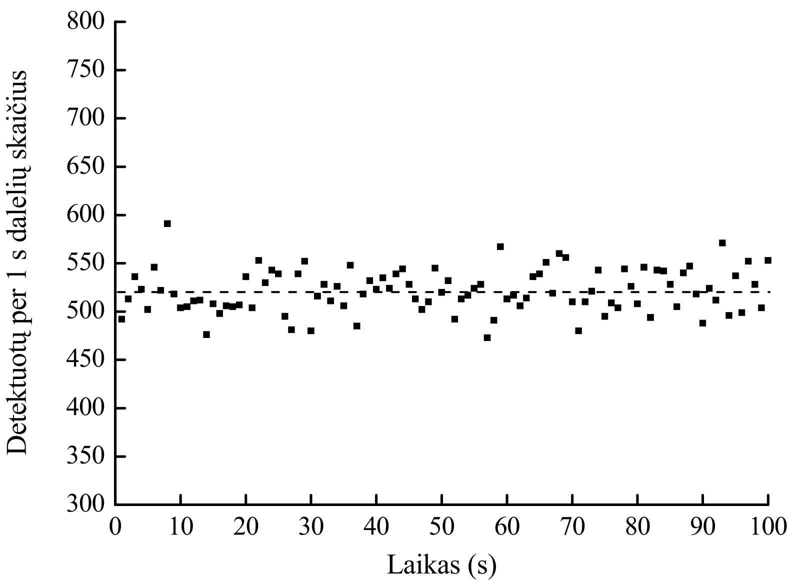
Mikroskopinis dydis, kurio statistinės savybės bus aprašytos šiame priede – tai radioaktyviosios spinduliuotės dalelių (α dalelių, β dalelių arba γ kvantų) skaičius, kurį užregistruoja dalelių detektorius per apibrėžtą laiko tarpą. Šis dydis yra proporcingas tiriamojo radioaktyviojo bandinio aktyvumui, t. y.



G.1 pav. Radioaktyviojo šaltinio spinduliuojamų dalelių skaičiavimo rezultatų pavyzdys. Vidurkis lygus 52 s^{-1}



G.2 pav. 10 matavimų po 1 s vidurkiai (panaudoti G.1 pav. duomenys)



G.3 pav. Radioaktyviojo šaltinio spinduliuojamų dalelių skaičiavimo rezultatų pavyzdys. Vidurkis lygus 520 s^{-1}

branduolių skilimų skaičiui per laiko vienetą. Taip yra todėl, kad skaičiuojamosios dalelės atsiranda, skylant branduoliams. T. y. viena detektuota dalelė – tai vienas užregistruotas branduolio skilimas. Vidutinis detektuotų per 1 s dalelių skaičius $\overline{x}$ nėra lygus bandinio aktyvumui Φ (t. y. vidutiniam per 1 s skilusių branduolių skaičiui). Šių dviejų vidurkių santykį $\overline{x} / \Phi$ žymėsime K. Jeigu kiekvieno skilimo metu išspinduliuojama viena dalelė, tada $K < 1$, nes detektorius detektuoja tik dalį išspinduliuotų dalelių. Taip yra dėl trijų priežasčių:

1) skilimo metu išspinduliuotoji dalelė gali išlėkti bet kuria kryptimi ir nebūtinai pataikyti į detektorių;
2) dalelė gali būti sugerta radioaktyviosios medžiagos tūryje arba detektoriaus apvalkale;
3) dalelė gali pralėkti pro detektoriaus tūrį, nesąveikaudama nė su vienu detektoriaus darbinės medžiagos atomu.

Taigi, jeigu $\overline{x}$ yra per 1 s detektuotų dalelių skaičius, o σ yra jo standartinis nuokrypis, tada tiriamojo bandinio aktyvumas lygus $\overline{x}/K$ (čia $0 < K < 1$), aktyvumo matavimo absoliučioji paklaida lygi σ/K, o santykinė paklaida lygi $\sigma/\overline{x}$. Koeficientas K yra pastovus (nors dažnai praktikoje jo tiksli vertė būna nežinoma). Vadinasi, branduolių skilimų skaičiaus ir detektuotų dalelių skaičiaus statistinės savybės yra vienodos.

Jeigu šaltinio aktyvumas ir jo padėtis detektoriaus atžvilgiu nekinta, tada vidutinis skaičius dalelių, kurias detektorius detektuoja per 1 s, taip pat yra pastovus ir turi tiksliai apibrėžtą vertę. Tačiau skirtingų matavimų rezultatai yra skirtingi. Pvz., G.1 pav. pavaizduoti 100 matavimų rezultatai. Šiame pavyzdyje vieno matavimo trukmė lygi 1 s, o šaltinio padėtis detektoriaus atžvilgiu parinkta taip, kad detektorius per 1 s detektuotų vidutiniškai 52 daleles (šį vidurkį vaizduoja brūkšninė linija). Tačiau, kaip matome, matavimų rezultatai „išsibarstę“ gana plačiose ribose: nuo 35 iki 72. Šio intervalo plotis lygus 72 – 35 = 37. Tai sudaro 37 / 52 = 71 % vidurkio vertės.

Šio detektuotų dalelių skaičiaus išsibarstymo priežastis yra ta, kad radioaktyvusis skilimas, kurio metu atsiranda minėtos dalelės, yra atsitiktinis vyksmas. Tai reiškia, kad neįmanoma iš anksto numatyti, kada skils duotas radioaktyvus branduolys. Kitaip sakant, radioaktyviajame šaltinyje per laiko vienetą skylančių branduolių skaičius (taigi, ir detektuotų dalelių skaičius) yra atsitiktinis dydis. ***Atsitiktinis dydis*** – tai dydis, kurio vertė, kai yra pastovios stebėjimo sąlygos, nėra tiksliai apibrėžta, t. y. gali įgyti vertę iš tam tikro verčių intervalo.

G.2 pav. gautas sugrupavus G.1 pav. taškus po 10 ir kiekvienoje grupėje apskaičiavus aritmetinį vidurkį. Akivaizdu, kad išsibarstymas yra mažesnis negu G.1 pav. atveju: vertės kinta nuo 46 iki 55,5. Šio intervalo plotis lygus 9,5, t. y. 9,5 / 52 = 18 % vidurkio vertės.

G.3 pav. skiriasi nuo G.1 pav. tik tuo, kad čia panaudotas 10 kartų aktyvesnis šaltinis: per 1 s detektuotų dalelių skaičiaus vidurkis lygus jau ne 52, o 520. Šiuo atveju matavimų rezultatai svyruoja nuo 473 iki 591. T. y. kitimo intervalo plotis lygus 591 – 473 = 118, o santykinio kitimo intervalo plotis lygus 118 / 520 = 23 %. Taigi, nors absoliutusis išsibarstymas daugiau kaip tris kartus viršija G.1 pav. atvejį (118 / 37 = 3,1), tačiau santykinis išsibarstymas yra maždaug tiek pat kartų mažesnis (71 % / 23 % = 3,1) ir yra artimas tam, kuris gautas G.2 pav. atveju.

Šie pavyzdžiai iliustruoja vieną iš svarbiausių radioaktyviosios spinduliuotės matavimo dėsningumų: **išmatuoto dalelių skaičiaus santykinis išsibarstymas aplink vidurkį mažėja didėjant matavimo metu detektuotų dalelių skaičiui**.

G.3. Matavimų duomenų statistinis aprašymas. Histograma, vidurkis, dispersija

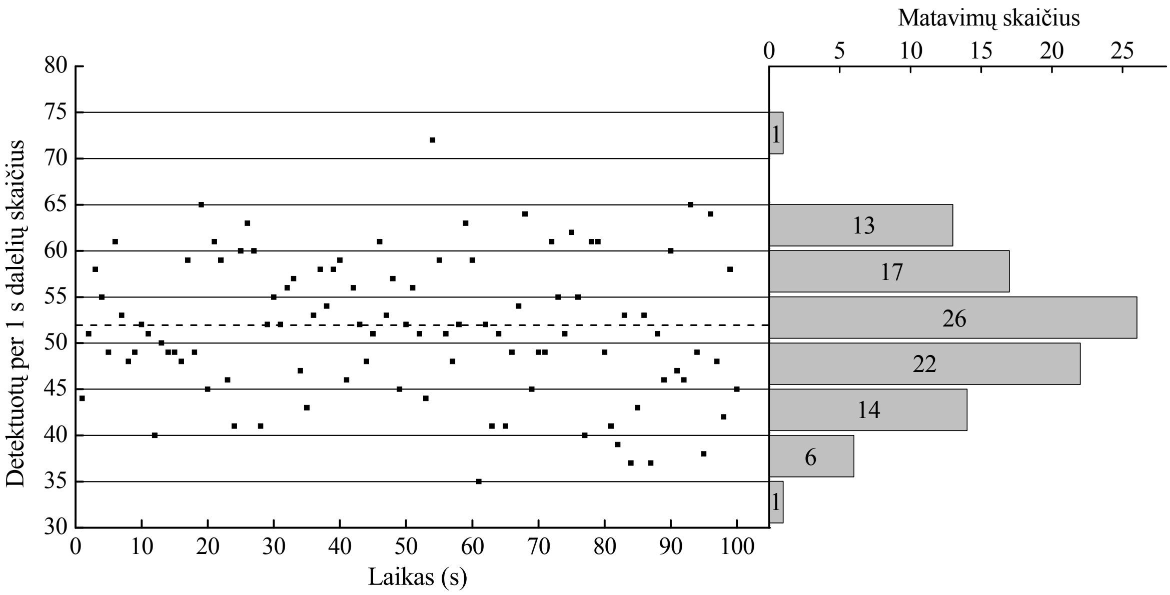
Atsitiktinių dydžių matavimo rezultatai dažniausiai vaizduojami histogramomis. ***Histograma*** – tai stulpelių diagrama, kurioje kiekvieno stulpelio kraštai nusako tam tikrą atsitiktinio dydžio verčių intervalą, o stulpelio aukštis lygus matavimų skaičiui, kurių metu išmatuotoji atsitiktinio dydžio vertė pakliuvo į tą intervalą. G.4 pav. iliustruoja histogramos sudarymą duomenų rinkiniui, kuris pavaizduotas G.1 pav. Dėl vaizdumo histogramos x ašis yra vertikali (teigiamoji kryptis – į viršų), o y ašis yra horizontali. Šiuo atveju histogramos stulpelių plotis lygus 5, o stulpelio aukštis nusako skaičių taškų, kurie yra tarp gretimų horizontalių linijų kairiajame grafike. Gautoji histograma pavaizduota G.5 pav. Pirmojo stulpelio aukštis lygus skaičiui matavimų, kurių rezultatas buvo nuo 31 iki 35 (tokių matavimų buvo 1), antrojo stulpelio aukštis lygus skaičiui matavimų, kurių rezultatas buvo nuo 36 iki 40 (tokių matavimų buvo 6), ir t. t. Nors G.4 pav. iliustruoja histogramos sudarymą tam atvejui, kai matuojamasis dydis yra dalelių skaičius, tačiau histogramos sudarymo metodika lieka tokia pati ir tuo atveju, kai matavimo rezultatas turi bet kurią kitą prasmę. Pvz., 21.5 poskyrio 21.9 pav. pavaizduotieji impulsų amplitudžių spektrai pagal savo prasmę taip pat yra histogramos (šiuo atveju matuojamasis dydis yra impulso amplitudė), nors jos yra nubraižytos ne stulpelių pavidalu, o kreivių pavidalu.

Histograma pilnai nusako matavimų rezultatų rinkinio statistines savybes. Tačiau dažniausiai toks išsamus aprašymas yra nereikalingas, o pakanka žinoti tik dvi svarbiausias atsitiktinio dydžio charakteristikas: jo tikimiausiąją vertę ir „išsibarstymo“ aplink ją laipsnį. Šias charakteristikas galima apytiksliai nustatyti pažiūrėjus į histogramą. Pvz., G.5 pav. akivaizdu, kad tikimiausias per 1 s detektuotų dalelių skaičius yra maždaug 50, o daugumos matavimų rezultatai yra tarp 40 ir 65, t. y. dažniausiai gaunami skaičiai, kurių nuokrypis nuo vidurkio neviršija 15. Tačiau tas pačias charakteristikas galima apibrėžti ir tiksliau. Jeigu tikimiausias detektuotų dalelių skaičius yra pakankamai didelis (dešimčių eilės arba didesnis), tada jis lygus dalelių skaičiaus aritmetiniam vidurkiui:

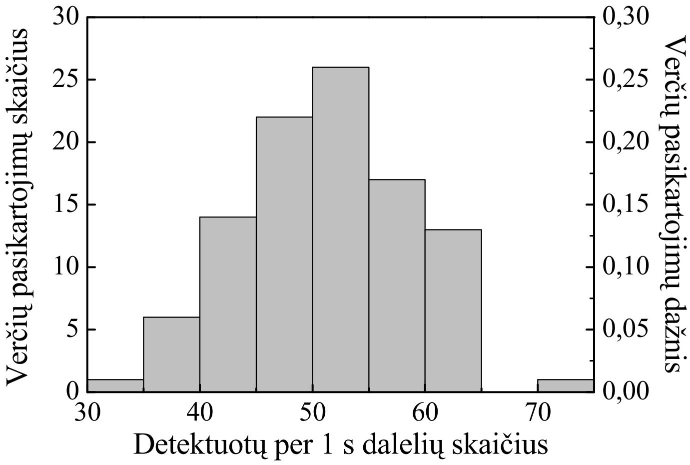
$$\overline{x}_{\mathrm{e}} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} x_i \; ; \tag{G.3.1}$$

čia x_i ($i = 1, 2, \ldots, n$) yra atskirų matavimų rezultatai (visus vidurkius žymėsime brūkšniu virš reiškinio, kurio vidurkis skaičiuojamas). Apatinis indeksas „e“ nurodo, kad turimas omenyje *empirinis* vidurkis, kuris gali skirtis nuo tikrojo vidurkio $\overline{x}$ (empirinis vidurkis artėja prie tikrojo, kai matavimų skaičius n artėja į begalybę). Atsitiktinio dydžio „išsibarstymo“ apie vidurkį laipsnį nusako to dydžio ***standartinis nuokrypis***. Standartinis nuokrypis žymimas graikiška raide σ („sigma“) ir apibrėžiamas šitaip:

$$\sigma_{\mathrm{e}} = \sqrt{\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(x_i - \overline{x})^2} \; ; \tag{G.3.2}$$



G.4 pav. Histogramos sudarymas atlikus 100 matavimų, kurių kiekvieno trukmė 1 s. Čia vieno stulpelio plotis pasirinktas lygus 5, tačiau jis gali būti ir kitoks (pvz., 1, 2, ...)



G.5 pav. Histograma, kuri atitinka G.4 pav. duomenis

čia apatinis indeksas „e" nurodo, kad turimas omenyje *empirinis* standartinis nuokrypis. Reiškinys, kuris yra po šaknies ženklu, vadinamas (empirine) ***dispersija***:

$$D_\mathrm{e} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(x_i - \overline{x})^2 \,. \tag{G.3.3}$$

Taigi, dispersija yra lygi matavimų rezultatų nuokrypių nuo vidurkio kvadratų vidurkiui, o standartinis nuokrypis yra lygus kvadratinei šakniai iš dispersijos:

$$\sigma = \sqrt{D} \,. \tag{G.3.4}$$

(G.3.2) ir (G.3.3) formulės netinka praktiškai taikyti, nes į jas įeina tikrasis vidurkis $\overline{x}$, kuris yra nežinomas. Praktikoje tikrąjį vidurkį $\overline{x}$ reikia pakeisti empiriniu vidurkiu $\overline{x}_\mathrm{e}$. Galima įrodyti [16], kad, norint minimizuoti paklaidą, kuri atsiranda dėl tokio pakeitimo, (G.3.3) reiškinio vardiklyje matavimų skaičių n reikia pakeisti skaičiumi $n - 1$:

$$D_\mathrm{e} = \frac{1}{n-1}\sum_{i=1}^{n}(x_i - \overline{x}_\mathrm{e})^2 \,. \tag{G.3.5}$$

Jeigu n yra didelis, tada $1/(n - 1) \approx 1/n$, todėl vietoj (G.3.5) galima taikyti ir (G.3.3) formulę, kurioje tikrasis vidurkis $\overline{x}$ pakeistas empiriniu vidurkiu $\overline{x}_\mathrm{e}$.

Nesunku įsitikinti, kad

$$\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(x_i - \overline{x}_\mathrm{e})^2 = \left(\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}x_i^2\right) - \overline{x}_\mathrm{e}^2 \equiv \overline{x_\mathrm{e}^2} - \overline{x}_\mathrm{e}^2 \,;$$

čia $\overline{x_{\mathrm{e}}^2}$ yra atsitiktinio dydžio kvadrato vidurkis. Todėl

$$D_{\mathrm{e}} = \frac{1}{n-1}\left(\sum_{i=1}^{n} x_i^2 - n\overline{x}_{\mathrm{e}}^2\right) \equiv \frac{n}{n-1}\left(\overline{x_{\mathrm{e}}^2} - \overline{x}_{\mathrm{e}}^2\right). \tag{G.3.6}$$

T. y. dispersija yra apytiksliai lygi kvadrato vidurkio ir vidurkio kvadrato skirtumui.

Kartais histogramose vietoj skirtingų rezultatų pasikartojimo skaičių pateikiami skirtingų rezultatų ***dažniai***, t. y. kiekvieno rezultato pasikartojimo skaičiaus ir pilnutinio matavimų skaičiaus santykis. Pvz., jeigu 40 iš 200 matavimų rezultatas lygus 1, tada tokio rezultato dažnis lygus 40/200 = 0,2. Vertės x pasikartojimo dažnį žymėsime $F(x)$. Ši funkcija vadinama ***dažnio pasiskirstymo funkcija***. Bet kokios dydžio x funkcijos $g(x)$ empirinis vidurkis yra lygus

$$\overline{g}_{\mathrm{e}} = \sum_{x=0}^{\infty} g(x)F(x). \tag{G.3.7}$$

Šio sąryšio atskirieji atvejai – tai atsitiktinio dydžio X empirinių vidurkio ir dispersijos išraiškos:

$$\overline{x}_{\mathrm{e}} = \sum_{x=0}^{\infty} xF(x); \tag{G.3.8}$$

$$D_{\mathrm{e}} = \frac{n}{n-1}\sum_{x=0}^{\infty}(x-\overline{x}_{\mathrm{e}})^2 F(x) = \frac{n}{n-1}\left(\sum_{x=0}^{\infty} x^2 F(x) - \overline{x}_{\mathrm{e}}^2\right) \equiv \frac{n}{n-1}\left(\overline{x_{\mathrm{e}}^2} - \overline{x}_{\mathrm{e}}^2\right). \tag{G.3.9}$$

G.4. Statistiniai modeliai

Tam tikromis sąlygomis yra įmanoma iš anksto apytiksliai numatyti įvairių rezultatų pasikartojimo dažnius. Toks numatymas tampa įmanomas tik padarius tam tikras išankstines prielaidas apie tiriamąjį atsitiktinį dydį. Šios prielaidos kartu su iš jų išplaukiančiais dažnių skaičiavimo metodais yra apibendrintai vadinamos ***statistiniu modeliu***. Statistiniai modeliai leidžia numatyti įvairių verčių ***tikimybes***. Jeigu statistinis modelis yra teisingas, tada, neribotai didėjant matavimų skaičiui n, kiekvienos vertės (x) dažnis $F(x)$ artėja prie tos vertės tikimybės $P(x)$, kurią numato statistinis modelis. Taigi, duotos vertės tikimybę galima apibrėžti kaip tos vertės „teorinį dažnį“. Jeigu visų galimų verčių tikimybės yra žinomos, tada galima apskaičiuoti ir teorinius vidurkį bei dispersiją. Tam pakanka (G.3.7)–(G.3.9) formulėse vietoj dažnių $F(x)$ naudoti tikimybes $P(x)$:

$$\overline{g} = \sum_{x=0}^{\infty} g(x)P(x); \tag{G.4.1}$$

$$\overline{x} = \sum_{x=0}^{\infty} xP(x); \tag{G.4.2}$$

$$D = \sum_{x=0}^{\infty}(x-\overline{x})^2 P(x) = \sum_{x=0}^{\infty} x^2 P(x) - \overline{x}^2 \equiv \overline{x^2} - \overline{x}^2. \tag{G.4.3}$$

Tikimybė, kad dydžio X vertė paklius į duotąjį intervalą $x_1 \le x \le x_2$, yra lygi

$$P\{x_1 \le x \le x_2\} = \sum_{x=x_1}^{x_2} P(x). \tag{G.4.4}$$

Visų tikimybių suma yra lygi vienetui:

$$\sum_{x=0}^{\infty} P(x) = 1. \tag{G.4.5}$$

Statistinio modelio matematinė išraiška yra ***skirstinys*** – taisyklė (lentelė arba funkcija), kuri numato visų galimų atsitiktinio dydžio verčių x tikimybes $P(x)$.

Prieš aptariant konkrečius skirstinius, reikia tiksliau apibrėžti tiriamąjį atsitiktinį dydį. Aptariamuoju atveju atsitiktinis dydis – tai branduolių skilimų skaičius per duotą laiką t. Bendriau formuluojant, tai yra ***palankiųjų įvykių*** skaičius atlikus duotąjį skaičių nepriklausomų ***bandymų***. Vienas bandymas – tai duoto branduolio stebėjimas duotą laiką t. Jeigu bandinyje yra N branduolių, tai reiškia, kad per vieną t trukmės matavimą atliekama N bandymų. Šie bandymai yra nepriklausomi, nes duoto branduolio skilimas neturi įtakos kitų branduolių skilimui. Jeigu stebėjimo metu branduolys skilo, tai bandymo rezultatas yra palankusis įvykis, o jeigu neskilo – nepalankusis. Taigi, yra galimos tik dvi bandymo baigtys. Tokie atsitiktiniai vyksmai vadinami ***binariaisiais vyksmais***. Palankiojo įvykio tikimybę atlikus vieną bandymą žymėsime p. G.9 skyrelyje bus įrodyta, kad radioaktyviojo skilimo atveju $p = 1 - e^{-\lambda t}$; čia λ yra skilimo konstanta. G.1 lentelėje pateikti trijų binariųjų vyksmų pavyzdžiai kartu su atitinkamomis p vertėmis.

G.1 lentelė. Binariųjų vyksmų pavyzdžiai

Bandymas	Palankiojo įvykio apibrėžtis	Palankiojo įvykio tikimybė p
Monetos metimas	„Erelis“	1/2
Kauliuko ridenimas	„Šešetukas“	1/6
Radioaktyviojo branduolio stebėjimas laiką t	Branduolio skilimas per stebėjimo laiką	$1 - e^{-\lambda t}$

Toliau bus aprašyti trys skirstiniai:

1. Binominis skirstinys. Tai yra pats bendriausias skirstinys, kuris tinka visiems binariesiems vyksmams, kai tikimybė p yra pastovi. Tačiau, kai bandymų (pvz., branduolių) skaičius N yra labai didelis, tada taikant šį skirstinį reikia sudėtingų skaičiavimų.
2. Puasono skirstinys. Šis skirstinys yra binominio skirstinio ribinis atvejis, kai palankiojo įvykio tikimybė p yra maža. Praktiniu požiūriu tai reiškia, kad stebėjimo trukmė t yra daug mažesnė už radioaktyviosios medžiagos pusamžį. Tada radioaktyviųjų branduolių skaičius praktiškai nesumažėja per matavimų trukmę (t. y. skilusių branduolių skaičius yra daug mažesnis už pilnutinį radioaktyviųjų branduolių skaičių), todėl duotojo konkretaus branduolio skilimo užregistravimo tikimybė p yra maža.
3. Gauso skirstinys. Šis skirstinys yra Puasono skirstinio ribinis atvejis, kai vidutinis palankiųjų įvykių skaičius per vieną matavimą yra palyginti didelis (pvz., didesnis už 20).

Jeigu vieno bandymo palankiosios baigties tikimybė p yra maža, tačiau bandymų skaičius yra pakankamai didelis, kad vidutinis palankiųjų įvykių skaičius per vieną matavimą būtų didelis (pvz., didesnis už 20), tada visi trys anksčiau minėti skirstiniai duoda vienodus rezultatus. Todėl tokiu atveju racionaliausia naudoti Gauso skirstinį, kurio matematinė išraiška yra paprasčiausia.

G.4.1. *Binominis skirstinys*

Tarkime, kad turime N nestabiliųjų branduolių, kurių pusamžis yra žinomas. Be to, yra žinoma kiekvieno branduolio skilimo per stebėjimo laiką tikimybė p. Tada tikimybė, kad branduolys per duotą laiką neskils, yra lygi $1 - p$. Kiekvienam branduoliui skirkime eilės numerį. Pagal nepriklausomųjų įvykių tikimybių sandaugos taisyklę, tikimybė, kad per tą laiką skils branduoliai, kurių numeriai yra nuo 1 iki x, o branduoliai, kurių numeriai yra nuo $x + 1$ iki N, neskils, yra lygi $p^x(1 - p)^{N-x}$. Norint apskaičiuoti tikimybę, kad skils *bet kurie* x branduolių, reikia sudėti tikimybes, atitinkančias visas galimas x branduolių imtis iš N branduolių (tokios imtys kartais vadinamos kėliniais iš N po x elementų). Kėlinių iš N po x elementų skaičių nusako binominis koeficientas

$$C_N^x = \frac{N!}{x!(N-x)!}; \tag{G.4.6}$$

čia $x!$ yra skaičiaus x faktorialas: $x! = 1 \cdot 2 \cdot 3 \cdot \ldots \cdot (x-2) \cdot (x-1) \cdot x$; skaičiaus 0 faktorialas lygus 1. Kadangi visi branduoliai vienodi, tai kiekvieną kėlinį iš N po x branduolių atitinka ta pati tikimybė $p^x(1-p)^{N-x}$. Todėl pagal nesutaikomųjų įvykių tikimybių sumos taisyklę tikimybė $P(x)$ yra lygi

$$P(x) = C_N^x p^x (1-p)^{N-x} = \frac{N!}{x!(N-x)!} p^x (1-p)^{N-x}. \tag{G.4.7}$$

Ši formulė nusako ***binominį skirstinį***. Apskaičiuosime teorinį vidurkį $\bar{x}$. Pagal (G.4.2) formulę kiekvieno branduolio indėlis į $\bar{x}$ yra lygus $p\cdot 1 + (1-p)\cdot 0 = p$. Kadangi visi branduoliai yra vienodi, tai

$$\bar{x} = pN. \tag{G.4.8}$$

Analogiškai samprotaudami, iš (G.4.3) išvedame dispersijos išraišką:

$$D = Np(1-p). \tag{G.4.9}$$

Iš (G.4.8) išplaukia, kad

$$p = \bar{x}/N. \tag{G.4.10}$$

Įrašę šią p išraišką į (G.4.7) formulę, išvedame:

$$P(x) = \frac{N!}{x!(N-x)!} \cdot \frac{\bar{x}^x}{N^x} \left(1 - \frac{\bar{x}}{N}\right)^{N-x}. \tag{G.4.11}$$

G.4.2. *Puasono skirstinys. Puasono vyksmų pavyzdžiai*

Jeigu matavimo trukmė t yra daug mažesnė už skilimo pusamžį $T_{1/2}$, tada duoto branduolio skilimo tikimybė per laiką t yra daug mažesnė už vienetą, o N yra praktiškai pastovus viso matavimo metu. Tokiu atveju binominio skirstinio išraiškoje (G.4.7) galima pereiti prie ribos $p \to 0$. Turint omenyje p išraišką (G.4.10), ši riba yra tapati ribai $N \to \infty$. Tada (G.4.11) reiškinyje galima pakeisti

$$N!/(N-x)! \to N^x ,$$

o laipsnio rodiklį $N - x$ galima pakeisti skaičiumi N, todėl

$$P(x) = \frac{(\bar{x})^x}{x!} \lim_{N\to\infty}\left(1-\frac{\bar{x}}{N}\right)^N = \frac{(\bar{x})^x}{x!} \lim_{N\to\infty}\left(1-\frac{\bar{x}}{N}\right)^{\frac{N}{\bar{x}}\bar{x}} = \frac{(\bar{x})^x}{x!}\left[\lim_{N\to\infty}\left(1-\frac{\bar{x}}{N}\right)^{\frac{N}{\bar{x}}}\right]^{\bar{x}} .$$

Matematinė analizė įrodo, kad laužtiniuose skliaustuose esantis reiškinys yra lygus 1 / e; čia e yra Eulerio konstanta (e ≈ 2,71828). Vadinasi,

$$P(x) = \frac{(\bar{x})^x}{x!} e^{-\bar{x}} \qquad (x = 0, 1, 2, \ldots). \tag{G.4.12}$$

Ši formulė nusako ***Puasono skirstinį*** (angl. *Poisson distribution*). Jeigu $x > 10$, tada faktorialą $x!$, kuris įeina į (G.4.12) išraišką, paprasčiau skaičiuoti pagal apytikslę Stirlingo formulę: $x! \approx x^x e^{-x}\sqrt{2\pi x}$.

Taigi, Puasono skirstinys yra binominio skirstinio atskiras atvejis, kai palankiojo įvykio tikimybė yra labai maža (šią sąlygą atspindi anksčiau minėta prielaida, kad $p \to 0$). Praktikoje binominį skirstinį galima pakeisti Puasono skirstiniu, kai tikimybė p yra 10^{-2} eilės arba mažesnė.

Puasono skirstiniu aprašomo atsitiktinio dydžio dispersija sutampa su vidurkiu:

$$D = \bar{x} \tag{G.4.13}$$

(šį sąryšį galima gauti iš binominio skirstinio vidurkio ir dispersijos išraiškų (G.4.8) ir (G.4.9) perėjus prie ribos $p \to 0$). Taigi, standartinis nuokrypis yra lygus kvadratinei šakniai iš vidurkio:

$$\sigma = \sqrt{\bar{x}} . \tag{G.4.14}$$

Be to, iš (G.4.12) išplaukia

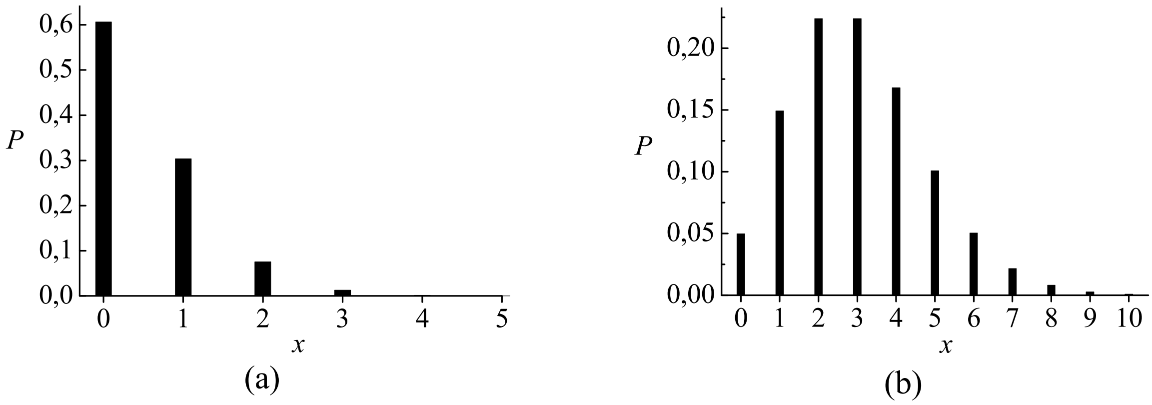
$$\frac{P(x+1)}{P(x)} = \frac{\bar{x}}{x+1} . \tag{G.4.15}$$

Todėl, kai $\bar{x} < 1$, $P(x)$ monotoniškai mažėja didėjant x. Šiuo atveju didžiausioji tikimybė $P(x)$ atitinka $x = 0$ (žr. G.6a pav.). Kai $\bar{x} > 1$, tikimybės $P(x)$ priklausomybėje nuo x atsiranda maksimumas, kurio padėtis apytiksliai sutampa su $\bar{x}$ (žr. G.6b pav.). Didėjant $\bar{x}$, ši priklausomybė tampa vis simetriškesnė (žr. G.7 pav.).

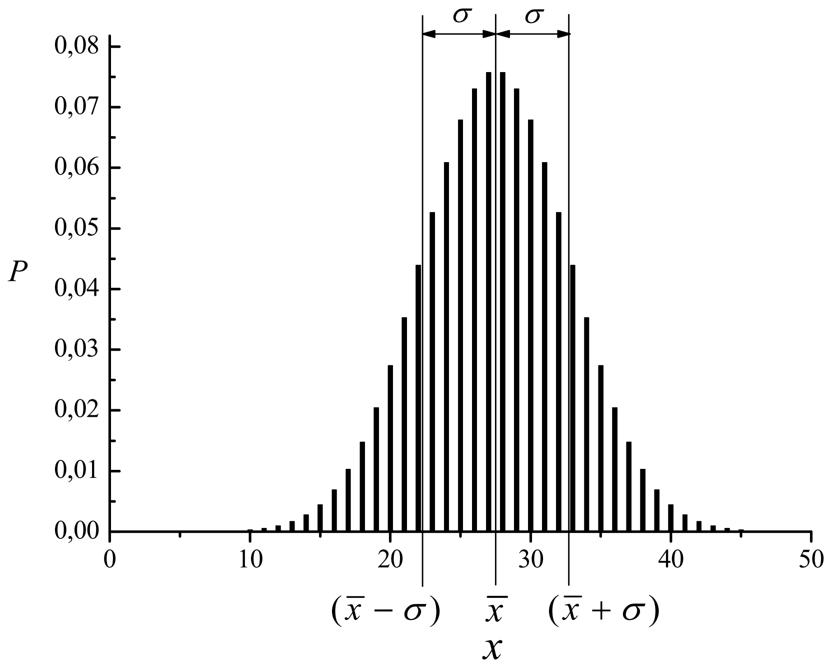
Pagrindinės Puasono skirstinio sąlygos (maža ir pastovi duoto branduolio skilimo tikimybė per duotą laiką) dažnai galioja praktikoje. Todėl per duotą laiką skilusių branduolių skaičius yra pasiskirstęs pagal Puasono skirstinį. Apskritai nepriklausomų įvykių seka, kurioje įvykių skaičius per duotą laiką yra pasiskirstęs pagal Puasono skirstinį, yra vadinama ***Puasono vyksmu***. Taigi, radioaktyvusis skilimas yra Puasono vyksmas.

Bendruoju atveju Puasono vyksmo parametro vaidmenį gali atlikti ne laikas, o koks nors kitas tolydusis dydis. Pvz., tarkime, kad yra skaičiuojami dalelės susidūrimai su medžiagos atomais (pvz., laisvojo elektrono susidūrimai su dujų molekulėmis dujiniame detektoriuje), kai dalelė medžiagoje nueina kelią d. Padalykime tą kelią į intervalus, kurių kiekvieno plotis Δd yra daug mažesnis už dalelės vidutinį laisvąjį kelią l. „Palankusis įvykis" šiuo atveju – tai susidūrimas su atomu, kai dalelė nueina kelią Δd. Kadangi $\Delta d << l$, tai susidūrimas su atomu kelyje Δd yra labai mažai tikėtinas įvykis. Taigi, tai atitinka vieną iš Puasono skirstinio sąlygų (maža palankiojo įvykio tikimybė). Jeigu, be to, susidūrimo tikimybė (skerspjūvis), nuėjus dalelei duotąjį kelią Δd, nepriklauso nuo dalelės judėjimo istorijos, tada galioja ir antroji sąlyga (palankiojo įvykio tikimybės pastovumas). Tokiu atveju dalelės susidūrimai su medžiagos atomais yra Puasono vyksmas, kurio parametras yra dalelės kelias. Palankiųjų įvykių skaičius šiuo atveju – tai susidūrimų su atomais skaičius, kai dalelė nueina duotą atstumą d (pastarasis dydis atlieka tą patį vaidmenį, kaip anksčiau minėto Puasono vyksmo matavimo trukmė). Vadinasi, tikimybė, kad dalelės trajektorijos atkarpoje, kurios ilgis d, bus x susidūrimų su atomais, yra nusakoma (G.4.12) reiškiniu, kuriame $\bar{x}$ reiškia vidutinį susidūrimų skaičių kelyje d.

Kitas pavyzdys – medžiagos atomų jonizavimas, kai medžiagoje visiškai sustabdoma elektringoji dalelė, kurios energija E yra daug didesnė už atomo jonizacijos energiją. Padalykime tą energiją į didelį



G.6 pav. Puasono skirstinio pavidalas esant mažoms vidurkio $\overline{x}$ vertėms. (a) $\overline{x}$ = 0,5; (b) $\overline{x}$ = 3



G.7 pav. Puasono skirstinio pavidalas, kai vidurkis $\overline{x}$ yra didelis ($\overline{x}$ = 27,5). σ yra standartinis nuokrypis

skaičių intervalų, kurių kiekvieno plotis ΔE yra tik nedaug didesnis už atomo jonizacijos energiją. „Palankusis įvykis“ šiuo atveju – tai atomo jonizavimas, kai dalelės energija sumažėja dydžiu ΔE. Tarkime, kad tik labai maža dalelės energijos nuostolių dalis eikvojama atomų jonizavimui (likusioji dalis prarandama kitais būdais, pvz., išeikvojama atomų sužadinimui arba virsta atomų šiluminio judėjimo energija). Tada atomo jonizavimas, kai dalelės energija sumažėja dydžiu ΔE, yra labai mažai tikėtinas įvykis. Taigi, tai atitinka vieną iš Puasono skirstinio sąlygų (maža palankiojo įvykio tikimybė). Jeigu, be to, jonizacijos tikimybė, sumažėjus dalelės energijai duotuoju dydžiu ΔE, nepriklauso nuo dalelės pradinės energijos, tada galioja ir antroji sąlyga (palankiojo įvykio tikimybės pastovumas). Tokiu atveju atomų jonizavimas yra Puasono vyksmas, kurio parametras yra krintančiosios dalelės energijos sumažėjimas. Palankiųjų įvykių skaičius šiuo atveju – tai jonizuotų atomų skaičius sumažėjus dalelės energijai duotuoju dydžiu E (pastarasis dydis atlieka tą patį vaidmenį, kaip anksčiau minėto Puasono vyksmo matavimo trukmė). Vadinasi, tikimybė, kad dalelės trajektorijos atkarpoje, kurioje dalelės energija sumažėja dydžiu E, bus jonizuota x atomų, yra nusakoma (G.4.12) reiškiniu, kuriame $\overline{x}$ reiškia vidutinį jonizuotų atomų skaičių, kai dalelės energija sumažėja dydžiu E.

G.4.3. *Gauso skirstinys*

Jau žinome, kad Puasono skirstinys – tai binominio skirstinio ribinis atvejis, kai $p << 1$. Jeigu, be to, skirstinio vidurkis $\overline{x}$ yra didelis (pvz., didesnis už 20), tada galima dar labiau supaprastinti skirstinio išraišką:

$$P(x)=\frac{1}{\sqrt{2\pi\overline{x}}}\exp\left[-\frac{(x-\overline{x})^2}{2\overline{x}}\right]. \tag{G.4.16}$$

Tai yra ***Gauso skirstinio*** (angl. *Gauss distribution*), taip pat vadinamo ***normaliuoju skirstiniu***, atskirasis atvejis (bendresnė Gauso skirstinio išraiška bus pateikta šio skyrelio pabaigoje). Kadangi (G.4.16) yra Puasono skirstinio ribinis atvejis, tai jam taip pat galioja vidurkio ir dispersijos išraiškos (G.4.8) ir (G.4.13).

Pvz., skirstinys, kuris pavaizduotas G.7 pav., yra labai artimas Gauso skirstiniui. Pagrindinės Gauso skirstinio savybės yra šios:

1. Skirstinys yra simetriškas atžvilgiu vidurkio $\overline{x}$.
2. Kadangi $\overline{x}$ yra didelis, tikimybių $P(x)$ vertės, kurios atitinka gretimas x vertes, tik nedaug skiriasi viena nuo kitos. Kitaip sakant, $P(x)$ yra lėtai kintanti funkcija.

Dėl pastarosios savybės diskretųjį Gauso skirstinį, kuris pavaizduotas G.7 pav., galima pakeisti tolydžiuoju skirstiniu. Kitaip sakant, dalelių skaičiaus x skirstinio teorinę analizę galima atlikti taip, lyg x būtų tolydusis dydis, nors tikrovėje jis yra diskretus[1]. Tolydžiojo atsitiktinio dydžio skirstinys apibrėžiamas šiek tiek kitaip negu diskrečiojo: vietoj konkrečios vertės x tikimybės nurodomas *tikimybės tankis*, kuris atitinka duotąją x vertę. ***Tikimybės tankio*** funkcija $f(x)$ apibrėžiama šitaip:

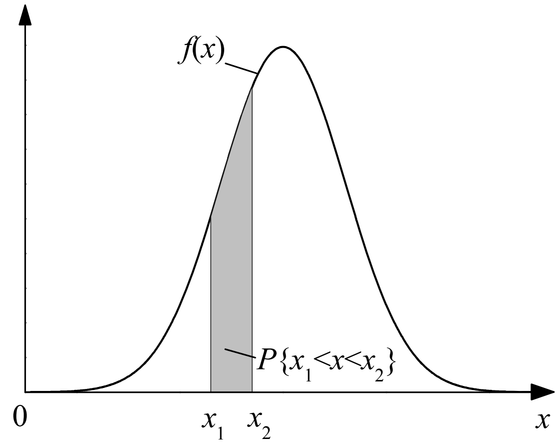
$$f(x) = \lim_{\Delta x \to 0} \frac{P\{x \le X < x + \Delta x\}}{\Delta x}; \qquad \text{(G.4.17)}$$

čia užrašymas „$P\{x \le X < x + \Delta x\}$“ reiškia tikimybę, kad atsitiktinio dydžio X vertė priklausys intervalui $[x; x + \Delta x[$. T. y. tikimybės tankis taške x – tai tikimybė aptikti dydį X intervale nuo x iki $x+\Delta x$ ir šio intervalo pločio Δx santykio riba, kai Δx artėja į nulį. Kitaip sakant, tikimybės tankis yra tikimybės kiekis, kuris atitinka atsitiktinio dydžio X vienetinį intervalą. Iš šios apibrėžties išplaukia tikimybės, kad tolydžiojo atsitiktinio dydžio X matavimo rezultatas paklius į duotą intervalą $x_1 \le x < x_2$, išraiška

$$P\{x_1 \le X < x_2\} = \int_{x_1}^{x_2} f(x)\mathrm{d}x \qquad \text{(G.4.18)}$$

(plg. su analogiška formule (G.4.4), kai atsitiktinis dydis yra diskretus). (G.4.18) lygybę galima vaizdžiai iliustruoti geometriškai: nubraižius funkciją $f(x)$, tikimybė, jog dydžio X matavimo rezultatas bus tarp x_1 ir x_2, lygi plotui po kreive $f(x)$ nuo x_1 iki x_2 (žr. G.8 pav.). Kaip ir diskrečiojo atsitiktinio dydžio, visų galimų tolydžiojo atsitiktinio dydžio X verčių tikimybių suma lygi vienetui:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f(x)\mathrm{d}x = 1 \qquad \text{(G.4.19)}$$



G.8 pav. Tikimybės tankio kreivės $f(x)$ geometrinis aiškinimas: plotas po kreive nuo x_1 iki x_2 lygus tikimybei, kad atsitiktinio dydžio X vertė priklauso intervalui $[x_1, x_2]$

(plg. su analogiška formule (G.4.5), kai atsitiktinis dydis yra diskretus). Jeigu $g(x)$ yra bet kokia tolydžiojo atsitiktinio dydžio X funkcija, tada jos vidurkis lygus

$$\overline{g} = \int_{-\infty}^{+\infty} g(x) f(x)\mathrm{d}x \qquad \text{(G.4.20)}$$

(plg. su analogiška formule (G.4.1), kai atsitiktinis dydis yra diskretus). Šios formulės atskirieji atvejai – tai tolydžiojo atsitiktinio dydžio X vidurkio ir dispersijos išraiškos:

$$\overline{x} = \int_{-\infty}^{+\infty} x f(x)\mathrm{d}x, \qquad \text{(G.4.21)}$$

$$D = \int_{-\infty}^{+\infty} (x - \overline{x})^2 f(x)\mathrm{d}x = \int_{-\infty}^{+\infty} x^2 f(x)\mathrm{d}x - \overline{x}^2 \equiv \overline{x^2} - \overline{x}^2 \qquad \text{(G.4.22)}$$

(plg. su analogiškais sąryšiais (G.4.2) ir (G.4.3), kai atsitiktinis dydis yra diskretus).

[1] ***Diskretusis dydis*** – tai dydis, kurio galimų verčių skaičius bet kuriame baigtinio pločio intervale yra baigtinis arba lygus nuliui. Pvz., branduolių skilimų skaičius yra diskretusis dydis, nes tai yra natūralusis skaičius (t. y. nulis arba teigiamas sveikasis skaičius). ***Tolydusis dydis*** – tai dydis, kurio galimų verčių skaičius bet kuriame baigtinio pločio intervale yra begalinis. Pvz., laisvosios dalelės energija ir greitis yra tolydieji dydžiai, nes jie gali būti trupmeniniai su kiek norima dideliu ženklų skaičiumi po kablelio.

Diskrečiojo Gauso skirstinio (G.4.16) tolydžiojo artinio tikimybės tankio išraiška yra tokia pati, kaip ir tikimybės $P(x)$ išraiška:

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\overline{x}}} \exp\left[-\frac{(x-\overline{x})^2}{2\overline{x}} \right]. \tag{G.4.23}$$

Šios funkcijos grafikas gaunamas sujungus G.7 pav. pavaizduotų stulpelių viršūnes glodžia linija.

Bendriausioji Gauso skirstinio išraiška yra šitokia:

$$f(x) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \exp\left[-\frac{(x-\overline{x})^2}{2\sigma^2} \right]. \tag{G.4.24}$$

Taigi, bendruoju atveju Gauso skirstinys apibūdinamas *dviem* nepriklausomais parametrais – vidurkiu $\overline{x}$ ir standartiniu nuokrypiu σ. Tuo tarpu Puasono skirstinys apibūdinamas tik vienu parametru – vidurkiu $\overline{x}$. Gauso skirstinio užrašymas (G.4.16) arba (G.4.23) pavidalu (tik su vienu parametru $\overline{x}$) atspindi tą faktą, kad tai yra Puasono skirstinio, kuriam visada galioja lygybė $\sigma = \sqrt{\overline{x}}$, aproksimacija.

Jeigu matuojamojo dydžio X skirstinys yra Gauso, tada, pasirinkus x verčių intervalą, kurio centras sutampa su vidurkiu $\overline{x}$, tikimybė, kad atskiro matavimo rezultatas priklausys duotajam intervalui, yra šitaip susijusi su to intervalo pločiu:

$P\{\overline{x} - \sigma < X < \overline{x} + \sigma\} = 0{,}683$,

$P\{\overline{x} - 2\sigma < X < \overline{x} + 2\sigma\} = 0{,}954$,

$P\{\overline{x} - 3\sigma < X < \overline{x} + 3\sigma\} = 0{,}997$.

Pastaroji lygybė išreiškia Gauso skirstinio „trijų sigma taisyklę“: kai yra pakankamai didelis matavimų skaičius, 99,7 % visų matavimų rezultatai priklauso intervalui $\overline{x} - 3\sigma < x < \overline{x} + 3\sigma$.

G.4.4. *Centrinė ribinė teorema*

Praktikoje matavimo paklaidos (nuokrypiai nuo vidurkio) būna pasiskirsčiusios pagal Gauso skirstinį (G.4.24) tais atvejais, kai matavimo paklaida lygi sumai didelio skaičiaus (praktiškai – didesnio už 4) vienodos didumo eilės atsitiktinių paklaidų, kurias sukelia skirtingi nepriklausomi vienas nuo kito veiksniai. Pvz., matuojant kūno svorį jautriomis mechaninėmis svarstyklėmis, matavimo atsitiktinę paklaidą sudaro: 1) paklaida dėl matavimo rezultato priklausomybės nuo kūno padėties ant svarstyklių lėkštelės, 2) paklaida dėl netikslaus svarstyklių rodyklės vizualaus sutapatinimo su skalės padala, 3) paklaida dėl stalo vibracijos ir t. t. Tokiais atvejais, nepriklausomai nuo kiekvienos iš sudedamųjų paklaidų skirstinio pavidalo, pilnutinės atsitiktinės paklaidos skirstinys yra (G.4.24) pavidalo. Šis rezultatas išplaukia iš tikimybių teorijoje įrodomos ***centrinės ribinės teoremos***, kurios paprasčiausia formuluotė yra tokia:

Jeigu $X_1, X_2, ..., X_m$ yra nepriklausomieji atsitiktiniai dydžiai, kurių kiekvieno vidurkis μ ir dispersija D, tada, didėjant m, jų sumõs $Y_m = \sum_{k=1}^{m} X_k$ skirstinys artėja prie Gauso skirstinio, kurio vidurkis $m\mu$ ir dispersija mD.

Todėl nesunku suprasti, kodėl Puasono skirstinio tikimybės tankio funkcija tampa vis panašesnė į Gauso skirstinio tikimybės tankio funkciją didėjant vidurkiui. Pvz., jeigu nagrinėjamas branduolių skilimas, radioaktyvųjį bandinį galima suskaidyti į m vienodo tūrio dalių. Tada pilnutinis skilimų skaičius yra lygus kiekvienoje dalyje įvykusių skilimų skaičių sumai. Kadangi skirtingose dalyse branduoliai skyla nepriklausomai vienas nuo kito (tai yra viena iš Puasono skirstinio atsiradimo sąlygų), o kiekvieno dėmens vidurkis yra lygus dispersijai (tai yra pagrindinė Puasono skirstinio savybė), tai pagal centrinę ribinę teoremą, kai m yra pakankamai didelis, sumos skirstinys apytiksliai sutampa su Gauso skirstiniu, kurio vidurkis taip pat lygus dispersijai, tačiau yra m kartų didesnis už kiekvieno dėmens vidurkį[1].

Centrinė ribinė teorema galioja ir tada, kai skirtingų dėmenų skirstiniai yra skirtingi. Be to, tų skirstinių vidurkiai ir dispersijos nebūtinai turi sutapti – pakanka, kad jie būtų vienodos didumo eilės. Todėl Gauso skirstinio vaidmuo tikimybių teorijoje yra išskirtinis. Matuojant tolydžiuosius dydžius,

[1] Toks aiškinimas tinka tik tada, kai kiekvieno matavimo metu skyla bent vienas branduolys *daugelyje* iš minėtųjų m dalių, t. y. kai bandinio aktyvumas yra pakankamai didelis arba kai matavimai yra pakankamai ilgi. Kai bandinio aktyvumas yra mažas arba matavimai yra trumpi, tada kiekvieno matavimo metu skilimų skaičius daugumoje iš m sričių lygus nuliui. Jeigu matavimo rezultatas yra mažas (pvz., 0, 1 arba 2), tada jau negalima laikyti, kad nepriklausomų veiksnių skaičius yra didelis, todėl sumos skirstinys jau nėra Gauso skirstinio pavidalo, o turi būti skaičiuojamas pagal (G.4.12) formulę.

matavimų paklaidų skirstinys dažniausiai yra Gauso skirstinio pavidalo, nes šias paklaidas dažniausiai galima išreikšti daugelio „elementariųjų paklaidų“ suma.

G.5. Statistinių modelių taikymai

Ankstesniuose dviejuose skyreliuose buvo aptarti du nepriklausomi klausimai: matavimo duomenų statistinis apibūdinimas (G.3 skyrelis) ir keli konkretūs statistiniai modeliai (G.4 skyrelis). Šiame skyrelyje sujungsime šiuos du atskirus klausimus.

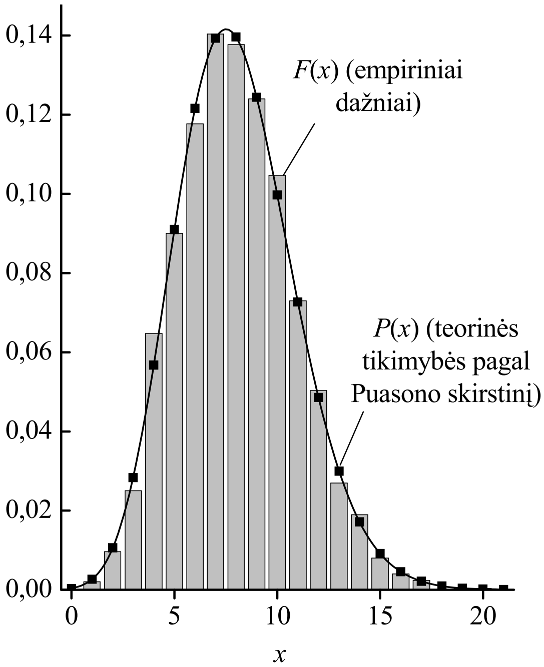
Atliekant branduolio fizikos matavimus, statistinių modelių taikymas yra dvejopas. Pirma, atlikus daug tiriamojo dydžio matavimų vienodomis sąlygomis, tų matavimų duomenų statistinė analizė leidžia nustatyti, ar matuojamojo dydžio „išsibarstymo“ pobūdis atitinka tą, kurį numato statistinis modelis. Tipiškas tokio palyginimo tikslas – nustatyti, ar dalelių skaičiavimo įranga funkcionuoja normaliai. Antra, turint statistinį modelį, galima apytiksliai apskaičiuoti matuojamojo dydžio pasikliovimo intervalą, net kai atliktas tik vienas matavimas.

G.5.1. *Skaičiavimo įrangos patikra palyginus stebimąsias fliuktuacijas su teorinėmis*

G.4 skyrelyje buvo aprašytas per fiksuotą laiko tarpą skilusių branduolių skaičiaus skirstinys: tai yra Puasono skirstinys (G.4.12), kurį esant dideliems vidurkiams galima aproksimuoti Gauso skirstiniu (G.4.16). Tokio paties pavidalo yra ir į detektorių patekusių dalelių skaičiaus skirstinys (kaip minėta G.2 skyrelyje, šių dviejų skaičių vidurkiai skiriasi tik pastoviu daugikliu). Todėl, jeigu *detektuotų* dalelių skaičiaus skirstinys skiriasi nuo Puasono arba Gauso skirstinio, tai reiškia, kad dalelių skaičiavimo įranga veikia neoptimaliai (pvz., detektoriaus išėjimo signale yra daug pašalinių impulsų, kurie nesusiję su detektuojamąja spinduliuote, arba kai kurie spinduliuotės sukeltieji impulsai nėra užregistruojami). Taigi, dalelių skaičiaus skirstinio statistinį modelį galima panaudoti skaičiavimo įrangos patikrinimui: pakanka palyginti statistinio modelio išvadas (tikimybes ir teorinę dispersiją) su atitinkamais empiriniais parametrais (dažniais ir empirine dispersija). Kaip matome, tarp lyginamųjų dydžių nėra vidurkio. Taip yra todėl, kad „teorinį“ (t. y. neiškraipytą jokių matavimo įrangos defektų) vidurkį lemiantys veiksniai nėra susiję su skaičiavimo statistika. Pvz., šis vidurkis priklauso nuo radioaktyviojo šaltinio aktyvumo, atstumo tarp šaltinio ir detektoriaus, detektoriaus tipo ir kt. Dažniausiai teorinis vidurkis $\overline{x}$ nebūna žinomas iš anksto. Tačiau jis yra reikalingas skaičiuojant tikimybes ir teorinę dispersiją: jis įeina į tikimybių išraiškas (G.4.12) ir (G.4.16) ir į teorinės dispersijos išraišką (G.4.3). Vienintelė išeitis – teorinį vidurkį pakeisti empiriniu. Taigi, veiksmų seka, kurią reikia atlikti tikrinant skaičiavimo įrangą, yra tokia:

1) atliekami N vienodos trukmės matavimų vienodomis sąlygomis;
2) apskaičiuojami empiriniai dažniai, vidurkis $\overline{x}_e$ ir dispersija D_e (pastarieji du dydžiai skaičiuojami pagal (G.3.1) ir (G.3.5) formules);
3) imant empirinį vidurkį $\overline{x}_e$ vietoj teorinio vidurkio $\overline{x}$, apskaičiuojamos teorinės tikimybės $P(x)$ (tiksliai skaičiuojant, reikia naudoti (G.4.12) formulę, o jeigu $\overline{x}_e$ yra pakankamai didelis, tada galima naudoti apytikslę formulę (G.4.16)) ir teorinė dispersija D (G.4.3);
4) empirinių dažnių pasiskirstymo funkcija $F(x)$ palyginama su teorinių tikimybių pasiskirstymo funkcija $P(x)$, o empirinė dispersija D_e palyginama su teorine dispersija D. Jeigu matavimų duomenys atitinka naudojamą statistinį modelį, tada $F(x)$ turėtų apytiksliai sutapti su $P(x)$ esant visoms x vertėms, o D_e turėtų apytiksliai sutapti su D.

Paprasčiausia palyginti $F(x)$ ir $P(x)$ nubrėžus abi šias funkcijas viename grafike. Pvz., empirinė histograma, kuri pavaizduota G.9 pav. stulpelių pavidalu, buvo gauta atlikus 3000 matavimų. Empirinis vidurkis lygus 8,018. Ši vertė turi būti įrašyta vietoj $\overline{x}$ skaičiuojant teorines tikimybes $P(x)$. Kadangi vidurkis nėra didelis, tai tikimybes $P(x)$ reikia skaičiuoti pagal bendrąją Puasono skirstinio išraišką (G.4.12) (jeigu vidurkis būtų didesnis už 20, tada taip pat būtų galima taikyti (G.4.12), tačiau praktiškai tas pats rezultatas būtų gautas ir taikant Gauso skirstinį (G.4.16), kurio matematinė išraiška paprastesnė). Teorinės tikimybės pavaizduotos taškais, kurie sujungti linija (kadangi Puasono skirstinys apibrėžtas tik diskrečioms x vertėms, tai jungianti linija yra tik dėl vaizdumo). Kaip matome, empirinė ir teorinė funkcijos yra artimos viena kitai. Vien pažiūrėjus į šį grafiką, nieko daugiau ir negalima pasakyti (toks vizualus kreivių palyginimas kartais vadinamas „kokybiniu“ palyginimu).



G.9 pav. Empirinių dažnių ir teorinių tikimybių palyginimas (matavimų skaičius 3000, empirinis vidurkis 8,018)

Kadangi empiriniai dažniai $F(x)$ yra atsitiktiniai dydžiai, tai jie gali skirtis nuo teorinių tikimybių $P(x)$ net ir tada, kai matavimų duomenų statistinės savybės tiksliai atitinka Puasono skirstinį. Didėjant matavimų skaičiui, tokie atsitiktiniai nuokrypiai nuo teorinės kreivės mažėtų. Tačiau skirtumų gali atsirasti ir dėl skaičiavimo įrangos defektų. Didinant matavimų skaičių, tokie skirtumai ne mažėtų, o taptų dar ryškesni. Norint nuspręsti, ar skirtumai yra grynai atsitiktiniai (t. y. įranga veikia optimaliai), ar ne (t. y. pasireiškia įrangos defektai), reikia *kiekybinio* palyginimo. Kiekybiškai palyginant empirinius dažnius ir teorines tikimybes, reikia nustatyti vieną parametrą, kuris apibūdina duomenis kaip visumą. Praktikoje dažniausiai pasirenkamas vadinamasis „chi kvadratu kriterijus" („χ^2 kriterijus"; čia „χ" yra graikų abėcėlės raidė „chi"). Jo esmė yra tokia. Apibrėžkime skaičių

$$\chi^2 = \frac{1}{\overline{x}_e} \sum_{i=1}^{n} (x_i - \overline{x}_e)^2 . \qquad \text{(G.5.1)}$$

Kadangi šis skaičius apskaičiuotas naudojant atsitiktinio dydžio X vertes x_i (i = 1, 2, ..., n), tai jis taip pat yra tam tikro atsitiktinio dydžio vertė. Kaip ir visus kitus atsitiktinius dydžius, tą dydį galima apibūdinti tam tikru skirstiniu. Aišku, kad to skirstinio pavidalas priklauso nuo dydžio X skirstinio ir nuo dėmenų skaičiaus n. Jeigu dydžio X skirstinys yra Puasono, tada dydžio, kurio vertės apibrėžtos (G.5.1) sąryšiu, skirstinys yra tiksliai apibrėžto pavidalo ir vadinamas ***χ^2 skirstiniu***. Atsitiktinį dydį, kuris apibūdinamas χ^2 skirstiniu, žymėsime Y (kaip ir anksčiau, „atsitiktinio dydžio" sąvoką skirsime nuo to dydžio empirinės vertės sąvokos). Šį skirstinį galima nusakyti tikimybės tankio funkcija, tačiau praktikoje dažniau naudojama kita funkcija, kurios prasmė – tikimybė, kad atsitiktinio dydžio Y vertė taps mažesnė už empirinę vertę χ^2, kuri apskaičiuota pagal (G.5.1). Šią tikimybę žymėsime $P(Y < \chi^2)$. Apskaičiavus (arba nuskaičius iš specialių lentelių) šią tikimybę, ji lyginama su tam tikromis „kritinėmis" vertėmis, kurių viena yra artima nuliui (pvz., 0,01), o kita artima vienetui (pvz., 0,99). Jeigu tikimybė $P(Y < \chi^2)$ yra mažesnė už 0,01, tai reiškia, kad χ^2 vertė yra neįtikėtinai maža: jeigu matavimo duomenų skirstinys būtų Puasono, tada tokia maža χ^2 vertė būtų gaunama rečiau negu vieną kartą iš šimto. Jeigu tikimybė $P(Y < \chi^2)$ yra didesnė už 0,99, tai reiškia, kad χ^2 vertė yra neįtikėtinai didelė: jeigu matavimo duomenų skirstinys būtų Puasono, tada daugiau negu 99 matavimuose iš šimto būtų gaunama mažesnė vertė. Tokiais atvejais galima spėti, kad blogai veikia skaičiavimo įranga. Jeigu tikimybė $P(Y < \chi^2)$ yra tarp 0,01 ir 0,99 (t. y. nei per maža, nei per didelė), tada galima teigti, kad dalelių skaičiavimo įranga veikia tinkamai.

Palyginus χ^2 apibrėžtį (G.5.1) su empirinės dispersijos apibrėžtimi (G.3.5), tampa akivaizdu, kad

$$\chi^2 = \frac{(n-1)D_e}{\overline{x}_e} . \qquad \text{(G.5.2)}$$

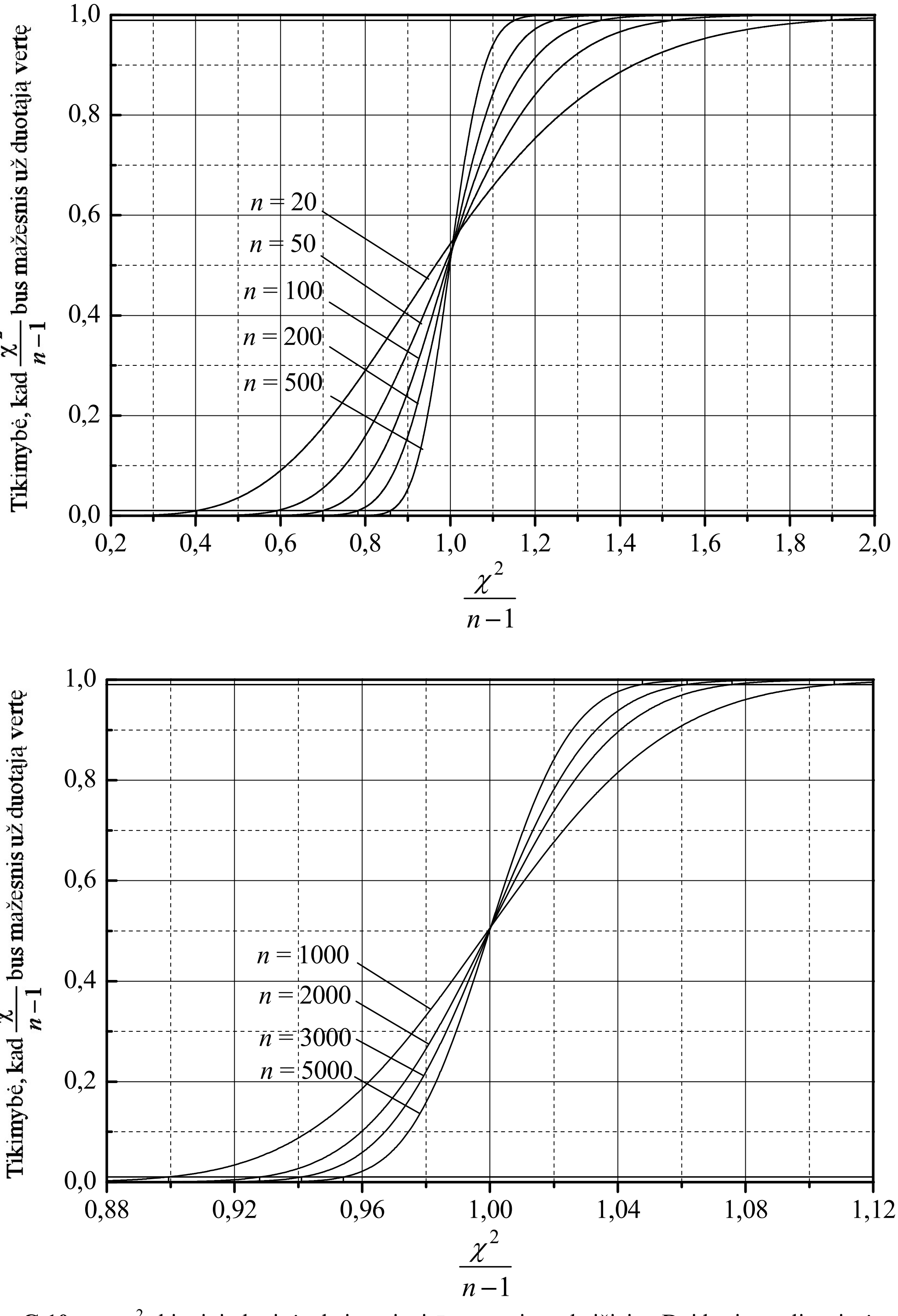
Kadangi Puasono skirstinio atveju empirinė dispersija turėtų būti artima empiriniam vidurkiui (žr. (G.4.13)), tai (G.5.2) reiškinio vertė turėtų būti artima skaičiui $n - 1$. Todėl vietoj anksčiau apibrėžto dydžio Y patogiau vartoti dydį $Y / (n - 1)$, kurio empirinė vertė lygi

$$\frac{\chi^2}{(n-1)} = \frac{D_e}{\overline{x}_e} . \qquad \text{(G.5.3)}$$

Ši vertė dažniausiai būna artima vienetui. G.10 pav. pateiktieji grafikai nusako tikimybę, kad dydžio $Y / (n - 1)$ vertė atsitiktinai taps mažesnė už duotąją vertę (kuri atidėta ant abscisių ašies). Dvi horizontalios linijos nurodo „kritines" tikimybes (0,01 ir 0,99). Šių linijų ir grafikų sankirtos taškų abscisės nusako dydžio $Y / (n - 1)$ kritines vertes. Jeigu $\chi^2/(n - 1)$ yra tarp tų kritinių verčių, tada galima teigti, kad įranga veikia tinkamai; priešingu atveju galima spėti, kad įranga veikia neoptimaliai.

Pvz., empirinio duomenų rinkinio, kurio histograma pavaizduota G.9 pav., vidurkis $\overline{x}_e$ yra lygus 8,018, dispersija D_e yra lygi 7,818, o $\chi^2 \approx 2924{,}3$. Kadangi $D_e < \overline{x}_e$, tai galima daryti išvadą, kad empirinių duomenų išsibarstymo laipsnis yra šiek tiek mažesnis už tą, kuris išplaukia iš Puasono skirstinio. Norint nustatyti, ar šis nuokrypis nuo teorijos yra statistiškai reikšmingas, reikia taikyti anksčiau aprašytą χ^2 kriterijų. Kadangi šiuo atveju $n = 3000$, tai $\chi^2 / (n - 1) \approx 0{,}975$. Iš G.10 pav. išplaukia, kad, kai $n = 3000$, tikimybė, kad $\chi^2 / (n - 1)$ taps mažesnis už 0,975, yra lygi maždaug 0,17. Kadangi ši vertė nėra nei pernelyg maža, nei pernelyg didelė (tiksliau, ši vertė yra didesnė už 0,01 ir mažesnė už 0,99), tai galima daryti išvadą, kad minėtas skirtumas tarp empirinės ir teorinės dispersijų yra atsitiktinis, o dalelių skaičiavimo įranga veikia normaliai.

Praktikoje tikslioji tikimybės $P(Y < \chi^2)$ vertė dažniausiai nebūna svarbi: pakanka tik nustatyti, ar ji yra tarp tam tikrų iš anksto duotų kritinių tikimybių (pvz., 0,01 ir 0,99). Todėl χ^2 kriterijus kartais



G.10 pav. χ^2 skirstinio kreivės, kai yra įvairūs matavimų skaičiai n. Dvi horizontalios tiesės atitinka kritines tikimybes 0,01 ir 0,99 taikomas šitaip: empirinė χ^2 vertė palyginama su kritinėmis vertėmis, kurios atitinka minėtas kritines tikimybes (kritinės χ^2 vertės dažniausiai nuskaitomos iš specialių lentelių arba grafikų). Pvz., kai $n =$ $= 3000$, kritinės $\chi^2 / (n - 1)$ vertės yra lygios maždaug 0,94 ir 1,06 (žr. G.10 pav.). Jeigu matavimo įranga veikia tinkamai, tada empirinė $\chi^2 / (n - 1)$ vertė turėtų būti tarp kritinių verčių.

Vienas iš veiksnių, kurie sąlygoja detektuotų dalelių skaičiaus skirstinio nuokrypį nuo Puasono skirstinio, yra skaitiklio neveikos trukmė τ_n. Įrodyta[1], kad, galiojant nepratęsiamosios neveikos trukmės modeliui (žr. 15.7.1 poskyrį), vidutinė dalelių skaičiavimo sparta (t. y. dydis $N = \bar{x}/T$, kur T yra vieno matavimo trukmė) išreiškiama (15.7.3) formule, o detektuotų per vieną matavimą dalelių skaičiaus standartinis nuokrypis lygus

$$\sigma = \sqrt{\frac{N_0 T}{(1 + N_0 \tau_n)^3}}\,. \tag{G.5.4}$$

Įrašę „tikrosios" skaičiavimo spartos N_0 išraišką (15.7.1) į (G.5.4), gauname:

$$\sigma = \sqrt{NT}(1 - N\tau_n) \equiv \sqrt{\bar{x}}\left(1 - \bar{x}\frac{\tau_n}{T}\right). \tag{G.5.5}$$

Akivaizdu, kad $\sigma < \sqrt{\bar{x}}$, t. y. neveikos trukmė pasireiškia tuo, kad detektuotų dalelių skaičiaus skirstinys tampa siauresnis už Puasono skirstinį, kuris atitinka duotąjį vidurkį $\bar{x}$. Nors (G.5.4) formulės matematinis išvedimas yra gana sudėtingas, minėtąjį skirstinio pločio sumažėjimą nesunku suprasti, išnagrinėjus ribinį atvejį, kai $N_0 \to \infty$. Šiuo atveju iš (15.7.2) gauname, kad $N = 1/\tau_n$, t. y. visų matavimų rezultatai tampa vienodi. Tai reiškia, kad, neribotai didėjant tikrajai skaičiavimo spartai N_0 ir galiojant nepratęsiamosios neveikos trukmės modeliui, per laiką T detektuotų dalelių skaičiaus skirstinys artėja į Dirako delta funkcijos pavidalo skirstinį, kurio centras yra ties T/τ_n. Tokio skirstinio standartinis nuokrypis yra lygus nuliui. Todėl nenuostabu, kad skaitiklio neveikos trukmė sąlygoja detektuotų dalelių skirstinio pločio *sumažėjimą*, palyginti su Puasono skirstiniu, kuris atitinka duotą išmatuotąjį dalelių skaičiaus vidurkį $\bar{x}$. Išmatavus empirinius vidurkį $\bar{x}_e$ ir standartinį nuokrypį σ_e, pagal (G.5.5) formulę galima apskaičiuoti skaitiklio neveikos trukmę:

$$\tau_n = \frac{T}{\bar{x}_e}\left(1 - \frac{\sigma_e}{\sqrt{\bar{x}_e}}\right) \tag{G.5.6}$$

(antrasis dėmuo skliaustuose yra lygus kvadratinei šakniai iš (G.5.3) reiškinio). Tačiau reikia turėti omenyje, kad šis rezultatas galioja tik nepratęsiamosios neveikos trukmės modeliui. Pratęsiamosios neveikos trukmės arba „mišriajam" modeliui (G.5.4)–(G.5.6) formules galima taikyti tik palyginti mažų spartų atvejais, kai $\bar{x}\tau_n / T << 1$ (kad būtų kuo mažesnė tikimybė, kad dvi dalelės paklius į tą patį neveikos intervalą).

G.5.2. *Vieno matavimo tikslumo įvertinimas*

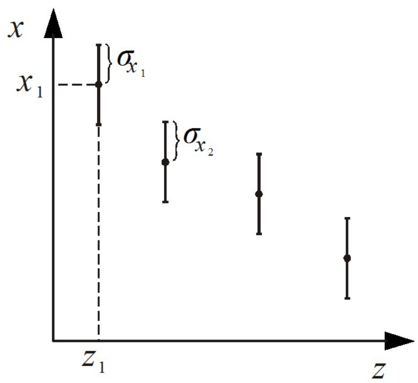
Antrasis statistinio modelio taikymas yra naudingas tais atvejais, kai siekiama bent apytiksliai nustatyti dalelių skaičiaus teorinį vidurkį $\bar{x}$, tačiau turimas tik vieno matavimo rezultatas x. Jeigu būtų žinomas standartinis nuokrypis σ, tada būtų galima teigti, kad vidurkis greičiausiai priklauso intervalui $x - \sigma < \bar{x} < x + \sigma$, nes daugumos matavimų rezultatų nuokrypių nuo vidurkio $\bar{x}$ moduliai neviršija standartinio nuokrypio σ (pvz., žr. G.7 pav.). Žinome, kad standartinis nuokrypis σ yra lygus kvadratinei šakniai iš dispersijos D. Tačiau aišku, kad, atlikus tik vieną matavimą ($n = 1$), dispersija negali būti skaičiuojama pagal jos apibrėžtį (G.3.5). Tokiu atveju galima pasinaudoti statistiniu modeliu – Puasono skirstiniu. Kaip matome iš Puasono skirstinio išraiškos (G.4.12), šį skirstinį visiškai apibūdina vidurkis $\bar{x}$ (t. y., žinodami $\bar{x}$, galime apskaičiuoti visų verčių x tikimybes $P(x)$ ir dispersiją). Turint vienintelį matavimą, vidurkį reikia prilyginti to matavimo rezultatui: $\bar{x} \approx x$. Dabar galime pasinaudoti žinoma Puasono skirstinio savybe: $D = \bar{x}$. Sujungę pastarąsias dvi lygybes, gauname: $D \approx x$, t. y. $\sigma \approx \sqrt{x}$. Taigi, *tipiškas pavienio matavimo rezultato nuokrypis nuo tikrojo vidurkio yra lygus šakniai iš to matavimo rezultato*.

[1] Pagal *Cantor B. I., Teicht M. C. Dead-time-corrected photocounting distributions for laser radiation // Journal of the Optical Society of America, vol. 65, no.7, 1975, p. 786–791.*

Jeigu išmatuotasis dalelių skaičius x yra didelis (didesnis už 20), tada šią išvadą galima suformuluoti tikslesniu pavidalu: tikrasis vidurkis $\bar{x}$ priklauso intervalui $x-\sqrt{x}<\bar{x}<x+\sqrt{x}$ su 68,3 % tikimybe. Kitaip sakant, šis intervalas yra ***vidurkio 68,3 % pasikliovimo intervalas***. Analogiškai intervalas $x-2\sqrt{x}<\bar{x}<x+2\sqrt{x}$ yra 95,4 % pasikliovimo intervalas, $x-3\sqrt{x}<\bar{x}<x+3\sqrt{x}$ yra 99,7 % pasikliovimo intervalas ir t. t. (žr. G.4.3 skyrelis, paskutiniosios dvi pastraipos).

Taigi, vieno matavimo ***santykinė standartinė paklaida*** (σ/x) yra lygi $\sqrt{x}/x=1/\sqrt{x}$. Matome, kad vieno matavimo rezultatas (pilnutinis per matavimo trukmę detektuotų dalelių skaičius) visiškai nusako to matavimo santykinę paklaidą. Jeigu matavimo metu buvo detektuota 100 dalelių, tada santykinė standartinė paklaida lygi 10 %. Norint sumažinti šią paklaidą iki 1 %, reikia detektuoti 10 000 dalelių. Tai rodo, kad optimalioji matavimo trukmė yra atvirkščiai proporcinga pageidaujamos santykinės paklaidos kvadratui (jeigu vidutinis dalelių skaičius per laiko vienetą yra pastovus).

Pateikiant matavimų rezultatus grafiškai, kiekvieno matavimo paklaidos dažnai nurodomos vertikalių brūkšnelių pavidalu. Pvz., G.11 pav. parodytas hipotetinis matavimo duomenų rinkinys, kuris gautas matuojant dydį x, kuris yra dydžio z funkcija. Matavimų duomenys pateikiami taškų pavidalu, o kiekvieno matavimo neapibrėžtumo intervalas nurodomas vertikaliu brūkšneliu, kurio centre yra atitinkamas taškas. Paklaidų brūkšnelio ilgį įprasta pasirinkti lygiu 2σ (t. y. σ į viršų ir σ į apačią nuo taško). Tada, aproksimuojant matavimų duomenis teorine funkcija $x=f(z)$ ir nubrėžus tą funkciją tame pačiame grafike, teorinė funkcija turėtų kirsti maždaug 68 % visų paklaidų brūkšnelių (žr. G.4.3 skyrelio pabaigą). Žinoma, taip yra tik tada, kai taškų skaičius yra pakankamai didelis, kad pasireikštų statistiniai dėsningumai (bent kelios dešimtys). Jeigu taškų skaičius yra mažas (pvz., 5), tada yra didelė tikimybė, kad teorinė funkcija nekirs daugumos paklaidų brūkšnelių.



G.11 pav. Matavimo paklaidų grafinis vaizdavimas

Reikia turėti omenyje, kad visos anksčiau suformuluotos išvados galioja tik tada, kai x yra per *vieną* duotosios trukmės matavimą detektuotų dalelių skaičius. Šiomis išvadomis *negalima* remtis skaičiuojant šių dydžių paklaidas:

1) kelių nepriklausomų matavimų *vidurkio*;
2) skaičiavimo *spartos* (t. y. vidutinio skaičiaus per laiko vienetą);
3) dalelių skaičių *sumos* arba *skirtumo*;
4) dydžio, kuris yra dalelių skaičiaus *funkcija*.

Tokiais atvejais, skaičiuojant paklaidas, reikia taikyti kitame skyrelyje išdėstytus metodus.

G.6. Paklaidų skaičiavimas

Iki šiol buvo aptariami tik tiesiogiai išmatuoto dalelių skaičiaus skirstiniai. Tačiau praktikoje eksperimentatorių dažniausiai domina ne pilnutinis per tam tikrą laiką detektuotų dalelių skaičius, o tam tikras išvestinis dydis, kuris gaunamas atliekant įvairias aritmetines operacijas su išmatuotais dalelių skaičiais. Kadangi tiesiogiai išmatuotasis dalelių skaičius yra atsitiktinis dydis, tai visi dydžiai, kurie gaunami operuojant dalelių skaičiais, taip pat yra atsitiktiniai. Jų skirstiniai priklauso ir nuo išmatuotojo dalelių skaičiaus skirstinio, ir nuo konkrečių matematinių operacijų, kurios yra su tais skaičiais atliekamos.

Kaip pavyzdį, aptarkime matavimus, kurių metu detektorius detektuoja radioaktyviojo šaltinio spinduliuotę. Tarkime, kad pilnutinis to šaltinio išspinduliuotų dalelių skaičius per vieną matavimą yra pakankamai didelis, kad jo skirstinį (Puasono skirstinį) būtų galima aproksimuoti Gauso skirstiniu (G.4.16). Šį skirstinį visiškai nusako jo vidurkis $\bar{x}$, o standartinis nuokrypis lygus kvadratinei šakniai iš vidurkio. Be to, tarkime, kad detektorius detektuoja tik 50 % visų dalelių, kurias spinduliuoja šaltinis. Tada, norint apskaičiuoti šaltinio išspinduliuotų dalelių skaičių, matavimo rezultatą reikėtų padauginti iš 2. Atlikus tokius matavimus daug kartų ir kiekvieno matavimo rezultatą padauginus iš 2, būtų gautas naujas skirstinys, kuris skiriasi nuo tiesiogiai detektuotų dalelių skaičiaus skirstinio. Aišku, kad šio apskaičiuotojo skirstinio vidurkis būtų lygus dvigubam detektuotų dalelių skaičiaus vidurkiui. Tačiau kyla klausimas: kokie yra šio skirstinio pavidalas ir standartinis nuokrypis?

Atsakymas į šį klausimą yra toks. Padauginus atsitiktinį dydį iš konstantos (šiuo atveju – iš 2), gautojo dydžio skirstinio *pavidalas* yra toks pat kaip pradinio dydžio (šiuo atveju – Gauso skirstinys), tačiau naujo skirstinio standartinis nuokrypis jau nėra lygus kvadratinei šakniai iš vidurkio (t. y. minėtame pavyzdyje naujasis standartinis nuokrypis nebus lygus senajam standartiniam nuokrypiui, padaugintam iš $\sqrt{2}$) . Todėl naują Gauso skirstinį reikia apibūdinti *dviem* parametrais: jo vidurkiu $\overline{x}$ ir standartiniu nuokrypiu σ. Tokio Gauso skirstinio tikimybės tankio funkcija $f(x)$ yra (G.4.24). Kaip minėta G.4.3 skyrelyje, $f(x)\mathrm{d}x$ nusako tikimybę, kad apskaičiuoto dydžio (šiuo atveju – dvigubo detektuotų dalelių skaičiaus) vertė bus tarp x ir $x + \mathrm{d}x$.

Pasirodo, kad, atlikus įvairias matematines operacijas su dydžiais, kurių skirstinys yra Gauso, skaičiavimo rezultato skirstinys dažniausiai taip pat yra Gauso. Norint gauti šio skirstinio vidurkį, pakanka atlikti tas pačias operacijas su pradinio dydžio vidurkiu. Tačiau standartinio nuokrypio skaičiavimas nėra toks akivaizdus. Toliau suformuluota bendroji taisyklė, kuri taikoma skaičiuojant bet kurio išvestinio dydžio standartinį nuokrypį.

Tarkime, kad x, y, z, ... yra tiesiogiai išmatuotieji dalelių skaičiai arba kitokie nepriklausomi atsitiktiniai dydžiai, kurių standartiniai nuokrypiai σ_x, σ_y, σ_z yra žinomi. Be to, duota tų dydžių funkcija $u(x, y, z, ...)$. Tada, jeigu tos funkcijos dalinių išvestinių standartiniai nuokrypiai yra daug mažesni už tų išvestinių modulius, atsitiktinio dydžio u standartinis nuokrypis σ_u atitinka lygybę

$$\sigma_u^2 = \left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)^2 \sigma_x^2 + \left(\frac{\partial u}{\partial y}\right)^2 \sigma_y^2 + \left(\frac{\partial u}{\partial z}\right)^2 \sigma_z^2 + ... \quad \text{(G.6.1)}$$

Toliau pateiktas šio sąryšio taikymas keliais paprastais atvejais.

I atvejis. Atsitiktinių dydžių suma arba skirtumas

Jeigu

$$u = x + y \quad \text{arba} \quad u = x - y,$$

tada

$$\frac{\partial u}{\partial x} = 1 \quad \text{ir} \quad \frac{\partial u}{\partial y} = \pm 1 .$$

Pasinaudoję (G.6.1) sąryšiu, gauname:

$$\sigma_u = \sqrt{\sigma_x^2 + \sigma_y^2} . \quad \text{(G.6.2)}$$

Pvz., šis sąryšis taikomas, jeigu matavimų duomenis reikia pataisyti atimant vadinamojo „fono“ impulsų skaičių (foną sąlygoja pašaliniai veiksniai, pvz., kosminė spinduliuotė, statybinių medžiagų natūralioji spinduliuotė, matavimų įrangos triukšmai ir kt.).

II atvejis. Atsitiktinio dydžio daugyba arba dalyba iš konstantos

Jeigu

$$u = Ax,$$

kur A yra tiksliai apibrėžta konstanta, tada

$$\frac{\partial u}{\partial x} = A .$$

Pasinaudoję (G.6.1) sąryšiu, matome:

$$\sigma_u = A\sigma_x. \quad \text{(G.6.3)}$$

Analogiškai, jeigu

$$u = x / B ,$$

tada

$$\sigma_u = \sigma_x / B . \quad \text{(G.6.4)}$$

Pvz., tarkime, kad reikia apskaičiuoti skaičiavimo spartos paklaidą. Skaičiavimo sparta r – tai pilnutinio detektuotų dalelių skaičiaus x ir laiko t, per kurį jos buvo detektuotos, santykis:

$$r = x / t .$$

Šio dydžio standartinė paklaida apskaičiuojama pagal bendrąją taisyklę (G.6.4), kur vietoj B yra pilnutinė matavimo trukmė t.

III atvejis. Atsitiktinių dydžių daugyba arba dalyba vienas iš kito

Jeigu

$$u = xy,$$

tada

$$\frac{\partial u}{\partial x} = y, \qquad \frac{\partial u}{\partial y} = x,$$

todėl pagal (G.6.1) sąryšį

$$\sigma_u^2 = y^2\sigma_x^2 + x^2\sigma_y^2.$$

Padaliję abi puses iš $u^2 = x^2y^2$, matome:

$$\left(\frac{\sigma_u}{u}\right)^2 = \left(\frac{\sigma_x}{x}\right)^2 + \left(\frac{\sigma_y}{y}\right)^2. \qquad \text{(G.6.5)}$$

Analogiškai, jeigu

$$u = \frac{x}{y},$$

tada

$$\frac{\partial u}{\partial x} = \frac{1}{y}, \qquad \frac{\partial u}{\partial y} = -\frac{x}{y^2}, \qquad \sigma_u^2 = \left(\frac{1}{y}\right)^2\sigma_x^2 + \left(-\frac{x}{y^2}\right)^2\sigma_y^2.$$

Padaliję abi puses iš $u^2 = x^2 / y^2$, vėl gauname (G.6.5) sąryšį. Taigi, dalelių skaičių sandaugos arba dalmens *santykiniai* standartiniai nuokrypiai (σ_u/u, σ_x/x ir σ_y/y) susiję tarpusavyje taip pat kaip dalelių skaičių sumos arba skirtumo *absoliutieji* standartiniai nuokrypiai (plg. (G.6.5) ir (G.6.2)).

IV atvejis. Dalelių skaičiaus matavimų rezultatų vidurkis

Tarkime, buvo atlikta n vienodos trukmės matavimų vienodomis sąlygomis. Atitinkamus užregistruotų dalelių skaičius žymėsime $x_1, x_2, \ldots, x_n$, o jų sumą žymėsime Σ:

$$\Sigma = x_1 + x_2 + \ldots + x_n.$$

Taikant bendrąją atsitiktinių dydžių funkcijos standartinio nuokrypio skaičiavimo formulę (G.6.1), gaunamas sąryšis

$$\sigma_\Sigma^2 = \sigma_{x_1}^2 + \sigma_{x_2}^2 + \ldots + \sigma_{x_n}^2,$$

nes visiems nepriklausomiems kintamiesiems x_i ($i = 1, 2, \ldots, n$) galioja $\partial\Sigma / \partial x_i = 1$. Tačiau kadangi kiekvienam kintamajam $\sigma_{x_i} = \sqrt{x_i}$, tai

$$\sigma_\Sigma^2 = x_1 + x_2 + \ldots + x_n = \Sigma,$$

$$\sigma_\Sigma = \sqrt{\Sigma}. \qquad \text{(G.6.6)}$$

Šis rezultatas rodo, kad kelių matavimų rezultatų (dalelių skaičių) sumos paklaida yra tokia pat kaip vieno matavimo, kurio rezultatas lygus tai sumai. T. y., skaičiuojant kelių matavimų rezultatų sumos paklaidą, nėra svarbu, ar visas matavimų laikas buvo suskaidytas į atskirus trumpesnius matavimus, ar ne – svarbus tik pilnutinis per visą matavimų laiką detektuotų dalelių skaičius.

Minėtųjų n nepriklausomų matavimų vidurkis yra lygus

$$\bar{x} = \frac{\Sigma}{n}. \qquad \text{(G.6.7)}$$

Kadangi n yra konstanta, tai galima taikyti anksčiau išvestą sąryšį (G.6.4), kuris nusako standartinį nuokrypį po dalybos iš konstantos:

$$\sigma_{\bar{x}} = \frac{\sigma_\Sigma}{n} = \frac{\sqrt{\Sigma}}{n} = \frac{\sqrt{n\bar{x}}}{n},$$

$$\sigma_{\bar{x}} = \sqrt{\frac{\bar{x}}{n}}. \qquad \text{(G.6.8)}$$

Kadangi pavienio matavimo paklaida yra $\sigma_{x_i} = \sqrt{x_i}$, o tipiškos kintamųjų x_i ($i = 1, 2, \ldots, n$) vertės yra artimos $\bar{x}$, galima padaryti išvadą, kad n matavimų vidurkio paklaida yra maždaug $\sqrt{n}$ kartų mažesnė negu kurio nors vieno iš tų matavimų paklaida. Vadinasi, norint 2 kartus padidinti matavimų tikslumą, reikia 4 kartus padidinti pilnutinę matavimų trukmę.

G.7. Dispersijos matavimo paklaida

Vėl tarkime, kad buvo atlikta n vienodos trukmės dalelių skaičiaus matavimų vienodomis sąlygomis. Dabar mūsų tikslas – apskaičiuoti atsitiktinio dydžio, kurio vertė lygi empirinei dispersijai (G.3.5), dispersiją σ_D^2 ir standartinį nuokrypį σ_D. Supaprastinsime šį uždavinį: tarkime, kad matavimų skaičius n yra toks didelis, kad (G.3.5) reiškinio vertė yra praktiškai lygi (G.3.3) reiškinio vertei:

$$D_\mathrm{e} \approx \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(x_i - \overline{x})^2 \equiv \frac{\Sigma}{n}, \tag{G.7.1}$$

$$\Sigma \equiv \sum_{i=1}^{n}(x_i - \overline{x})^2 \equiv \sum_{i=1}^{n} y_i\ ; \tag{G.7.2}$$

čia $y_i \equiv (x_i - \overline{x})^2$. Vadinasi, reikia apskaičiuoti n nepriklausomų atsitiktinių dydžių $Y_i \equiv (X_i - \overline{x})^2$ sumos (G.7.2) dispersiją σ_Σ^2. Kadangi visų tų dydžių dispersijos yra vienodos ir lygios σ_y^2, tai pagal bendrąją atsitiktinių dydžių funkcijos dispersijos išraišką (G.6.1) rašome:

$$\sigma_\Sigma^2 = n\sigma_y^2. \tag{G.7.3}$$

Pagal dalybos iš konstantos taisyklę (žr. G.6 skyrelį) empirinės dispersijos (G.7.1) dispersija lygi

$$\sigma_D^2 \approx \frac{\sigma_\Sigma^2}{n^2} = \frac{\sigma_y^2}{n}. \tag{G.7.4}$$

Dispersijos σ_y^2 negalima išreikšti dydžio X dispersija σ_x^2 pagal bendrąją atsitiktinio dydžio funkcijos dispersijos išraišką (G.6.1), nes dydžio $Y \equiv (X - \overline{x})^2$ išvestinė lygi $2\,(X - \overline{x})$, t. y. tos išvestinės standartinis nuokrypis (kuris yra lygus $2\sigma_x$) nėra daug mažesnis už jos vidurkį (kuris yra lygus nuliui). Dispersiją σ_y^2 skaičiuosime pagal (G.4.22):

$$\sigma_y^2 = \overline{y^2} - \overline{y}^2 \equiv \mu_4 - \mu_2^2 \equiv \mu_4 - \sigma_x^4\ ; \tag{G.7.5}$$

čia μ_k ($k = 2, 3, 4, \ldots$) yra dydžio X ***k-tasis centrinis momentas***, kuris apibrėžiamas šitaip:

$$\mu_k \equiv \overline{(x - \overline{x})^k}\ , \tag{G.7.6}$$

t. y. μ_k yra dydžio X nuokrypio nuo vidurkio k-tojo laipsnio vidurkis (pvz., dispersija σ_x^2 yra lygi antrajam centriniam momentui μ_2). Įrašę (G.7.5) į (G.7.4), matome:

$$\sigma_D^2 \approx \frac{1}{n}(\mu_4 - \sigma_x^4).$$

Tikslioji dydžio (G.3.5) dispersijos išraiška yra tokia[1]:

$$\sigma_D^2 = \frac{1}{n}\left(\mu_4 - \frac{n-3}{n-1}\sigma_x^4\right) \tag{G.7.7}$$

(kai n yra didelis, pastarųjų dviejų reiškinių vertės yra praktiškai vienodos). Apskaičiuosime atsitiktinio dydžio X ketvirtąjį centrinį momentą μ_4. Laikysime, kad dalelių skaičiaus vidurkis $\overline{x}$ yra didelis (didesnis negu 20). Tada dalelių skaičiaus skirstinį galima aproksimuoti Gauso skirstiniu, kurio tikimybės tankis yra (G.4.23). Tačiau, kad gautas rezultatas būtų bendresnis, naudosime bendresnę formulę (G.4.24):

$$f_X(x) = \frac{1}{\sigma_x\sqrt{2\pi}}\exp\left[-\frac{(x - \overline{x})^2}{2\sigma_x^2}\right]. \tag{G.7.8}$$

Tada pagal atsitiktinio dydžio funkcijos vidurkio bendrąją išraišką (G.4.20) rašome:

$$\mu_4 = \int_{-\infty}^{+\infty}(x - \overline{x})^4 f_X(x)\mathrm{d}x = \frac{1}{\sigma_x\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{+\infty}(x - \overline{x})^4 \exp\left[-\frac{(x - \overline{x})^2}{2\sigma_x^2}\right]\mathrm{d}x = \frac{1}{\sigma_x\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{+\infty} z^4 \exp\left(-\frac{z^2}{2\sigma_x^2}\right)\mathrm{d}z. \tag{G.7.9}$$

Integralas, kuris įeina į šį reiškinį, yra lygus [29]

$$\int_{-\infty}^{+\infty} z^4 \exp\left(-\frac{z^2}{2\sigma_x^2}\right)\mathrm{d}z = 3\sqrt{2\pi}\,\sigma_x^5.$$

Vadinasi,

$$\mu_4 = 3\sigma_x^4. \tag{G.7.10}$$

---

[1] Pagal tinklalapį <http://mathworld.wolfram.com/SampleVarianceDistribution.html>.

Įrašę (G.7.10) į (G.7.7), gauname atsitiktinio dydžio, kuris apibūdinamas Gauso skirstiniu (G.7.8), empirinės dispersijos dispersiją (t. y. empirinės dispersijos standartinės paklaidos kvadratą):

$$\sigma_D^2 = \frac{2\sigma_x^4}{n-1}. \tag{G.7.11}$$

Kadangi $\sigma_x \approx \sqrt{D_\mathrm{e}}$, tai, apskaičiavus dydžio X empirinę dispersiją D_e ir jos dispersiją σ_D^2, dydžio X empirinio standartinio nuokrypio σ_x paklaidą (standartinį nuokrypį) σ_σ galima apskaičiuoti pagal atsitiktinio dydžio funkcijos standartinio nuokrypio išraišką (G.6.1):

$$\sigma_\sigma = \frac{\sigma_D}{2\sqrt{D_\mathrm{e}}} \approx \frac{\sigma_D}{2\sigma_x}. \tag{G.7.12}$$

Pvz., galiojant (G.7.11) lygybei,

$$\sigma_\sigma = \frac{\sigma_x}{\sqrt{2(n-1)}}. \tag{G.7.13}$$

Jeigu dydis X yra dalelių skaičius, tada jo skirstinys yra Puasono, todėl $\sigma_x = \sqrt{\bar{x}}$ (žr. (G.4.14)). Vadinasi, šiuo atveju vietoj (G.7.11) ir (G.7.13) galima rašyti:

$$\sigma_D^2 = \frac{2\bar{x}^2}{n-1}; \tag{G.7.14}$$

$$\sigma_\sigma = \sqrt{\frac{\bar{x}}{2(n-1)}}. \tag{G.7.15}$$

G.8. Dalelių skaičiavimo eksperimentų optimizavimas

G.6 skyrelyje pateiktos paklaidų skaičiavimo taisyklės gali būti panaudotos optimizuojant matavimų trukmes taip, kad tiriamųjų dydžių atsitiktinės paklaidos būtų mažiausios. Aptarsime dažnai praktikoje atliekamų matavimų pavyzdį – ilgaamžio radioaktyviojo šaltinio spinduliuotės matavimas, kai vidutinės skaičiavimo spartos išraiškoje yra pastovus nuo šaltinio nepriklausantis dėmuo (tas dėmuo vadinamas „fonu“). Matavimų tikslas – nustatyti šaltinio spinduliuojamų dalelių skaičiavimo spartą R (šaltinio išspinduliuotų dalelių, kurios detektuojamos per laiko vienetą, skaičių). Ši skaičiavimo sparta apskaičiuojama kaip pilnutinės skaičiavimo spartos R_Σ (šaltinis ir fonas) ir fono dalelių skaičiavimo spartos R_f skirtumas:

$$R = R_\Sigma - R_\mathrm{f}. \tag{G.8.1}$$

Skaičiavimo sparta nustatoma skaičiuojant daleles tam tikrą laiką, o paskui dalelių skaičių dalijant iš matavimų trukmės. Tokie matavimai atliekami du kartus: vieną kartą su šaltiniu (matuojant R_Σ), o kitą kartą – be šaltinio (matuojant R_f). Vadinasi,

$$R_\Sigma = \frac{n_\Sigma}{T_\Sigma}, \quad R_\mathrm{f} = \frac{n_\mathrm{f}}{T_\mathrm{f}}; \tag{G.8.2}$$

$$R = \frac{n_\Sigma}{T_\Sigma} - \frac{n_\mathrm{f}}{T_\mathrm{f}}; \tag{G.8.3}$$

čia n_Σ yra pilnutinis šaltinio ir fono dalelių skaičius per laiką T_Σ, o n_f yra fono dalelių skaičius per laiką T_f. Skaičiuojant (G.8.3) reiškinio standartinį nuokrypį σ, galima pasinaudoti G.6 skyrelyje suformuluotomis taisyklėmis (dalybos iš konstantos ir dviejų dydžių skirtumo atvejai). Taigi, matome:

$$\sigma = \sqrt{\left(\frac{\sigma_\Sigma}{T_\Sigma}\right)^2 + \left(\frac{\sigma_\mathrm{f}}{T_\mathrm{f}}\right)^2}; \tag{G.8.4}$$

čia σ_Σ yra skaičiaus n_Σ standartinis nuokrypis, o σ_f yra skaičiaus n_f standartinis nuokrypis. Kadangi $\sigma_\Sigma^2 \approx n_\Sigma$, o $\sigma_\mathrm{f}^2 \approx n_\mathrm{f}$, tai (G.8.4) reiškinį galima užrašyti šitaip:

$$\sigma = \sqrt{\frac{n_\Sigma}{T_\Sigma^2} + \frac{n_\mathrm{f}}{T_\mathrm{f}^2}}.$$

Atsižvelgę į (G.8.2), gauname:

$$\sigma = \sqrt{\frac{R_\Sigma}{T_\Sigma} + \frac{R_\mathrm{f}}{T_\mathrm{f}}}. \tag{G.8.5}$$

Dabar tarkime, kad pilnutinis laikas $T = T_\Sigma + T_f$, per kurį reikia išmatuoti n_Σ ir n_f, yra fiksuotas. Tada laikai T_Σ ir T_f nėra nepriklausomi. Pvz., $T_\Sigma = T - T_f$. Todėl σ yra tik vieno kintamojo (T_f) funkcija:

$$\sigma = \sqrt{\frac{R_\Sigma}{T - T_f} + \frac{R_f}{T_f}}\,. \tag{G.8.6}$$

Apskaičiuosime optimalų laikų T_Σ ir T_f santykį, kuriam esant standartinis nuokrypis σ yra mažiausias. Žinome, kad funkcijos minimumo taške jos išvestinė yra lygi nuliui. Prilyginę nuliui (G.8.6) reiškinio išvestinę T_f atžvilgiu, gauname:

$$\frac{T}{T_f} = \sqrt{\frac{R_\Sigma}{R_f}} + 1\,. \tag{G.8.7}$$

Perkėlę vienetą į kairiąją lygybės pusę ir pasinaudoję tuo, kad $(T / T_f) - 1 = (T - T_f) / T_f = T_\Sigma / T_f$, gauname ieškomąjį optimalųjį laikų T_Σ ir T_f santykį:

$$\left.\frac{T_\Sigma}{T_f}\right|_{\text{opt}} = \sqrt{\frac{R_\Sigma}{R_f}}\,. \tag{G.8.8}$$

Vadinasi, kuo didesnis fonas, tuo didesnę matavimų laiko dalį reikia skirti fono matavimui. Tačiau fono niekada nereikia matuoti ilgiau negu šaltinio spinduliuotės ((G.8.8) reiškinys yra visada didesnis už 1, nes $R_\Sigma > R_f$).

Remdamiesi šiuo rezultatu, susiesime šaltinio spinduliuojamų dalelių skaičiavimo spartos standartinį nuokrypį σ ir pilnutinę matavimų trukmę T. Laikysime, kad fono matavimo trukmė T_f yra optimali, t. y. galioja (G.8.7) sąryšis. Išreiškę T_f iš (G.8.7), įrašę į (G.8.6) ir išreiškę $1 / T$, gauname:

$$\frac{1}{T} = \sigma^2 \frac{1}{(\sqrt{R_\Sigma} + \sqrt{R_f})^2} = \sigma^2 \frac{1}{(\sqrt{R + R_f} + \sqrt{R_f})^2}\,. \tag{G.8.9}$$

Apibrėžus šaltinio spinduliuojamų dalelių skaičiavimo spartos *santykinį* standartinį nuokrypį

$$\varepsilon \equiv \frac{\sigma}{R}\,, \tag{G.8.10}$$

(G.8.9) sąryšį galima užrašyti šitaip:

$$\frac{1}{T} = \varepsilon^2 \frac{R^2}{(\sqrt{R + R_f} + \sqrt{R_f})^2}\,. \tag{G.8.11}$$

Jeigu bent apytiksliai žinomos skaičiavimo spartos R ir R_f, tada (G.8.11) sąryšį galima taikyti skaičiuojant matavimų trukmę T, kuri reikalinga tam, kad būtų gautas duotasis matavimų tikslumas (t. y. duotoji santykinė paklaida ε). Tą patį sąryšį galima taikyti ir sprendžiant atvirkščią uždavinį: skaičiuojant mažiausią santykinę paklaidą ε, kurią įmanoma gauti esant duotai pilnutinei matavimų trukmei T (į kurią įeina ir fono matavimo trukmė). Iš (G.8.11) formulės išplaukia, kad, norint du kartus sumažinti santykinę paklaidą ε, reikia 4 kartus padidinti matavimų trukmę T.

Jeigu kai kuriuos matavimų įrangos parametrus (pvz., detektoriaus dydį, stiprintuvo jautrio ribą ir kt.) galima keisti, tada, optimizuojant tų parametrų vertes, reikia siekti, kad (G.8.11) reiškinys būtų kuo didesnis (t. y. kad pilnutinė matavimų trukmė T būtų kuo mažesnė). Panaudosime (G.8.11) sąryšį dviem ribiniais atvejais: kai šaltinio spinduliuojamų dalelių skaičiavimo sparta yra daug didesnė už fono dalelių skaičiavimo spartą ($R >> R_f$) ir kai galioja priešinga nelygybė, t. y. $R << R_f$. Jeigu $R >> R_f$, tada (G.8.11) lygybę galima pakeisti apytiksliu sąryšiu

$$\frac{1}{T} = \varepsilon^2 R\,. \tag{G.8.12}$$

Šiuo atveju fonas praktiškai neturi įtakos matavimų tikslumui ir reikia siekti, kad R būtų kuo didesnis. Jeigu $R << R_f$, tada (G.8.11) lygybę galima pakeisti apytiksliu sąryšiu

$$\frac{1}{T} = \varepsilon^2 \frac{R^2}{4R_f}\,. \tag{G.8.13}$$

Šiuo atveju reikia siekti, kad santykis R^2 / R_f būtų kuo didesnis. Pvz., tarkime, kad matavimų sąlygos pakeičiamos taip, kad R padidėja 1,5 karto, o R_f padidėja 2 kartus. Tada santykis R^2 / R_f padidėja $(1{,}5)^2 / 2 = 1{,}125$ karto. Vadinasi, toks matavimų sąlygų pokytis šiek tiek padidina šaltinio spinduliuotės matavimų tikslumą.

G.9. Intervalų tarp Puasono vyksmo įvykių skirstinys

Išvesime laiko intervalų tarp Puasono vyksmo įvykių tikimybės tankio funkciją $f(t)$. Kad būtų konkrečiau, kalbėsime apie laiko intervalus tarp dalelių, kurios pataiko į detektorių. Šie intervalai dažnai yra svarbūs matuojant dalelių skaičių (pvz., žr. 15.7.1 poskyrį). Tarkime, kad laiko momentu $t = 0$ į detektorių pataikė dalelė. Pagal tikimybės tankio apibrėžtį (žr. G.4.3 skyrelį) tikimybė, kad kita dalelė pataikys į detektorių per laiką nuo t iki $t + \mathrm{d}t$, yra lygi

$$\mathrm{d}P = f(t)\mathrm{d}t\,. \tag{G.9.1}$$

Kadangi teigiame, kad t yra intervalas tarp dviejų „gretimų“ dalelių, tai tikimybė $\mathrm{d}P$ yra lygi dviejų nepriklausomų įvykių tikimybių sandaugai: I įvykis – per laiko tarpą nuo 0 iki t nėra *nė vienos* dalelės; II įvykis – per laiko tarpą nuo t iki $t + \mathrm{d}t$ yra *bent viena* dalelė. Pirmąją tikimybę nusako Puasono skirstinio išraiška (G.4.12) su $k = 0$: $P_0 = \mathrm{e}^{-\bar{k}(t)} = \mathrm{e}^{-rt}$; čia $\bar{k}(t) = rt$ yra vidutinis dalelių skaičius per laiką t, o r yra vidutinis dalelių srautas (t. y. vidutinis dalelių skaičius per laiko vienetą). Antroji tikimybė gaunama, atėmus iš vieneto tikimybę, kad per laiko tarpą, kurio plotis $\mathrm{d}t$, nebus nė vienos dalelės. Pastaroji tikimybė skaičiuojama taip pat kaip anksčiau: $\mathrm{d}P_0 = \mathrm{e}^{-r\cdot\mathrm{d}t} = 1 - r\cdot\mathrm{d}t$. Vadinasi, tikimybė, kad per laiką $\mathrm{d}t$ bus bent viena dalelė, yra lygi $1 - (1 - r\cdot\mathrm{d}t) = r\cdot\mathrm{d}t$. Taigi,

$$\mathrm{d}P = \mathrm{e}^{-rt} r\mathrm{d}t\,. \tag{G.9.2}$$

Palyginę (G.9.1) ir (G.9.2), gauname intervalų tarp dalelių tikimybės tankio funkciją:

$$f(t) = r\mathrm{e}^{-rt}\,. \tag{G.9.3}$$

Matome, kad intervalų tarp dalelių skirstinys yra eksponentinis. Tikimybė, kad intervalas tarp dviejų dalelių bus didesnis už duotąjį laiką τ, yra lygi funkcijos (G.9.3) integralui nuo τ iki ∞:

$$P(t > \tau) = \int_{\tau}^{\infty} r\mathrm{e}^{-rt}\mathrm{d}t = \mathrm{e}^{-r\tau}\,. \tag{G.9.4}$$

Tikimybė, kad intervalas tarp dviejų dalelių bus mažesnis už duotąjį laiką τ, yra

$$P(t < \tau) = 1 - P(t > \tau) = 1 - \mathrm{e}^{-r\tau}. \tag{G.9.5}$$

Kadangi dalelės yra nepriklausomos, tai laiko τ, kuris įeina į (G.9.4) ir (G.9.5) formules, atskaitos momentas gali būti pasirinktas laisvai (tai nebūtinai turi būti ankstesniosios dalelės pataikymo į detektorių momentas). (G.9.4) nusako tikimybę, kad per laiką τ į detektorių nepataikys nė viena dalelė, o (G.9.5) – tikimybę, kad per laiką τ į detektorių pataikys bent viena dalelė.

Pagal (G.9.5) formulę galima apskaičiuoti duoto branduolio skilimo tikimybę per duotą laiką τ. Tam ankstesniuose samprotavimuose pakanka padaryti du neesminius pakeitimus: 1) vietoj detektuotų dalelių skaičiaus reikia kalbėti apie *skilimų* skaičių (abu šie skaičiai sutampa, jeigu detektoriaus absoliutusis efektyvumas lygus 100 %, t. y. jeigu detektorius visada generuoja signalą, kai skyla branduolys); 2) reikia nagrinėti bandinį, kurį sudaro tik vienas branduolys. Pagal radioaktyviojo skilimo dėsnį (9.1.1) tokio bandinio vidutinis skilimų skaičius per laiko vienetą yra lygus λ. Vadinasi, duotojo branduolio skilimo tikimybę per laiką τ nusako (G.9.5) reiškinys, kuriame $r = \lambda$:

$$p(\tau) = 1 - \mathrm{e}^{-\lambda\tau}\,. \tag{G.9.6}$$

Analogiškos formulės galioja ir kitų rūšių Puasono vyksmams, kurių pavyzdžiai buvo pateikti G.4.2 skyrelyje. Pvz., tikimybė, kad elektronas dujose nulėks atstumą d be susidūrimų su dujų molekulėmis, yra lygi

$$P(x > d) = \mathrm{e}^{-d/l}\,; \tag{G.9.7}$$

čia x yra elektrono kelias (Puasono vyksmo parametras), o l yra elektrono vidutinis laisvasis kelias dujose. Tikimybė, kad, dalelei praradus energijos kiekį E medžiagoje, nebus išlaisvintas nė vienas elektronas, yra

$$P(x > E) = \mathrm{e}^{-E/W}\,; \tag{G.9.8}$$

čia x yra dalelės energijos nuostoliai medžiagoje (Puasono vyksmo parametras), o W yra vidutinis dalelės energijos sumažėjimas, kuris atitinka vieną išlaisvintą elektroną. (G.9.8) galioja tik tada, kai W yra daug didesnis už atomo jonizacijos energiją[1].

---

[1] Ši sąlyga tinka blyksimiesiems detektoriams (kai W yra vidutinis dalelės energijos sumažėjimas, kuris atitinka vieną *iš fotodaugintuvo fotokatodo* išlaisvintą elektroną), tačiau netinka dujiniams ir puslaidininkiniams detektoriams (kai W yra vidutinis dalelės energijos sumažėjimas, kuris atitinka vieną *iš detektoriaus darbinės medžiagos atomo* išlaisvintą elektroną). Pvz., žr. 16.2.1 poskyris, 16.1 lentelė.

H priedas. Kai kurie termodinamikos sąryšiai analizuojant Vilsono kameros veikimą

Šiame priede išvestos kelios formulės, kurios reikalingos analizuojant Vilsono kameros veikimą (žr. 23.1 poskyrį).

H.1. Dujų šiluminė talpa

Kūno šiluminė talpa – tai šilumos kiekis, kurį reikia perduoti kūnui, kad jo temperatūra padidėtų 1 K. Šiluminės talpos vertė priklauso ne vien nuo kūno prigimties, bet ir nuo vyksmo, kurio metu kūnui perduodama šiluma. Taip yra todėl, kad kūno temperatūra nusako kūno vidinę energiją, kuri susijusi su atomų ir molekulių betvarkiu šiluminiu judėjimu. Tačiau kūno vidinė energija gali keistis ne vien dėl šilumos, bet ir dėl darbo, kurį atlieka išorinės jėgos. Šis teiginys – tai pirmasis termodinamikos dėsnis:

$$\mathrm{d}E = \mathrm{d}Q + \mathrm{d}A\,; \tag{H.1.1}$$

čia dE yra sistemos vidinės energijos pokytis, dQ yra sistemos gautas šilumos kiekis, o dA yra išorinių jėgų atliktas darbas. Minėtas darbas priklauso nuo konkretaus vyksmo. Pvz., jeigu sistemą sudaro dujos inde su stūmokliu, tada atliktas darbas yra proporcingas dujų tūrio pokyčiui vyksmo metu. Taigi, kūno temperatūros pokytis dT nėra vienareikšmiškai susijęs su gautu šilumos kiekiu dQ, o dar priklauso nuo vyksmo. Atitinkamai ir šiluminė talpa priklauso nuo vyksmo. Šiluminė talpa vyksmo λ atveju yra lygi

$$C_\lambda = \left(\frac{\mathrm{d}Q}{\mathrm{d}T}\right)_\lambda ; \tag{H.1.2}$$

čia indeksas „λ“ nusako vyksmą, kurio metu kūnui perduodama šiluma. Pvz., jeigu šilumos kiekis perduodamas esant pastoviam kūno tūriui V (izochorinis vyksmas), tada vartojamas indeksas „V“, o jeigu esant pastoviam slėgiui p (izobarinis vyksmas), tada vartojamas indeksas „p“. Toliau „šilumine talpa“ vadinsime ne pilnutinę šiluminę talpą, o ***molinę šiluminę talpą***: tai yra vieno molio medžiagos kiekio šiluminė talpa (dujų 1 molis atitinka N_A molekulių). Taigi, vartosime tokią šiluminės talpos apibrėžtį:

$$C_\lambda = \left(\frac{\mathrm{d}Q_\mu}{\mathrm{d}T}\right)_\lambda ; \tag{H.1.3}$$

čia dQ_μ yra vienam medžiagos moliui perduotas šilumos kiekis.

Šiluminės talpos išraišką paprasčiausia gauti idealiosioms dujoms. Idealiosios dujos – tai dujos, kurių molekulės nesąveikauja tarpusavyje. Norint realiąsias dujas aproksimuoti idealiosiomis, reikia, kad dujų molekulių vidutinė kinetinė energija būtų daug didesnė už jų tarpusavio sąveikos potencinę energiją. Dažniausiai ši sąlyga galioja, todėl realiąsias dujas galima aprašyti taip pat kaip idealiąsias. Išreikšime idealiųjų dujų izochorinę šiluminę talpą C_V. Pasinaudosime tuo, kad izochorinio vyksmo metu darbas neatliekamas (dA = 0). T. y. pagal pirmąjį termodinamikos dėsnį (H.1.1) dE = dQ, todėl pagal (H.1.3)

$$C_V = \left(\frac{\mathrm{d}E_\mu}{\mathrm{d}T}\right)_V ; \tag{H.1.4}$$

čia E_μ yra dujų vieno molio vidinė energija. Šią energiją reikia išreikšti temperatūra T. Pasinaudosime klasikinės statistinės mechanikos ***vienodo energijos pasiskirstymo dėsniu***. Šio dėsnio turinys yra toks. Jeigu izoliuotos sistemos pilnutinė energija lygi

$$E = \sum_{i=1}^{m} a_i p_i^2 + \sum_{i=1}^{n} b_i q_i^2 + U(p_{m+1}, p_{m+2}, \ldots, p_M, q_{n+1}, q_{n+2}, \ldots, q_M)\,, \tag{H.1.5}$$

kur q_i (i = 1, 2, ..., M) yra vadinamosios apibendrintosios koordinatės, p_i yra atitinkami apibendrintieji impulsai, o a_i ir b_i yra konstantos, tada *termodinaminės pusiausvyros sąlygomis vidutinė energija, kuri atitinka abiejų sumų kiekvieną dėmenį, yra lygi kT/2*.

Apibendrintosios koordinatės – tai nepriklausomi dydžiai, kurių vertės nusako sistemos momentinę konfigūraciją. Kai sistema yra dujos, sistemos konfigūraciją nusako visų dujų atomų padėtys erdvėje[1]. Apibendrintųjų koordinačių skaičius (dydis M (H.1.5) reiškinyje) vadinamas sistemos ***laisvės laipsnių skaičiumi***. Pvz., dviatomė molekulė (H_2, O_2, N_2, CO ir kt.) turi šešias apibendrintąsias koordi-

[1] Bendresniu atveju sistemos konfigūraciją nusako ne vien jos dalelių koordinatės, bet ir elektromagnetinio lauko erdvinis pasiskirstymas (pvz., žr. 1.3.1 poskyrį).

nates (šešis laisvės laipsnius) – trys masės centro Dekarto koordinatės, du kampai, kurie nusako molekulės posūkį aplink jos masės centrą, ir atstumas tarp atomų. Kiekvieną iš šių laisvės laipsnių atitinka vienas dėmuo pirmojoje (H.1.5) reiškinio sumoje (šie 6 dėmenys nusako molekulės kinetinę energiją). Antrojoje sumoje kiekvieną molekulę atitinka tik vienas dėmuo, kuris nusako dviejų atomų sąveikos potencinę energiją (atitinkama apibendrintoji koordinatė – tai atstumo tarp molekulės atomų nuokrypis nuo pusiausvirojo atstumo). Todėl, kai yra termodinaminė pusiausvyra, dviatomės molekulės vidutinė energija yra lygi $7kT/2$. Bendruoju atveju vienos molekulės vidutinė energija yra lygi $(i/2)kT$; čia i yra molekulės energijos išraiškos (H.1.5) kvadratinių dėmenų skaičius. Šis skaičius yra lygus laisvės laipsnių skaičiaus ir cheminių ryšių skaičiaus sumai. 1 molio vidinė energija yra lygi

$$E_\mu = N_A \frac{i}{2} kT = \frac{i}{2} RT\,; \tag{H.1.6}$$

čia $R = N_A k$ yra idealiųjų dujų konstanta. Įrašę (H.1.6) į (H.1.4), matome:

$$C_V = \frac{i}{2} R\,. \tag{H.1.7}$$

Tačiau praktikoje šiluminė talpa dažniausiai būna mažesnė už (H.1.7). Taip yra dėl to, kad molekulės sukamojo ir virpamojo judėjimo energija yra kvantuota. Jeigu pirmojo sužadintojo lygmens ir pagrindinio energijos lygmens skirtumas yra daug didesnis už kT, tada pagal Bolcmano pasiskirstymo funkciją (1.3.12) tikimybė, kad molekulė bus sužadinta, yra labai maža (praktiškai lygi nuliui). Tokiu atveju atitinkamas laisvės laipsnis yra „užšaldytas“, t. y. neturi įtakos šiluminei talpai. Atitinkamai daugiklis i (H.1.7) reiškinyje tampa mažesnis už anksčiau apibrėžtą vertę, kurią numato klasikinė statistinė mechanika. Kambario temperatūroje būna iš dalies „užšaldyti“ virpėjimo laisvės laipsniai, kurie susiję su atstumo tarp cheminiame ryšyje dalyvaujančių atomų kitimu. Taip yra todėl, kad atstumai tarp virpėjimo lygmenų dažniausiai būna (0,01–0,1) eV eilės, t. y. tos pačios eilės kaip dydis kT kambario temperatūroje (0,0254 eV). Tuo tarpu atstumai tarp rotacinių energijos lygmenų būna 10^{-4} eV eilės, t. y. daug mažesni už kT, todėl molekulių sukamąjį judėjimą galima aprašyti klasikinės mechanikos metodais. Pvz., jeigu dujos yra CO, tada, kai yra kambario temperatūra, (H.1.7) formulėje i apytiksliai lygus transliacinių ir rotacinių laisvės laipsnių skaičiui 3 + 2 = 5, t. y. maždaug dviem vienetais mažesnis už didžiausią galimą vertę 7 (nes beveik nevyksta virpesiai išilgai linijos, kuri jungia C ir O atomus).

Dabar išreikšime idealiųjų dujų izobarinę šiluminę talpą C_p. Izobarinio vyksmo metu keičiasi dujų tūris. Pažymėjus tūrio pokytį $\mathrm{d}V$, išorinių jėgų atliktas darbas yra lygus $-p\mathrm{d}V$; čia p yra dujų slėgis. Todėl pagal (H.1.1)

$$\mathrm{d}Q = \mathrm{d}E - \mathrm{d}A = \mathrm{d}E + p\mathrm{d}V\,; \tag{H.1.8}$$

$$\left(\frac{\mathrm{d}Q_\mu}{\mathrm{d}T}\right)_p = \frac{\mathrm{d}E_\mu}{\mathrm{d}T} + p\left(\frac{\partial V_\mu}{\partial T}\right)_p. \tag{H.1.9}$$

Pirmasis dėmuo šios lygybės dešiniojoje pusėje yra izochorinė šiluminė talpa (H.1.4), o antrasis proporcingas molinio tūrio dalinei išvestinei temperatūros atžvilgiu. Pagal idealiųjų dujų būsenos lygtį

$$pV = nRT\,; \tag{H.1.10}$$

čia n yra dujų kiekis (moliais), o V yra dujų užimamas tūris. Todėl molinis tūris yra lygus

$$V_\mu \equiv \frac{V}{n} = \frac{RT}{p}. \tag{H.1.11}$$

Įrašę (H.1.11) į (H.1.9), matome:

$$C_p = C_V + R\,. \tag{H.1.12}$$

Atliekant daugelį praktinių skaičiavimų, pakanka žinoti tik izobarinės ir izochorinės šiluminių talpų *santykį*. Pagal (H.1.12) šis santykis yra lygus

$$\gamma \equiv \frac{C_p}{C_V} = \frac{R}{C_V} + 1\,, \tag{H.1.13}$$

t. y.

$$C_V = \frac{R}{\gamma - 1}. \tag{H.1.14}$$

Kadangi molekulės laisvės laipsnių skaičius $i \geq 3$, tai pagal C_V išraišką (H.1.7) idealiųjų dujų izobarinės ir izochorinės šiluminių talpų santykis visada priklauso intervalui

$$1 < \gamma \leq \frac{5}{3}. \tag{H.1.15}$$

Didžiausioji γ vertė (5/3) pasiekiama, kai dujų molekulės yra vienatomės (tada molekulės laisvės laipsnių skaičius yra mažiausias ir lygus 3).

Kadangi šiluminė talpa yra adityvus dydis, tai pilnutinė duotojo dujų kiekio talpa yra lygi molinės šiluminės talpos ir moliais išreikšto dujų kiekio sandaugai. Todėl dviejų dujų mišinio molinė izochorinė šiluminė talpa yra lygi

$$C_V = \frac{n_a C_{Va} + n_b C_{Vb}}{n_a + n_b}; \tag{H.1.16}$$

čia indeksai „a“ ir „b“ nusako dujų rūšį, o n_a ir n_b yra kiekvienos rūšies dujų kiekis. Pagal (H.1.10) $n_a/n_b = p_a/p_b$, kur p_a ir p_b yra dujų mišinio komponenčių daliniai slėgiai. Todėl (H.1.16) reiškinyje dujų kiekius galima pakeisti atitinkamais daliniais slėgiais:

$$C_V = \frac{p_a C_{Va} + p_b C_{Vb}}{p_a + p_b}; \tag{H.1.17}$$

Įrašę šiluminių talpų C_V, C_{Va} ir C_{Vb} išraiškas atitinkamais talpų santykiais γ, γ_{Va} ir γ_{Vb} (žr. (H.1.14)) į (H.1.17), gauname dujų mišinio talpų santykio išraišką abiejų komponenčių talpų santykiais:

$$\frac{1}{\gamma - 1} = \frac{1}{\gamma_a - 1} \cdot \frac{p_a}{p_a + p_b} + \frac{1}{\gamma_b - 1} \cdot \frac{p_b}{p_a + p_b}. \tag{H.1.18}$$

H.2. Adiabatinis dujų plėtimasis. Puasono dėsnis

Dabar išnagrinėsime adiabatinį dujų plėtimąsi. ***Adiabatinis vyksmas*** – tai toks vyksmas, kurio metu nėra šilumos apykaitos tarp dujų ir jų aplinkos ($dQ = 0$). Praktikoje tai reiškia, kad vyksmas turi būti pakankamai greitas. Kadangi plėtimosi metu atliekamas darbas (kinta tūris), tai pagal pirmąjį termodinamikos dėsnį (H.1.1) adiabatinio vyksmo metu turi keistis ir dujų vidinė energija. Pagal (H.1.8) molinės vidinės energijos pokytis adiabatinio plėtimosi metu yra lygus

$$dE_\mu = -p\,dV_\mu. \tag{H.2.1}$$

Antra vertus, žinome, kad idealiųjų dujų vidinė energija yra proporcinga temperatūrai, o proporcingumo koeficientas yra lygus izochorinei šiluminei talpai (žr. (H.1.6) ir (H.1.7)). T. y.

$$dE_\mu = C_V\,dT. \tag{H.2.2}$$

Sujungę (H.2.1) ir (H.2.2), gauname:

$$C_V\,dT = -p\,dV_\mu. \tag{H.2.3}$$

Išreiškę p iš idealiųjų dujų būsenos lygties (H.1.11), matome:

$$p = \frac{RT}{V_\mu}. \tag{H.2.4}$$

Įrašius (H.2.4) į (H.2.3),

$$C_V\,dT = -\frac{RT}{V_\mu}\,dV_\mu$$

arba

$$C_V \frac{dT}{T} = -R\frac{dV_\mu}{V_\mu}. \tag{H.2.5}$$

Dabar šią lygtį integruosime nuo pradinės dujų būsenos (prieš adiabatinį plėtimąsi) iki galutinės (po adiabatinio plėtimosi). Dujų temperatūrą ir molinį tūrį prieš adiabatinį plėtimąsi žymėsime T_1 ir $V_{\mu 1}$, o temperatūrą ir molinį tūrį po adiabatinio plėtimosi žymėsime T_2 ir $V_{\mu 2}$. Vadinasi,

$$C_V \int_{T_1}^{T_2} \frac{dT}{T} = -R \int_{V_{\mu 1}}^{V_{\mu 2}} \frac{dV_\mu}{V_\mu}. \tag{H.2.6}$$

Apskaičiavus integralus,

$$C_V \ln\frac{T_2}{T_1} = -R\ln\frac{V_{\mu 2}}{V_{\mu 1}} \tag{H.2.7}$$

arba

$$\frac{T_2}{T_1} = \left(\frac{V_{\mu 1}}{V_{\mu 2}}\right)^{R/C_V} = \left(\frac{V_1}{V_2}\right)^{R/C_V}; \tag{H.2.8}$$

čia V_1 ir V_2 yra pilnutiniai dujų tūriai prieš adiabatinį plėtimąsi ir po jo (molinių tūrių santykis yra lygus pilnutinių tūrių santykiui, nes laikoma, kad plėtimosi metu dujų kiekis nekinta). Pagal izochorinės ir izobarinės šiluminių talpų sąryšį (H.1.12), $R = C_p - C_V$. Įrašę tai į (H.2.8), išvedame:

$$\frac{T_2}{T_1} = \left(\frac{V_1}{V_2}\right)^{\gamma - 1}; \tag{H.2.9}$$

čia γ yra izobarinės ir izochorinės šiluminių talpų santykis:

$$\gamma = \frac{C_p}{C_V}. \tag{H.2.10}$$

(H.2.8) arba (H.2.9) sąryšis vadinamas ***Puasono dėsniu***.

H.3. Pusiausvirasis garų slėgis virš skysčio lašo. Kelvino formulė

Visų pirma išsiaiškinsime, ar garų būsena po adiabatinio plėtimosi vyksmo yra pusiausviroji kondensavimosi atžvilgiu, ir kokią įtaką šiai pusiausvyrai turi skysčio lašų matmenys. Teigiame, kad garai kondensuojasi ant kondensavimosi centrų (pvz., dulkių), kurių skaičius N yra duotas. Be to, tarkime, kad visų lašų, į kuriuos kondensuojasi garai, spinduliai r yra vienodi (lašai yra sferiniai). Po plėtimosi yra žinomi garų slėgis p_2' ir temperatūra T_2'. Duoto slėgio ir duotos temperatūros dujų būsena yra pusiausviroji tada, kai tos būsenos sistemos laisvosios Gibso energijos dalinės išvestinės visų vidinių parametrų atžvilgiu yra lygios nuliui. Jeigu tai yra laisvosios Gibso energijos minimumo taškas, tada pusiausvyra yra stabili (t. y., nedaug sutrikdžius pusiausvyrą ir palikus sistemą savieigai, sistema savaime grįš į pusiausvyros būseną), o jeigu maksimumo, tada nestabili (t. y., nedaug sutrikdžius pusiausvyrą ir palikus sistemą savieigai, nuokrypis nuo nestabilios pusiausvyros didės tol, kol sistema nepasieks stabilios pusiausvyros būsenos). Aptariamuoju atveju „vidinis parametras“ – tai skysčio lašelių spindulys r. Tačiau r yra vienareikšmiškai susijęs su skysčio tūriu V_s:

$$V_s = N\frac{4}{3}\pi r^3, \tag{H.3.1}$$

todėl vidiniu parametru laikysime V_s. Taigi, reikia gauti laisvosios Gibso energijos išraišką trimis dydžiais: slėgiu p, temperatūra T ir skysčio tūriu V_s. Bendroji laisvosios Gibso energijos išraiška yra šitokia:

$$G = E + pV - T\Phi; \tag{H.3.2}$$

čia V yra visos sistemos (skystis + garai) tūris, o Φ yra sistemos entropija. Tačiau praktikoje, išreiškiant laisvąją Gibso energiją būsenos parametrais, patogiau naudotis tuo, kad laisvosios Gibso energijos pokytis bet kokio grįžtamojo vyksmo metu[1] yra pilnasis diferencialas:

$$\mathrm{d}G = V\mathrm{d}p - \Phi\mathrm{d}T + \frac{\partial E}{\partial V_s}\mathrm{d}V_s. \tag{H.3.3}$$

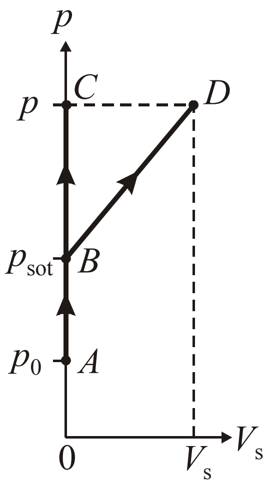
Tai reiškia, kad laisvąją Gibso energiją galima atskaityti nuo jos vertės, kuri atitinka kurią nors tiksliai apibrėžtą pusiausvyros būseną su žinomais $p = p_0$, $T = T_0$ ir $V_s = V_{s0}$: pakanka integruoti (H.3.3) reiškinį išilgai bet kokios taškus (p_0, T_0, V_{s0}) ir (p, T, V_s) jungiančios linijos, kuri atitinka tam tikrą grįžtamąjį vyksmą (tada integravimo rezultatas nepriklauso nuo pasirinktojo integravimo kelio). Tarkime, kad atskaitos būsenos garų temperatūra yra lygi galutinei temperatūrai ($T_0 = T$), skysčio kiekis yra lygus nuliui ($V_{s0} = 0$), o slėgis neviršija sočiųjų garų slėgio ($p_0 \le p_{sot}(T)$). ***Sočiųjų garų slėgis*** – tai pusiausvirasis garų slėgis dvifazėje skysčio ir jo garų sistemoje (t. y. toks garų slėgis, kai skysčio ir garų kiekių santykis nekinta). Kadangi $T = T_0$, tai integravimo metu galima laikyti, kad $\mathrm{d}T = 0$ (t. y. integravimo kelias priklauso kintamųjų p ir V_s plokštumai), todėl laisvoji Gibso energija yra lygi

[1] Grįžtamasis vyksmas – tai vyksmas, kurio metu sistema visą laiką yra termodinaminės pusiausvyros būsenos (t. y. pusiausvirasis vyksmas). Vadinasi, tik be galo lėti vyksmai gali būti idealiai grįžtamieji. Aišku, kad tokių vyksmų realizuoti neįmanoma, nes jie truktų be galo ilgai. Jeigu realusis (baigtinės trukmės) vyksmas vadinamas „grįžtamuoju“, tai reiškia, kad jis yra pakankamai lėtas, todėl paklaidos, kurios atsiranda dėl prielaidos apie jo grįžtamumą, yra mažos.

$$G = \int_{p_0}^{p} V\mathrm{d}p + \Delta E\,;$$

čia ΔE yra sistemos vidinės energijos pokytis, kai dalis garų susikondensuoja į V_s tūrio skystį esant pastoviems temperatūrai ir slėgiui. Mūsų tikslas – nustatyti skysčio ir garų pusiausvyros sąlygas, kai $p > p_\mathrm{sot}(T)$. Todėl anksčiau užrašytą G išraišką panaudosime skaičiuodami laisvąją Gibso energiją dviem atvejais: $V_\mathrm{s} = 0$ (atitinkamą laisvąją Gibso energiją žymėsime G_0) ir $V_\mathrm{s} > 0$ (atitinkamą laisvąją Gibso energiją žymėsime G). Skirtumas $\Delta G = G - G_0$ nusakys laisvosios Gibso energijos pokytį, kai dalis garų susikondensuoja į V_s tūrio skystį, esant pastoviems slėgiui p ir temperatūrai T. Pagal ΔG priklausomybę nuo V_s bus galima nustatyti, ar būsena su duotuoju V_s yra stabili esant duotiesiems p ir T. Jeigu ji nebus stabili, tada pagal dalinės išvestinės $\partial\Delta G/\partial V_\mathrm{s}$ ženklą bus galima nustatyti, kuria kryptimi keisis V_s (t. y. ar vyraus garų kondensacija, ar skysčio garavimas).

H.1 pav. pavaizduoti du galimi integravimo keliai. Skaičiuojant G_0 (kai galutinės būsenos $V_\mathrm{s} = 0$), integravimo kelias yra ABC. Skaičiuojant G (kai galutinės būsenos $V_\mathrm{s} > 0$), integravimo kelias yra ABD. Kaip matome, abu integravimo keliai turi bendrą atkarpą AB. Taip yra todėl, kad, kol $p \le p_\mathrm{sot}(T)$, pusiausvyros būsenos skysčio kiekis turi likti nulinis. Kadangi mus domina tik skirtumas $G - G_0$, tai integralo dalis, kuri atitinka atkarpą AB, susiprastins. Todėl laisvąją Gibso energiją atskaitysime nuo jos vertės, kai $p = p_\mathrm{sot}(T)$, t. y.



H.1 pav. Integravimo kelias plokštumoje (V_s, p)

$$G = \int_{p_\mathrm{sot}}^{p} V\mathrm{d}p + \Delta E\,. \tag{H.3.4}$$

Kai $V_\mathrm{s} = 0$, integravimo kelią nusako atkarpa BC (žr. H.1 pav.). Šiuo atveju sistemos tūris V yra lygus garų tūriui V_g, kurį galima skaičiuoti pagal idealiųjų dujų būsenos lygtį (H.1.10):

$$V_\mathrm{g} = n_\mathrm{g}\frac{RT}{p}\,; \tag{H.3.5}$$

čia n_g yra garų kiekis (išreikštas moliais). Be to, šiuo atveju $\Delta E = 0$. Įrašę (H.3.5) ir $\Delta E = 0$ į (H.3.4), apskaičiavę integralą ir atsižvelgę į tai, kad šiuo atveju garų kiekis n_g yra lygus pilnutiniam medžiagos kiekiui n_Σ, gauname:

$$G_0 = n_\Sigma RT \ln\frac{p}{p_\mathrm{sot}}\,. \tag{H.3.6}$$

Kai $V_\mathrm{s} > 0$, tada galutinę sistemos būseną atitinka taškas D (žr. H.1 pav.). Sistemos tūris V yra lygus garų tūrio V_g ir skysčio tūrio V_s sumai: $V = V_\mathrm{g} + V_\mathrm{s}$. Atitinkamai laisvosios Gibso energijos išraišką (H.3.4) reikia rašyti šitaip:

$$G = \int_{p_\mathrm{sot}}^{p} (V_\mathrm{g} + V_\mathrm{s})\mathrm{d}p + \Delta E = \int_{p_\mathrm{sot}}^{p} V_\mathrm{g}\mathrm{d}p + \int_{p_\mathrm{sot}}^{p} V_\mathrm{s}\mathrm{d}p + \Delta E\,. \tag{H.3.7}$$

Tarkime, kad skysčio tūris yra daug mažesnis už garų tūrį ($V_\mathrm{s} << V_\mathrm{g}$). Tada antrojo integralo galima nepaisyti. Tai reiškia, kad integravimo kelias nuo taško B iki galutinio taško D (žr. H.1 pav.) beveik neturi įtakos G vertei: galima pasirinkti bet kokį kelią, kuriame $V_\mathrm{s} << V_\mathrm{g}$ (net ir tada, kai tame kelyje skystis ir garai nėra pusiausvyros būsenos). Pirmasis integralas, kaip ir anksčiau, skaičiuojamas, remiantis reikalavimu, kad visų integravimo kelio taškų garų būsena turi atitikti idealiųjų dujų lygtį (H.3.5). Tai reiškia, kad pirmojo integralo išraiška yra analogiška (H.3.6) išraiškai: pakanka tik pakeisti pilnutinį medžiagos kiekį n_Σ garų kiekiu n_g (kuris yra skysčio tūrio V_s funkcija). Tada gauname:

$$G = n_\mathrm{g}RT\ln\frac{p}{p_\mathrm{sot}} + \Delta E\,. \tag{H.3.8}$$

Aptariamuoju atveju dėmuo ΔE yra susijęs su paviršiaus įtempiu:

$$\Delta E = N\cdot 4\pi r^2\sigma\,; \tag{H.3.9}$$

čia σ yra paviršiaus įtempis (skysčio vidinės energijos pokytis padidinus jo plotą vienetu ir esant pastoviems skysčio tūriui, slėgiui ir temperatūrai).

Paviršiaus įtempį galima paaiškinti šitaip. Skystyje tarp molekulių veikia artisiekės traukos jėgos. Dėl šių traukos jėgų kiekvienai kaimyninių molekulių porai galima priskirti tam tikrą neigiamą potencinę energiją. Skysčio vidinė energija gaunama sudėjus visų tokių porų potencines energijas ir visų molekulių kinetines energijas. Jeigu skysčio tūris būtų be galo didelis, tada visų molekulių aplinka būtų vienoda, todėl kiekvieną molekulę atitinkantis porų skaičius būtų lygus pusei kiekvieną molekulių supančių aplinkinių molekulių skaičiaus. Vadinasi, potencinė energija būtų adityvus dydis. Tačiau baigtinio tūrio skystis visada turi paviršių, kuriame esančių molekulių aplinka skiriasi nuo skysčio gilumoje esančių molekulių aplinkos. Pvz., skysčio ir garų riboje esančios skysčio molekulės sąveikauja su maždaug du kartus mažesniu molekulių skaičiumi negu kitos skysčio molekulės. T. y. kiekvienos skysčio paviršiuje esančios molekulės vidutinės potencinės energijos modulis yra mažesnis negu kitų skysčio molekulių. Atitinkamai pilnutinė skysčio potencinė energija yra šiek tiek didesnė už vertę, kuri būtų gauta tiesiog padauginus skysčio vidinių molekulių vidutinę potencinę energiją iš visų skysčio molekulių skaičiaus. Dėmuo ΔE nusako šią pilnutinės potencinės energijos pataisą. Dėmuo ΔE gali virsti darbu. Pvz., paviršiaus įtempis gali pakelti skystį į tam tikrą aukštį kapiliariniu vamzdeliu arba priversti netaisyklingos formos skysčio lašą susitelkti į taisyklingą sferą. Būtent todėl jis priskiriamas vadinamajai „laisvajai energijai“ (taip vadinama vidinės energijos dalis, kuriai nėra apribojimų virsti darbu).

Atėmę (H.3.6) reiškinį iš (H.3.8) ir atsižvelgę į (H.3.9), gauname laisvosios Gibso energijos pokytį, kai dalis garų izotermiškai ir izobariškai susikondensuoja į N sferinių lašelių, kurių kiekvieno spindulys r:

$$\Delta G = (n_\mathrm{g} - n_\Sigma)RT\ln\frac{p}{p_\mathrm{sot}} + N\cdot 4\pi r^2\sigma = -n_\mathrm{s}RT\ln\frac{p}{p_\mathrm{sot}} + N\cdot 4\pi r^2\sigma\,; \tag{H.3.10}$$

čia $n_\mathrm{s} = n_\mathrm{g} - n_\Sigma$ yra skysčio kiekis (moliais), kurį galima išreikšti lašelių skaičiumi N ir jų tūriu:

$$n_\mathrm{s} = \frac{m_\mathrm{s}}{M} = \frac{\rho V_\mathrm{s}}{M} = N\frac{\rho}{M}\cdot\frac{4}{3}\pi r^3\,; \tag{H.3.11}$$

čia m_s yra pilnutinė skysčio lašelių masė, M yra skysčio molinė masė, ρ yra skysčio tankis. Įrašę (H.3.11) į (H.3.10) ir pasinaudoję tuo, kad $R = kN_\mathrm{A}$, gauname:

$$\Delta G = N\left(-\frac{\rho}{M}\cdot\frac{4}{3}\pi r^3 RT\ln\frac{p}{p_\mathrm{sot}} + 4\pi r^2\sigma\right) = N\left(-\frac{4\pi r^3 kT}{3\upsilon}\ln S + 4\pi r^2\sigma\right); \tag{H.3.12}$$

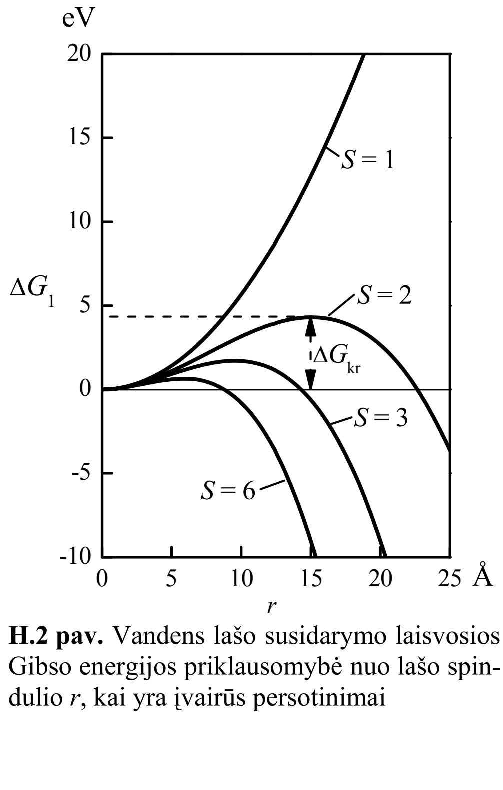
čia υ yra vienos skysčio molekulės užimamas tūris, o S yra vadinamasis ***persotinimas***, kuris apibrėžiamas kaip garų slėgio ir sočiųjų garų slėgio toje pačioje temperatūroje santykis:

$$S = \frac{p}{p_\mathrm{sot}}. \tag{H.3.13}$$

Pagal (H.3.12) laisvosios Gibso energijos pokytis, kuris susijęs su vieno lašo susidarymu, yra lygus

$$\Delta G_1 = -\frac{4\pi r^3 kT}{3\upsilon}\ln S + 4\pi r^2\sigma\,. \tag{H.3.14}$$

H.2 pav. yra pavaizduotos vandens lašo susidarymo energijos ΔG_1 priklausomybės nuo r kambario temperatūroje ($T = 298$ K, $\upsilon = 2{,}99\cdot 10^{-29}$ m^3, $\sigma = 0{,}072$ J/m^2), kai yra keturi skirtingi persotinimai. Matome, kad visos priklausomybės turi minimumą taške $r = 0$. Vadinasi, sistemos būsena, kai nėra vandens lašų, yra stabilios pusiausvyros būsena. Kai $S > 0$, tos priklausomybės turi maksimumą, kuris atitinka nestabilios pusiausvyros būseną. Atitinkamą lašo spindulį vadinsime „kritiniu spinduliu“ ir žymėsime r_k. Kai $r = r_\mathrm{k}$, lašas yra pusiausvyros būsenos su garais (t. y. jo spindulys nekinta). Tačiau, nedaug pakitus lašo spinduliui, jis pradeda mažėti arba didėti tol, kol nepasiekiama stabilios pusiausvyros būsena: jeigu spindulys sumažėja, tada lašas išgaruoja, o jeigu padidėja, tada lašas pradeda didėti (kai r yra ypač didelis, nustoja galioti prielaida $V_\mathrm{s} << V_\mathrm{g}$, todėl (H.3.14) lygybė netinka aprašant didelių lašų stabilios pusiausvyros sąlygas). Kritinį lašo spindulį galima išreikšti pasinaudojus tuo, kad funkcijos maksimumo taške jos išvestinė lygi nuliui:



H.2 pav. Vandens lašo susidarymo laisvosios Gibso energijos priklausomybė nuo lašo spindulio r, kai yra įvairūs persotinimai

$$\left.\frac{\partial \Delta G_1}{\partial r}\right|_{r=r_k} = 0 . \qquad \text{(H.3.15)}$$

Įrašę (H.3.14) į (H.3.15) lygtį ir išreiškę r, gauname:

$$r_k = \frac{2\sigma\upsilon}{kT\ln S} . \qquad \text{(H.3.16a)}$$

Esant kambario temperatūrai ($T = 298$ K), vandens lašo kritinio spindulio išraišką (H.3.16a) galima užrašyti šitaip:

$$r_k = \frac{1.05\cdot 10^{-9}}{\ln S} \quad [\text{m}]. \qquad \text{(H.3.16b)}$$

Pvz., kai $S = 2$, kambario temperatūroje vandens lašo kritinis spindulys yra $r_k \approx 15$ Å (žr. H.2 pav.). Didėjant persotinimui S, kritinis spindulys r_k mažėja. Kai $S = 1$, $r_k \to \infty$, t. y. tik plokščias skysčio paviršius gali būti pusiausvyros būsenos su garais. Didžiausia ΔG_1 vertė, kai duotas persotinimas S, gaunama įrašius r_k išraišką (H.3.16a) į (H.3.14):

$$\Delta G_{kr} = \frac{16\pi\sigma^3\upsilon^2}{3(kT\ln S)^2} . \qquad \text{(H.3.17)}$$

Pvz., kai $S = 2$, kambario temperatūroje didžiausia vandens lašo susidarymo energija yra lygi maždaug 4,3 eV (žr. H.2 pav.).

Išreiškus $S \equiv p/p_{sot}$ iš (H.3.16a), gaunamas garų slėgis, kuriam esant spindulio r lašas yra pusiausvyros būsenos su savo garais:

$$p_r = p_{sot}\exp\left(\frac{2\sigma\upsilon}{kTr}\right). \qquad \text{(H.3.18)}$$

Tai yra vadinamoji ***Kelvino formulė***.

H.4. Pusiausvirasis garų slėgis virš įelektrinto skysčio lašo

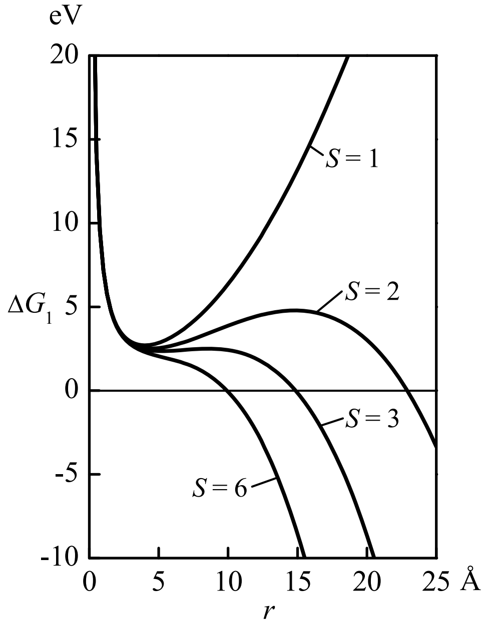
Dabar išvesime įelektrinto skysčio lašo pusiausvyros sąlygas. Tarkime, kad dujų molekulė yra netekusi vieno elektrono (pvz., dėl jonizuojančiosios spinduliuotės poveikio). T. y. turime molekulinį joną, kurio elektros krūvis yra lygus $+e$. Toks jonas sukurs aplink save nevienalytį elektrinį lauką. Yra žinoma, kad nevienalyčiame elektriniame lauke elektrinį dipolį veikianti pilnutinė (atstojamoji) jėga yra nukreipta lauko stiprėjimo kryptimi. Todėl jonas traukia link savęs dujų molekules, kurios turi pastovųjį dipolinį momentą (pvz., vandens garų molekules). Šitaip susidaro skysčio lašas. Po tam tikro laiko, kuris priklauso nuo skysčio savitojo elektrinio laidžio, elektros krūvis pasiskirstys taip, kad elektrinio lauko stipris skysčio tūryje būtų lygus nuliui. T. y. krūvis pasiskirsto lašo paviršiuje.

Išreiškiant įelektrinto lašo laisvąją Gibso energiją ΔG_1, (H.3.14) reiškinyje reikia pridėti lašo krūvio elementų Kulono sąveikos potencinę energiją. r spindulio sferos paviršiuje tolygiai pasiskirsčiusio elektros krūvio e potencinė energija yra lygi

$$\Delta E_e = \frac{e^2}{8\pi\varepsilon_0 r} . \qquad \text{(H.4.1)}$$

Vadinasi, įelektrinto lašo laisvoji Gibso energija yra lygi

$$\begin{aligned}\Delta G_1 &= -\frac{4\pi r^3 kT}{3\upsilon}\ln S + 4\pi r^2\sigma + \Delta E_e = \\ &= -\frac{4\pi r^3 kT}{3\upsilon}\ln S + 4\pi r^2\sigma + \frac{e^2}{8\pi\varepsilon_0 r}.\end{aligned} \qquad \text{(H.4.2)}$$



H.3 pav. Vandens lašo, kurio elektros krūvis e, susidarymo laisvosios Gibso energijos priklausomybė nuo lašo spindulio r, kai yra įvairūs persotinimai

H.3 pav. pavaizduotos vandens lašo, kurio elektros krūvis e, susidarymo energijos ΔG_1 priklausomybės nuo r kambario temperatūroje ($T = 298$ K, $\upsilon = 2{,}99\cdot 10^{-29}$ m^3, σ=0,072J/m^2). Matome, kad, kai persotinimas yra pakankamai mažas, egzistuoja dvi pusiausvyros būsenos (viena – stabilioji, o kita – nestabilioji), tačiau šiuo atveju stabilioji pusiausvyra atitinka didesnį už nulį lašelio spindulį (plg. su H.2 pav.). Prilyginus nuliui (H.4.2) reiškinio išvestinę r atžvilgiu ir išreiškus ln S, gaunamas persotinimo, kuriam esant r spindulio lašai yra pusiausvyros būsenos su garais, natūralusis logaritmas:

$$\ln S = \left(\frac{2\sigma}{r} - \frac{e^2}{32\pi^2 \varepsilon_0 r^4} \right) \frac{\upsilon}{kT} . \tag{H.4.3}$$

H.3 pav. matome, kad, kai persotinimas yra didesnis, pusiausvirojo spindulio nėra, t. y. lašas nuolat didėja. Išreikšime kritinį persotinimą S_{kr}, kurį viršijus visų matmenų lašai tampa nestabilūs. H.3 pav. akivaizdu, kad kritinis persotinimas atitinka tokią priklausomybę $\Delta G_1(r)$, kurios išvestinė perlinkio taške yra lygi nuliui (t. y. tame perlinkio taške galioja (H.4.3) sąryšis). Prilyginę nuliui (H.4.2) reiškinio antrąją išvestinę r atžvilgiu, įrašę į tą lygtį ln S išraišką (H.4.3) ir išreiškę r, gauname pusiausvirąjį lašo spindulį, kai yra kritinis persotinimas:

$$r_0 = \left(\frac{e^2}{16\pi^2 \varepsilon_0 \sigma} \right)^{1/3} . \tag{H.4.4}$$

H.3 pav. sąlygomis $r_0 = 6{,}341$ Å. Įrašę (H.4.4) į (H.4.3), išvedame kritinio persotinimo natūralųjį logaritmą:

$$\ln S_{\mathrm{kr}} = \frac{3\sigma\upsilon}{2r_0 kT} = \left(\frac{16\pi^2 \varepsilon_0}{e^2} \right)^{1/3} \frac{3\sigma^{4/3}\upsilon}{2kT} . \tag{H.4.5}$$

H.3 pav. sąlygomis ln $S_{\mathrm{kr}} = 1{,}238$, t. y. $S_{\mathrm{kr}} = 3{,}45$.

I priedas. Mažos energijos elektronų ir jonų sąveikos skerspjūviai dujose

Apytiksliai išreikšime jonų ir elektronų sąveikos su dujų molekulėmis skerspjūvius, kurie lemia krūvininkų laisvąjį kelią dujose (žr. (16.2.5) formulę). Taikysime geometrinį artinį. Krūvininką (joną arba elektroną) pakeisime r spindulio rutuliu, o dujų molekules – R spindulio rutuliais. Pasirinkime pakankamai ilgą laiko tarpą Δt, per kurį krūvininkas daug kartų susiduria su molekulėmis. Aplink krūvininko trajektoriją, kuri atitinka tą laiko tarpą, sudarykime spindulio $r + R$ cilindrinį „vamzdelį“, kurio ašimi juda krūvininkas[1] (žr. I.1 pav.). Taikant geometrinį artinį, krūvininkas susiduria tik su tomis molekulėmis, kurių centrai yra to vamzdelio viduje. Todėl susidūrimų skaičius per laiką Δt yra lygus tų molekulių skaičiui, t. y. vamzdelio tūrio ΔV ir molekulių koncentracijos n sandaugai. Vamzdelio tūris yra lygus jo ilgio l ir skerspjūvio ploto $\pi(r + R)^2$ sandaugai:

$$\Delta V = l \cdot \pi(r + R)^2 . \tag{I.1}$$

Krūvininko kelias per laiką Δt yra lygus $\upsilon_\Sigma \cdot \Delta t$; čia υ_Σ yra krūvininko pilnutinis greitis. Tačiau, skaičiuojant susidūrimų skaičių, bendruoju atveju reikia atsižvelgti į tai, kad dujų molekulės taip pat juda. Todėl, skaičiuojant minėtojo vamzdelio ilgį l, vietoj krūvininko tikrojo greičio reikia naudoti vidutinį ***reliatyvųjį*** krūvininko ir dujų molekulių greitį υ_r, kuris apibrėžiamas kaip krūvininko ir dujų molekulės greičių vektorinio skirtumo modulio vidurkis: $\upsilon_r = \langle | \boldsymbol{v}_\Sigma(t) - \boldsymbol{v}_d(t) | \rangle$; čia $\boldsymbol{v}_\Sigma(t)$ yra krūvininko momentinio greičio vektorius, $\boldsymbol{v}_d(t)$ yra dujų molekulės momentinio greičio vektorius, o simboliai „$\langle ... \rangle$“ žymi vidurkį. Taigi, $l = \upsilon_r \Delta t$ ir

$$\Delta V = \upsilon_r \Delta t \cdot \pi(r + R)^2 . \tag{I.2}$$

Vidutinis susidūrimų dažnis yra lygus susidūrimų skaičiaus per laiką Δt ir to laiko santykiui:

$$f = \frac{\Delta V n}{\Delta t} = \upsilon_r n \cdot \pi(r + R)^2 = \upsilon_r \frac{p}{kT} \cdot \pi(r + R)^2 ; \tag{I.3}$$

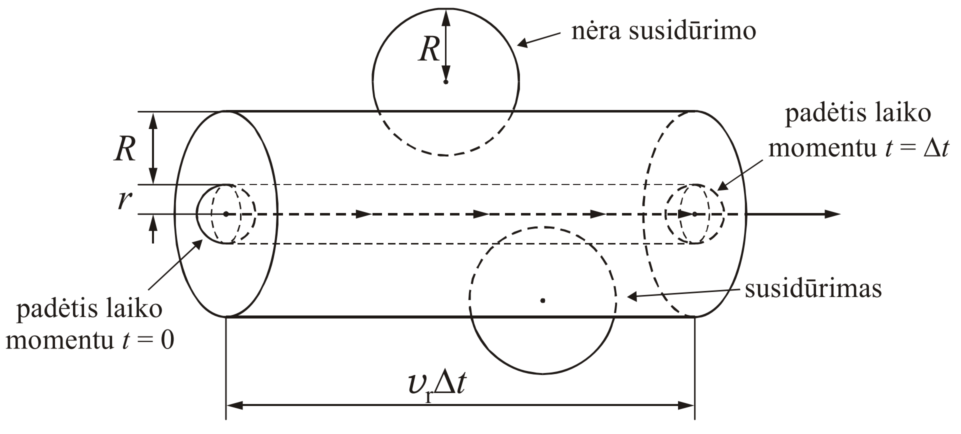
čia pasinaudota idealiųjų dujų būsenos lygtimi (16.2.4). Antra vertus, pagal (16.2.3) ir (16.2.5)

$$f = \upsilon_\Sigma \frac{\sigma p}{kT} . \tag{I.4}$$

Prilyginę vieną kitai (I.3) ir (I.4) lygčių dešiniąsias puses ir išreiškę σ, gauname geometrinio artinio sąveikos skerspjūvio išraišką:

$$\sigma = \pi(r + R)^2 \frac{\upsilon_r}{\upsilon_\Sigma} . \tag{I.5}$$

Jeigu krūvininko vidutinis greitis υ_Σ yra daug didesnis už dujų molekulių vidutinį greitį, tada $\upsilon_r \approx \upsilon_\Sigma$. Ši lygybė visada galioja elektronams dujiniuose detektoriuose. Be to, elektronų matmenys yra



I.1 pav. Dalelių (jonų, molekulių, elektronų ir kt.) geometrinio artinio sąveikos skerspjūvio skaičiavimas

[1] Kadangi krūvininko judėjimo kryptis pasikeičia po kiekvieno susidūrimo, tai minėtas vamzdelis nėra tiesus. Tačiau tai neturi įtakos vamzdelio tūriui, todėl skaičiuojant galima remtis prielaida, kad vamzdelis yra tiesus.

daug mažesni už molekulių matmenis ($r << R$). Todėl elektronų sąveikos su neutraliomis dujų molekulėmis geometrinio artinio skerspjūvis yra lygus molekulių geometriniam skerspjūvio plotui:

$$\sigma_{\mathrm{e}} = \pi R^2 . \qquad \text{(I.6)}$$

Bendruoju atveju vidutinis reliatyvusis greitis υ_{r} priklauso nuo krūvininkų ir dujų molekulių greičių (arba energijų) skirstinių. Pvz., jeigu krūvininkų ir dujų molekulių *energijų* skirstiniai yra vienodi, tada vidutinio reliatyviojo greičio υ_{r} ir vidutinės energijos E sąryšis yra tokio paties pavidalo kaip vidutinio tikrojo greičio υ_{Σ} ir E sąryšis, tačiau toje formulėje vietoj krūvininko masės m reikia naudoti vadinamąją ***redukuotąją masę*** m_{r}, kuri apibrėžiama šitaip:

$$m_{\mathrm{r}} = \frac{mM}{m+M} ; \qquad \text{(I.7)}$$

čia M yra dujų molekulės masė. Kadangi jono masė yra praktiškai lygi dujų molekulės masei ($m \approx M$), tai jonų redukuotoji masė lygi pusei jono masės: $m_{\mathrm{r}} = m/2$. Dujinių detektorių veikimo sąlygomis jonų ir neutraliųjų molekulių greičių skirstiniai nedaug skiriasi nuo Maksvelo skirstinio. Todėl jonų vidutinį reliatyvųjį greitį galima išreikšti (16.2.14) formule, tačiau vietoj jono masės m joje reikia rašyti redukuotąją masę $m/2$. Tai reiškia, kad jonų $\upsilon_r = \sqrt{2}\upsilon_{\Sigma}$. Be to, jono matmenys yra tokie patys kaip neutraliųjų molekulių ($r = R$). Todėl jonų sąveikos su neutraliomis dujų molekulėmis skerspjūvis geometriniame artinyje yra $4\sqrt{2} \approx 5.66$ karto didesnis už molekulių geometrinį skerspjūvio plotą:

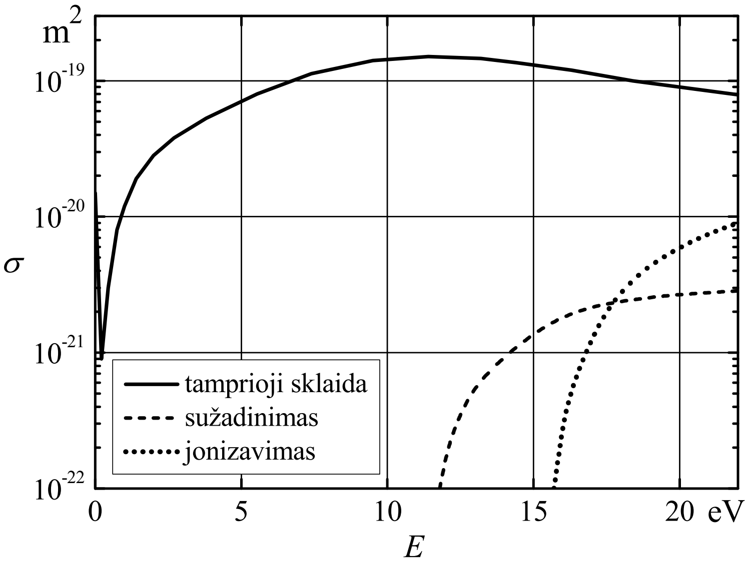
$$\sigma_{\mathrm{jon}} = 4\sqrt{2} \cdot \pi R^2 . \qquad \text{(I.8)}$$

Įvertinsime šių skerspjūvių didumo eilę. Mažiausias yra inertinių dujų (pvz., argono Ar) molekulių spindulys, nes tos molekulės yra vienatomės. Atomo spindulys yra artimas 0,5 Å, t. y. pirmajam Boro spinduliui (žr. (1.10.15)). Todėl, taikant geometrinį artinį, elektronų sąveikos su vienatomėmis molekulėmis skerspjūvis yra maždaug $0{,}8 \cdot 10^{-20}$ m^2, o tų molekulių jonų sąveikos skerspjūvis yra maždaug $4 \cdot 10^{-20}$ m^2. Dviatomių ir paprastų daugiaatomių molekulių (pvz., metano CH_4) tipiški spinduliai yra (1−1,5) Å, todėl elektronų sąveikos su tokiomis molekulėmis skerspjūvis, apskaičiuotas pagal geometrinį artinį, yra $(3\text{–}6) \cdot 10^{-20}$ m^2, o tų molekulių jonų geometrinis sąveikos skerspjūvis yra $(15\text{–}35) \cdot 10^{-20}$ m^2.

Skaičiuojant jonų susidūrimų su neutraliosiomis molekulėmis skerspjūvius, geometrinis artinys nėra pakankamai tikslus. Dviatomių ir daugiaatomių molekulinių jonų tikrasis tampriosios sąveikos skerspjūvis būna kelis kartus didesnis už geometrinį skerspjūvį, o vienatomių (inertinių) dujų jonų tikrasis tampriosios sąveikos skerspjūvis gali būti net kelias dešimtis kartų didesnis už geometrinį. Taip yra dėl toliasiekės sąveikos, į kurią neatsižvelgia geometrinis artinys. Ši sąveika atsiranda dėl krūvio mainų tarp jono ir neutraliosios molekulės bei dėl to, kad jonas poliarizuoja neutraliąją molekulę. Didėjant jono energijai, sąveikos skerspjūvis mažėja, tačiau šis mažėjimas yra palyginti lėtas. Pvz., kintant argono jono energijai nuo 0,038 eV iki 1 eV, jo tampriosios sąveikos su neutraliaisiais argono atomais skerspjūvis sumažėja nuo $16 \cdot 10^{-19}$ m^2 iki $9 \cdot 10^{-19}$ m^2, o helio jonų tampriosios sąveikos su neutraliaisiais helio atomais skerspjūvis tame pačiame energijų intervale sumažėja nuo $8 \cdot 10^{-19}$ m^2 iki $5 \cdot 10^{-19}$ m^2.

Skaičiuojant elektronų susidūrimų su molekulėmis skerspjūvius, geometrinis artinys leidžia įvertinti sąveikos skerspjūvį tik vienos eilės tikslumu. Tikrasis elektronų sąveikos skerspjūvis gali būti kelis kartus (arba netgi eile) didesnis arba mažesnis už geometrinį skerspjūvį (I.6) priklausomai nuo dujų. Be to, elektrono sąveikos skerspjūvis priklauso nuo elektrono energijos E, kurios kitimo ribos dujinių detektorių veikimo sąlygomis yra gana plačios (nuo kelių šimtųjų elektronvolto dalių iki kelių dešimčių elektronvoltų). Pvz., kai $E = 0{,}1$ eV, monoenerginių elektronų tampriosios sąveikos su neutraliais Ar atomais skerspjūvis σ yra maždaug $0{,}6 \cdot 10^{-20}$ m^2 (t. y. artimas geometriniam skerspjūviui), tačiau, kai $E = 0{,}2$ eV, skerspjūvis sumažėja iki $0{,}1 \cdot 10^{-20}$ m^2, o kai $E = 1$ eV, skerspjūvis vėl padidėja iki $1 \cdot 10^{-20}$ m^2 (žr. I.2 pav.). Kai $E \approx 12$ eV, elektronų tampriosios sąveikos su neutraliais argono atomais skerspjūvis pasiekia savo didžiausią vertę $\sigma \approx 1{,}5 \cdot 10^{-19}$ m^2. Į laisvojo lėkio išraišką (16.2.5) įeina *vidutinis* skerspjūvis (čia turimas omenyje vidurkis visų galimų elektrono energijų atžvilgiu). Vidutinis elektronų sąveikos su dujų molekulėmis skerspjūvis priklauso nuo elektronų greičio skirstinio ir nuo elektronų vidutinės energijos (t. y. nuo elektronų efektinės temperatūros (16.2.17b)). Jeigu elektronų greičiai pasiskirstę pagal Maksvelo skirstinį, tada elektronų tampriosios sąveikos su argono atomais vidutinio skerspjūvio priklausomybė nuo elektronų temperatūros neturi minėto minimumo ties 0,2 eV: kai $T = 300$ K, $\sigma = 0{,}3 \cdot 10^{-20}$ m^2; kai $T = 3000$ K, $\sigma \approx 10^{-20}$ m^2; kai $T \approx 10^5$ K, $\sigma \approx 10^{-19}$ m^2 (maksimumas), o toliau kylant temperatūrai, σ mažėja.

Iki šiol buvo kalbama tik apie tampriosios sąveikos skerspjūvius. Netamprioji sąveika gali pasireikšti molekulių sužadinimu arba jonizavimu. Argono mažiausioji sužadinimo energija yra 11,5 eV, o



I.2 pav. Elektrono sąveikos su argono atomais skerspjūvių priklausomybės nuo elektrono energijos

mažiausioji jonizacijos energija yra 15,7 eV. Vadinasi, kol elektrono energija yra mažesnė už 11,5 eV, yra galima tik tamprioji elektronų sąveika su argono atomais (t. y. netampriosios sąveikos skerspjūvis lygus nuliui). Kai elektrono energija viršija 11,5 eV, galimas dar ir argono atomų sužadinimas, o kai elektrono energija viršija 15,7 eV, galimas ne tik sužadinimas, bet ir atomų jonizavimas (žr. I.2 pav.). Pilnutinis elektrono sąveikos skerspjūvis yra lygus tampriosios sąveikos, sužadinimo ir jonizacijos skerspjūvių sumai. Mažesnės už 30 eV energijos elektronų susidūrimų su argono atomais pilnutinį skerspjūvį lemia tamprioji sąveika (žr. I.2 pav.).

Priede pateikiamos sąveikos skerspjūvių vertės pagal straipsnius:

a) *Buckman S. J., Brunger M. J. A Critical Comparison of Electron Scattering Cross Sections measured by Single Collision and Swarm Techniques // Aust. J. Phys., vol. 50, 1997, p. 483–509.*

b) *Petrov G. M., Petrova T. A Determination of the Electron Distribution Function Near Absorbing Surfaces // IEEE Transactions on Plasma Science, vol. 28, no. 6, 2000, p. 2202–2206.*

c) *Daiber J. W., Waldron H. F. Scattering Cross Sections of Argon and Atomic Oxygen to Thermal Electrons // Phys. Rev., vol. 151, no. 1, 1966, p. 51–55.*

d) *Sheldon J. W. Mobility of Positive Ions in Their Own Gas: Determination of Momentum-Transfer Cross Section // NASA Technical Note D-2408, 1964, 20 p.*

J priedas. Periodinė elementų sistema ir atomų elektronų konfigūracijos

Z	Elementas		*A*	Pagrindinės būsenos konfigūracija	Pagr. būs.	Joniz. en.(eV)
1	H	Vandenilis	1,00794	$1s$	$^2S_{1/2}$	13,5984
2	He	Helis	4,002602	$1s^2$	$^1S_0$	24,5874
3	Li	Litis	6,941	$1s^2$ $2s$	$^2S_{1/2}$	5,3917
4	Be	Berilis	9,012182	$1s^2$ $2s^2$	$^1S_0$	9,3227
5	B	Boras	10,811	$1s^2$ $2s^2$ $2p$	$^2P_{1/2}$	8,2980
6	C	Anglis	12,0107	$1s^2$ $2s^2$ $2p^2$	$^3P_0$	11,2603
7	N	Azotas	14,00674	$1s^2$ $2s^2$ $2p^3$	$^4S_{3/2}$	14,5341
8	O	Deguonis	15,9994	$1s^2$ $2s^2$ $2p^4$	$^3P_2$	13,6181
9	F	Fluoras	18,99840	$1s^2$ $2s^2$ $2p^5$	$^2P_{3/2}$	17,4228
10	Ne	Neonas	20,1797	$1s^2$ $2s^2$ $2p^6$	$^1S_0$	21,5645
11	Na	Natris	22,98977	(Ne) $3s$	$^2S_{1/2}$	5,1391
12	Mg	Magnis	24,3050	(Ne) $3s^2$	$^1S_0$	7,6462
13	Al	Aliuminis	26,98154	(Ne) $3s^2$ $3p$	$^2P_{1/2}$	5,9858
14	Si	Silicis	28,0855	(Ne) $3s^2$ $3p^2$	$^3P_0$	8,1517
15	P	Fosforas	30,97376	(Ne) $3s^2$ $3p^3$	$^4S_{3/2}$	10,4867
16	S	Siera	32,066	(Ne) $3s^2$ $3p^4$	$^3P_2$	10,3600
17	Cl	Chloras	35,453	(Ne) $3s^2$ $3p^5$	$^2P_{3/2}$	12,9676
18	Ar	Argonas	39,948	(Ne) $3s^2$ $3p^6$	$^1S_0$	15,7596
19	K	Kalis	39,0983	(Ar) $4s$	$^2S_{1/2}$	4,3407
20	Ca	Kalcis	40,078	(Ar) $4s^2$	$^1S_0$	6,1132
21	Sc	Skandis	44,95591	(Ar) $3d$ $4s^2$	$^2D_{3/2}$	6,5615
22	Ti	Titanas	47,867	(Ar) $3d^2$ $4s^2$	$^3F_2$	6,8281
23	V	Vanadis	50,9415	(Ar) $3d^3$ $4s^2$	$^4F_{3/2}$	6,7462
24	Cr	Chromas	51,9961	(Ar) $3d^5$ $4s$	$^7S_3$	6,7665
25	Mn	Manganas	54,93805	(Ar) $3d^5$ $4s^2$	$^6S_{5/2}$	7,4340
26	Fe	Geležis	55,8457	(Ar) $3d^6$ $4s^2$	$^5D_4$	7,9024
27	Co	Kobaltas	58,93320	(Ar) $3d^7$ $4s^2$	$^4F_{9/2}$	7,8810
28	Ni	Nikelis	58,6934	(Ar) $3d^8$ $4s^2$	$^3F_4$	7,6398
29	Cu	Varis	63,546	(Ar) $3d^{10}$ $4s$	$^2S_{1/2}$	7,7264
30	Zn	Cinkas	65,409	(Ar) $3d^{10}$ $4s^2$	$^1S_0$	9,3942
31	Ga	Galis	69,723	(Ar) $3d^{10}$ $4s^2$ $4p$	$^2P_{1/2}$	5,9993
32	Ge	Germanis	72,64	(Ar) $3d^{10}$ $4s^2$ $4p^2$	$^3P_0$	7,8994
33	As	Arsenas	74,92160	(Ar) $3d^{10}$ $4s^2$ $4p^3$	$^4S_{3/2}$	9,7886
34	Se	Selenas	78,96	(Ar) $3d^{10}$ $4s^2$ $4p^4$	$^3P_2$	9,7524
35	Br	Bromas	79,904	(Ar) $3d^{10}$ $4s^2$ $4p^5$	$^2P_{3/2}$	11,8138
36	Kr	Kriptonas	83,798	(Ar) $3d^{10}$ $4s^2$ $4p^6$	$^1S_0$	13,9996

Pereinamieji elementai

Z		**Elementas**	***A***	**Pagrindinės būsenos konfigūracija**	**Pagr. būs.**	**Joniz. en.(eV)**	
37	Rb	Rubidis	85,4678	(Kr) 5s	$^2S_{1/2}$	4,1771	
38	Sr	Stroncis	87,62	(Kr) $5s^2$	$^1S_0$	5,6949	
39	Y	Itris	88,90585	(Kr) 4d $5s^2$	$^2D_{3/2}$	6,2173	Pereinamieji elementai
40	Zr	Cirkonis	91,224	(Kr) $4d^2$ $5s^2$	$^3F_2$	6,6339	
41	Nb	Niobis	92,90638	(Kr) $4d^4$ 5s	$^6D_{1/2}$	6,7589	
42	Mo	Molibdenas	95,94	(Kr) $4d^5$ 5s	$^7S_3$	7,0924	
43	Tc	Technecis	(98)	(Kr) $4d^5$ $5s^2$	$^6S_{5/2}$	7,28	
44	Ru	Rutenis	101,07	(Kr) $4d^7$ 5s	$^5F_5$	7,3605	
45	Rh	Rodis	102,9055	(Kr) $4d^8$ 5s	$^4F_{9/2}$	7,4589	
46	Pd	Paladis	106,42	(Kr) $4d^{10}$	$^1S_0$	8,3369	
47	Ag	Sidabras	107,8682	(Kr) $4d^{10}$ 5s	$^2S_{1/2}$	7,5762	
48	Cd	Kadmis	112,411	(Kr) $4d^{10}$ $5s^2$	$^1S_0$	8,9938	
49	In	Indis	114,818	(Kr) $4d^{10}$ $5s^2$ 5p	$^2P_{1/2}$	5,7864	
50	Sn	Alavas	118,710	(Kr) $4d^{10}$ $5s^2$ $5p^2$	$^3P_0$	7,3439	
51	Sb	Stibis	121,760	(Kr) $4d^{10}$ $5s^2$ $5p^3$	$^4S_{3/2}$	8,6084	
52	Te	Telūras	127,60	(Kr) $4d^{10}$ $5s^2$ $5p^4$	$^3P_2$	9,0096	
53	I	Jodas	126,9045	(Kr) $4d^{10}$ $5s^2$ $5p^5$	$^2P_{3/2}$	10,4513	
54	Xe	Ksenonas	131,293	(Kr) $4d^{10}$ $5s^2$ $5p^6$	$^1S_0$	12,1298	
55	Cs	Cezis	132,9055	(Xe) 6s	$^2S_{1/2}$	3,8939	
56	Ba	Baris	137,327	(Xe) $6s^2$	$^1S_0$	5,2117	
57	La	Lantanas	138,9055	(Xe) 5d $6s^2$	$^2D_{3/2}$	5,5769	Lantanoidai
58	Ce	Ceris	140,116	(Xe) 4f 5d $6s^2$	$^1G_4$	5,5387	
59	Pr	Prazeodimis	140,9077	(Xe) $4f^3$ $6s^2$	$^4I_{9/2}$	5,473	
60	Nd	Neodimis	144,24	(Xe) $4f^4$ $6s^2$	$^5I_4$	5,5250	
61	Pm	Prometis	(145)	(Xe) $4f^5$ $6s^2$	$^6H_{5/2}$	5,582	
62	Sm	Samaris	150,36	(Xe) $4f^6$ $6s^2$	$^7F_0$	5,6437	
63	Eu	Europis	151,964	(Xe) $4f^7$ $6s^2$	$^8S_{7/2}$	5,6704	
64	Gd	Gadolinis	157,25	(Xe) $4f^7$ 5d $6s^2$	$^9D_2$	6,1498	
65	Tb	Terbis	158,9253	(Xe) $4f^9$ $6s^2$	$^6H_{15/2}$	5,8638	
66	Dy	Disprozis	162,500	(Xe) $4f^{10}$ $6s^2$	$^5I_8$	5,9389	
67	Ho	Holmis	164,9303	(Xe) $4f^{11}$ $6s^2$	$^4I_{15/2}$	6,0215	
68	Er	Erbis	167,259	(Xe) $4f^{12}$ $6s^2$	$^3H_6$	6,1077	
69	Tm	Tulis	168,9342	(Xe) $4f^{13}$ $6s^2$	$^2F_{7/2}$	6,1843	
70	Yb	Iterbis	173,04	(Xe) $4f^{14}$ $6s^2$	$^1S_0$	6,2542	
71	Lu	Lutecis	174,967	(Xe) $4f^{14}$ 5d $6s^2$	$^2D_{3/2}$	5,4259	

Z		**Elementas**	***A***	**Pagrindinės būsenos konfigūracija**	**Pagr. būs.**	**Joniz. en.(eV)**	
72	Hf	Hafnis	178,49	(Xe) $4f^{14}$ $5d^{2}$ $6s^{2}$	$^{3}F_{2}$	6,8251	Pereinamieji elementai
73	Ta	Tantalas	180,9479	(Xe) $4f^{14}$ $5d^{3}$ $6s^{2}$	$^{4}F_{3/2}$	7,5496	
74	W	Volframas	183,84	(Xe) $4f^{14}$ $5d^{4}$ $6s^{2}$	$^{5}D_{0}$	7,8640	
75	Re	Renis	186,207	(Xe) $4f^{14}$ $5d^{5}$ $6s^{2}$	$^{6}S_{5/2}$	7,8335	
76	Os	Osmis	190,23	(Xe) $4f^{14}$ $5d^{6}$ $6s^{2}$	$^{5}D_{4}$	8,4382	
77	Ir	Iridis	192,217	(Xe) $4f^{14}$ $5d^{7}$ $6s^{2}$	$^{4}F_{9/2}$	8,9670	
78	Pt	Platina	195,078	(Xe) $4f^{14}$ $5d^{9}$ $6s$	$^{3}D_{3}$	8,9588	
79	Au	Auksas	196,9666	(Xe) $4f^{14}$ $5d^{10}$ $6s$	$^{2}S_{1/2}$	9,2255	
80	Hg	Gyvsidabris	200,59	(Xe) $4f^{14}$ $5d^{10}$ $6s^{2}$	$^{1}S_{0}$	10,4375	
81	Tl	Talis	204,3833	(Xe) $4f^{14}$ $5d^{10}$ $6s^{2}$ $6p$	$^{2}P_{1/2}$	6,1082	
82	Pb	Švinas	207,2	(Xe) $4f^{14}$ $5d^{10}$ $6s^{2}$ $6p^{2}$	$^{3}P_{0}$	7,4167	
83	Bi	Bismutas	208,9804	(Xe) $4f^{14}$ $5d^{10}$ $6s^{2}$ $6p^{3}$	$^{4}S_{3/2}$	7,2855	
84	Po	Polonis	(209)	(Xe) $4f^{14}$ $5d^{10}$ $6s^{2}$ $6p^{4}$	$^{3}P_{2}$	8,414	
85	At	Astatinas	(210)	(Xe) $4f^{14}$ $5d^{10}$ $6s^{2}$ $6p^{5}$	$^{2}P_{3/2}$		
86	Rn	Radonas	(222)	(Xe) $4f^{14}$ $5d^{10}$ $6s^{2}$ $6p^{6}$	$^{1}S_{0}$	10,7485	
87	Fr	Francis	(223)	(Rn) $7s$	$^{2}S_{1/2}$	4,0727	
88	Ra	Radis	(226)	(Rn) $7s^{2}$	$^{1}S_{0}$	5,2784	
89	Ac	Aktinis	(227)	(Rn) $6d$ $7s^{2}$	$^{2}D_{3/2}$	5,17	Aktinoidai
90	Th	Toris	232,0381	(Rn) $6d^{2}$ $7s^{2}$	$^{3}F_{2}$	6,3067	
91	Pa	Protaktinis	231,0359	(Rn) $5f^{2}$ $6d$ $7s^{2}$	$^{4}K_{11/2}$	5,89	
92	U	Uranas	238,0289	(Rn) $5f^{3}$ $6d$ $7s^{2}$	$^{5}L_{6}$	6,1941	
93	Np	Neptūnis	(237)	(Rn) $5f^{4}$ $6d$ $7s^{2}$	$^{6}L_{11/2}$	6,2657	
94	Pu	Plutonis	(244)	(Rn) $5f^{6}$ $7s^{2}$	$^{7}F_{0}$	6,0260	
95	Am	Americis	(243)	(Rn) $5f^{7}$ $7s^{2}$	$^{8}S_{7/2}$	5,9738	
96	Cm	Kiuris	(247)	(Rn) $5f^{7}$ $6d$ $7s^{2}$	$^{9}D_{2}$	5,9914	
97	Bk	Berklis	(247)	(Rn) $5f^{9}$ $7s^{2}$	$^{6}H_{15/2}$	6,1979	
98	Cf	Kalifornis	(251)	(Rn) $5f^{10}$ $7s^{2}$	$^{5}I_{8}$	6,2817	
99	Es	Einšteinis	(252)	(Rn) $5f^{11}$ $7s^{2}$	$^{4}I_{15/2}$	6,42	
100	Fm	Fermis	(257)	(Rn) $5f^{12}$ $7s^{2}$	$^{3}H_{6}$	6,50	
101	Md	Mendelevis	(258)	(Rn) $5f^{13}$ $7s^{2}$	$^{2}F_{7/2}$	6,58	
102	No	Nobelis	(259)	(Rn) $5f^{14}$ $7s^{2}$	$^{1}S_{0}$	6,65	
103	Lr	Lourensis	(262)	(Rn) $5f^{14}$ $7s^{2}$ $7p$?	$^{2}P_{1/2}$?	4,9 ?	
104	Rf	Rezerfordis	(261)	(Rn) $5f^{14}$ $6d^{2}$ $7s^{2}$?	$^{3}F_{2}$?	6,0 ?	

Pastabos:

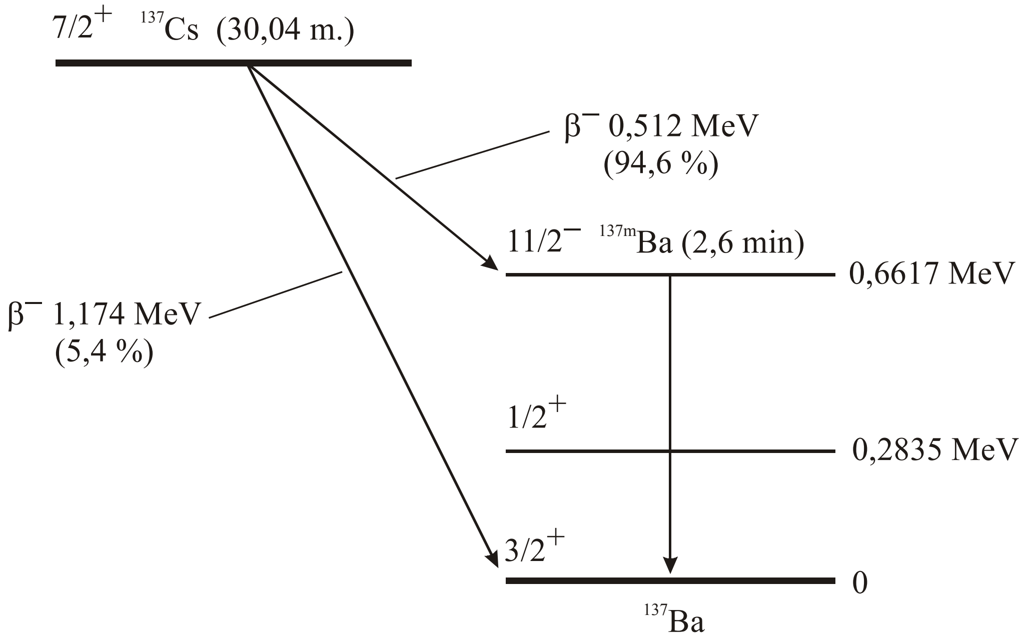
1. Ištisinės horizontalios linijos skiria elementų sistemos periodus.
2. Brūkšninės linijos atskiria elementus, kuriuose užpildomas priešpaskutinis arba trečiasis nuo galo elektronų sluoksnis (išskyrus kelias išimtis). Tai yra: (a) pereinamieji elementai (užpildomas priešpaskutinio sluoksnio *d* posluoksnis), (b) lantanoidai ir aktinoidai (užpildomas trečiojo nuo galo sluoksnio *f* posluoksnis). T. p. žr. 4.5 poskyrio paskutinę pastraipą.
3. Užrašymas, pvz., „(Ar) $3d^6$ $4s^2$“ reiškia elektronų konfigūraciją, kuri gaunama papildžius argono konfigūraciją šešiais $3d$ elektronais ir dviem $4s$ elektronais.
4. Jonizacijos energijos iš [40].

K priedas. K-L ir K-M linijų fotonų energijos (keV)[1]

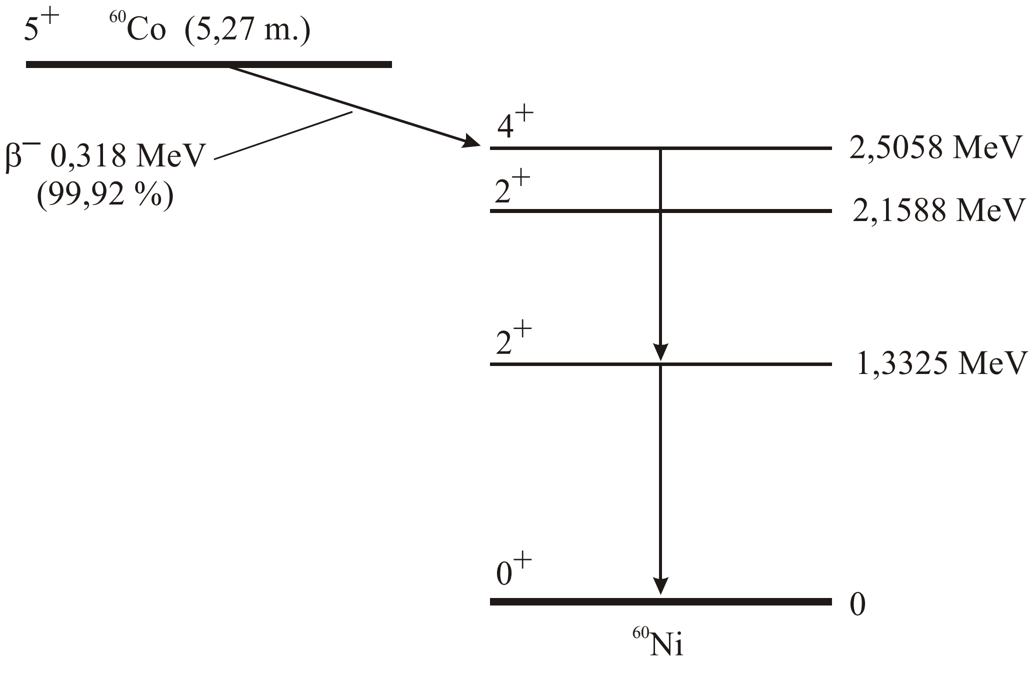
Nr.	Elem.	K-L$_3$	K-L$_2$	K-M	Nr.	Elem.	K-L$_3$	K-L$_2$	K-M
3	Li	0,0543			48	Cd	23,1736	22,9841	26,0955
4	Be	0,1085			49	In	24,2097	24,0020	27,2759
5	B	0,1833			50	Sn	25,2713	25,0440	28,4860
6	C	0,2770			51	Sb	26,3591	26,1108	29,7256
7	N	0,3924			52	Te	27,4723	27,2017	30,9957
8	O	0,5249			53	I	28,6120	28,3172	32,2947
9	F	0,6768			54	Xe	29,7790	29,4580	33,6240
10	Ne	0,8486	0,8486		55	Cs	30,9728	30,6251	34,9869
11	Na	1,0410	1,0410	1,0711	56	Ba	32,1936	31,8171	36,3782
12	Mg	1,2536	1,2536	1,3022	57	La	33,4418	33,0341	37,8010
13	Al	1,4867	1,4863	1,5575	58	Ce	34,7197	34,2789	39,2573
14	Si	1,7400	1,7394	1,8359	59	Pr	36,0263	35,5502	40,7482
15	P	2,0137	2,0127	2,1391	60	Nd	37,3610	36,8474	42,2713
16	S	2,3078	2,3066	2,4640	61	Pm	38,7247	38,1712	43,8260
17	Cl	2,6224	2,6208	2,8156	62	Sm	40,1181	39,5224	45,4130
18	Ar	2,9577	2,9556	3,1905	63	Eu	41,5422	40,9019	47,0379
19	K	3,3138	3,3111	3,5896	64	Gd	42,9962	42,3089	48,6970
20	Ca	3,6917	3,6881	4,0127	65	Tb	44,4816	43,7441	50,3820
21	Sc	4,0906	4,0861	4,4605	66	Dy	45,9984	45,2078	52,1190
22	Ti	4,5108	4,5049	4,9318	67	Ho	47,5467	46,6997	53,8770
23	V	4,9522	4,9446	5,4273	68	Er	49,1277	48,2211	55,6810
24	Cr	5,4147	5,4055	5,9467	69	Tm	50,7416	49,7726	57,5170
25	Mn	5,8988	5,8877	6,4905	70	Yb	52,3889	51,3540	59,3700
26	Fe	6,4038	6,3908	7,0580	71	Lu	54,0698	52,9650	61,2830
27	Co	6,9303	6,9153	7,6494	72	Hf	55,7902	54,6114	63,2340
28	Ni	7,4782	7,4609	8,2647	73	Ta	57,5320	56,2770	65,2230
29	Cu	8,0478	8,0278	8,9053	74	W	59,3182	57,9817	67,2443
30	Zn	8,6389	8,6158	9,5720	75	Re	61,1403	59,7179	69,3100
31	Ga	9,2517	9,2248	10,2642	76	Os	63,0005	61,4867	71,4130
32	Ge	9,8864	9,8553	10,9821	77	Ir	64,8956	63,2867	73,5608
33	As	10,5437	10,5080	11,7262	78	Pt	66,8320	65,1120	75,7480
34	Se	11,2224	11,1814	12,4959	79	Au	68,8037	66,9895	77,9840
35	Br	11,9242	11,8776	13,2914	80	Hg	70,8190	68,8950	80,2530
36	Kr	12,6490	12,5980	14,1120	81	Tl	72,8715	70,8319	82,5760
37	Rb	13,3953	13,3358	14,9613	82	Pb	74,9694	72,8042	84,9360
38	Sr	14,1650	14,0979	15,8357	83	Bi	77,1079	74,8148	87,3430
39	Y	14,9584	14,8829	16,7378	84	Po	79,2900	76,8620	89,8000
40	Zr	15,7751	15,6909	17,6678	85	At	81,5200	78,9500	92,3000
41	Nb	16,6151	16,5210	18,6225	86	Rn	83,7800	81,0700	94,8700
42	Mo	17,4793	17,3743	19,6083	87	Fr	86,1000	83,2300	97,4700
43	Tc	18,3671	18,2508	20,6190	88	Ra	88,4700	85,4300	100,1300
44	Ru	19,2792	19,1504	21,6568	89	Ac	90,8840	87,6700	102,8500
45	Rh	20,2161	20,0737	22,7236	90	Th	93,3500	89,9530	105,6090
46	Pd	21,1771	21,0201	23,8187	91	Pa	95,8680	92,2870	108,4270
47	Ag	22,1629	21,9903	24,9424	92	U	98,4390	94,6650	111,3000

[1] Duomenys iš [43].

L priedas. Radioaktyviųjų nuklidų skilimo schemos[1]

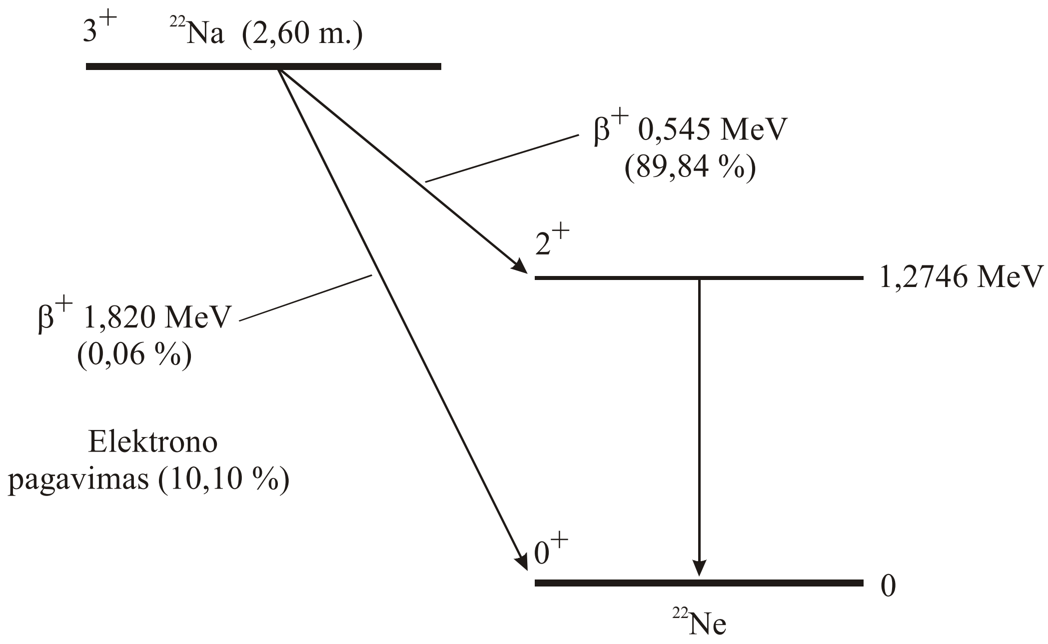


L.1 pav. ^{137}Cs skilimo schema. Schemoje pateikti pusamžiai, didžiausios β dalelių energijos, β skilimo kanalų tikimybės, ^{137}Ba branduolio mažiausios energijos vertės ir intensyviausias kvantinis šuolis tarp ^{137}Ba energijos lygmenų

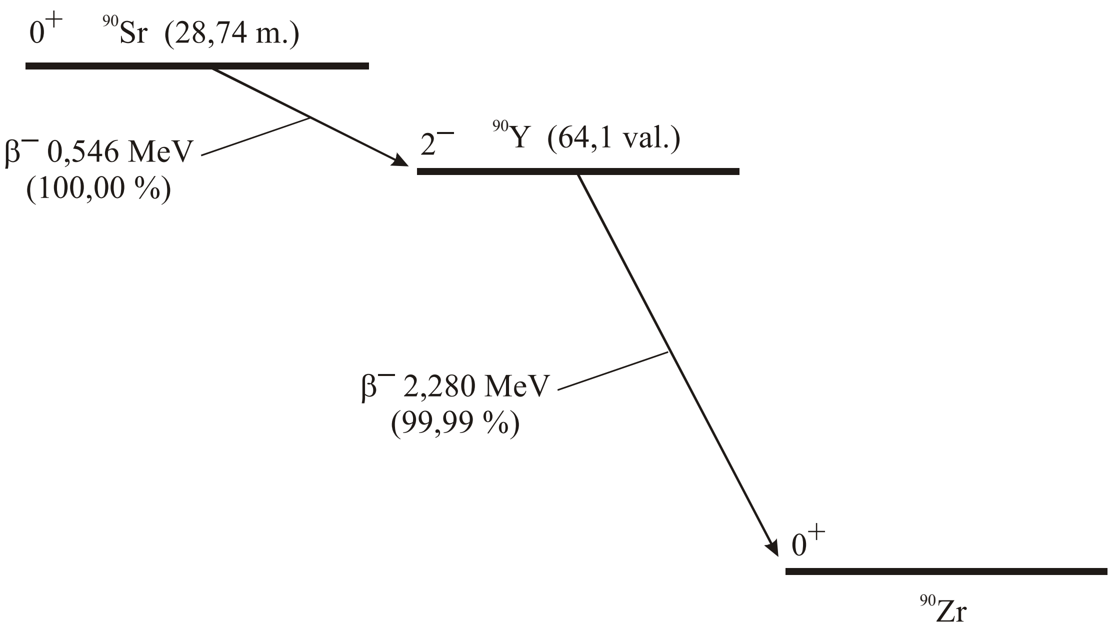


L.2 pav. ^{60}Co skilimo schema. Schemoje parodyti pusamžis, didžiausia β dalelių energija, atitinkamo β skilimo tikimybė, ^{60}Ni branduolio mažiausios energijos vertės ir intensyviausi kvantiniai šuoliai tarp ^{60}Ni energijos lygmenų

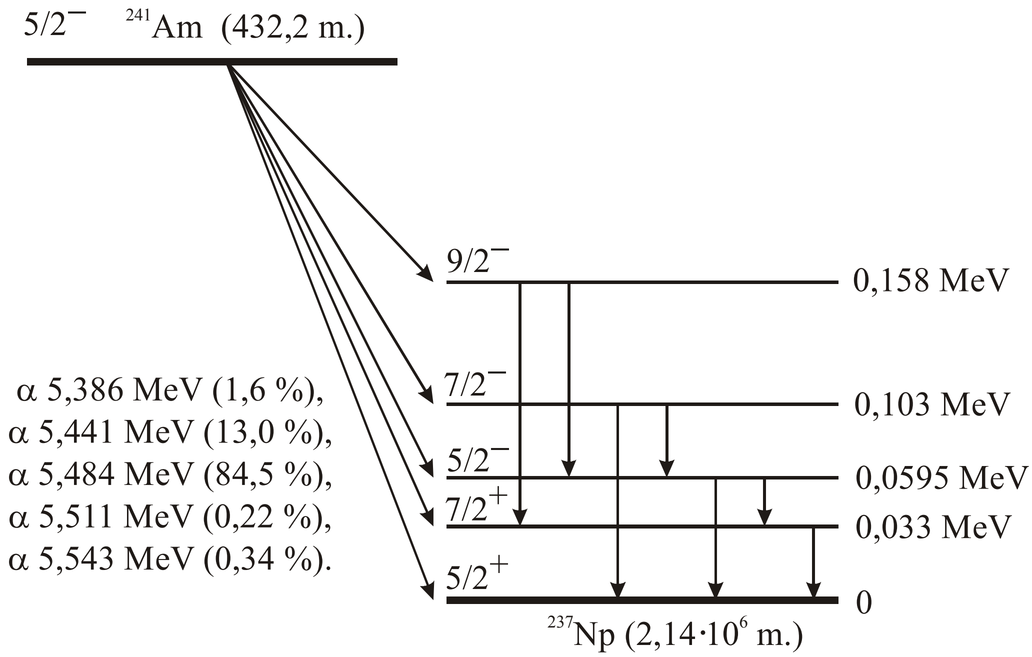
[1] Duomenys iš [42].



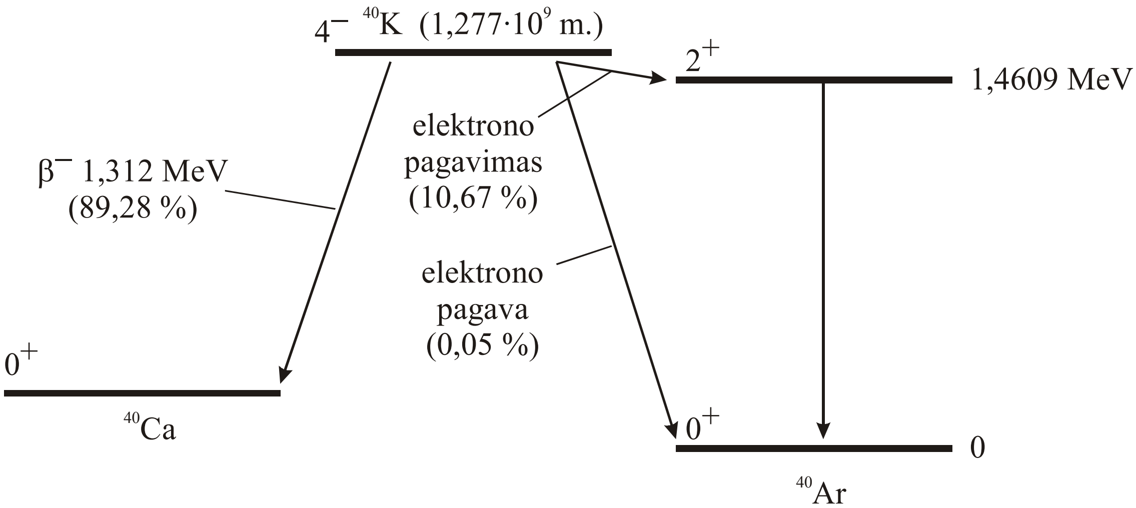
L.3 pav. ^{22}Na skilimo schema. Schemoje parodyti pusamžis, didžiausios β dalelių energijos, atitinkamų β skilimų tikimybės ir kvantinis šuolis tarp ^{22}Ne lygmenų



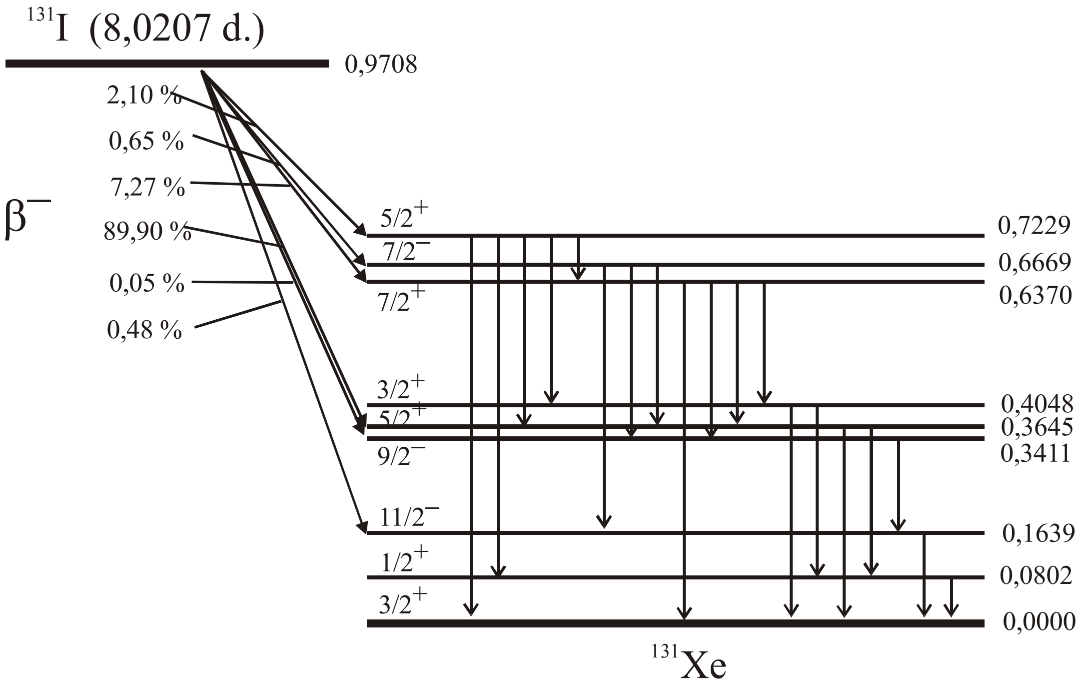
L.4 pav. ^{90}Sr ir ^{90}Y skilimo schema. Schemoje pateikti pusamžis, didžiausios β dalelių energijos ir atitinkamų β skilimų tikimybės



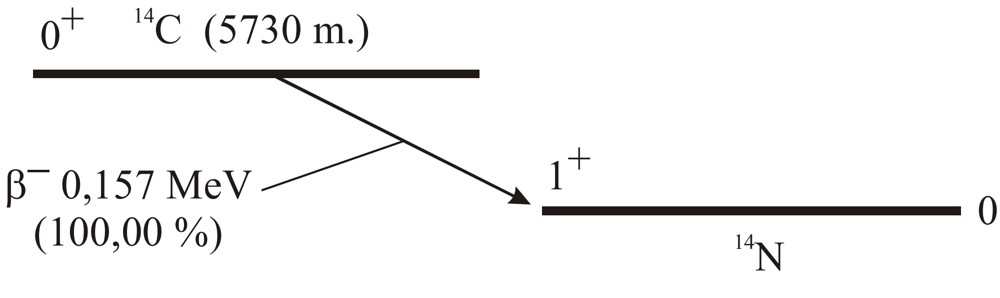
L.5 pav. ^{241}Am skilimo schema. Schemoje pateikti pusamžis, α dalelių energijos, atitinkamų α skilimų tikimybės ir kvantiniai šuoliai tarp ^{237}Np energijos lygmenų



L.6 pav. ^{40}K skilimo schema. Schemoje parodyti pusamžis, didžiausia β dalelių energija, β skilimų tikimybės ir kvantinis šuolis tarp ^{40}Ar lygmenų



L.7 pav. ^{131}I skilimo schema. Schemoje pateikti pusamžis, visų β skilimo kanalų tikimybės ir kvantiniai šuoliai tarp ^{137}Xe energijos lygmenų



L.8 pav. ^{14}C skilimo schema. Schemoje pateikti pusamžis ir didžiausioji β dalelių energija

Knygoje vartojami fizikinių dydžių žymenys[1]

Žymuo	Prasmė
$\boldsymbol{a}$, a	Pagreičio vektorius ir jo modulis
$a_{\lambda,T}$	Sugerties geba (tik 1.1 ir 1.2 poskyriuose)
$\boldsymbol{A}$	Elektromagnetinio lauko vektorinis potencialas
A	1) Branduolio masės skaičius; 2) darbas
$\boldsymbol{B}$	Magnetinės indukcijos vektorius
B	1) Magnetinės indukcijos modulis; 2) barioninis krūvis (tik 8 skyriuje)
B'	„Gražumas“ (angl. *beauty* arba *bottomness*)– vienas iš hadronų „aromato“ kvantinių skaičių (8 skyriuje)
b	Smūgio parametras (tik 11.3 ir 12.2 poskyriuose)
C	1) Elektrinė talpa; 2) žavumas (angl. *charm*) – vienas iš hadronų „aromato“ kvantinių skaičių (8 skyriuje)
d	1) Atstumas; 2) pn sandūros nuskurdintojo sluoksnio storis (tik 19 skyriuje)
D	1) Dispersija (tik G priede); 2) difuzijos koeficientas (tik 16 skyriuje ir 23.1 poskyryje) ; 3) gama spinduliuotės spektro linijos Doplerio išplitimas (tik 22 skyriuje); 4) potencialo barjero skaidris tuneliavimui; 5) skersmuo
E	1) Sistemos arba dalelės pilnutinė mechaninė energija; 2) sistemos arba dalelės pilnutinė reliatyvistinė energija (tik 3.4, 8.6 ir 14.5 poskyriuose)
E_{jon}	Dujų molekulės jonizacijos energija
E_{g}	Draudžiamosios energijos juostos plotis (puslaidininkyje arba dielektrike)
$\boldsymbol{\mathcal{E}}$, $\mathscr{E}$	Elektrinio lauko stiprio vektorius ir jo modulis
$\boldsymbol{e}_x$, $\boldsymbol{e}_y$, $\boldsymbol{e}_z$	Dekarto koordinačių sistemos baziniai vektoriai
$\boldsymbol{e}_r$, $\boldsymbol{e}_\theta$, $\boldsymbol{e}_\phi$	Sferinės koordinačių sistemos baziniai vektoriai
E_{R}	Branduolio ryšio energija
δE_{R}	Branduolio savitoji ryšio energija
$\boldsymbol{F}$	Jėgos vektorius
F	1) Jėgos modulis; 2) Fanò faktorius
f	Elektrono arba jono susidūrimų su neutraliomis dujų molekulėmis vidutinis dažnis
$f(x)$	Tikimybės tankio funkcija
g	1) Dalelės g faktorius (giromagnetiniam santykiui skaičiuoti); 2) iš elektrinio lauko įgytosios energijos vidutinė santykinė dalis, kurią krūvininkas praranda vieno susidūrimo metu (tik 16.3.3 ir 16.3.4 poskyriuose); 3) momentinių neutronų skaičiaus ir viso neutronų skaičiaus santykis (tik 13.2.4 poskyryje)
$\boldsymbol{H}$	Magnetinio lauko stiprio vektorius
H	1) Įtampos impulso amplitudė; 2) magnetinio lauko stiprio modulis
H_{d}	Impulsų registravimo įrenginio jautrio riba (mažiausioji impulso amplitudė, kurią įmanoma užregistruoti)
$\hat{H}$	Hamiltoniano operatorius
i	Elektros srovės stipris
I	1) Spinduliuotės energijos srauto tankis (intensyvumas); 2) izotopinio sukinio kvantinis skaičius (tik 8 skyriuje)
$\overline{I}$	Vidutinė atomo sužadinimo energija (tik 12.2 ir 12.3 poskyriuose)
I_z	Izotopinio sukinio projekcijos kvantinis skaičius (tik 8 skyriuje)
I_λ, I_ν, I_ω	Spinduliuotės spektrinis intensyvumas (intensyvumas vienetiniam bangos ilgių arba dažnių intervalui)
j	1) Dalelės pilnutinio judesio kiekio momento kvantinis skaičius; 2) elektros srovės tankio modulis; 3) dalelių srauto tankio modulis (dalelių skaičius ploto vienetui per laiko vienetą); 4) vienos dalelės tikimybės srauto tankis
J	1) Atomo elektronų arba branduolio nukleonų pilnutinio judesio kiekio momento kvantinis skaičius; 2) elementariosios dalelės sukinio kvantinis skaičius (tik 8 skyriuje)
$\boldsymbol{k}$	Bangos vektorius
k	1) Bangos skaičius (bangos vektoriaus modulis); 2) Bolcmano konstanta; 3) tamprumo koeficientas (tik 2.3.5 ir 12.3.3 poskyriuose)
K	Dujinio stiprinimo koeficientas (tik 17 ir 18 skyriuose)

[1] Šioje lentelėje nėra pagrindinių fizikinių konstantų žymenų (jie pateikti kitoje lentelėje) ir kai kurių „tarpinių“ žymenų, kurie vartojami tik viename arba dviejuose puslapiuose. Kartais tokių trumpalaikių žymenų vaidmenį gali atlikti ir žymenys, kurių tradicinė prasmė yra kitokia. Pvz., norint matematiškai išreikšti teiginį, kad dydis y yra tiesinė dydžio x funkcija, gali būti užrašyta lygybė „$y = A \cdot x + B$“. Iš konteksto aišku, kad čia konstantos A prasmė nėra darbas, o konstantos B prasmė nėra magnetinė indukcija.

Žymuo	Prasmė
l	1) Dalelės orbitinio judesio kiekio momento kvantinis skaičius (šalutinis kvantinis skaičius); 2) daugiapolės spinduliuotės fotono judesio kiekio kvantinis skaičius (tik 10 skyriuje); 3) dalelės laisvasis kelias (tik 11.2 poskyryje, 16−17 skyriuose ir I priede);
$\boldsymbol{l}$, l_z	Daugiapolės spinduliuotės fotono judesio kiekio vektorius ir jo z komponentė (tik 10 skyriuje)
l_1	Laisvojo kelio l išraiškos dujų slėgiu p proporcingumo koeficientas: $l = l_1 / p$
l_{jon}	Vidutinis elektrono kelias tarp dviejų smūginės jonizacijos įvykių dujose
$\boldsymbol{L}$	Dalelės orbitinio judesio kiekio momento vektorius
L	1) Atomo elektronų pilnutinio orbitinio judesio kiekio momento kvantinis skaičius; 2) leptoninis krūvis (tik 8 skyriuje); 3) magnetinio spektrometro šviesingumas (tik 23.3 poskyryje)
L_n	n-tosios orbitos elektronų judesio kiekio momento modulis (Boro kvantinė teorija)
$\boldsymbol{L}_s$, L_s	Dalelės sukininio judesio kiekio momento vektorius ir jo modulis
$\boldsymbol{L}_j$, L_j	Dalelės pilnutinio judesio kiekio momento vektorius ir jo modulis
$\boldsymbol{L}_L$, L_L	Atomo elektronų pilnutinio orbitinio judesio kiekio momento vektorius ir jo modulis
$\boldsymbol{L}_S$, L_S	Atomo elektronų pilnutinio sukininio judesio kiekio momento vektorius ir jo modulis
$\boldsymbol{L}_J$, L_J	Atomo elektronų arba branduolio nukleonų pilnutinio judesio kiekio momento vektorius ir jo modulis
m	1) Dalelės masė; 2) dalelės orbitinio judesio kiekio momento projekcijos kvantinis skaičius; 3) daugiapolio fotono judesio kiekio momento projekcijos kvantinis skaičius;
$m_{(l,s,j,L,S,J)}$	Dalelės (elektrono arba nukleono) arba dalelių sistemos (atomo arba branduolio) judesio kiekio momento projekcijos kvantinis skaičius (indeksų prasmė tokia pati, kaip atitinkamo judesio kiekio momento)
m_0	Dalelės rimties masė
$\boldsymbol{M}$	Įmagnetėjimo vektorius (tik 10 skyriuje ir D priede)
M	1) Dalelės masė; 2) impulso momento projekcijos kvantinis skaičius (C ir D prieduose)
M_{lm}	l, m eilės apibendrintasis magnetinis daugiapolis momentas, kuris susijęs su elektros srovių pasiskirstymu
M'_{lm}	l, m eilės apibendrintasis magnetinis daugiapolis momentas, kuris susijęs su įmagnetėjimu
n	1) Pagrindinis kvantinis skaičius; 2) koncentracija; 3) detektoriaus impulsų skaičius; 4) lūžio rodiklis (tik 23.2 poskyryje); 5) neutrono tampriųjų susidūrimų su branduoliais skaičius (tik 12.4 poskyryje)
N	1) Detektoriaus impulsų skaičius; 2) koncentracija; 3) neutronų skaičius branduolyje; 4) duotosios rūšies dalelių skaičius sistemoje
$\boldsymbol{p}$	Judesio kiekio vektorius
p	1) Judesio kiekio modulis; 2) slėgis; 3) puslaidininkio skylių koncentracija (tik 19.2.3 poskyryje); 4) tikimybė
$\boldsymbol{p}_{\mathrm{e}}$	Elektrinio dipolinio momento vektorius
P	Tikimybė
$P(\theta)$	Centriniame jėgų lauke judančios dalelės banginės funkcijos daugiklis, kuris priklauso nuo polinio kampo θ
$\boldsymbol{q}$	Neutrino judesio kiekio vektorius (tik 9.3 poskyryje)
q	1) Dalelės elektros krūvis; 2) elementariosios dalelės elektros krūvio kvantinis skaičius (tik 8 skyriuje); 3) neutrino judesio kiekio modulis (tik 9.3 poskyryje); 4) elektrinio lauko stiprio gradientas (tik 22.5.5 poskyryje);
Q	1) Dalelės elektros krūvis; 2) branduolinės reakcijos arba branduolio skilimo šiluma (tik 8.6, 9.3 ir 14.5 poskyriuose bei 13 skyriuje); 3) branduolio elektrinis kvadrupolinis momentas (tik 7.7 ir 22.5.5 poskyriuose)
Q_{lm}	l, m eilės apibendrintasis elektrinis daugiapolis momentas, kuris susijęs su erdviniu elektros krūviu
Q'_{lm}	l, m eilės apibendrintasis elektrinis daugiapolis momentas, kuris susijęs su įmagnetėjimu
$\boldsymbol{r}$, $\boldsymbol{R}$	Spindulys vektorius
r	1) Spindulys (spindulio vektoriaus modulis); 2) radialioji koordinatė sferinėje koordinačių sistemoje; 3) Puasono vyksmo įvykių dažnis
R	1) Spindulys; 2) detektoriaus energinė skyra; 3) reakcijos sparta; 4) elektrinė varža; 5) dalelės siekis medžiagoje; 6) Rydbergo konstanta;
R_T	Energinis šviesis (tik 1.1 poskyryje)
$r_{\lambda,T}$	Spektrinis šviesis (tik 1.1 ir 1.2 poskyriuose)

Žymuo	Prasmė
s	1) Dalelės sukininio judesio kiekio momento kvantinis skaičius (sukinys); 2) plotas
$\mathbf{S}$	Pointingo vektorius
S	1) Atomo elektronų pilnutinio sukininio judesio kiekio momento kvantinis skaičius; 2) plotas; 3) ilginė stabdymo geba (12.2 poskyryje); 4) garų persotinimas (23.1 poskyryje ir H priede); 5) keistumas (angl. *strangeness*) – vienas iš hadronų „aromato“ kvantinių skaičių (8 skyriuje)
S_T	Absoliučiai juodo kūno energinis šviesis (tik 1.1 ir 1.2 poskyriuose)
$S_{\lambda,T}$	Absoliučiai juodo kūno spektrinis šviesis (tik 1.2 poskyryje)
t	Laikas
T	1) Absoliučioji temperatūra; 2) periodas; 3) tikrumas (angl. *truth* arba *topness*) – vienas iš hadronų „aromato“ kvantinių skaičių (tik 8 skyriuje)
U	1) Potencinė energija; 2) įtampa
U_0	Nuolatinė įtampa (pvz., detektoriaus maitinimo įtampa)
$U_{\max}$	Įtampos impulso amplitudė
$U_{so}(r)$	Sukinio ir orbitos sąveikos potencinės energijos išraiškos radialusis daugiklis
V	Tūris
$\hat{V}$	Trikdžio operatorius
$\boldsymbol{v}$	Greičio vektorius
υ	1) Greičio modulis; 2) krūvininkų dreifo greitis
υ_Σ	Krūvininkų pilnutinio greičio modulio vidurkis (tik 16 skyriuje ir I priede)
W	1) Vidutinis dalelės energijos sumažėjimus vienai sukurtų krūvininkų porai; 2) dalelės kinetinė energija (tik 1.10, 2.3.1 ir 3.2.2 poskyriuose);
W_T	Šiluminės spinduliuotės energijos tankis (tik 1.1 ir 1.2 poskyriuose)
W_λ, W_ν, W_ω	Elektromagnetinės spinduliuotės energijos spektrinis tankis (indeksas nurodo, kurio dydžio vienetui skaičiuojamas)
w	1) Potencialo duobės arba potencialo barjero plotis; 2) sluoksnio storis
x	1) Viena iš trijų Dekarto koordinačių; 2) dalelės nueitas kelias
$x_{\min}$	Mažiausias kelias, kurį turi nueiti elektronas dujose, kad įgytų pakankamą smūginei jonizacijai energiją
$X(r)$	Centriniame jėgų lauke judančios dalelės banginės funkcijos radialioji dalis
y	Viena iš trijų Dekarto koordinačių
$Y_{lm}(\theta, \phi)$	Skaliarinė sferinė harmonika
z	1) Viena iš trijų Dekarto koordinačių; 2) dalelės krūvio skaičius (12.2 poskyryje)
Z	1) Elemento atominis numeris; 2) dalelės krūvio skaičius
α	1) Smulkiosios sandaros konstanta; 2) bedimensis daugiklis (tik 12.4.3 poskyryje ir 16 skyriuje); 3) kampas
β	1) Dalelės greičio ir šviesos greičio santykis; 2) kampas
γ	Izobarinės ir izochorinės šiluminių talpų santykis (tik 23.1 poskyryje ir H priede)
Γ	Gama spinduliuotės spektro linijos natūralusis plotis
$\delta(x)$	Dirako delta funkcija
ε	1) Dielektrinė skvarba; 2) signalo energijos spektrinis tankis (tik F priede); 3) harmoninio osciliatoriaus energija (tik 1.3.2 poskyryje)
ε_r	Atomo elektronų sluoksnio ryšio energija
θ	1) Sklaidos kampas; 2) sferinės koordinačių sistemos polinis kampas
λ	1) Bangos ilgis; 2) skilimo konstanta; 3) kvantinio šuolio tikimybė per laiko vienetą
$\lambda\!\!\!^{-}$	Redukuotasis bangos ilgis $\lambda\!\!\!^{-} = \lambda/(2\pi)$
$\boldsymbol{\mu}$	Magnetinio momento vektorius
μ	1) Magnetinio momento modulis; 2) krūvininkų judris; 3) silpimo koeficientas
$\boldsymbol{\mu}_{(l,s,j,L,S,J)}$, $\mu_{(l,s,j,L,S,J)}$	Dalelės (elektrono arba nukleono) arba dalelių sistemos (atomo arba branduolio) magnetinio momento vektorius ir jo modulis (indeksų prasmė tokia pati kaip atitinkamo judesio kiekio momento)
ν	Dažnis
ξ	1) Neutrono vidutinis logaritminis energijos dekrementas; 2) centriniame jėgų lauke judančios dalelės orbitinės banginės funkcijos daugiklis
Π	Kvantinės būsenos (banginės funkcijos) lyginumas (±1)
ρ	1) Medžiagos masinis tankis; 2) elektros krūvio tankis; 3) savitoji varža

Žymuo	Prasmė
σ	1) Sąveikos skerspjūvis; 2) standartinis nuokrypis; 3) Stefano ir Bolcmano konstanta (tik 1.2 poskyryje); 4) paviršiaus įtempis (23.1 poskyryje ir H priede)
σ_{jon}	Dujų molekulės smūginės jonizacijos dėl sąveikos su elektronu skerspjūvis, kai elektrono energija yra didesnė už jonizacijos energiją
$\hat{\sigma}_x, \hat{\sigma}_x, \hat{\sigma}_x$	Paulio matricos
Σ	Makroskopinis sąveikos skerspjūvis
Σ_{jon}	Smūginės jonizacijos makroskopinis skerspjūvis
τ	1) Atomo arba branduolio būsenos vidutinė gyvavimo trukmė; 2) laiko intervalas
φ	1) Elektromagnetinio lauko skaliarinis potencialas; 2) orbitinė (nepriklausanti nuo laiko ir sukininių koordinačių) banginė funkcija; 3) atatrankos elektrono arba branduolio išlėkimo kampas atžvilgiu krintančiosios dalelės krypties
ϕ	Sferinės koordinačių sistemos azimutinis kampas
Φ	1) Dalelių srautas (dalelių skaičius per laiko vienetą); 2) aktyvumas; 3) sistemos entropija (tik H priede); 4) elektromagnetinės spinduliuotės srautas (tik 1.1 poskyryje)
$\Phi(\phi)$	Centriniame jėgų lauke judančios dalelės banginės funkcijos daugiklis, kuris priklauso nuo azimutinio kampo ϕ
χ	Sukininė banginė funkcija
Ψ	Pilnutinė (priklausančioji nuo laiko) banginė funkcija
ψ	Nuostoviąją būseną atitinkančios banginės funkcijos dalis, kuri nepriklauso nuo laiko
ω	1) Kampinis dažnis; 2) Furjė transformacijos argumentas
Ω	Erdvinis kampas

Kai kurių fizikinių ir matematinių konstantų žymenys ir vertės

Žymuo	Prasmė	Vertė
i	Menamasis vienetas	$\mathrm{i} = \sqrt{-1}$
π	Skaičius „pi“	3,14159...
e	Eulerio konstanta	2,71828...
e	Elektrono krūvis	$1{,}6021765 \cdot 10^{-19}$ C
ε_0	Elektrinė konstanta	$8{,}8541878176 \cdot 10^{-12}$ F/m
μ_0	Magnetinė konstanta	$4\pi \cdot 10^{-7}$ N/A^2 = $4\pi \cdot 10^{-7}$ H/m
c	Šviesos greitis	299792458 m/s ≈ $3{,}00 \cdot 10^8$ m/s
N_{A}	Avogadro skaičius	$N_{\mathrm{A}} = 6{,}022142 \cdot 10^{23}$ mol^{-1}
R_∞	Rydbergo konstanta	$R_\infty = 1{,}09737315685 \cdot 10^7$ m^{-1}
σ	Stefano ir Bolcmano konstanta	$\sigma = 5{,}6704 \cdot 10^{-8}$ W/(m^2·K^4)
h	Planko konstanta	$6{,}626069 \cdot 10^{-34}$ J·s
$\hbar$	Mažoji Planko konstanta	$\hbar = h/(2\pi) = 1{,}0545716 \cdot 10^{-34}$ J·s
k, k_{B}	Bolcmano konstanta	$1{,}3806504 \cdot 10^{-23}$ J/K
m_{e}	Elektrono rimties masė	$9{,}1093826 \cdot 10^{-31}$ kg
m_{p}	Protono rimties masė	$1{,}67262171 \cdot 10^{-27}$ kg
m_{n}	Neutrono rimties masė	$1{,}67492729 \cdot 10^{-27}$ kg
μ_{B}	Boro magnetonas	$9{,}274009 \cdot 10^{-24}$ J/T
μ_{N}	Branduolinis magnetonas	$5{,}050783 \cdot 10^{-27}$ J/T
a_0	Pirmasis Boro spindulys	$5{,}2917721 \cdot 10^{-11}$ m

Literatūra

1. Абрамов А. И., Казанский Ю. А., Матусевич Е. С. Основы экспериментальных методов ядерной физики. Москва: Энергоатомиздат, 1985. 488 с.
2. Adlienė D., Adlys G. Neutronų detektoriai ir dozimetrai. Kaunas: Technologija, 1998. 125 p.
3. Антонова И. А., Бояркина А. Н., Гончарова Н. Г. Практикум по ядерной физике. Москва: Изд. Московского университета, 1988. 200 с.
4. Bandzaitis A., Grabauskas D. Kvantinė mechanika. Vilnius: Mokslas, 1975. 319 p.
5. Blatt J. M., Weisskopf V. F. Theoretical Nuclear Physics. New York: Dover Publications, Inc., 1991. 864 p.
6. Блохинцев Д. И. Основы квантовой механики. Москва: Высшая школа, 1963. 620 с.
7. Brandt S., Dahmen H. D. Iliustruotoji kvantinė mechanika. Kaunas: Vytauto Didžiojo Universitetas, 1993. 281 p.
8. Butrimaitė J., Dementjev A., Gadonas R. ir kt. Fizika biomedicinos ir fizinių mokslų studentams. II dalis. Vilnius: Vilniaus universiteto leidykla, 2004. 351 p.
9. Gylys J. Branduolinės inžinerijos įvadas. Kaunas: Technologija, 1997. 293 p.
10. Greiner W. Quantum Mechanics: An Introduction. 4th Edition. Berlin, New York: Springer-Verlag, 2001. 485 p.
11. Griffiths D. J. Introduction to Quantum Mechanics. Upper Saddle River, NJ: Prentice Hall, Inc, 1995. 394 p.
12. Horodničius H. Branduolio fizika. Vilnius: Vilniaus universiteto leidykla, 1997. 291 p.
13. Иродов И. Е. Задачи по общей физике. Москва: Наука, 1988. 416 с.
14. Иродов И. Е. Сборник задач по атомной и ядерной физике. Москва: Атомиздат, 1971. 232 с.
15. Янке Е., Эмде Ф., Лёш Ф. Специальные функции. Формулы, графики, таблицы. Москва: Наука, 1968. 344 с.
16. Knoll G. F. Radiation Detection and Measurement. 3rd Edition. New York: John Wiley & Sons, 2000. 802 p.
17. Корн Г., Корн Т. Справочник по математике (для научных работников и инженеров). Москва: Наука, 1973. 832 с.
18. Krane K. S. Introductory Nuclear Physics. New York: John Wiley & Sons, 1988. 845 p.
19. Kukšas B., Vičas S. Fizika, II t. Vilnius: Mokslas, 1988. 254 p.
20. Laboratory Experiments: Physics. Goettingen: PHYWE Systeme GmbH & Co., 2005.
21. Lilley J. Nuclear Physics: Principles and Applications. New York: John Wiley & Sons, 2001. 393 p.
22. Martin B. R. Nuclear and Particle Physics. New York: John Wiley & Sons, 2006. 411 p.
23. Matematikos terminų žodynas. Red. J. Kubilius. Vilnius: Mokslo ir enciklopedijų leidykla, 1994. 726 p.
24. Матвеев А.Н. Атомная физика. Москва: Высшая школа, 1989. 439 с.
25. Matulis A. Kietojo kūno fizika. 2-asis patais. leid. Vilnius: Ciklonas, 2002. 231 p.
26. Мухин К. Н. Экспериментальная ядерная физика. Т. 1. Москва: Атомиздат, 1974. 584 с.
27. Нерсесов Э. А. Основные законы атомной и ядерной физики. Москва: Высшая школа, 1988. 288 с.
28. Palenskis V., Valiukėnas V., Žalkauskas V., Žilinskas P. J. Fizikos terminų žodynas. Vilnius: Mokslo ir enciklopedijų leidybos institutas, 2007. 1632 p.
29. Прудников А. П., Брычков Ю. А., Маричев О. И. Интегралы и ряды. Москва: Наука, 1981. 800 с.
30. Radioelektronikos terminų žodynas. Red. V. Palenskis. Vilnius: Litimo, 2000. 1339 p.
31. Remeikis V., Kalinauskas R. Taikomoji branduolio fizika ir radioekologija. Vilnius: Fizikos institutas, 1999. 127 p.
32. Широков Ю. М., Юдин Н. П. Ядерная физика. Москва: Наука, 1980. 727 с.
33. Шпольский Э. В. Атомная физика. Т. 2. Москва: Наука, 1984. 438 с.
34. Вентцель Е. С., Овчаров Л. А. Теория вероятностей и ее инженерные приложения. Москва: Наука, 1988. 480 с.
35. Вертхейм Г. Эффект Мессбауэра. Москва: Мир, 1966. 172 с.
36. Žilinskas Pr. J. Patarimai rengiantiems rašto darbus. Vilnius: Vilniaus universiteto leidykla, 2003. 169 p.
37. Жуковский Ю. Г., Сергеев В. О., Антоньева Н. М. Практикум по ядерной физике. Москва: Высшая школа, 1975. 197 с.

Interneto tinklalapiai[1]:

38. HyperPhysics. <http://hyperphysics.phy-astr.gsu.edu/hbase/HFrame.html>
39. National Nuclear Data Center. <http://www.nndc.bnl.gov/>

[1] Čia pateiktos tinklalapių antraštės kartu su adresu. Jeigu tinklalapio antraštė yra nepakankamai informatyvi arba jeigu tinklalapyje paaiškinta, kaip turi atrodyti nuoroda į tą tinklalapį, tada po antraštės laužtiniuose skliaustuose yra paantraštė.

40. NIST Physical Reference Data. <http://physics.nist.gov/PhysRefData/>
41. XCOM [Photon cross sections and attenuation coefficients]. <http://atom.kaeri.re.kr/cgi-bin/w3xcom>
42. Table Of Gamma Rays. <http://atom.kaeri.re.kr/gamrays.html>
43. X-Ray Emission Lines. <http://xray.uu.se/hypertext/XREmission.html>
44. Stopping-Power and Range Tables: Electrons, Protons, Helium Ions [Berger M. J., Coursey J. S., Zucker M. A. and Chang J. ESTAR, PSTAR, and ASTAR: Computer Programs for Calculating Stopping-Power and Range Tables for Electrons, Protons, and Helium Ions (2005)]. <http://physics.nist.gov/PhysRefData/Star/Text/>
45. The 1995 Update to the Atomic Mass Evaluation. <http://amdc.in2p3.fr/web/mass95.html>
46. Quantum Physics 130. <http://quantummechanics.ucsd.edu/ph130a/130_notes/130_notes.html>
47. James Ziegler – SRIM & TRIM [Particle Interactions With Matter]. <http://www.srim.org/>
48. Elementary particle. <http://en.wikipedia.org/wiki/Elementary_particle>

Poškus, Andrius

Po216 Atomo fizika ir branduolio fizikos eksperimentiniai metodai. Vadovėlis. – Vilnius: Vilniaus universiteto leidykla, 2008. – 544 p.

ISBN 978-9955-33-295-4

Vadovėlio pirmojoje dalyje išdėstyti atomo ir branduolio fizikos pagrindai. Antrojoje dalyje aptariami dalelių greitinimo, detektavimo ir jų energijos spektro matavimo metodai. Plačiai nagrinėjama jonizuojančioji spinduliuotė, jos kilmė ir savybės. Vadovėlis skirtas aukštųjų mokyklų III kurso fizikos studentams.

UDK 539.1(075.8)

Andrius Poškus

ATOMO FIZIKA IR
BRANDUOLIO FIZIKOS
EKSPERIMENTINIAI METODAI

Kalbos redaktorė *Severina Mokolaitė*
Viršelio dailininkė *Audronė Uzielaitė*

Tiražas 400 egz.
Išleido Vilniaus universiteto leidykla
Universiteto g. 1, LT-01122 Vilnius
El. paštas: info@leidykla.vu.lt

Spausdino UAB „Standartų spaustuvė“
Dariaus ir Girėno g. 39, LT-02189 Vilnius