

VILNIAUS UNIVERSITETAS

Fizikos fakultetas

Andrius Poškus

# **ATOMO IR ELEMENTARIŲJŲ DALELIŲ FIZIKA**

Paskaitų konspektas

2022-03-15



# Turinys

<b>1. Įvadas. Kvantinės mechanikos atsiradimo istorinės prielaidos .....</b>	<b>1</b>
1.1. Šiluminio spinduliavimo energijos spektrinis tankis .....	1
1.2. Planko hipotezė. Osciliatoriaus energijos kvantas.....	2
1.3. Elektromagnetinės spinduliuotės fotoninė teorija.....	3
1.4. Branduolinis atomo sandaros modelis. Rezerfordo tyrimai.....	4
1.5. Vandenilio atomo spektro linijų dažniai .....	5
1.6. Boro postulatai .....	6
1.7. Boro vandenilio atomo modelis .....	7
1.8. Boro atomo teorijos ribotumas.....	10
1.9. Bangos-dalelės dvejopumas. Heizenbergo nelygybė.....	11
1.10. Elektronų banginių savybių eksperimentinis patvirtinimas.....	12
1.11. Banginė funkcija ir jos statistinė samprata .....	13
<b>2. Paprasčiausių sistemų banginių funkcijų ir energijos lygmenų apskaičiavimas .....</b>	<b>14</b>
2.1. Šrėdingerio lygtis, energijos lygmenys, dalelių srauto tankis.....	14
2.2. Paprasčiausių sistemų Šrėdingerio lygties sprendimas.....	15
2.3. Laisvų dalelių būsenų tankis ir banginių funkcijų normavimas .....	22
<b>3. Atomo elektrono energijos lygmenys ir banginės funkcijos .....</b>	<b>25</b>
3.1. Centriname jėgų lauke judančios dalelės kvantiniai skaičiai.....	25
3.2. Centriname lauke judančios dalelės kampinė banginė funkcija. Būsenos lyginumas.....	27
3.3. Vandenilio atomo elektrono radialioji banginė funkcija.....	29
3.4. Elektrono sukiny. Orbitinio ir sukulinio impulso momentų sudėtis .....	30
3.5. Elektrono magnetinis momentas.....	32
3.6. Sukinio ir orbitos sąveika.....	32
3.7. Sukininė banginė funkcija.....	34
<b>4. Daugiaelektroniai atomai.....</b>	<b>35</b>
4.1. Vienodų dalelių sistemos banginė funkcija. Paulio draudimo principas .....	35
4.2. Daugiaelektronio atomo judesio kiekio momentas ir magnetinis momentas .....	36
4.3. Dviejų nepriklausomų elektronų sistemos banginė funkcija .....	39
4.4. Helio atomo energijos lygmenys. Pakaitinė sąveika.....	40
4.5. Šarminių metalų atomų energijos lygmenys.....	42
4.6. Elektronų sluoksniai.....	43
4.7. Periodinė elementų sistema.....	45
<b>5. Atomų kvantiniai šuoliai.....</b>	<b>49</b>
5.1. Savaiminiai ir priverstiniai šuoliai .....	49
5.2. Spinduliuotės linijos forma. Natūralusis linijos plotis.....	50
5.3. Atomo kvantinių šuolių atrankos taisyklės .....	51
5.4. Atomų spektro linijų smulkioji sandara .....	52
<b>6. Rentgeno spinduliuotė.....</b>	<b>53</b>
6.1. Rentgeno spinduliuotės šaltiniai .....	53
6.2. Stabdomoji rentgeno spinduliuotė .....	53
6.3. Būdingoji rentgeno spinduliuotė.....	54
6.4. Mozlio dėsnis .....	55
<b>7. Atomo branduolio sandara ir branduolio modeliai .....</b>	<b>56</b>

7.1. Branduolio sandara. Izotopai .....	56
7.2. Branduolinės jėgos savybės .....	57
7.3. Branduolio masė ir ryšio energija .....	58
7.4. Lašelinis ir sluoksninis branduolio modeliai .....	60
7.5. Magiškieji skaičiai. Nukleono sukinio ir orbitos sąveika .....	61
7.6. Branduolio sukinys .....	65
7.7. Kai kurių branduolių konfigūracijos ir energijos lygmenys .....	65
7.8. Branduolio magnetinis momentas.....	66
<b>8. Branduolių nestabilumas .....</b>	<b>69</b>
8.1. Radioaktyvumo sąvoka. Pagrindinis radioaktyviojo skilimo dėsnis .....	69
8.2. Alfa skilimas .....	72
8.3. Gama spinduliavimas.....	75
8.4. Beta skilimas.....	82
8.5. Skilimų grandinės. Radioaktyviosios šeimos .....	87
<b>9. Branduolinės reakcijos.....</b>	<b>92</b>
9.1. Įvadas. Branduolinės reakcijos sąvoka .....	92
9.2. Sąveikos skerspjūvio ir diferencialinio sąveikos skerspjūvio sąvokos.....	92
9.3. Branduolinių reakcijų pavyzdžiai .....	93
9.4. Bendrosios branduolinių reakcijų savybės.....	97
<b>10. Jonizuojančiosios spinduliuotės sąveika su medžiaga.....</b>	<b>101</b>
10.1. Įvadas .....	101
10.2. Sunkiųjų elektringųjų dalelių sąveika su medžiaga .....	101
10.3. Elektronų sąveika su medžiaga .....	106
10.4. Gama spinduliuotės sąveika su medžiaga.....	108
10.5. Neutronų sąveika su medžiaga.....	111
<b>11. Branduolinių ir termobranduolinių reaktorių fizikos pradmenys .....</b>	<b>116</b>
11.1. Branduolių dalijimosi reakcija .....	116
11.2. Valdoma branduolių dalijimosi reakcija šiluminių neutronų reaktoriuje .....	119
11.3. Branduolių sintezė .....	123
<b>12. Elementariosios dalelės .....</b>	<b>131</b>
12.1. Pagrindinės sąveikos .....	131
12.2. Elementariųjų dalelių klasifikavimas.....	133
12.3. Spalvinis krūvis. Hadronai.....	135
12.4. Izosukinys ir „aromato“ kvantiniai skaičiai. Antidalelės.....	135
12.5. Tvermės dėsniai .....	139
12.6. Dalelių virsmai.....	140

# 1. Įvadas. Kvantinės mechanikos atsiradimo istorinės prielaidos

## 1.1. Šiluminio spinduliavimo energijos spektrinis tankis

**Spinduliuotės energijos tankis**  $W_T$  – elektromagnetinės spinduliuotės energijos kiekis erdvės tūrio vienetu (matavimo vienetas –  $J/m^3$ ).

**Spinduliuotės energijos spektrinis tankis**  $W_{\lambda,T}$  – elektromagnetinės spinduliuotės energijos tankis, kuris atitinka vienetinį bangos ilgių intervalą. „Energijos spektriniu tankiu“ taip pat vadinamas ir energijos tankis, kuris atitinka vienetinį dažnių intervalą. Jis žymimas  $W_{\omega,T}$  arba  $W_{\nu,T}$ , priklausomai nuo to, ar argumentu vaidmenį atlieka dažnis  $\nu$ , ar kampinis (ciklinis) dažnis  $\omega = 2\pi\nu$ .

$$W_{\omega,T} \equiv \frac{2\pi c}{\omega^2} W_{\lambda(\omega),T}. \quad (1.1.1)$$

Kūno **sugerties geba**  $a_{\lambda,T}$  rodo, kokia dalis kritusios  $\lambda$  bangos ilgio elektromagnetinės spinduliuotės energijos lieka kūno viduje ir virsta šiluma. Kūnas, kurio  $a_{\lambda,T} \equiv 1$ , t. y. kuris bet kokiaje temperatūroje sugeria bet kokio bangos ilgio spinduliuotės visą energiją, yra vadinamas **absoliučiai juodu kūnu**.

Absoliučiai juodo kūno elektromagnetinės spinduliuotės energijos spektrinis tankis yra lygus tos pačios temperatūros šiluminės spinduliuotės energijos spektriniam tankiui. **Šiluminė spinduliuotė** – tai elektromagnetinė spinduliuotė, kuri yra termodinaminėje pusiausvyroje su visais sistemą sudarančiais kūnais. Kadangi termodinaminėje pusiausvyroje nėra jokių srautų, tai šiluminė spinduliuotė egzistuoja stovinčiųjų bangų pavidalu. Pvz., kad susidarytų stovinčioji banga kubinėje ertmėje (žr. 1.1.1 pav.), turi galioti lygybės

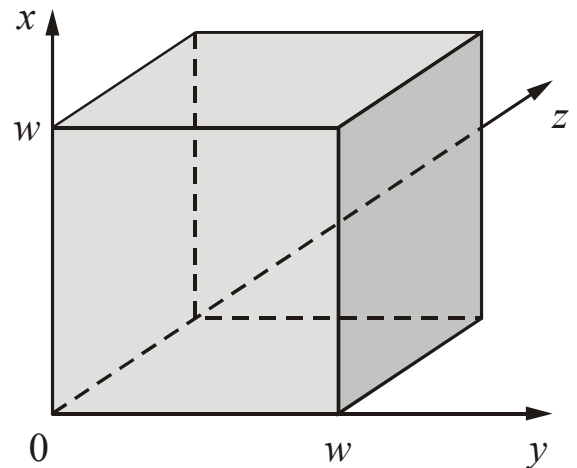
$$k_x w = \pi n_x, \quad k_y w = \pi n_y, \quad k_z w = \pi n_z, \quad (1.1.2)$$

čia  $k_x$ ,  $k_y$  ir  $k_z$  yra bangos vektoriaus komponentės, o  $n_x$ ,  $n_y$  ir  $n_z$  yra sveikieji skaičiai. Apskaičiuojant  $W_{\lambda,T}$ , reikia žinoti bangų skaičių vienetiniame bangos ilgių intervale ir vidutinę bangos energiją  $\langle E_\lambda \rangle$ .

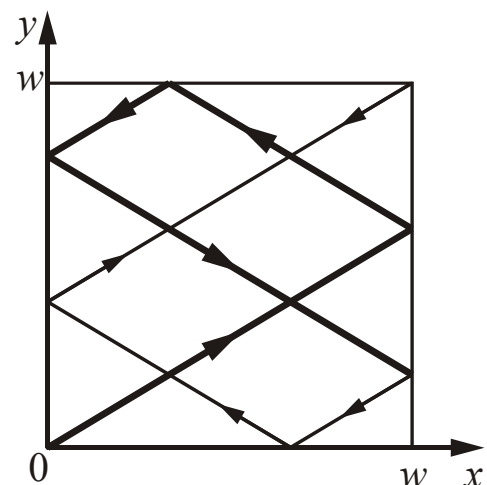
$W_{\lambda,T}$  išraiška:

$$W_{\lambda,T} = \frac{8\pi}{\lambda^4} \langle E_\lambda \rangle. \quad (1.1.3)$$

Stovinčioji banga – tai vienmačio harmoninio osciliatoriaus pavyzdys. **Vienmatis harmoninis osciliatorius** – tai vieno laisvės laipsnio fizikinė sistema, kurios apibendrintoji koordinatė  $q$ , kai nėra išorinių poveikių, yra šios diferencialinės lygties sprendinys:



1.1.1 pav. Kubinė ertmė šiluminės spinduliuotės energijos spektriniam tankiui skaičiuoti



1.1.2 pav. Stovinčiosios bangos susidarymas po atspindžių (keturios bėgančiosios bangos, kurių suma sudaro stovinčiąją bangą, pažymėtos storesnėmis linijomis)

$$\frac{d^2 q}{dt^2} + \omega^2 q = 0, \quad (1.1.4)$$

čia  $\omega$  yra osciliatoriaus *savasis dažnis*. Stovinčiosios elektromagnetinės bangos „apibendrintoji koordinatė“ – tai elektrinio lauko stipris  $\mathcal{E}$  kuriame nors viename erdvės taške, o „apibendrintasis impulsas“ – tai magnetinio lauko stipris  $H$  tame pačiame taške. Stovinčiosios bangos energija gaunama sudėjus elektrinio ir magnetinio laukų energijas. Elektrinio lauko energijos erdvinis tankis yra  $\varepsilon_0 \mathcal{E}^2/2$ , o magnetinio lauko energijos tankis yra  $\mu_0 H^2/2$ . Taikome **vienodo energijos pasiskirstymo dėsnį**: jeigu sistemos energija yra suma dėmenų, kurie proporcingi apibendrintųjų koordinačių arba impulsų kvadratams, tada kiekvieno tokio dėmens vidutinė vertė termodinaminėje pusiausvyroje yra lygi  $k_B T/2$  (čia  $k_B$  yra Bolcmano konstanta, o  $T$  yra absoliučioji temperatūra). Todėl

$$\langle E_\lambda \rangle = k_B T \quad (1.1.5)$$

(pagal klasikinę fiziką, tokia pati yra ir bet kurios kitos prigimties vienmačio harmoninio osciliatoriaus vidutinė energija termodinaminėje pusiausvyroje).

(1.1.5) → (1.1.3):

$$W_{\lambda,T} = \frac{8\pi}{\lambda^4} k_B T. \quad (1.1.6)$$

Akivaizdus prieštaravimas eksperimentiniams duomenims: matavimai rodo, kad, mažėjant  $\lambda$ ,  $W_{\lambda,T}$  artėja ne į begalybę, o į nulį (žr. 1.1.3 pav.).

Absoliučiai juodo kūno **spektrinis šviesis**:

$$S_{\lambda,T} = \frac{c W_{\lambda,T}}{4}. \quad (1.1.7)$$

## 1.2. Planko hipotezė. Osciliatoriaus energijos kvantas

1900 m. vokiečių fizikas Maksas Plankas (*Planck*) suformulavo hipotezę, pagal kurią harmoninio osciliatoriaus energija yra kvantuota:

$$E \equiv E_n = nE_1 \quad (n = 0, 1, 2, \dots). \quad (1.2.1)$$

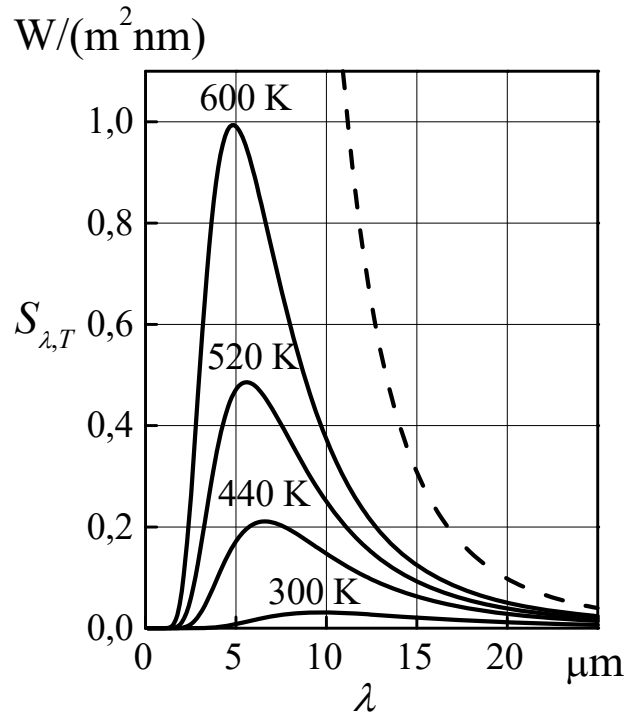
$E_1$  – tai energijos kvantas (iš lotynų kalbos žodžio *quantum* – „kiek“). Taigi, osciliatoriaus energija yra ne tolydi, o diskreti (kvantuota). Tada nustoja galioti vienodo energijos pasiskirstymo dėsnis: vidutinė osciliatoriaus energija  $\langle E \rangle$  lygi ne  $k_B T$ , o

$$\langle E \rangle = \frac{E_1}{\exp\left(\frac{E_1}{k_B T}\right) - 1}. \quad (1.2.2)$$

Osciliatoriaus energijos kvantas  $E_1$  proporcingas osciliatoriaus dažniui  $\nu$ :

$$E_1 = h\nu = h \frac{c}{\lambda} = \hbar\omega, \quad (1.2.3)$$

čia  $h = 6,626 \cdot 10^{-34}$  J·s (**Planko konstanta**),  $\hbar = h / 2\pi$  yra **mažoji Planko konstanta**, o  $\omega = 2\pi\nu$  yra ciklinis (kampinis) dažnis.



**1.1.3 pav.** Absoliučiai juodo kūno spektrinis šviesis įvairiose temperatūrose: ištisinės linijos – matavimų duomenys, brūkšninė linija – klasikinės teorijos rezultatas, kai  $T = 600$  K

Įrašius vidutinę osciliatoriaus energiją  $\langle E \rangle$  (1.2.2) į bendrąją  $W_{\lambda,T}$  išraišką (1.1.3) ir atsižvelgus į osciliatoriaus energijos kvanto išraišką (1.2.3), gaunamas **Planko spinduliavimo dėsnis** (kartais vadinamas **Planko formule**), kuris atitinka matavimo duomenis:

$$W_{\lambda,T} = \frac{8\pi}{\lambda^4} \langle E_{\lambda} \rangle = \frac{8\pi hc}{\lambda^5} \cdot \frac{1}{\exp\left(\frac{hc}{\lambda k_B T}\right) - 1}. \quad (1.2.4)$$

Kitokia to paties dėsnio išraiška gaunama įrašius (1.2.4) į (1.1.1):

$$W_{\omega,T} = \frac{\hbar \omega^3}{\pi^2 c^3} \cdot \frac{1}{\exp\left(\frac{\hbar \omega}{k_B T}\right) - 1}. \quad (1.2.5)$$

### 1.3. Elektromagnetinės spinduliuotės fotoninė teorija

Vokiečių fizikas Albertas Einšteinas 1905 m. sukūrė **šviesos kvantinę (fotoninę) teoriją**, pagal kurią elektromagnetinė spinduliuotė egzistuoja diskrečių energijos porcijų pavidalu:

$$E = h\nu = h \frac{c}{\lambda}. \quad (1.3.1)$$

Ši dalelė vadinama **fotonu**. Fotono masė:

$$m_f = \frac{h\nu}{c^2} = \frac{h}{c\lambda}. \quad (1.3.2)$$

Fotono rimties masė lygi nuliui. Fotono judesio kiekis (impulsas):

$$p_f = m_f c = \frac{h\nu}{c} = \frac{h}{\lambda}. \quad (1.3.3)$$

Fotono judesio kiekio vektorius  $\mathbf{p}_f$  susijęs su jo bangos vektoriumi  $\mathbf{k}$  šitaip:

$$\mathbf{p}_f = \hbar \mathbf{k}. \quad (1.3.4)$$

Tai rodo, kad elektromagnetinio spinduliavimo reiškiniuose pasireiškia **bangos-dalelės dvejojumas** (angl. *wave-particle duality*): vieni reiškiniai apibūdinami bangų parametrais (bangos ilgis ir dažnis), o kiti – dalelių parametrais (fotono energija ir impulsas).

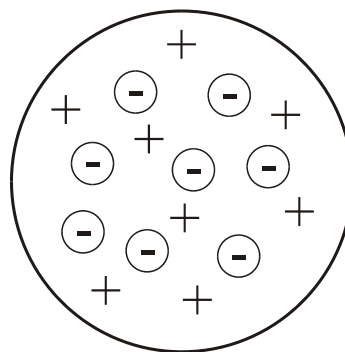
#### 1.4. Branduolinis atomo sandaros modelis. Rezerfordo tyrimai

Pagal **Tomsono modelį** (XIX a. pabaiga) atomą sudaro sferinis tolygiai pasiskirsčiusio teigiamąjo krūvio debesėlis, kuriame „plaukioja“ neigiamieji elektronai (žr. 1.4.1 pav.).

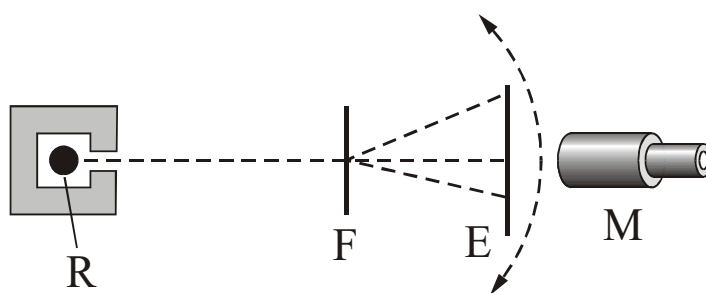
1909 m. anglų fizikas Ernestas Rezerfordas (*Rutherford*) tyrė alfa dalelių („ $\alpha$  dalelių“) pereigą pro plonas aukso bei kitų metalų folijas (žr. pav.) Rezerfordas pastebėjo, kad vidutiniškai viena iš 8000 dalelių, pereidamos foliją (F), buvo išsklaidomos didesniu negu  $90^\circ$  kampu, t. y. atšokdavo atgal (žr. 1.4.2 pav.). Atsižvelgdamas į didelį  $\alpha$  dalelių greitį (maždaug 20 000 km/s), Rezerfordas matematiškai įrodė, kad tai įmanoma tik tuo atveju, kai  $\alpha$  dalelę veikiantis teigiamasis krūvis yra sutelktas erdvės srityje, kurios matmenys maždaug 10 000 kartų mažesni už atomo matmenis.

Tuo remdamasis, Rezerfordas 1911 m. pateikė naują atomo sandaros modelį, kuris vadinamas **branduoliniu atomo modeliu**. Pagal šį modelį beveik visa atomo masė ir visas teigiamasis atomo krūvis yra sutelkti atomo **branduolyje**, kurio matmenys maždaug 10 000 kartų mažesni už viso atomo matmenis (žr. 1.4.3 pav.). Branduolio krūvis lygus elemento atominio numerio  $Z$  ir elementariojo krūvio  $e$  sandaugai  $Ze$ . Branduolio matmenys yra  $10^{-15}$ – $10^{-14}$  m eilės (palyginimas: atomo matmenys yra  $10^{-10}$  m eilės). Pagal branduolinį atomo modelį elektronai sukasi apie branduolį uždromis orbitomis (panašiai kaip planetos aplink Saulę).

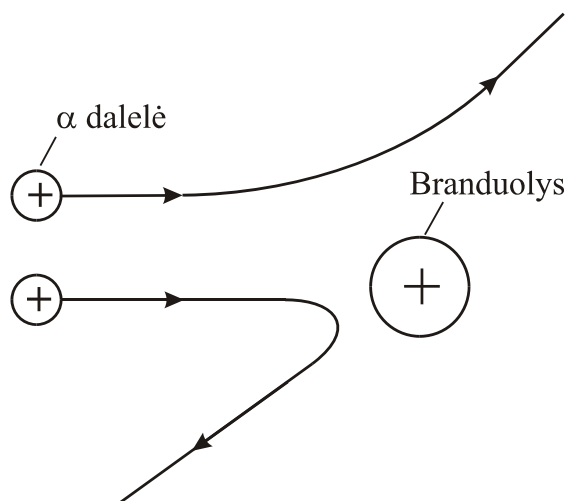
Tačiau pagal klasikinę elektrodinamiką tokia sistema yra nestabili, nes judėjimas uždara orbita – tai judėjimas su pagreičiu, o su pagreičiu judantis krūvininkas spinduliuoja elektromagnetines bangas, t. y. netenka energijos. Taigi, priėmus branduolinį atomo modelį, paaiškėjo, kad klasikinė fizika negali paaiškinti atomų egzistavimo.



1.4.1 pav. Tomsono atomo modelis



1.4.2 pav. Rezerfordo matavimų schema



1.4.3 pav.  $\alpha$  dalelių sklaidos aiškinimas remiantis branduoliniu atomo modeliu



## 1.5. Vandenilio atomo spektro linijų dažniai

Matavimai rodo, kad linijos atomų spektruose išsidėsčiusios dėsningai. Pvz., vandenilio atomo spektro regimosios dalies linijų bangos ilgius išreiškia Balmerio formulė (1885 m., šveicarų matematikas Johanas Balmeris):

$$\frac{1}{\lambda} = R \left( \frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad (n = 3, 4, 5, \dots),$$

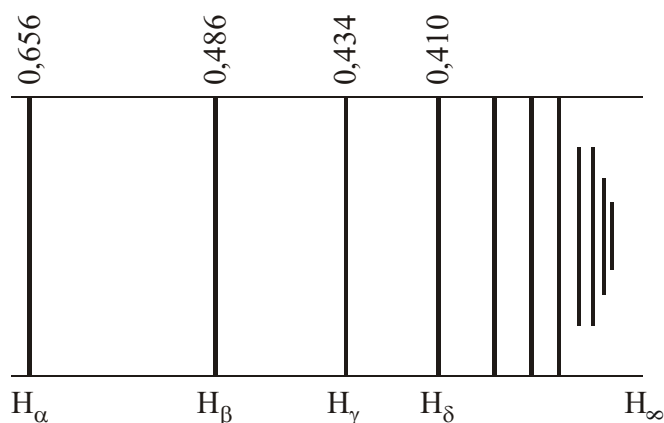
čia  $R$  yra **Rydbergo konstanta** ( $R \approx 1,097 \cdot 10^7 \text{ m}^{-1}$ ), o  $n$  yra bet koks sveikasis skaičius pradedant trimis. Ši formulė vadinama **Balmerio formule**. Atitinkama spektro linijų sistema vadinama **Balmerio serija** (žr. 1.5.1 pav.).

1888 m. švedų fizikas Johanas Rydbergas (*Rydberg*) nustatė, kad Balmerio formulė yra atskiras atvejis bendresnės formulės, kuri nusako įvairių vandenilio spektro serijų linijų bangos ilgius:

$$\frac{1}{\lambda} = R \left( \frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right) \quad (n_2 > n_1). \quad (1.5.1)$$

Tai yra **Balmerio ir Rydbergo formulė**.  $n_1$  yra serijos numeris. Balmerio seriją atitinka  $n_1 = 2$ , Pašeno seriją atitinka  $n_1 = 3$  (1908 m., austrų ir vokiečių fizikas Fridrichas Pašenas (*Paschen*)), Laimano seriją atitinka  $n_1 = 1$  (1914 m., amerikiečių fizikas Teodoras Laimanas (*Lyman*)).

Vandenilio atomo spektro dėsningumai prieštarauja klasikiniam požiūriui į atomą. Pagal klasikinę elektrodinamiką atomas turėtų spinduliuoti ištisinio spektro spinduliuotę.



**1.5.1 pav.** Vandenilio atomo spektro linijos, kurios atitinka regimąją šviesą

## 1.6. Boro postulatai

Danų fizikas Nilsas Boras (*Bohr*) 1913 m. suformulavo atomo teoriją, kuri susiejo tris tuo metu žinomus eksperimentinius faktus, prieštaraujančius klasikinei mechanikai:

- 1) spinduliavimo kvantinis pobūdis,
- 2) branduolinis atomo modelis,
- 3) vandenilio atomo spektro dėsningumai.

**Pirmasis postulat** (*nuostoviųjų būsenų postulat*). Elektronas gali skrieti apie branduolį tik tam tikromis *nuostoviomis* orbitomis, nespinduliuodamas energijos. Kiekvieną orbitą atitinka apibrėžta atomo energija  $E_n$  ( $n$  – orbitos numeris).

**Antrasis postulat** (*dažnių taisyklė*). Peršokant elektronui iš toliau nuo branduolio esančios orbitos  $n_2$  į artimesnę branduoliui orbitą  $n_1$ , atomas išspinduliuoja energiją, kuri lygi atitinkamų nuostoviųjų energijų  $E_{n_2}$  ir  $E_{n_1}$  skirtumui (žr. 1.6.1 pav.). Šios elektromagnetinės spinduliuotės dažnis lygus

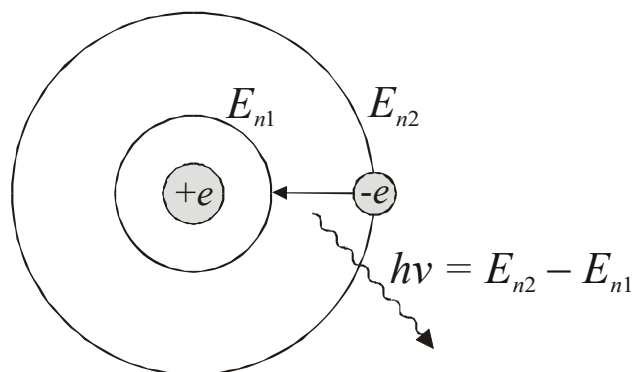
$$\nu = (E_{n_2} - E_{n_1})/h. \quad (1.6.1)$$

**Trečiasis postulat** (*orbitų kvantavimo taisyklė*):  $n$ -tojoje orbitoje esančio elektrono judesio kiekio momento modulis lygus

$$L_n = n \frac{h}{2\pi} = n\hbar \quad (n = 1, 2, \dots). \quad (1.6.2)$$

Sveikasis skaičius  $n$  vadinamas *pagrindiniu kvantiniu skaičiumi*.

Boro teiginio apie atomo energijos diskretumą pirmuoju tiesioginiu įrodymu tapo vokiečių fizikų Dž. Franko (*Franck*) ir G. L. Herco (*Hertz*) bandymai, kurie buvo atlikti 1914 m. Jie matavo energiją, kurią elektriniame lauke pagreitintieji elektronai, judantys mažo slėgio gyvsidabrio (Hg) garuose, perduoda Hg atomams netampriųjų susidūrimų metu. Paaiškėjo, kad mažiausias galimas Hg atomo vidinės energijos padidėjimas dėl tokio susidūrimo yra lygus 4,9 eV. Tai reiškia, kad dviejų mažiausių galimų Hg atomo energijų skirtumas yra 4,9 eV.



1.6.1 pav. Antrasis Boro postulat

### 1.7. Boro vandenilio atomo modelis

Pagrindiniai apibrėžimai ir dėsniai, kurie bus reikalingi:

- 1) Dalelę veikianti **jėga**  $F$  – tai dalelės masės  $m$  ir pagreičio  $a$  sandauga (II Niutono dėsnis):

$$F = ma. \quad (1.7.1)$$

- 2) Dalelę veikiančios jėgės  $F$  atliktas **darbas**  $A$  – tai jėgos vektoriaus  $F$  ir dalelės poslinkio vektoriaus  $\Delta r$  skaliarinė sandauga:

$$A = F \cdot \Delta r = F \Delta r \cos \theta; \quad (1.7.2)$$

čia  $\theta$  yra kampas tarp vektorių  $F$  ir  $\Delta r$ .

- 3) Dalelės **judesio kiekio momento** (arba **mechaninio momento**) vektorius yra lygus

$$L = r \times p; \quad (1.7.3)$$

Jeigu vektoriai  $r$  ir  $p$  yra statmeni, tada  $L$  modulis lygus vektorių  $r$  ir  $p$  modulių sandaugai:

$$|L| = rp = rmv. \quad (1.7.4)$$

čia  $p = mv$  yra dalelės judesio kiekio modulis,  $m$  yra jos masė,  $v$  yra greitis.

- 4) Pastoviu greičiu  $v$  spindulio  $r$  apskrita orbita judanti dalelė turi įcentrinį pagreitį, kuris lygus

$$a = \frac{v^2}{r}. \quad (1.7.5)$$

- 5) Greičiu  $v$  judančios  $m$  masės dalelės **kinetinė energija**  $W$  lygi

$$W = \frac{mv^2}{2}. \quad (1.7.6)$$

- 6) Dviejų dalelių sąveikos **potencinė energija**  $U$ , kai dalelės yra duotuoju atstumu  $r$  viena nuo kitos – tai darbas, kurį atliktų dalelių sąveikos jėga  $F$ , kai tos dalelės yra nutolinamos viena nuo kitos be galo dideliu atstumu:

$$U = -\int_r^{\infty} F dr. \quad (1.7.7)$$

- 7) Dalelių sistemos **pilnutinė mechaninė energija**  $E$  lygi jų kinetinės ir potencinės energijų sumai:

$$E = W + U. \quad (1.7.8)$$

- 8) **Kulono dėsnis** teigia, kad dviejų dalelių, kurių elektros krūviai  $q_1$  ir  $q_2$ , sąveikos jėga lygi

$$F = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{q_1 q_2}{r^2}; \quad (1.7.9)$$

čia  $r$  yra atstumas tarp dalelių, o  $\epsilon_0$  yra elektrinė konstanta:  $\epsilon_0 = 8,854 \cdot 10^{-12} \text{ C}^2/(\text{N} \cdot \text{m}^2)$ .

Balmerio ir Rydbergo formulės išvedimas pagal Boro postulatus susideda iš trijų dalių:

- 1) elektrono orbitų spindulių apskaičiavimas,
- 2) elektrono kinetinės energijos kiekvienoje orbitoje apskaičiavimas,
- 3) elektrono potencinės energijos kiekvienoje orbitoje apskaičiavimas.

*Elektrono orbitų spindulių apskaičiavimas*

Elektrono įcentrinis pagreitis  $n$ -tojoje orbitoje lygus

$$a = \frac{v_n^2}{r_n}. \quad (1.7.10)$$

Įrašius šią pagreičio išraišką į antrąjį Niutono dėsnį (1.7.1), gaunama jėgos išraiška:

$$F_n = ma = m \frac{v_n^2}{r_n}. \quad (1.7.11)$$

Jėgą  $F_n$  nusako Kulono dėsnis (1.7.9). Kadangi branduolio ir elektrono krūviai lygūs  $\pm e$ , tai

$$F(r) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{e^2}{r^2} \quad \text{arba} \quad r_n^2 = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{e^2}{F_n} \quad (1.7.12)$$

( $F_n$  yra jėgos modulis). (1.7.11) → (1.7.12):

$$r_n = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{e^2}{mv_n^2}. \quad (1.7.13)$$

$v_n$  galima išreikšti orbitos spinduliu  $r_n$  pagal trečiąjį Boro postulatą (1.6.2):

$$v_n = n \frac{h}{2\pi m r_n} \quad (n = 1, 2, 3, \dots). \quad (1.7.14)$$

Elektrono greitis pirmojoje orbitoje:  $v_1 \approx 2,2 \cdot 10^6$  m/s. (1.7.14) → (1.7.13):

$$r_n = n^2 \frac{\epsilon_0 h^2}{\pi m e^2} \approx n^2 \cdot 0,529 \text{ \AA} \quad (n = 1, 2, 3, \dots). \quad (1.7.15)$$

**Pirmasis Boro spindulys**  $r_1 \approx 5,3 \cdot 10^{-11} \text{ m} = 0,529 \text{ \AA}$ .

*Elektrono kinetinės energijos kiekvienoje orbitoje apskaičiavimas*

Elektrono kinetinė energija  $n$ -tojoje orbitoje lygi

$$W_n = \frac{mv_n^2}{2}. \quad (1.7.16)$$

(1.7.14) → (1.7.16):

$$W_n = n^2 \frac{h^2}{8\pi^2 m r_n^2}. \quad (1.7.17)$$

(1.7.15) → (1.7.17):

$$W_n = \frac{1}{n^2} \cdot \frac{me^4}{8\epsilon_0^2 h^2}. \quad (1.7.18)$$

*Elektrono potencinės energijos kiekvienoje orbitoje apskaičiavimas*

(1.7.12) → (1.7.7):

$$U(r) = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{e^2}{r}. \quad (1.7.19)$$

(1.7.15) → (1.7.19):

$$U_n = -\frac{1}{n^2} \cdot \frac{me^4}{4\epsilon_0^2 h^2}. \quad (1.7.20)$$

*H* atomo spektro linijų dažnių apskaičiavimas. Pagrindinė ir sužadintoji būsenos

$$E_n = W_n + U_n = -\frac{1}{n^2} \frac{me^4}{8\varepsilon_0^2 h^2} = -\frac{1}{n^2} \frac{\hbar^2}{2r_1^2 m} \quad (n = 1, 2, 3, \dots). \quad (1.7.21)$$

Mažiausia atomo energija  $E_1$  atitinka atomo **pagrindinę būseną**. Kol nėra jokių išorinių poveikių, atomas yra pagrindinės būsenos. Norint perkelti elektroną iš pirmosios orbitos į toliau nuo branduolio esančią orbitą, kurios numeris  $n > 1$ , atomui reikia suteikti energiją, kuri lygi orbitų energijų skirtumui  $E_n - E_1$ . Tokios būsenos atomas yra nestabilus (**sužadintas**) ir per  $10^{-8}$  s eilės laiką savaime grįžta į pagrindinę būseną. Kadangi  $\nu = c/\lambda$ , tai pagal antrąjį Boro postulata (1.6.1) atitinkamos atomo spektro linijos atvirkštinis bangos ilgis lygus

$$\frac{1}{\lambda} = \frac{E_{n_2} - E_{n_1}}{hc}. \quad (1.7.22)$$

(1.7.21) → (1.7.22):

$$\frac{1}{\lambda} = \frac{me^4}{8\varepsilon_0^2 h^3 c} \left( \frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right) \quad (n_2 > n_1). \quad (1.7.23)$$

Tai – Balmerio ir Rydbergo formulė (1.5.1). Daugiklis prieš skliaustus yra Rydbergo konstanta:

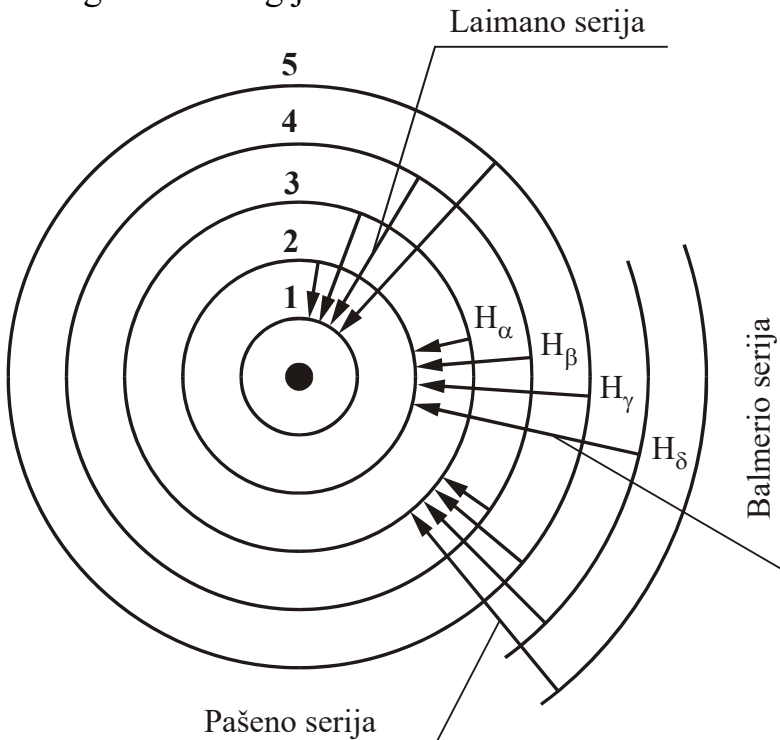
$$R = \frac{me^4}{8\varepsilon_0^2 h^3 c} = \frac{(9,11 \cdot 10^{-31}) \cdot (1,6022 \cdot 10^{-19})^4}{8 \cdot (8,854 \cdot 10^{-12})^2 \cdot (6,626 \cdot 10^{-34})^3 \cdot 3 \cdot 10^8} \approx 1,097 \cdot 10^7 \text{ m}^{-1}.$$

Atomo energijos vertės (1.7.21) vadinamos atomo **energijos lygmenimis**. Žemiausiasis energijos lygmuo, kuris atitinka atomo pagrindinę būseną ( $n = 1$ ), vadinamas **pagrindiniu lygmeniu**. Visi aukštesnieji lygmenys, kurie atitinka atomo sužadintąsias būsenas ( $n = 2, 3, \dots$ ), vadinami **sužadintaisiais lygmenimis**.

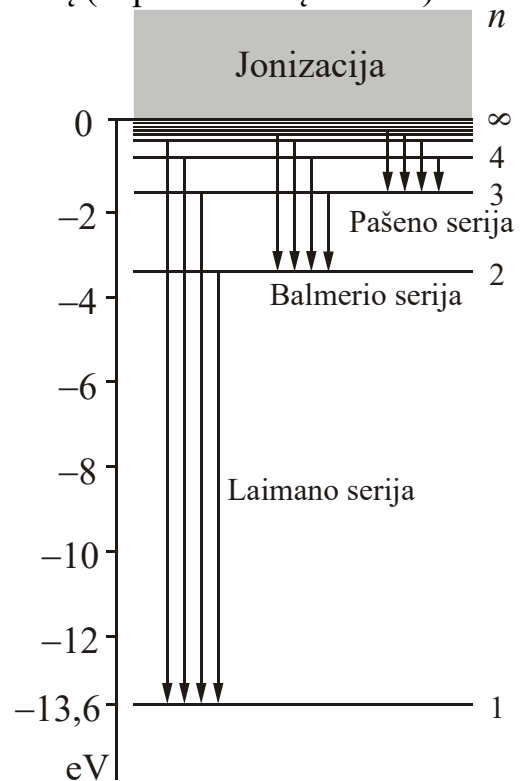
$$E_n = -\frac{13,6 \text{ eV}}{n^2} \quad (n = 1, 2, 3, \dots). \quad (1.7.24)$$

$$1 \text{ eV} = e \cdot 1 \text{ V} = 1,6022 \cdot 10^{-19} \text{ C} \cdot 1 \text{ V} = 1,6022 \cdot 10^{-19} \text{ J}.$$

Teigiamos energijos vertės nėra kvantuotos ir atitinka laisvą (nepriklausantį atomui) elektroną.



1.7.1 pav. Vandenilio spektro serijų susidarymas



1.7.2 pav. Vandenilio atomo energijos lygmenys

Apibendrinimas jonams, turintiems tik vieną elektroną (*vandeniliškiesiems atomams*): visose ankstesnėse formulėse dydį  $e^2$  reikia pakeisti dydžiu  $Ze^2$ , čia  $Z$  yra branduolio krūvis, išreikštas elementariaisiais krūviais. Pvz.,  $n$ -tosios orbitos spindulys ((1.7.15) formulė) lygus

$$r_n = n^2 \frac{\varepsilon_0 \hbar^2}{\pi m Z e^2} \approx n^2 \frac{0,529 \text{ \AA}}{Z}. \quad (1.7.25)$$

T. y., didėjant branduolio krūviui  $Z$ , orbitų spinduliai mažėja. Pagal (1.7.21) formulę

$$E_n = W_n + U_n = -\frac{Z^2}{n^2} \cdot \frac{me^4}{8\varepsilon_0^2 \hbar^2} = -\frac{1}{n^2} \frac{\hbar^2}{2r_1^2 m} = -\frac{Z^2}{n^2} \cdot 13,6 \text{ eV} \quad (n = 1, 2, 3, \dots). \quad (1.7.26)$$

Pagal (1.7.23) formulę

$$\frac{1}{\lambda} = Z^2 R \left( \frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right) \quad (n_2 > n_1). \quad (1.7.27)$$

Čia  $R$  yra Rydbergo konstanta.

### 1.8. Boro atomo teorijos ribotumas

Boro teorija nebuvo nei nuosekliai kvantinė, nei nuosekliai klasikinė. Trys Boro postulatai joje buvo naudojami kaip formalios išankstinės prielaidos. Todėl Boro atomo teorija negalėjo paaiškinti platesnio masto atominių reiškinių (pvz., daugiaelektronių atomų spektrų).

Boro teorija tapo pereinamuoju etapu tarp klasikinės fizikos ir kvantinės mechanikos, kurios pagrindai buvo sukurti XX a. trečiajame dešimtmetyje. Kvantinėje mechanikoje įrodoma, kad atomo elektronai sudaro „elektronų debesį“, o ne sukasi aplink branduolį tiksliai apibrėžta orbita.

Tačiau Boro atomo teorija yra daug vaizdesnė ir paprastesnė už kvantinę mechaniką. Be to, atomo energijos lygmenų sąvoka, kuri pirmą kartą pavartota Boro teorijoje, vartojama ir kvantinėje mechanikoje. Todėl, jeigu siekiama didesnio aiškumo ir vaizdumo, ir šiuo metu dažnai remiamasi Boro atomo modeliu.

## 1.9. Bangos-dalelės dvejojimas. Heizenbergo nelygybė

XX a. III dešimtmetyje paaiškėjo, kad banginių ir dalelinių savybių sąryšiai, kurie pirmą kartą suformuluoti kvantinėje šviesos teorijoje (žr. [1.3 skirsnis](#)), tinka ne tik fotonams, bet ir materijos mikrodalelėms. T. y. kiekvieną mikrodalelę galima apibūdinti ne tik dalelių parametrais – energija  $E$  ir judesio kiekio vektoriumi  $\mathbf{p}$ , bet ir banginiais parametrais – dažniu  $\nu$ , bangos ilgiu  $\lambda$  ir bangos vektoriumi  $\mathbf{k}$ . Dalelės banginių ir dalelinių savybių sąryšiai:

$$E = h\nu, \quad (1.9.1)$$

$$p = \frac{h}{\lambda}, \quad (1.9.2)$$

$$\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}. \quad (1.9.3)$$

*de Broilio formulė* (prancūzų fizikas *Louis de Broglie*, 1924 m.):

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{m\nu}. \quad (1.9.4)$$

Jeigu dalelė nereliatyvistinė, tada  $p = \sqrt{2mE}$ , todėl [\(1.9.4\)](#) formulę galima užrašyti šitaip:

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2mE}}. \quad (1.9.5)$$

Bendruoju atveju mikrodalelė negali vienu metu turėti tiksliai apibrėžtų judesio kiekio ir koordinatės. „Neapibrėžtumo“ sąvoka reiškia, kad, matuojant dalelės koordinatę arba judesio kiekį, po skirtingų matavimų gausime šiek tiek skirtingas vertes, net kai dalelės judėjimo būseną (ir energiją) nekinta.

Vokiečių fizikas Verneris Heizenbergas (*Heisenberg*) 1927 m. suformulavo *neapibrėžtumo sąryšį*, taip pat vadinamą *Heizenbergo nelygybe*: dalelės koordinatės ir judesio kiekio neapibrėžtumai susiję tokia nelygybe:

$$\Delta x \cdot \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2}; \quad (1.9.6)$$

$\hbar = h/(2\pi) \approx 1,05 \cdot 10^{-34}$  J·s yra mažoji Planko konstanta. Pvz., jeigu dalelės koordinatė  $x$  yra tiksliai nustatyta ( $\Delta x = 0$ ), tada pagal [\(1.9.6\)](#)  $\Delta p_x = \infty$ , t. y. judesio kiekio  $x$  komponentė yra visiškai neapibrėžta. Kadangi  $\Delta p_x = m\Delta v_x$ , tai [\(1.9.6\)](#) nelygybę galima užrašyti šitaip:

$$\Delta x \cdot \Delta v_x \geq \frac{\hbar}{2m}. \quad (1.9.7)$$

[\(1.9.6\)](#) arba [\(1.9.7\)](#) nusako, koku tikslumu galima taikyti klasikinės mechanikos dėsnius (pvz., trajektorijos sąvoką) aprašant dalelės judėjimą. Pagal [\(1.9.7\)](#) nelygybę apibrėžta trajektorija gali judėti tik pakankamai masyvūs kūnai arba greitos mikrodalelės. Pavyzdžiai:

1. 1 g masės kūnas juda išilgai  $x$  ašies 1 m/s greičiu, kuris nustatytas  $10^{-9}$  m/s tikslumu. Tada mažiausias galimas koordinatės neapibrėžtumas lygus

$$(\Delta x)_{\min} = \frac{\hbar}{2m\Delta v} \approx 5,3 \cdot 10^{-23} \text{ m}.$$

Tai yra toks mažas dydis, kad jį galima laikyti lygiu nuliui.

2. Elektronų judančio vandenilio atome, koordinatės neapibrėžtumas yra apytiksliai lygus vandenilio atomo matmenims, t. y. maždaug  $10^{-10}$  m. Todėl elektrono greičio neapibrėžtumas vandenilio atome yra didesnis už

$$(\Delta v)_{\min} = \frac{\hbar}{2m\Delta x} \approx 6 \cdot 10^5 \frac{\text{m}}{\text{s}}.$$

Ši vertė yra tos pačios eilės kaip vidutinis elektrono greitis atome [\(1.7.14\)](#). Todėl, aprašant elektrono judėjimą atome, negalima taikyti klasikinės mechanikos dėsnių.

3. Elektroninėje lemposje elektronas juda greičiu  $v_x = 10^6$  m/s, ir šis greitis nustatytas 0,01 % tikslumu, t. y.  $\Delta v_x = 10^6 \cdot 0,0001 = 100$  m/s. Tada mažiausias elektrono koordinatės neapibrėžtumas lygus

$$(\Delta x)_{\min} = \frac{\hbar}{2m\Delta v} \approx 5,8 \cdot 10^{-7} \text{ m},$$

Todėl šiame pavyzdyje klasikinės mechanikos dėsniai yra pakankamai tikslūs praktiniams taikymams.

### 1.10. Elektronų banginių savybių eksperimentinis patvirtinimas

Norint eksperimentiškai aptikti materialijų dalelių banginę prigimtį, reikia atlikti bandymą, kuriame pasireikštų dalelių interferencija arba difrakcija. Analogija: šviesos interferencija išplaukia iš elektromagnetinės bangos išraiškos:

$$\mathcal{E}(x,t) = \mathcal{E}_0 \cos \left[ 2\pi \left( \frac{x}{\lambda} - vt \right) \right]. \quad (1.10.1)$$

Kad pasireikštų bangų difrakcija, bangų kelyje turi būti periodinės kliūtys, kurios nutolusios viena nuo kitos bangos ilgio eilės atstumu (pvz., difrakcinė gardelė – plyšių sistema). 100 eV eilės energijos elektronų bangos ilgis yra atomų matmenų eilės ( $\sim 10^{-10}$  m). Tokios pačios eilės yra ir atstumai tarp gretimų atomų kietose medžiagose. Todėl kietosios medžiagos, kuriose atomai išsidėstę periodiškai (*kristalai*), gali būti naudojamos kaip „natūralios“ difrakcinės gardelės, kurių periodas yra  $10^{-10}$  m eilės.

Elektronų (kaip ir rentgeno spindulių) difrakciją galima pastebėti tiriant jų atspindį nuo kristalo. Spindesio kampą  $\theta$ , atitinkantį didžiausią atspindžio intensyvumą, nusako **Brego lygtis**:

$$2d \sin \theta = n\lambda \quad (n = 1, 2, 3, \dots). \quad (1.10.2)$$

Tokį bandymą 1927 m. atliko amerikiečių fizikai K. Devisonas (*Davisson*) ir L. Džermeris (*Germer*). Monoenerginis elektronų pluoštas krito fiksuotu kampu  $\theta$  į nikelio kristalą. Bandymo metu buvo keičiama elektrono energija  $E$ , t. y. buvo matuojama su įvairiais bangos ilgiais:

$$E = \frac{mv^2}{2} = \frac{m}{2} \left( \frac{h}{m\lambda} \right)^2 = \frac{h^2}{2m\lambda^2}. \quad (1.10.3)$$

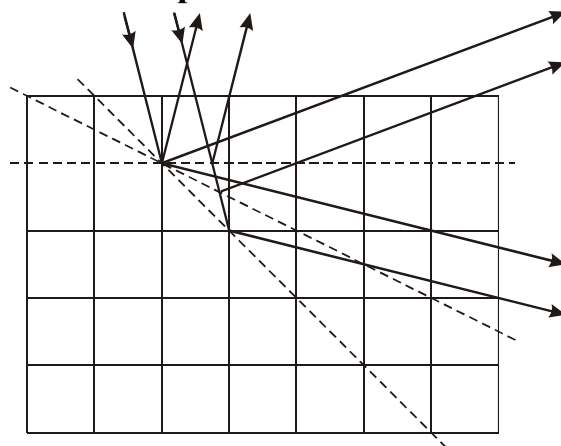
Pagal Brego lygtį (1.10.2) didžiausias veidrodinio atspindžio intensyvumas atitinka

$$\lambda = \lambda_{\max} = \frac{2d \sin \theta}{n}. \quad (1.10.4)$$

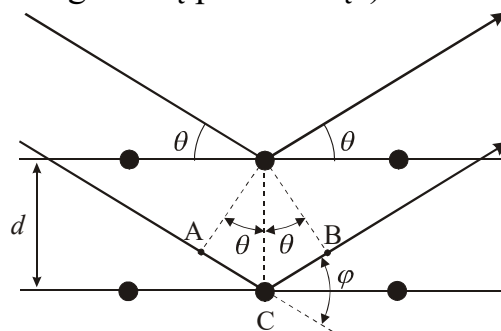
Atitinkama elektronų energija yra

$$E = E_{\max} = \frac{h^2}{2m\lambda_{\max}^2} = \frac{h^2}{8md^2 \sin^2 \theta} \cdot n^2. \quad (1.10.5)$$

T. y. atspindžio intensyvumas periodiškai padidėja ir sumažėja, o periodas yra proporcingas  $\sqrt{E}$ .

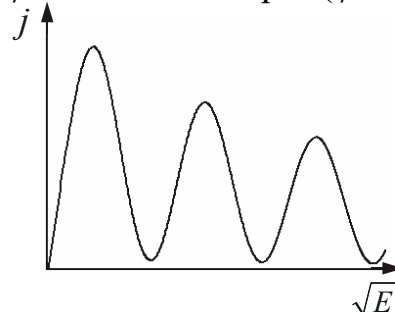


1.10.1 pav. Bangos atspindys nuo plokštumų, kuriose išsidėstę kristalo gardelės mazgai („kristalografinių plokštumų“)



$$\Delta l = |AC| + |CB| = 2d \sin \theta$$

1.10.2 pav. Bangų, kurios atsispindėjo nuo lygiagrečių kristalografinių plokštumų, eigų skirtumo  $\Delta l$  skaičiavimas.  $\theta$  – spindesio kampas,  $\varphi$  – sklaidos kampas ( $\varphi = 2\theta$ )



1.10.3 pav. Atsispindėjusių nuo kristalo elektronų pluošto srauto tankio priklausomybė nuo kvadratinės šaknies iš elektrono energijos



### 1.11. Banginė funkcija ir jos statistinė samprata

Dalelių (pvz., fotonų arba elektronų) difrakcijos reiškinį galima paaiškinti susiejus su dalele tam tikrą bangą. Remiantis analogija su elektromagnetinėmis bangomis, galima teigti, kad tos bangos amplitudės kvadratas turi nusakyti dalelių srauto tankį (taip yra vadinamas dalelių skaičius, kuris kerta vienetinio ploto paviršių per laiko vienetą): pvz., šviesos intensyvumas (ir tuo pačiu – fotonų srauto tankis) yra proporcingas elektrinio lauko amplitudės kvadratui. Taigi, „bangų“ sąvoką šiuo atveju reikia taikyti dydžiui, kurio kvadratas yra lygus dalelės (pvz., elektrono) buvimo duotajame taške tikimybės tankiui. **Tikimybės tankis** – tai dalelės radimo duotojoje nykstamojoje erdvės srityje tikimybės  $dP$  ir tos srities tūrio  $dV$  santykis  $dP/dV$ . Dalelės **banginė funkcija** – tai koordinacių ir laiko kompleksinė funkcija  $\Psi(x,y,z,t)$ , kuri apibūdina dalelės judėjimo būseną ir kurios modulio kvadratas lygus tikimybės tankiui aptikti duotosios būsenos dalelę erdvės taške su koordinatėmis  $x, y$  ir  $z$  laiko momentu  $t$ :

$$|\Psi|^2 = \frac{dP}{dV} \quad (1.11.1)$$

arba

$$dP = |\Psi|^2 dV.$$

Tikimybė aptikti dalelę baigtiniame tūryje  $V$  yra lygi

$$P = \int_V dP = \int_V |\Psi|^2 dV. \quad (1.11.2)$$

**Banginės funkcijos normavimo sąlyga:**

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi|^2 dV = 1. \quad (1.11.3)$$

Dalelės banginė funkcija atitinka **superpozicijos principą**: *dalelės banginė funkcija yra lygi funkcijų, atitinkančių visus galimus įvykius, tiesiniam dariniui*

$$\Psi = \sum_{i=0}^N a_i \Psi_i. \quad (1.11.4)$$

Dėl superpozicijos principo vyksta materialiujų dalelių interferencija ir difrakcija. Pvz., elektronų difrakcija atsispindint nuo kristalo (žr. [1.10 skirsnis](#)) pasireiškia todėl, kad šis atspindys – tai elektronų sklaidos kristalo atomuose pasekmė. Elektroną gali sklaidyti įvairūs atomai. Skirtinguose atomuose išsklaidytų bangų suma („superpozicija“) pasireiškia difrakciniu vaizdu, kurio maksimumus nusako Brego lygtis ([1.10.2](#)).

## 2. Paprasčiausių sistemų banginių funkcijų ir energijos lygmenų apskaičiavimas

### 2.1. Šrėdingerio lygtis, energijos lygmenys, dalelių srauto tankis

Pagrindinę nereliatyvistinės kvantinės mechanikos lygtį 1926 m. suformulavo austrų fizikas Ervinas Šrėdingeris (*Schrödinger*). Todėl ta lygtis pavadinta *Šrėdingerio lygtimi*. Ši lygtis matematiškai apibrėžia dalelės banginę funkciją  $\Psi$ . **Nenuostovioji Šrėdingerio lygtis:**

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi + U(x,y,z,t)\Psi = i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}; \quad (2.1.1)$$

čia  $\hbar$  – mažoji Planko konstanta,  $m$  – dalelės masė,  $\nabla$  – diferencialinis „nabla“ operatorius:

$$\nabla = \mathbf{i}_x \frac{\partial}{\partial x} + \mathbf{i}_y \frac{\partial}{\partial y} + \mathbf{i}_z \frac{\partial}{\partial z},$$

$\nabla^2$  yra Laplaso operatorius (kartais jis žymimas  $\Delta$ ):

$$\nabla^2 \equiv \Delta = \nabla \cdot \nabla = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2},$$

$i = \sqrt{-1}$  yra menamasis vienetas,  $U$  yra dalelės potencinė energija. Jeigu  $U$  nepriklauso nuo laiko (**nuostovusis potencialinis laukas**), tada sprendiniai yra tokio pavidalo:

$$\Psi(x,y,z,t) = \psi(x,y,z)e^{-iEt/\hbar}, \quad (2.1.2)$$

čia  $\psi(x,y,z)$  yra **nuostoviosios Šrėdingerio lygties** sprendinys:

$$\nabla^2\psi + \frac{2m}{\hbar^2}[E - U(x,y,z)]\psi = 0; \quad (2.1.3)$$

$E$  yra pilnutinė mechaninė dalelės energija. Jeigu  $U = U(x,y,z)$ , „banginė funkcija“ dažniausiai vadinama funkcija  $\psi(x,y,z)$ , o ne pilnoji funkcija  $\Psi(x,y,z,t)$ . Sistemos (arba dalelės) būsenos, kurias nusako (2.1.3) lygties sprendiniai, vadinamos **nuostoviosiomis būsenomis**.

Banginė funkcija turi atitikti šias keturias „standartines sąlygas“:

- 1) banginė funkcija turi būti baigtinė (nes tikimybės tankis negali būti begalinis);
- 2) banginė funkcija turi būti vienareikšmė (nes tikimybė negali būti daugiareikšmė);
- 3) banginė funkcija turi būti tolydi (nes tikimybės tankis erdvėje negali kisti šuoliais);
- 4) banginės funkcijos išvestinės  $x$ ,  $y$  ir  $z$  atžvilgiu turi būti tolydžios (vienintelė išimtis – taškai, kur potencinė energija  $U$  šuoliškai pakinta nuo baigtinės vertės iki  $\pm\infty$ ).

Nuostoviosios Šrėdingerio lygties sprendiniai, kurie atitinka šias sąlygas, egzistuoja tik tada, kai pilnutinė energija  $E$  yra lygi tam tikroms vertėms:  $E = E_n$  ( $n = 1, 2, 3, \dots$ ). Tai yra atitinkami **energijos lygmenys**. Energijos lygmenų spektras gali būti diskretus arba ištisinis.

Jeigu dalelės nėra sukuriamos ir neišnyksta, tada jų koncentracija ( $\rho$ ) gali keistis tik dėl jų judėjimo erdvėje. Matematinė šio teiginio išraiška yra **tolydumo lygtis**:

$$\frac{\partial\rho(\mathbf{r},t)}{\partial t} = -\nabla\mathbf{j}(\mathbf{r},t); \quad (2.1.4)$$

čia  $\mathbf{j}$  yra dalelių srauto tankio vektorius.

$$\frac{\partial\rho(\mathbf{r},t)}{\partial t} = N \frac{\partial}{\partial t}(\Psi\Psi^*) = N \left( \Psi^* \frac{\partial\Psi}{\partial t} + \Psi \frac{\partial\Psi^*}{\partial t} \right). \quad (2.1.5)$$

Pagal (2.1.1),  $\Psi$  ir kompleksiskai jungtinės funkcijos ( $\Psi^*$ ) dalinės išvestinės  $t$  atžvilgiu lygios

$$\frac{\partial\Psi}{\partial t} = \frac{i\hbar}{2m}\nabla^2\Psi - \frac{i}{\hbar}U\Psi, \quad (2.1.6a)$$

$$\frac{\partial\Psi^*}{\partial t} = -\frac{i\hbar}{2m}\nabla^2\Psi^* + \frac{i}{\hbar}U\Psi^*. \quad (2.1.6b)$$

Padauginus (2.1.6a) iš  $\Psi^*$ , o (2.1.6b) iš  $\Psi$  ir sudėjus:

$$\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial t} + \Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} = \frac{i\hbar}{2m} (\Psi^* \nabla^2 \Psi - \Psi \nabla^2 \Psi^*) \equiv -\frac{i\hbar}{2m} \nabla (\Psi \nabla \Psi^* - \Psi^* \nabla \Psi). \quad (2.1.7)$$

(2.1.7)  $\rightarrow$  (2.1.5):

$$\frac{\partial \rho(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = -N \frac{i\hbar}{2m} \nabla (\Psi \nabla \Psi^* - \Psi^* \nabla \Psi). \quad (2.1.8)$$

Palyginus (2.1.8) lygybę su (2.1.4), gaunama vidutinio dalelių srauto tankio išraiška:

$$\mathbf{j} = N \frac{i\hbar}{2m} (\Psi \nabla \Psi^* - \Psi^* \nabla \Psi). \quad (2.1.9)$$

Kai  $N = 1$ , dydžio  $\mathbf{j}$  prasmė – *tikimybės srauto tankis*.

## 2.2. Paprasčiausių sistemų Šrėdingerio lygties sprendimas

Vienmačiu atveju, kai sistemos konfigūraciją nusako viena koordinatė  $x$ , vietoj trimatės nuostoviosios Šrėdingerio lygties (2.1.3) reikia spręsti vienmatę nuostoviąją Šrėdingerio lygtį:

$$\frac{d^2 \psi}{dx^2} = \frac{2m}{\hbar^2} (U(x) - E) \psi. \quad (2.2.1)$$

*Laisvųjų dalelių banginė funkcija ir srauto tankis*

Laisvos dalelės atveju  $U \equiv 0$ . Atitinkama vienmatė Šrėdingerio lygtis (2.2.1):

$$\frac{d^2 \psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E \psi = 0$$

arba

$$\frac{d^2 \psi}{dx^2} + k^2 \psi = 0, \quad (2.2.2)$$

čia

$$k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}. \quad (2.2.3)$$

Bendrasis (2.2.2) lygties sprendinys:

$$\psi(x) = A e^{ikx} + B e^{-ikx} \quad (2.2.4a)$$

Kadangi  $e^{\pm ikx} = \cos(kx) + i \cdot \sin(kx)$ , šį sprendinį galima užrašyti kitaip:

$$\psi(x) = A' \cos kx + B' \sin kx, \quad (2.2.4b)$$

čia  $A' = A + B$ , o  $B' = i(A - B)$ . Pilnoji (priklausanti nuo laiko) banginė funkcija gaunama pagal (2.1.2):

$$\Psi(x, t) = \psi(x) e^{-iEt/\hbar} = A e^{i(kx - \omega t)} + B e^{-i(kx + \omega t)}, \quad (2.2.5)$$

čia

$$\omega = E / \hbar. \quad (2.2.6)$$

Pirmasis (2.2.5) reiškinių dėmuo yra teigiamąja  $x$  ašies kryptimi sklindanti banga, o antrasis dėmuo yra neigiamąja  $x$  ašies kryptimi sklindanti banga. Jeigu dalelių šaltinis yra taške  $x = -\infty$ , tada banga gali sklisti tik teigiamąja kryptimi, t. y.  $B = 0$ . Kadangi nėra kraštinių sąlygų, tai nulinė ir visos teigiamos  $E$  vertės yra leistinos. Normavimo sąlyga (1.11.3) šiuo atveju negali būti panaudota, nes funkcijų  $\sin^2 kx$  ir  $\cos^2 kx$  integralai nuo  $x = -\infty$  iki  $x = \infty$  yra neapibrėžti.

Vienos dalelės srauto tankis (2.1.9) vienmačiu atveju yra lygus

$$\mathbf{j} = \frac{i\hbar}{2m} \left( \Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} - \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} \right). \quad (2.2.7)$$

Irašę banginės funkcijos išraišką (2.2.5) su  $B = 0$  į (2.2.7), gauname:

$$j = \frac{\hbar k}{m} |A|^2. \quad (2.2.8)$$

Taigi, daugiklio prieš kompleksinę eksponentę modulio kvadratas proporcingas srauto tankiui.

*Vienmatis potencialo barjeras. Tunelinis reiškiny*

Stačiakampio potencialo barjero atveju (2.2.1) lygtį reikia spręsti kiekvienai iš trijų sričių:

$$\begin{aligned} \frac{d^2\psi_1}{dx^2} + k_1^2\psi_1 &= 0 & \text{(I sritis: } x < 0), \\ \frac{d^2\psi_2}{dx^2} - k_2^2\psi_2 &= 0 & \text{(II sritis: } 0 \leq x \leq w), \\ \frac{d^2\psi_3}{dx^2} + k_1^2\psi_3 &= 0 & \text{(III sritis: } x > w). \end{aligned}$$

$$k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}, \quad k_2 = \frac{\sqrt{2m(U_0 - E)}}{\hbar}.$$

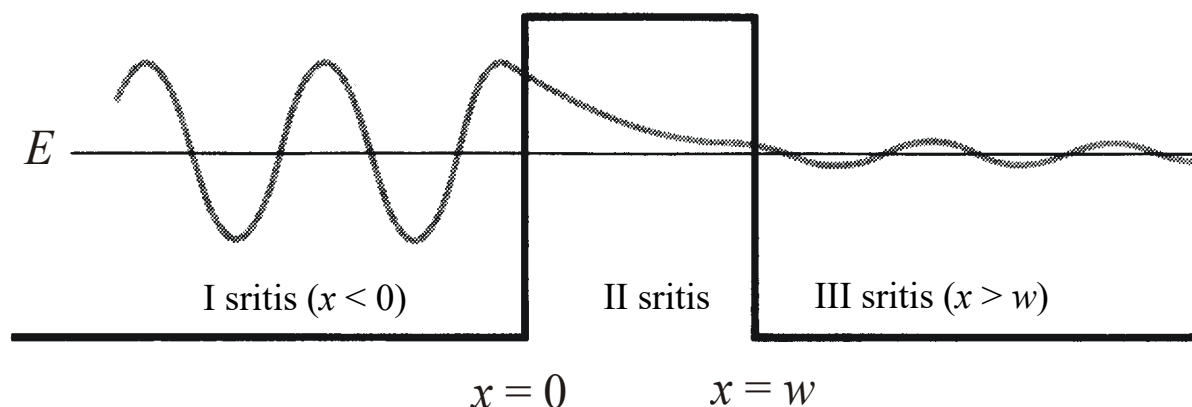
I ir III lygtys yra tokio paties pavidalo kaip (2.2.2), todėl jų bendrasis sprendinys yra dviejų kompleksinių eksponentinių funkcijų tiesinis darinys (plg. su (2.2.4a)). II lygties pavidalas skiriasi nuo I ir III lygčių pavidalo ženklu prieš antrąjį dėmenį. Šios lygties bendrasis sprendinys yra dviejų *realiųjų* eksponentinių funkcijų  $\exp(k_2x)$  ir  $\exp(-k_2x)$  tiesinis darinys. Taigi, sprendinys gaunamas „sujungus“ tris funkcijas:

$$\begin{aligned} \psi_1 &= A \exp(ik_1x) + B \exp(-ik_1x) & \text{(I sritis),} \\ \psi_2 &= C \exp(k_2x) + D \exp(-k_2x) & \text{(II sritis),} \\ \psi_3 &= F \exp(ik_1x) + G \exp(-ik_1x) & \text{(III sritis).} \end{aligned}$$

Šis „sujungimas“ turi būti toks, kad galiotų standartinės sąlygos (žr. 2.1 skirsnis), t. y. funkcija  $\psi$  ir jos išvestinė  $x$  atžvilgiu turi būti tolydžios. Jeigu dalelių šaltinis yra taške  $x = -\infty$ , tada  $G = 0$ .

$A$  yra *krintančiosios* bangos amplitudė,  $B$  yra *atsispindėjusios* bangos amplitudė, o  $F$  yra *praėjusios* bangos amplitudė. Amplitudžių modulių kvadratai proporcingi atitinkamiems srauto tankiams (žr. (2.2.8)).

Erdvės srityse, kur  $E > U$ , tikimybės tankio priklausomybė nuo koordinatės yra osciliuojanti, o srityse kur  $E < U$ , eksponentiškai mažėja. Šis teiginys yra bendras, jis galioja ir trimačiu atveju (tačiau bendruoju atveju osciliacijos nėra periodinės, o mažėjimas yra tik apytiksliai eksponentinis).



**2.2.1 pav.** Banginė funkcija, kai yra potencialo barjeras, kurio aukštis didesnis už dalelės energiją

Potencialo barjero *skaidris* – tai barjerą praėjusių ir į jį kritusių dalelių srauto tankių santykis:

$$S \equiv \frac{|F|^2}{|A|^2}. \quad (2.2.9)$$

Kai barjeras yra aukštas arba platus, t. y. kai

$$k_2 w \gg 1, \quad (2.2.10)$$

tada

$$S \approx \exp\left[-\frac{2}{\hbar}\sqrt{2m(U_0 - E)} \cdot w\right] \ll 1.$$

Toks reiškiny, kai dalelė pereina pro potencialo barjerą, turėdama mažiau energijos, negu jos reikėtų kad pereiti virš barjero, vadinamas *tuneliniu reiškiniu* arba *tuneline pereiga*.

Bet kokios formos plataus potencialo barjero skaidrį galima apytiksliai apskaičiuoti suskaidžius tą barjerą į didelį skaičių  $N$  plonų stačiakampių barjerų:

$$S \approx \lim_{N \rightarrow \infty} \prod_{n=1}^N S_n \approx \exp\left[-\frac{2}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{2m(U(x) - E)} dx\right]. \quad (2.2.11)$$

*Dalelė be galo gilioje vienmatėje stačiakampėje potencialo duobėje*

Vienmatė begalinio gylio potencialo duobė:

$$U(x) = \begin{cases} 0, & 0 \leq x \leq w; \\ \infty, & x < 0 \text{ ir } x > w. \end{cases} \quad (2.2.12)$$

Intervale  $[0, w]$  Šrėdingerio lygtis (2.2.1) yra:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + k^2\psi = 0 \quad (0 \leq x \leq w), \quad (2.2.13)$$

$$k = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} E}. \quad (2.2.14)$$

Bendrasis sprendinys:

$$\psi(x) = A \sin kx + B \cos kx. \quad (2.2.15)$$

Konstantos  $A$  ir  $B$  randamos iš lygties kraštinių sąlygų, kurios gaunamos remiantis banginės funkcijos tolydumu taškuose  $x = 0$  ir  $x = w$ :

$$\psi(0) = 0, \quad \psi(w) = 0. \quad (2.2.16)$$

T. y.

$$1) \quad A \cdot \sin(0) + B \cdot \cos(0) = B = 0,$$

$$2) \quad A \cdot \sin kw + B \cdot \cos kw = A \cdot \sin kw = 0.$$

Iš pirmosios sąlygos ir iš (2.2.15) išplaukia, kad

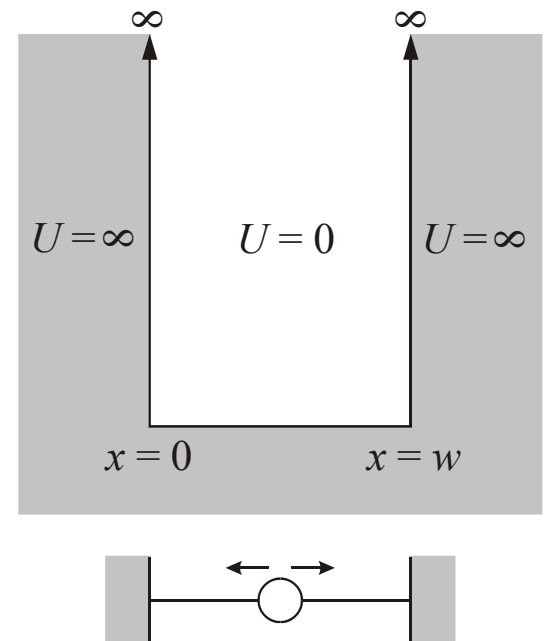
$$\psi(x) = A \sin kx. \quad (2.2.17)$$

Iš antrosios sąlygos išplaukia, kad  $\sin kw = 0$ , t. y.

$$k = \frac{n\pi}{w} \quad (n = 1, 2, \dots) \quad (2.2.18)$$

(2.2.18) → (2.2.14):

$$E = E_n = n^2 \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mw^2} = n^2 \frac{h^2}{8mw^2} \quad (n = 1, 2, 3, \dots). \quad (2.2.19)$$



**2.2.2 pav.** Begalinio gylio stačiakampė potencialo duobė ir jos klasikinis analogas: rutuliukas, kuris slysta be trinties išilgai vielos ir tampa atšoka nuo kietų sienų taškuose  $x = 0$  ir  $x = w$

Daugiklis  $A$  apskaičiuojamas remiantis vienmate normavimo sąlyga (plg. su (1.11.3)):

$$\int_0^w \psi^2(x) dx = 1. \quad (2.2.20)$$

(2.2.17) → (2.2.20):

$$A = \sqrt{\frac{2}{w}}. \quad (2.2.21)$$

(2.2.21) ir (2.2.18) → (2.2.17):

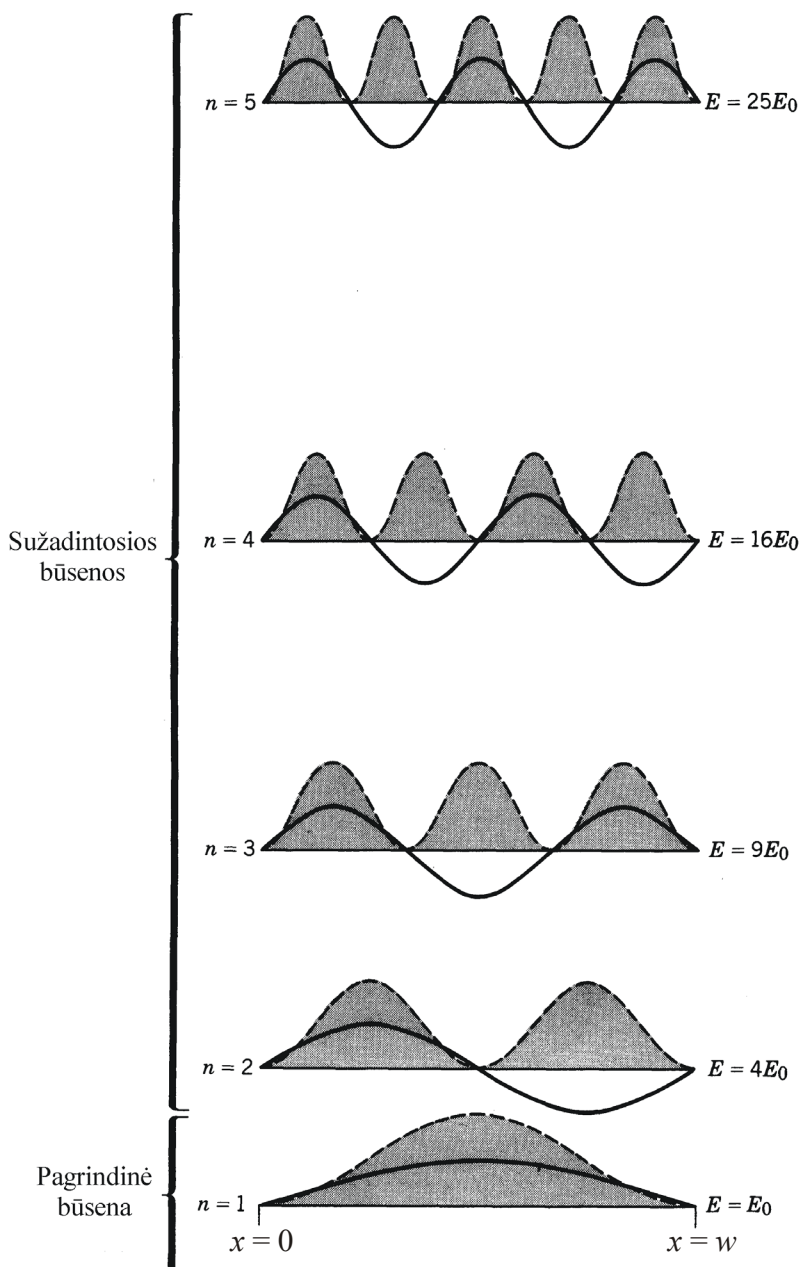
$$\psi(x) = \psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{w}} \sin \frac{n\pi}{w} x \quad (2.2.22)$$

$(n = 1, 2, 3, \dots)$ .

Išvados:

1) Potencialo duobėje esančios dalelės energija gali būti lygi ne bet kokiai vertei, o tik diskrečioms vertėms. Ši išvada galioja bet kokio pavidalo (taip pat ir trimatei) potencialo duobei (nebūtinai begalinio gylio).

2) Vienmatės stačiakampės begalinio gylio potencialo duobės atveju gretimų energijos lygmenų skirtumas yra atvirkščiai proporcingas  $mw^2$ . Pvz., kai  $w = 10$  cm, o dalelė yra elektronas ( $m = 9,1 \cdot 10^{-31}$  kg), tada gretimų lygmenų skirtumas ( $\Delta E$ ) yra tik  $10^{-17}$  eV eilės. Kai potencialo duobės matmenys yra tokie patys kaip atomo ( $10^{-10}$  m), tada  $\Delta E \sim 10$  eV. Kai potencialo duobės matmenys yra tokie patys kaip branduolio ( $3 \cdot 10^{-15}$  m), o dalelė yra protonas arba neutronas ( $m = 1,67 \cdot 10^{-27}$  kg), tada  $\Delta E \sim 10$  MeV.



**2.2.3 pav.** Be galo gilios vienmatės stačiakampės potencialo duobės energijos lygmenys, banginės funkcijos (ištininės kreivės) ir tikimybės tankiai (brūkšninės kreivės). Energija  $E_0$  lygi  $h^2/(8mw^2)$ .

*Dalelė be galo gilioje trimatėje stačiakampėje potencialo duobėje*

Jeigu begalinio gylio potencialo duobė yra kubo formos, tada vietoj vienmatės Šrėdingerio lygties (2.2.13) reikia spręsti trimatę lygtį

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} + k^2 \psi = 0, \quad (2.2.23)$$

o vietoj dviejų kraštinių sąlygų (2.2.16) yra šešios – po vieną kiekvienai kubo sienai:

$$\begin{cases} \psi(0, y, z) = 0, & \psi(w, y, z) = 0; \\ \psi(x, 0, z) = 0, & \psi(x, w, z) = 0; \\ \psi(x, y, 0) = 0, & \psi(x, y, w) = 0. \end{cases} \quad (2.2.24)$$

(2.2.23) lygtis sprendžiama **kintamųjų atskyrimo metodu**:

$$\psi(x, y, z) = X(x)Y(y)Z(z). \quad (2.2.25)$$

Irašius (2.2.25) į (2.2.23) ir padalijus abi puses iš  $\psi(x, y, z)$ :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{1}{X} \frac{\partial^2 X}{\partial x^2} + \frac{1}{Y} \frac{\partial^2 Y}{\partial y^2} + \frac{1}{Z} \frac{\partial^2 Z}{\partial z^2} \right) = E. \quad (2.2.26)$$

Kadangi  $x$ ,  $y$  ir  $z$  kinta nepriklausomai vienas nuo kito, tai trys dėmenys kairiojoje (2.2.26) lygybės pusėje taip pat yra nepriklausomi vienas nuo kito. Todėl (2.2.26) lygybė gali būti tiksli esant visoms  $x$ ,  $y$  ir  $z$  vėrtėms tik tada, kai kiekvienas iš šių trijų dėmenų yra lygus konstantai (**atskyrimo konstantai**):

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{1}{X} \frac{\partial^2 X}{\partial x^2} \right) = \text{const} = E_x, \quad -\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{1}{Y} \frac{\partial^2 Y}{\partial y^2} \right) = \text{const} = E_y, \quad -\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{1}{Z} \frac{\partial^2 Z}{\partial z^2} \right) = \text{const} = E_z, \quad (2.2.27)$$

ir kai visų šių konstantų suma yra lygi  $E$ :

$$E_x + E_y + E_z = E. \quad (2.2.28)$$

(2.2.27) lygčių sprendiniai yra tokio paties pavidalo, kaip vienmačiu atveju (žr. (2.2.22)), t. y.

$$\psi(x, y, z) = \psi_{n_x, n_y, n_z}(x) = \left( \frac{2}{w} \right)^{\frac{3}{2}} \sin k_x x \cdot \sin k_y y \cdot \sin k_z z; \quad (2.2.29)$$

$$k_x = \frac{n_x \pi}{w}, \quad k_y = \frac{n_y \pi}{w}, \quad k_z = \frac{n_z \pi}{w} \quad (n_x, n_y, n_z = 1, 2, 3, \dots). \quad (2.2.30)$$

Kiekvienas dėmuo (2.2.28) reiškinyje išsireiškia taip pat, kaip vienmačiu atveju (žr. (2.2.19)), t. y.

$$E = E_n = \frac{\hbar^2}{8m w^2} (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2) \quad (n_x, n_y, n_z = 1, 2, 3, \dots). \quad (2.2.31)$$

Matome, kad potencialo duobėje esančios dalelės energija (pvz., (2.2.19) arba (2.2.31)) priklauso nuo vieno arba kelių sveikųjų skaičių (pvz., (2.2.19) formulėje –  $n$ , o (2.2.31) formulėje –  $n_x$ ,  $n_y$  ir  $n_z$ ). Kvantinėje mechanikoje visi tvarūs diskretūs fizikiniai dydžiai (pvz., potencialo duobėje esančios dalelės energija) nusakomi bedimensiais skaičiais (dažniausiai sveikaisiais arba pusiniais), kurie vadinami **kvantiniais skaičiais**. Kiekvienas kvantinių skaičių verčių rinkinys atitinka vieną **kvantinę būseną**. Kvantinių skaičių kiekis ir jų fizikinė prasmė priklauso nuo konkrečios fizikinės sistemos.

## Vienmatis harmoninis osciliatorius

Arti potencinės energijos minimumo taško bet kokios vienmatės sistemos potencinę energiją galima aproksimuoti reiškiniu

$$U(x) = \frac{1}{2} kx^2, \quad (2.2.32)$$

čia  $k$  yra konstanta. Kadangi dalelę veikianti jėga yra lygi  $F = -dU/dx$ , tai dalelės judėjimo klasikinė lygtis (II Niutono dėsnis) šiuo atveju yra

$$\frac{d^2x}{dt^2} + \omega_0^2 x = 0, \quad (2.2.33)$$

čia  $\omega_0 = \sqrt{k/m}$ . (2.2.33) yra harmoninio osciliatoriaus lygtis (plg. su (1.1.4)), kurios bendrasis sprendinys yra harmoninė funkcija  $x(t) = a \cos(\omega_0 t + \theta)$ .

Vienmatės Šrėdingerio lygties (2.2.1) sprendiniai, kai  $U(x)$  yra (2.2.32) pavidalo, yra

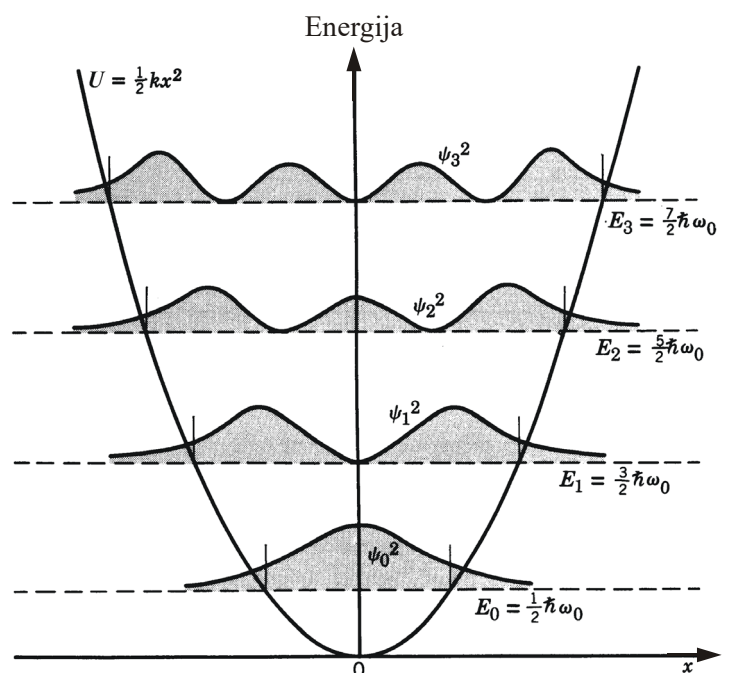
$$\psi_n(x) = h_n(x) e^{-\alpha^2 x^2 / 2},$$

čia  $\alpha^2 = \sqrt{km}/\hbar$ , o  $h_n(x)$  yra tam tikras  $n$ -tojo laipsnio daugianaris (proporcingas to paties laipsnio Hermito daugianariui). Energijos lygmenys:

$$E_n = \hbar \omega_0 \left( n + \frac{1}{2} \right); \quad n = 0, 1, 2, 3, \dots \quad (2.2.34)$$

Vadinasi, kvantinio harmoninio osciliatoriaus energija gali įgyti tik diskrečias vertes (2.2.34), kurios nutolusios viena nuo kitos vienodu atstumu  $\hbar \omega_0$ . Mažiausia osciliatoriaus energija nėra lygi nuliui, o yra lygi  $E_0 = \hbar \omega_0 / 2$ .

Vienmatis harmoninis osciliatorius yra tapatus vienmatei parabolinei potencialo duobei (žr. (2.2.32)). Kaip matome iš 2.2.4 pav., tokioje potencialo duobėje esančios dalelės banginė funkcija yra nelygi nuliui ne tik erdvės srityse, kur  $E > U$ , bet ir erdvės srityse, kur  $E < U$ . Erdvės srityse, kur  $E > U$ , banginė funkcija yra osciliuojanti, o erdvės srityse, kur  $E < U$ , banginė funkcija eksponentiškai mažėja tolstant nuo taško, kur  $E = U$  (mažėjimas yra tuo spartesnis, kuo sparčiau auga skirtumas  $U - E$  tolstant nuo taško, kuriame  $E = U$ ). Šis rezultatas patvirtina bendrąjį išvadą, kuri buvo suformuluota aptariant potencialo barjerą (žr. 2.2.1 pav.), ir matematiškai išplaukia iš banginės funkcijos ir jos išvestinių tolydumo visuose erdvės taškuose. Dėl šio tolydumo banginė funkcija negali sumažėti iki nulio šuoliškai ir dalelė gali „išsiskverbti“ į erdvės sritį, kurioje  $E < U$ , tam tikru mažu atstumu, kuris yra tuo mažesnis, kuo didesnis skirtumas  $U - E$ . Atskiru atveju, kai  $U \rightarrow \infty$  (žr. 2.2.2 pav.), dalelė negali atsisturėti srityje, kur  $E < U$ , o banginės funkcijos išvestinės koordinatų atžvilgiu turi trūkti ant potencialo duobės krašto (žr. 2.2.3 pav.).



2.2.4 pav. Keli žemiausieji vienmačio harmoninio osciliatoriaus energijos lygmenys ir atitinkami tikimybės tankiai



## Elektronas branduolio elektriniame lauke

Kitas trimatės potencialo duobės pavyzdys yra elektrono ir atomo branduolio sistema (vandeniliškasis atomas). Potencinė energija:

$$U(r) = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze^2}{r}; \quad (2.2.35)$$

Atitinkama nuostovioji Šrėdingerio lygtis (2.1.3):

$$\nabla^2\psi + \frac{2m}{\hbar^2} \left( E + \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze^2}{r} \right) \psi = 0. \quad (2.2.36)$$

Išsprendus šią lygtį, gaunamos tiksliai tos pačios energijos lygmenų vertės, kurias numatė Boro teorija (žr. (1.7.26)):

$$E_n = -\frac{Z^2}{n^2} \cdot \frac{me^4}{8\epsilon_0^2\hbar^2} = -\frac{1}{n^2} \frac{\hbar^2}{2r_1^2 m} = -\frac{Z^2}{n^2} \cdot 13,6 \text{ eV} \quad (n = 1, 2, 3, \dots).$$

Paprasčiausia yra mažiausios energijos ( $E_1$ ) banginės funkcijos  $\psi_1$  išraiška:

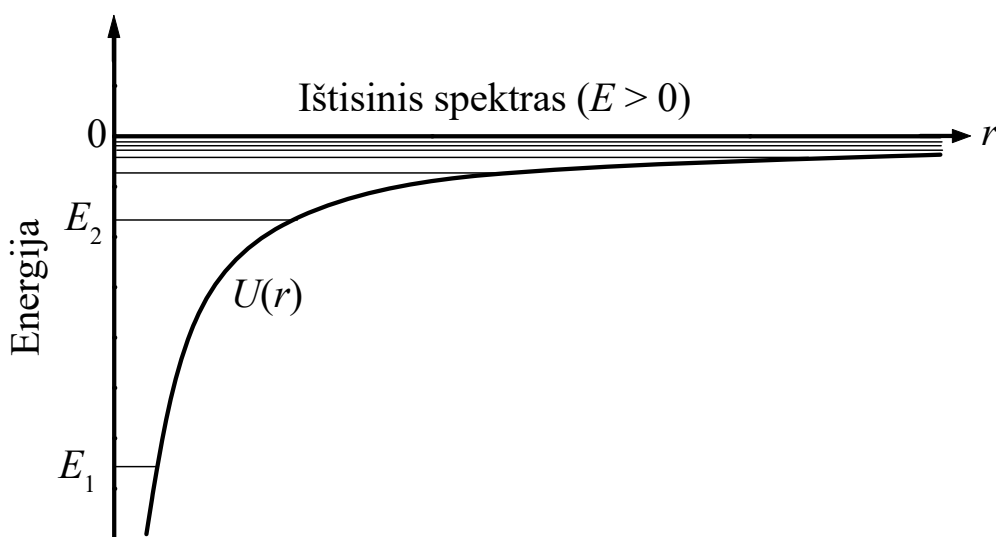
$$\psi_1(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi r_1^3}} \exp\left(-\frac{r}{r_1}\right); \quad (2.2.37)$$

čia  $r_1$  yra pirmasis Boro spindulys, padalytas iš branduolio krūvio skaičiaus  $Z$  (žr. (1.7.25)):

$$r_1 = \frac{\epsilon_0 \hbar^2}{\pi m Z e^2} \approx \frac{0,529 \text{ \AA}}{Z}.$$

Iš (2.2.37) ir iš banginės funkcijos statistinės sampratos (žr. 1.11 skirsnis) išplaukia, kad elektronas atome yra tolydžiai pasiskirstęs aplink branduolį. Sakoma, kad atomo elektronai (H atomo – vienas elektronas) sudaro „elektronų debesį“. Taigi, Boro teorijos įvaizdis apie elektroną, kuris juda apibrėžtu greičiu apskrita orbita apie branduolį, yra neteisingas.

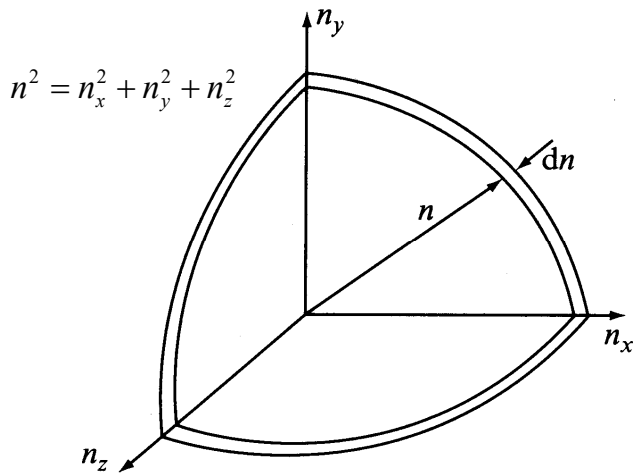
Banginė funkcija (2.2.37) sparčiai mažėja didėjant  $r$ . Pvz., atstumu  $r = 10r_1 = 5,3 \cdot 10^{-10} \text{ m}$  banginės funkcijos vertė yra  $e^{-10} \approx 22000$  kartų mažesnė už jos didžiausią vertę. Taigi, „elektronų debesies“ matmenys atitinka kelis pirmosios Boro orbitos spindulius.



2.2.5 pav. Vandenilio atomo potencinė energija ir energijos lygmenys

### 2.3. Laisvų dalelių būsenų tankis ir banginių funkcijų normavimas

**Būsenų tankis**  $\rho(E)$  (tiksliau – *energijos būsenų tankis*) yra skirtingų kvantinių būsenų skaičius, atitinkantis vienetinį energijos intervalą. Būsenų tankis reikalingas apskaičiuojant fizikinių vyksmų spartas, nes bet kuris vyksmas gali būti aprašytas kaip dalelių pereiga („kvantiniai šuoliai“) iš vienos būsenos į kitą. Vyksmo spartą lemia dalelės šuolio iš duotos pradinės būsenos į duotą galutinę būseną tikimybė per laiko vienetą. Kai yra daug „užimtų“ pradinių būsenų arba daug „laisvų“ galutinių būsenų, tada minėtąją tikimybę reikia sumuoti jų atžvilgiu. Žinant energinį būsenų tankį  $\rho(E)$ , ši sumavimą galima pakeisti integravimu energijos  $E$  atžvilgiu (tai palengvina apskaičiavimus).



**2.3.1 pav.** Dalelės, kuri uždaryta kubinėje erdvės srityje, kvantines būsenas atitinkantys kvantiniai skaičiai (pagal (2.2.31)). Kiekvieną būseną atitinka taškas, kurio koordinatės yra sveikieji teigiamieji skaičiai. Kadangi yra leidžiamos visos jų vertės, tai vienetiniame tūryje esančių būsenų skaičius lygus 1. T. y. šioje „ $n$  erdvėje“ būsenų tankis lygus 1. Visos būsenos, kurios priklauso plonam oktanto sferiniam sluoksniui tarp  $n$  ir  $n + dn$ , turi apytiksliai vienodą energiją.

Oktanto sluoksnyje esančių būsenų skaičius:

$$\rho(E)dE = \frac{\pi n^2 dn}{2} = \pi \cdot n \cdot \frac{ndn}{2}. \quad (2.3.1)$$

Pagal (2.2.31)

$$E = \frac{h^2 n^2}{8mw^2}, \quad n^2 = \frac{8mw^2}{h^2} E, \quad (2.3.2)$$

$$n = \frac{w}{h} \sqrt{8mE}, \quad \frac{ndn}{2} = \frac{d(n^2)}{4} = \frac{2mw^2}{h^2} dE. \quad (2.3.3)$$

(2.3.3) → (2.3.1):

$$\rho(E) = V \frac{2^{5/2} \pi m^{3/2}}{h^3} \sqrt{E}, \quad (2.3.4)$$

čia  $V = w^3$  yra kubo tūris.

Dalelės, kuri uždaryta potencialo duobėje, banginės funkcijos yra stovinčiųjų bangų pavidalo (žr. (2.2.29–30)). Laisvos dalelės banginės funkcijos yra *bėgančiųjų* bangų pavidalo:

$$\psi(\mathbf{r}) \sim \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) = \exp(i(k_x x + k_y y + k_z z)). \quad (2.3.5)$$

Tos bangos kartais vadinamos „de Broilio bangomis“ (prancūzų fiziko *Louis de Broglie*, kuris postulavo jų egzistavimą 1924 m., garbei).  $\mathbf{k}$  yra bangos vektorius, kuris susijęs su impulsu  $\mathbf{p}$ :

$$\mathbf{p} = \hbar \mathbf{k}. \quad (2.3.6)$$

Bangų ciklinis dažnis  $\omega$  susijęs su dalelės kinetine energija  $E$ :

$$E = \hbar \omega. \quad (2.3.7)$$

Jeigu dalelė yra nereliatyvistinė, tada

$$E = \frac{p^2}{2m}, \quad (2.3.8)$$

čia  $p = |\mathbf{p}|$ . (2.3.6) → (2.3.8):

$$k = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} E}, \quad (2.3.9)$$

čia  $k = |\mathbf{k}|$ . Laisvosios dalelės Šrėdingerio lygtis gaunama įrašius  $U(x,y,z) \equiv 0$  į (2.1.3):

$$\nabla^2 \psi + k^2 \psi = 0. \quad (2.3.10)$$

Banginė funkcija (2.3.5) yra Šrėdingerio lygties (2.3.10) sprendinys esant bet kokiai  $k$  vertei, t. y. esant bet kokiai  $E$  vertei, atitinkančiai nelygybę  $E \geq 0$  (žr. (2.3.9)). Tai reiškia, kad laisvos dalelės būsenų tankis  $\rho(E) \rightarrow \infty$ . Išsiaiškinsime, kaip šis faktas įtakoja apskaičiavimus. Pvz., reikia apskaičiuoti proceso, kurio metu laisvosios dalelės keičia savo energiją ir judėjimo kryptį dėl susidūrimų su kitomis dalelėmis, kurios yra modeliuojamos kaip nejudantys materialieji taškai, spartą. Jeigu sąveika yra trumpasiekė (t. y. jeigu jėga, kuri sklaido daleles, pasireiškia tik nuliniu atstumu nuo sklaidos centro), tada vienos dalelės, kurios pradinė energija  $E_0$ , „indėlis“ į sklaidos įvykių skaičių per laiko vienetą tūrio vienetą dėl sąveikos su konkrečiu sklaidos centru, esančiu taške  $\mathbf{r}$ , yra lygus

$$\Phi = |\psi_0(\mathbf{r})|^2 \int_0^\infty \lambda(E_0, E) \rho(E) dE, \quad (2.3.11)$$

čia  $\psi_0$  yra pradinė dalelės banginė funkcija, o  $\lambda(E_0, E)$  yra kvantinio šuolio iš būsenos su energija  $E_0$  į būseną su energija  $E$  tikimybė per laiko vienetą. Kadangi laisvoji dalelė su vienoda tikimybe gali būti bet kur, tai iš normavimo sąlygos (1.11.3)  $\psi_0(\mathbf{r}) \rightarrow 0$ . Kaip minėta,  $\rho(E) \rightarrow \infty$ . Vadinasi, (2.3.11) lygybės dešiniojoje pusėje atsiranda matematinis „ $0 \cdot \infty$ “ tipo neapibrėžtumas. Norint apskaičiuoti sklaidos spartą, reikia pašalinti šį neapibrėžtumą, naudojant standartinius matematinės analizės metodus (pvz., Lopotailio taisyklę). Tačiau patogiau išvengti šio papildomo žingsnio, modifikavus tą patį uždavinį taip, kad minėtasis neapibrėžtumas neatsirastų, t. y. kad visi daugikliai būtų baigtiniai. Tuo tikslu, apibrėžiant laisvos dalelės būsenų tankį, daroma formali prielaida, kad dalelė yra viduje kubo, kurio briaunos ilgis  $w$ , ir yra naudojamos **periodinės kraštinės sąlygos**:

$$\begin{cases} \psi(0, y, z) = \psi(w, y, z); \\ \psi(x, 0, z) = \psi(x, w, z); \\ \psi(x, y, 0) = \psi(x, y, w). \end{cases} \quad (2.3.12)$$

(plg. su (2.2.24)). Periodinės kraštinės sąlygos (2.3.12) teigia, kad simetriniai taškai, esantys ant priešingų kubo sienų, yra tapatūs vienas kitam. Kitaip sakant, dalelė, kuri išėjo iš kubo, yra tartum automatiškai „gražinama“ į jo vidų, perkeliant ją į simetrinį tašką, esantį ant priešingos sienos. Tai yra tapatu prielaidai, kad visa erdvė yra užpildyta kubinėmis tiriamosios fizikinės sistemos „kopijomis“, kurios sudaro kubinę „gardelę“ (kaip atomai kubiniuose kristaluose), o kiekviena dalelė (kuri gali būti bet kuriame erdvės taške), yra pakeičiama begaliniu skaičiumi jos „kopijų“, kurių kiekviena yra uždaryta atitinkamoje kubinėje srityje. Kompleksinė eksponentinė funkcija (2.3.5) atitinka periodines kraštinės sąlygas (2.3.12) tada, kai dalelės banginio vektoriaus komponentės atitinka šias lygybes:

$$k_x = \frac{2n_x \pi}{w}, \quad k_y = \frac{2n_y \pi}{w}, \quad k_z = \frac{2n_z \pi}{w} \quad (n_x, n_y, n_z = 0, \pm 1, \pm 2, \dots) \quad (2.3.13a)$$

(plg. su (2.2.30)). Kitaip tas pačias banginio vektoriaus komponentes galima išreikšti šitaip:

$$k_x = \frac{n_x \pi}{w}, \quad k_y = \frac{n_y \pi}{w}, \quad k_z = \frac{n_z \pi}{w} \quad (n_x, n_y, n_z = 0, \pm 2, \pm 4, \dots). \quad (2.3.13b)$$

Šios išraiškos sutampa su (2.2.30), tačiau pasikeičia leidžiamos kvantinių skaičių  $n_x$ ,  $n_y$  ir  $n_z$  vertės. Energinio būsenų tankio išraiška lieka tokia pati, kaip ir kubinės potencialo duobės, nes:

- I. Vietoj oktanto sluoksnio reikia nagrinėti visą sferinį sluoksnį (nes bet kurios dvi būsenos, kurios skiriasi tik bangos vektoriaus komponentių  $k_x$ ,  $k_y$  arba  $k_z$  ženklais, bet ne jų moduliais, yra *skirtingos* būsenos).
- II. Kadangi pagal (2.3.13b) yra leidžiamos tik lyginės kvantinių skaičių  $n_x$ ,  $n_y$  ir  $n_z$  vertės, tai „ $n$  erdvėje“ būsenų tankis yra lygus  $1/8$  (t. p. žr. 2.3.1 pav.).

Dėl I priežasties būsenų tankio išraiškoje atsiranda papildomas daugiklis 8, o dėl II priežasties atsirada papildomas daugiklis  $1/8$ . Kadangi šių dviejų daugiklių sandauga lygi 1, tai būsenų tankis nepasikeičia: lieka galioti (2.3.4) lygybė. Taigi, gaunamas baigtinis būsenų tankis, kuris yra tiesiog proporcingas  $V$ .

Kadangi laisvų dalelių energija ir impulsas yra abipus vienareikšmiškai susiję (2.3.8) sąryšiu, tai vietoj *energinio* būsenų tankio  $\rho(E)$  galima naudoti *impulso* būsenų tankį  $\rho(p)$ , t. y. kvantinių būsenų skaičių, atitinkantį vienetinį *impulso modulio* intervalą (o ne vienetinį energijos intervalą). Impulso būsenų tankį  $\rho(p)$  galima išreikšti energiniu būsenų tankiu  $\rho(E)$ :

$$\rho(p)dp = \rho(E)dE, \quad \rho(p) = \rho(E(p)) \frac{dE}{dp}. \quad (2.3.14)$$

(2.3.4), (2.3.8)  $\rightarrow$  (2.3.14):

$$\rho(p) = V \frac{4\pi p^2}{h^3}. \quad (2.3.15)$$

Kadangi tariama, kad dalelė yra viduje kubo, kurio tūris  $V$ , tai normavimo daugiklis, kuris apskaičiuojamas įrašius bėgančiosios bangos išraišką (2.3.5) į normavimo sąlygą (1.11.3), yra lygus  $1/\sqrt{V}$ . Vadinasi, laisvos dalelės normuotos banginės funkcijos (2.3.5) išraiška, kuri išplaukia iš periodinių kraštinių sąlygų, yra šitokia:

$$\psi(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) \equiv \frac{1}{\sqrt{V}} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \mathbf{p} \cdot \mathbf{r}\right). \quad (2.3.16)$$

Čia tūris  $V$  yra formalios kilmės: jis atsirado siekiant pašalinti „ $0 \cdot \infty$ “ tipo matematinį neapibrėžtumą (iš tikro dalelės yra laisvos, t. y. nėra uždarytos tūryje  $V$ , o tiriamoji sistema nėra kubinės gardelės pavidalo). Todėl, apskaičiuojant realių fizikinių dydžių vertes, tūris  $V$  susiprastina. Matematiškai taip atsitinka todėl, kad visų realių fizikinių dydžių vertės (pvz., sklaidos sparta atskiruoju atveju, kuri atitinka (2.3.11) formulė) yra išreiškiamos dauginant būsenų tankį (kuris pagal (2.3.4) ir (2.3.15) yra tiesiog proporcingas  $V$ ) iš banginės funkcijos modulio kvadrato (bendriau – iš tam tikro dviejų banginių funkcijų sandaugos integralo), kuris pagal (2.3.16) yra atvirkščiai proporcingas  $V$ . Tokio apskaičiavimo pavyzdys pateiktas 8.4 skirsnyje.

### 3. Atomo elektrono energijos lygmenys ir banginės funkcijos

#### 3.1. Centriniam jėgų lauke judančios dalelės kvantiniai skaičiai

Nuostovioji Šrėdingerio lygtis centrinio jėgų lauko atveju (pvz., elektronas atomo branduolio elektriniame lauke):

$$\nabla^2 \psi + \frac{2m}{\hbar^2} (E - U(r)) \psi = 0. \quad (3.1.1)$$

Laplaso operatoriaus išraiška sferinėmis koordinatėmis:

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial \dots}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial \dots}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2 \dots}{\partial \phi^2}. \quad (3.1.2)$$

Naudojant sferines koordinatas, kintamieji  $r$ ,  $\phi$  ir  $\theta$  atsiskiria:

$$\psi(r, \theta, \phi) = X(r)Y(\theta, \phi). \quad (3.1.3)$$

Irašius (3.1.3) į (3.1.1), išvedamos dvi diferencialinės lygtys, kurių sprendiniai yra funkcijos  $X(r)$  ir  $Y(\theta, \phi)$ :

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{dX}{dr} \right) + \left\{ \frac{2m}{\hbar^2} [E - U(r)] - \frac{|\mathbf{L}|^2}{\hbar^2 r^2} \right\} X = 0, \quad (3.1.4a)$$

$$\hat{\mathbf{L}}^2 Y = |\mathbf{L}|^2 Y; \quad (3.1.4b)$$

čia  $\hat{\mathbf{L}}^2$  yra dalelės judesio kiekio momento (kitai vadinamo „impulso momentu“) kvadrato operatorius:

$$\hat{\mathbf{L}}^2 = -\hbar^2 \left[ \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right], \quad (3.1.5)$$

o  $|\mathbf{L}|^2$  yra radialinės ir kampinių koordinačių atskyrimo konstanta. Vartojant diferencialinių lygčių terminologiją, (3.1.4b) yra diferencialinio operatoriaus (3.1.5) tikrinių verčių lygtis. To operatoriaus tikrinė vertė – tai tokia daugiklio  $|\mathbf{L}|^2$  vertė, kuriai esant (3.1.4b) lygties sprendinys  $Y(\theta, \phi)$  atitinka standartines sąlygas (baigtinumas, vienareikšmiškumas ir tolydumas). (3.1.4b) lygtis iliustruoja vieną bendrą kvantinės mechanikos taisyklę: kiekvieną tvarų fizikinį dydį (pvz., energiją arba impulso momento kvadratą) atitinka tam tikras diferencialinis operatorius. To operatoriaus tikrinės vertės nusako galimas to fizikinio dydžio vertes. Pvz., energija  $E$ , atitinkanti bet kurią nuostoviąją (stacionariąją) būseną, yra operatoriaus  $i\hbar(\partial/\partial t)$  tikrinė vertė. Tuo galima įsitikinti, paveikus operatoriumi  $i\hbar(\partial/\partial t)$  priklausančią nuo laiko banginę funkciją (2.1.2). Tada išvedama ši lygybė:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = E \Psi, \quad (3.1.6)$$

t. y. operatoriaus  $i\hbar(\partial/\partial t)$  tikrinių verčių lygtis.

Matematiškai įrodoma, kad (3.1.4b) lygties tikrinės vertės yra

$$|\mathbf{L}|^2 = l(l+1)\hbar^2 \quad (l = 0, 1, 2, \dots). \quad (3.1.7a)$$

Pakėlus laipsniu 1/2:

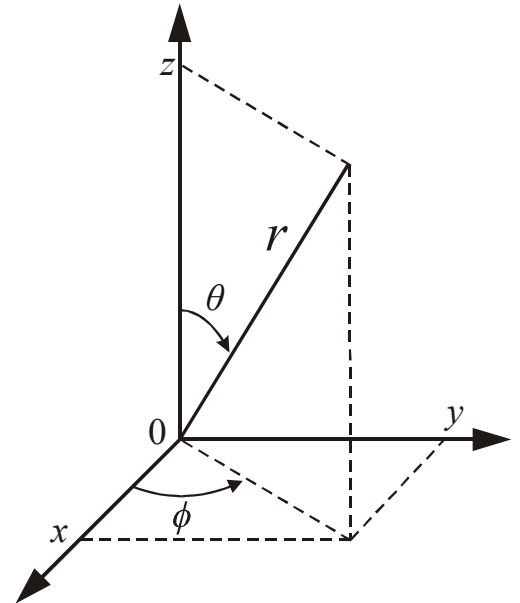
$$|\mathbf{L}| = \hbar \sqrt{l(l+1)} \quad (l = 0, 1, 2, \dots). \quad (3.1.7b)$$

Tai yra centriniam jėgų lauke judančios dalelės impulso momento modulio galimosios vertės.

(3.1.4b) lygtyje galima dar kartą atskirti kintamuosius:

$$Y(\theta, \phi) = P(\theta)\Phi(\phi). \quad (3.1.8)$$

Atitinkamos atskyrimo konstantos fizikinė prasmė – tai impulso momento  $z$  komponentė  $L_z$ , o jos galimosios vertės yra



3.1.1 pav. Sferinės koordinatės  $r$ ,  $\theta$  ir  $\phi$  ir jų ryšys su Dekarto koordinatėmis

$$L_z = m_l \hbar \quad (m_l = -l, -l+1, \dots, l-1, l). \quad (3.1.9)$$

Skaičiai  $l$  ir  $m_l$  – tai centriniame jėgų lauke esančios dalelės impulso momentą nusakantys kvantiniai skaičiai. Apskritai **kvantiniais skaičiais** vadinami sveikieji arba pusiniai skaičiai, kurių kiekvienas nusako tam tikro tvaraus fizikinio dydžio vertę, kai dalelės būseną (banginė funkcija) yra Šrėdingerio lygties sprendinys.

Centriniame jėgų lauke esančios dalelės erdvinio judėjimo būseną pilnai apibūdina trys dydžiai:

- 1) dalelės energija  $E$ ,
- 2) dalelės judesio kiekio momento modulis  $|\mathbf{L}|$ ,
- 3) dalelės judesio kiekio momento projekcija į laisvai pasirinktą kryptį  $L_z$ .

Kiekvieną iš šių dydžių atitinka tam tikras kvantinis skaičius:

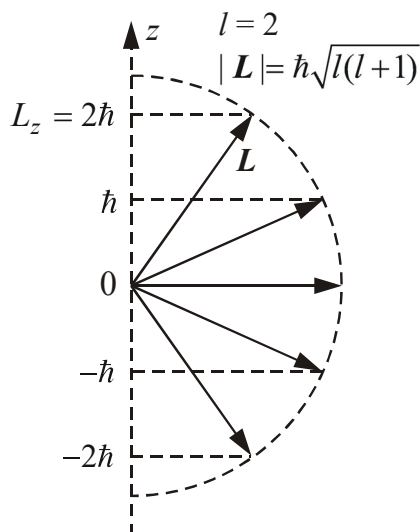
- 1) **pagrindinis** kvantinis skaičius  $n$  nusako dalelės energiją.
- 2) **šalutinis** (arba **orbitinis**) kvantinis skaičius  $l$  nusako judesio kiekio momento modulį,
- 3) **magnetinis** kvantinis skaičius  $m_l$  nusako judesio kiekio momento projekciją į laisvai pasirinktą kryptį. Kai nėra išorinių laukų, tada dalelės energija nepriklauso nuo  $m_l$ .

Bendruoju atveju kiekvieną  $l$  ir  $m_l$  porą atitinka kelios galimos energijos. Tos energijos numeruojamos energijos didėjimo kryptimi. Šitaip apibrėžtas numeris  $n$  yra **pagrindinis kvantinis skaičius**.

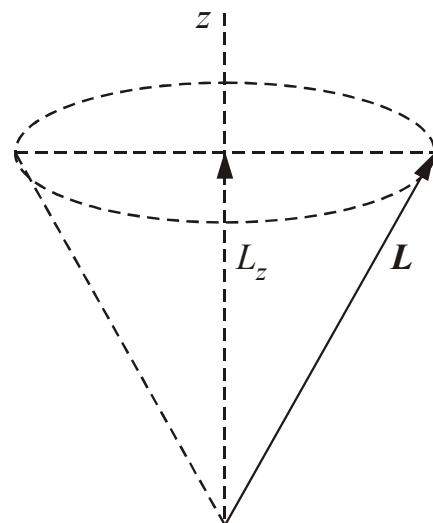
Nusakant dalelės būseną, vietoj  $l$  verčių (0, 1, 2, 3, 4, ...) vartojamos mažosios raidės – atitinkamai s, p, d, f, g, ... (pradedant nuo raidės „f“ – pagal abėcėlę). Pvz., jeigu  $n = 2$ , o  $l = 1$ , tada sakoma „2p būseną“.

Išvados:

1. Pasirinkus kryptį erdvėje ir matuojant kampą tarp tos krypties ir dalelės impulso momento vektoriais, visada bus gautas vienas iš kelių kampų, kurie atitinka (3.1.9) lygybę. Pvz., kai  $l = 2$ , tokių kampų yra penki (žr. [3.1.2 pav.](#)).
2. Impulso momento vektorius  $\mathbf{L}$  visada sudaro tam tikrą nenulinį kampą su pasirinktąja kryptimi.
3. Impulso momento vektoriaus komponentės  $L_x$  ir  $L_y$  yra neapibrėžtos (kitaip negu klasikinėje mechanikoje). Tai galima aprašyti naudojant vektoriaus  $\mathbf{L}$  precesijos apie  $z$  ašį įvaizdį (žr. [3.1.3 pav.](#)).



**3.1.2 pav.** Galimi kampai tarp judesio kiekio momento ir išskirtosios krypties



**3.1.3 pav.** Judesio kiekio momento vektoriaus precesija aplink išskirtąją kryptį

### 3.2. Centriniam lauke judančios dalelės kampinė banginė funkcija. Būsenos lyginumas

Šrėdingerio lygtis (3.1.1):

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

Sprendinys ((3.1.8) → (3.1.3)):

$$\psi(r, \theta, \phi) = X(r)P(\theta)\Phi(\phi) \equiv X(r)Y(\theta, \phi). \quad (3.2.1)$$

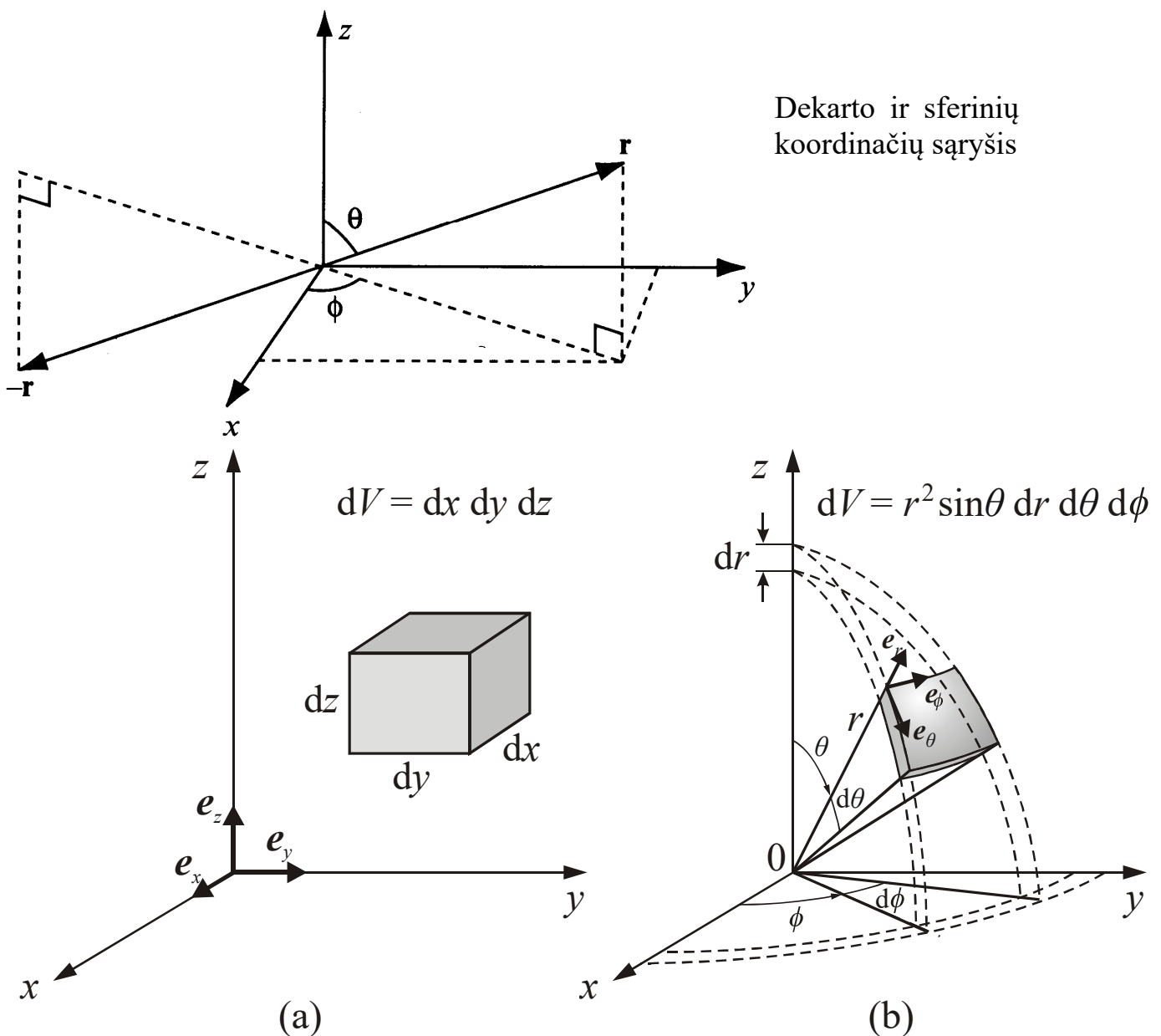
$X(r)$  – „radialioji banginė funkcija“,  $Y(\theta, \phi)$  – „kampinė banginė funkcija“. Jų prasmė išplaukia iš banginė funkcijos statistinio aiškinimo. Tam visų pirma apibrėžiame tūrio elementą:

$$dV = r^2 \sin \theta dr d\theta d\phi. \quad (3.2.2)$$

Tikimybė, kad dalelė (elektronas) priklausys tam tūrio elementui:

$$|\psi(r, \theta, \phi)|^2 dV = [|X(r)|^2 r^2 dr] \cdot [|Y(\theta, \phi)|^2 \sin \theta d\theta d\phi]. \quad (3.2.3)$$

Vadinasi,  $|X(r)|^2 r^2$  yra radialinis tikimybės tankis, o  $|Y(\theta, \phi)|^2$  yra kampinis tikimybės tankis.

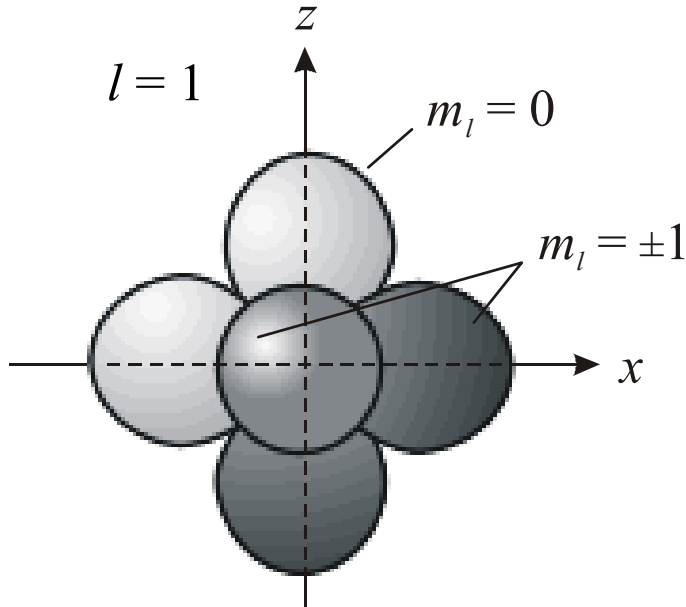


**3.2.1 pav.** Baziniai vektoriai ir tūrio elementai Dekarto koordinatų sistemoje (a) ir sferinėje koordinatų sistemoje (b)

Nuo  $U(r)$  pavidalo priklauso tik radialioji funkcija  $X(r)$ . Kampinės funkcijos  $Y(\theta, \phi)$  yra **sferinės harmonikos**. Kiekvieną kvantinių skaičių  $l$  ir  $m_l$  porą atitinka tam tikra sferinė harmonika  $Y_{lm_l}(\theta, \phi)$ . Sferinė harmonika, kuri atitinka  $l = 0$ , t. y. s būsenas, yra konstanta:

$$Y_{00} = \frac{1}{2\sqrt{\pi}}. \quad (3.2.4)$$

Kai  $l > 0$ ,  $Y(\theta, \phi)$  nėra konstanta, t. y. tikimybės tankio pasiskirstymas aplink branduolio centrą nėra sferiškai simetriškas:



**3.2.2 pav.** p elektronų kampinis tikimybės tankis  $|Y(\theta, \phi)|^2$ , atitinkantis tris kvantinio skaičiaus  $m_l$  vertes.  $|Y(\theta, \phi)|^2$  vertę įvairiomis kryptimis nusako atstumai nuo koordinatų centro iki pavaizduotų paviršių

Būsenos lyginumas (arba banginės funkcijos lyginumas) nusako banginės funkcijos ženklo pokytį atlikus koordinatų inversiją. **Koordinatų inversijos** apibrėžtis:

Dekarto koordinatų sistemoje:

$$x \rightarrow -x, \quad y \rightarrow -y, \quad z \rightarrow -z; \quad (3.2.5)$$

sferinėje koordinatų sistemoje

$$r \rightarrow r, \quad \theta \rightarrow \pi - \theta, \quad \phi \rightarrow \phi + \pi. \quad (3.2.6)$$

Dėl atomo sferinės simetrijos visos elektrono banginės funkcijos yra lyginės arba nelyginės. **Lyginės funkcijos** nesikeičia atlikus inversiją, o **nelyginės funkcijos** keičia tik ženklą. Jeigu banginė funkcija yra lyginė, tada sakoma, kad būsenos **lyginumas** yra +1, o jeigu ne, tada -1.

Sferinių harmonikų lyginumas:

$$Y_{lm_l}(\pi - \theta, \pi + \phi) = (-1)^l Y_{lm_l}(\theta, \phi). \quad (3.2.7)$$

Tai reiškia, kad centriniame jėgų lauke judančios dalelės būsenos lyginumas yra toks pats, kaip šalutinio kvantinio skaičiaus  $l$  lyginumas: lyginės  $l$  vertės atitinka lygines būsenas, o nelyginės  $l$  vertės atitinka nelygines būsenas.



### 3.3. Vandeniio atomo elektrono radialioji banginė funkcija

Radialiąją lygtį (3.1.4a) užrašysime vienmatės nuostoviosios Šrėdingerio lygties pavidalu. Tam apibrėžiame naują radialiąją funkciją  $\xi(r)$ :

$$X(r) \equiv \frac{\xi(r)}{r}. \quad (3.3.1)$$

(3.3.1), (3.1.7a)  $\rightarrow$  (3.1.4a):

$$\frac{d^2\xi}{dr^2} = \frac{2m}{\hbar^2} \left[ U(r) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} - E \right] \xi. \quad (3.3.2)$$

Ši lygtis savo pavidalu sutampa su vienmačio judėjimo potencialiniame jėgų lauke Šrėdingerio lygtimi (2.2.1), kurioje potencinės energijos vaidmenį atlieka funkcija

$$U_l(r) \equiv U(r) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} = U(r) + \frac{|\mathbf{L}_l|^2}{2mr^2} \quad (l = 0, 1, 2, \dots). \quad (3.3.3)$$

Tai yra dalelės **efektinė potencinė energija**. Antrasis dėmuo – tai klasikinė apskrita orbita judančios dalelės kinetinės energijos išraiška:  $W = L^2/(2mr^2)$ . Šis dėmuo atspindi išcentrinę jėgą. Atskiru atveju, kai

$$U(r) = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze^2}{r} \quad (3.3.4)$$

(vandeniliškasis atomas), (3.3.2) lygties tikrinės vertės ( $E$ ) nepriklauso nuo  $l$  ir sutampa su tomis, kurias numato Boro teorija (žr. (1.7.26)):

$$E_n = -\frac{Z^2}{n^2} \frac{me^4}{8\epsilon_0^2 \hbar^2} \approx -\frac{Z^2}{n^2} \frac{\hbar^2}{2ma_0^2} = -\frac{Z^2}{n^2} \cdot 13,6 \text{ eV} \quad (n = 1, 2, 3, \dots), \quad (3.3.5)$$

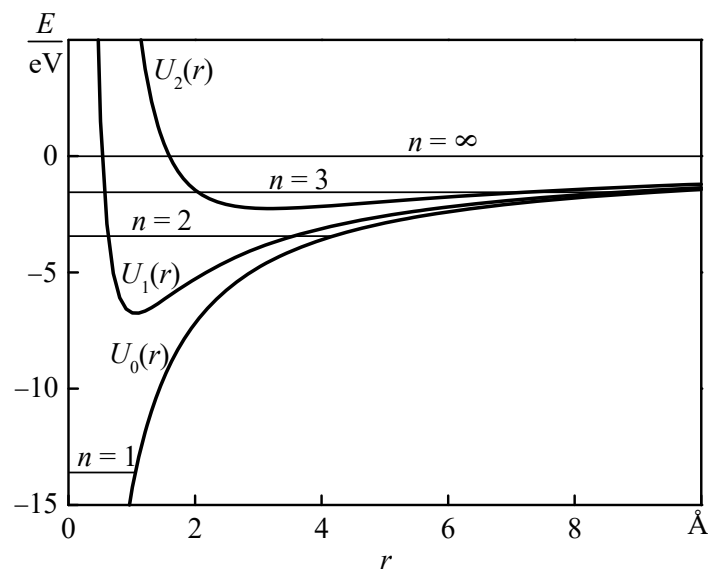
čia  $a_0$  yra **pirmasis Boro spindulys**:

$$a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{me^2}. \quad (3.3.6)$$

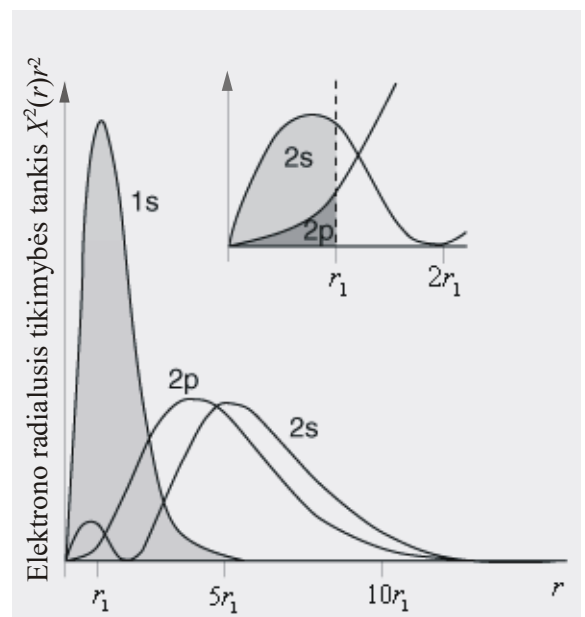
$l$  turi būti mažesnis už  $n$ :

$$l = 0, 1, 2, \dots, n-1. \quad (3.3.7)$$

nes priešingu atveju visur galiotų nelygybė  $E_n < U_l(r)$  (pvz., plg. energijos lygmenį  $E_2$  ir  $U_2(r)$  grafiką, kurie pavaizduoti 3.3.1 pav.). Tada (3.3.2) lygtis neturėtų sprendinių, tenkinančių baigtinumo reikalavimą ((3.3.2) lygties sprendinys, atitinkantis duotąją energiją  $E$ , gali būti baigtinis visoje erdvėje tik tada, kai egzistuoja  $r$  verčių intervalas, kuriame  $E > U_l(r)$ ).



3.3.1 pav. Vandeniio atomo efektinė potencinė energija, kai  $l = 0, 1, 2$ , ir trys žemiausieji vandeniio atomo energijos lygmenys



3.3.2 pav. 1s, 2s ir 2p elektronų radialieji tikimybės tankiai ( $r_1$  yra pirmasis Boro spindulys)

### 3.4. Elektrono sukiny. Orbitinio ir sukulinio impulso momentų sudėtis

Pilnai apibūdinant dalelės būseną, reikia įskaityti jos *sukinį* – vidinį impulso (judesio kiekio) momentą. Elektrono *sukinio kvantinis skaičius*:

$$s = \frac{1}{2}. \quad (3.4.1)$$

Sukulinio impulso momento modulis  $|\mathbf{L}_s|$  išreiškiamas sukinio kvantiniu skaičiumi  $s$  taip pat, kaip orbitinio momento modulis  $|\mathbf{L}|$  išreiškiamas orbitiniu kvantiniu skaičiumi  $l$  (žr. (3.1.7b)):

$$|\mathbf{L}_s| = \hbar\sqrt{s(s+1)} = \frac{\sqrt{3}}{2}\hbar \quad (3.4.2)$$

*Sukinio magnetinis kvantinis skaičius*  $m_s$  nusako sukulinio judesio kiekio momento projekciją:

$$L_{sz} = m_s\hbar \quad (m_s = \pm s = \pm 1/2) \quad (3.4.3)$$

Jeigu neatsižvelgiama į sąveikas, kurias lemia dalelės sukiny, tada dalelės būseną galima pilnai nusakyti šiais keturiais kvantiniais skaičiais:

$$n, l, m_l, m_s. \quad (3.4.4)$$

Skaičiai  $m_l$  ir  $m_s$  netinka, jeigu yra atsižvelgiama į sąveikas, kurias lemia sukiny (pvz., sukinio ir orbitos sąveika). Tada vietoj  $m_l$  ir  $m_s$  reikia naudoti *pilnutinio judesio kiekio momento kvantinį skaičių*  $j$  ir *pilnutinio judesio kiekio momento projekcijos kvantinį skaičių*  $m_j$ .

Dalelės pilnutinio judesio kiekio momento vektorius:

$$\mathbf{L}_j = \mathbf{L} + \mathbf{L}_s \quad (3.4.5)$$

Bendroji kvantinės mechanikos impulso momentų sudėties taisyklė: jeigu sudedamųjų momentų modulius nusako kvantiniai skaičiai  $l_1$  ir  $l_2$ , o projekcijas nusako kvantiniai skaičiai  $m_1$  ir  $m_2$ , tada suminio momento modulio galimos vertės yra

$$L_{\Sigma} = \hbar\sqrt{l_{\Sigma}(l_{\Sigma}+1)} \quad (l_{\Sigma} = |l_1 - l_2|, |l_1 - l_2| + 1, \dots, l_1 + l_2), \quad (3.4.6)$$

o jo projekcija lygi

$$L_{\Sigma z} = L_{1z} + L_{2z} = m_{\Sigma}\hbar \quad (m_{\Sigma} = m_1 + m_2) \quad (3.4.7)$$

Taikant šią taisyklę atomo elektrono orbitinio ( $l_1 \equiv l, m_1 \equiv m_l$ ) ir sukulinio ( $l_2 \equiv s = 1/2, m_2 \equiv m_s$ ) judesio kiekio momentų sudėčiai, gaunama, kad pilnutinio momento  $\mathbf{L}_j$  modulio galimosios vertės yra:

$$|\mathbf{L}_j| = \hbar\sqrt{j(j+1)}, \quad (3.4.8)$$

čia kvantinis skaičius  $j$  gali būti lygus tik šioms vertėms:

$$\text{a) jeigu } l > 0, \quad j = l \pm \frac{1}{2}; \quad (3.4.9)$$

$$\text{b) jeigu } l = 0, \quad j = \frac{1}{2}.$$

Du vektoriai  $\mathbf{L}_j$ , atitinkantys dvi galimas kvantinio skaičiaus  $j$  vertes (3.4.9a), yra pavaizduoti 3.4.1 pav. Pilnutinio judesio kiekio momento projekcija:

$$L_{jz} = m_j\hbar \quad (m_j = -j, -j+1, \dots, j-1, j) \quad (3.4.10)$$

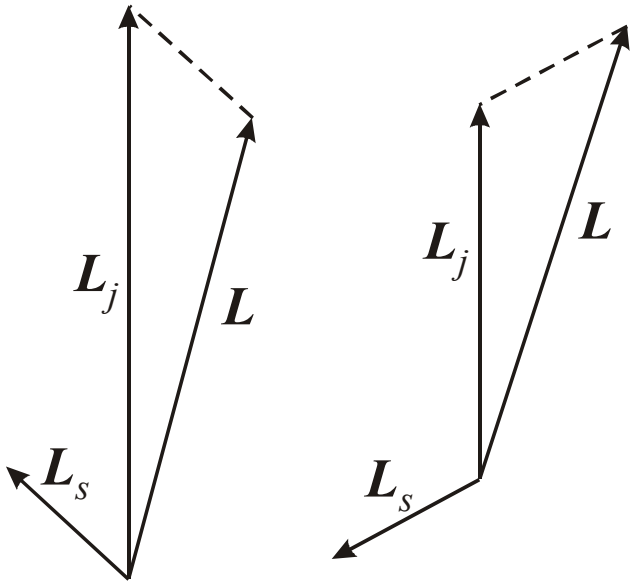
Vektorius  $\mathbf{L}_j$  precesuoja aplink  $z$  kryptį. Vektorių  $\mathbf{L}$  ir  $\mathbf{L}_s$  projekcijos į tą kryptį yra neapibrėžtos (žr. 3.4.2 pav.). Todėl, aprašant būseną su apibrėžtu  $j$ , kvantiniai skaičiai  $m_l$  ir  $m_s$  neturi apibrėžtų verčių ir vietoj jų vartojami  $j$  ir  $m_j$ . T. y. vartojamas šis kvantinių skaičių ketvertas:

$$n, l, j, m_j. \quad (3.4.11)$$

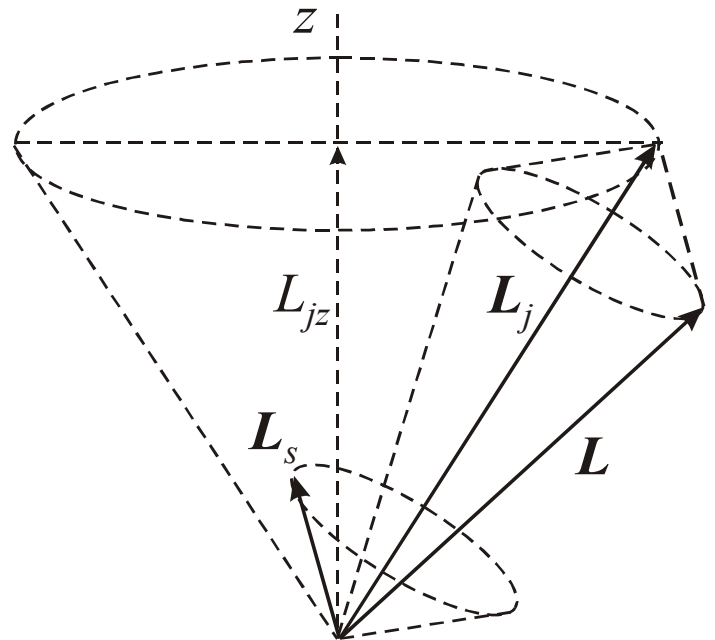
(plg. su (3.4.4)).

Centriniame jėgų lauke (pvz., atome) esančio elektrono *kvantinės būsenos* – tai tokios būsenos, kai elektrono energija, orbitinio judesio kiekio momento modulis, pilnutinio judesio kiekio momento modulis ir šio momento projekcija vienu metu turi tiksliai apibrėžtas vertes.

Kai nėra išorinių laukų, elektrono energija nepriklauso nuo  $m_j$ . Todėl, norint nusakyti elektrono energijos lygmenį, pakanka nurodyti tik kvantinius skaičius  $n$ ,  $l$  ir  $j$ . Kvantinis skaičius  $j$  nurodomas apatinio indekso pavidalu. Pvz., elektrono energijos lygmuo, kuris atitinka kvantinių skaičių vertes  $n = 2$ ,  $l = 1$  ir  $j = 3/2$ , žymimas taip:  $2p_{3/2}$ . Šis žymėjimas nusako tik energijos lygmenį, bet ne konkrečią kvantinę būseną. Duotąjį energijos lygmenį atitinkančių kvantinių būsenų yra tiek pat, kiek yra galimų kvantinio skaičiaus  $m_j$  verčių. Kadangi  $m_j$  gali įgyti visas vertes nuo  $-j$  iki  $j$  (žr. (3.4.10)), tai energijos lygmenį su duota kvantinio skaičiaus  $j$  verte atitinka  $2j + 1$  skirtingų kvantinių būsenų. Pvz., lygmenį  $2p_{3/2}$  atitinka keturios kvantinės būsenos ( $2 \cdot 3/2 + 1 = 4$ ), kurių kvantinis skaičius  $m_j$  yra lygus  $-3/2$ ,  $-1/2$ ,  $+1/2$ ,  $+3/2$ .



**3.4.1 pav.** Du galimi kampai tarp elektrono sukinių vektorių  $L_s$  ir dalelės orbitinio judesio kiekio momento vektorių  $L$  bei atitinkami dalelės pilnutinio judesio kiekio momento vektoriai  $L_j$



**3.4.2 pav.** Elektrono sukinių judesio kiekio momento vektorių  $L_s$  ir orbitinio judesio kiekio momento vektorių  $L$  precesija aplink pilnutinio judesio kiekio momento vektorių  $L_j$  ir pastarojo vektorių precesija aplink išskirtąją kryptį  $Z$

### 3.5. Elektrono magnetinis momentas

Apskrita orbita judančio elektrono magnetinis momentas pagal klasikinę elektrodinamiką:

$$\mu = \frac{eS}{T} = \frac{\pi e r^2}{T}, \quad (3.5.1)$$

Elektrono impulso (mechaninis) momentas pagal klasikinę mechaniką:

$$|\mathbf{L}| = r m v = \frac{2\pi m r^2}{T}. \quad (3.5.2)$$

Išreiškus  $r^2/T$  iš (3.5.2) ir įrašius į (3.5.1), gaunamas klasikinis magnetinio ir mechaninio momentų sąryšis:

$$\mu = \frac{e}{2m} |\mathbf{L}|.$$

Atitinkamų vektorių sąryšis:

$$\boldsymbol{\mu} = -\frac{e}{2m} \mathbf{L} = -\mu_B \frac{\mathbf{L}}{\hbar}, \quad (3.5.3)$$

čia  $\mu_B$  yra **Boro magnetonas**:

$$\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e} = 9,274010 \cdot 10^{-24} \text{ J/T} = 5,788382 \cdot 10^{-5} \text{ eV/T}. \quad (3.5.4)$$

Su elektrono sukiniu yra susijęs elektrono vidinis (sukininis) magnetinis momentas  $\boldsymbol{\mu}_s$ . Sukininių magnetinio ir mechaninio momentų santykis yra dukart didesnis negu orbitinių:

$$\boldsymbol{\mu}_s = -2\mu_B \frac{\mathbf{L}_s}{\hbar} \quad (3.5.5)$$

Magnetinio momento ir atitinkamo judesio kiekio momento projekcijų į duotąją kryptį santykis vadinamas **giromagnetiniu santykiu**. Dydis, kuris yra priešingas elektrono giromagnetinio santykio vertei, išreikštai  $\mu_B/\hbar$  vienetais, yra vadinamas elektrono **g faktoriumi**. Pagal (3.5.3) ir (3.5.5) elektrono orbitinis g faktorius lygus 1, o sukininis g faktorius lygus 2.

### 3.6. Sukinio ir orbitos sąveika

**Sukinio ir orbitos sąveika** pasireiškia tuo, kad atomo elektrono potencinės energijos išraiškoje atsiranda dėmuo, kuris proporcingas skaliarinei sandaugai  $\mathbf{L}_s \cdot \mathbf{L}$ . Taip yra todėl, kad besisukantis krūvininkas kuria magnetinį lauką. Koordinačių sistemoje, kurioje elektronas nejuda, apie jį sukasi branduolys. Todėl elektroną veikia „efektinis“ magnetinis laukas

$$\mathbf{B}_{\text{ef}} = \frac{\mu_0 Z e}{4\pi r^3} \mathbf{v}_{\text{br}} \times \mathbf{r} = -\frac{\mu_0 Z e}{4\pi r^3} \mathbf{v} \times \mathbf{r} = \frac{\mu_0 Z e}{4\pi r^3} \mathbf{r} \times \mathbf{v} = \frac{\mu_0 Z e}{4\pi m r^3} \mathbf{L}. \quad (3.6.1)$$

Šiame magnetiniame lauke elektrono sukininis magnetinis momentas  $\boldsymbol{\mu}_s$  turi potencinę energiją

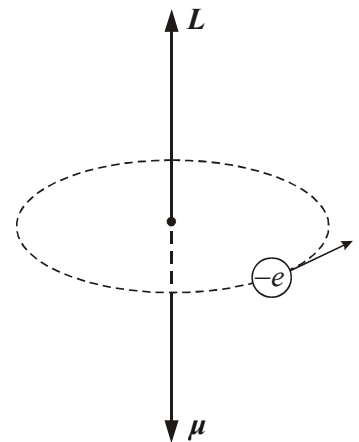
$$\Delta U = -\boldsymbol{\mu}_s \cdot \mathbf{B}_{\text{ef}} = -\frac{\mu_0}{4\pi} \cdot \frac{Z e}{m r^3} \boldsymbol{\mu}_s \cdot \mathbf{L}. \quad (3.6.2)$$

(3.5.5) → (3.6.2):

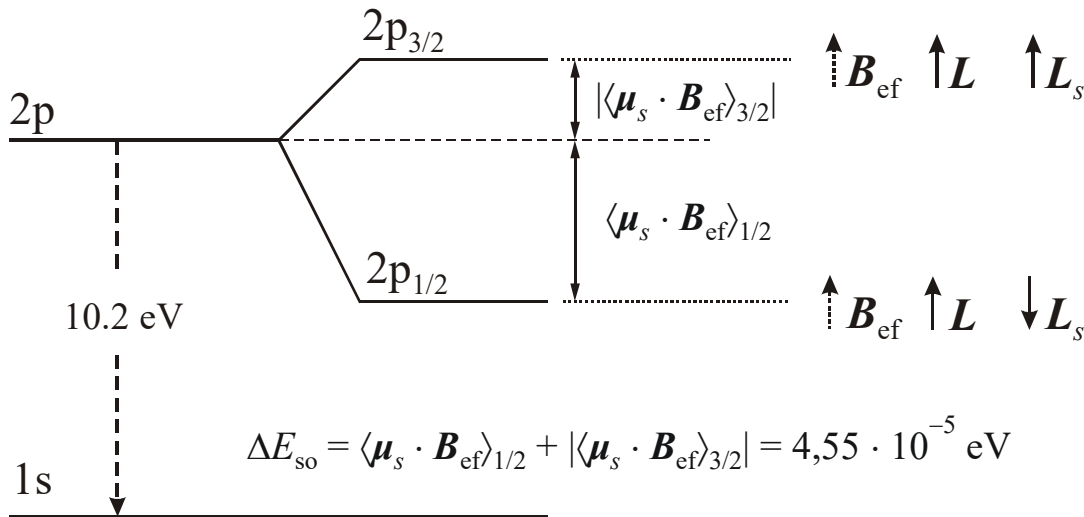
$$\Delta U = \frac{\mu_0 \mu_B}{h} \cdot \frac{Z e}{m r^3} \mathbf{L}_s \cdot \mathbf{L} \equiv U_{\text{so}}(r) \mathbf{L}_s \cdot \mathbf{L} \equiv U_{\text{so}}(r) |\mathbf{L}_s| |\mathbf{L}| \cos(\mathbf{L}_s, \mathbf{L}). \quad (3.6.3)$$

Dėl reliatyvistinių efektų atsiranda papildomas daugiklis 1/2:

$$U_{\text{so}}(r) = \frac{\mu_0 \mu_B}{2h} \cdot \frac{Z e}{m r^3}. \quad (3.6.4)$$



3.5.1 pav. Elektrono mechaninis momentas  $\mathbf{L}$  ir magnetinis momentas  $\boldsymbol{\mu}$



**3.6.1 pav.** Vandenilio 2p būsenos energijos lygmens skilimas dėl sukinių ir orbitos sąveikos. Lygmuo  $2p_{3/2}$  atitinka „vienodas“ vektorių  $L$  ir  $L_s$  kryptis (kaip kairiojoje [3.4.1 pav.](#) vektorinėje diagramoje), o lygmuo  $2p_{1/2}$  „priešingas“ jų kryptis (kaip dešiniojoje [3.4.1 pav.](#) vektorinėje diagramoje).

Kadangi galimi tik du kampai tarp  $L_s$  ir  $L$  (žr. [\(3.4.9a\)](#)), tai pagal [\(3.6.3\)](#) sukinių ir orbitos sąveika pasireiškia tuo, kad visi energijos lygmenys, išskyrus s lygmenis, skyla į du.

Didėjant  $n$  ir  $l$ , vidutinis atstumas tarp elektrono ir branduolio didėja, todėl sukinių ir orbitos sąveikos energija mažėja.

Kvantinėje mechanikoje įrodoma, kad dviejų polygmenių, į kuriuos skyla pradinis energijos lygmuo dėl sukinių ir orbitos sąveikos, poslinkis atžvilgiu pradinio lygmens yra lygus

$$\Delta E_j = \langle \Delta U \rangle_j = \langle U_{so} \rangle \langle L_s \cdot L \rangle_j, \quad (3.6.5)$$

čia skliaustai „ $\langle \dots \rangle_j$ “, žymi fizikinio dydžio statistinį vidurkį, kai sistema yra būsenos su duotuoju  $j$ . Vidurkį  $\langle L_s \cdot L \rangle$  galima išreikšti kvantiniais skaičiais  $l$ ,  $s$  ir  $j$ . Tam reikia pakelti kvadratu lygybę  $L_j = L + L_s$ :

$$|L_j|^2 = |L|^2 + |L_s|^2 + 2L \cdot L_s. \quad (3.6.6)$$

Kai  $j$  duotas, tada visi dėmenys yra tiksliai apibrėžti, todėl vidurkio ženklo galima nerašyti:

$$L \cdot L_s = \frac{1}{2}(|L_j|^2 - |L|^2 - |L_s|^2) = \frac{\hbar^2}{2}[j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)]. \quad (3.6.7)$$

Atsižvelgus į tai, kad  $s = 1/2$ , o  $j = l \pm 1/2$ , gaunama, kad

$$L \cdot L_s = \begin{cases} \frac{1}{2}l\hbar^2, & \text{kai } j = l + \frac{1}{2}; \\ -\frac{1}{2}(l+1)\hbar^2, & \text{kai } j = l - \frac{1}{2}. \end{cases} \quad (3.6.8)$$

[\(3.6.8\)](#) → [\(3.6.5\)](#):

$$\Delta E_j = \langle \Delta U \rangle_j = \langle U_{so} \rangle \frac{\hbar^2}{2} \cdot \begin{cases} l, & \text{kai } j = l + \frac{1}{2}; \\ -l-1, & \text{kai } j = l - \frac{1}{2}. \end{cases} \quad (3.6.9)$$

Intervalas tarp dviejų polygmenių:

$$\Delta E_{so} = \Delta E_{l+1/2} - \Delta E_{l-1/2} = \langle U_{so} \rangle \hbar^2 (l + \frac{1}{2}). \quad (3.6.10)$$

Didėjant  $n$  ir  $l$ ,  $\langle U_{so} \rangle$  mažėja.

### 3.7. Sukininė banginė funkcija

Dalelės sukiniio projekcija  $L_{sz}$  – tai dar vienas „laisvės laipsnis“, kurį turi atspindėti papildomas argumentas banginės funkcijos išraiškoje (*sukininė koordinatė*). Kadangi yra galimos tik dvi  $L_{sz}$  vertės, tai

$$\psi(x, y, z, L_{sz}) = \begin{pmatrix} \psi_1(x, y, z) \\ \psi_2(x, y, z) \end{pmatrix}. \quad (3.7.1)$$

$\psi_1(x, y, z)$  nusako elektrono orbitinio judėjimo būseną, kai  $L_{sz} = +\hbar/2$ , o funkcija  $\psi_2(x, y, z)$  – kai  $L_{sz} = -\hbar/2$ . Toks dviejų funkcijų stulpelis vadinamas *spinoriumi* (iš angliško žodžio „spin“ – „sukinys“). Kitoks užrašymas:

$$\psi(x, y, z, L_{sz}) = \psi_1(x, y, z)\chi^+ + \psi_2(x, y, z)\chi^- = \psi_1(x, y, z) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \psi_2(x, y, z) \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad (3.7.2)$$

čia  $\chi^+$  ir  $\chi^-$  yra „vienetiniai spinoriai“:

$$\chi^+ = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \chi^- = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (3.7.3)$$

$\chi^+$  nusako elektrono sukiningę būseną, kurioje  $L_{sz} = +\hbar/2$ , o  $\chi^-$  nusako elektrono sukiningę būseną, kurioje  $L_{sz} = -\hbar/2$ .

Elektrono sukinytis turi palyginti silpną įtaką jo orbitiniam judėjimui. Todėl

$$\psi(x, y, z, L_{sz}) \approx \varphi(x, y, z)\chi(L_{sz}) = \varphi(x, y, z) \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}, \quad (3.7.4)$$

čia  $\varphi(x, y, z)$  yra orbitinė banginė funkcija, o  $\chi(L_{sz})$  yra spinorius, kuris vadinamas *sukinine bangine funkcija*:

$$\chi = \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} \equiv \alpha\chi^+ + \beta\chi^-. \quad (3.7.5)$$

$|\alpha|^2$  yra tikimybė, kad  $L_{sz} = +\hbar/2$ , o  $|\beta|^2$  yra tikimybė, kad  $L_{sz} = -\hbar/2$ . Kadangi kitų galimų sukinių būsenų nėra, tai

$$|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1. \quad (3.7.6)$$

Tai yra sukiningės banginės funkcijos normavimo sąlyga.

## 4. Daugiaelektroniai atomai

Sistemose, kurias sudaro du arba daugiau elektronų, pasireiškia du efektai, kurie nepasireiškia vieno elektrono sistemose:

- elektronų tapatingumas,
- elektronų tarpusavio sąveika.

### 4.1. Vienodų dalelių sistemos banginė funkcija. Paulio draudimo principas

Kvantinėje sistemoje dvi vienodos dalelės (pvz., du elektronai) yra visiškai neatskiriamos viena nuo kitos. Tai pasireiškia tuo, kad banginės funkcijos modulis nepakinta sukeitus dviejų vienodų dalelių koordinatčių rinkinius vietomis. Jeigu sistemą sudaro  $N$  vienodų dalelių (pvz., elektronų), tada nuostovioji banginė funkcija (daugiklis prieš  $e^{-iEt/\hbar}$  (2.1.2) formulėje) yra

$$\psi = \psi(\mathbf{r}_1 s_1, \mathbf{r}_2 s_2, \dots, \mathbf{r}_N s_N), \quad (4.1.1)$$

čia  $\mathbf{r}_i$  yra  $i$ -tosios dalelės spindulys vektorius, o  $s_i$  yra jos „sukininė koordinatė“. Sukeitus  $i$ -tąją ir  $j$ -tąją dalelę vietomis, tikimybės tankis (banginės funkcijos modulio kvadratas) nepasikeičia:

$$|\psi(\mathbf{r}_1 s_1, \mathbf{r}_2 s_2, \dots, \mathbf{r}_i s_i, \dots, \mathbf{r}_j s_j, \dots, \mathbf{r}_N s_N)|^2 = |\psi(\mathbf{r}_1 s_1, \mathbf{r}_2 s_2, \dots, \mathbf{r}_j s_j, \dots, \mathbf{r}_i s_i, \dots, \mathbf{r}_N s_N)|^2. \quad (4.1.2)$$

Tai reiškia, kad

$$\psi(\mathbf{r}_1 s_1, \mathbf{r}_2 s_2, \dots, \mathbf{r}_i s_i, \dots, \mathbf{r}_j s_j, \dots, \mathbf{r}_N s_N) = \pm \psi(\mathbf{r}_1 s_1, \mathbf{r}_2 s_2, \dots, \mathbf{r}_j s_j, \dots, \mathbf{r}_i s_i, \dots, \mathbf{r}_N s_N). \quad (4.1.3)$$

T. y. banginės funkcija yra *simetrinė* arba *antisimetrinė*.

Dalelės, kurių sistemos aprašomos simetrinėmis funkcijomis, vadinamos *bozonais*, o dalelės, kurių sistemos aprašomos antisimetrinėmis funkcijomis, vadinamos *fermionais*. Bozonai pavadinti indų fiziko S. N. Bozė (*Bose*) garbei, o fermionai – italų fiziko Enriko Fermio (*Fermi*) garbei. Pagrindinis požymis, pagal kurį galima atskirti bozonus nuo fermionų, yra jų sukiny: bozonų sukinių kvantinis skaičius yra sveikasis (0, 1, 2 ir t. t.), o fermionų sukinių kvantinis skaičius yra pusinis (1/2, 3/2, 5/2 ir t. t.). Bozono pavyzdys yra fotonas (jo sukiny lygus 1). Fermionų pavyzdžiai yra elektronas, protonas, neutronas (sukiny lygus 1/2).

Išreikšime *nepriklausomų* (atskiru atveju – nesąveikaujančių) vienodų dalelių sistemos simetrinę ir antisimetrinę bangines funkcijas. Tokios sistemos nuostovioji Šrėdingerio lygtis yra

$$(\hat{H}_1 + \hat{H}_2 + \dots + \hat{H}_N)\psi(\mathbf{r}_1, s_1, \mathbf{r}_2, s_2, \dots, \mathbf{r}_N, s_N) = E\psi(\mathbf{r}_1, s_1, \mathbf{r}_2, s_2, \dots, \mathbf{r}_N, s_N); \quad (4.1.4)$$

čia  $\hat{H}_i$  yra  $i$ -tosios dalelės *hamiltonianas*:

$$\hat{H}_i = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 + U(\mathbf{r}_i). \quad (4.1.5)$$

Vienintelis operatorių  $\hat{H}_i$  ir  $\hat{H}_j$  skirtumas yra tas, kad jie veikia skirtingų dalelių ( $i$ -tosios ir  $j$ -tosios) koordinatas; jų matematinis pavidalas yra vienodas. Todėl kintamųjų atskyrimo metodu gauname, kad nepriklausomų dalelių sistemos Šrėdingerio lygties (4.1.4) sprendinys yra viendalelės Šrėdingerio lygties, t. y. viendalelio hamiltoniano (4.1.5) tikrinių verčių lygties

$$\hat{H}_i \psi_k(\mathbf{r}_i, s_i) = E_k \psi_k(\mathbf{r}_i, s_i) \quad (4.1.6)$$

sprendinių sandauga:

$$\psi(\mathbf{r}_1, s_1, \mathbf{r}_2, s_2, \dots, \mathbf{r}_N, s_N) = \psi_{k_1}(\mathbf{r}_1, s_1) \psi_{k_2}(\mathbf{r}_2, s_2) \dots \psi_{k_N}(\mathbf{r}_N, s_N), \quad (4.1.7)$$

čia  $k_i$  yra  $i$ -tosios dalelės kvantiniai skaičiai, o sistemos energija yra dalelių energijų suma:

$$E = \sum_{i=1}^N E_{k_i} = \sum_{k=1}^{\infty} n_k E_k. \quad (4.1.8)$$

Pirmoji suma yra *dalelių atžvilgiu*, o antroji – *viendalelių būsenų atžvilgiu*;  $n_k$  yra  $k$ -tosios būsenos dalelių skaičius.

(4.1.7) sandauga nėra nei simetrinė, nei antisimetrinė, todėl negali atlikti sistemos banginės funkcijos vaidmens. Simetrinė banginė funkcija sudaroma sudedant visų viendalelių banginių funkcijų sandaugas atžvilgiu visų galimų dalelių pertvarkymų tarp kvantinių būsenų:

$$\psi^{(+)}(\mathbf{r}_1, s_1, \mathbf{r}_2, s_2, \dots, \mathbf{r}_N, s_N) = \frac{1}{\sqrt{N!n_1!n_2!\dots}} [\psi_{k_1}(\mathbf{r}_1, s_1)\psi_{k_2}(\mathbf{r}_2, s_2)\dots\psi_{k_N}(\mathbf{r}_N, s_N) + \psi_{k_1}(\mathbf{r}_2, s_2)\psi_{k_2}(\mathbf{r}_1, s_1)\dots\psi_{k_N}(\mathbf{r}_N, s_N) + \dots]. \quad (4.1.9a)$$

Antisimetrinė  $N$  vienodų nepriklausomų dalelių banginė funkcija:

$$\psi^{(-)}(\mathbf{r}_1, s_1, \mathbf{r}_2, s_2, \dots, \mathbf{r}_N, s_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \psi_{k_1}(\mathbf{r}_1, s_1) & \psi_{k_2}(\mathbf{r}_1, s_1) & \dots & \psi_{k_N}(\mathbf{r}_1, s_1) \\ \psi_{k_1}(\mathbf{r}_2, s_2) & \psi_{k_2}(\mathbf{r}_2, s_2) & \dots & \psi_{k_N}(\mathbf{r}_2, s_2) \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \psi_{k_1}(\mathbf{r}_N, s_N) & \psi_{k_2}(\mathbf{r}_N, s_N) & \dots & \psi_{k_N}(\mathbf{r}_N, s_N) \end{vmatrix}. \quad (4.1.9b)$$

Šis determinantas kartais vadinamas **Sleiterio determinantu**, anglų fiziko Džono Sleiterio (*Slater*) garbei. Bet kurių dviejų dalelių transpozicija yra tapati dviejų šio determinanto eilučių sukeitimui vietomis. Kaip žinome, sukeitus vietomis bet kurias dvi determinanto eilutes arba bet kuriuos du jo stulpelius, determinantas keičia ženklą. Vadinasi, (4.1.9b) funkcija iš tikrųjų yra antisimetrinė bet kurių dviejų dalelių transpozicijos atžvilgiu.

Iš reikalavimo, kad vienodų fermionų sistemos banginė funkcija turi būti antisimetrinė, išplaukia, kad vienodų nepriklausomų fermionų sistemoje negali būti dviejų vienos būsenos fermionų. Šį teiginį 1925 m. suformulavo austrų fizikas Wolfgangas Paulis (*Pauli*), todėl šis principas vadinamas **Paulio draudimo principu** (angl. *Pauli exclusion principle*). Paulio draudimo principas išplaukia iš antisimetrinės funkcijos išraiškos (4.1.9b) ir iš determinanto savybių (jeigu du determinanto stulpeliai yra vienodi, tada determinantas lygus nuliui).

## 4.2. Daugiaelektronio atomo judesio kiekio momentas ir magnetinis momentas

Du atomo elektronų impulso momentų sudėties būdai:

**I būdas.** Kiekvieno elektrono orbitinis impulso momentas  $\mathbf{L}$  vektoriškai sudedamas su jo sukiniu  $\mathbf{L}_s$  ir sudaro elektrono pilnutinį momentą  $\mathbf{L}_j$ :

$$\mathbf{L}_j = \mathbf{L} + \mathbf{L}_s.$$

Paskui skirtingų elektronų pilnutiniai momentai  $\mathbf{L}_{jk}$  (čia  $k$  yra elektrono numeris) vektoriškai sudedami ir kartu sudaro atomo pilnutinį judesio kiekio momentą  $\mathbf{L}_J$ :

$$\mathbf{L}_J = \sum_k \mathbf{L}_{jk}.$$

Toks atomo elektronų momentų ryšys vadinamas **jj ryšiu**.

**II būdas.** Visų elektronų orbitinių impulso momentų vektoriai sudedami ir sudaro atomo orbitinį impulso momentą  $\mathbf{L}_L$ :

$$\mathbf{L}_L = \sum_k \mathbf{L}_k; \quad |\mathbf{L}_L| = \hbar\sqrt{L(L+1)}. \quad (4.2.1)$$

Visų elektronų sukinių impulso momentų vektoriai sudedami ir sudaro atomo sukinių impulso momentą  $\mathbf{L}_S$ :

$$\mathbf{L}_S = \sum_k \mathbf{L}_{sk}; \quad |\mathbf{L}_S| = \hbar\sqrt{S(S+1)}. \quad (4.2.2)$$

Paskui atomo orbitinis impulso momentas  $\mathbf{L}_L$  vektoriškai sudedamas su atomo sukiniu impulso momentu  $\mathbf{L}_S$  ir sudaro atomo pilnutinį impulso momentą:

$$\mathbf{L}_J = \mathbf{L}_L + \mathbf{L}_S; \quad |\mathbf{L}_J| = \hbar\sqrt{J(J+1)}. \quad (4.2.3)$$



Toks atomo elektronų momentų ryšys vadinamas **LS ryšiu** arba **Raselo ir Saunderso ryšiu** (angl. *Russell-Saunders coupling*).

Momentų  $L_L$ ,  $L_S$  ir  $L_J$  projekcijos į  $z$  ašį apskaičiuojamos pagal bendrąją taisyklę (3.1.9):

$$L_{Lz} = m_L \hbar \quad (m_L = -L, -L+1, \dots, L), \quad L_{Sz} = m_S \hbar \quad (m_S = -S, -S+1, \dots, S), \quad L_{Jz} = m_J \hbar \quad (m_J = -J, -J+1, \dots, J). \quad (4.2.4)$$

Teisingąją elektronų orbitinių ir sukininių judesio kiekio momentų sudėties tvarką lemia įvairių „liekamųjų“ sąveikų, į kurias neatsižvelgiama centrinio jėgų lauko modelyje (pvz., elektronų Kulono stūmos ir kiekvieno elektrono sukinio ir orbitos sąveikos), santykinis stiprumas. Visų pirma turi būti įskaitomos stipriausios liekamosios sąveikos. Lengvųjų atomų ( $Z < 40$ ) atveju svarbiausia liekamoji sąveika yra elektronų Kulono stūma. Tada tinka **LS** ryšys. Sunkiųjų atomų ( $Z > 80$ ) elektronų sukinio ir orbitos sąveikos energija yra daug didesnė už Kulono stūmos energiją. Tada tinka **jj** ryšys. Yra galimas ir „mišrusis“ ryšys (**tarpinis ryšys**).

**LS** ryšio atveju kvantinių skaičių  $L$ ,  $S$  ir  $J$  vertės gaunamos pagal bendrąją momentų sudėties taisyklę (3.4.6). Jeigu atomas turi  $N$  elektronų, tada galimos skaičiaus  $S$  vertės yra

$$S = \sum_{k=1}^N \left( \pm \frac{1}{2} \right) = \begin{cases} 0, 1, \dots, \frac{1}{2}N-1, \frac{1}{2}N, & \text{jeigu } N \text{ lyginis;} \\ \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \dots, \frac{1}{2}N-1, \frac{1}{2}N, & \text{jeigu } N \text{ nelyginis.} \end{cases} \quad (4.2.5)$$

Atomo pilnutinio impulso momento kvantinis skaičius  $J$  gali įgyti tik šias vertes:

$$J = |L - S|, |L - S| + 1, \dots, L + S - 1, L + S. \quad (4.2.6)$$

Kiekviena iš šių verčių atitinka apibrėžtą kampą tarp vektorių  $L_L$  ir  $L_S$ .

Sukinio ir orbitos sąveika pasireiškia tuo, kad energija priklauso nuo kampo tarp  $L_L$  ir  $L_S$ , tiksliau, proporcinga skaliarinei sandaugai  $L_L \cdot L_S$  (plg. su (3.6.3)). Todėl atomo energijos lygmuo, kuris atitinka duotąsias  $L$  ir  $S$  vertes, skyla į  $2S + 1$  artimų lygmenų (jeigu  $S \leq L$ ) arba į  $2L + 1$  artimų lygmenų (jeigu  $S > L$ ). Kai  $n$ ,  $L$  ir  $S$  yra fiksuoti, atomo energija didėja didėjant  $J$ .

Fiksavus  $L$ , duotąją  $J$  vertę galima gauti esant įvairioms  $S$  vertėms. Todėl, nusakant atomo energijos lygmenį, kartu su kvantiniais skaičiais  $L$  ir  $J$  reikia nurodyti ir atomo sukinio kvantinį skaičių  $S$ . Vietoj skaičiaus  $S$  įprasta nurodyti **multiplietišumą**  $2S + 1$ , kuris nusako, kiek yra galimų kampų tarp vektoriaus  $L_S$  ir laisvai pasirinktos krypties. Būsena su  $S = 0$  vadinama **singuletine būseną** ( $2S + 1 = 1$ ), būsena su  $S = 1/2$  – **dubletine būseną** ( $2S + 1 = 2$ ), būsena su  $S = 1$  – **tripletine būseną** ( $2S + 1 = 3$ ) ir t. t. Pilnasis atomo energijos lygmens žymuo yra toks:  $n^{2S+1}L_J$ ; čia vietoj  $L$  verčių 0, 1, 2, 3, 4, ... vartojamos didžiosios raidės – atitinkamai S, P, D, F, G ir t. t. (pradedant nuo raidės „F“ – pagal abėcėlę). Pvz., žymuo  $3^2P_{3/2}$  reiškia lygmenį, kuris atitinka  $n = 3$ ,  $S = 1/2$ ,  $L = 1$  ir  $J = 3/2$ .

Atomo pilnutinis magnetinis momentas  $\mu_{\text{piln}}$  lygus atomo orbitinio ir sukininio magnetinių momentų vektorinei sumai:

$$\mu_{\text{piln}} = \mu_L + \mu_S. \quad (4.2.7)$$

Kaip ir vieno elektrono atveju,

$$\mu_L = -\frac{e}{2m} L_L = -\mu_B \frac{L_L}{\hbar}, \quad (4.2.8)$$

$$\mu_S = -2\mu_B \frac{L_S}{\hbar}. \quad (4.2.9)$$

Pilnutinio magnetinio momento  $\mu_{\text{piln}}$  kryptis nėra priešinga  $L_J$  kryptiai, nes orbitinis ir sukininis  $g$  faktoriai yra skirtingi. Kadangi  $L_L$  ir  $L_S$  precesuoja apie  $L_J$ , tai,  $\mu_{\text{piln}}$  taip pat precesuoja apie  $L_J$ . Reiškiniuose, kurie priklauso nuo  $\mu_{\text{piln}}$ , pasireiškia tik vektoriaus  $\mu_{\text{piln}}$  vidurkis  $\mu_J$ , kurio kryptis priešinga  $L_J$  kryptiai, o modulis lygus vektoriaus  $\mu_{\text{piln}}$  projekcijos į  $L_J$  kryptį moduliui:

$$|\boldsymbol{\mu}_J| = |\boldsymbol{\mu}_{\text{piln}} - \boldsymbol{\mu}_{\text{piln}}^{(\perp)}| = |\boldsymbol{\mu}_L| \cos(\mathbf{L}_L, \mathbf{L}_J) + |\boldsymbol{\mu}_S| \cos(\mathbf{L}_S, \mathbf{L}_J). \quad (4.2.10)$$

Kampų tarp  $\mathbf{L}_L$  ir  $\mathbf{L}_J$  bei tarp  $\mathbf{L}_S$  ir  $\mathbf{L}_J$  kosinusus galima išreikšti pakėlus kvadratu sąryšius  $\mathbf{L}_S = \mathbf{L}_J - \mathbf{L}_L$  ir  $\mathbf{L}_L = \mathbf{L}_J - \mathbf{L}_S$ . Tada, atsižvelgę į modulius  $|\mathbf{L}_L|$ ,  $|\mathbf{L}_S|$  ir  $|\mathbf{L}_J|$  išraiškas (4.2.1–3), gauname:

$$|\boldsymbol{\mu}_J| = \mu_B g_J \sqrt{J(J+1)}; \quad g_J = 1 + \frac{J(J+1) + S(S+1) - L(L+1)}{2J(J+1)}. \quad (4.2.11)$$

Čia  $g_J$  yra atomo elektronų sistemos  $g$  faktorius – atomo elektronų pilnutinių magnetinio momento ir judesio kiekio momento projekcijų į duotąją kryptį santykis, išreikštas  $-\mu_B/\hbar$  vienetais.  $g$  faktoriaus išraišką (4.2.11) 1921 m. išvedė amerikiečių fizikas Alfredas Landė (*Landé*), todėl atomo  $g$  faktorius taip pat vadinamas **Landė  $g$  faktoriumi**.

Atomai, kurio magnetinis momentas yra  $\boldsymbol{\mu}_J$ , išoriniame magnetiniame lauke, kurio indukcija yra  $\mathbf{B}$ , įgyja papildomą potencinę energiją

$$E_M = -\boldsymbol{\mu}_J \cdot \mathbf{B} = -\mu_J B \cos(\boldsymbol{\mu}_J, \mathbf{B}); \quad (4.2.12)$$

čia  $\mu_J \equiv |\boldsymbol{\mu}_J|$ ,  $B \equiv |\mathbf{B}|$ . Todėl kiekvienas energijos lygmuo skyla į tiek galimų kampų tarp vektorių  $\boldsymbol{\mu}_J$  ir  $\mathbf{B}$ . Kadangi

$$L_{Jz} = m_J \hbar, \quad (4.2.13)$$

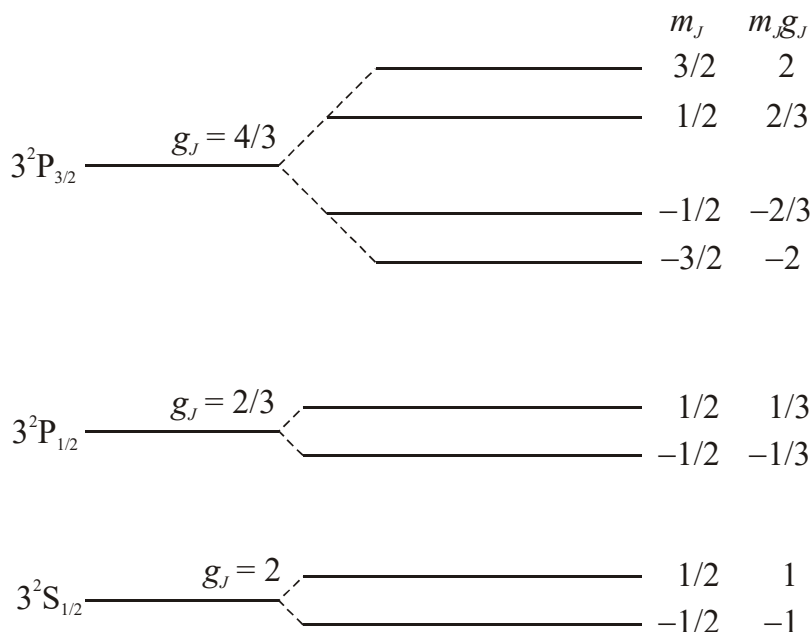
$$\mu_{Jz} = -m_J g_J \mu_B, \quad (4.2.14)$$

$$m_J = -J, -J+1, \dots, J-1, J, \quad (4.2.15)$$

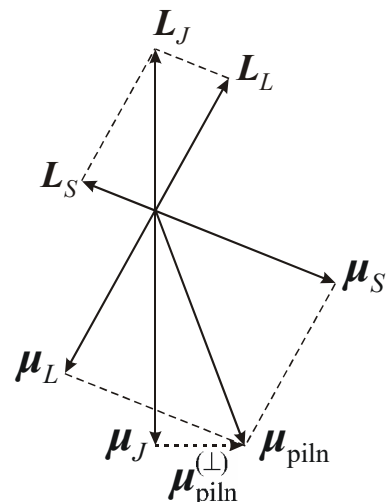
tai

$$E_M = \mu_{Jz} B = -m_J g_J \mu_B B \quad (m_J = -J, -J+1, \dots, J-1, J). \quad (4.2.16)$$

Tai reiškia, kad išoriniame magnetiniame lauke kiekvienas atomo energijos lygmuo skyla į  $2J+1$  artimų lygmenų. Atitinkamai skyla ir atomo spektro linijos. Atomo spektro linijų skilimą esant nuostoviam magnetiniam laukui 1896 m. pirmasis pastebėjo olandų fizikas Peteris Zėmanas (*Zeeman*), todėl šis reiškinys vadinamas **Zėmano efektu**.



**4.2.2 pav.** Natrio atomo energijos lygmenų skilimas magnetiniame lauke (skilimo didumo ir intervalų tarp neskilusių lygmenų santykis tikrovėje yra daug mažesnis už tą, kuris parodytas šioje energijos lygmenų diagramoje)



**4.2.1 pav.** Atomo orbitinio ir sukulinio mechaninio ir magnetinio momentų vektorinė sudėtis

### 4.3. Dviejų nepriklausomų elektronų sistemos banginė funkcija

Antisimetrinė dvidalė banginė funkcija (4.1.9b):

$$\psi(\mathbf{r}_1, s_1, \mathbf{r}_2, s_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{vmatrix} \psi_{k_1}(\mathbf{r}_1, s_1) & \psi_{k_2}(\mathbf{r}_1, s_1) \\ \psi_{k_1}(\mathbf{r}_2, s_2) & \psi_{k_2}(\mathbf{r}_2, s_2) \end{vmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_{k_1}(\mathbf{r}_1, s_1)\psi_{k_2}(\mathbf{r}_2, s_2) - \psi_{k_2}(\mathbf{r}_1, s_1)\psi_{k_1}(\mathbf{r}_2, s_2)). \quad (4.3.1)$$

Atomo elektrono sukininė būseną (t. y. elektrono sukinio kryptis) beveik nepriklauso nuo orbitinės būsenos, todėl erdvinės ir sukininės koordinatės atsiskiria (žr. (3.7.4)):

$$\psi(\mathbf{r}, s) \approx \varphi(\mathbf{r})\chi^\pm(s), \quad (4.3.2)$$

čia  $\chi^+$  ir  $\chi^-$  yra vienetiniai spinoriai (3.7.3). Pažymėjus dviejų elektronų erdvines būsenas  $a$  ir  $b$ ,

$$\begin{aligned} \psi(\mathbf{r}_1, s_1, \mathbf{r}_2, s_2) &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{vmatrix} \varphi_a(\mathbf{r}_1)\chi^\pm(s_1) & \varphi_b(\mathbf{r}_1)\chi^\pm(s_1) \\ \varphi_a(\mathbf{r}_2)\chi^\pm(s_2) & \varphi_b(\mathbf{r}_2)\chi^\pm(s_2) \end{vmatrix} = \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\varphi_a(\mathbf{r}_1)\chi^\pm(s_1)\varphi_b(\mathbf{r}_2)\chi^\pm(s_2) - \varphi_a(\mathbf{r}_2)\chi^\pm(s_2)\varphi_b(\mathbf{r}_1)\chi^\pm(s_1)). \end{aligned} \quad (4.3.3)$$

Galiojant (4.3.2), pasireiškia ir „sukininė“ simetrija: jeigu sistemoje yra du elektronai su priešingais sukiniais (t. y. jeigu jų sukininės banginės funkcijos yra  $\chi^+(s_1)$  ir  $\chi^-(s_2)$ , arba  $\chi^-(s_1)$  ir  $\chi^+(s_2)$ ), tada, vienu metu apvertus jų sukinius:

$$\chi^\pm(s_1) \rightarrow \chi^\mp(s_1), \quad \chi^\mp(s_2) \rightarrow \chi^\pm(s_2), \quad (4.3.4)$$

gausime būseną, kuri tapati pradinei. Tai reiškia, kad tikimybės tankis (banginės funkcijos modulio kvadratas) turi nepasikeisti. Todėl atitinkama banginė funkcija turi būti lygi arba priešinga pradinei. Šios išvados pagrindimas yra analogiškas pilnutinės banginės funkcijos (priklausančios ir nuo erdvių, ir nuo sukininių koordinatų) simetriškumo arba antisimetriškumo savybės pagrindimui (žr. (4.1.2) ir (4.1.3)). Jeigu  $a \neq b$ , tada, atlikus pakeitimą (4.3.4) funkcijos išraiškoje (4.3.3), gautoji funkcija nėra lygi arba priešinga pradinei. Tačiau galima sudaryti du pradinio ir galutinio determinantų tiesinius darinius, kurių vienas nesikeičia atlikus (4.3.4) pakeitimą, o kitas keičia tik ženklą:

$$\psi(\mathbf{r}_1, s_1, \mathbf{r}_2, s_2) = \frac{1}{2} \left[ \begin{vmatrix} \varphi_a(\mathbf{r}_1)\chi^+(s_1) & \varphi_b(\mathbf{r}_1)\chi^-(s_1) \\ \varphi_a(\mathbf{r}_2)\chi^+(s_2) & \varphi_b(\mathbf{r}_2)\chi^-(s_2) \end{vmatrix} \pm \begin{vmatrix} \varphi_a(\mathbf{r}_1)\chi^-(s_1) & \varphi_b(\mathbf{r}_1)\chi^+(s_1) \\ \varphi_a(\mathbf{r}_2)\chi^-(s_2) & \varphi_b(\mathbf{r}_2)\chi^+(s_2) \end{vmatrix} \right]. \quad (4.3.5)$$

Tai yra galimos banginės funkcijos, kai  $a \neq b$ , o elektronų sukiniai priešingi. Kitoks užrašymas:

$$\psi(\mathbf{r}_1, s_1, \mathbf{r}_2, s_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\varphi_a(\mathbf{r}_1)\varphi_b(\mathbf{r}_2) \mp \varphi_a(\mathbf{r}_2)\varphi_b(\mathbf{r}_1)] \cdot \frac{1}{\sqrt{2}} [\chi^+(s_1)\chi^-(s_2) \pm \chi^+(s_2)\chi^-(s_1)]. \quad (4.3.6)$$

Jeigu elektronų sukininės būsenos yra vienodos (t. y. nusakomos vienodu spinoriumi  $\chi^\pm$ ), tada

$$\psi(\mathbf{r}_1, s_1, \mathbf{r}_2, s_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{vmatrix} \varphi_a(\mathbf{r}_1)\chi^\pm(s_1) & \varphi_b(\mathbf{r}_1)\chi^\pm(s_1) \\ \varphi_a(\mathbf{r}_2)\chi^\pm(s_2) & \varphi_b(\mathbf{r}_2)\chi^\pm(s_2) \end{vmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} [\varphi_a(\mathbf{r}_1)\varphi_b(\mathbf{r}_2) - \varphi_a(\mathbf{r}_2)\varphi_b(\mathbf{r}_1)]\chi^\pm(s_1)\chi^\pm(s_2). \quad (4.3.7)$$

Jeigu  $a = b$ , tada

$$\psi(\mathbf{r}_1, s_1, \mathbf{r}_2, s_2) = \varphi_a(\mathbf{r}_1)\varphi_a(\mathbf{r}_2) \cdot \frac{1}{\sqrt{2}} [\chi^+(s_1)\chi^-(s_2) - \chi^+(s_2)\chi^-(s_1)]. \quad (4.3.8)$$

Iš (4.3.6–8) akivaizdu, kad dviejų nepriklausomų elektronų sistemos banginės funkcijas galima išreikšti dvidalės erdvinės funkcijos ir dvidalės sukininės funkcijos sandauga:

$$\psi(\mathbf{r}_1, s_1, \mathbf{r}_2, s_2) = \varphi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)\chi(s_1, s_2). \quad (4.3.9)$$

Funkcijų  $\varphi$  ir  $\chi$  simetrija argumentų transpozicijos atžvilgiu yra priešinga (viena simetrinė, o kita antisimetrinė), todėl jų sandauga yra antisimetrinė.

a) Antisimetrinė sukininė funkcija

$$\chi_{0,0}(s_1, s_2) = [\chi^+(s_1)\chi^-(s_2) - \chi^+(s_2)\chi^-(s_1)]/\sqrt{2}, \quad (4.3.10a)$$

b) simetrinės sukininės funkcijos

$$\chi_{1,1}(s_1, s_2) = \chi^+(s_1)\chi^+(s_2), \quad (4.3.10b)$$

$$\chi_{1,0}(s_1, s_2) = [\chi^+(s_1)\chi^-(s_2) + \chi^+(s_2)\chi^-(s_1)]/\sqrt{2}, \quad (4.3.10c)$$

$$\chi_{1,-1}(s_1, s_2) = \chi^-(s_1)\chi^-(s_2). \quad (4.3.10d)$$

Antisimetrinė sukininė funkcija (4.3.10a) atitinka  $S = 0$  (priešingų kryptių sukiniai), o simetrinės sukininės funkcijos (4.3.10b–d) atitinka  $S = 1$  (vienodos krypties sukiniai). Pirmasis indeksas yra  $S$  vertė, o antrasis indeksas yra  $m_S$  vertė (ji nusako atomo sukinio projekciją į  $z$  ašį).

Jeigu  $a = b$ , tada sistemos erdvinė banginė funkcija yra simetrinė funkcija  $\varphi_a(\mathbf{r}_1)\varphi_a(\mathbf{r}_2)$ , o sukininė – antisimetrinė funkcija (4.3.10a):

$$\psi(\mathbf{r}_1, s_1, \mathbf{r}_2, s_2) = \varphi_a(\mathbf{r}_1)\varphi_a(\mathbf{r}_2) \cdot \chi_{0,0}(s_1, s_2), \quad (4.3.11)$$

o jeigu  $a \neq b$ , tada

$$S = 0: \quad \psi(\mathbf{r}_1, s_1, \mathbf{r}_2, s_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}[\varphi_a(\mathbf{r}_1)\varphi_b(\mathbf{r}_2) + \varphi_a(\mathbf{r}_2)\varphi_b(\mathbf{r}_1)] \cdot \chi_{0,0}(s_1, s_2), \quad (4.3.12a)$$

$$S = 1: \quad \psi(\mathbf{r}_1, s_1, \mathbf{r}_2, s_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}[\varphi_a(\mathbf{r}_1)\varphi_b(\mathbf{r}_2) - \varphi_a(\mathbf{r}_2)\varphi_b(\mathbf{r}_1)] \cdot \begin{cases} \chi_{1,1}(s_1, s_2), & (4.3.12b) \\ \chi_{1,0}(s_1, s_2), & (4.3.12c) \\ \chi_{1,-1}(s_1, s_2). & (4.3.12d) \end{cases}$$

#### 4.4. Helio atomo energijos lygmenys. Pakaitinė sąveika

Helio (He) atomas turi du elektronus, todėl helio atomo Šrėdingerio lygtis yra

$$\nabla_1^2\psi + \nabla_2^2\psi + \frac{2m}{\hbar^2}[E - U(r_1) - U(r_2) - U_{12}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)]\psi = 0, \quad (4.4.1)$$

čia  $U_{12}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$  yra abiejų elektronų Kulono stūmos potencinė energija:

$$U_{12}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|}. \quad (4.4.2)$$

Kvantinė mechanika pateikia apytikslį (4.4.1) lygties sprendimo metodą („trikdymų teorija“), kuris remiasi prielaida, kad elektronų sąveikos dėmuo (4.4.2) („trikdys“) yra palyginti mažas. Tada elektronų tarpusavio sąveika turi palyginti mažą įtaką banginėms funkcijoms. Tai reiškia, kad elektronai yra apytiksliai nepriklausomi, t. y. pasiskirstę tarp vienelektronių būsenų, kurios nusakomos tais pačiais keturiais kvantiniais skaičiais (3.4.11), kaip ir vandeniliškojo atomo būsenos. Pvz., He atomo atveju lieka galioti (4.3.11) ir (4.3.12a–d) formulės (čia indeksai „a“ ir „b“ yra kiekvieno elektrono būseną nusakantys kvantinių skaičių ketvertai (3.4.11)). Tačiau dėl elektronų tarpusavio sąveikos pasikeičia atomo energijos lygmenys: jų jau negalima apskaičiuoti tiesiog sudedant užimtų viendalelių būsenų energijas (3.3.5) (helio atomo  $Z = 2$ ). Toliau aprašytas helio atomo energijos lygmenų pokytis dėl elektronų tarpusavio sąveikos.

**Jeigu  $a = b$** , t. y. abiejų elektronų erdvinės būsenos yra vienodos (pvz., 1s), tada atitinkamo energijos lygmens pokytis lygus vidutinei elektronų Kulono stūmos energijai:

$$\Delta E = C = \int |\varphi_a(\mathbf{r}_1)|^2 |\varphi_a(\mathbf{r}_2)|^2 \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} dV_1 dV_2 \quad (a = b). \quad (4.4.3)$$

**Jeigu  $a \neq b$** , t. y. abiejų elektronų erdvinės būsenos yra skirtingos (pvz., 1s ir 2s), tada atitinkamas energijos lygmuo ne tik pasislenka dydžiu  $C$ , bet ir skyla į du lygmenis:

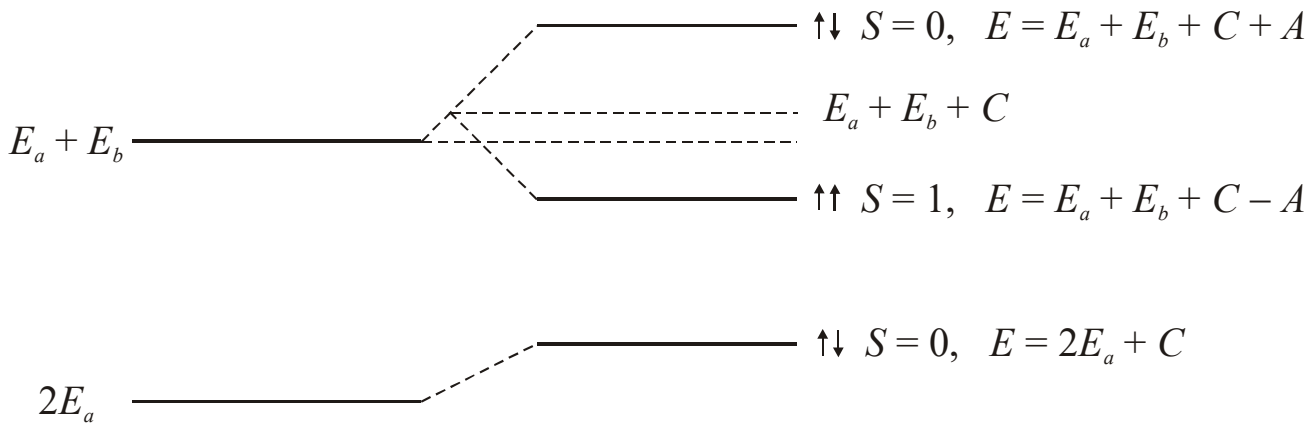
$$\Delta E = C \pm A \quad (a \neq b), \quad (4.4.4)$$

čia  $A$  yra **pakaitinis integralas**:

$$A \equiv \frac{1}{2} \int \left[ \varphi_a^*(\mathbf{r}_1) \varphi_b^*(\mathbf{r}_2) \varphi_a(\mathbf{r}_2) \varphi_b(\mathbf{r}_1) + \varphi_a(\mathbf{r}_1) \varphi_b(\mathbf{r}_2) \varphi_a^*(\mathbf{r}_2) \varphi_b^*(\mathbf{r}_1) \right] \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} dV_1 dV_2. \quad (4.4.5)$$

Dėmuo  $\pm A$  energijos pokyčio išraiškoje (4.4.4) vadinamas **mainų energija**. Ženklas prieš  $A$  priklauso nuo  $S$ : jeigu  $S = 0$  (priešingų kryptių sukiniai), tada mainų energija lygi  $+A$ , o jeigu  $S = 1$  (vienos krypties sukiniai), tada mainų energija lygi  $-A$ . Helio atomo atveju  $A > 0$ . Todėl, esant duotoms (skirtingoms) abiejų elektronų orbitinio judėjimo būsenoms, tripletinės būsenos helio atomo energija yra mažesnė negu singuletinės būsenos. T. y. skirtingų orbitinio judėjimo būsenų elektronams energiškai naudingiau turėti vienodos krypties sukinius.

Mainų energijos fizikinė prasmė: dėl galimybės keistis elektronais tarp būsenų  $a$  ir  $b$  kiekvienas elektronas tartum iš dalies yra būsenos  $a$  ir iš dalies būsenos  $b$ . Tos „skirtingos elektrono dalys“ sąveikauja pagal Kulono dėsnį, o sąveikos energijos ženklas priklauso nuo elektronų sukinių tarpusavio orientacijos.



**4.4.1 pav.** Helio atomo energijos lygmenų poslinkis ir skilimas, kuriuos sukelia elektronų tarpusavio sąveika. Šalia lygmenų parodyta elektronų sukinių tarpusavio orientacija

Kiti reiškiniai, kuriuose pasireiškia elektronų pakaitinė sąveika:

**Kovalentinis cheminis ryšys.** Šiuo atveju būsenos  $a$  ir  $b$  skiriasi tuo, kad jos lokalizuotos prie skirtingų atomų. Kadangi  $A$  išsireiškia banginių funkcijų  $\varphi_a$  ir  $\varphi_b$  sandaugos integralu (4.4.5), tai mainų energija pastebimai skiriasi nuo nulio tik tada, kai atomai yra pakankama arti vienas kito. Šiuo atveju  $A < 0$ , todėl mažesnę energiją atitinka priešingos sukinių kryptys. Tik tada dviejų atomų sistemos energijos priklausomybė nuo atstumo tarp atomų turi minimumą. Todėl dviejų kovalentinį cheminį ryšį sudarančių elektronų sukiniai visada yra priešingų kryptių.

**Feromagnetizmas.** Kai kuriose kietose medžiagose (pvz., geležyje), kurių atomai turi iš dalies užpildytą elektronų sluoksnį, skirtingų atomų elektronų sukiniai savaime orientuojasi viena kryptimi. Feromagnetinė medžiaga yra sudaryta iš **magnetinių domenų** – sričių, kurios turi pastovų įmagnetėjimą dėl viena kryptimi orientuotų elektronų sukinių. Normaliomis sąlygomis gretimų domenų magnetinių momentų kryptys yra priešingos, todėl pilnutinis įmagnetėjimas lygus nuliui. Tačiau, kai feromagnetiką veikia pakankamai stiprus magnetinis laukas, domenų magnetiniai momentai pasisuka to lauko kryptimi ir lieka tos krypties netgi išjungus lauką. Šitaip feromagnetikas virsta „pastoviu“ magnetu.

#### 4.5. Šarminių metalų atomų energijos lygmenys

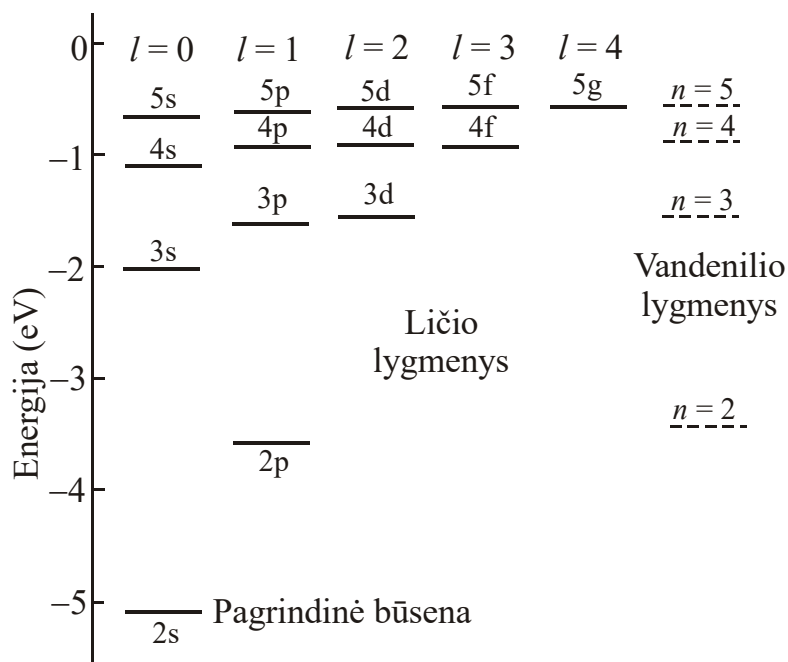
Šarminio metalo atomai turi vieną silpnai susijusį su branduoliu elektroną ir  $Z - 1$  arčiau branduolio esančių elektronų, kurie susiję su branduoliu stipriau. Vidiniai elektronai pasireiškia kaip pastovus sferiškai simetrinis neigiamo erdvinio krūvio pasiskirstymas, kuris iš dalies ekranuoja teigiamą branduolio krūvį  $+Ze$ .

„*Ekranavimas*“ – tai pilnutinio („efektinio“) teigiamo krūvio, su kuriuo sąveikauja elektronas, sumažėjimas dėl arčiau branduolio esančių elektronų neigiamojo erdvinio krūvio. Ekranavimo sąvoka leidžia supaprastinti atomo elektronų tarpusavio elektrosstatinės sąveikos analizę. Ekranuoti gali tik *arčiau* branduolio esantys elektronai, nes iš elektrosstatikos yra žinoma, kad krūvis, kuris tolygiai pasiskirstęs ant sferos, sukuria elektrinį lauką tik tos sferos išorėje.

Taigi, šie vidiniai elektronai modifikuoja išorinio elektrono potencinės energijos priklausomybę nuo radialiosios koordinatės  $U(r)$ . Todėl šarminio metalo atomo išorinio elektrono judėjimą nusako to paties pavidalo Šrėdingerio lygtis (3.1.1) kaip ir vandeniliškojo atomo atveju, tačiau su šiek tiek kitokia potencine energija  $U(r)$ . Viena iš šio  $U(r)$  pokyčio pasekmių yra ta, kad šarminio metalo energijos lygmenys priklauso ne vien nuo pagrindinio kvantinio skaičiaus  $n$ , bet ir nuo šalutinio kvantinio skaičiaus  $l$  (kitaip negu vandeniliškojo atomo energijos lygmenys (3.3.5), kurie priklauso tik nuo  $n$ ). Priklausomybę nuo  $l$  galima paaiškinti remiantis tuo, kad didėjant  $l$  mažėja išorinio elektrono banginės funkcijos erdvinė sanklota su vidinių elektronų banginėmis funkcijomis ir todėl didėja pastarųjų elektronų ekranuojantis poveikis (t. y. mažėja efektinis teigiamas krūvis, su kuriuo sąveikauja išorinis elektronas). Pvz., 1s elektronų ekranuojantis poveikis priklauso nuo tikimybės aptikti išorinį elektroną  $r_1$  eilės arba mažesniu atstumu nuo branduolio (žr. 3.3.2 pav.): kuo ta tikimybė mažesnė, tuo didesnis ekranavimas. Iš 3.3.2 pav. akivaizdu, kad tikimybė aptikti 2s elektroną viduje sferos su spinduliu  $r_1$  yra didesnė negu tikimybė ten aptikti 2p elektroną, nes 2s elektrono radialinis tikimybės tankis turi papildomą maksimumą intervale  $r < r_1$ . Atitinkamai, jeigu  $n$  pastovus, o  $l$  didėja, tada energijos lygmenys kyla (energija tampa vis mažiau neigiama). Ekranavimo įtaką ličio atomo energijos lygmenims iliustruoja 4.5.1 pav.

Kai  $Z > 18$ , dėl ekranavimo gali pasikeisti energijos lygmenų tvarka: lygmenys, atitinkantys  $l > 1$ , gali atsidurti aukščiau lygmenų, kurie atitinka vienetu didesnę  $n$  ir  $l = 0$ . Pvz., 3d lygmuo ( $n = 3, l = 2$ ) gali atsidurti aukščiau 4s lygmens ( $n = 4, l = 0$ ).

Šis ekranavimo reiškinys yra svarbus, aiškinant periodinę elementų sistemą (tiksliau, aiškinant nuokrypius nuo „idealiosios“ elektronų sluoksnių užpildymo tvarkos).



4.5.1 pav. Ličio (Li,  $Z = 3$ ) atomo išorinio elektrono energijos lygmenų diagrama

## 4.6. Elektronų sluoksniai

[4.5 skirsnyje](#) aprašytą metodą galima apibendrinti: tikrąsias jėgas, kurios veikia *kiekvieną* atomo elektroną (ne tik išorinį), galima pakeisti apytiksle centrine jėga. T. y. tikslioji potencinė energija  $U(r)$  pakeičiama „efektine“ potencine energija  $U_{ef}(r)$ , o elektronų porinių sąveikų dėmenys [\(4.4.2\)](#) pašalinami. Pvz., He atomo atveju vietoj [\(4.4.1\)](#) gaunama ši Šrėdingerio lygtis:

$$\nabla_1^2 \psi + \nabla_2^2 \psi + \frac{2m}{\hbar^2} [E - U_{ef}(r_1) - U_{ef}(r_2)] \psi = 0. \quad (4.6.1)$$

Tai yra tapatu prielaidai, kad elektronai yra nepriklausomi. Tada elektronai lieka pasiskirstę tarp vienelektroninių būsenų, kurios nusakomos tais pačiais keturiais kvantiniais skaičiais, kaip ir vandeniliškojo atomo būsenos (žr. [3.4 skirsnis](#)). Jeigu nepaisoma sukiniio ir orbitos sąveikos, kiekvieno elektrono būseną galima apibūdinti kvantiniais skaičiais [\(3.4.4\)](#):

$$n, l, m_l, m_s. \quad (4.6.2)$$

Elektrono būseną, kuri apibūdinama kvantinių skaičių trejetu  $n, l, m_l$ , vadinama atomo **orbitale**.

Pagrindiniai principai, kurie nusako daugiaelektronio atomo vienelektroninių būsenų užpildymą:

**Paulio draudimo principas:** atome negali būti du elektronai, kurių visi atitinkami kvantiniai skaičiai sutampa, t. y. orbitalėje gali būti ne daugiau negu du elektronai su priešingais sukiniiais.

**Energijos minimumo principas:** esant duotam elektronų skaičiui atome, jų pasiskirstymas tarp vienelektroninių kvantinių būsenų yra toks, kad atomo energija būtų mažiausia.

Didėjant  $n$ , didėja vidutinis atstumas tarp branduolio ir elektrono. Todėl visos orbitalės, kurių  $n$  sutampa, sudaro **elektronų sluoksnį**. Visos orbitalės, kurių  $n$  ir  $l$  sutampa, sudaro **elektronų posluoksnį**; jis taip pat vadinamas **pogrūpiu**. Elektronų sluoksniai žymimi raidėmis K, L, M ir t. t. Pvz., pirmasis elektronų sluoksnis ( $n = 1$ ) vadinamas **K sluoksniu**. Antrasis sluoksnis ( $n = 2$ ) vadinamas **L sluoksniu** ir t. t. Posluoksniai žymimi raidėmis s, p, d, f, g, ...

### 4.6.1 lentelė. Elektronų sluoksnių žymėjimas

Pagrindinis kvantinis skaičius $n$	1	2	3	4	5
Elektronų sluoksnis	K	L	M	N	O

### 4.6.2 lentelė. Elektronų posluoksnių žymėjimas

Šalutinis kvantinis skaičius $l$	0	1	2	3	4
Elektronų posluoksnis	s	p	d	f	g

### Elektronų pasiskirstymo tarp sluoksnių ir posluoksnių aiškinimas:

Kiekvieną  $l$  vertę atitinka  $2l + 1$  galimų skaičiaus  $m_l$  verčių (žr. [\(3.1.9\)](#)):

$$m_l = -l, -l + 1, \dots, l. \quad (4.6.3)$$

Be to,  $m_s = \pm 1/2$  (žr. [\(3.4.3\)](#)). Todėl posluoksnyje gali būti ne daugiau kaip  $2(2l+1)$  elektronų.

Kiekvieną  $n$  vertę atitinka  $n$  galimų skaičiaus  $l$  verčių (žr. [\(3.3.7\)](#)):

$$l = 0, 1, 2, \dots, n - 1. \quad (4.6.4)$$

Todėl didžiausias galimas elektronų skaičius  $n$ -tajame sluoksnyje yra lygus

$$2 \sum_{l=0}^{n-1} (2l + 1) = 2n^2. \quad (4.6.5)$$

### 4.6.3 lentelė. Didžiausi elektronų skaičiai sluoksniuose ir posluoksniuose

Sluoksnis	$n$	Didžiausias elektronų skaičius posluoksnyje					Iš viso sluoksnyje
		s	p	d	f	g	
K	1	2					2
L	2	2	6				8
M	3	2	6	10			18
N	4	2	6	10	14		32
O	5	2	6	10	14	18	50

Didėjant  $n$ , elektrono energija didėja, t. y. tampa vis mažiau neigiama (pvz., žr. vandeniliškojo atomo energijos lygmenų išraišką [\(3.3.5\)](#)).

Didėjant  $l$  ir esant pastoviam  $n$ , stiprėja vidinių sluoksnių elektronų ekranuojantis poveikis branduolio krūviui (t. y. mažėja „efektinis“ teigiamas krūvis, kuris veikia duotojo sluoksnio elektronus). Todėl, didėjant  $l$  ir esant pastoviam  $n$ , elektrono energija didėja (žr. [4.5 skirsnis](#)). Elektrono energijos priklausomybė nuo  $l$  yra silpnesnė negu priklausomybė nuo  $n$ .

Sujungus Paulio draudimo principą, energijos minimumo principą ir elektrono energijos priklausomybę nuo  $n$  ir  $l$ , gaunama „**idealioji sluoksnių užpildymo tvarka**“: *kiekvienas prisijungęs elektronas užima posluoksnį su mažiausiais  $n$  ir  $l$ , kuriuos leidžia Paulio draudimo principas*.

Galimosios  $m_l$  vertės [\(4.6.3\)](#) yra poromis priešingos. Todėl pilnai užpildyto posluoksnio  $L_z = 0$ . Kadangi tai galioja *nepriklausomai nuo  $z$  krypties*, tai ir  $|L| = 0$ . Analogiškai  $|L_s| = 0$ . Todėl *atomo pilnutinius orbitinį ir sukininį momentus lemia iš dalies užpildyti posluoksniai*.

Būsenų, kurios atitinka skirtingus posluoksnius, energijų skirtumas yra didesnis, negu būsenų, kurios priklauso vienam posluoksniui. Todėl atomams su pilnai užpildytais posluoksniais reikia suteikti daugiau energijos, perkeliant elektroną į aukštesnį laisvą energijos lygmenį, ir tokie atomai yra palyginti „inertiški“. Normaliomis sąlygomis atomo fizikines ir chemines savybes lemia išorinių (iš dalies užpildytų) sluoksnių elektronai – **valentiniai elektronai**. Išorinis sluoksnis vadinamas **valentiniu sluoksniu**.

Kai elektronų sluoksniai yra pilnai užpildyti, susidaro stabili elektronų konfigūracija, kuri atitinka inertinių dujų elektronų konfigūraciją. Paskui prasideda kito sluoksnio užpildymas (pradedant nuo šarminio metalo). Tačiau dėl ekranavimo reiškinio (žr. [4.5 skirsnis](#)) ketvirtojo ir visų aukštesnių sluoksnių užpildymas prasideda anksčiau: kai yra pilnai užpildyti žemesniojo sluoksnio  $s$  ir  $p$  posluoksniai.

Kol nėra išorinio magnetinio arba elektrinio lauko, visos kryptys erdvėje yra lygiavertės. Todėl vieno posluoksnio elektronų orbitinių ir sukininių momentų kryptys  $z$  ašies atžvilgiu ( $m_l$  ir  $m_s$ ) yra neapibrėžtos. Tačiau dėl elektronų tarpusavio sąveikos jų orbitinių ir sukininių momentų kryptys *viena kitos atžvilgiu* yra iš dalies apibrėžtos (žr. [3.6 skirsnis](#)). Nuo to priklauso atomo pilnutiniai orbitinis ir sukininis momentai (kvantiniai skaičiai  $L$  ir  $S$ ) bei jų vektorinė suma (kvantinis skaičius  $J$ ). Lengvųjų atomų ( $Z < 40$ ), kuriuose galioja  $LS$  ryšys, pagrindinės būsenos kvantinius skaičius  $S$ ,  $L$  ir  $J$  galima apskaičiuoti remiantis taisyklėmis, kurias suformulavo vokiečių fizikas Fridrichas Hundas (*Hund*).

**Pirmoji Hund taisyklė:** mažiausia energija yra būsenos, kurią atitinka didžiausias  $S$ . Taip yra dėl elektronų pakaitinės sąveikos ([4.4 skirsnis](#)). Pagal šią taisyklę, kol posluoksnis yra užpildytas mažiau negu pusiau, visų elektronų sukinių kryptys yra vienodos, t. y. kiekvienas naujai prijungtas elektronas padidina skaičių  $S$  dydžiu  $1/2$ . Paskui kiekvienas naujas elektronas sumažina skaičių  $S$  dydžiu  $1/2$ .

**Antroji Hund taisyklė:** iš visų būsenų su vienodu  $S$  mažiausia energija yra tos būsenos, kurios  $L$  yra didžiausias. Klasikinis aiškinimas: kelių elektronų sistemos orbitinis judesio kiekio momentas yra didžiausias tada, kai visi elektronai sukasi aplink branduolį viena kryptimi. Tokiu atveju jie susitinka vienas su kitu rečiau negu tuo atveju, jeigu sukūsi priešingomis kryptimis. Vadinasi, vidutinis atstumas tarp elektronų yra didesnis, todėl ir vidutinė jų Kulono stūmos energija yra mažesnė.

**Trečioji Hund taisyklė:** jeigu posluoksnis ( $n, l$ ) yra užpildytas mažiau negu pusiau, tada mažiausios energijos būsenos  $J = |L - S|$ , o kitais atvejais mažiausios energijos būsenos  $J = L + S$ . Taip yra dėl sukinio ir orbitos sąveikos (žr. [3.6 skirsnis](#)).



## 4.7. Periodinė elementų sistema

1869 m. rusų chemikas Dmitrijus Mendelejevas nustatė, kad, išdėsčius tuo metu žinomus cheminius elementus atominės masės didėjimo tvarka, elementų savybės kinta periodiškai.

Tai buvo paaiškinta XX a. trečiajame dešimtmetyje, taikant kvantinės mechanikos dėsnius: užpildant kiekvieną elektronų sluoksnį, pasikartoja ankstesniojo sluoksnio užpildymo tvarka (žr. [4.6 skirsnis](#)). Elementai, kurie gaunami užpildant vieną (išorinį) elektronų sluoksnį, sudaro vieną periodinės elementų sistemos periodą. Idealiosios sluoksnių užpildymo tvarkos atveju elementų skaičiai I–VI perioduose turėtų būti 2, 8, 18, 32, 50, 72 (žr. [4.6.3 lentelė](#)). Tačiau tikrovėje šie skaičiai yra 2, 8, 8, 18, 18, 32. Taip yra dėl ekranavimo reiškinių.

Atomo **elektronų konfigūracija** nusako visas užpildytas vienelektrones būsenas ir kiekvienos būsenos elektronų skaičių. Simbolinis užrašymas: visų pirma  $n$ , paskui  $l$  (vartojant raidę s, p, d, f ir t. t.), o paskui tos būsenos elektronų skaičius (viršutinio indekso pavidalu). Pvz., neono ( $_{10}\text{Ne}$ ) elektronų konfigūracijos užrašymas  $1s^2 2s^2 2p^6$  reiškia, kad neono atome yra: du 1s elektronai ( $n = 1, l = 0$ ); du 2s elektronai ( $n = 2, l = 0$ ); šeši 2p elektronai ( $n = 2, l = 1$ ).

Jeigu atomo vidinių sluoksnių konfigūracija atitinka kitą elementą su mažesniu  $Z$ , tada konfigūraciją galima užrašyti trumpiau, nurodant to elemento simbolį tarp skliaustų. Pvz., argono ( $_{18}\text{Ar}$ ) elektronų konfigūraciją ( $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6$ ) galima užrašyti taip:  $(\text{Ne}) 3s^2 3p^6$ .

Periodinės elementų sistemos pradžioje elektroninės būsenos užpildomos pagal idealiąją užpildymo tvarką (žr. [4.6 skirsnis](#)).

Helis ( $_2\text{He}$ , inertinės dujos) užbaigia elementų sistemos I periodą.

Neonu ( $_{10}\text{Ne}$ , inertinės dujos) baigiasi II elektronų sluoksnio užpildymas ir baigiasi II periodo sudarymas. Taigi, antrąjį periodą sudaro 8 elementai.

**III** periodas prasideda šarminiu metalu natriu ( $_{11}\text{Na}$ ), kurio elektronų konfigūracija  $(\text{Ne}) 3s$ .

Pirmasis nuokrypis nuo idealiosios užpildymo tvarkos – tai kalio ( $_{19}\text{K}$ ), kuris eina po argono ( $_{18}\text{Ar}$ ), elektronų konfigūracija. Pagal idealiąją užpildymo tvarką šio elemento elektronų konfigūracija turėtų būti  $(\text{Ar}) 3d$ . Tačiau kalio atomo mažiausią energiją atitinka konfigūracija  $(\text{Ar}) 4s$ . T. y. energiškai naudingiau, kai prisijungęs elektronas yra ne būsenos 3d, o būsenos 4s. Taip yra dėl ekranavimo reiškinių (žr. [4.5 skirsnis](#)). Todėl kalis priklauso **IV** periodui.

3d būsenų užpildymas tampa energiškai naudingiausias pradėdant nuo skandžio  $_{21}\text{Sc}$ . Dešimt IV periodo elementų nuo Sc iki cinko ( $_{30}\text{Zn}$ ) gaunami užpildant visas dešimt 3d būsenų. Šie elementai vadinami **pereinamaisiais elementais**.

Šešių IV periodo elementų, kurie yra po cinko (nuo galio  $_{31}\text{Ga}$  iki kriptono  $_{36}\text{Kr}$ ), elektronų konfigūracijos gaunamos užpildant 4p posluoksnį. Kriptono visos 4s ir 4p būsenos yra užpildytos, todėl kriptonas yra inertinės dujos. Kriptonas užbaigia ketvirtąjį elementų sistemos periodą, kurį sudaro  $8 + 10 = 18$  elementų.

**V** periode atomų elektronų sluoksniai užpildomi ta pačia tvarka kaip IV periode. Rubidžio ( $_{37}\text{Rb}$ ), kuris eina po kriptono, elektronų konfigūracija yra  $(\text{Kr}) 5s$ , nes tokia konfigūracija yra energiškai naudingesnė už  $(\text{Kr}) 4d$  arba  $(\text{Kr}) 4f$ . 4d būsenų užpildymas tampa energiškai naudingiausias pradėdant nuo itrio ( $_{39}\text{Y}$ ). Dešimt pereinamųjų elementų nuo itrio iki kadmio ( $_{48}\text{Cd}$ ) gaunami užpildant 4d būsenas. Šešių elementų, kurie eina po kadmio (nuo indžio  $_{49}\text{In}$  iki ksenono  $_{54}\text{Xe}$ ), elektronų konfigūracijos gaunamos užpildant 5p posluoksnį. Ksenonas (inertinės dujos) užbaigia penktąjį elementų sistemos periodą, kurį sudaro 18 elementų.

**VI** periode, užpildžius dvi 6s būsenas (cezis  $_{55}\text{Cs}$  ir baris  $_{56}\text{Ba}$ ), trečiasis elementas (lantanai  $_{57}\text{La}$ ) gaunamas užpildžius 5d (o ne 6p) būseną, o kiti 14 elementų (nuo cerio  $_{58}\text{Ce}$  iki lutecio  $_{71}\text{Lu}$ ) gaunami užpildant visas 4f būsenas. Tie 14 elementų kartu su lantanu vadinami **lantanoidais**. Po lantanoidų esantys devyni elementai (nuo hafnio  $_{72}\text{Hf}$  iki gyvsidabrio  $_{80}\text{Hg}$ )

yra pereinamieji elementai, nes jų elektronų konfigūracijos gaunamos užpildant 5d būsenas. Kaip ir V periode, šeši elementai, kurie yra po pereinamųjų elementų (nuo talio  $_{81}\text{Tl}$  iki radono  $_{86}\text{Rn}$ ), gaunami užpildant paskutinio (šeštojo) sluoksnio p posluksnį.

Panaši situacija pasikartoja VII periode po aktinio ( $_{89}\text{Ac}$ ), kai užpildomos 5f būsenos. Penkiolika elementų nuo aktinio iki lourensio ( $_{103}\text{Lr}$ ) vadinami *aktinoidais*, o devyni elementai nuo 104 iki 112 numerių yra pereinamieji elementai (jie susidaro užpildant 6d posluksnį).

#### 4.7.1 lentelė. Periodinė elementų sistema ir atomų elektronų konfigūracijos

Z	Elementas	A	Pagrindinės būsenos konfigūracija	Pagr. Joniz. būs. en.(eV)
1	H Vandenilis	1,00794	1s	$^2\text{S}_{1/2}$ 13,5984
2	He Helis	4,002602	1s <sup>2</sup>	$^1\text{S}_0$ 24,5874
3	Li Litis	6,941	1s <sup>2</sup> 2s	$^2\text{S}_{1/2}$ 5,3917
4	Be Berilis	9,012182	1s <sup>2</sup> 2s <sup>2</sup>	$^1\text{S}_0$ 9,3227
5	B Boras	10,811	1s <sup>2</sup> 2s <sup>2</sup> 2p	$^2\text{P}_{1/2}$ 8,2980
6	C Anglis	12,0107	1s <sup>2</sup> 2s <sup>2</sup> 2p <sup>2</sup>	$^3\text{P}_0$ 11,2603
7	N Azotas	14,00674	1s <sup>2</sup> 2s <sup>2</sup> 2p <sup>3</sup>	$^4\text{S}_{3/2}$ 14,5341
8	O Deguonis	15,9994	1s <sup>2</sup> 2s <sup>2</sup> 2p <sup>4</sup>	$^3\text{P}_2$ 13,6181
9	F Fluoras	18,99840	1s <sup>2</sup> 2s <sup>2</sup> 2p <sup>5</sup>	$^2\text{P}_{3/2}$ 17,4228
10	Ne Neonas	20,1797	1s <sup>2</sup> 2s <sup>2</sup> 2p <sup>6</sup>	$^1\text{S}_0$ 21,5645
11	Na Natris	22,98977	(Ne) 3s	$^2\text{S}_{1/2}$ 5,1391
12	Mg Magnis	24,3050	(Ne) 3s <sup>2</sup>	$^1\text{S}_0$ 7,6462
13	Al Aliuminis	26,98154	(Ne) 3s <sup>2</sup> 3p	$^2\text{P}_{1/2}$ 5,9858
14	Si Silicis	28,0855	(Ne) 3s <sup>2</sup> 3p <sup>2</sup>	$^3\text{P}_0$ 8,1517
15	P Fosforas	30,97376	(Ne) 3s <sup>2</sup> 3p <sup>3</sup>	$^4\text{S}_{3/2}$ 10,4867
16	S Siera	32,066	(Ne) 3s <sup>2</sup> 3p <sup>4</sup>	$^3\text{P}_2$ 10,3600
17	Cl Chloras	35,453	(Ne) 3s <sup>2</sup> 3p <sup>5</sup>	$^2\text{P}_{3/2}$ 12,9676
18	Ar Argonas	39,948	(Ne) 3s <sup>2</sup> 3p <sup>6</sup>	$^1\text{S}_0$ 15,7596
19	K Kalis	39,0983	(Ar) 4s	$^2\text{S}_{1/2}$ 4,3407
20	Ca Kalcis	40,078	(Ar) 4s <sup>2</sup>	$^1\text{S}_0$ 6,1132
21	Sc Skandis	44,95591	(Ar) 3d 4s <sup>2</sup>	$^2\text{D}_{3/2}$ 6,5615
22	Ti Titanas	47,867	(Ar) 3d <sup>2</sup> 4s <sup>2</sup>	$^3\text{F}_2$ 6,8281
23	V Vanadis	50,9415	(Ar) 3d <sup>3</sup> 4s <sup>2</sup>	$^4\text{F}_{3/2}$ 6,7462
24	Cr Chromas	51,9961	(Ar) 3d <sup>5</sup> 4s	$^7\text{S}_3$ 6,7665
25	Mn Manganas	54,93805	(Ar) 3d <sup>5</sup> 4s <sup>2</sup>	$^6\text{S}_{5/2}$ 7,4340
26	Fe Geležis	55,8457	(Ar) 3d <sup>6</sup> 4s <sup>2</sup>	$^5\text{D}_4$ 7,9024
27	Co Kobaltas	58,93320	(Ar) 3d <sup>7</sup> 4s <sup>2</sup>	$^4\text{F}_{9/2}$ 7,8810
28	Ni Nikelis	58,6934	(Ar) 3d <sup>8</sup> 4s <sup>2</sup>	$^3\text{F}_4$ 7,6398
29	Cu Varis	63,546	(Ar) 3d <sup>10</sup> 4s	$^2\text{S}_{1/2}$ 7,7264
30	Zn Cinkas	65,409	(Ar) 3d <sup>10</sup> 4s <sup>2</sup>	$^1\text{S}_0$ 9,3942
31	Ga Galis	69,723	(Ar) 3d <sup>10</sup> 4s <sup>2</sup> 4p	$^2\text{P}_{1/2}$ 5,9993
32	Ge Germanis	72,64	(Ar) 3d <sup>10</sup> 4s <sup>2</sup> 4p <sup>2</sup>	$^3\text{P}_0$ 7,8994
33	As Arsenas	74,92160	(Ar) 3d <sup>10</sup> 4s <sup>2</sup> 4p <sup>3</sup>	$^4\text{S}_{3/2}$ 9,7886
34	Se Selenas	78,96	(Ar) 3d <sup>10</sup> 4s <sup>2</sup> 4p <sup>4</sup>	$^3\text{P}_2$ 9,7524
35	Br Bromas	79,904	(Ar) 3d <sup>10</sup> 4s <sup>2</sup> 4p <sup>5</sup>	$^2\text{P}_{3/2}$ 11,8138
36	Kr Kriptonas	83,798	(Ar) 3d <sup>10</sup> 4s <sup>2</sup> 4p <sup>6</sup>	$^1\text{S}_0$ 13,9996

} Pereinamieji elementai

Z	Elementas	A	Pagrindinės būsenos konfigūracija		Pagr. Joniz. būs. 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
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
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

Pereinamieji elementai

Lantanoidai

Z	Elementas	A	Pagrindinės būsenos konfigūracija	Pagr. būs.	Joniz. en.(eV)	
72	Hf Hafnis	178,49	(Xe) 4f <sup>14</sup> 5d <sup>2</sup> 6s <sup>2</sup>	<sup>3</sup> F <sub>2</sub>	6,8251	Pereinamieji elementai
73	Ta Tantalas	180,9479	(Xe) 4f <sup>14</sup> 5d <sup>3</sup> 6s <sup>2</sup>	<sup>4</sup> F <sub>3/2</sub>	7,5496	
74	W Volframas	183,84	(Xe) 4f <sup>14</sup> 5d <sup>4</sup> 6s <sup>2</sup>	<sup>5</sup> D <sub>0</sub>	7,8640	
75	Re Renis	186,207	(Xe) 4f <sup>14</sup> 5d <sup>5</sup> 6s <sup>2</sup>	<sup>6</sup> S <sub>5/2</sub>	7,8335	
76	Os Osmis	190,23	(Xe) 4f <sup>14</sup> 5d <sup>6</sup> 6s <sup>2</sup>	<sup>5</sup> D <sub>4</sub>	8,4382	
77	Ir Iridis	192,217	(Xe) 4f <sup>14</sup> 5d <sup>7</sup> 6s <sup>2</sup>	<sup>4</sup> F <sub>9/2</sub>	8,9670	
78	Pt Platina	195,078	(Xe) 4f <sup>14</sup> 5d <sup>9</sup> 6s	<sup>3</sup> D <sub>3</sub>	8,9588	
79	Au Auksas	196,9666	(Xe) 4f <sup>14</sup> 5d <sup>10</sup> 6s	<sup>2</sup> S <sub>1/2</sub>	9,2255	
80	Hg Gyvsidabris	200,59	(Xe) 4f <sup>14</sup> 5d <sup>10</sup> 6s <sup>2</sup>	<sup>1</sup> S <sub>0</sub>	10,4375	
81	Tl Talis	204,3833	(Xe) 4f <sup>14</sup> 5d <sup>10</sup> 6s <sup>2</sup> 6p	<sup>2</sup> P <sub>1/2</sub>	6,1082	Akinoidai
82	Pb Švinas	207,2	(Xe) 4f <sup>14</sup> 5d <sup>10</sup> 6s <sup>2</sup> 6p <sup>2</sup>	<sup>3</sup> P <sub>0</sub>	7,4167	
83	Bi Bismutas	208,9804	(Xe) 4f <sup>14</sup> 5d <sup>10</sup> 6s <sup>2</sup> 6p <sup>3</sup>	<sup>4</sup> S <sub>3/2</sub>	7,2855	
84	Po Polonis	(209)	(Xe) 4f <sup>14</sup> 5d <sup>10</sup> 6s <sup>2</sup> 6p <sup>4</sup>	<sup>3</sup> P <sub>2</sub>	8,414	
85	At Astatinas	(210)	(Xe) 4f <sup>14</sup> 5d <sup>10</sup> 6s <sup>2</sup> 6p <sup>5</sup>	<sup>2</sup> P <sub>3/2</sub>		
86	Rn Radonas	(222)	(Xe) 4f <sup>14</sup> 5d <sup>10</sup> 6s <sup>2</sup> 6p <sup>6</sup>	<sup>1</sup> S <sub>0</sub>	10,7485	
87	Fr Francis	(223)	(Rn) 7s	<sup>2</sup> S <sub>1/2</sub>	4,0727	Akinoidai
88	Ra Radis	(226)	(Rn) 7s <sup>2</sup>	<sup>1</sup> S <sub>0</sub>	5,2784	
89	Ac Aktinis	(227)	(Rn) 6d 7s <sup>2</sup>	<sup>2</sup> D <sub>3/2</sub>	5,17	
90	Th Toris	232,0381	(Rn) 6d <sup>2</sup> 7s <sup>2</sup>	<sup>3</sup> F <sub>2</sub>	6,3067	
91	Pa Protaktinis	231,0359	(Rn) 5f <sup>2</sup> 6d 7s <sup>2</sup>	<sup>4</sup> K <sub>11/2</sub>	5,89	
92	U Uranas	238,0289	(Rn) 5f <sup>3</sup> 6d 7s <sup>2</sup>	<sup>5</sup> L <sub>6</sub>	6,1941	
93	Np Neptūnis	(237)	(Rn) 5f <sup>4</sup> 6d 7s <sup>2</sup>	<sup>6</sup> L <sub>11/2</sub>	6,2657	
94	Pu Plutonis	(244)	(Rn) 5f <sup>6</sup> 7s <sup>2</sup>	<sup>7</sup> F <sub>0</sub>	6,0260	
95	Am Americis	(243)	(Rn) 5f <sup>7</sup> 7s <sup>2</sup>	<sup>8</sup> S <sub>7/2</sub>	5,9738	
96	Cm Kiuris	(247)	(Rn) 5f <sup>7</sup> 6d 7s <sup>2</sup>	<sup>9</sup> D <sub>2</sub>	5,9914	
97	Bk Berklis	(247)	(Rn) 5f <sup>9</sup> 7s <sup>2</sup>	<sup>6</sup> H <sub>15/2</sub>	6,1979	
98	Cf Kalifornis	(251)	(Rn) 5f <sup>10</sup> 7s <sup>2</sup>	<sup>5</sup> I <sub>8</sub>	6,2817	
99	Es Einšteinis	(252)	(Rn) 5f <sup>11</sup> 7s <sup>2</sup>	<sup>4</sup> I <sub>15/2</sub>	6,42	
100	Fm Fermis	(257)	(Rn) 5f <sup>12</sup> 7s <sup>2</sup>	<sup>3</sup> H <sub>6</sub>	6,50	
101	Md Mendelevis	(258)	(Rn) 5f <sup>13</sup> 7s <sup>2</sup>	<sup>2</sup> F <sub>7/2</sub>	6,58	
102	No Nobelis	(259)	(Rn) 5f <sup>14</sup> 7s <sup>2</sup>	<sup>1</sup> S <sub>0</sub>	6,65	
103	Lr Lourensis	(262)	(Rn) 5f <sup>14</sup> 7s <sup>2</sup> 7p ?	<sup>2</sup> P <sub>1/2</sub> ?	4,9 ?	
104	Rf Rezerfordis	(261)	(Rn) 5f <sup>14</sup> 6d <sup>2</sup> 7s <sup>2</sup> ?	<sup>3</sup> F <sub>2</sub> ?	6,0 ?	

Pastabos:

1. Išsiskiria 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).
3. Užrašymas, pvz., „(Ar) 3d<sup>6</sup> 4s<sup>2</sup>“ reiškia elektronų konfigūraciją, kuri gaunama papildžius argono konfigūraciją šešiais 3d elektronais ir dviem 4s elektronais.

## 5. Atomų kvantiniai šuoliai

### 5.1. Savaiminiai ir priverstiniai šuoliai

Kvantinės sistemos perėjimas į kitą energijos lygmenį vadinamas *kvantiniu šuoliu*. Atomų elektromagnetinės spinduliuotės intensyvumą lemia spinduliuojamųjų kvantinių šuolių tikimybės („*spinduliuojamasis šuolis*“ – tai šuolis, kurio metu atsiranda arba išnyksta fotonas). Jos gaunamos iš elementariosios kvantinės spinduliavimo teorijos, kurią 1916 m. sukūrė Einšteinas.

Tarkime, kad atomas gali būti dviejuose lygmenyse:  $E_n$  ir  $E_m$  (be to,  $E_m < E_n$ ). Yra galimi trijų rūšių spinduliuojamieji kvantiniai šuoliai:

**1. Savaiminiai šuoliai**, kurių metu atomas pereina iš lygmens  $E_n$  į lygmenį  $E_m < E_n$  be išorinio poveikio (savaime) ir emituoja fotoną, kurio energija

$$\hbar\omega_{nm} = E_n - E_m. \quad (5.1.1)$$

Toks spinduliavimas vadinamas *savaiminiu spinduliavimu*. Tokio šuolio tikimybė per nykstantąjį laiką  $dt$  yra lygi

$$dP_{nm}^{(s)} = A_{nm} dt, \quad (5.1.2)$$

čia  $A_{nm}$  yra atomo savaiminio šuolio tarp lygmenų  $E_n$  ir  $E_m$  tikimybė per laiko vienetą.

**2. Atomas gali pereiti iš lygmens  $E_m$  į lygmenį  $E_n > E_m$  sugėręs energijos  $\hbar\omega_{nm}$  fotoną. Tokie šuoliai vadinami *priverstiniais šuoliais*. Priverstinio šuolio „ $m \rightarrow n$ “ tikimybė per laiką  $dt$  yra lygi**

$$dP_{mn}^{(p)} = B_{mn} W_{\omega}(\omega_{nm}) dt, \quad (5.1.3)$$

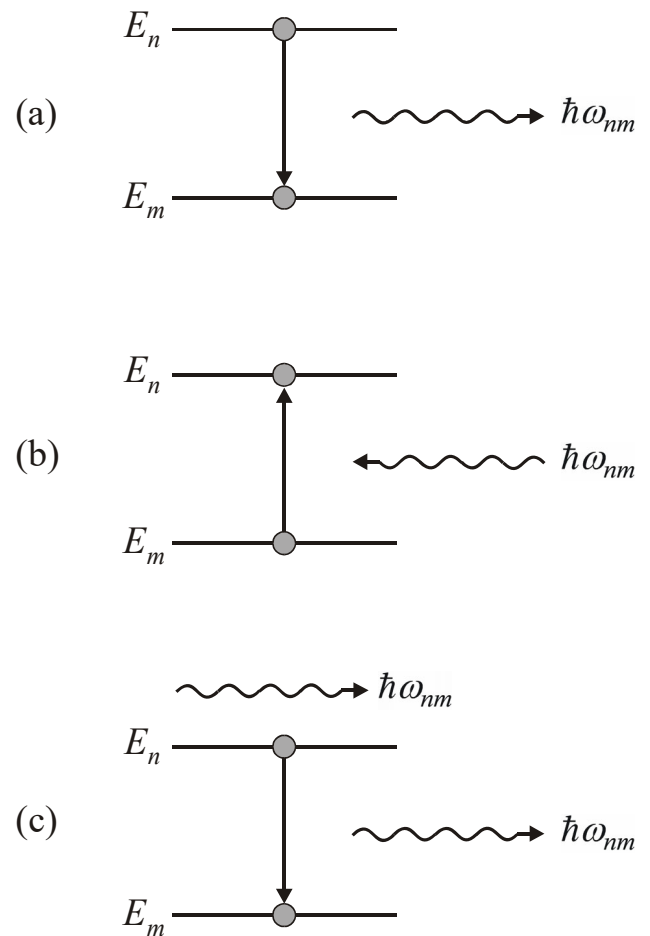
čia  $W_{\omega}(\omega_{nm})$  yra spinduliuotės energijos spektrinis tankis, kuris atitinka dažnį  $\omega_{nm}$ , o  $B_{mn}$  yra priverstinio šuolio „ $m \rightarrow n$ “ tikimybė per laiko vienetą energijos spektrinio tankio vienetui.

**3. Dėl atomo sąveikos su išorine spinduliuote gali įvykti ir priešingos krypties priverstinis šuolis: atomas gali pereiti iš aukštesniojo lygmens  $E_n$  į žemesnįjį lygmenį  $E_m$  išspinduliuodamas energijos  $\hbar\omega_{nm}$  fotoną. Toks spinduliavimas vadinamas *priverstiniu spinduliavimu*. Tokio priverstinio šuolio tikimybė per laiką  $dt$  yra lygi**

$$dP_{nm}^{(p)} = B_{nm} W_{\omega}(\omega_{nm}) dt, \quad (5.1.4)$$

čia  $B_{nm}$  yra priverstinio šuolio iš lygmens  $E_n$  į lygmenį  $E_m$  tikimybė per laiko vienetą energijos spektrinio tankio vienetui. Fotonas, kuris emituojamas priverstinio šuolio  $n \rightarrow m$  metu, yra visais atžvilgiais tapatus tą šuolį stimuliuojamam fotonui (tas pats dažnis, tokia pati poliarizacija, toks pats kampinis intensyvumo pasiskirstymas). Taigi, po priverstinio šuolio „ $n \rightarrow m$ “ vietoj vieno fotono turime du visiškai vienodus fotonus.

Dydžiai  $A_{nm}$ ,  $B_{nm}$  ir  $B_{mn}$ , kurie įeina į (5.1.2–4) formules, yra vadinami *Einšteino koeficientais*.



**5.1.1 pav.** Trijų rūšių spinduliuojamieji šuoliai: (a) savaiminiai; (b) priverstiniai šuoliai sugėriant fotoną; (c) priverstiniai šuoliai emituojant fotoną

## 5.2. Spinduliuotės linijos forma. Natūralusis linijos plotis

Energija  $E$  yra gaunama išsprendus nuostoviąją Šrėdingerio lygtį (4.1.4), kuri yra tiksliai tik *nuostoviųjų* („stabiliųjų“, „stacionariųjų“) būsenų atveju (nuostovioji būsena – tai tokia būsena, kuri nesikeičia, kol nėra išorinių poveikių). Kadangi sužadintosios būsenos yra nenuostovios, tai jų energija  $E$  nėra tiksliai apibrėžta. Energijos lygmens neapibrėžtumas  $\Gamma$  („lygmens plotis“) yra susijęs su vidutine sistemos buvimo tame lygmenyje trukme  $\tau$ :

$$\Gamma\tau \geq \frac{\hbar}{2}. \quad (5.2.1)$$

Tai yra energijos ir laiko neapibrėžtumo sąryšis (koordinatės ir impulso neapibrėžtumo sąryšis – tai Heizenbergo nelygybė (1.9.6)).

Energijos vertė  $E_n$ , kuri gaunama išsprendus nuostoviąją Šrėdingerio lygtį, – tai *tikimiausia* atomo energijos vertė, kai atomas yra  $n$ -tos kvantinės būsenos. Tikimybė aptikti atomą energijos intervale nuo  $E$  iki  $E + dE$ :

$$P(E)dE = \frac{2\Gamma_n}{\pi} \cdot \frac{1}{4(E - E_n)^2 + \Gamma_n^2} dE, \quad (5.2.2)$$

čia

$$\Gamma_n = \hbar / \tau_n. \quad (5.2.3)$$

(5.2.2) yra *Lorenco skirstinys* (kitaip – *Breito ir Vignerio skirstinys*). Išspinduliuotų fotonų energijos pasiskirstymo plotis pusės maksimumo aukštyje vadinamas *natūraliuoju linijos pločiu*. Jeigu kvantinis šuolis vyksta tarp dviejų nestabiliųjų būsenų, kurių pločiai yra  $\Gamma_1$  ir  $\Gamma_2$ , tada natūralusis linijos plotis lygus abiejų būsenų pločių sumai:

$$\Gamma = \Gamma_1 + \Gamma_2. \quad (5.2.4)$$

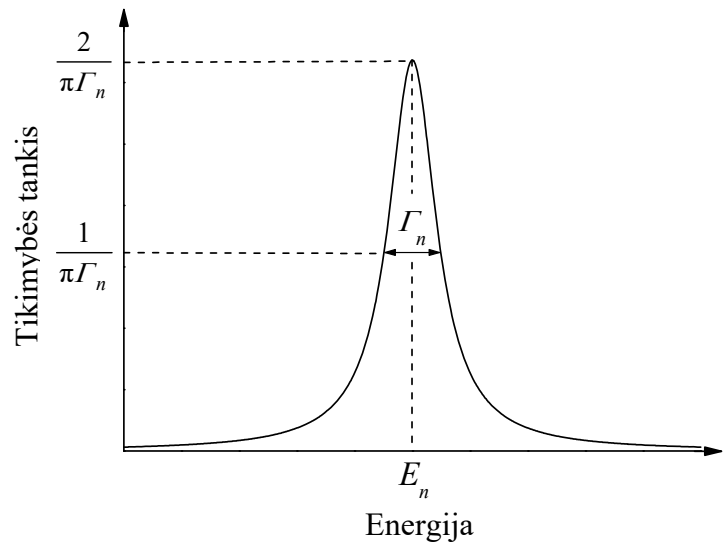
„Išjungus“ išorinius poveikius, dėl kurių atomai yra sužadinami, atomų, esančių sužadintame energijos lygmenyje, skaičius  $N$  eksponentiškai mažėja laike:

$$N(t) = N_0 \exp(-t / \tau), \quad (5.2.5)$$

čia  $N_0$  yra sužadintų atomų skaičius pradinio laiko momentu  $t = 0$ , o  $\tau$  yra vidutinė sužadintojo energijos lygmens gyvavimo trukmė. Kadangi atomų sistemos spinduliuotės intensyvumas  $I$  yra proporcingas savaiminių šuolių iš aukštesniojo energijos lygmens į žemesnįjį spartai (skaičiui per laiko vienetą), o ši sparta yra proporcinga sužadintų atomų skaičiui  $N$ , tai sužadintų atomų sistemos spinduliuotės intensyvumas taip pat mažėja laike pagal (5.2.5) dėsnį:

$$I(t) = I_0 \exp(-t / \tau), \quad (5.2.6)$$

čia  $I_0$  yra spinduliuotės intensyvumas pradinio laiko momentu  $t = 0$ .



5.2.1 pav. Energijos pasiskirstymas dėl  $n$ -tosios kvantinės būsenos nenuostovumo

### 5.3. Atomo kvantinių šuolių atrankos taisyklės

Kvantiniai šuoliai, kurių tikimybė yra palyginti didelė, vadinami „leidžiamaisiais šuoliais“, o kiti šuoliai vadinami „draudžiamaisiais šuoliais“. Taisyklės, kurios nusako, kurie šuoliai yra draudžiamieji, o kurie – leidžiamieji, vadinamos *kvantinių šuolių atrankos taisyklėmis*.

Vieno elektrono kvantinių šuolių atrankos taisyklės:

Leidžiamieji šuoliai yra tie, kurių metu elektrono kvantinių skaičių  $j$  ir  $l$  pokyčiai lygūs

$$\Delta j = 0, \pm 1, \quad (5.3.1a)$$

$$\Delta l = \pm 1. \quad (5.3.1b)$$

Daugiaelektronio atomo, kuriame egzistuoja  $LS$  ryšys, kvantinių šuolių atrankos taisyklės:

Leidžiamųjų šuolių metu kvantinių skaičių  $J$ ,  $S$ ,  $L$  ir  $m_J$  pokyčiai lygūs

$$\Delta J = 0, \pm 1 \quad (\text{tačiau šuoliai tarp lygmenų su } J = 0 \text{ yra draudžiamieji}), \quad (5.3.2a)$$

$$\Delta S = 0, \quad (5.3.2b)$$

$$\Delta L = 0, \pm 1 \quad (\text{tačiau šuoliai tarp lygmenų su } L = 0 \text{ yra draudžiamieji}), \quad (5.3.2c)$$

$$\Delta m_J = 0, \pm 1 \quad (\text{tačiau šuoliai tarp lygmenų su } m_J = 0 \text{ ir vienodais } J \text{ yra draudžiamieji}) \quad (5.3.2d)$$

ir pasikeičia būsenos lyginumas:

$$\Pi = -\Pi', \quad (5.3.2e)$$

čia  $\Pi$  ir  $\Pi'$  yra pradinės ir galutinės būsenų lyginumai: lyginę būseną atitinka  $+1$ , o nelyginę  $-1$ .

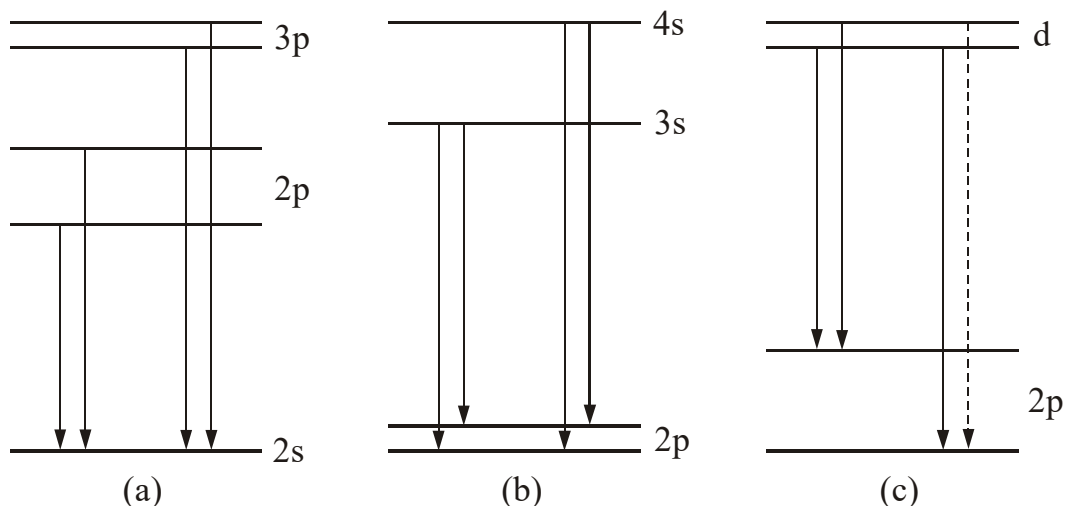
Kadangi nepriklausomų elektronų artinyje atomo banginė funkcija išsireiškia vienelektroninių funkcijų sandaugų tiesiniu dariniu (žr. (4.1.9b) ir (4.3.3)), o vienelektronės banginės funkcijos lyginumas sutampa su šalutinio kvantinio skaičiaus  $l$  lyginumu (žr. (3.2.7)), tai *atomo būsenos lyginumas sutampa su visų elektronų  $l$  verčių sumos lyginumu*. Todėl, kad galiotų (5.3.2e), *visų elektronų kvantinio skaičiaus  $l$  pokyčių suma turi būti nelyginis skaičius*.

Atomo, kuriame egzistuoja  $LS$  ryšys, tikimiausi kvantiniai šuoliai yra tie šuoliai, kurių metu kinta tik *vieno* elektrono būseną. Todėl vieno elektrono ir atomo kvantinių šuolių atrankos taisyklės yra panašios.

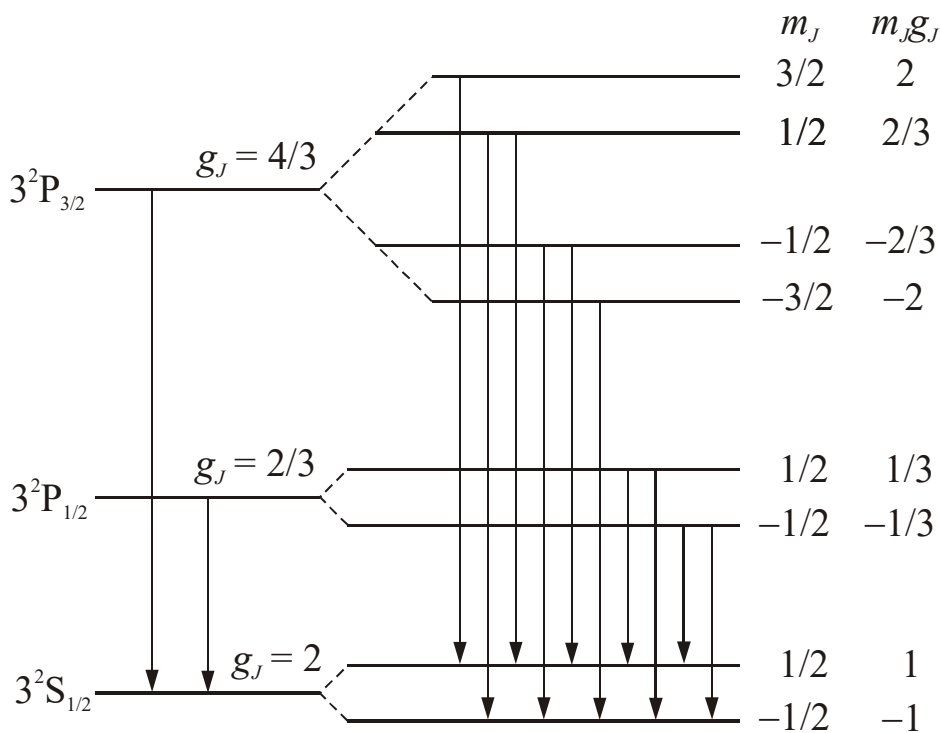
Draudžiamųjų spinduliuojamųjų šuolių tikimybė per laiko vienetą nėra tiksliai lygi nuliui, tačiau ji būna daug mažesnė už leidžiamųjų spinduliuojamųjų šuolių tikimybę per laiko vienetą. Jeigu nėra galimų leidžiamųjų savaiminių spinduliuojamųjų šuolių, atomas būna sužadintas daug ilgiau negu įprasta, todėl tokios sužadintosios būsenos vadinamos *metastabiliosiomis būsenomis*.

### 5.4. Atomų spektro linijų smulkioji sandara

Energijos lygmenų skilimas dėl sukiniio ir orbitos sąveikos (žr. [3.6 skirsnis](#) ir [3.6.1 pav.](#)) arba dėl atomo magnetinio momento sąveikos su išoriniu magnetiniu lauku (žr. [4.2 skirsnis](#) ir [4.2.2 pav.](#)) lemia spektro linijų skilimą į dvi arba daugiau artimų linijų. Šis skilimas vadinamas *spektro linijų multiplietiškumu*, o spektro linija, kuri sudaryta iš kelių artimų linijų, apibendrintai vadinama multiplietu (dubletas, tripletas ir t. t.). Spektro linijų multiplietinė sandara, kuri atsiranda dėl sukiniio ir orbitos sąveikos ir dėl išorinių veiksnių, yra vadinama spektro *smulkiaja sandara*. Linijų skaičių ir intensyvumą galima paaiškinti naudojantis atrankos taisyklėmis ([5.3.2a–e](#)).



**5.4.1 pav.** Ličio atomo valentinio elektrono kvantiniai šuoliai atsižvelgiant į smulkiają sandarą: (a) šuoliai iš p lygmenų į 2s lygmenį, (b) šuoliai iš s lygmenų į 2p lygmenis, (c) šuoliai iš d lygmenų į 2p lygmenis (šuolis, kuris pavaizduotas brūkšnine linija, yra draudžiamasis)



**5.4.2 pav.** Natrio atomo energijos lygmenų skilimas magnetiniame lauke ir atitinkamas spektro linijų skilimas (Zemano efektas)



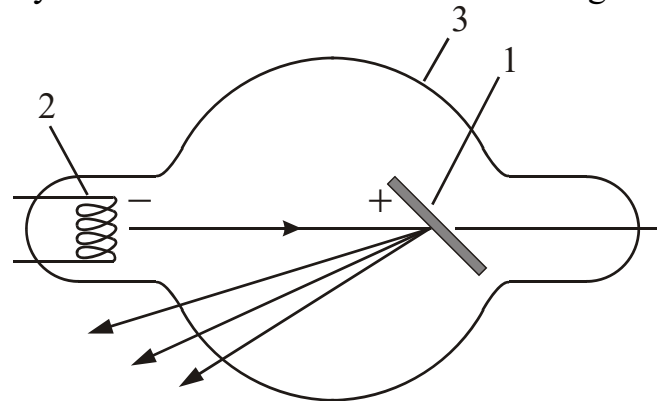
## 6. Rentgeno spinduliuotė

### 6.1. Rentgeno spinduliuotės šaltiniai

**Rentgeno spinduliuotė** – tai elektromagnetinė spinduliuotė, kurios bangos ilgis yra nuo  $5 \cdot 10^{-12}$  m iki  $10^{-8}$  m. Atitinkama fotonų energija yra nuo 100 eV iki 200 keV. Rentgeno spinduliuotė pavadinta vokiečių mokslininko Vilhelmo Rentgeno (*Röntgen*), kuris ją atrado 1895 m., garbei.

Rentgeno spinduliuotės šaltinio vaidmenį dažniausiai atlieka specialūs (rentgeno) vamzdžiai. Aukšta įtampa tarp katodo ir anodo pagreitina elektronus, kurie emituojami iš katodo jį kaitinant (termoelektroninė emisija).

Elektronams smogiant į anodą, yra sužadinama dviejų rūšių rentgeno spinduliuotė: stabdomoji ir būdingoji.



6.1.1 pav. Rentgeno vamzdžio schema. 1 – anodas, 2 – katodas, 3 – kolba

### 6.2. Stabdomoji rentgeno spinduliuotė

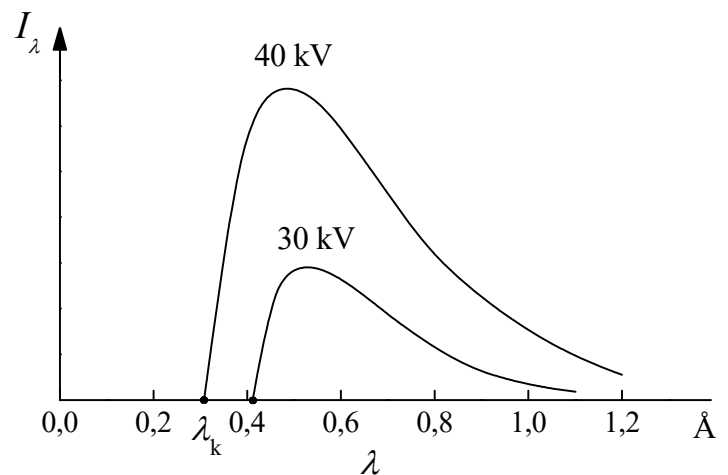
Elektronas anodo medžiagoje yra stabdomas dėl Kulono sąveikos su anodo medžiagos elektringosiomis dalelėmis – atomų branduoliais ir elektronais. Ši sąveika mažina elektrono judėjimo greitį, t. y. suteikia jam pagreitį. Kaip teigia klasikinė elektrodinamika, elektringajai dalelei judant su pagreičiu, yra spinduliuojamos elektromagnetinės bangos, kurių energijos srautas (energijos kiekis per laiko vienetą) yra proporcingas dalelės pagreičio kvadratui. Kai krintančiųjų elektronų energija yra  $10^3$  –  $10^5$  eV eilės, didžioji šios spinduliuotės energijos dalis atitinka rentgeno spindulių diapazoną. Tai yra **stabdomoji rentgeno spinduliuotė**.

Stabdomosios spinduliuotės spektras yra ištisinis. Iš energijos tvermės dėsnio išplaukia, kad kiekvieno stabdomosios fotono energija yra lygi elektrono energijos sumažėjimui atitinkamo susidūrimo su medžiagos atomu metu. Todėl didžiausia fotono energija yra lygi pilnutinei elektrono energijai, t. y.  $eU$  (čia  $U$  yra greitinimo įtampa):

$$h\nu_{\max} = eU, \quad (6.2.1)$$

o mažiausias bangos ilgis („trumpabangis kraštas“) lygus

$$\lambda_k = \frac{c}{\nu_{\max}} = \frac{ch}{eU}. \quad (6.2.2)$$

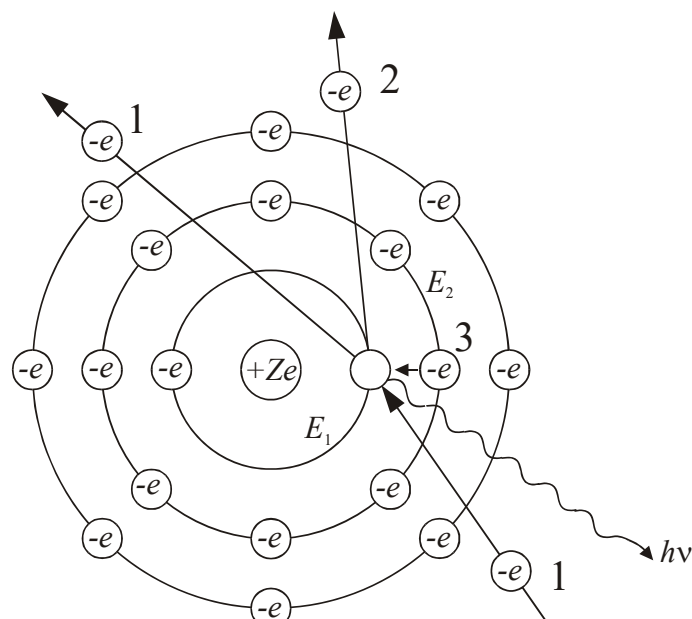


6.2.1 pav. Stabdomosios rentgeno spinduliuotės spektras

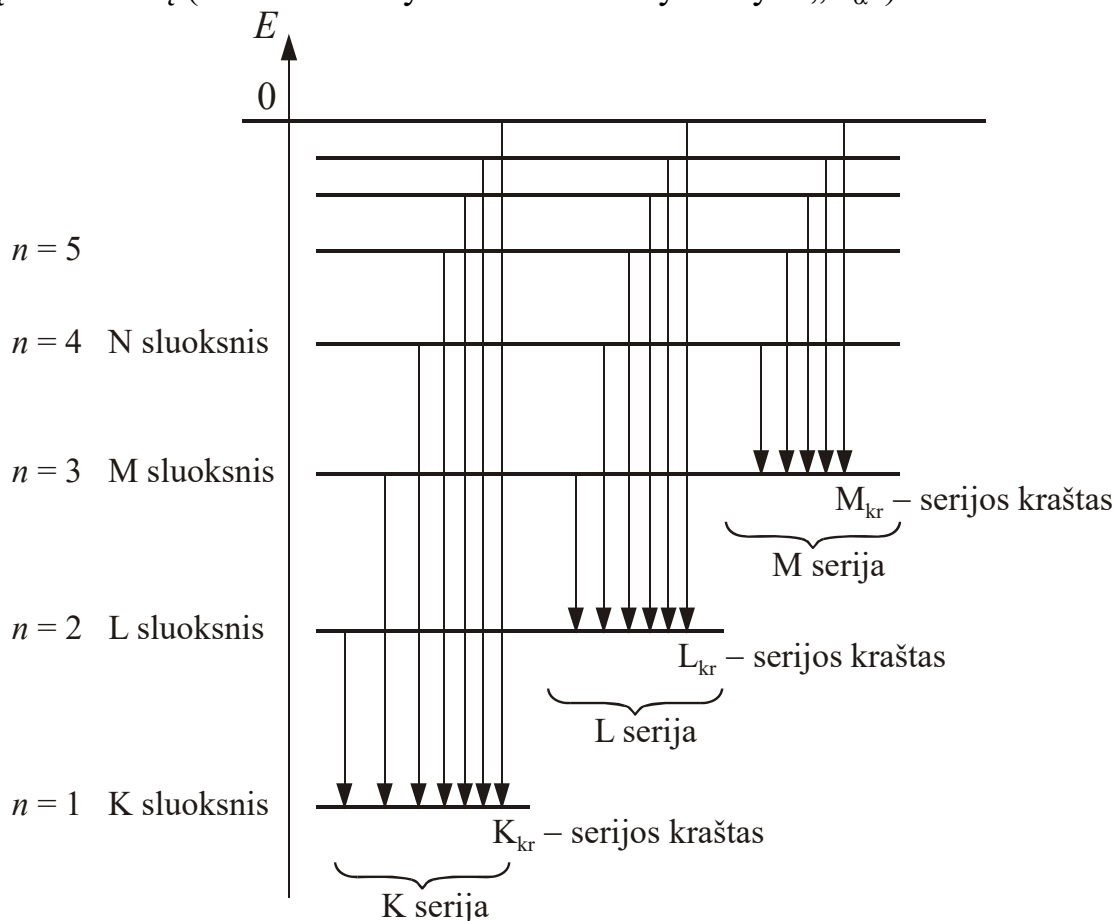
### 6.3. Būdingoji rentgeno spinduliuotė

Pirminis elektronas (6.3.1 pav. – „1“), jeigu jo energija yra pakankamai didelė, gali savo energiją perduoti vienam iš vidinių medžiagos atomo elektronų (2) ir jį iš atomo išlaisvinti. Dėl to atomas yra jonizuojamas: viename iš vidinių elektronų sluoksnių atsiranda „laisva“ būseną. Į ją pereina vienas iš tolesnių sluoksnių elektronų (3). Pereinant elektronui 3 iš energijos  $E_2$  būsenos į mažesnės energijos  $E_1$  būseną, emituojamas fotonas, kurio energija  $h\nu = E_2 - E_1$ .

Būdingosios rentgeno spinduliuotės spektro linijos žymimos taip, kad būtų aiškūs pradinis ir galutinis elektronų sluoksniai. Naudojant Zybano (*Siegbahn*) sistemą, linija žymima raide K, L, M ir t. t., kuri nusako galutinį sluoksnį (kuriame buvo vakansija), ir indeksu  $\alpha$ ,  $\beta$  ir t. t., kuris nusako pradinį sluoksnį (iš kurio persoko elektronas), pvz., „ $L_\alpha$ “. Vartojant IUPAC sistemą („*International Union of Pure and Applied Chemistry*“), galutinis ir pradinis elektronų sluoksniai nurodomi raidėmis K, L, M ir t. t., kurios atskirtos brūkšneliu. Pvz., žymuo „K-L“ reiškia šuolį iš L sluoksnio į K sluoksnį (atitinkamas Zybano sistemos žymuo yra „ $K_\alpha$ “).



6.3.1 pav. Būdingosios rentgeno spinduliuotės atsiradimo schema



6.3.2 pav. Būdingosios rentgeno spinduliuotės serijų atsiradimo schema

Vykstant elektrono šuoliui iš aukštesnio elektronų sluoksnio į gilesniajame sluoksnyje esančią vakansiją, išsiskyrusi energija gali būti ne vien išspinduliuota fotono pavidalu, bet ir gali būti tiesiogiai perduota vienam iš išorinių (valentinių) elektronų, kuris dėl to išlekia iš atomo (taigi, atomas netenka dar vieno elektrono). Šis reiškinys vadinamas **Ožė reiškiniu** (angl. *Auger effect*), o tie elektronai vadinami **Ožė elektronais** (tą reiškinį atradusio prancūzų fiziko Pjero Ožė garbei). Ožė elektrono energija lygi pradinio šuolio metu išsiskyrusios energijos ir išlaisvintojo elektrono ryšio energijos skirtumui. Ožė reiškiniu ir būdingosios rentgeno spinduliuotės fotono atsiradimo tikimybių santykis didėja mažėjant atominiam numeriui  $Z$ , nes tada mažėja elektronų ryšio energija. Kai  $Z = 30$  (cinkas), Ožė reiškiniu tikimybė yra apytiksliai lygi būdingosios rentgeno spinduliuotės tikimybei. Kai  $Z = 53$  (jodas), būdingosios rentgeno spinduliuotės tikimybė yra 7,3 karto didesnė negu Ožė reiškiniu tikimybė.

#### 6.4. Mozlio dėsnis

Apytiksliai apskaičiuojant būdingosios rentgeno spinduliuotės spektro linijų bangos ilgį, galima naudotis formule, kuri panaši į vandeniliškojo atomo spinduliuotės bangos ilgių išraišką (1.7.27), tačiau dėl elektronų tarpusavio sąveikos joje atsiranda papildomas dėmuo – **ekranavimo konstanta**  $\sigma$ :

$$\frac{1}{\lambda} = (Z - \sigma)^2 R \left( \frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right) \quad (n_2 > n_1). \quad (6.4.1)$$

T. y. sluoksnio Nr.  $n_2$  elektroną, kuris užima sluoksnyje Nr.  $n_1$  esančią vakansiją, veikia „efektinis“ krūvis  $Z - \sigma$ . Ekranavimo konstanta  $\sigma$  – tai arčiau branduolio esančių elektronų skaičius. Pvz., jeigu elektronas pereina iš L į K sluoksnį, tada pagal Boro modelį  $\sigma = 1$  (nes didžiausias elektronų skaičius K sluoksnyje yra 2, taigi esant vakansijai lieka vienas). Tačiau, atsižvelgus į tai, kad bet kurio sluoksnio elektronai su tam tikra tikimybe gali būti bet koku atstumu nuo branduolio (žr. 3.3.2 pav.), ekranavimo konstanta gali žymiai skirtis nuo tos, kurią numato Boro modelis.

Iš (6.4.1) matyti, kad kvadratinė šaknis iš atvirkštinio bangos ilgio yra tiesiog proporcinga atominiam numeriui  $Z$ . Šį sąryšį 1913 m. atrado anglų fizikas Henris Mozlis (*Moseley*). Todėl šis dėsnis vadinamas **Mozlio dėsniu**. Mozlio dėsnį galima užrašyti taip:

$$Z - \sigma = A \frac{1}{\sqrt{\lambda}}, \quad (6.4.2)$$

čia

$$A = \frac{1}{\sqrt{R \left( \frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right)}}. \quad (6.4.3)$$

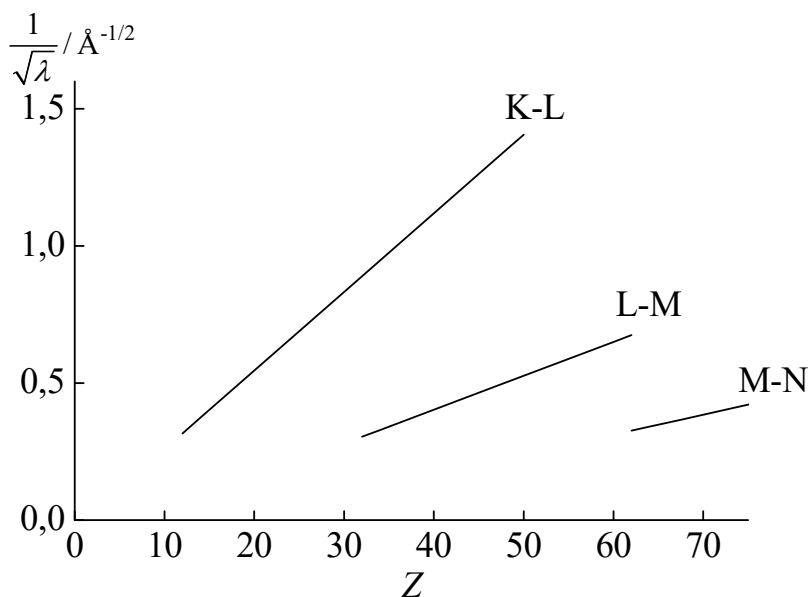
K-L linijos  $A = 1/\sqrt{R[(1/1^2) - (1/2^2)]}$ ,

K-M linijos  $A = 1/\sqrt{R[(1/1^2) - (1/3^2)]}$ ,

L-M linijos  $A = 1/\sqrt{R[(1/2^2) - (1/3^2)]}$  ir

t. t.

Mozlio dėsnį (6.4.2) iliustruoja 6.4.1 pav.



6.4.1 pav. Mozlio diagramos

## 7. Atomo branduolio sandara ir branduolio modeliai

### 7.1. Branduolio sandara. Izotopai

Branduolio krūvio skaičius  $Z$  lygus elemento atominiam numeriui. Nors visų atomų su vienodais numeriais  $Z$  cheminės savybės yra vienodos, tačiau jų branduolių fizikinės savybės gali būti labai įvairios. Taip yra todėl, kad atomo branduolys yra sudarytas iš dviejų rūšių dalelių – protonų ir neutronų. **Protonas** – tai vandenilio atomo branduolys (jo krūvio skaičius lygus 1). Protono masė yra lygi  $m_p = 1,672 \cdot 10^{-27}$  kg; ji yra maždaug 1840 kartų didesnė už elektrono masę ( $m_e = 9,11 \cdot 10^{-31}$  kg). **Neutronas** – tai neturinti elektros krūvio branduolio dalelė. Neutrono masė yra šiek tiek didesnė už protono masę:  $m_n = 1,675 \cdot 10^{-27}$  kg. Protonas ir neutronas vadinami **nukleonais**.

Taigi, norint visapusiškai apibūdinti branduolio sudėtį, reikia nurodyti du skaičius – krūvio skaičių  $Z$  (kuris lygus protonų skaičiui branduolyje) ir pilnutinį nukleonų skaičių  $A$  (kuris lygus protonų ir neutronų skaičiaus branduolyje sumai). Nukleonų skaičius branduolyje ( $A$ ) vadinamas branduolio **masės skaičiumi**.

Vieno elemento atomai gali turėti skirtingą masės skaičių  $A$ , t. y. skirtingą neutronų skaičių branduolyje. Cheminio elemento atomų rūšys, kurios skiriasi tik masės skaičiumi  $A$ , yra vadinamos to elemento **izotopais**. Dauguma cheminių elementų turi kelis izotopus. **Nuklidas** – tai cheminio elemento atomų rūšis su apibrėžtais masės ir krūvio skaičiais ir su apibrėžta energija. Nuklidai žymimi nurodant krūvio ir masės skaičius šalia cheminio elemento žymens; masės skaičius nurodomas viršuje, o krūvio skaičius apačioje. Labiausiai paplitęs vandenilio izotopas yra  ${}^1_1\text{H}$  ( $Z = 1$  ir  $A = 1$ , t. y. neutronų skaičius lygus nuliui). Žinomi dar trys vandenilio izotopai:  ${}^2_1\text{H}$  (arba  ${}^2_1\text{D}$ ) – sunkusis vandenilis, arba deuteris,  ${}^3_1\text{H}$  (arba  ${}^3_1\text{T}$ ) – ultrasunkusis vandenilis, arba tritis, ir  ${}^4_1\text{H}$ . Dviejų chloro izotopų pavyzdžiai yra  ${}^{35}_{17}\text{Cl}$  ( $Z = 17$ ,  $A = 35$ ) ir  ${}^{37}_{17}\text{Cl}$  ( $Z = 17$ ,  $A = 37$ ). Nuklidų žymenys dažnai trumpinami nenurodant krūvio skaičiaus (pvz.,  ${}^{35}\text{Cl}$ ,  ${}^{37}\text{Cl}$ ). Nors masės skaičius rašomas prieš cheminio elemento simbolį, tačiau kalbant cheminis elementas turi būti įvardytas prieš masės skaičių (pvz., sakoma „chloras trisdešimt penki“). Be to, masės skaičių galima rašyti ir po cheminio elemento simbolio, atskiriant juos brūkšneliu, pvz., „Cl-35“.

Iš to, kas anksčiau pasakyta, išplaukia, kad vieno elemento skirtingų izotopų atomų branduoliai skiriasi neutronų skaičiumi  $N = A - Z$ . Minėtųjų chloro izotopų  $N = 35 - 17 = 18$  ir  $N = 37 - 17 = 20$ .

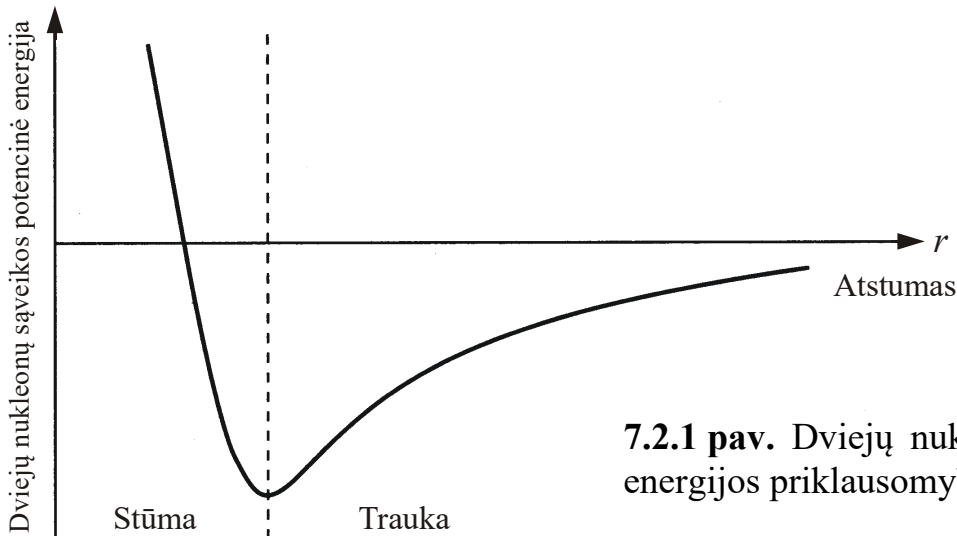
Nuklidai, kurie turi vienodą sudėtį (t. y. vienodą masės skaičių  $A$  ir vienodą krūvio skaičių  $Z$ ), tačiau skirtingą energiją, ir kurių energija nekinta ilgiau negu  $10^{-11}$  s, yra vadinami **branduoliniais izomeriais**. Pvz., pagrindinės būsenos nuklidas  ${}^{137}\text{Ba}$  (baris-137) ir antrosios sužadintosios būsenos nuklidas  ${}^{137\text{m}}\text{Ba}$  yra izomerai. Raidė „m“ nuklido  ${}^{137\text{m}}\text{Ba}$  žymenyje reiškia metastabiliąją būseną. Branduoliniai izomerai yra **skirtingi** nuklidai.

Nuklidai, kurių masės skaičius  $A$  vienodas, tačiau krūvio skaičius  $Z$  skirtingas, vadinami **izobarais**. Pvz., cezio izotopas  ${}^{137}_{55}\text{Cs}$  ir bario izotopas  ${}^{137}_{56}\text{Ba}$  yra izobarai. Nuklidai, kurių neutronų skaičius vienodas, vadinami **izotonais**. Pvz., chloro izotopas  ${}^{37}_{17}\text{Cl}$  ir kalio izotopas  ${}^{39}_{19}\text{K}$  yra izotonai.

## 7.2. Branduolinės jėgos savybės

1. Branduolinė trauka tarp nukleonų yra *artisieklė*, t. y. ji pasireiškia tik tada, kai atstumas tarp nukleonų yra labai mažas ( $10^{-15}$  m eilės).
2. Branduolinė sąveikos jėga turi ir stūmos komponentę, kuri pradeda vyrauti, kai atstumas tarp nukleonų sumažėja iki  $\approx 0,5 \cdot 10^{-15}$  m. Todėl egzistuoja tam tikras pusiausviris atstumas tarp gretimų nukleonų. Su tuo susijusi branduolinės jėgos *soties* savybė: kiekvieno nukleono (išskyrus branduolio paviršiuje esančius nukleonus) sąveikos su jį supančiais nukleonais energija yra apytiksliai vienoda visuose branduoliuose. Vienas iš šios soties požymių – apytikslis branduolio medžiagos tankio pastovumas. Branduolio spindulys:

$$R = R_0 A^{1/3}, \quad R_0 \approx 1,2 \cdot 10^{-15} \text{ m.} \quad (7.2.1)$$



7.2.1 pav. Dviejų nukleonų sąveikos potencialinės energijos priklausomybė nuo atstumo tarp jų

3. Branduolinei jėgai yra būdinga *krūvinė simetrija*: dviejų vienodų nukleonų branduolinės sąveikos jėga nepriklauso nuo to, ar jie yra protonai, ar neutronai. Neutrono ir protono branduolinės sąveikos jėga tik apytiksliai lygi dviejų vienodų nukleonų sąveikos jėgai.
4. Branduolinė jėga priklauso nuo kampo tarp nukleonų sukinių. Sukinys – tai vidinis dalelės (nukleono) impulso momentas (žr. [3.4 skirsnis](#)). Nukleono sukinio kvantinis skaičius ( $s$ ) lygus  $1/2$ . Eksperimentiškai nustatyta, kad neutrono ir protono sukinių kryptys surištojoje neutrono ir protono sistemoje – deuterio branduolyje (deutone) – yra vienodos, t. y. jų suminio sukinio kvantinis skaičius  $S$  lygus  $1$  (žr. [\(3.4.6\)](#) ir [\(4.2.5\)](#)). Tai rodo, kad dviejų vienodos sukinio krypties nukleonų vidutinė traukos jėga yra stipresnė už dviejų priešingų sukinių krypties nukleonų traukos jėgą. Iš [Paulio draudimo principo](#) išplaukia, kad vienodų nukleonų kvantinės būsenos turi būti skirtingos. Tai reiškia, kad jeigu jų erdvinio judėjimo būsenos yra vienodos, tada sukinių kryptys turi būti priešingos. Dviejų vienodos erdvinio judėjimo būsenos *skirtingų* nukleonų (neutrono ir protono) sukinių kryptys gali būti ir vienodos, ir priešingos, nes Paulio draudimo principas galioja tik tada, kai dalelės yra vienodos. Todėl, atsižvelgus į pirmiau minėtą dviejų nukleonų traukos jėgos priklausomybę nuo kampo tarp jų sukinių, gaunama, kad *vidutinė* neutrono ir protono traukos jėga branduolyje yra didesnė negu vidutinė dviejų neutronų arba dviejų protonų traukos jėga. Šios dvi jėgos skiriasi maždaug du kartus.
5. Dviejų nukleonų branduolinės sąveikos jėga priklauso nuo kampo tarp abiejų nukleonų pilnutinio sukinio vektoriaus  $L_S$  ir jų reliatyviojo judėjimo impulso momento vektoriaus  $L$ . Jėgos komponentė, kuri nusako šią priklausomybę, yra vadinama sukinio ir orbitos sąveikos jėga. Ji yra proporcinga skaliarinei sandaugai  $L \cdot L_S$  (plg. su [\(3.6.3\)](#)).

### 7.3. Branduolio masė ir ryšio energija

Apie nukleonų tarpusavio ryšio stiprumą galima spręsti iš branduolio *ryšio energijos*  $E_R$ . Tai yra darbas, kurį reikia atlikti norint suskaldyti branduolį į atskirus nukleonus. Kitaip sakant,  $E_R$  yra priešinga pilnutinei mechaninei branduolio nukleonų energijai (kuri yra neigiama). Todėl branduolio masė  $M$  yra keliomis dešimtosiomis procento mažesnė už jo nukleonų masių sumą:

$$M = Zm_p + (A - Z)m_n - \Delta m, \quad (7.3.1)$$

čia  $m_p$  yra protono masė,  $m_n$  yra neutrono masė, o  $\Delta m$  yra branduolio *masės defektas*.

$$E_R = \Delta mc^2 = [Zm_p + (A - Z)m_n - M]c^2. \quad (7.3.2)$$

Dažniausiai vartojamas ryšio energijos matavimo vienetas – megaelektronvoltas:

$$1 \text{ MeV} = 10^6 \text{ eV} = 10^6 \cdot 1,6022 \cdot 10^{-19} \text{ J} = 1,6022 \cdot 10^{-13} \text{ J}.$$

Atominis masės vienetas:

$$1 \text{ a.m.v.} = 1,660539 \cdot 10^{-27} \text{ kg}. \quad (7.3.3)$$

$$m_p = 1,007276 \text{ a.m.v.}, \quad m_n = 1,008665 \text{ a.m.v.}, \quad m_e = 5,48580 \cdot 10^{-4} \text{ a.m.v.} \quad (7.3.4)$$

Kai masės išreikštos a.m.v., o energija išreikšta MeV, tada

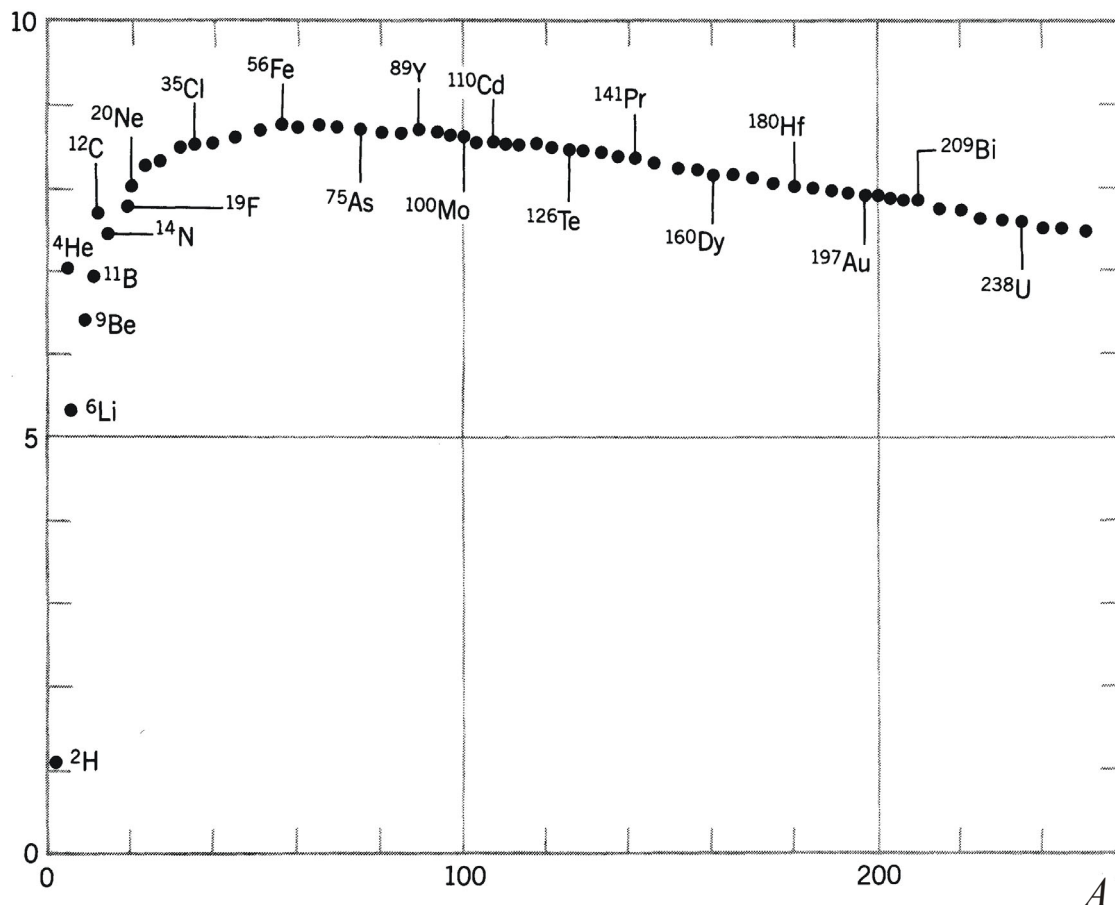
$$E_R = 931,1 \cdot [Zm_p + (A - Z)m_n - M] = 931,1 \cdot [Zm_H + (A - Z)m_n - M_a], \quad (7.3.5)$$

čia  $m_H$  yra  $^1\text{H}$  atomo masė, o  $M_a$  yra neutralaus atomo, į kurio sudėtį įeina  $M$  masės branduolys, masė ( $Z$  elektronų masės susiprastina).

*Savitoji ryšio energija* – tai ryšio energija vienam nukleonui:

$$\delta E_R = \frac{E_R}{A} = \frac{931,1}{A} \cdot [Zm_p + (A - Z)m_n - M]. \quad (7.3.6)$$

$\delta E_R / \text{MeV}$



7.3.1 pav. Savitosios ryšio energijos priklausomybė nuo branduolio masės skaičiaus

Atsižvelgus į visus veiksnius, nuo kurių priklauso branduolio ryšio energija  $E_R$ , gaunama pusempirė branduolio ryšio energijos formulė, kurią 1935 m. suformulavo vokiečių fizikas Karlas fon Veiczekeris (*Weizsäcker*):

$$E_R = \alpha A - \beta A^{2/3} - \gamma Z(Z-1)A^{-1/3} - \eta(N-Z)^2 A^{-1} + C, \quad (7.3.7)$$

čia  $N$  yra neutronų skaičius ( $N = A - Z$ ). Ši formulė vadinama **Veiczekerio formulė**. Koeficientų vertės buvo nustatytos empiriškai:

$$\alpha = 15,5 \text{ MeV}, \quad \beta = 16,8 \text{ MeV}, \quad \gamma = 0,72 \text{ MeV}, \quad \eta = 23 \text{ MeV}, \quad (7.3.8)$$

$$C = \begin{cases} +\Delta & \text{jeigu } Z \text{ ir } N \text{ lyginiai,} \\ 0 & \text{jeigu } A \text{ nelyginis,} \\ -\Delta & \text{jeigu } Z \text{ ir } N \text{ nelyginiai;} \end{cases} \quad \Delta \approx \frac{34}{A^{3/4}} \text{ MeV.}$$

- 1) Pirmasis dėmuo nusako ryšio energijos dalį, kurią lemia įsotinti ryšiai tarp nukleonų, t. y. vidinių branduolio nukleonų branduolinės traukos jėgos.
- 2) Antrasis dėmuo atspindi paviršinius efektus, t. y. neišsotintus paviršinių nukleonų ryšius. Šis ryšio energijos sumažėjimas yra proporcingas branduolio paviršiaus plotui, t. y.  $A^{2/3}$ .
- 3) Trečiasis dėmuo yra priešingas protonų Kulono stūmos potencinei energijai. Kadangi elektrostatinė sąveika yra toliasiokė, tai kiekvienas protonas sąveikauja su visais kitais to paties branduolio protonais. Todėl atitinkamas ryšio energijos sumažėjimas yra proporcingas protonų porų skaičiui  $Z(Z-1)/2$ . Vidutinis atstumas tarp dviejų protonų yra proporcingas branduolio spinduliui, t. y.  $A^{1/3}$ . Kadangi dviejų protonų Kulono sąveikos energija atvirkščiai proporcinga atstumui tarp jų, tai trečiasis Veiczekerio formulės (7.3.7) dėmuo proporcingas  $A^{-1/3}$ .
- 4) Ketvirtasis dėmuo – **simetrijos dėmuo**. Jis atspindi du veiksnius:

(a) dviejų skirtingų nukleonų vidutinė traukos jėga yra stipresnė negu dviejų vienodų,

(b) didėjant  $|Z - N|$  ir esant pastoviam  $A$ , didėja pilnutinė nukleonų kinetinė energija.

Pirmojo veiksnio (a) įtakos apskaičiavimas: neutronų santykinė dalis yra  $f_n = N/A$ , o protonų  $f_p = Z/A$ . Dviejų nukleonų sąveikos (potencinė) energija yra  $u_{nn}$ ,  $u_{pp}$  ir  $u_{np}$ . Kadangi  $u_{nn} = u_{pp} = u$ , o  $u_{np} \approx 2u$ , tai pilnutinė nukleonų sąveikos energija yra

$$N(uf_n + 2uf_p) + Z(2uf_n + uf_p) = \frac{u}{A}(N^2 + 4NZ + Z^2) = \frac{u}{2} \left[ 3A - \frac{(N-Z)^2}{A} \right].$$

Pirmasis šio reiškinių dėmuo yra proporcingas  $A$ , todėl įeina į pirmąjį Veiczekerio formulės (7.3.7) dėmenį. Antrasis dėmuo įeina į ketvirtąjį tos formulės dėmenį. Antrasis minėtasis veiksnys (b) taip pat pasireiškia dėmeniu, kuris proporcingas  $(N-Z)^2/A$ .

- 5) Penktasis dėmuo – **porų dėmuo** – atspindi vienodų nukleonų tendenciją jungtis į poras, kuriose abiejų nukleonų orbitinio judėjimo būsenos yra vienodos, o sukinių yra priešingi.

Kai branduolys, kurio rimties masė  $M$ , savaime pasidalija į du branduolius, kurių rimties masės  $M_1$  ir  $M_2$ , išsiskiria energijos kiekis, kuris lygus pirminio branduolio rimties energijos ir antrinių branduolių suminės rimties energijos skirtumui:

$$Q = Mc^2 - (M_1 + M_2)c^2 = (M - M_1 - M_2)c^2, \quad (7.3.9)$$

čia  $c$  yra šviesos greitis. Savaime gali vykti tik procesai, kurių metu  $Q > 0$ . Todėl savaime besidalijantys branduoliai yra sunkieji, t. y. jie atitinka masės skaičiaus  $A$  verčių intervalą, kuriame savitoji ryšio energija (ir savitasis masės defektas) mažėja didėjant  $A$  (žr. 7.3.1 pav.).

#### 7.4. Lašelinis ir sluoksninis branduolio modeliai

*Lašelinis branduolio modelis* grindžiamas branduolio ir įelektrinto skysčio lašo panašumais:

- nukleonus sąveikos jėga yra artiesikė kaip ir skysčio molekulių sąveikos jėga,
- branduolio medžiaga kaip ir skystis yra praktiškai nespūdi.

Remiantis lašelinio branduolio modeliu, galima paprastai paaiškinti pirmuosius tris Veiczekerio formulės dėmenis. Pvz., II dėmuo yra branduolio paviršiaus laisvoji energija, kuri atsiranda dėl paviršiaus įtempio (*paviršiaus įtempis* – tai darbas, kurį reikia atlikti padidinant paviršiaus plotą vienetu, o *paviršiaus laisvoji energija* – tai paviršiaus įtempio ir paviršiaus ploto sandauga).

Lašelinis modelis taikomas branduolinių reakcijų teorijoje bei aiškinant sunkiųjų branduolių dalijimosi procesą. Įsiskverbus nukleonui į branduolį, dėl branduolio medžiagos mažo spūdumo prasideda nukleonų kolektyvinis judėjimas, kurio metu branduolys deformuojasi nekintant jo tūriui. Protonų Kulono stūmos jėga stengiasi padidinti deformaciją, o paviršiaus įtempio jėga stengiasi grąžinti branduoliui rutulio formą. Kuo didesnis branduolio krūvio skaičius  $Z$ , tuo didesnis Kulono jėgų vaidmuo ir tuo lengviau branduoliui dalytis.

*Sluoksninis branduolio modelis* remiasi prielaida, kad tikrąsias jėgas, kurios veikia tarp nukleonų, galima pakeisti viena centrine jėga, kuri yra bendra visiems nukleonams. T. y. taikoma tokia pati aproksimacija, kaip ir atomo elektronų atveju (žr. [4.6 skirsnis](#)). Pagal šį modelį branduolio nukleonų orbitinio judėjimo kvantinės būsenos („orbitos“) sudaro sluoksnius taip pat kaip ir atomo elektronų orbitos. Kiekvieną sluoksnį atitinka grupė artimų energijos lygmenų. Skiriami *protonų sluoksniai* ir *neutronų sluoksniai*. Gretimų sluoksnių energijų skirtumas yra  $\sim 10$  MeV. Atstumai tarp branduolio energijos lygmenų yra 3–6 eilėmis didesni už atstumus tarp atomo energijos lygmenų. Taip yra dėl to, kad branduolio matmenys yra daug mažesni už atomo matmenis (žr. [\(2.2.19\)](#)).

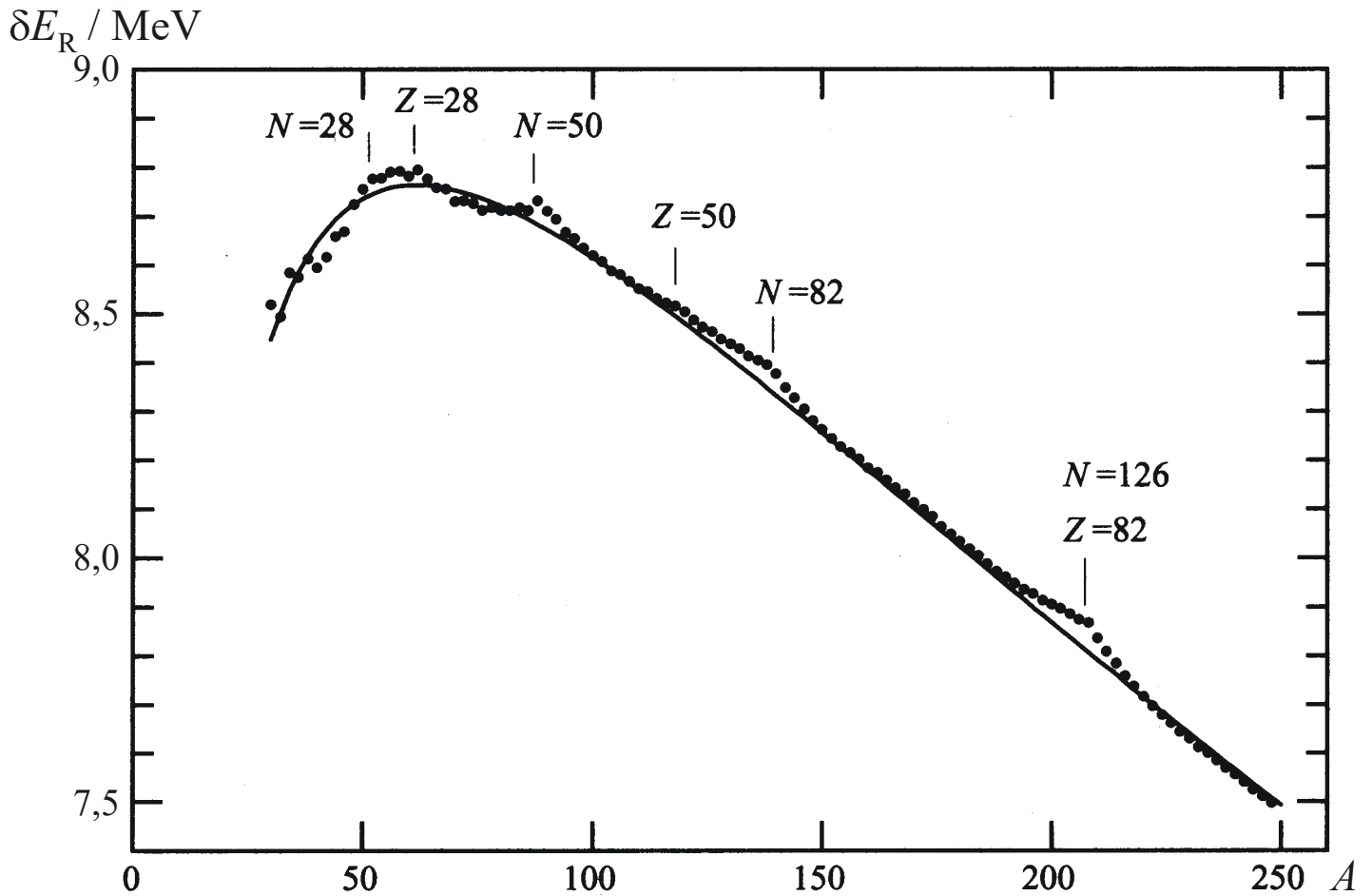
Kadangi, taikant sluoksninį branduolio modelį, yra teigiama, kad visi nukleonai juda stacionariame centriniame jėgų lauke, tai nukleonų erdvinio judėjimo būsenos klasifikuojamos naudojant centriniame jėgų lauke judančios dalelės kvantinius skaičius (kaip ir elektrono kvantinės būsenos atome). Tie trys kvantiniai skaičiai buvo apibrėžti [3.1 skirsnyje](#). Dėl tos pačios priežasties branduolio nukleono *kampinės* banginės funkcijos yra tokio paties pavidalo, kaip atomo elektrono: tai yra sferinės harmonikos (žr. [3.2 skirsnis](#)). Tačiau nukleono ir elektrono *radialiųjų* banginių funkcijų skirtumas yra labai didelis (dėl labai skirtingų potencinių energijų  $U(r)$  abiem atvejais).



### 7.5. Magiškieji skaičiai. Nukleono sukinio ir orbitos sąveika

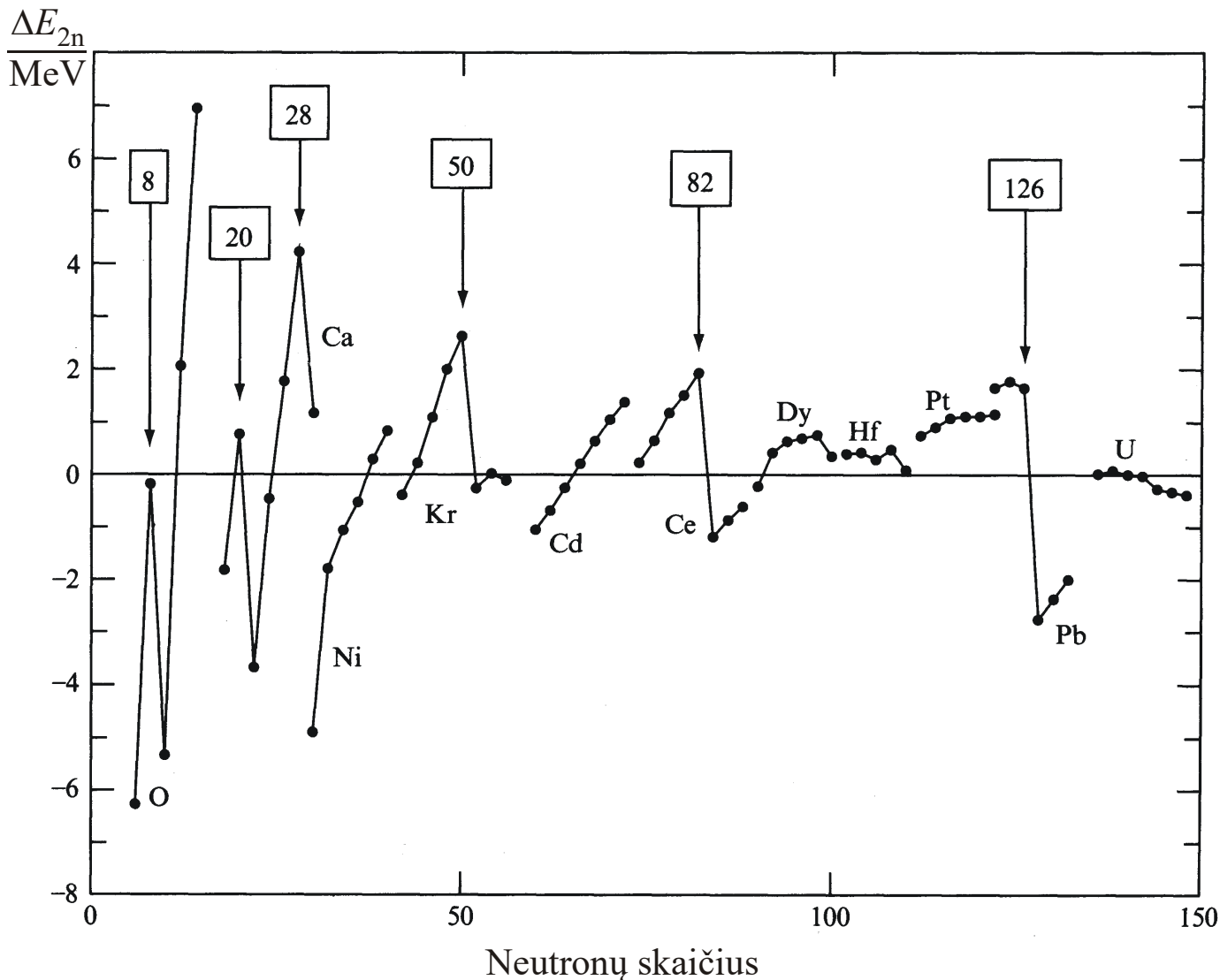
Empiriniai požymiai, kurie rodo, kad branduoliai su tam tikru protonų arba neutronų skaičiumi yra ypač stabilūs:

- 1) Elementai, kurių  $Z = 20$  arba  $50$  (atitinkamai Ca ir Sn), turi daugiau stabilių izotopų;
- 2) Savitosios ryšio energijos priklausomybėje nuo  $A$  yra matomi nuokrypiai nuo glodžios linijos:



**7.5.1 pav.** Savitosios ryšio energijos priklausomybė nuo branduolio masės skaičiaus  $A$ , kai  $A > 30$ . Glodžioji kreivė apskaičiuota pagal Veiczekerio formulę, o taškai atitinka matavimų duomenis.

3) Darbo, kurį reikia atlikti, kad pašalinti neutroną arba protoną iš branduolio, priklausomybėje nuo  $N$  arba  $Z$  yra matomi trūkiai ties tam tikromis  $N$  arba  $Z$  vertėmis:



**7.5.2 pav.** Skirtumas tarp išmatuotos dviejų neutronų atskyrimo energijos ir tos, kurią numato Veiczekerio formulė. Kiekviena linija atitinka grupę branduolių su vienodu protonų skaičiumi

**Branduolio magiškasis skaičius** – tai tokia neutronų arba protonų skaičiaus vertė, kuri atitinka pilnai užpildytus neutronų arba protonų sluoksnius. Branduolio magiškieji skaičiai yra

$$2, 8, 20, 28, 50, 82, 126. \quad (7.5.1)$$

Analogija: atomo „magiškieji skaičiai“ – tai atomo elektronų skaičiaus vertės, kurios atitinka pilnai užpildytus atomo elektronų sluoksnius:

$$2, 10, 18, 36, 54, 86. \quad (7.5.2)$$

Atitinkami cheminiai elementai yra chemiškai inertiški (inertinės dujos) ir ypač stabilūs.

Branduoliai, kuriuose magiškieji yra ir protonų, ir neutronų skaičiai, vadinami **dukart magiškaisiais**:

$${}^4_2\text{He}, {}^{16}_8\text{O}, {}^{40}_{20}\text{Ca}, {}^{48}_{20}\text{Ca}, {}^{208}_{82}\text{Pb}. \quad (7.5.3)$$

Sferinės begalinio gylio potencialo duobės modelis teisingai numato tik tris mažiausius magiškuosius skaičius (2, 8, 20).

Tikslesnė nukleono potencinės energijos išraiška:

$$U(r) \approx -\frac{U_0}{1 + \exp\left(\frac{r-R}{a}\right)} + U_{\text{kul}}(r). \quad (7.5.4)$$

Tačiau ir toks modelis teisingai numato tik tris mažiausius magiškuosius skaičius.

Branduolio modelis, kuris teisingai numato visus magiškuosius skaičius ir kai kurias kitas pagrindines branduolio savybes, gaunamas, pridėjus prie  $U(r)$  *sukinio ir orbitos sąveikos* energiją

$$E_{\text{so}} = U_{\text{so}} \mathbf{L}_s \cdot \mathbf{L}. \quad (7.5.5)$$

Čia  $U_{\text{so}} < 0$ . Ši išraiška yra analogiška elektrono sukinio ir orbitos sąveikos energijos išraiškai (3.6.3). Tačiau nukleono sukinio ir orbitos sąveika nėra elektromagnetinės prigimties, o daugiklis  $U_{\text{so}}$  yra keliomis eilėmis didesnis negu elektrono atveju. Be to, šiuo atveju daugiklis  $U_{\text{so}}$  dažniausiai yra neigiamas, t. y. jo ženklas dažniausiai yra priešingas analogiško daugiklio (3.6.4), nusakančio elektrono sukinio ir orbitos sąveiką, ženklui.

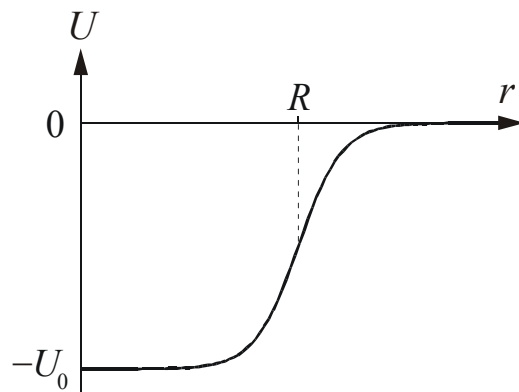
Kadangi pagal sluoksninį branduolio modelį nukleono būseną branduolyje nusakoma tais pačiais kvantiniais skaičiais, kaip elektrono būseną atome, tai nukleono lygmenų skilimas dėl sukinio ir orbitos sąveikos išreiškiamas taip pat, kaip elektrono lygmenų skilimas (žr. (3.6.9)):

$$E_{\text{so}} = U_{\text{so}} \frac{\hbar^2}{2} \cdot \begin{cases} l, & \text{kai } j = l + \frac{1}{2}; \\ -l - 1, & \text{kai } j = l - \frac{1}{2}. \end{cases} \quad (7.5.6)$$

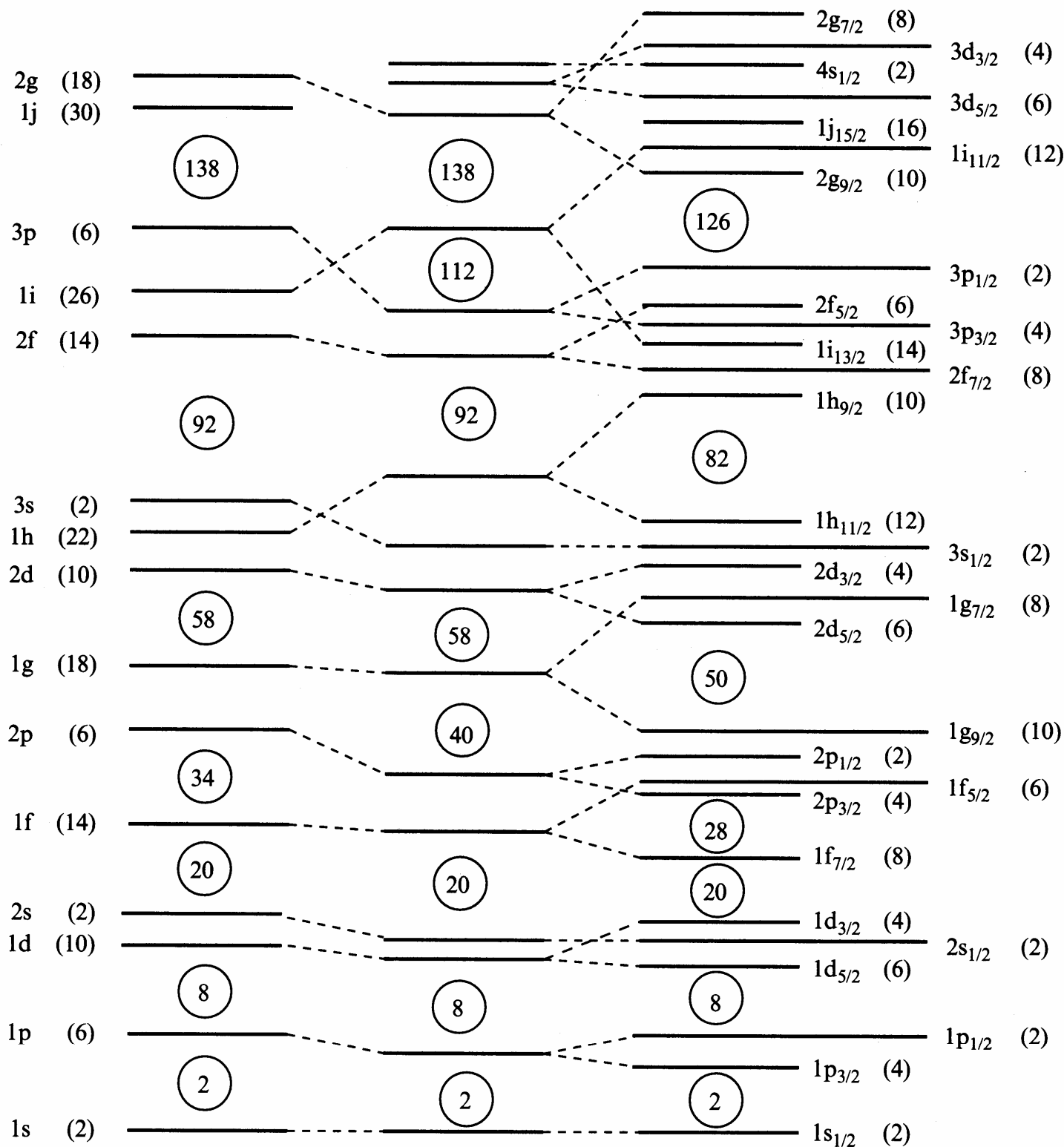
Intervalas tarp dviejų polygmenų, į kuriuos skyla kiekvienas lygmuo su nenuliniu  $l$  dėl sukinio ir orbitos sąveikos:

$$\Delta E_{\text{so}} = \frac{1}{2} |U_{\text{so}}| \hbar^2 (2l + 1). \quad (7.5.7)$$

Nukleono sukinio ir orbitos sąveika turi didelę įtaką nukleono energijos lygmenų išsidėstymui (kitaip negu elektrono sukinio ir orbitos sąveika, kurios įtaka yra nežymi). Du polygmenys, atitinkantys  $j = l \pm \frac{1}{2}$ , gali netgi priklausyti skirtingiems sluoksniams. Pavyzdys – būsenos  $1f_{5/2}$  ir  $1f_{7/2}$  (žr. 7.5.4 pav., dešinioji energijos lygmenų diagrama):  $1f_{7/2}$  sudaro atskirą (ketvirtąjį) sluoksnį, nes atitinkamas energijos lygmuo yra toli nuo kitų energijos lygmenų, o  $1f_{5/2}$  priklauso penktajam sluoksniui.



7.5.3 pav. Nukleono potencinė energija branduolyje



**7.5.4 pav.** Nukleono energijos lygmenų diagramos, apskaičiuotos skirtingo pavidalo nukleono potencinėms energijoms, taikant sluoksniinį branduolio modelį. Kairioji diagrama atitinka sferinę begalinio gylio potencialo duobę, vidurinioji diagrama atitinka realistišką potencinės energijos priklausomybę nuo radialiosios koordinatės (7.5.4), tačiau be sukini ir orbitos sąveikos, o dešinioji diagrama gauta atsižvelgus į sukini ir orbitos sąveiką, t. y. pridėjus dėmenį (7.5.5). Skaičiai skliaustuose nusako didžiausias galimas energijos lygmenų užpildas. Skaičiai apskritimuose – tai „magiškieji skaičiai“, t. y. pilnutiniai nukleonų skaičiai, kai visi žemiau esantys lygmenys yra pilnai užpildyti.

## 7.6. Branduolio sukinys

**Branduolio sukiniu** ( $L_J$ ) vadinamas branduolio pilnutinis judesio kiekio momentas. Tai yra vektorinis dydis, kurio savybės yra tokios pačios kaip ir bet kurios kitos prigimties judesio kiekio momento. Pvz., jo modulio galimosios vertės yra nusakomos (4.2.3) formule:

$$L_J = \sqrt{J(J+1)}\hbar \quad (J = 0, 1, 2, \dots \text{ arba } J = 1/2, 3/2, 5/2, \dots), \quad (7.6.1)$$

o jo projekcija į bet kurią apibrėžtą kryptį erdvėje yra nusakoma (4.2.4) formule:

$$L_{Jz} = m_J \hbar \quad (m_J = -J, -J+1, \dots, J-1, J). \quad (7.6.2)$$

Branduolio sukinys lygus visų branduolio nukleonų orbitinių ir vidinių (sukininių) impulso momentų vektorinei sumai:

$$L_J = \sum_{i=1}^A (L_i + L_{si}) = \sum_{i=1}^A L_{ji}, \quad (7.6.3)$$

čia  $L_i$ ,  $L_{si}$  ir  $L_{ji}$  yra  $i$ -tojo nukleono (protono arba neutrono) orbitinis, sukininis ir pilnutinis judesio kiekio momentai. Kai yra tik du nukleonai (deuterio branduolys), pagal momentų sudėties taisyklę (3.4.6) gauname tokias galimas branduolio sukinių kvantinio skaičiaus  $J$  vertes:

$$|j_1 - j_2| \leq J \leq |j_1 + j_2|. \quad (7.6.4)$$

Branduolių pagrindinių būsenų sukinius galima apskaičiuoti pagal tokias taisykles:

1. Lyginių-lyginių branduolių (su lyginiais  $Z$  ir  $A - Z$ ) pagrindinės būsenos sukinys yra  $J = 0$ .
2. Branduolių su nelyginiu  $A$  (t. y. su lyginiu  $Z$  ir nelyginiu  $A - Z$  arba atvirkščiai) sukinių beveik visada lemia vienintelio „nesuporuoto“ nukleono kvantinis skaičius  $j$ .
3. Nelyginių-nelyginių branduolių sukinių lemia dviejų nesuporuotųjų nukleonų pilnutinių judesio kiekio momentų vektorinė suma:  $L_J = L_{jp} + L_{jn}$ , todėl yra galimos kelios vertės.

## 7.7. Kai kurių branduolių konfigūracijos ir energijos lygmenys

Branduolio nukleonų konfigūracija apibrėžiama ir užrašoma panašiai kaip atomo elektronų konfigūracija (žr. 4.7 skirsnis). Yra tik du skirtumai:

1. Kadangi branduolį sudaro dviejų rūšių nukleonai (protonai ir neutronai), tai reikia atskirai apibrėžti protonų ir neutronų konfigūracijas.
2. Kadangi dviejų polygmenių, kurie skiriasi tik  $j$  verte, tačiau turi vienodus kvantinius skaičius  $n$  ir  $l$ , energijos stipriai skiriasi dėl sukinių ir orbitos sąveikos (žr. 7.5.4 pav.), tai, užrašant nukleonų konfigūraciją, būtina nurodyti ir  $j$  vertę (apatinio indekso pavidalu).

Pvz., deguonies izotopo  $^{17}\text{O}$  branduolio protonų konfigūracija yra

$$(1s_{1/2})^2(1p_{3/2})^4(1p_{1/2})^2,$$

o neutronų konfigūracija yra

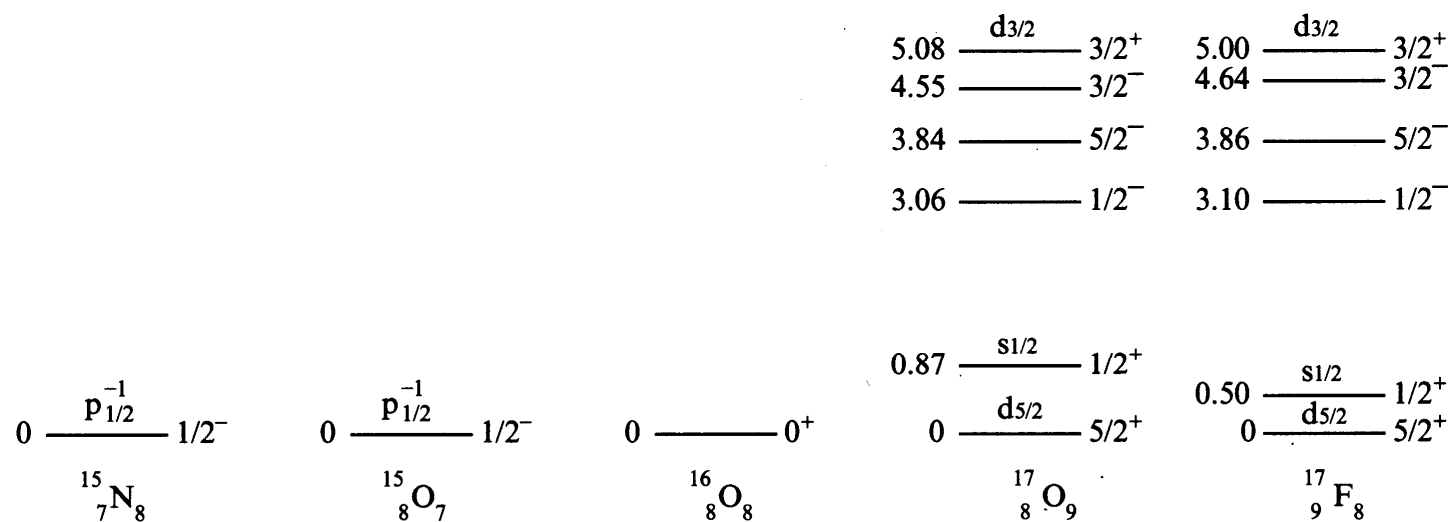
$$(1s_{1/2})^2(1p_{3/2})^4(1p_{1/2})^2(1d_{5/2})^1.$$

Branduolio savybes (sukinį, magnetinį momentą, lyginumą) lemia iš dalies užpildyti lygmenys (kaip ir atomo: žr. 4.6 skirsnis). Pvz.,  $^{17}\text{O}$  branduolio savybes lemia  $1d_{5/2}$  neutronas. Todėl pastarąją konfigūraciją galima užrašyti trumpiau:  $(1d_{5/2})^1$ .

Branduolio sukinių ir lyginumą yra įprasta nurodyti identifikuojant branduolių energijos lygmenis. Lyginumas nurodomas šalia branduolio sukinių kvantinio skaičiaus viršutiniu indeksu „+“ arba „-“ priklausomai nuo to, ar būsena yra lyginė, ar ne. Tokią branduolio sukinių kvantinio skaičiaus ir simbolio „+“ arba „-“ porą vadinsime „branduolio būsenos charakteristika“ arba „energijos lygmens charakteristika“. Pvz.,  $^{17}\text{O}$  branduolio pagrindinės būsenos energijos lygmens charakteristika yra „ $5/2^+$ “.

Viso branduolio banginė funkcija yra išreiškiama atskirų nukleonų banginių funkcijų sandaugų tiesiniu dariniu, taikant tas pačias taisykles kaip atomo banginės funkcijos išraiškoje atskirų elektronų banginėmis funkcijomis (žr. (4.1.9b)). Kadangi vieno nukleono banginės funkcijos lyginumas sutampa su šalutinio kvantinio skaičiaus  $l$  lyginiu (žr. (3.2.7)), tai branduolio būsenos (t. y. banginės funkcijos) lyginumas sutampa su visų nukleonų šalutinio kvantinio skaičiaus  $l$  verčių sumos lyginiu.

Užrašant nukleonų konfigūraciją, viršutinis indeksas gali būti naudojamas ne tik nurodant energijos lygmenyje esančių nukleonų skaičių, bet ir nurodant nukleonų trūkumą iki to lygmens pilno užpildymo. Pvz., deguonies izotopo  $^{15}\text{O}$  branduoliui „trūksta“ vieno  $1p_{1/2}$  neutrono iki pilno sluoksnių užpildymo (žr. 7.5.4 pav., dešinioji energijos lygmenų diagrama). Todėl šio branduolio konfigūracija yra  $(1p_{1/2})^{-1}$ . Nukleonų, kurie atitinka pilnai užpildytus energijos lygmenis, pilnutinis sukinyss lygus nuliui, o lyginumas lygus  $+1$ . Todėl, jeigu lygmenyje yra tik viena „vakansija“, tada tame lygmenyje esančių nukleonų pilnutinis sukinyss ir lyginumas yra tokie patys kaip vienintelio trūkstamo nukleono. Taigi,  $^{15}\text{O}$  branduolio pagrindinio energijos lygmens charakteristika yra  $1/2^-$  (žr. 7.7.1 pav.).



**7.7.1 pav.** Branduolių, kurie skiriasi nuo  $^{16}\text{O}$  branduolio tik viena vakansija išoriniame sluoksnyje arba vienu papildomu sluoksniu, kuriame yra vienas nukleonas, energijos lygmenų diagramos. Sužadintieji lygmenys, virš kurių užrašyta „ $s_{1/2}$ “ arba „ $d_{3/2}$ “, atitinka branduolio konfigūracijas, kurios skiriasi nuo pagrindinės būsenos konfigūracijos tik  $d_{5/2}$  neutrono arba protono perkėlimu į nurodytąjį viendalelį energijos lygmenį (žr. 7.5.4 pav., dešinioji energijos lygmenų diagrama).

## 7.8. Branduolio magnetinis momentas

Kaip ir elektrono orbitinis magnetinis momentas (3.5.3), protono orbitinis magnetinis momentas  $\mu$  yra susijęs su jo orbitiniu impulso momentu  $L$  pagal klasikinę apskrita orbita judančio taškinio krūvininko magnetinio momento išraišką, kurioje vietoj elektrono krūvio  $-e$  reikia naudoti protono krūvį  $+e$ :

$$\mu = \frac{e}{2m_p} L = \mu_N \frac{L}{\hbar}, \quad (7.8.1)$$

čia  $m_p$  yra protono masė, o  $\mu_N$  yra **branduolinis magnetonas**:

$$\mu_N = \frac{e\hbar}{2m_p} = 5,050784 \cdot 10^{-27} \text{ J/T} = 3,152451 \cdot 10^{-8} \text{ eV/T} \quad (7.8.2)$$

(plg. su (3.5.4)). Neutrono elektros krūvis ir orbitinis magnetinis momentas lygūs nuliui.

Kadangi  $\mu_N \ll \mu_B$ , tai branduolio magnetinės savybės pasireiškia daug silpniau negu atomo elektronų magnetinės savybės. Įprastines magnetines medžiagų savybes lemia tik atomų elektronų magnetiniai momentai.

Kaip ir orbitinis impulso momentas  $L$ , orbitinis magnetinis momentas (7.8.1) precesuoja apie pasirinktąją kryptį ( $z$  ašį). Eksperimentiškai pasireiškia tik *vidutinė* orbitinio magnetinio momento (7.8.1) vertė, kuri lygi jo projekcijai į  $z$  ašį:

$$\mu_z = \frac{e\hbar}{2m_p} m_l \equiv \mu_N m_l \quad (m_l = -l, -l+1, \dots, l-1, l) \quad (7.8.3)$$

(žr. (3.1.9)). Todėl „magnetiniu momentu“ susitarta vadinti didžiausią galimą  $\mu_z$  vertę. Pvz., protono „orbitinis magnetinis momentas“ pagal šį susitarimą yra lygus

$$\mu_l = \mu_N l. \quad (7.8.4)$$

Ši vertė yra mažesnė už precesuojančio vektoriaus modulį  $\mu_N \sqrt{l(l+1)}$  (žr. (3.1.7b)). Bendroju atveju nukleono arba branduolio orbitinio magnetinio momento projekcija lygi

$$\mu_z = \frac{g_l L_z \mu_N}{\hbar} = g_l m_l \mu_N \quad (m_l = -l, -l+1, \dots, l-1, l), \quad (7.8.5)$$

čia  $g_l$  yra „orbitinis“  $g$  faktorius. Nukleono (arba branduolio) ***g faktorius*** – tai nukleono (arba branduolio) magnetinio momento ir atitinkamo judesio kiekio momento projekcijų į duotąją kryptį santykis, išreikštas  $\mu_N/\hbar$  vienetais (plg. su elektrono  $g$  faktoriaus apibrėžtimi 3.5 skyriuje). Protono  $g_l = 1$ , neutrono  $g_l = 0$ . Atsižvelgus į sukinių, nukleono magnetinio momento projekcija lygi

$$\mu_z = \frac{(g_l \langle L_z \rangle + g_s \langle L_{sz} \rangle) \mu_N}{\hbar} \equiv g_j m_j \mu_N \quad (m_j = -j, -j+1, \dots, j-1, j), \quad (7.8.6)$$

čia skliaustai „ $\langle$ “ ir „ $\rangle$ “ žymi statistinius vidurkius, o  $g_s$  ir  $g_j$  yra atitinkamai „sukininis“ ir „pilnutinis“  $g$  faktoriai. Nukleono „pilnutinis magnetinis momentas“ – tai didžiausia pastarojo reiškinio vertė (plg. su (7.8.4)):

$$\mu = g_j j \mu_N. \quad (7.8.7)$$

Protono  $g_s = 5,5856912$ , o neutrono  $g_s = -3,8260837$ . Palyginimas: elektrono  $g_s = 2$  (žr. (3.5.5)). Šis elektrono ir nukleono sukinių  $g$  faktorių skirtumas aiškinamas tuo, kad elektronas yra elementarioji (nedaloma) dalelė, o protonas ir neutronas yra sudėtinės dalelės. Nukleonas yra sudarytas iš trijų elementariųjų dalelių, kurios vadinamos „kvarkais“. Nukleono vidinis impulso momentas (sukinys) – tai kvarkų sukinių ir orbitinių impulso momentų suma (kvarkų orbitinis impulso momentas atsiranda dėl jų sukamojo judėjimo aplink nukleono masės centrą).

Nukleono pilnutinio  $g$  faktoriaus išraiška orbitiniu ir sukiniu  $g$  faktoriais bei kvantiniu skaičiumi  $j$ :

$$\begin{aligned} \text{kai } j = l + \frac{1}{2}, \quad g_j &= g_l \left( 1 - \frac{1}{2j} \right) + \frac{g_s}{2j}; \\ \text{kai } j = l - \frac{1}{2}, \quad g_j &= g_l \frac{j + \frac{3}{2}}{j+1} - \frac{g_s}{2j(j+1)}. \end{aligned} \quad (7.8.8)$$

Branduolio magnetinio momento projekcija yra lygi nukleonų magnetinių momentų projekcijų sumai:

$$\mu_z = \frac{1}{\hbar} \sum_{i=1}^A (g_{l,i} \langle L_{z,i} \rangle + g_{s,i} \langle L_{sz,i} \rangle) \mu_N \equiv g_J m_J \mu_N, \quad (7.8.9)$$

čia  $g_J$  yra branduolio  $g$  faktorius.

„Branduolio magnetinis momentas“ – tai didžiausioji (7.8.9) reiškinio vertė:

$$\mu \equiv (\mu_z)_{\max} = g_J J \mu_N. \quad (7.8.10)$$

Esant išoriniam magnetiniam laukui, branduolys įgyja papildomą potencinę energiją

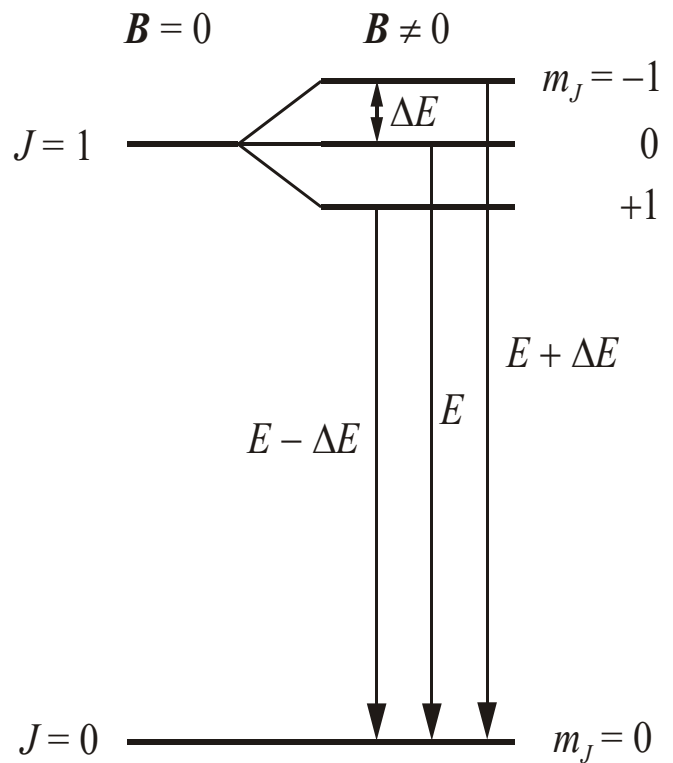
$$E_M = -\mu_z B = -m_J g_J \mu_N B \quad (7.8.11)$$

$$(m_J = -J, -J + 1, \dots, J - 1, J).$$

T. y. branduolio energijos lygmuo skyla į  $2J + 1$  lygmenų, tarp kurių yra tokio dydžio intervalai:

$$\Delta E = g_J \mu_N B. \quad (7.8.12)$$

Šis reiškinys vadinamas **branduoliniu Zėmano efektu** (žr. 7.8.1 pav.) Jis yra analogiškas atominiam Zėmano efektui (žr. 4.2.2 pav.).



7.8.1 pav. Branduolinis Zėmano efektas



## 8. Branduolių nestabilumas

### 8.1. Radioaktyvumo sąvoka. Pagrindinis radioaktyviojo skilimo dėsnis

**Radioaktyvumas** – tai kai kurių nuklidų branduolių savaiminis virtimas kitų nuklidų branduoliais. Tada vietoj vieno (*pirminio*) branduolio atsiranda dvi arba daugiau *antrinių* dalelių (pvz., kito nuklido branduolys ir elektronas arba du lengvesni branduoliai). Todėl toks branduolio virsmas vadinamas branduolio *skilimu*. Kad branduolys galėtų skilti savaime, toks vyksmas turi būti „energiškai naudingas“, t. y. dalelių, kurios atsiranda skylant branduoliui, pilnutinė rimties energija turi būti mažesnė už pradinio branduolio rimties energiją.

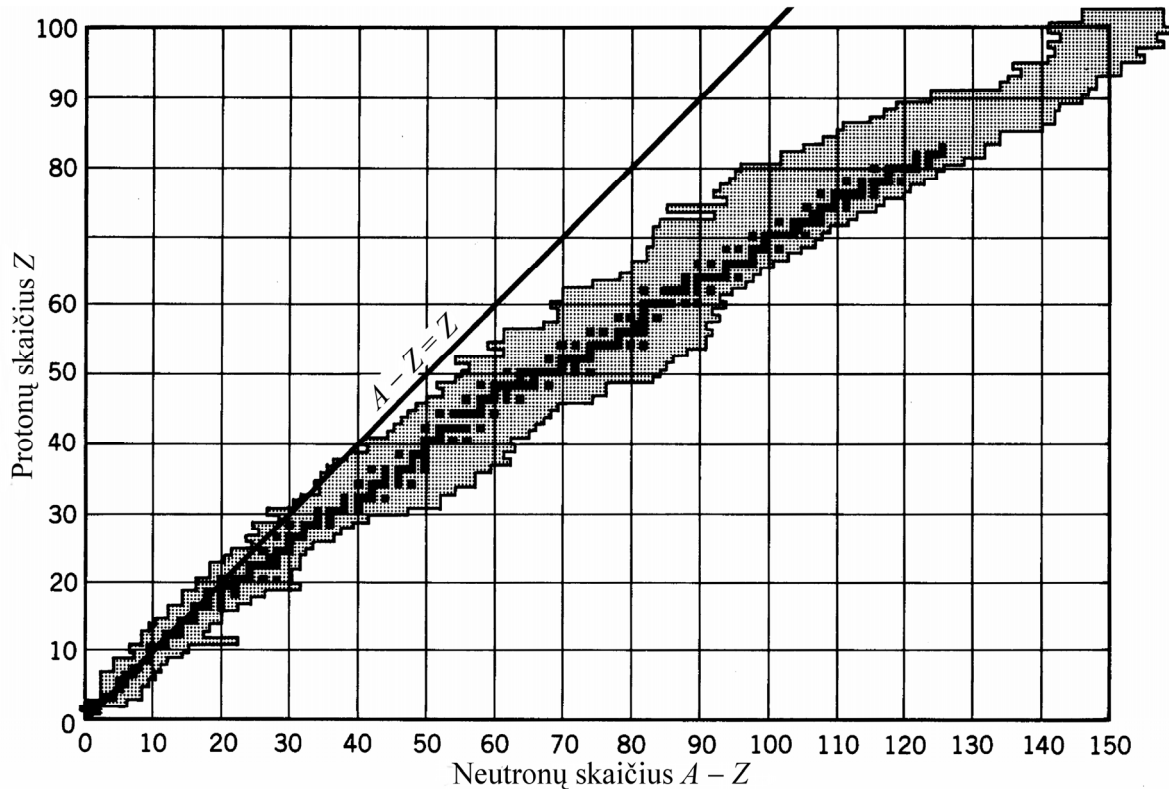
Kiekvieno elemento stabilųjų izotopų masės skaičiai  $A$  priklauso siauram (kelių vienetų pločio) intervalui, kuris vadinamas to elemento *stabilumo sritimi* (žr. [8.1.1 pav.](#)). Pvz., stabilieji švino izotopai yra  ${}_{82}^{204}\text{Pb}$ ,  ${}_{82}^{206}\text{Pb}$ ,  ${}_{82}^{207}\text{Pb}$  ir  ${}_{82}^{208}\text{Pb}$ . T. y. švino izotopų stabilumo srityje  $A$  yra nuo 204 iki 208. Duotojo elemento izotopai, kurių masės skaičius  $A$  yra žemiau arba aukščiau stabilumo srities, yra radioaktyvūs (nestabilūs). Lengvųjų elementų atveju ( $Z < 20$ ,  $A < 40$ ) stabilumo srityje neutronų ir protonų skaičių santykis artimas vienetui. Sunkiausiems stabiliems nuklidams neutronų skaičiaus  $A - Z$  ir protonų skaičiaus  $Z$  santykis  $(A - Z) / Z$  padidėja iki  $\approx 1,5$ . Taip yra todėl, kad duotam masės skaičiui  $A$  optimalųjį (atitinkantį mažiausią branduolio energiją) santykį  $(A - Z) / Z$  lemia du konkuruojantys veiksniai: ketvirtasis (simetrijos) dėmuo ryšio energijos išraiškoje ([7.3.7](#)), dėl kurio energiškai naudingiau, kad  $(A - Z) / Z$  būtų artimas vienetui, ir protonų Kulono stūma, dėl kurios energiškai naudingiau turėti mažiau protonų branduolyje. Pastarojo veiksnio santykinis vaidmuo didėja didėjant branduolio masei, nes:

- 1) Kulono stūmos energija yra proporcinga protonų skaičiaus kvadratui  $Z^2$  (kiekvienas protonas sąveikauja su visais kitais branduolio protonais), todėl ta energija yra apytiksliai proporcinga ir atominio skaičiaus kvadratui  $A^2$  (turint omenyje tik tuos nuklidus, kurie yra stabilumo srityje arba arti jos);
- 2) nukleonų traukos energija (ir simetrijos energija) yra proporcinga masės skaičiui  $A$  (stiprioji sąveika pasireiškia tik tarp gretimų nukleonų).

T. y., didėjant  $Z$ , protonų Kulono stūmos energija didėja greičiau už branduolinės traukos energiją (ir simetrijos energiją). Todėl, didėjant  $A$ , optimalusis protonų skaičius  $Z$  didėja lėčiau už neutronų skaičių  $A - Z$ , ir optimalioji  $(A - Z) / Z$  vertė šiek tiek padidėja.

Kuo lengvesnė antrinė dalelė, tuo didesnę skilimo metu išsiskyrusios energijos dalį ji gauna (tai išplaukia iš energijos ir impulso tvermės dėsnų). Dalelių, kurios atsiranda skylant branduoliams, kinetinė energija yra palyginti didelė – daug didesnė už energijas, kurios pasireiškia atominiuose reiškiniuose. Pvz., elektrono, kuris atsirado, skilus branduoliui, tipiškoji kinetinė energija yra 4–6 eilėmis didesnė už vidutinę orbitinio elektrono kinetinę energiją vandenilio atome. Būtent ši ypač didelė dalelių energija ir yra tas požymis, pagal kurį praktikoje lengviausia aptikti branduolio skilimą. Didelė dalelių energija sąlygoja didelę jų skvarbą ir gebėjimą jonizuoti medžiagos atomus. Jonizavimo reiškinys panaudojamas šių dalelių detektavimui.

Pagal spinduliuojamų dalelių rūšį skiriami alfa ( $\alpha$ ) skilimas, beta ( $\beta$ ) skilimas ir savaiminis dalijimasis. **Alfa ( $\alpha$ ) dalelės** – tai didelės energijos  ${}^4\text{He}$  branduoliai, o **beta ( $\beta$ ) dalelės** – tai didelės energijos elektronai arba pozitronai. Savaiminis dalijimasis yra būdingas tik patiems sunkiausiems branduoliams ir pasireiškia branduolio skilimu į dvi artimų masių skeveldras. Kartu su kiekvienu iš šių trijų skilimo vyksmų dažnai atsiranda elektromagnetinė **gama ( $\gamma$ ) spinduliuotė**. Šios spinduliuotės kvantai (didelės energijos fotonai) vadinami **gama ( $\gamma$ ) kvantais**.



**8.1.1 pav.** Protonų ir neutronų skaičiai, kurie atitinka stabiliuosius branduolius (juodos sritys) ir radioaktyviuosius branduolius (pilkos sritys)

Kadangi radioaktyviojo skilimo metu vieno elemento branduoliai virsta kitų elementų branduoliais, tai pradinio radioaktyviojo elemento atomų skaičius bandinyje visą laiką mažėja. Jeigu tam tikru laiko momentu  $t$  radioaktyviojo elemento atomų skaičius bandinyje buvo  $N$ , tai dėl skilimo per laiką  $dt$  tokių atomų skaičius sumažės dydžiu  $-dN$ . Dėsnį, kuris nusako šį atomų skaičiaus pokytį, 1902 m. atrado anglų fizikai Ernestas Rezerfordas (*Rutherford*) ir Frederikas Sodis (*Soddy*). Jie nustatė, kad

$$\frac{dN}{dt} = -\lambda N, \quad (8.1.1)$$

čia  $N$  – radioaktyviojo nuklido branduolių skaičius, o  $\lambda$  – radioaktyviojo nuklido **skilimo konstanta**, rodanti, kuri branduolių dalis suskyla per laiko vienetą. Šį dėsnį galima išvesti teoriškai, pasinaudojus tuo, kad branduolių skilimas yra atsitiktinis vyksmas. Sąvoka „atsitiktinis vyksmas“ reiškia, kad neįmanoma numatyti, kada ir kuris branduolys skils, o galima kalbėti tik apie kiekvieno branduolio skilimo per apibrėžtą laiką tikimybę. Skilimo konstanta  $\lambda$  yra nestabiliojo branduolio skilimo tikimybė per laiko vienetą. Diferencialinės lygties (8.1.1) sprendinys yra eksponentinė laiko funkcija:

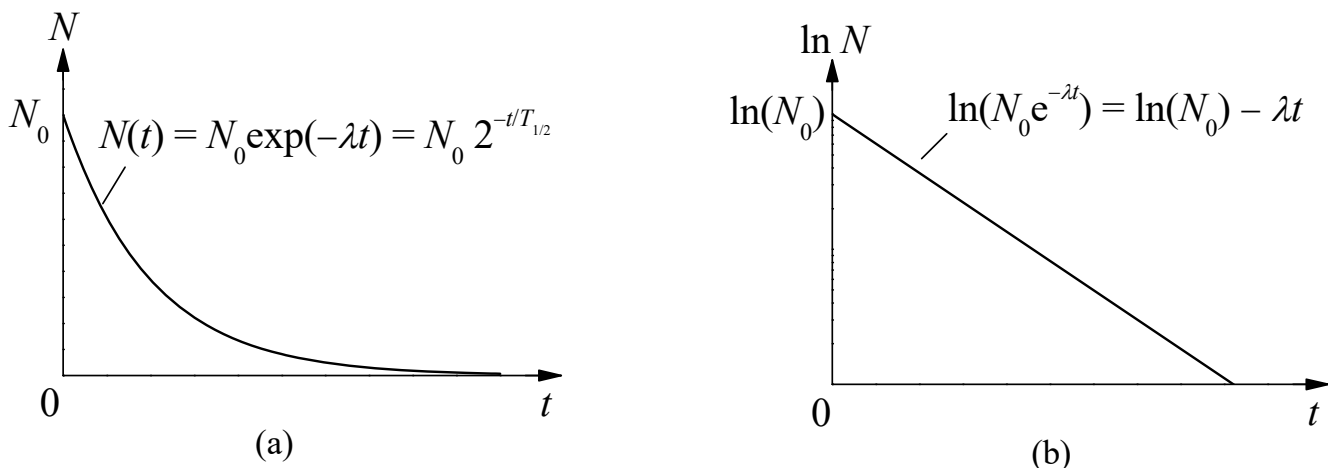
$$N(t) = N_0 e^{-\lambda t}, \quad (8.1.2)$$

čia  $N_0$  yra radioaktyviojo nuklido branduolių skaičius pradiniu laiko momentu  $t = 0$ . Vadinasi, radioaktyviojo nuklido atomų skaičiaus bandinyje priklausomybė nuo laiko – tai mažėjimas pagal eksponentinį dėsnį. (8.1.1) arba (8.1.2) lygybė kartais vadinama **pagrindiniu radioaktyviojo skilimo dėsniumi**. Šį dėsnį galima užrašyti šitaip:

$$N(t) = N_0 \cdot 2^{-t/T_{1/2}}, \quad (8.1.3)$$

čia  $T_{1/2}$  yra radioaktyviojo nuklido pusėjimo trukmė („pusamžis“):

$$T_{1/2} = \frac{\ln 2}{\lambda}. \quad (8.1.4)$$



**8.1.2 pav.** Radioaktyviojo nuklido kiekio (a) ir jo logaritmo (b) priklausomybė nuo laiko

Radioaktyviojo nuklido *pusėjimo trukmė* arba *pusamžis* – tai laikas, per kurį to nuklido branduolių skaičius sumažėja 2 kartus dėl radioaktyviojo skilimo. Per laiką  $2T_{1/2}$  branduolių skaičius sumažėja  $2^2 = 4$  kartus, per laiką  $3T_{1/2} - 2^3 = 8$  kartus ir t. t. Vietoj pusamžio kartais vartojama branduolio vidutinės gyvavimo trukmės sąvoka. *Vidutinė gyvavimo trukmė* – tai vidutinis laikas iki branduolio skilimo. Vidutinė gyvavimo trukmė  $\tau$  lygi laikui, per kurį nestabiliųjų branduolių skaičius sumažėja  $e = 2,7183$  karto, t. y.

$$\tau = \frac{1}{\lambda}. \quad (8.1.5)$$

Iš trijų skilimo spartą apibūdinančių dydžių ( $\lambda$ ,  $\tau$  ir  $T_{1/2}$ ), praktikoje dažniausiai vartojamas pusamžis  $T_{1/2}$ . Radioaktyviųjų nuklidų pusamžiai yra labai įvairūs ir kinta nuo sekundės dalių iki daugelio milijardų metų. Pvz., urano izotopo  $^{238}_{92}\text{U}$  pusamžis lygus  $4,5 \cdot 10^9$  m., radžio  $^{226}_{88}\text{Ra}$  – 1590 m., radono  $^{222}_{86}\text{Rn}$  – 3,8 dienos, polonio  $^{214}_{84}\text{Po}$  –  $1,6 \cdot 10^{-4}$  s.

Vidutinis per sekundę skylančių branduolių skaičius

$$\Phi \equiv -\frac{dN}{dt} \quad (8.1.6)$$

vadinamas radioaktyviojo šaltinio *aktyvumu*. Aktyvumas dažniausiai išreiškiamas vidutiniu skilimų skaičiumi per sekundę (skil./s). Šis aktyvumo vienetas vadinamas *bekereliu (Bq)*:  $1 \text{ Bq} = 1 \text{ skil./s}$ . Tačiau vartojami ir kiti vienetai: *kiuris (Ci)*;  $1 \text{ Ci} = 3,7 \cdot 10^{10} \text{ Bq}$  ir *rezerfordas (Rd)*;  $1 \text{ Rd} = 10^6 \text{ Bq}$ .

Kadangi skilimo metu branduolys išspinduliuoja vieną arba daugiau dalelių, tai radioaktyviojo bandinio aktyvumą galima įvertinti matuojant tų dalelių vidutinį skaičių per laiko vienetą.

Pagal radioaktyviojo skilimo dėsnį (8.1.1) ir pagal aktyvumo apibrėžtį (8.1.6) aktyvumas  $\Phi$  ir nestabiliųjų branduolių skaičius  $N$  kiekvienu laiko momentu susiję sąryšiu

$$\Phi = \lambda N. \quad (8.1.7)$$

Bandinio aktyvumo priklausomybės nuo laiko grafikas vadinamas *skilimo kreive*. Iš (8.1.7) išplaukia, kad aktyvumo  $\Phi$  priklausomybė nuo laiko yra to paties pavidalo kaip ir radioaktyviųjų branduolių skaičiaus  $N$  laikinė priklausomybė; atsiranda tik pastovus papildomas daugiklis  $\lambda$ . Jeigu branduolių skaičius  $N$  kinta tik dėl jų skilimo, tada pagal (8.1.2)

$$\Phi(t) = \lambda N(t) = \lambda N_0 e^{-\lambda t} = \Phi_0 e^{-\lambda t} = \Phi_0 \cdot 2^{-t/T_{1/2}}, \quad (8.1.8)$$

čia  $\Phi_0$  yra pradinis šaltinio aktyvumas:

$$\Phi_0 = \lambda N_0. \quad (8.1.9)$$

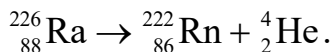
## 8.2. Alfa skilimas

### Pagrindinės alfa skilimo ypatybės

**Alfa ( $\alpha$ ) skilimas** yra toks atomo branduolio virsmas, kurio metu branduolys savaime išspinduliuoja  $\alpha$  dalelę ( ${}^4_2\text{He}$  branduolį). Apibendrintoji lygtis:



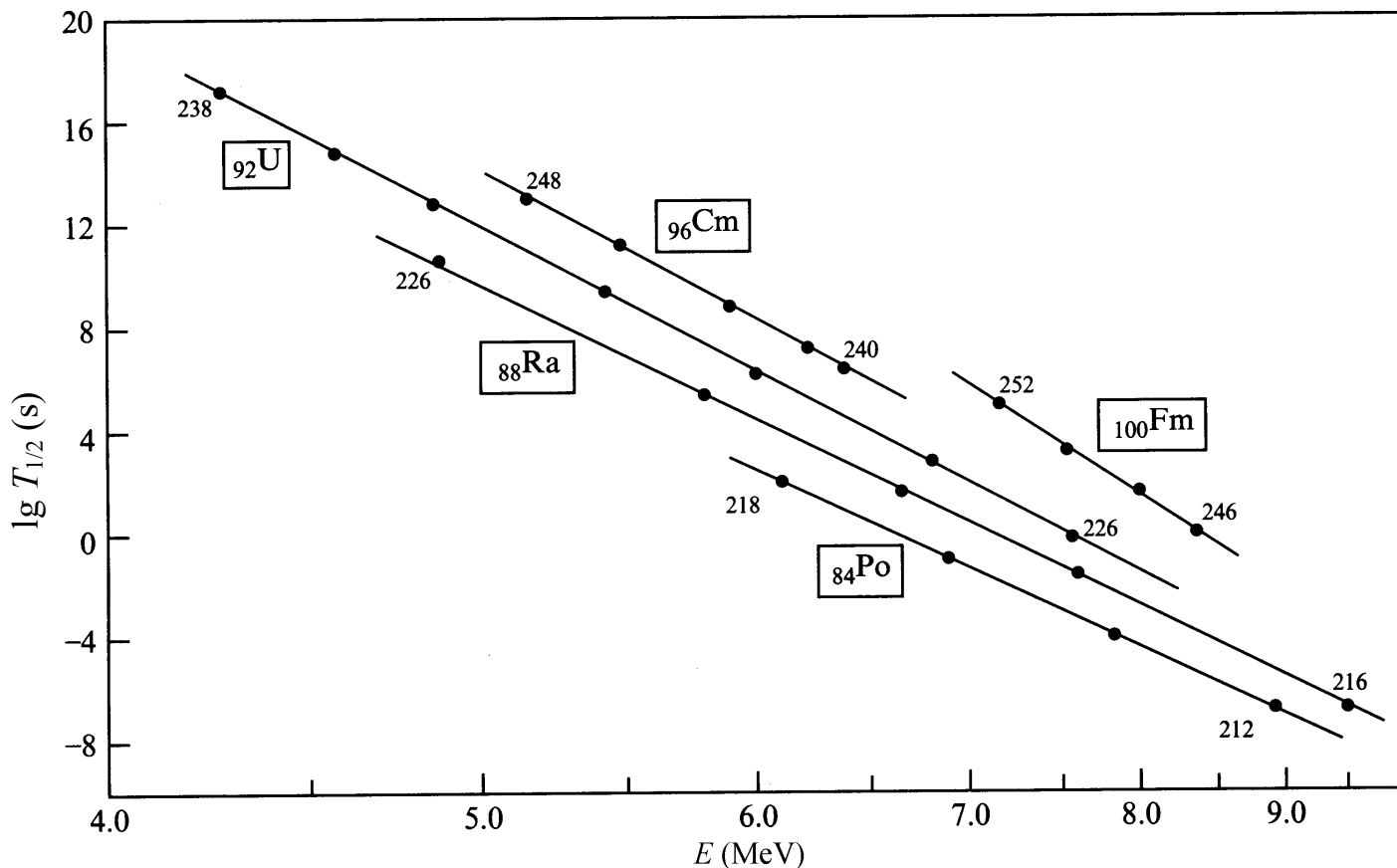
Pavyzdys:



Pagrindinės alfa skilimo ypatybės:

1.  $Z > 82$ .
2. Diskrečios energijos.
3. Siauras alfa dalelių energijų intervalas:  $E = (4 - 8,7)$  MeV.
4. Labai stipri pusamžio priklausomybė nuo dalelių energijos. **Geigerio ir Netolo dėsnis:**

$$\lg T_{1/2} = C + \frac{D}{\sqrt{E}}. \quad (8.2.2)$$



**8.2.1 pav.** Kai kurių branduolių alfa skilimo pusamžio logaritmo priklausomybė nuo alfa dalelių energijos. Linijos atitinka izotopų sekas. Horizontaliosios ašies mastelis proporcingas  $-1/E^{1/2}$ .

Pirmąją ypatybę lemia tai, kad alfa skilimas susijęs su protonų Kulono stūma. Alfa skilimas yra „energiškai naudingas“, nes  $\alpha$  dalelė yra ypač stabilus darinys, t. y. jos rimties masė yra maža, o savitoji ryšio energija didelė (žr. 7.3.1 pav.). Energiją, kuri išsiskiria, kai branduolys savaime emituoja  $\alpha$  dalelę, galima apskaičiuoti pagal (7.3.9) formulę.

**8.2.1 lentelė.** Išsiskyrusi energija įvairiems  $^{232}\text{U}$  branduolio skilimo tipams

Išspinduliuota dalelė	Išsiskyrusi energija (MeV)	Išspinduliuota dalelė	Išsiskyrusi energija (MeV)
n	-7,26	$^4\text{He}$	+5,41
$^1\text{H}$	-6,12	$^5\text{He}$	-2,59
$^2\text{H}$	-10,70	$^6\text{He}$	-6,19
$^3\text{H}$	-10,24	$^6\text{Li}$	-3,79
$^3\text{He}$	-9,92	$^7\text{Li}$	-1,94

Antrąją ypatybę lemia antrinio branduolio energijos diskretumas (žr. 8.2.2 pav.).

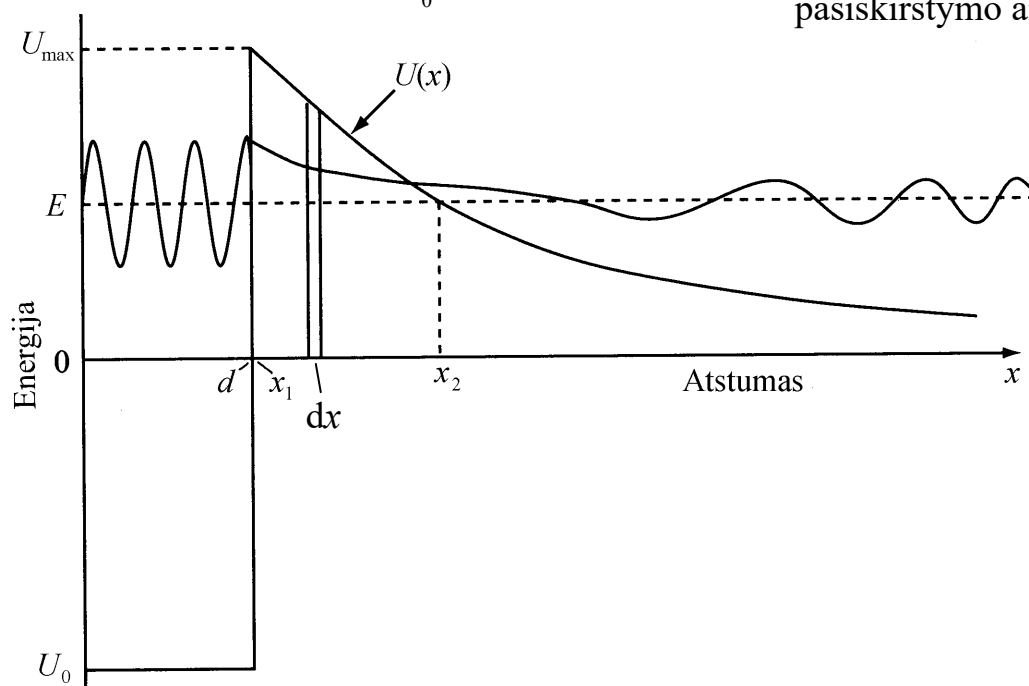
3) ir 4)  $\alpha$  skilimo ypatybės paaiškina teorija, kurią 1928 m. sukūrė amerikiečių fizikas G. Gamovas (*Gamow*).

Alfa dalelės potencinė energija:

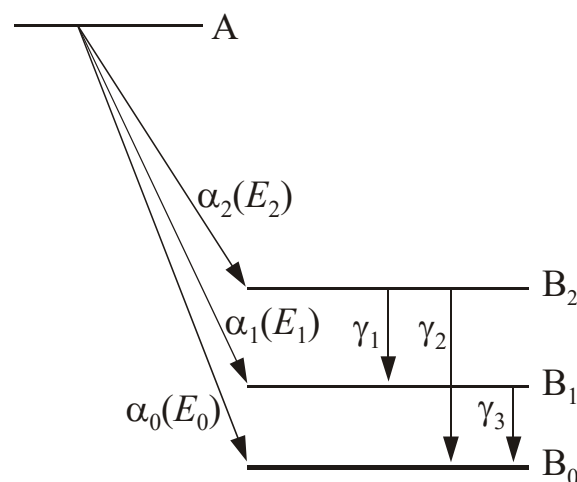
$$U(x) \approx \begin{cases} Ze^2 / (2\pi\epsilon_0 x), & \text{kai } x > d, \\ U_0 < 0, & \text{kai } x \leq d. \end{cases} \quad (8.2.3)$$

Kuloninio potencialo barjero aukštis:

$$U_{\max} \approx U(d) = \frac{Ze^2}{2\pi\epsilon_0 d}. \quad (8.2.4)$$



**8.2.3 pav.**  $\alpha$  dalelės ir antrinio branduolio sąveikos energijos priklausomybė nuo atstumo tarp jų



**8.2.2 pav.**  $\alpha$  dalelių greičių pasiskirstymo aiškinimas

### Geigerio ir Netolo dėsnio išvedimas

Pagal Gamovo teoriją alfa skilimas vyksta dėl to, kad alfa dalelė „tuneliuoja“ pro Kulono potencialo barjerą (8.2.3). Naudojamės potencialo barjero skaidrio išraiška (2.2.11):

$$S \approx \lim_{N \rightarrow \infty} \prod_{n=1}^N S_n \approx \exp \left[ -\frac{2}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{2m(U(x) - E)} dx \right].$$

$$x_1 \approx d \approx 10^{-14} \text{ m.} \quad (8.2.5)$$

Lygties  $U(x) = E$  sprendinys:

$$x_2 = \frac{Ze^2}{2\pi\epsilon_0 E}. \quad (8.2.6)$$

Jeigu  $Z = 100$ , o  $E = 10 \text{ MeV}$ , tai  $x_2 - x_1 \approx 1,88 \cdot 10^{-14} \text{ m}$ . Remdamiesi prielaida, kad vidutinė  $U - E$  vertė pointegraliniame reiškinyje lygi  $0,5 \cdot (U_{\max} - E) \approx 10 \text{ MeV}$ , gauname  $S \approx \exp(-52) \approx 2 \cdot 10^{-23}$ . Vadinasi,  $S \ll 1$ , todėl galima taikyti aukšto ir plataus barjero artinį, kurį atitinka skaidrio išraiška (2.2.11).

Skilimo konstantą  $\lambda$  lemia alfa dalelės „atsitrenkimų“ į barjerą dažnis ir barjero skaidris  $S$ :

$$\lambda \approx \frac{v}{d} S. \quad (8.2.7)$$

$E = Mv^2/2$ . Jeigu  $E = 10 \text{ MeV}$ , tai  $v \approx 2 \cdot 10^7 \text{ m/s}$ . Todėl

$$\lambda \approx 10^{21} \cdot S \text{ [s}^{-1}\text{]}. \quad (8.2.8)$$

Kadangi

$$T_{1/2} = \frac{\ln 2}{\lambda}, \quad (8.2.9)$$

tai

$$\lg T_{1/2} \approx B - 0.434 \ln S, \quad (8.2.10)$$

čia  $T_{1/2}$  išreikštas sekundėmis, o  $B \approx -21$ . Dydis  $\ln S$  yra lygus reiškiniui laužtiniuose skliaustuose skaidrio išraiškoje (2.2.11). Jo priklausomybė nuo  $E$  gaunama, remiantis prielaida, kad potencialo barjero viduje  $E \ll U$  (išskyrus integravimo režius, kuriuose  $U = E$ ). Todėl

$$-\int_{x_1}^{x_2} \sqrt{2m(U(x) - E)} dx \approx -\int_{x_1}^{x_2} \sqrt{2mU(x)} dx = -\int_{x_1}^{x_2} \sqrt{2m \frac{Ze^2}{2\pi\epsilon_0 x}} dx = \text{const}(\sqrt{x_1} - \sqrt{x_2}) \sim -\frac{1}{\sqrt{E}}$$

(nes  $x_2 \sim 1/E$ ). Vadinasi,

$$\lg T_{1/2} = C + \frac{D}{\sqrt{E}}.$$

Tai yra Geigerio ir Netolo dėsnis (8.2.2).

### 8.3. Gama spinduliavimas

*Gama spinduliavimo ir vidinės konversijos sąvokos*

**Gama ( $\gamma$ ) spinduliuotė** vadinamos elektromagnetinės bangos, kurių bangos ilgis yra daug mažesnis už atstumą tarp kietojo kūno atomų, t. y. daug mažesnis už  $10^{-10}$  m (1 Å).

Gama spinduliuotė dažniausiai atsiranda dėl branduolio **kvantinio šuolio** iš energijos lygmens  $E_a$  į žemesnį lygmenį  $E_b$ . Išspinduliuoto fotono energija lygi

$$E = h\nu = E_a - E_b. \quad (8.3.1)$$

Tipiškos gama fotonų („gama kvantų“) energijos: (0,01 – 5) MeV.

Tipiška sužadintojo branduolio gyvavimo trukmė: ( $10^{-14}$ – $10^{-6}$ ) s.

Tačiau yra galimos ir daug labiau ilgaamžės būsenos ( $> 1$  min) – **metastabiliosios būsenos**.

Sužadinimo energiją branduolys gali prarasti ne tik gama kvanto pavidalu. Yra dar du būdai:

**Vidinė konversija:** sužadavimo energija tiesiogiai perduodama atomo elektronui.

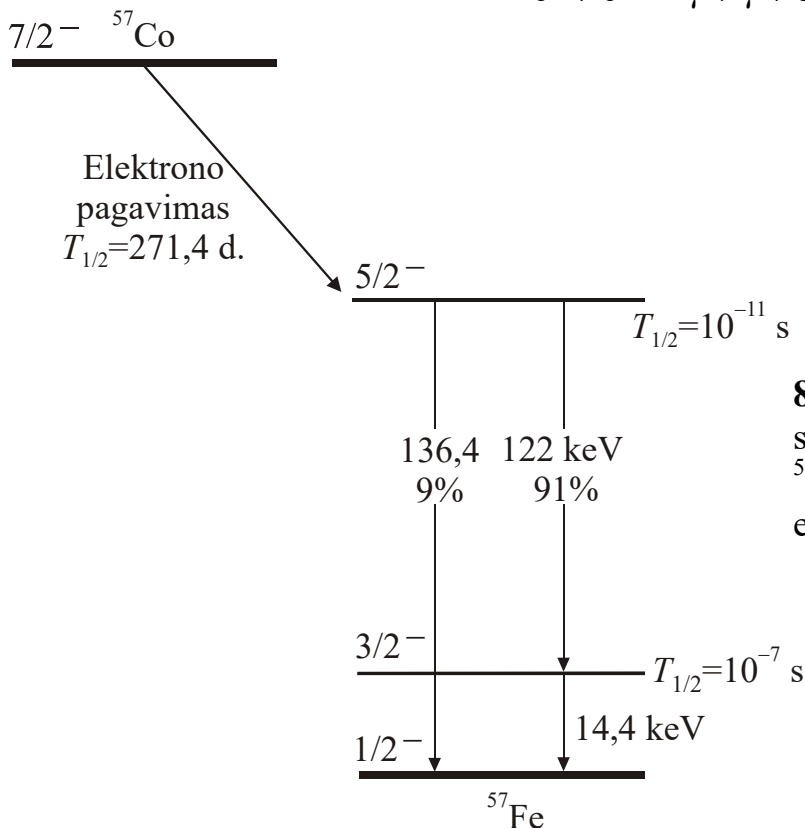
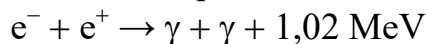
Konversijos elektrono energija:  $E_e = E - \varepsilon_r$ .

**Vidinis porų kūrimas:** sužadavimo energija virsta dviejų naujų dalelių – elektrono ir pozitrono pilnutine reliatyvistine energija (t. y. rimties energija + kinetinė energija)

Vidinio porų kūrimo konversijos „slenkstis“ (mažiausia sužadavimo energija) =  $2m_0c^2$ .

Kvantiniai šuoliai, kurių metu branduolys emituoja arba sugeria fotoną, yra vadinami **spinduliuojamaisiais**. Nespinduliuojamojo kvantinio šuolio pavyzdys yra vidinė konversija.

Gama spinduliuotė gali atsirasti ne tik dėl branduolio sužadavimo, bet ir anihiliuojant dalelėms. Paprasčiausia realizuoti elektrono ir pozitrono anihiliacijos reakciją:



**8.3.1 pav.** Radioaktyviojo skilimo  $^{57}\text{Co} \rightarrow ^{57}\text{Fe}$  schema. Šio skilimo metu atsiranda sužadinti  $^{57}\text{Fe}$  branduoliai, kurie spinduliuoja trijų energijų gama kvantus

*Daugiapolės spinduliuotės sąvoka, jos impulso momentas ir lyginumas*

Pagal impulso momento tvermės dėsnį išspinduliuotas fotonas turi impulso momentą

$$\mathbf{l} = \mathbf{L}_{Ja} - \mathbf{L}_{Jb}. \quad (8.3.2)$$

To momento modulis ir kvantiniai skaičiai  $l$  ir  $m$  apskaičiuojami pagal bendrąsias taisykles:

$$|\mathbf{l}| = \hbar\sqrt{l(l+1)}, \quad (8.3.3a)$$

$$|J_a - J_b| \leq l \leq |J_a + J_b| \quad (\text{išskyrus } l = 0), \quad (8.3.3b)$$

$$m = m_{Ja} - m_{Jb}, \quad (8.3.3c)$$

$$-l \leq m \leq l. \quad (8.3.3d)$$

Elektromagnetinė spinduliuotė, kuri turi tiksliai apibrėžtą impulso momentą  $l$  ir tiksliai apibrėžtą jo projekciją  $m$ , yra vadinama  **$l, m$  eilės daugiapole spinduliuote**. Jeigu  $m$  vertė nėra apibrėžta (arba nėra svarbi sprendžiamajam uždaviniui), tada  $l$ -tosios eilės daugiapole spinduliuotė taip pat vadinama  **$2^l$ -poline spinduliuote** (pvz., **dipolinė spinduliuotė** atitinka  $l = 1$ , **kvadrupolinė spinduliuotė** atitinka  $l = 2$ , **oktupolinė spinduliuotė** atitinka  $l = 3$  ir t. t.). Nulinės eilės („monopolinė“) spinduliuotė neegzistuoja.

Daugiapolė spinduliuotė turi apibrėžtą dažnį. Todėl elektrinis ir magnetinis laukai lygūs

$$\mathcal{E}(\mathbf{r}, t) = \mathcal{E}(\mathbf{r})e^{-i\omega t} + \mathcal{E}^*(\mathbf{r})e^{+i\omega t}, \quad (8.3.4a)$$

$$\mathbf{H}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{H}(\mathbf{r})e^{-i\omega t} + \mathbf{H}^*(\mathbf{r})e^{+i\omega t}. \quad (8.3.4b)$$

Maksvelo lygtys ir tolydumo lygtis kompleksinėms amplitudėms:

$$\nabla \times \mathcal{E}(\mathbf{r}) = \frac{i\omega}{\varepsilon_0 c^2} [\mathbf{H}(\mathbf{r}) + \mathbf{M}(\mathbf{r})], \quad (8.3.5a)$$

$$\nabla \times \mathbf{H}(\mathbf{r}) = -i\omega\varepsilon_0 \mathcal{E}(\mathbf{r}) + \mathbf{j}(\mathbf{r}), \quad (8.3.5b)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{j}(\mathbf{r}) = i\omega\rho(\mathbf{r}). \quad (8.3.5c)$$

Taikant šiuos bendrus sąryšius branduoliui, dėmuo  $\mathbf{j}$  nusako elektros srovę, kuri atsiranda branduolio viduje dėl protonų judėjimo erdvėje. Dėmuo  $\mathbf{M}$  nusako įmagnetėjimą, kuris atsiranda dėl nukleonų sukinių magnetinių momentų. Klasikinė įmagnetėjimo apibrėžtis – tūrio vieneto dipolinis magnetinis momentas:

$$\mathbf{M} \equiv \frac{1}{V} \sum_{i=1}^N \boldsymbol{\mu}_i. \quad (8.3.6)$$

Iš Maksvelo lygčių gaunama lygtis  $\mathbf{H}$  atžvilgiu:

$$\nabla \times \nabla \times \mathbf{H} - k^2 \mathbf{H} = \nabla \times \mathbf{j} + k^2 \mathbf{M}. \quad (8.3.7)$$

Ši lygtis yra simetriška inversijos atžvilgiu ( $\mathbf{j}$  yra nelyginė funkcija,  $\mathbf{M}$  yra lyginė funkcija, o  $\nabla$  yra nelyginis operatorius). Todėl visi jos sprendiniai yra lyginės arba nelyginės spindulio vektoriaus  $\mathbf{r}$  funkcijos („lyginė“ funkcija nesikeičia pakeitus  $\mathbf{r}$  kryptį priešinga, o „nelyginė“ funkcija keičia tik ženklą). Kitaip negu centrinio jėgų lauko Šrėdingerio lygties (3.1.1) (kuri irgi yra simetriška inversijos atžvilgiu), (8.3.7) lygties sprendinio lyginumas yra **nepriklausomas** parametras, t. y. jis turi būti nurodytas apibūdinant spinduliuotės lauko pasiskirstymą erdvėje ir negali būti išreikštas kitais parametrais. Palyginimas: elektrono arba nukleono banginės funkcijos lyginumas sutampa su jo šalutinio kvantinio skaičiaus  $l$  lyginiu (žr. (3.2.7)).

Spinduliuotės šaltinio išorėje elektrinio lauko  $\mathcal{E}$  lyginumas yra priešingas  $\mathbf{H}$  lyginumui. Spinduliuotės lauko lyginumą susitarta tapatinti su jos magnetinio lauko lyginiu:

$$\begin{aligned} \text{lyginė banga:} \quad & \mathbf{H}(-\mathbf{r}) = +\mathbf{H}(\mathbf{r}), \\ \text{nelyginė banga:} \quad & \mathbf{H}(-\mathbf{r}) = -\mathbf{H}(\mathbf{r}). \end{aligned} \quad (8.3.8)$$



Dėl istorinių priežasčių, pilnai apibūdinant daugiapolės spinduliuotės lauko erdvinį pasiskirstymą, vietoj spinduliuotės lauko lyginumo yra nurodomas spinduliuotės **tipas**: elektrinė („E“) ar magnetinė („M“), kuris abipus vienareikšmiškai susijęs su lyginiu pagal šią taisyklę:

$$\begin{aligned} l, m \text{ eilės } \mathbf{elektrinės} \text{ daugiapolės spinduliuotės lyginumas} & \quad (-1)^l, \\ l, m \text{ eilės } \mathbf{magnetinės} \text{ daugiapolės spinduliuotės lyginumas} & \quad -(-1)^l. \end{aligned} \quad (8.3.9)$$

Tai reiškia, kad E spinduliuotės (t. y. jos magnetinio lauko) lyginumas yra priešingas tos pačios eilės M spinduliuotės (t. y. jos magnetinio lauko) lyginumui.

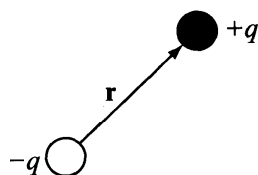
Spinduliuotės lauko lyginumas yra svarbus todėl, kad pradinė ir galutinė branduolio būsenos yra apibrėžto lyginumo. Todėl ir fotono lauko lyginumas turi būti apibrėžtas. Būsenų  $a$  ir  $b$  lyginumus pažymėjus  $\Pi_a$  ir  $\Pi_b$ , „lyginumo atrankos taisyklę“ galima užrašyti taip:

$$\begin{aligned} \text{jeigu } \Pi_a = \Pi_b, \text{ atsiranda tik lyginė spinduliuotė,} \\ \text{jeigu } \Pi_a = -\Pi_b, \text{ atsiranda tik nelyginė spinduliuotė.} \end{aligned} \quad (8.3.10)$$

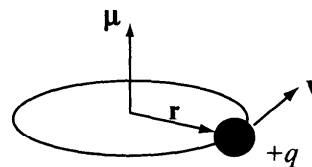
Vadinasi, nors bendruoju atveju dėl kvantinio šuolio tarp duotųjų dviejų būsenų „a“ ir „b“ gali atsirasti įvairios eilės daugiapolė spinduliuotė, tačiau kiekvienos eilės  $l$  spinduliuotė gali būti tik elektrinė arba tik magnetinė.  $l$ -tosios eilės daugiapolės spinduliuotės intensyvumas (t. y. atitinkamo tipo kvantinio šuolio tikimybė) sparčiai mažėja didėjant  $l$ . Todėl dažniausiai pasireiškia tik mažiausios galimos eilės spinduliuotė (žr. [8.3.1 lentelė](#)).

**8.3.1 lentelė.** Mažiausioji galima daugiapolės spinduliuotės eilė ( $l_{\min}$ ), kai spinduliuotė atsiranda dėl kvantinio šuolio iš būsenos  $J_a$ ,  $\Pi_a$  į būseną  $J_b$ ,  $\Pi_b$

(A) $J_a \neq J_b$		
Būsenų lyginumai	Elektrinė spinduliuotė	Magnetinė spinduliuotė
$\Pi_a \Pi_b = (-1)^{J_a - J_b}$	$l_{\min} =  J_a - J_b $	$l_{\min} =  J_a - J_b  + 1,$ išskyrus $J_a$ arba $J_b = 0$
$\Pi_a \Pi_b = (-1)^{J_a - J_b + 1}$	$l_{\min} =  J_a - J_b  + 1,$ išskyrus $J_a$ arba $J_b = 0$	$l_{\min} =  J_a - J_b $
(B) $J_a = J_b \neq 0$		
Būsenų lyginumai	Elektrinė spinduliuotė	Magnetinė spinduliuotė
$\Pi_a = \Pi_b$	$l_{\min} = 2,$ išskyrus $J_a = J_b = 1/2$	$l_{\min} = 1$
$\Pi_a = -\Pi_b$	$l_{\min} = 1$	$l_{\min} = 2,$ išskyrus $J_a = J_b = 1/2$



(a)



(b)

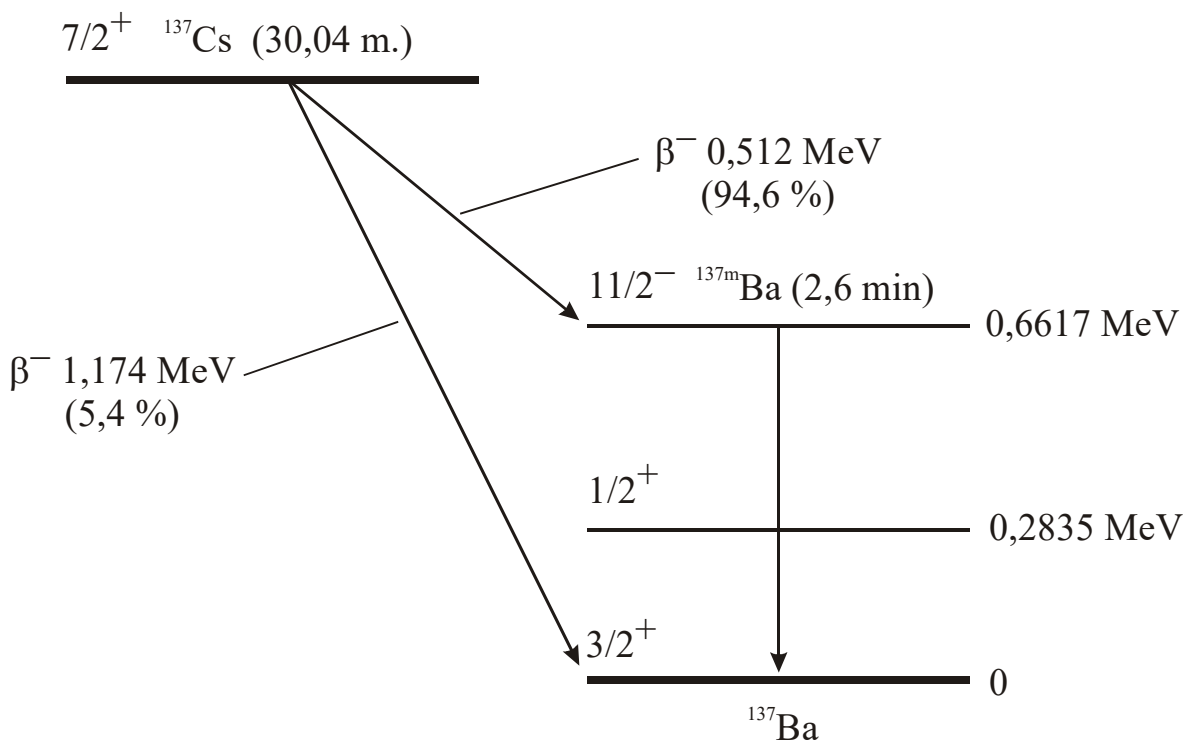
**8.3.2 pav.** (a) Elektrinis dipolinis momentas, kurį sudaro teigiamas ir neigiamas krūviai, atskirti atstumu  $r$ . Elektrinis dipolinis momentas lygus  $qr$ . (b) Magnetinis dipolinis momentas, kurį sukuria apskrita orbita judantis krūvis  $q$ . Magnetinis dipolinis momentas lygus  $\frac{1}{2} q r \times v$ . Dėl krūvininkų virpamojo judėjimo (a) atveju atsiranda elektrinė dipolinė spinduliuotė, o dėl kintamosios elektros srovės (b) atveju atsiranda magnetinė dipolinė spinduliuotė.

## Elektriniai ir magnetiniai kvantiniai šuoliai

Spinduliuojamieji kvantiniai šuoliai skirstomi į *elektrinius* ir *magnetinius*, priklausomai nuo jų metu atsirandančios (arba sugeriamos) spinduliuotės tipo (žr. (8.3.9)). Kadangi kiekvieną kvantinį šuolį atitinka apibrėžta daugiapoliškumo eilė  $l$  (t. y. fotono impulso momento kvantinis skaičius), tai kvantinių šuolių žymėjimuose  $l$  vertė nurodoma po raidės „E“ arba „M“, pvz., „E1“, „M2“ ir t. t. Toliau yra pavyzdys, kuriame išvardyti visų galimų bario-137 ( $^{137}\text{Ba}$ ) branduolio savaiminių kvantinių šuolių tipai, kai pradinė būseną atitinka antrąjį sužadintąjį energijos lygmenį, o galutinė būseną atitinka pagrindinį energijos lygmenį (šis kvantinis šuolis parodytas vertikaliaja rodykle energijos lygmenų diagramoje 8.3.3 pav.). Šiuo atveju  $J_a = 11/2$ ,  $J_b = 3/2$ ,  $\Pi_a = -\Pi_b$ . Pagal (8.3.3b) galimos šuolio eilės yra  $l = 4, 5, 6, 7$ . Kadangi  $\Pi_a = -\Pi_b$ , tai pagal (8.3.10) atsiranda tik nelyginė spinduliuotė. Todėl, pagal (8.3.9), kai  $l$  yra lyginis, tada kvantinis šuolis yra magnetinis, o kai  $l$  yra nelyginis, tada kvantinis šuolis yra elektrinis (nes tik taip yra užtikrinama, kad spinduliuotė visada būtų nelyginė). Vadinasi, šiame pavyzdyje visi galimi kvantinių šuolių tipai yra šie:

M4, E5, M6, E7.

Intensyviausias yra mažiausios eilės šuolis (šiuo pavyzdyje – M4 šuolis).



**8.3.3 pav.**  $^{137}\text{Cs}$  skilimo schema. Schemoje pateikti pusamžiai, didžiausios  $\beta$  dalelių energijos,  $\beta$  skilimo kanalų tikimybės,  $^{137}\text{Ba}$  branduolio mažiausios energijos vertės ir intensyviausias kvantinis šuolis tarp  $^{137}\text{Ba}$  energijos lygmenų. Antroji sužadintoji  $^{137}\text{Ba}$  branduolio būseną yra metastabilioji (todėl žymėjime „ $^{137m}\text{Ba}$ “ yra įterpta raidė „m“).

Kiekvienos rūšies kvantinio šuolio tikimybė per laiko vienetą ( $\lambda$ ) gali būti apytiksliai apskaičiuota (didumo eilės tikslumu) klasikinės elektrodinamikos metodais, t. y. pagal Maksvelo lygtis (8.3.5a–c). Šie apskaičiavimai remiasi prielaida, kad spinduliuotės šaltinio (branduolio) matmenys ( $d$ ) yra daug mažesni už bangos ilgį, t. y.

$$kd \ll 1, \quad (8.3.11)$$

čia  $k$  yra spinduliuotės bangos skaičius:

$$k \equiv \omega / c. \quad (8.3.12)$$

Toliau yra pateikti galutiniai minėtų apskaičiavimų rezultatai.

*Savaiminio elektrinio šuolio tikimybė per sekundę:*

$$\begin{aligned} \lambda(E1) &= 1,0 \cdot 10^{14} A^{2/3} E^3, \\ \lambda(E2) &= 7,3 \cdot 10^7 A^{4/3} E^5, \\ \lambda(E3) &= 34 A^2 E^7, \\ \lambda(E4) &= 1,1 \cdot 10^{-5} A^{8/3} E^9, \\ \lambda(E5) &= 2,4 \cdot 10^{-12} A^{10/3} E^{11}, \\ \lambda(E6) &= 4,0 \cdot 10^{-19} A^4 E^{13}, \end{aligned} \quad (8.3.13)$$

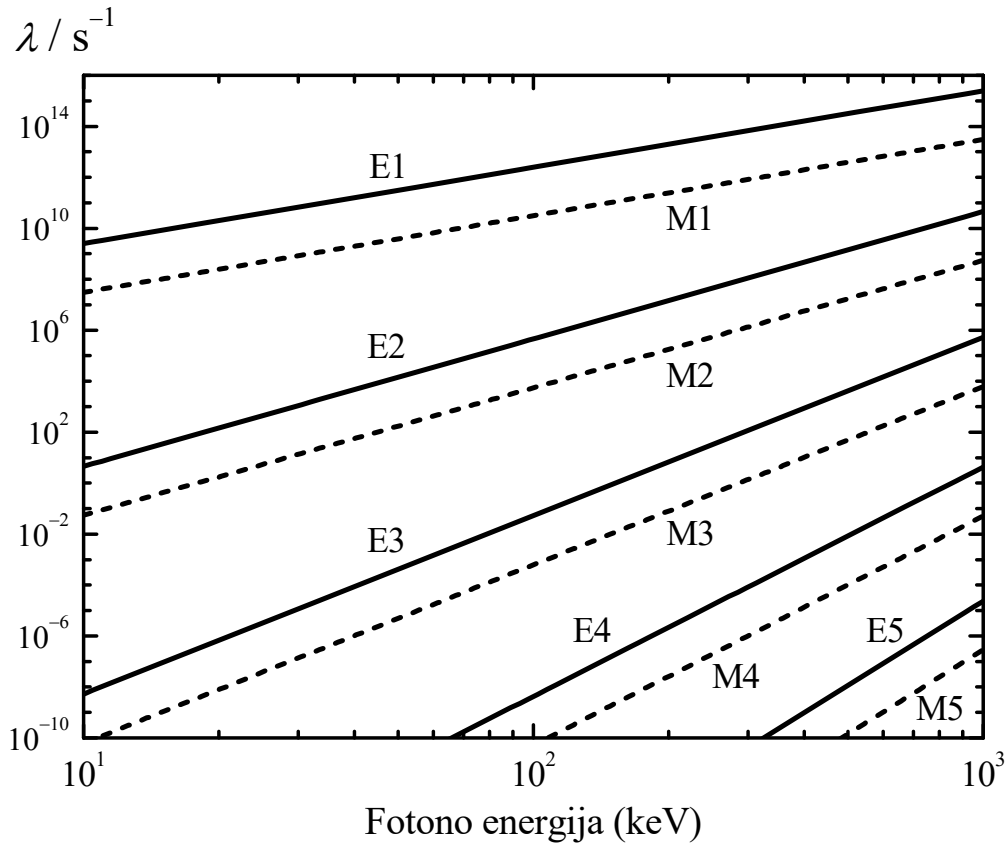
čia  $A$  yra branduolio masės skaičius, o  $E$  yra šuolio energija (MeV).

*Savaiminio magnetinio šuolio tikimybė per sekundę:*

$$\begin{aligned} \lambda(M1) &= 3,1 \cdot 10^{13} E^3, \\ \lambda(M2) &= 2,2 \cdot 10^7 A^{2/3} E^5, \\ \lambda(M3) &= 10 A^{4/3} E^7, \\ \lambda(M4) &= 3,3 \cdot 10^{-6} A^2 E^9, \\ \lambda(M5) &= 7,4 \cdot 10^{-13} A^{8/3} E^{11}, \\ \lambda(M6) &= 1,2 \cdot 10^{-19} A^{10/3} E^{13}, \end{aligned} \quad (8.3.14)$$

čia  $A$  yra branduolio masės skaičius, o  $E$  yra šuolio energija (MeV).

(8.3.13) ir (8.3.14) formulės nusako *spinduliuojamųjų* kvantinių šuolių tikimybes. Tos formulės netinka apskaičiuojant *pilnutines* šuolių tikimybes, nes yra galima ir vidinė konversija. Be to, kadangi šios formulės buvo išvestos remiantis prielaida (8.3.11), tai jos tinka tik tada, kai fotono energija yra MeV eilės arba mažesnė. Tada, kaip akivaizdu iš (8.3.13–14) formulių, kvantinio šuolio tikimybė sparčiai mažėja didėjant šuolio eilei, ir, be to, vidutinių ir sunkiųjų branduolių atveju ( $A > 50$ ) elektrinio kvantinio šuolio tikimybė yra dviem didumo eilėmis didesnė negu tos pačios eilės ir tos pačios energijos magnetinio kvantinio šuolio tikimybė (tačiau, kaip minėta, vienodos eilės elektriniai ir magnetiniai šuoliai negalimi, jeigu yra kalbama apie kvantinius šuolis tarp dviejų konkrečių energijos lygmenų). Šiuos dėsningumus iliustruoja 8.3.4 pav.



**8.3.4 pav.** Teorinės daugiapolio kvantinio šuolio tikimybės per sekundę priklausomybės nuo šuolio energijos įvairių eilių elektriniams (E) ir magnetiniams (M) šuoliams, kai branduolio masės skaičius ( $A$ ) lygus 125. Šie rezultatai buvo gauti pagal (8.3.13) ir (8.3.14) formules.

Branduolių gama spinduliavimo dėsningumų apibendrinimas:

1. Daugiapolių atrankos taisyklės (8.3.3b–d):

$$\text{kai } J_a \neq J_b: |J_a - J_b| \leq l \leq J_a + J_b,$$

$$\text{kai } J_a = J_b: 1 \leq l \leq J_a + J_b,$$

$$m = m_{J_a} - m_{J_b},$$

$$-l \leq m \leq l.$$

2. „Lyginumo atrankos taisyklė“ (8.3.10): jeigu šuolio metu branduolio būsenos lyginumas nepakinta, tada šuolyje gali atsirasti arba būti sugerama tik lyginė daugiapolė spinduliuotė (t. y. nelyginiam  $l$  yra galimas tik  $Ml$  šuolis, o lyginiam  $l$  yra galimas tik  $El$  šuolis), o jeigu šuolio metu būsenos lyginumas pakinta, tada šuolyje gali atsirasti arba būti sugerama tik nelyginė daugiapolė spinduliuotė (t. y. nelyginiam  $l$  yra galimas tik  $El$  šuolis, o lyginiam  $l$  yra galimas tik  $Ml$  šuolis).

3. Dažniausiai vyrauja šuoliai, kurių daugiapoliškumo eilė yra lygi mažiausiai leidžiamajai vertei ( $l_{\min}$ ).

4. Vidutiniams ir sunkiesiems branduoliams ( $A > 50$ ) elektrinių kvantinių šuolių tikimybė yra maždaug  $10^2$  kartų didesnė už tos pačios daugiapoliškumo eilės ir energijos magnetinių šuolių tikimybę (tačiau pagal lyginumo atrankos taisyklę duotosios eilės šuolis tarp duotųjų dviejų kvantinių būsenų gali būti tik elektrinis arba tik magnetinis).

5.  $l+1$ -osios eilės daugiapolio šuolio tikimybė yra maždaug  $10^5$  kartų mažesnė už  $l$ -tosios eilės daugiapolio šuolio tikimybę.
6. Sujungus taisykles Nr. 4 ir Nr. 5, gaunami tokie apytiksliai šuolių tikimybių santykiai (čia  $l' = l + 1$ ):

$$\frac{\lambda(E'l')}{\lambda(Ml)} = \frac{\lambda(E'l')}{\lambda(El)} \cdot \frac{\lambda(El)}{\lambda(Ml)} \approx 10^{-5} \times 10^2 \approx 10^{-3}, \quad (8.3.15a)$$

$$\frac{\lambda(M'l')}{\lambda(El)} = \frac{\lambda(M'l')}{\lambda(Ml)} \cdot \frac{\lambda(Ml)}{\lambda(El)} \approx 10^{-5} \times 10^{-2} \approx 10^{-7}. \quad (8.3.15b)$$

Egzistuoja sužadintieji nuklidai, kurių vidutinė gyvavimo trukmė yra neįprastai ilga (didesnė už  $10^{-10}$  s; gali siekti net kelias valandas arba ilgiau). Tokios ilgaamžės sužadintosios būsenos vadinamos **metastabiliosiomis būsenomis**. Iš anksčiau suformuluotų taisyklių išplaukia, kad metastabiliosios būsenos egzistavimo sąlyga – tai didelė  $l_{\min}$  vertė ir maža šuolio energija. Be to, būsenos gyvavimo trukmė duotojo šuolio atžvilgiu priklauso ir nuo to šuolio rūšies (elektrinis ar magnetinis).

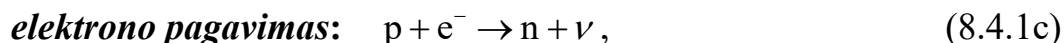
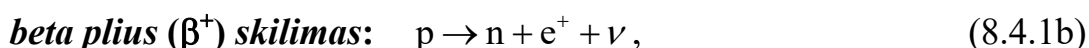
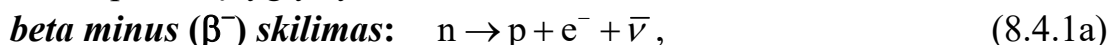
## 8.4. Beta skilimas

### *Bendrosios beta skilimo savybės*

**Beta skilimo** metu vienas iš branduolyje esančių neutronų savaime virsta protonu arba atvirkščiai. Pirmuoju atveju iš branduolio išlekia elektronas, o antruoju atveju – pozitronas (elektrono antidalelė, t. y. „teigiamasis elektronas“). Be to, protonas gali savaime virsti neutronu dėl elektrono pagavimo į branduolį (šiuo atveju pozitronas neatsiranda).

Elektronai arba pozitronai, kurie išlekia iš branduolių beta skilimo metu, apibendrintai vadinami „beta dalelėmis“. Kitaip, negu alfa dalelių arba gama kvantų, beta dalelių spektras yra tolydus. Tačiau pilnutinė duotojo skilimo metu išsiskyrusi kinetinė energija („skilimo šiluma“) turi būti tiksliai apibrėžta ir lygi pirminio branduolio rimties energijos ir antrinio branduolio kartu su emituotomis dalelėmis pilnutinės rimties energijos skirtumui (energijos tvermės dėsnis). Tai rodo, kad dalį kinetinės energijos nusineša kita dalelė. Ta dalelė buvo pavadinta „neutrinu“. Neutrino egzistavimą 1930 m. postulavo austrų fizikas Wolfgangas Paulis (*Pauli*).

Visų trijų beta skilimo procesų lygtys yra tokios:



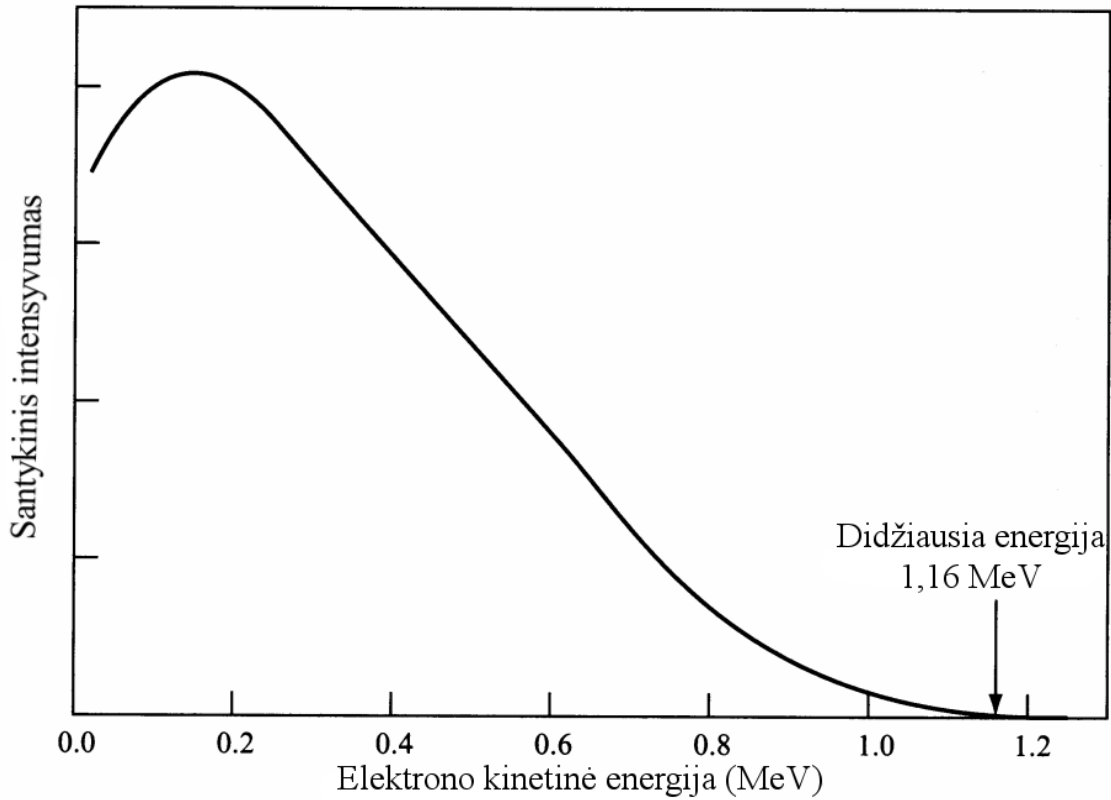
čia vartojami šie žymėjimai:  $n$  – neutronas,  $p$  – protonas,  $e^-$  – elektronas,  $e^+$  – pozitronas,  $\nu$  – neutrinai,  $\bar{\nu}$  – antineutrinai (neutrino antidalelė).

Vykstant  $\beta^-$  arba  $\beta^+$  skilimui, pilnutinės išsiskyrusios kinetinės energijos pasidalijimas tarp beta dalelės ir neutrino (antineutrino) yra atsitiktinis. Pvz., beveik visa energija gali „atitekti“ beta dalelei. Tada neutrinai (antineutrinai) turi beveik nulinę kinetinę energiją. Gali būti ir atvirkščiai: beveik visą skilimo šilumą gali „nusinešti“ neutrinai. Bet kuriuo atveju abiejų išlėkusių dalelių kinetinių energijų suma yra apytiksliai pastovi ir lygi skilimo šilumai („apytiksliai“, nes maža tos energijos dalis virsta antrinio branduolio atitransformacijos energija).

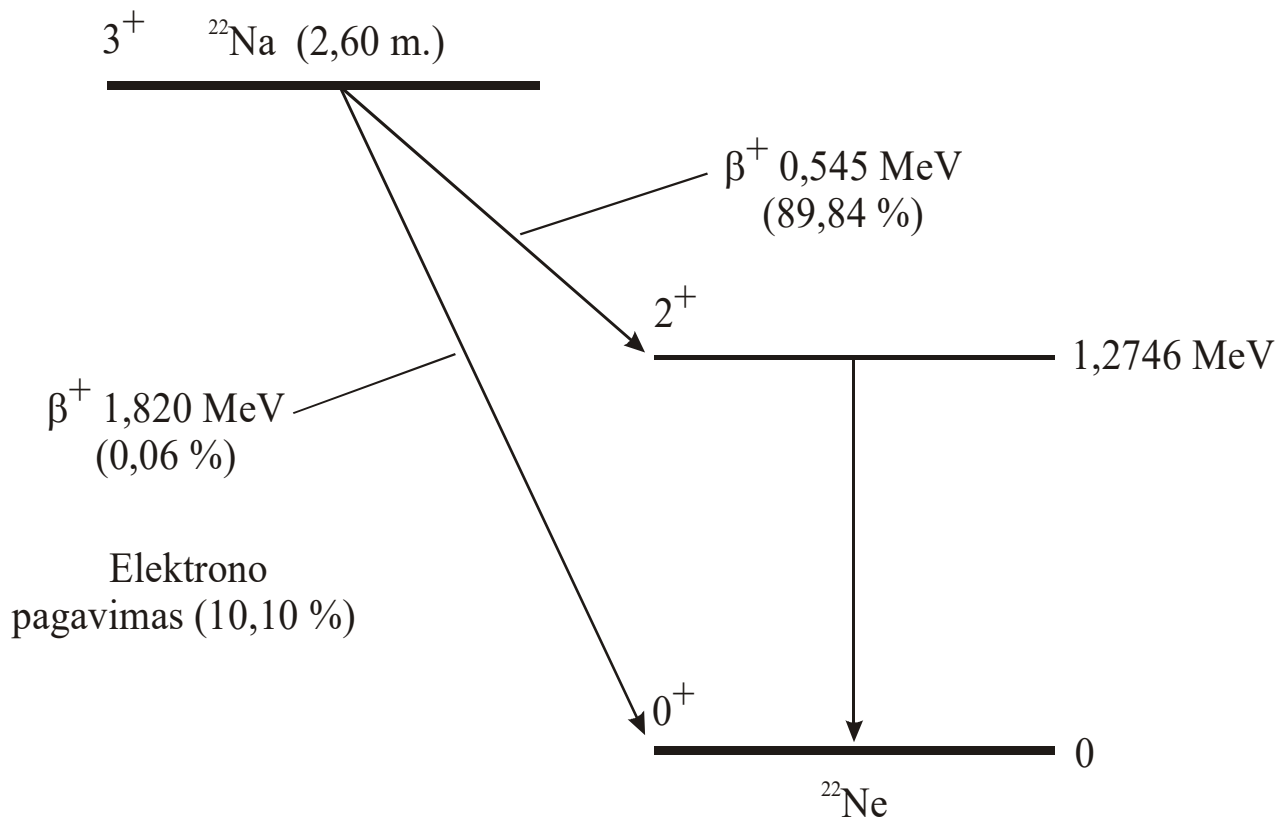
Visais trim atvejais (8.4.1a–c) sistemos elektros krūvis nepakinta: pilnutinis elektros krūvis prieš skilimą yra lygus pilnutiniam elektros krūviui po skilimo (elektros krūvio tvermės dėsnis). Tai reiškia, kad  $\beta^-$  skilimo atveju branduolio krūvio skaičius (t. y. cheminio elemento atominis numeris) padidėja vienetu, o  $\beta^+$  skilimo atveju branduolio krūvio skaičius sumažėja vienetu. Masės skaičius nesikeičia. Pavyzdžiai:  ${}^{137}_{55}\text{Cs} \rightarrow {}^{137}_{56}\text{Ba} + e^- + \bar{\nu}$ ,  ${}^{22}_{11}\text{Na} \rightarrow {}^{22}_{10}\text{Ne} + e^+ + \nu$ .

Neutrinai yra elementarioji dalelė, kuri neturi elektros krūvio ir kurios rimties masė daug mažesnė negu elektrono (manoma, kad neutrino masė yra  $\sim 0.1 \text{ eV}/c^2$  eilės, t. y.  $\sim 10^6$  kartų mažesnė negu elektrono). Apskaičiuojant dažniausiai galima nepaisyti neutrino rimties masės, t. y. galima tarti, kad ji lygi nuliui. Neutrinai labai silpnai sąveikauja su materija, todėl jų energija yra „nematoma“ (tuo aiškinamas neutrino pavadinimas: išvertus iš italų kalbos, jis reiškia „mažasis neutronas“). Kadangi neutrinus labai sunku detektuoti, jų egzistavimas buvo eksperimentiškai patvirtintas tik 1956 m. (praėjus daugiau kaip 20 m. po to, kai jis buvo įrodytas teoriškai), naudojant branduolinių reaktorių. Nors prie Žemės į vieną kvadratinį centimetrą per 1 s krinta maždaug  $7 \cdot 10^{10}$  neutrino, kuriuos skleidžia Saulė ir kurių vidutinė energija yra  $\sim 100 \text{ keV}$  eilės, pirmasis gamtinis neutrinai buvo detektuoti tik 1965 m., atliekant matavimus 3 km gylyje po žeme (kad būtų mažesnė kitų rūšių kosminės spinduliuotės įtaka).

Beta skilimas vyksta dėl nukleonų silpnosios sąveikos. Palyginimas: alfa skilimas vyksta dėl stipriosios sąveikos, o gama spinduliavimas atsiranda dėl elektromagnetinės sąveikos (žr. [12.1 skirsnis](#)).



8.4.1 pav. Elektronų, kuriuos emituoja bismuto izotopas  $^{210}_{83}\text{Bi}$ , kinetinės energijos pasiskirstymas



8.4.2 pav.  $^{22}\text{Na}$  skilimo schema. Schemoje parodyti pusėjimo trukmė, didžiausios  $\beta$  dalelių energijos, atitinkamų  $\beta$  skilimų tikimybės ir kvantinis šuolis tarp  $^{22}\text{Ne}$  lygmenų

### Beta dalelių spektras

Kaip ir gama spinduliavimas (žr. [8.3 skirsnis](#)), branduolio beta skilimas – tai tam tikros rūšies kvantinio šuolio pasekmė. Nuo gama spinduliavimo jis skiriasi tuo, kad keičiasi ne tik energija, bet ir nukleono rūšis (neutronas virsta protonu arba atvirkščiai). Taigi, aprašant beta skilimą, protoną ir neutroną reikia laikyti vienos dalelės – nukleono – dviem skirtingomis būsenomis, tarp kurių gali vykti kvantiniai šuoliai.

Apskaičiuojant beta dalelių energijos spektrą, reikia naudoti bendrąją kvantinio šuolio tikimybės per laiko vienetą išraišką:

$$\lambda = \frac{2\pi}{\hbar} |H_{21}|^2 \rho(E_0). \quad (8.4.2)$$

Čia  $H_{21}$  yra trikdžio (silpnosios sąveikos hamiltoniano  $H$ ) **matricos elementas**, atitinkantis šuolį iš pradinės būsenos „1“ į galutinę būseną „2“:

$$H_{21} \equiv \int \psi_2^* H \psi_1 dV. \quad (8.4.3)$$

$\rho$  yra energinis būsenų tankis (žr. [2.3 skirsnis](#)), atitinkantis pilnutinę išsiskyrusią energiją  $E_0$ , t. y. kvantinių būsenų skaičius ( $n$ ), atitinkantis vienetinį energijos intervalą:

$$\rho(E_0) \equiv \left. \frac{dn}{dE} \right|_{E=E_0}. \quad (8.4.4)$$

$E_0$  yra abiejų lengvųjų dalelių – beta dalelės (toliau – „elektrono“) ir neutrino arba antineutrino (toliau – „neutrino“) – suminė *reliatyvistinė* energija, t. y. jų suminės kinetinės energijos  $T_0$  ir elektrono rimties energijos suma:

$$E_0 = T_0 + m_e c^2, \quad (8.4.5)$$

čia  $m_e$  yra elektrono rimties masė, o  $c$  yra šviesos greitis. Pradinio branduolio kvantinių skaičių rinkinį žymėsime  $a$ . Tada

$$\psi_1 \equiv \psi_a. \quad (8.4.6)$$

Galutinėje būsenoje atsiranda dar dvi lengvosios dalelės. Todėl

$$\psi_2 = [\psi_b \psi_e \psi_\nu]. \quad (8.4.7)$$

čia  $b$  yra antrinio branduolio būsenos kvantiniai skaičiai, o laužtiniai skliaustai žymi tam tikrą nurodytų banginių funkcijų sandaugų tiesinį darinį. Kadangi elektronas ir neutrinas yra laisvi, tai apskaičiavimai atliekami taikant periodines kraštines sąlygas ([2.3.12](#)), o ([8.4.3](#)) reiškinyje integruojama normavimo tūryje (pvz., kubo, kurio sienas atitinka kraštinės sąlygos ([2.3.12](#)), viduje). Tada elektrono ir neutrino banginės funkcijos yra išreiškiamos ([2.3.16](#)) formule:

$$\psi_e(\mathbf{r}_e) = \frac{1}{\sqrt{V}} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \mathbf{p} \cdot \mathbf{r}_e\right), \quad \psi_\nu(\mathbf{r}_\nu) = \frac{1}{\sqrt{V}} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_\nu\right), \quad (8.4.8)$$

čia  $\mathbf{p}$  ir  $\mathbf{q}$  yra atitinkamai elektrono ir neutrino impulso vektoriai, o  $\mathbf{r}_e$  ir  $\mathbf{r}_\nu$  yra atitinkami spinduliai vektoriai. Todėl į integralo ([8.4.3](#)) pointegralinę funkciją įeina daugiklis

$$\exp\left(\frac{i}{\hbar} \mathbf{p} \cdot \mathbf{r}_e\right) \exp\left(\frac{i}{\hbar} \mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_\nu\right) \equiv \exp\left(\frac{i}{\hbar} \mathbf{P} \cdot \mathbf{r}\right), \quad (8.4.9)$$

$$\mathbf{P} \equiv \mathbf{p} + \mathbf{q}. \quad (8.4.10)$$

Kadangi branduolio viduje dažniausiai galioja nelygybė

$$|\mathbf{r}| |\mathbf{P}| / \hbar \ll 1, \quad (8.4.11)$$

kompleksinę eksponentę ([8.4.9](#)) galima aproksimuoti kelių pirmųjų Teiloro eilutės dėmenų suma:

$$\exp\left(\frac{i}{\hbar} \mathbf{P} \cdot \mathbf{r}\right) = 1 + \frac{i(\mathbf{P} \cdot \mathbf{r})}{\hbar} + \dots \quad (8.4.12)$$



Normavimo tūrį  $V$  (t. y. integravimo tūrį (8.4.3) reiškinyje) galima pasirinkti taip, kad (8.4.11–12) galiotų ne tik branduolio viduje, bet ir visame integravimo tūryje  $V$ . Tarus, kad

$$\exp\left(\frac{i}{\hbar} \mathbf{P} \cdot \mathbf{r}\right) \approx 1 \quad (8.4.13)$$

(t. y. palikus tik nulinio laipsnio dėmenį Teiloro eilutėje (8.4.12)),

$$\psi_2 \approx \psi_b / V. \quad (8.4.14)$$

Čia dalyba iš tūrio  $V$  atsiranda todėl, kad į visos sistemos galutinės banginės funkcijos išraišką (8.4.7) įeina elektrono ir neutrino banginių funkcijų (8.4.8) sandauga (tuo pačiu – ir jų normavimo daugiklių sandauga, kuri yra lygi  $1/V$ ). (8.4.6) ir (8.4.14) → (8.4.3):

$$H_{21} \approx \frac{1}{V} \int \psi_b^* H \psi_a dV \equiv \frac{M_{ba}}{V}. \quad (8.4.15)$$

Čia  $M_{ba}$  yra **branduolio matricos elementas**, kuris nepriklauso nuo  $\mathbf{p}$  ir  $\mathbf{q}$ :

$$M_{ba} = \int \psi_b^* H \psi_a dV. \quad (8.4.16)$$

(8.4.15) artinyje elektronų spektro pavidalą lemia būsenų tankio  $\rho(E_0)$  pavidalas, nes visi daugikliai prieš  $\rho(E_0)$  (8.4.2) reiškinyje yra konstantos.

Kadangi yra dvi laisvosios dalelės, tai apskaičiuojant visos sistemos būsenų tankį (8.4.4), reikia žinoti kiekvienos iš tų dviejų dalelių būsenų tankį, kurį išreiškia (2.3.15) formulė. Elektrono būsenų skaičius nykstamajame  $p$  verčių intervale  $dp$  yra lygus

$$dn_e = V \frac{4\pi p^2 dp}{h^3}, \quad (8.4.17a)$$

neutrino būsenų skaičius nykstamajame  $q$  verčių intervale  $dq$  yra lygus

$$dn_\nu = V \frac{4\pi q^2 dq}{h^3}, \quad (8.4.17b)$$

o atitinkamas visos sistemos būsenų skaičius yra lygus

$$d^2n = dn_e dn_\nu = V^2 \frac{(4\pi)^2 p^2 dp q^2 dq}{h^6}. \quad (8.4.17c)$$

Jeigu nepaisoma antrinio branduolio atatrunkos energijos (kuri yra labai maža), tada

$$E_0 = E_e + E_\nu. \quad (8.4.18)$$

Pagal specialiąją reliatyvumo teoriją neutrino pilnutinė reliatyvistinė energija lygi

$$E_\nu = \sqrt{m_\nu^2 c^4 + q^2 c^2} \approx qc, \quad (8.4.19)$$

nes neutrino rimties masė  $m_\nu$  yra praktiškai nulinė. (8.4.19) → (8.4.18):

$$E_0 = E_e + qc, \quad q = (E_0 - E_e)/c, \quad dq = dE_0/c. \quad (8.4.20)$$

Įrašius  $q$  ir  $dq$  išraiškas (8.4.20) į (8.4.17c) ir padalijus iš  $dE_0$ , gaunamas būsenų tankis (8.4.4), kuris pagal (8.4.2) yra tiesiog proporcingas skilimo konstantai:

$$\frac{d^2n}{dE_0} \sim p^2 (E_0 - E_e)^2 dp \sim d\lambda. \quad (8.4.21)$$

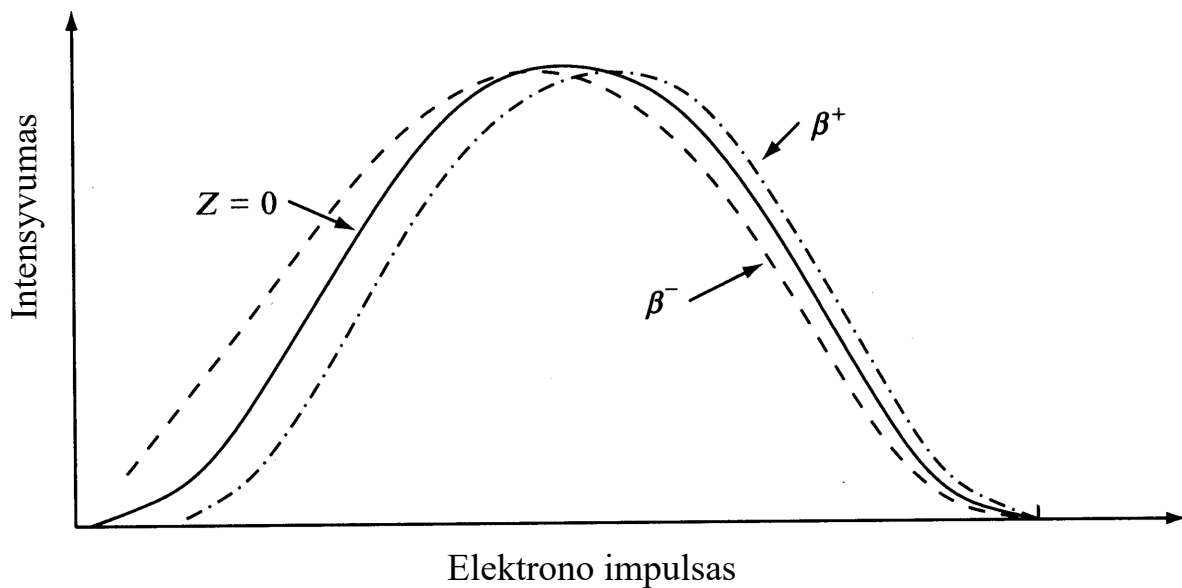
$$\frac{d\lambda}{dp} \sim p^2 (E_0 - E_e)^2. \quad (8.4.22)$$

$d\lambda$  yra skilimo konstanta, atitinkanti skilimus, kurių metu elektrono impulsas yra nuo  $p(E_e)$  iki  $p(E_e) + dp$ . T. y.  $d\lambda/dp$  proporcingas elektrono impulso skirstiniui („impulso spektrui“). Kai  $p$  mažas,  $d\lambda/dp$  priklausomybę nuo  $p$  (arba  $E_e$ ) lemia daugiklis  $p^2$ , todėl  $d\lambda/dp$  didėja augant  $p$ . Kai  $E_e$  yra artimas  $E_0$ ,  $d\lambda/dp$  priklausomybę nuo  $p$  (arba  $E_e$ ) lemia daugiklis  $(E_0 - E_e)^2$ , todėl  $d\lambda/dp$  mažėja augant  $p$ . Tai paaiškina bendrąjį beta dalelių spektro pavidalą (žr. 8.4.3 pav.).

Kulono sąveikos įtaką spektrui atspindi papildomas daugiklis – *Fermio funkcija*  $F(Z, E_e)$ , čia  $Z$  yra *antrinio* branduolio krūvio skaičius. Galutinė impulso spektro išraiška:

$$\frac{d\lambda}{dp} = C |M_{ba}|^2 F(Z, E_e) p^2 (E_0 - E_e)^2, \quad (8.4.23)$$

čia  $C$  yra konstanta.



**8.4.3 pav.** Beta dalelių judesio kiekio (impulso) spektras. Priklausomybė, kuri pavaizduota ištisine linija, apskaičiuota nepaisant Kulono sąveikos tarp antrinio branduolio ir beta dalelės ((8.4.22) formulė). Vykstant  $\beta^-$  skilimui, Kulono trauka tarp antrinio branduolio ir elektrono padidina mažų energijų elektronų skaičių ir sumažina didelių energijų elektronų skaičių (punktyrinė linija). Vykstant  $\beta^+$  skilimui, Kulono stūma tarp antrinio branduolio ir pozitrono sumažina mažų energijų pozitronų skaičių ir padidina didelių energijų pozitronų skaičių (punktyrinė-taškinė linija).

### 8.5. Skilimų grandinės. Radioaktyviosios šeimos

Antrinis branduolys, kuris susidaro skylant pirminiam branduoliui dažnai pats būna radioaktyvus. Jo skilimo produktas taip pat gali būti radioaktyvus ir t. t. Tokia radioaktyviųjų skilimų seka vadinama **skilimų grandine**. Tarkime, yra duota skilimų grandinė  $A \rightarrow B \rightarrow C \rightarrow \dots$ , kurios narių skilimo konstantos yra  $\lambda_A, \lambda_B, \lambda_C$  ir t. t. Kadangi nuklido A branduolių skaičius nėra papildomas, jis mažėja laike eksponentiškai pagal (8.1.2):

$$N_A(t) = N_A(0)e^{-\lambda_A t}. \quad (8.5.1)$$

Kadangi nuklido B branduoliai ne tik skyla, bet ir atsiranda (dėl pirminio nuklido A skilimo), tai diferencialinė lygtis, kuri nusako nuklido B branduolių skaičiaus kitimą laike, turi papildomą dėmenį, kuris atspindi nuklido A skilimą:

$$\frac{dN_B}{dt} = -\lambda_B N_B + \lambda_A N_A \quad (8.5.2)$$

(plg. su (8.1.1)). Sprendimas: perkeliame (8.5.2) lygties dešinėsios pusės pirmąjį dėmenį į kairiąją pusę ir padauginame abi lygybės puses iš  $e^{\lambda_B t}$ . Tada kairiojoje lygybės pusėje gauname sandaugos  $N_B e^{\lambda_B t}$  išvestinę laiko atžvilgiu:

$$\frac{d}{dt}(N_B e^{\lambda_B t}) = \lambda_A N_A e^{\lambda_B t}. \quad (8.5.3)$$

(8.5.1)  $\rightarrow$  (8.5.3):

$$\frac{d}{dt}(N_B e^{\lambda_B t}) = \lambda_A N_A(0) e^{(\lambda_B - \lambda_A)t}. \quad (8.5.4)$$

(8.5.4) integralas:

$$N_B e^{\lambda_B t} = \lambda_A N_A(0) \int e^{(\lambda_B - \lambda_A)t} dt = \frac{\lambda_A}{\lambda_B - \lambda_A} N_A(0) e^{(\lambda_B - \lambda_A)t} + K, \quad (8.5.5)$$

čia  $K$  yra integravimo konstanta, kuri priklauso nuo pradinių sąlygų. Jeigu pradiniu laiko momentu ( $t = 0$ ) nuklido B nebuvo ( $N_B(0) = 0$ ), tada iš (8.5.5) išplaukia, kad

$$K = -\frac{\lambda_A}{\lambda_B - \lambda_A} N_A(0). \quad (8.5.6)$$

(8.5.6)  $\rightarrow$  (8.5.5):

$$N_B(t) = \frac{\lambda_A}{\lambda_B - \lambda_A} N_A(0) (e^{-\lambda_A t} - e^{-\lambda_B t}). \quad (8.5.7)$$

Lygtys, kurios analogiškos (8.5.3) lygčiai, nusako ir vėlesniųjų grandinės narių kiekio priklausomybę nuo laiko. 8.5.1 pav. parodyta nuklidų A, B ir C branduolių skaičiaus priklausomybė nuo laiko, kai  $\lambda_A = \lambda_B = \lambda$ , o C yra stabilusis nuklidas.

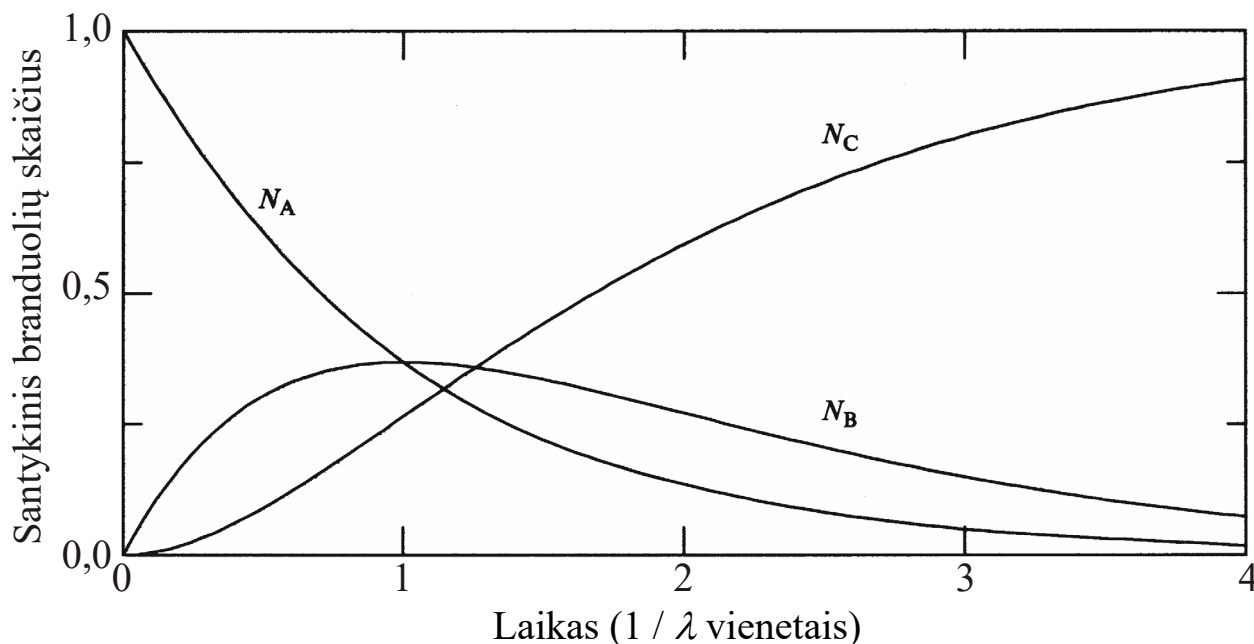
Jeigu  $\lambda_A \gg \lambda_B$ , tada branduoliai skyla dviem etapais: visų pirma – palyginti greitas skilimas  $A \rightarrow B$ , o paskui lėtas skilimas  $B \rightarrow C$ . Tada, jeigu  $t \gg 1 / \lambda_A$ , iš (8.5.7) išplaukia, kad

$$N_B(t) \approx N_A(0) e^{-\lambda_B t}. \quad (8.5.8)$$

Jeigu  $\lambda_A < \lambda_B$ , tada  $N_B$  iš pradžių didėja ir po pakankamai ilgo laiko (kad galėtų  $e^{-\lambda_A t} \gg e^{-\lambda_B t}$ )

$$N_B(t) \approx \frac{\lambda_A}{\lambda_B - \lambda_A} N_A(0) e^{-\lambda_A t} \equiv \frac{\lambda_A}{\lambda_B - \lambda_A} N_A(t) \quad (8.5.9)$$

(kuo ilgesnis  $t$ , tuo tikslesnė ši apytikslė lygybė). Vadinasi, jeigu pirminis nuklidas yra ilgaamžiškesnis už antrinį ( $\lambda_A < \lambda_B$ , t. y.  $T_A > T_B$ ), tada per tam tikrą laiką nusistovi vadinamoji **radioaktyvioji pusiausvyra**: abiejų nuklidų kiekių *santykis* yra pastovus ir lygus



**8.5.1 pav.** Nuklidų A, B ir C kiekių kitimas laike skilimų grandinėje  $A \rightarrow B \rightarrow C$ , kai  $\lambda_A = \lambda_B = \lambda$ , o nuklidas C yra stabilus. Visais laiko momentais galioja lygybė  $N_A + N_B + N_C = 1$

$$\frac{N_B}{N_A} = \frac{\lambda_A}{\lambda_B - \lambda_A}. \quad (8.5.10)$$

Jeigu  $\lambda_A \ll \lambda_B$  (t. y.  $T_A \gg T_B$ ), tada

$$\frac{N_B}{N_A} \approx \frac{\lambda_A}{\lambda_B} = \frac{T_B}{T_A}, \quad (8.5.11)$$

čia  $T_A$  ir  $T_B$  yra nuklidų A ir B skilimo pusamžiai. (8.5.11) lygybę galima užrašyti šitaip:

$$\lambda_A N_A \approx \lambda_B N_B. \quad (8.5.12)$$

Pagal (8.1.7) formulę sandaugos  $\lambda_A N_A$  ir  $\lambda_B N_B$  yra atitinkamai nuklidų A ir B aktyvumai:

$$\Phi_A \approx \Phi_B. \quad (8.5.13)$$

Vadinasi, jeigu pirminio nuklido skilimo pusamžis yra daug didesnis už visų nestabiliųjų antrinių nuklidų skilimo pusamžius, tada radioaktyviosios pusiausvyros sąlygą galima suformuluoti šitaip: *esant radioaktyviajai pusiausvyrai, visų duotosios skilimo grandinės radioaktyviųjų nuklidų aktyvumas yra vienodas.*

$\alpha$  skilimo atveju branduolio masės skaičiais pokytis lygus  $-4$ , o beta  $\beta$  skilimo atveju masės skaičius nepakinta. Todėl, jeigu vyksta tik  $\alpha$  ir  $\beta$  skilimai, tada, išreiškus branduolių masės skaičius reiškiniu  $A = 4n + k$ , dėmuo  $k$  bus vienodas visiems duotosios skilimų grandinės nariams (jo galimosios vertės yra  $k = 0, 1, 2, 3$ ). Atitinkamai, visus nuklidus, kurie susidaro skylant Žemės plutoje esantiems ilgaamžiams radioaktyviems nuklidams, galima suskirstyti į 4 klases, kurios vadinamos **radioaktyviosiomis šeimomis**. Kiekvienos skilimų grandinės visi nariai priklauso vienai iš tų keturių šeimų. Radioaktyviosios šeimos pradininku susitarta laikyti ilgaamžiškiausią iš radioaktyviųjų nuklidų, kurie priklauso tai šeimai (nors tas nuklidas pats gali būti kitų nuklidų skilimo produktas). Natūraliomis sąlygomis aptinkamos trys iš minėtųjų 4 radioaktyviųjų šeimų: **torio šeima** ( $A = 4n$ , pradininkas – torio izotopas  $^{232}\text{Th}$ ), **urano šeima** ( $A = 4n + 2$ , pradininkas – urano izotopas  $^{238}\text{U}$ ) ir **aktinio šeima** ( $A = 4n + 3$ ; pradininkas – urano izotopas  $^{235}\text{U}$ ). Šių trijų šeimų galutiniai nuklidai yra stabilieji švino izotopai (atitinkamai  $^{208}\text{Pb}$ ,  $^{206}\text{Pb}$  ir  $^{207}\text{Pb}$ ). Ketvirtoji šeima – **neptūnio šeima** ( $A = 4n + 1$ ; pradininkas – neptūnio

izotopas  $^{237}\text{Np}$ ) – natūraliomis sąlygomis nepasitaiko, nes visų jos narių pusamžiai yra daug mažesni už Žemės amžių (pvz.,  $^{237}\text{Np}$  pusamžis yra  $2,14 \cdot 10^6$  m.). Neptūnio šeimos galutiniu nuklidu galima laikyti bismuto izotopą  $^{209}\text{Bi}$ , nes jo skilimo pusamžis yra toks didelis, kad jį galima laikyti praktiškai stabiliu ( $^{209}\text{Bi}$  pusamžis yra maždaug  $2 \cdot 10^{19}$  m.). Pagrindiniai kiekvienos šeimos nuklidai yra išvardyti [8.5.1a–d lentelėse](#).

Jeigu pirminio nuklido skilimo pusamžis yra daug didesnis už visų antrinių radioaktyviųjų nuklidų (kurie priklauso tai pačiai skilimo grandinei) skilimo pusamžius, tada radioaktyviosios pusiausvyros sąlygomis [\(8.5.11\)](#) lygybė galioja *bet kuriems* dviems tos grandinės nuklidams (su sąlyga, kad nėra grandinės „išsišakojimų“, t. y. nėra galimi keli skilimo kanalai, arba vieno skilimo kanalo tikimybė yra daug didesnė negu visų kitų kanalų). Tokia situacija, pvz., stebima skilimų grandinėje, kurios pradininkas yra radžio izotopas  $^{226}\text{Ra}$ . Pastarojo nuklido skilimo pusamžis yra 1622 metai, o labiausiai ilgaamžio iš jo skilimo produktų (švino izotopo  $^{210}\text{Pb}$ ) skilimo pusamžis yra 22 metai (žr. [8.5.1b lentelė](#)).

**8.5.1a lentelė.** Torio šeima ( $A = 4n$ )

Nuklidas	Skilimo rūšis	Pusamžis	Skilimo energija (MeV)	Skilimo produktas
$^{232}\text{Th}$	$\alpha$	$1,405 \cdot 10^{10}$ m.	4,081	$^{228}\text{Ra}$
$^{228}\text{Ra}$	$\beta^-$	5,75 m.	0,046	$^{228}\text{Ac}$
$^{228}\text{Ac}$	$\beta^-$	6,25 h	2,124	$^{228}\text{Th}$
$^{228}\text{Th}$	$\alpha$	1,9116 m.	5,520	$^{224}\text{Ra}$
$^{224}\text{Ra}$	$\alpha$	3,6319 d.	5,789	$^{220}\text{Rn}$
$^{220}\text{Rn}$	$\alpha$	55,6 s	6,404	$^{216}\text{Po}$
$^{216}\text{Po}$	$\alpha$	0,145 s	6,906	$^{212}\text{Pb}$
$^{212}\text{Pb}$	$\beta^-$	10,64 h	0,570	$^{212}\text{Bi}$
$^{212}\text{Bi}$	$\beta^-$ (64,06 %)	60,55 min	2,252	$^{212}\text{Po}$
	$\alpha$ (35,94 %)		6,208	$^{208}\text{Tl}$
$^{212}\text{Po}$	$\alpha$	299 ns	8,955	$^{208}\text{Pb}$
$^{208}\text{Tl}$	$\beta^-$	3,053 min	4,999	$^{208}\text{Pb}$
$^{208}\text{Pb}$	–	stabilus	–	–

8.5.1b lentelē. Urano šeima ( $A = 4n + 2$ )

Nuklidas	Skilimo rūšis	Pusamžis	Skilimo enerģija (MeV)	Skilimo produkts
$^{238}\text{U}$	$\alpha$	$4,468 \cdot 10^9$ m.	4,270	$^{234}\text{Th}$
$^{234}\text{Th}$	$\beta^-$	24,10 d.	0,273	$^{234}\text{Pa}$
$^{234}\text{Pa}$	$\beta^-$	6,70 h	2,197	$^{234}\text{U}$
$^{234}\text{U}$	$\alpha$	245500 m.	4,859	$^{230}\text{Th}$
$^{230}\text{Th}$	$\alpha$	75380 m.	4,770	$^{226}\text{Ra}$
$^{226}\text{Ra}$	$\alpha$	1602 m.	4,871	$^{222}\text{Rn}$
$^{222}\text{Rn}$	$\alpha$	3,8235 d.	5,590	$^{218}\text{Po}$
$^{218}\text{Po}$	$\alpha$ (99,98 %) $\beta^-$ (0,02 %)	3,10 min	6,115 0,265	$^{214}\text{Pb}$ $^{218}\text{At}$
$^{214}\text{Pb}$	$\beta^-$	26,8 min	1,024	$^{214}\text{Bi}$
$^{218}\text{At}$	$\alpha$ (99,90 %) $\beta^-$ (0,10 %)	1,5 s	6,874 2,883	$^{214}\text{Bi}$ $^{218}\text{Rn}$
$^{218}\text{Rn}$	$\alpha$	35 ms	7,263	$^{214}\text{Po}$
$^{214}\text{Bi}$	$\beta^-$ (99,98 %) $\alpha$ (0,02 %)	19,9 min	3,272 5,617	$^{214}\text{Po}$ $^{210}\text{Tl}$
$^{214}\text{Po}$	$\alpha$	0,1643 ms	7,883	$^{210}\text{Pb}$
$^{210}\text{Tl}$	$\beta^-$	1,30 min	5,484	$^{210}\text{Pb}$
$^{210}\text{Pb}$	$\beta^-$	22,3 m.	0,064	$^{210}\text{Bi}$
$^{210}\text{Bi}$	$\beta^-$ (99,99987 %) $\alpha$ (0,00013 %)	5,013 d.	1,426 5,982	$^{210}\text{Po}$ $^{206}\text{Tl}$
$^{210}\text{Po}$	$\alpha$	138,376 d.	5,407	$^{206}\text{Pb}$
$^{206}\text{Tl}$	$\beta^-$	4,199 min	1,533	$^{206}\text{Pb}$
$^{206}\text{Pb}$	—	stabilus	—	—

8.5.1c lentelē. Aktinio šeima ( $A = 4n + 3$ )

Nuklidas	Skilimo rūšis	Pusamžis	Skilimo energija (MeV)	Skilimo produkta
$^{235}\text{U}$	$\alpha$	$7,04 \cdot 10^8$ m.	4,678	$^{231}\text{Th}$
$^{231}\text{Th}$	$\beta^-$	25,52 h	0,391	$^{231}\text{Pa}$
$^{231}\text{Pa}$	$\alpha$	32760 m.	5,150	$^{227}\text{Ac}$
$^{227}\text{Ac}$	$\beta^-$ (98,62 %) $\alpha$ (1,38 %)	21,772 m.	0,045 5,042	$^{227}\text{Th}$ $^{223}\text{Fr}$
$^{227}\text{Th}$	$\alpha$	18,68 d.	6,147	$^{223}\text{Ra}$
$^{223}\text{Fr}$	$\beta^-$	22,00 min	1,149	$^{223}\text{Ra}$
$^{223}\text{Ra}$	$\alpha$	11,43 d.	5,979	$^{219}\text{Rn}$
$^{219}\text{Rn}$	$\alpha$	3,96 s	6,946	$^{215}\text{Po}$
$^{215}\text{Po}$	$\alpha$ (99,99977 %) $\beta^-$ (0,00023 %)	1,781 ms	7,527 0,715	$^{211}\text{Pb}$ $^{215}\text{At}$
$^{215}\text{At}$	$\alpha$	0,1 ms	8,178	$^{211}\text{Bi}$
$^{211}\text{Pb}$	$\beta^-$	36,1 min	1,367	$^{211}\text{Bi}$
$^{211}\text{Bi}$	$\alpha$ (99,724 %) $\beta^-$ (0,276 %)	2,14 min	6,751 0,575	$^{207}\text{Tl}$ $^{211}\text{Po}$
$^{211}\text{Po}$	$\alpha$	516 ms	7,595	$^{207}\text{Pb}$
$^{207}\text{Tl}$	$\beta^-$	4,77 min	1,418	$^{207}\text{Pb}$
$^{207}\text{Pb}$	—	stabilus	—	—

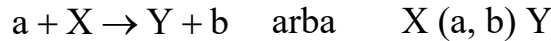
8.5.1d lentelē. Neptūnio šeima ( $A = 4n + 1$ )

Nuklidas	Skilimo rūšis	Pusamžis	Skilimo energija (MeV)	Skilimo produkta
$^{237}\text{Np}$	$\alpha$	$2,14 \cdot 10^6$ m.	4,959	$^{233}\text{Pa}$
$^{233}\text{Pa}$	$\beta^-$	27,0 d.	0,571	$^{233}\text{U}$
$^{233}\text{U}$	$\alpha$	$1,592 \cdot 10^5$ m.	4,909	$^{229}\text{Th}$
$^{229}\text{Th}$	$\alpha$	$7,54 \cdot 10^4$ m.	5,168	$^{225}\text{Ra}$
$^{225}\text{Ra}$	$\beta^-$	14,9 d.	0,36	$^{225}\text{Ac}$
$^{225}\text{Ac}$	$\alpha$	10,0 d.	5,935	$^{221}\text{Fr}$
$^{221}\text{Fr}$	$\alpha$	4,8 min	6,3	$^{217}\text{At}$
$^{217}\text{At}$	$\alpha$	32 ms	7,0	$^{213}\text{Bi}$
$^{213}\text{Bi}$	$\alpha$	45,6 min	5,87	$^{209}\text{Tl}$
$^{209}\text{Tl}$	$\beta^-$	2,2 min	3,99	$^{209}\text{Pb}$
$^{209}\text{Pb}$	$\beta^-$	3,25 h	0,644	$^{209}\text{Bi}$
$^{209}\text{Bi}$	$\alpha$	$1,9 \cdot 10^{19}$ m.	3,14	$^{205}\text{Tl}$
$^{205}\text{Tl}$	—	stabilus	—	—

## 9. Branduolinės reakcijos

### 9.1. Įvadas. Branduolinės reakcijos sąvoka

**Branduolinė reakcija** – tai yra bet koks branduolio virsmas dėl sąveikos su dalele.



Reakcijos energija (šiluma):  $Q = (m_a + m_x - m_b - m_y)c^2$ . (9.1.1)

Jeigu  $Q > 0$ , tada reakcija yra **egzoterminė**, o jeigu  $Q < 0$  – **endoterminė**.

### 9.2. Sąveikos skerspjūvio ir diferencialinio sąveikos skerspjūvio sąvokos

**Sąveikos skerspjūvis**  $\sigma$  – plotas, kuris parinktas taip, kad pataikymo į jį tikimybė ( $dP$ ) sutaptų su sąveikos tikimybe.

$$dP = dS' / S = \sigma n dx. \quad (9.2.1)$$

Kai yra kelios galimos susidūrimo pasekmės,

$$\sigma = \sum_i \sigma_i. \quad (9.2.2)$$

Kai yra kelių rūšių taikiniai,

$$\sigma = \sum_i p_i \sigma_i. \quad (9.2.3)$$

(čia  $p_i$  yra  $i$ -tosios rūšies taikinių santykinis kiekis).

Įprastinis matavimo vienetas – barnas.  $1 \text{ b} = 10^{-28} \text{ m}^2$ .

**Vidutinis laisvasis kelias:**

$$l = \frac{1}{\sigma n} \quad (9.2.4)$$

( $n$  yra taikinių koncentracija). Vidutinio laisvojo kelio išraiškos išvedimas: atstume  $x$  dalelė gali sąveikauti su  $N$  taikinių, esančių skerspjūvio ploto  $\sigma$  cilindre (9.2.2 pav.).

$$N = \sigma x n.$$

$$l = \frac{x}{N} = \frac{x}{\sigma x n} = \frac{1}{\sigma n}.$$

Jeigu yra keli sąveikos vyksmai,

$$\frac{1}{l} = \sum_i \frac{1}{l_i}. \quad (9.2.5)$$

**Makroskopinis skerspjūvis** – tai taikinio tūrio vienetą atitinkantis skerspjūvis:

$$\Sigma = \frac{dP}{dx} = \sigma n = \frac{1}{l}. \quad (9.2.6)$$

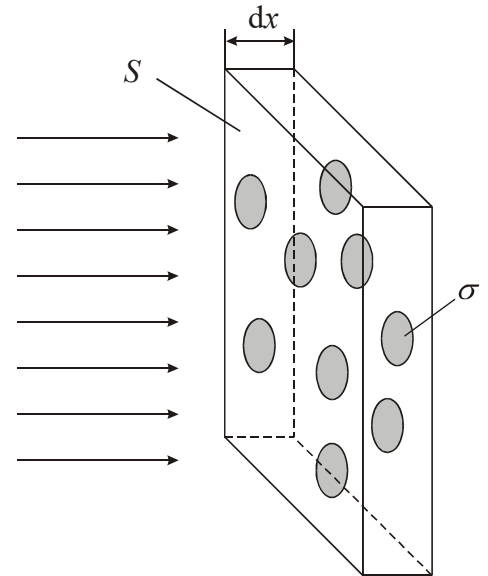
Reakcijos spartos  $R$  išraiškos išvedimas:

$$\frac{dP}{dt} = \sigma n v, \quad (9.2.7)$$

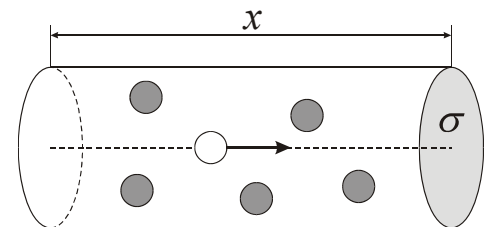
$$R = \frac{dP}{dt} n_{kr} V = \sigma n v n_{kr} V = \sigma N v n_{kr} = \sigma N j = \Sigma V j, \quad (9.2.8)$$

čia  $v$  yra krintančiųjų dalelių greitis,  $n_{kr}$  yra jų koncentracija,  $j$  yra jų srauto tankis (skaičius ploto vienetui per laiko vienetą),  $V$  yra tūris. Jeigu dalelės krinta į ploną sluoksnį, tada dažnai patogiau išreikšti  $R$  pilnutiniu krintančiųjų dalelių srautu, t. y. jų skaičiumi per laiko vienetą ( $\Phi = Sj$ ), ir taikinių „paviršiniu tankiu“, t. y. jų skaičiumi sluoksnio ploto vienetui ( $n_s = N / S$ ):

$$R = \sigma N j = \sigma (N / S) (Sj) = \sigma n_s \Phi. \quad (9.2.9)$$



9.2.1 pav. Sąveikos skerspjūvio  $\sigma$  aiškinimas



9.2.2 pav. Vidutinio laisvojo kelio apskaičiavimui



Tarkime,  $d\sigma(\theta, \phi)$  yra antrinės dalelės išlėkimo duotąja kryptimi  $(\theta, \phi)$  į erdvinio kampo elementą  $d\Omega$  skerspjūvis. Tada **diferencialinis** arba **kampinis** sąveikos skerspjūvis yra lygus

$$\sigma_{\Omega} = \frac{d\sigma}{d\Omega}. \quad (9.2.10)$$

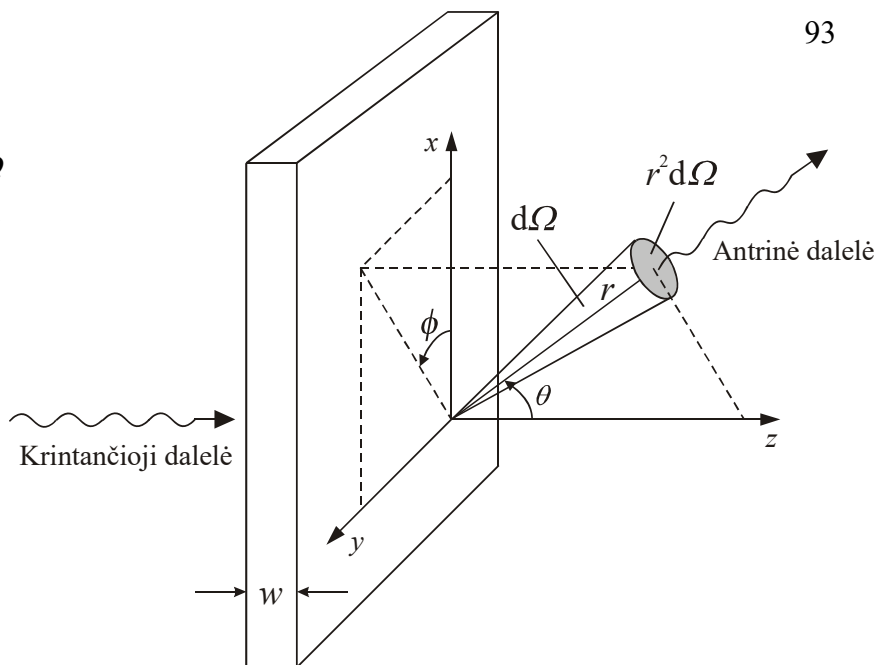
Matavimo vienetas – b / sr.

Pilnutinis skerspjūvis:

$$\sigma = \int \sigma_{\Omega} d\Omega \equiv \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^{\pi} \sigma_{\Omega} \sin\theta d\theta. \quad (9.2.11)$$

Jeigu  $\sigma_{\Omega}$  nepriklauso nuo  $\phi$ , tada

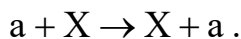
$$\sigma = 2\pi \int_0^{\pi} \sigma_{\Omega} \sin\theta d\theta. \quad (9.2.12)$$



9.2.3 pav. Diferencialinio sąveikos skerspjūvio apskaičiavimui

### 9.3. Branduolinių reakcijų pavyzdžiai

*Tamprioji sklaida*



Atskiras tampriosios sklaidos atvejis – **tamprioji Kulono sklaida** (arba **Rezerfordo sklaida**).

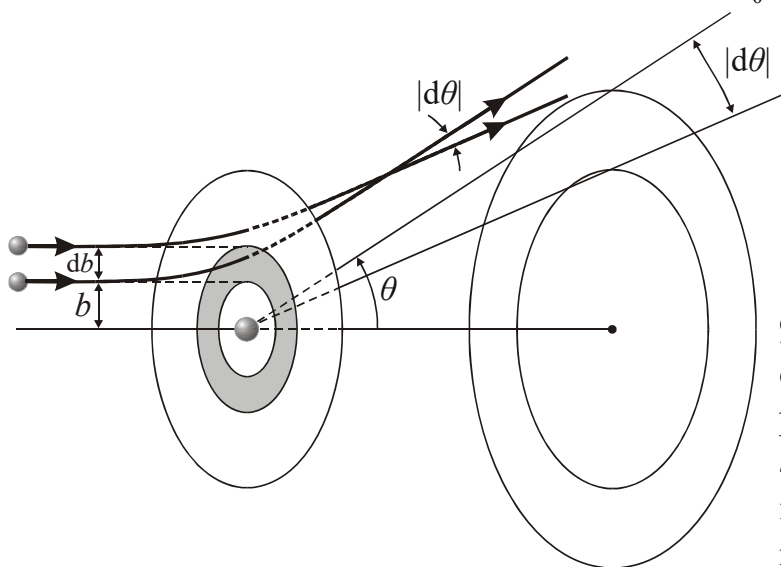
$$F = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{zZe^2}{r^2}. \quad (9.3.1)$$

Kulono sklaidos diferencialinis skerspjūvis, kai taikinio branduolys yra be galo masyvus:

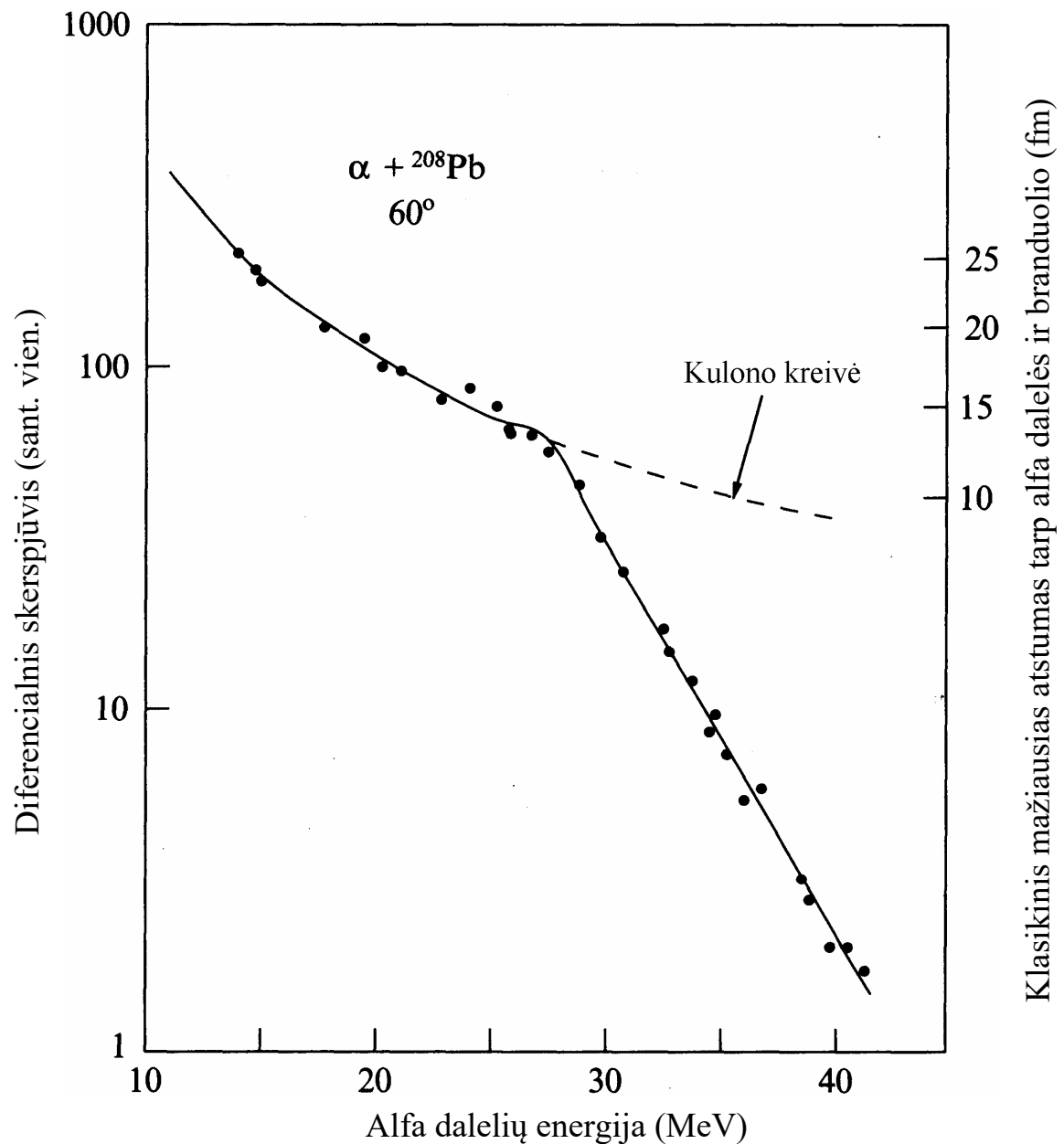
$$\sigma_{\Omega} = \frac{d^2}{16\sin^4(\theta/2)} = \left(\frac{zZe^2}{4\pi\epsilon_0}\right)^2 \left(\frac{1}{4E}\right)^2 \frac{1}{\sin^4(\theta/2)}. \quad (9.3.2)$$

Čia  $d$  yra mažiausias atstumas, kuriuo suartėja branduolys ir teigiamo krūvio dalelė, kurios energija  $E$ , kai smūgis yra centrinis:

$$d = \frac{zZe^2}{4\pi\epsilon_0 E}. \quad (9.3.3)$$



9.3.1 pav. Tamprioji Kulono sklaida: dalelių, kurių smūgio parametrai priklauso nykstamo pločio intervalui nuo  $b$  iki  $b + db$ , sklaidos kampai priklauso intervalui nuo  $\theta$  iki  $\theta + d\theta$  (pokyčių  $db$  ir  $d\theta$  ženklai yra priešingi)



**9.3.2 pav.** Alfa dalelių tampriosios sklaidos fiksuotu kampu ( $60^\circ$ ) diferencialinis skerspjūvis (santykinais vienetais). Lūžio taškas atitinka tokią alfa dalelių energiją, kai tampa galima trumpasiekė stiprioji sąveika

Atlikus daug alfa dalelių tampriosios Kulono sklaidos matavimų su įvairiais taikiniais, pagal lūžio taško padėtį diferencialinio skerspjūvio priklausomybėje nuo alfa dalelių energijos nustatytas atstumas tarp alfa dalelės ir branduolio centrų, kuriam esant pradeda veikti branduolinė jėga:

$$R = 1,41A^{1/3} + 2,11 \text{ fm} .$$

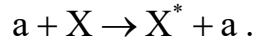
### Tiesioginės reakcijos

**Tiesioginė branduolinė reakcija** – tai tokia reakcija, kai krintančioji dalelė sąveikauja tik su mažu skaičiumi paviršinių branduolio nukleonų. Ypatybės:

- a) palyginti maži energijos, impulso ir masės pokyčiai,
- b) labai maža reakcijos trukmė ( $\sim 10^{-22}$  s).

Tiesioginių reakcijų pavyzdžiai:

**Netamprioji sklaida:**



**Pernašos reakcijos – atplėšimo reakcijos** (pvz., (d,p), ( $\alpha$ ,d) ir ( $^{16}\text{O}$ ,  $^{12}\text{C}$ )) arba **pagrobimo reakcijos** (pvz., (p,d), (p,t) ir ( $^{16}\text{O}$ ,  $^{17}\text{O}$ )).

### Tarpinio branduolio reakcijos

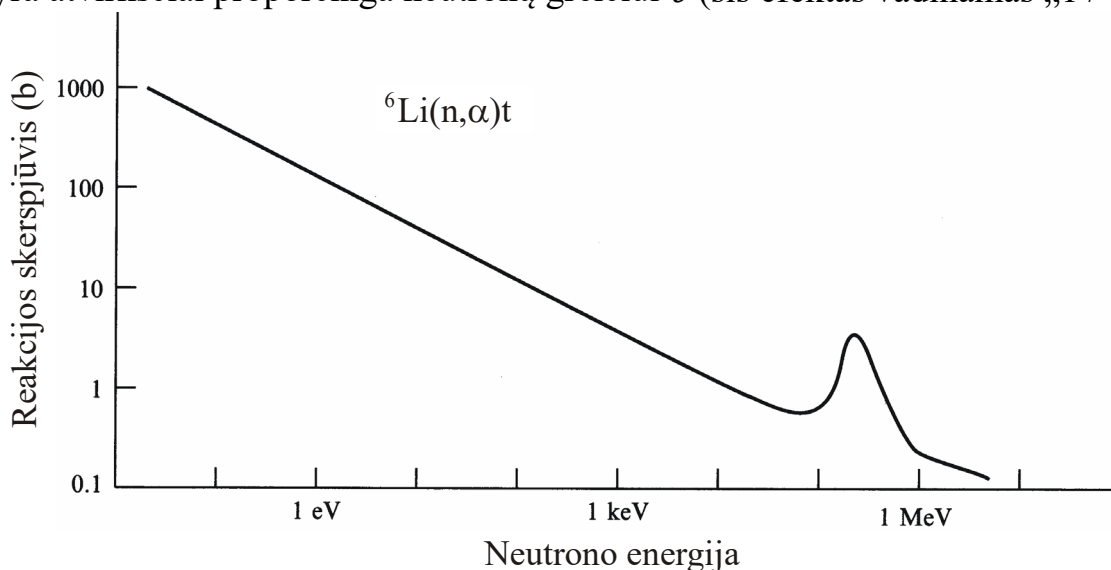
Kai susidūrimas yra centrinis arba beveik centrinis, yra galimos tarpinio branduolio reakcijos, kurios vyksta dviem etapais:

- 1) Abi reaguojančios dalelės susijungia į vieną (tarpinį) branduolį, kuris yra sužadintos būsenos;
- 2) Po  $10^{-16} - 10^{-18}$  s branduolys pereina į pagrindinę būseną emituodamas vieną arba daugiau dalelių.

Emituotų dalelių savybės priklauso tik nuo tarpinio branduolio savybių ir nepriklauso nuo to, kaip tas branduolys susiformavo.

Emituotos dalelės gali būti nukleonai, branduoliai, gama kvantai arba vidinės konversijos elektronai. Nukleonų emisija yra analogiška karšto skysčio garavimui. Tačiau, jeigu tarpinio branduolio sužadavimo energija yra mažesnė už nukleono ryšio energiją arba tik nežymiai viršija pastarąją, tada labiau tikėtina gama kvantų arba konversijos elektronų emisija. Tada dalelė „pagaunama“ į taikinio branduolį, todėl tokia reakcija vadinama **pagavimo reakcija**.

Jeigu krintančioji dalelė yra branduolys, tada tarpiniam branduoliui susiformuoti trukdo Kulono potencialo barjeras. Jeigu krintančioji dalelė yra neutronas, tada Kulono barjero nėra, todėl tarpinis branduolys gali susiformuoti esant labai mažoms neutrono energijoms. Tada reakcijos tikimybė yra atvirkščiai proporcinga neutronų greičiui  $v$  (šis efektas vadinamas „ $1/v$ “ dėsniumi).



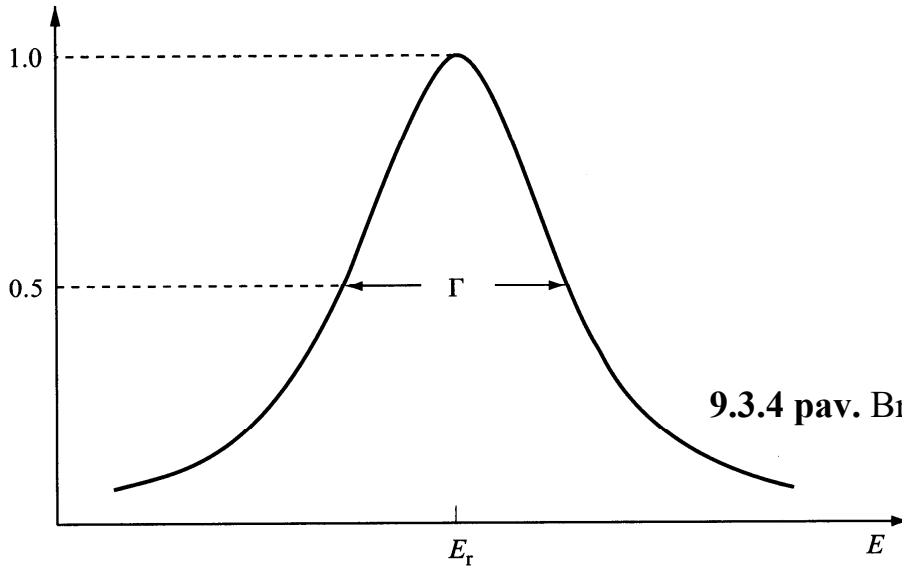
**9.3.3 pav.** Branduolinės reakcijos  ${}^6\text{Li}(n,\alpha)t$  skerspjūvio priklausomybė nuo neutrono energijos. Maždaug iki 50 keV skerspjūvis proporcingas  $1/v \sim E^{-1/2}$ . Ties 250 keV matomas rezonansas

### Rezonansai

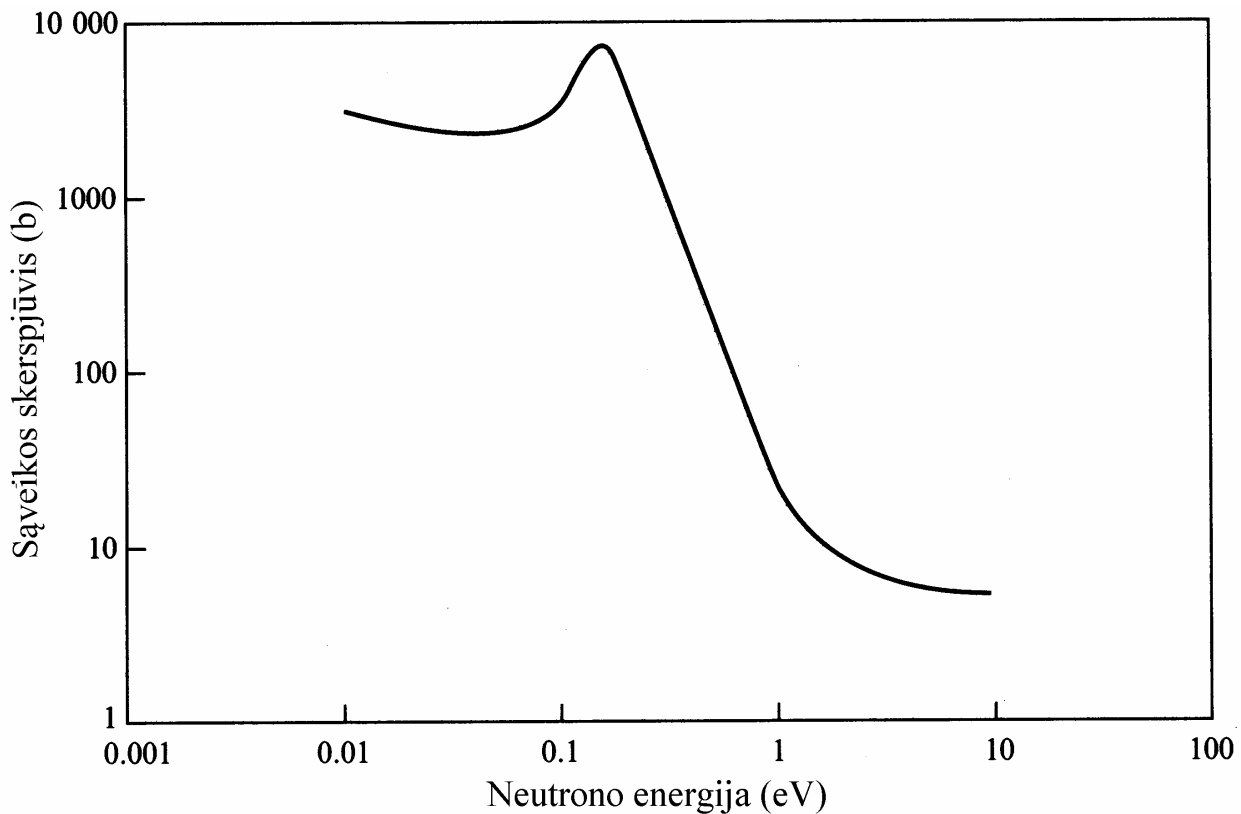
Tarpinio branduolio reakcijų skerspjūvio priklausomybėje nuo  $E$  dažnai būna maksimumai. Jie atsiranda tada, kai tarpinio branduolio sužadavimo energija tiksliai atitinka vieną iš jo sužadintųjų energijos lygmenų („savųjų virpesių dažnių“). Šis reiškinys vadinamas **rezonansu**. Rezonanso srityje

$$\sigma(E) \sim \frac{1}{(E - E_r)^2 + (\Gamma/2)^2} \quad (9.3.4)$$

(tai yra vadinamoji **Lorenco funkcija** arba **Breito ir Vignerio funkcija**).



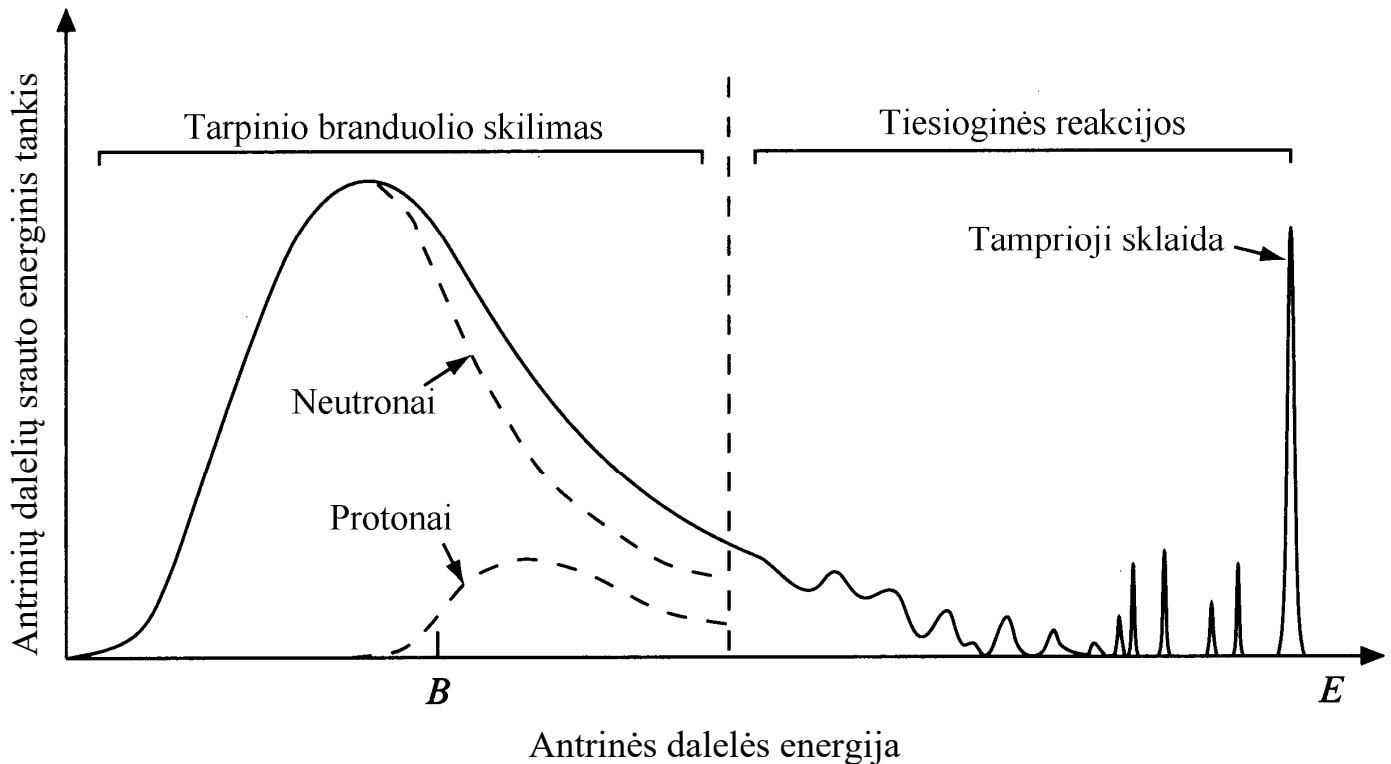
9.3.4 pav. Breito ir Vignerio rezonansinė kreivė



9.3.5 pav. Neutronų sąveikos su kadmio izotopu  $^{113}\text{Cd}$  pilnutinis skerspjūvis. Matomas ryškus rezonansas ties neutrono energija 0,17 eV

## 9.4. Bendrosios branduolinių reakcijų savybės

### Energijos spektrai

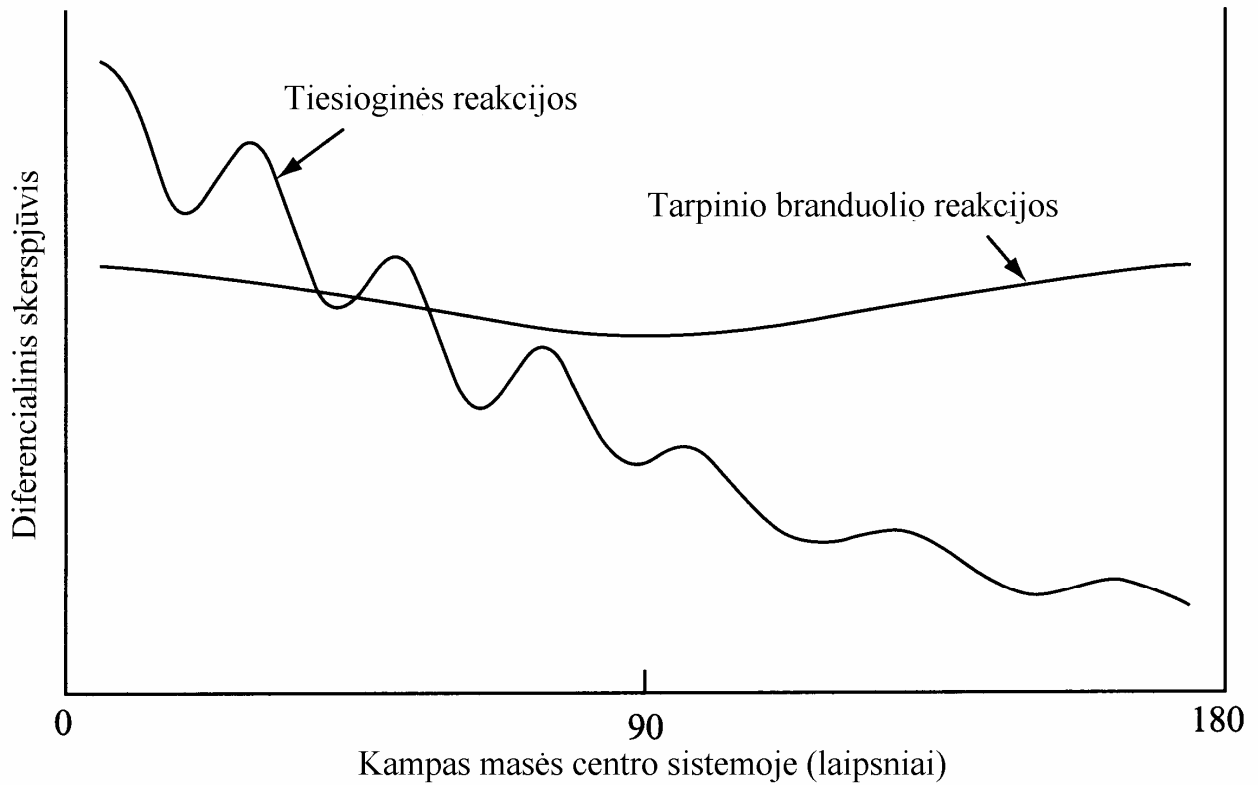


**9.4.1 pav.** Elektringųjų dalelių ir neutronų, išlekiančių po branduolinių reakcijų, energijos spektrų bendrasis pavidalas. Laikoma, kad branduolines reakcijas sukelia protonų susidūrimai su vidutinės masės branduoliais, o protonų energija yra kelis kartus didesnė už Kulono barjero aukštį  $B$

Būdingosios spektro sritys:

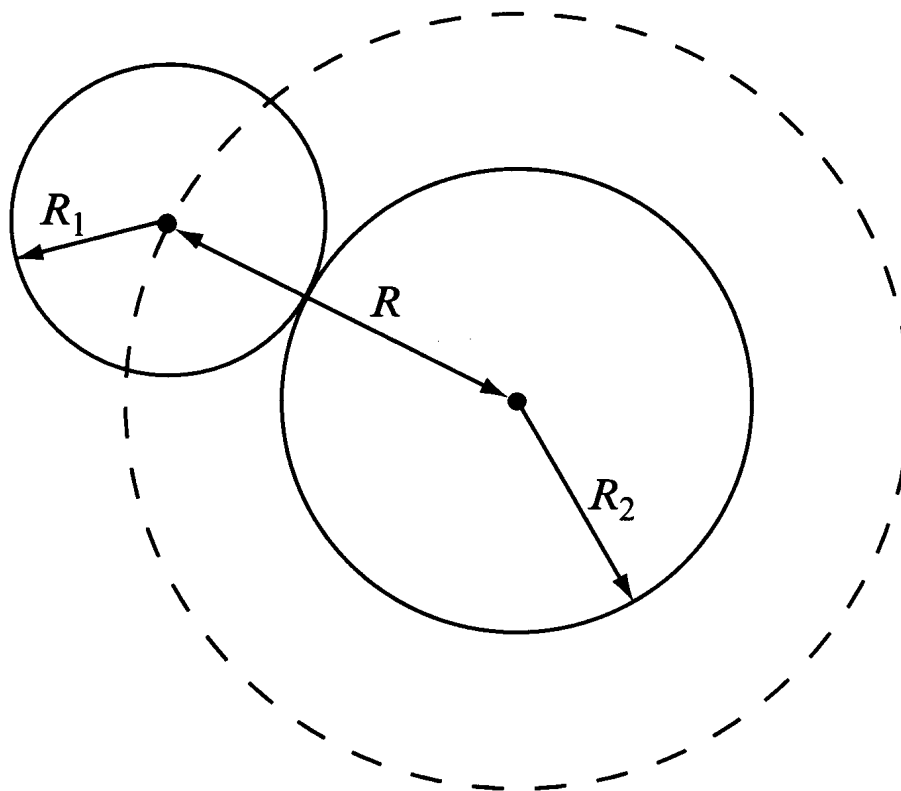
- 1) tampriosios sklaidos maksimumas yra dešiniajame spektro krašte (didžiausia išsklaidytojo protono energija);
- 2) mažesnių energijų maksimumai atitinka tiesiogines reakcijas – netampriąją sklaidą (kuo mažesnė antrinio protono energija, tuo į aukštesnį lygmenį sužadinas antrinis branduolys);
- 3) kai antrinių dalelių energijos yra dar mažesnės, jų energijos spektras yra platus ir be jokių smailių. Ši sritis atitinka tarpinio branduolio reakcijas. Šioje srityje neutrono išlėkimo tikimybė yra didesnė negu protono, nes protonui išlėkti iš branduolio trukdo Kulono potencialo barjeras (jo aukštis  $B$ ), panašiai kaip alfa skilimo atveju (žr. [8.2.3 pav.](#));
- 4) antrinių neutronų srauto mažėjimas mažėjant energijai atspindi galimų duotos energijos laisvojo neutrono būsenų tankio mažėjimą (žr. [\(2.3.4\)](#)). Be to, mažėjant energijai didėja „konkuruojančio“ proceso – spinduliuojamojo pagavimo – tikimybė. [9.4.1 pav.](#) atveju šis spinduliuojamojo pagavimo tikimybės didėjimas prisideda prie išlekiančių neutronų srauto mažėjimo, nes po spinduliuojamojo pagavimo išleikia gama kvantai (o ne neutronai).

*Antrinių dalelių išlėkimo krypčių pasiskirstymai*



**9.4.2 pav.** Antrinių dalelių diferencialinių skerspjūvių priklausomybės nuo kampo bendrasis pavidalas (kampas atskaitomas nuo krintančiosios dalelės judėjimo krypties)

*Branduolinių reakcijų skerspjūvių klasikinės išraiškos*



**9.4.3 pav.** Dviejų branduolių, kurių spinduliai  $R_1$  ir  $R_2$ , geometrinio sąveikos skerspjūvio apskaičiavimas

Pilnutinis sąveikos skerspjūvis – tai tampriosios sklaidos ir reakcijos skerspjūvių suma:

$$\sigma_p = \sigma_s + \sigma. \quad (9.4.1)$$

Didžiausias atstumas tarp branduolių centrų, kai dar yra galima branduolinė reakcija:

$$R = R_1 + R_2. \quad (9.4.2)$$

Čia  $R_1$  ir  $R_2$  yra abiejų branduolių efektingi spinduliai.

Jeigu krintančioji dalelė yra neutronas, tada reakcijos skerspjūvis

$$\sigma = \pi R^2. \quad (9.4.3)$$

Jeigu krintančioji dalelė yra branduolys, tada Kulono stūma sumažina reakcijos skerspjūvį.

Reakcijos skerspjūvio, kai yra Kulono stūma, išvedimas:

$$\sigma = \pi b^2. \quad (9.4.4)$$

Čia  $b$  yra smūgio parametro vertė, kai krintantysis branduolys „slysta“ taikinio branduolio paviršiumi (žr. [9.4.4 pav.](#)). Vadinasi, kai smūgio parametras lygus  $b$ , tada didžiausia Kulono stūmos (potencinė) energija yra lygi

$$B = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{4\pi\epsilon_0 R}. \quad (9.4.5)$$

$E'$  ir  $p'$  – tai krintančiojo branduolio mažiausieji kinetinė energija ir impulsas (žr. [9.4.4 pav.](#)).

Energijos tvermės dėsnis:  $E = E' + B.$  (9.4.6)

Impulso momento tvermės dėsnis:  $L = pb = p'R.$  (9.4.7)

$$b^2 = R^2 \left( \frac{p'}{p} \right)^2 = R^2 \frac{E'}{E}. \quad (9.4.8)$$

[\(9.4.8\)](#) → [\(9.4.4\)](#):

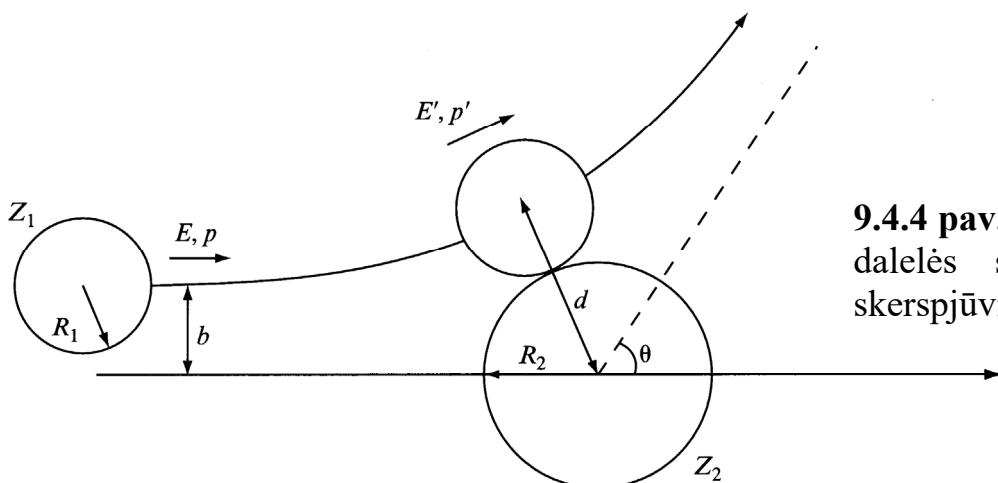
$$\sigma = \pi R^2 \frac{E'}{E} = \pi R^2 \left( 1 - \frac{B}{E} \right), \quad \text{kai } E \geq B. \quad (9.4.9)$$

Atsižvelgus į tai, kad taikinio masė  $M$  yra baigtinė, vietoj  $E$  reikia naudoti dalelės energiją masių centro sistemoje:

$$E_{mc} = E \frac{M}{M + m}. \quad (9.4.10)$$

Kadangi  $b = L/p$ , tai apytikslė kvantinė reakcijos skerspjūvio išraiška gaunama pasinaudojus dydžių  $L$  ir  $p$  kvantinėmis išraiškomis (atitinkamai [\(3.1.7b\)](#) ir [\(2.3.6\)](#)):

$$\sigma = \pi b^2 = \pi \left( \frac{L}{p} \right)^2 = \frac{\pi l(l+1)\hbar^2}{(\hbar k)^2} \approx \frac{\pi l^2}{k^2}. \quad (9.4.11)$$



**9.4.4 pav.** Teigiamo elektros krūvio dalelės sąveikos su branduoliu skerspjūvio apskaičiavimui

### Dalinių sferinių bangų sąvoka

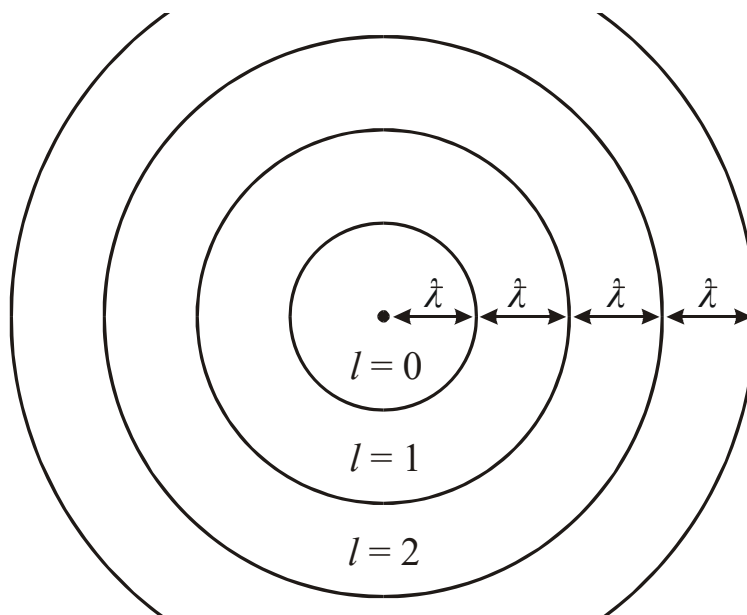
Apibrėžtos energijos ir judėjimo krypties dalelės būseną nusako plokščioji banga (2.3.16). Plokščiąją bangą galima išreikšti dalinių sferinių bangų suma. Kiekviena iš jų atitinka tam tikrą orbitinio kvantinio skaičiaus  $l$  vertę ( $l = 0, 1, 2, \dots$ ). Tos dalinės bangos žymimos tomis pačiomis raidėmis, kaip centriniame jėgų lauke judančios dalelės būsenos, atitinkančios tą pačią šalutinio kvantinio skaičiaus  $l$  vertę (žr. 3.1 skyriaus pabaigą): **s bangos** atitinka  $l = 0$ , **p bangos** atitinka  $l = 1$  ir t. t. Klasikinė judesio kiekio momento išraiška yra

$$L = bp. \quad (9.4.12)$$

Vadinasi, kiekviena dalinė banga (t. y. kiekviena  $l$  vertė) atitinka tam tikrą smūgio parametro  $b$  verčių intervalą (žiedą). To žiedo vidinis ir išorinis spinduliai yra

$$r_l = \frac{L_l}{\hbar k} \approx \frac{l}{k} = l\hat{\lambda}, \quad r_{l+1} = (l+1)\hat{\lambda}. \quad (9.4.13)$$

Čia  $\hat{\lambda}$  yra **redukuotasis bangos ilgis** (jis yra  $2\pi$  kartų mažesnis už bangos ilgį  $\lambda$ ).



**9.4.5 pav.** Judesio kiekio momento sritys plokščiai krįtančiajai bangai, kurios kryptis statmena brėžinio plokštumai. Dalelės, kurių orbitinis kvantinis skaičius  $l$ , pataiko į  $l$ -tąjį žiedą

Jeigu  $l$ -toji dalinė banga tikrai įvykdo branduolinę reakciją, tada atitinkamas skerspjūvis yra

$$\sigma_l = \pi r_{l+1}^2 - \pi r_l^2 = (2l+1)\pi\hat{\lambda}^2. \quad (9.4.14)$$

Tai yra didžiausia galima skerspjūvio vertė. Bendruoju atveju  $l$ -tąją dalinę bangą atitinkantis reakcijos skerspjūvis yra mažesnis:

$$\sigma_{r,l} \leq (2l+1)\pi\hat{\lambda}^2, \quad (9.4.15)$$

nes branduolinė reakcija yra atsitiktinis vyksmas.

Branduolinių reakcijų analizėje užtenka atsižvelgti tik į tas dalines sferines bangas, kurias atitinkančių žiedinių zonų vidinis spindulys yra mažesnis už sąveikaujančių dalelių (pvz., dviejų branduolių arba neutrono ir branduolio) spindulių sumą  $R$ . Pagal (9.4.13) tai atitinka

$$l < \frac{R}{\hat{\lambda}}. \quad (9.4.16)$$

Atskiru atveju, kai nagrinėjamos mažos energijos reakcijos (pvz., reakcijos, kurias vykdo šiluminiai neutronai), galioja nelygė

$$\hat{\lambda} > R, \quad (9.4.17)$$

todėl (9.4.16) sąlygą atitinka tik nulinė  $l$  vertė (s bangos).



## 10. Jonizuojančiosios spinduliuotės sąveika su medžiaga

### 10.1. Įvadas

Branduolių spinduliuotė yra *jonizuojančioji*, t. y. dėl jos poveikio medžiagai medžiagos atomai yra jonizuojami (iš jų išlaisvinami elektronai). Todėl ši spinduliuotė gali nutraukti cheminius ryšius tarp medžiagos atomų.

Iš vienos pusės, stiprus spinduliuotės poveikis medžiagoms reiškia, kad ši spinduliuotė yra pavojinga sveikatai, o iš kitos pusės, jis palengvina spinduliuotės detektavimą ir tuo pačiu – jos kontroliavimą.

Nepriklausomai nuo jonizuojančiosios spinduliuotės prigimties, jonizavimo procese visada dalyvauja *elektringosios* dalelės. Jos gali sudaryti krintančiąją spinduliuotę (pvz.,  $\beta$  dalelės,  $\alpha$  dalelės, kiti branduoliai arba jonai) arba atsirasti dėl krintančiųjų dalelių, kurios neturi krūvio (gama fotonai, neutronai), poveikio medžiagai.

### 10.2. Sunkiųjų elektringųjų dalelių sąveika su medžiaga

Elektringosios dalelės sąveikauja su medžiagos atomų elektronais ir branduoliais dėl Kulono jėgos. Sąveika su elektronais yra daug labiau tikėtina, negu sąveika su branduoliais.

**Sunkiosios dalelės** – tai dalelės, kurių masė yra daug didesnė už elektrono masę. Pvz., protonai ir sunkesnės dalelės.

Didžiausia galima medžiagos elektrono įgyta energija:

$$\Delta E_{\max} = E \frac{4m_e}{M} = 2m_e v^2. \quad (10.2.1)$$

Čia  $E$  yra krintančiosios dalelės kinetinė energija,  $M$  yra jos masė,  $m_e$  yra elektrono masė,  $v$  yra krintančiosios dalelės greitis.

Kadangi sąveikos įvykių daug, o po kiekvieno sąveikos įvykio energija sumažėja labai nežymiai, tai sunkioji dalelė turi palyginti tiksliai apibrėžtą *siekį*, t. y. nueitą kelią, kuriame ji praranda visą kinetinę energiją.

„Delta spinduliai“ – tai didelės energijos antriniai elektronai, kurie taip pat gali jonizuoti medžiagos atomus.

#### *Betės formulė*

Medžiagos **ilginė stabdymo geba** – tai vidutinis dalelės energijos sumažėjimas vienetiniame kelyje ( $-dE / dx$ ).

Klasikinis sąveikos modelis remiasi šiomis prielaidomis:

1. Krintančiosios dalelės ir medžiagos elektrono sąveiką galima aprašyti klasikinės mechanikos metodais. Klasikiniai metodai tinka, jeigu dalelės kinetinė energija yra pakankamai didelė.
2. Skaičiavimuose medžiagos elektronus galima laikyti laisvais (nors iš tikrųjų jie priklauso atomams).
3. Sąveikos trukmė yra tokia maža, kad jos metu medžiagos elektronas praktiškai nepasislenka iš vietos.

Kulono jėgos modulis:

$$F = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{ze^2}{x^2 + b^2}. \quad (10.2.2)$$

$b$  yra **smūgio parametras**,  $ze$  yra krintančiosios dalelės krūvis. Sąveikos metu elektronui perduotas pilnutinis judesio kiekis:

$$p = \int_{-\infty}^{\infty} F dt, \quad (10.2.3)$$

Kadangi judėjimas yra simetriškas taško  $x = 0$  atžvilgiu, tai

$$p = \int_{-\infty}^{\infty} F_{\perp} dt. \quad (10.2.4)$$

Kadangi krintančiosios dalelės greitis vienos sąveikos metu beveik nepakinta, tai  $t = x/v$ , t. y.  $dt = dx/v$ . Įrašius į (10.2.4),

$$p = \frac{1}{v} \int_{-\infty}^{\infty} F_{\perp} dx = \frac{1}{v} \int_{-\infty}^{\infty} F \frac{b}{\sqrt{x^2 + b^2}} dx. \quad (10.2.5a)$$

(10.2.2) → (10.2.5a):

$$p = \frac{ze^2}{4\pi\epsilon_0 v} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{b}{(x^2 + b^2)^{3/2}} dx = \frac{1}{2\pi\epsilon_0} \frac{ze^2}{bv}. \quad (10.2.5b)$$

Energija, kurią gavo elektronas (t. y. krintančiosios dalelės energijos nuostoliai sąveikos metu):

$$\Delta E = \frac{p^2}{2m_e} = \frac{1}{8\pi^2\epsilon_0^2} \frac{z^2 e^4}{m_e v^2 b^2}. \quad (10.2.6)$$

Kadangi Kulono jėga yra toliasiekė, tai dalelė vienu metu sąveikauja su visais arti jos esančiais medžiagos elektronais. Elektronų skaičius žiediniame  $b$  spindulio,  $db$  pločio ir  $dx$  storio sluoksnyje yra

$$n \cdot 2\pi b \cdot db \cdot dx,$$

čia  $n$  yra medžiagos elektronų koncentracija. Sudėjus energijos sumažėjimus dėl sąveikos su kiekvienu iš tų elektronų, suintegravus  $b$  atžvilgiu ir padalijus iš  $dx$ ,

$$-\frac{dE}{dx} = \int_{b_{\min}}^{b_{\max}} \frac{p_e^2}{2m_e} n 2\pi b db = \frac{1}{4\pi\epsilon_0^2} \frac{z^2 e^4 n}{m_e v^2} \ln \frac{b_{\max}}{b_{\min}}. \quad (10.2.7)$$

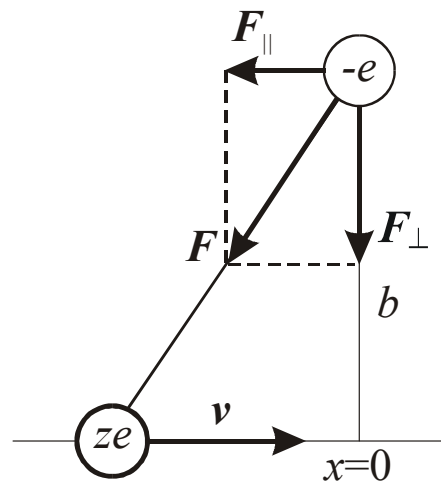
(čia atsižvelgta į (10.2.6) formulę). Pagal (10.2.6)

$$b \sim \frac{1}{\sqrt{\Delta E}}, \quad (10.2.8)$$

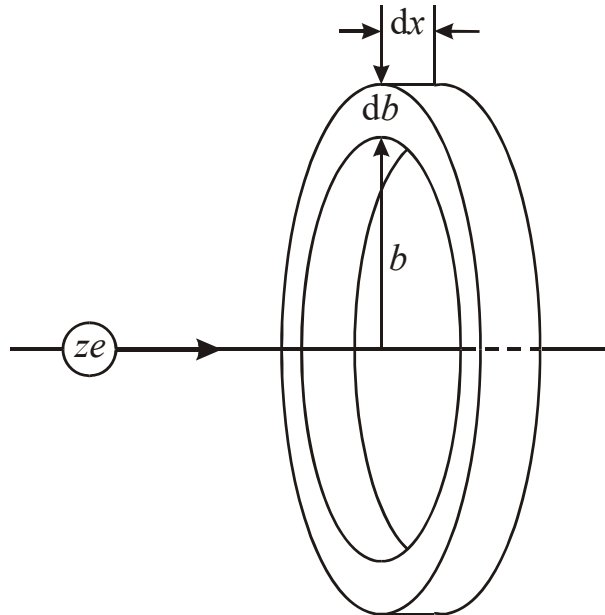
todėl

$$\ln \frac{b_{\max}}{b_{\min}} = \ln \frac{\sqrt{\Delta E_{\min}}}{\sqrt{\Delta E_{\max}}} = \frac{1}{2} \ln \frac{\Delta E_{\min}}{\Delta E_{\max}} = \frac{1}{2} \ln \frac{2m_e v^2}{I}, \quad (10.2.9)$$

čia didžiausią energijos sumažėjimą  $\Delta E_{\max}$  išreiškia (10.2.1) formulė, o  $\Delta E_{\min} = \bar{I}$  yra atomo elektrono vidutinė sužadavimo energija. (10.2.9) → (10.2.7):



**10.2.1 pav.** Atomo jonizavimo sunkiosios elektringosios dalelės elektriniu lauku klasikinis modelis.  $ze$  – krintančiosios dalelės krūvis,  $-e$  – atomo elektrono krūvis



**10.2.2 pav.** Tūrio elementas integruojant dalelės energijos nuostolius sluoksniu tūriu

$$-\frac{dE}{dx} = \frac{1}{8\pi\epsilon_0^2} \frac{z^2 e^4 n}{m_e v^2} \ln \frac{2m_e v^2}{\bar{I}}. \quad (10.2.10)$$

Tikslesnė formulė – tai **Betės formulė** (ją 1930 m. išvedė vokiečių fizikas *Hans Bethe*):

$$-\frac{dE}{dx} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0^2} \frac{z^2 e^4 n}{m_e v^2} \left[ \ln \frac{2m_e v^2}{I(1-\beta^2)} - \beta^2 \right], \quad (10.2.11)$$

čia  $\beta = v/c$ . Kai  $\beta \ll 1$ , Betės formulė išplaukia iš (10.2.7) ir (10.2.9), jeigu vietoj  $\Delta E_{\min} = \bar{I}$  yra naudojama tokia  $\Delta E_{\min}$  išraiška:

$$\Delta E_{\min} = \frac{\bar{I}^2}{2m_e v^2} = \bar{I} \left( \frac{\bar{I}}{2m_e v^2} \right). \quad (10.2.12)$$

Irašius (10.2.12) į (10.2.8), gaunama, kad  $b_{\max} \sim v$ . Šį teiginį (ir tuo pačiu – Betės formulę) galima pagrįsti pagal Boro atomo teoriją (1.7 skirsnis). Kad išorinis elektrinis laukas, atsiradęs dėl pralekiančios dalelės elektros krūvio, galėtų padidinti atomo elektrono energiją, sąveikos trukmė  $\tau$  turi būti daug mažesnė už vidutinį elektrono sukimosi aplink branduolį periodą:

$$\tau \ll 1/\bar{\nu} = \hbar/\bar{I}, \quad (10.2.13)$$

čia  $\bar{\nu}$  yra vidutinis apsisukimų dažnis. Antra vertus, kai dalelės greitis nėra reliatyvistinis,

$$\tau \approx b/v, \quad (10.2.14)$$

(10.2.14) → (10.2.13):

$$b \ll \hbar v/\bar{I}, \quad (10.2.15)$$

t. y.  $b_{\max} \sim v$ , ką ir reikėjo įrodyti. Norint gauti Betės formulę (10.2.11), reikia tarti, kad

$$b_{\max} = \frac{\hbar v}{\bar{I}} \quad (10.2.16)$$

(ši vertė yra  $2\pi$  kartų mažesnė už (10.2.15) nelygybės dešiniąją pusę).

Remiantis kvantinės mechanikos dėsniais, galima gauti ir  $b_{\min}$  vertę. Koordinatės ir impulso neapibrėžtumų sąryšis (Heizenbergo nelygybė) (1.9.6):

$$\Delta x \cdot \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2}.$$

Iš šio neapibrėžtumų sąryšio išplaukia:

$$b_{\min} = \Delta x_{\min} = \frac{\hbar}{2\Delta p_{\max}} = \frac{\hbar}{2p_{\text{mc}}}, \quad (10.2.17)$$

čia  $p_{\text{mc}}$  yra krintančiosios dalelės ir elektrono pilnutinis judesio kiekis jų masės centro atskaitos sistemoje. Kadangi laboratorinėje atskaitos sistemoje elektronas nejuda, o  $m_e \ll M$ , tai

$$p_{\text{mc}} \approx m_e v. \quad (10.2.18)$$

(10.2.18) → (10.2.17):

$$b_{\min} = \frac{\hbar}{2m_e v}. \quad (10.2.19)$$

Iš (10.2.16) ir (10.2.19) išplaukia:

$$\ln \frac{b_{\max}}{b_{\min}} = \ln \frac{2m_e v^2}{\bar{I}}. \quad (10.2.20)$$

(10.2.20) → (10.2.7):

$$-\frac{dE}{dx} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0^2} \frac{z^2 e^4 n}{m_e v^2} \ln \frac{2m_e v^2}{\bar{I}}. \quad (10.2.21)$$

Šis reiškiny – tai atskirasis Betės formulės (10.2.11) atvejis, atitinkantis sąlygą  $\beta \ll 1$ .

Medžiagos elektronų koncentracija:

$$n = \frac{Z\rho N_A}{A}. \quad (10.2.22)$$

Čia  $\rho$  yra medžiagos tankis,  $Z$  yra medžiagos krūvio skaičius,  $A$  yra medžiagos molinė masė (atominis masės skaičius). Kadangi  $Z/A$  daugumai medžiagų kinta palyginti siaurame intervale (nuo 0,4 iki 0,5, išskyrus vandenilį, kurio  $Z/A = 1$ ), tai  $n$  yra apytiksliai proporcinga tankiui  $\rho$ .

Empirinė vidutinės jonizavimo energijos išraiška:

$$\bar{I} \approx 11 \cdot Z \text{ eV}. \quad (10.2.23)$$

**Masinė stabdymo geba:**

$$-dE/(\rho dx). \quad (10.2.24)$$

Kadangi  $\bar{I}$  yra po logaritmo ženklo (žr. (10.2.11)), tai priklausomybė nuo  $\bar{I}$  yra silpna ir pagrindinis stabdančiosios medžiagos parametras, kuris lemia ilginę stabdymo gebą, yra elektronų koncentracija  $n$ , kuri įeina į stabdymo gebos išraišką kaip daugiklis (žr. (10.2.11)). Kadangi  $n$  yra proporcinga medžiagos tankiui  $\rho$  (žr. (10.2.22)), o proporcingumo koeficientas yra apytiksliai vienodas visoms medžiagoms (išskyrus vandenilį), tai masinė stabdymo geba taip pat yra *apytiksliai* vienoda visoms medžiagoms. Jeigu medžiagos skiriasi tik tankiu, tačiau yra vienodos cheminės sudėties (pvz., vanduo, ledas ir vandens garai), tada jų masinės stabdymo gebos *tiksliai* sutampa.

Dalelės **siekis** – tai dalelės nulėktas kelias medžiagoje, t. y. kelias, kuriame dalelė praranda visą savo kinetinę energiją. Kitaip sakant, siekis – tai dalelės trajektorijos ilgis medžiagoje. Taip apibrėžtas siekis kartais vadinamas **ilginiu siekiu** (masinis siekis apibrėžtas toliau). Siekį galima išreikšti ilgine stabdymo geba  $-dE/dx$ :

$$R = \int_0^{E_0} \frac{dE}{-dE/dx}, \quad (10.2.25)$$

čia  $E_0$  yra dalelės pradinė kinetinė energija. Kadangi trajektorija nėra tiesi, tai siekis visada yra didesnis už pilnutinį dalelės *poslinkį* medžiagoje (t. y. už atstumą tarp taško, kuriame dalelė įlėkė į medžiagą, ir taško, kuriame ji neteko visos kinetinės energijos).

**Masinis siekis:**

$$R' \equiv \rho R. \quad (10.2.26)$$

Kadangi ilginė stabdymo geba  $-dE/dx$  yra apytiksliai tiesiog proporcinga medžiagos tankiui, tai siekis yra apytiksliai atvirkščiai proporcingas medžiagos tankiui (nes stabdymo geba yra (10.2.25) pointegralinės funkcijos vardiklyje). Atitinkamai masinis siekis (10.2.26) (kaip ir masinė stabdymo geba) yra *apytiksliai* vienodas visoms medžiagoms, ir yra *tiksliai* vienodas medžiagoms, kurių cheminė sudėtis vienoda, o tankiai skirtingi.

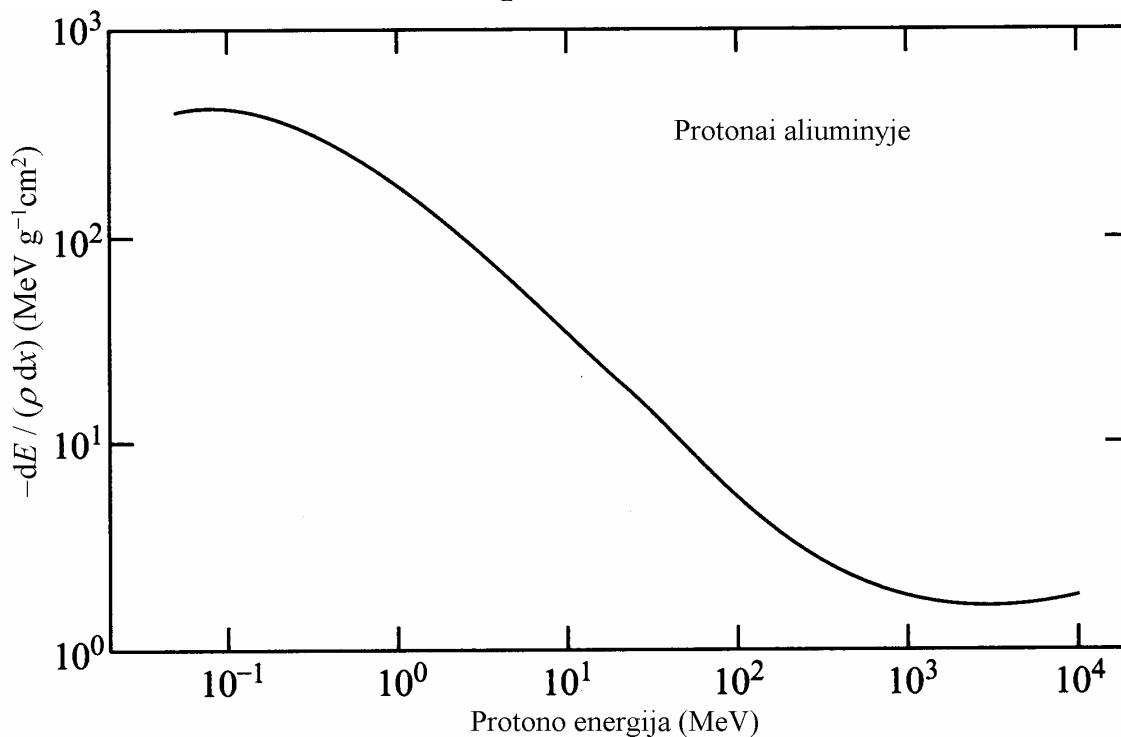
Stabdymo gebos priklausomybė nuo dalelės kinetinės energijos

Apytikslis empirinis sąryšis (tinka kai  $100 \text{ keV} < E < 1 \text{ GeV}$ ):

$$\frac{dE}{dx} = \text{const} \cdot E^{-k}, \quad (10.2.27)$$

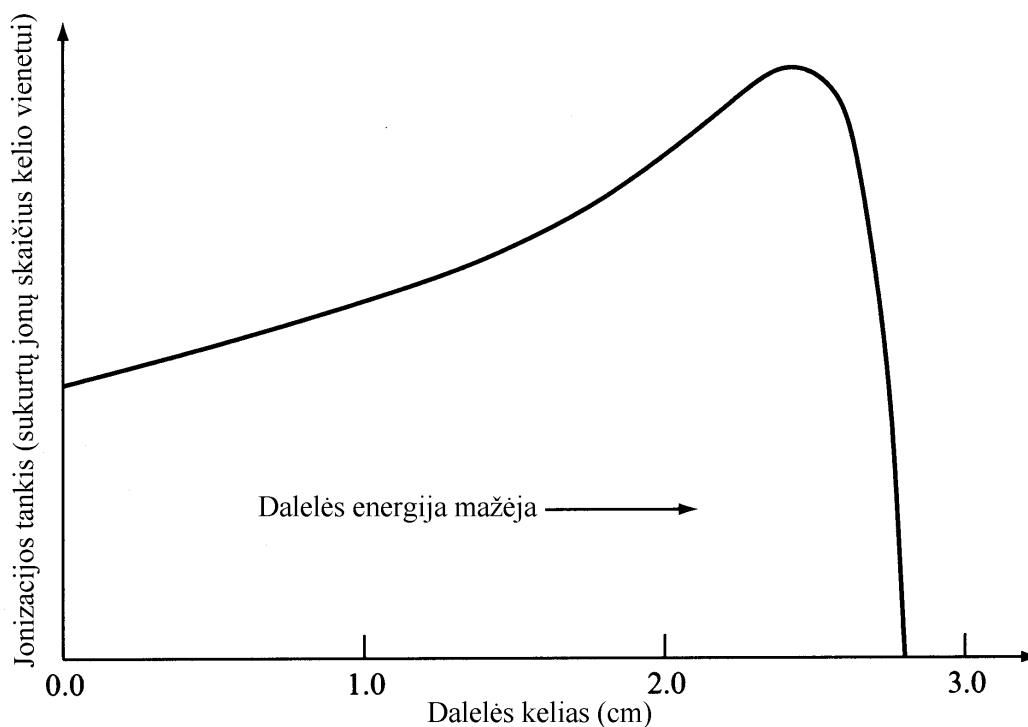
čia  $k \approx 0,8$ . Jono siekis:

$$R \equiv \int dx \equiv \int_E^0 \frac{dE}{(dE/dx)} \sim E^{1+k}. \quad (10.2.28)$$



10.2.3 pav. Protonų masinės stabdymo gebos priklausomybė nuo energijos aliuminyje

Brego kreivė



10.2.4 pav. Jonizacijos tankio priklausomybė nuo atstumo, kurį  $\alpha$  dalelė nueina ore (Brego kreivė)

Stabdymo gebos ir siekio priklausomybė nuo dalelės masės ir krūvio

$$\frac{dE}{dx} \sim z^2 f(v). \quad R \equiv \int_E^0 \frac{dE}{(dE/dx)} = \int_v^0 \frac{Mv'dv'}{(dE/dx)} \sim \int_v^0 \frac{Mv'dv'}{z^2 f(v')} \sim \frac{M}{z^2} F(v). \quad (10.2.29)$$

Stabdymo gebos ir siekio priklausomybė nuo stabdančiosios medžiagos

$$\frac{1}{\rho} \frac{dE}{dx} \sim \frac{Z}{A} \ln \left( \frac{2m_e v^2}{I} \right). \quad (10.2.30)$$

Daugiklis  $Z/A$  ir logaritminė funkcija silpnai priklauso nuo  $A$  ir  $Z$ . Atsižvelgus į šią silpną priklausomybę, gaunama, kad vienodų dalelių masiniai siekiai skirtingose medžiagose nėra vienodi ir yra tiesiog proporcingi kvadratinei šakniai iš  $A$ :

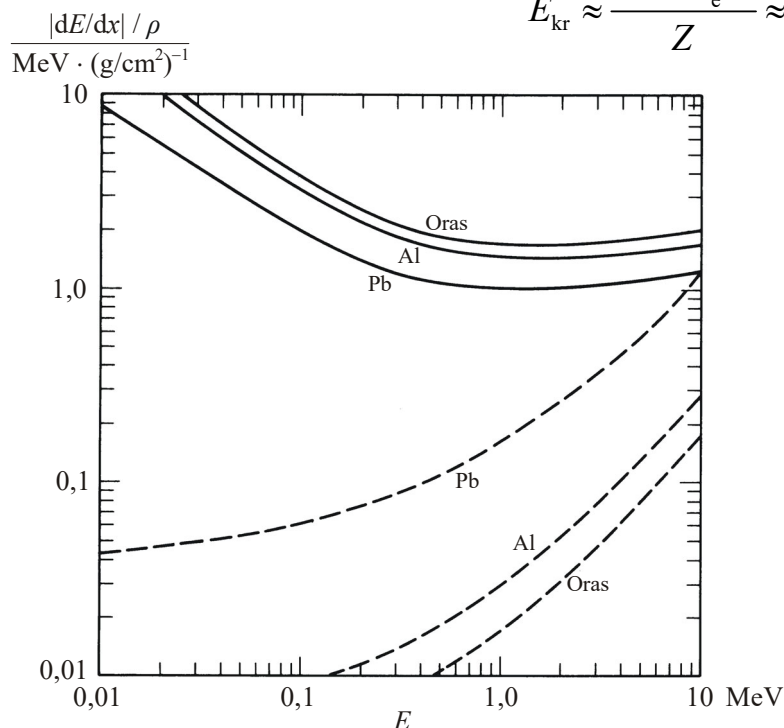
$$\frac{R'_1}{R'_2} \approx \frac{\sqrt{A_1}}{\sqrt{A_2}} \quad \text{arba} \quad \frac{R_1}{R_2} \approx \frac{\rho_2 \sqrt{A_1}}{\rho_1 \sqrt{A_2}}. \quad (10.2.31)$$

### 10.3. Elektronų sąveika su medžiaga

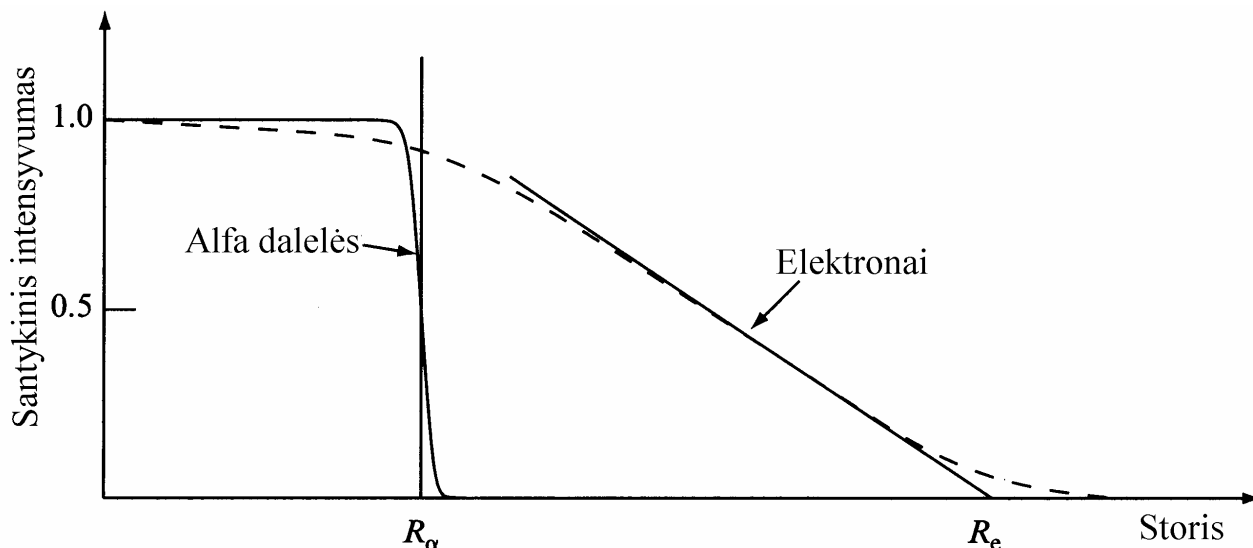
Elektronų sąveikos su medžiaga fizikinis mechanizmas yra toks pats, kaip sunkiųjų elektringųjų dalelių (Kulono jėga).

Elektronas medžiagoje yra stabdomas, t.y. juda su neigiamu pagreičiu. Visos elektringosios dalelės, judėdamos su pagreičiu, spinduliuoja elektromagnetines bangas (nepriklausomai nuo to, ar tas pagreitis teigiamas, neigiamas ar įcentrinis). Elektromagnetinė spinduliuotė, atsirandanti dėl elektrintųjų dalelių lėtėjimo medžiagoje, yra vadinama **stabdomąja spinduliuote**. Jeigu dalelė nereliatyvistinė, tada šios spinduliuotės intensyvumas yra tiesiog proporcingas pagreičio kvadratui. Elektronų atveju ši spinduliuotė yra ypač intensyvi, nes jų masė palyginti maža, todėl pagreitis didelis. Taigi, elektronų energijos nuostoliai yra sudaryti iš dviejų dėmenų: **jonizaciniai** ir **radiaciniai**. Kiekvieną iš jų nusako atitinkamai jonizacinė arba radiacinė ilginė stabdymo geba. Kai energija maža, vyrauja jonizaciniai nuostoliai, kurie atsiranda dėl to, kad elektronai tiesiogiai perduoda savo energiją medžiagos atomų elektronams, išlaisvindami juos iš atomų. Didėjant energijai radiaciniai nuostoliai sparčiai didėja (dėl didėjančio pagreičio) ir galų gale pranoksta jonizacinius. „Kritinė“ energija, kai jonizaciniai ir radiaciniai nuostoliai tampa vienodi, yra

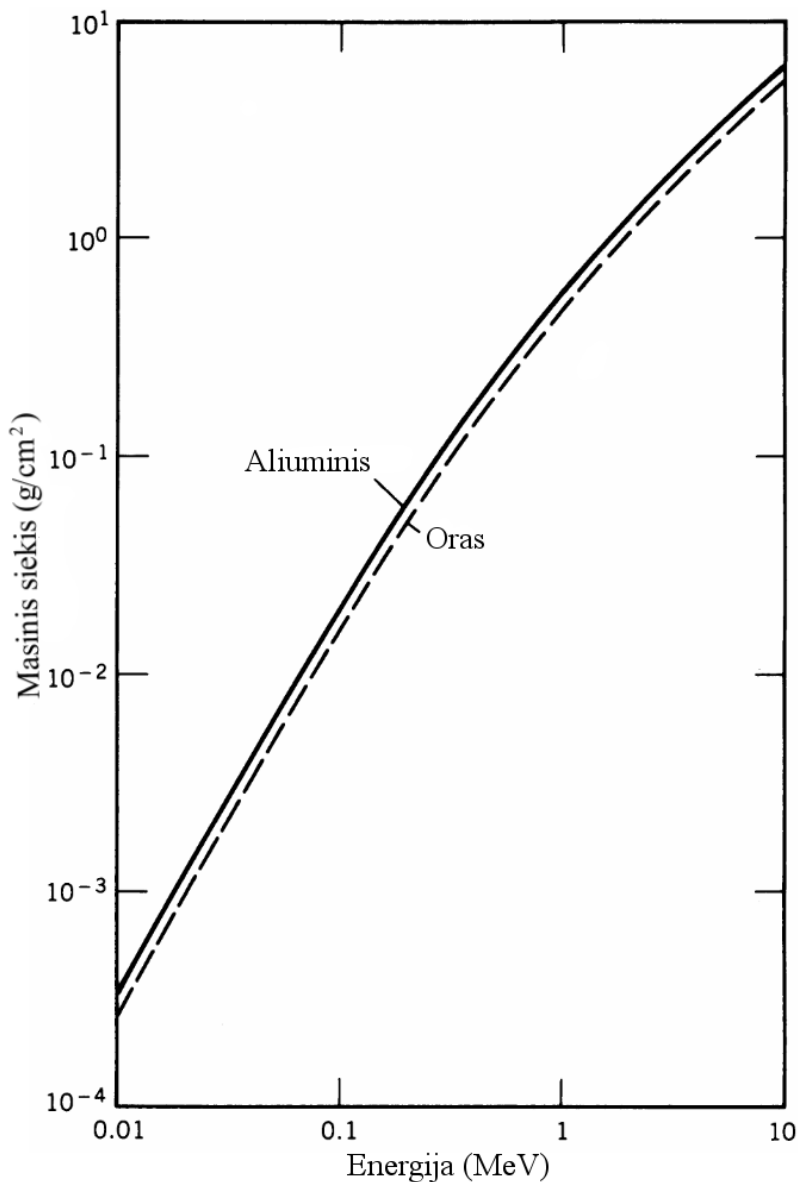
$$E_{kr} \approx \frac{1600m_e c^2}{Z} \approx \frac{800}{Z} \text{ MeV}. \quad (10.3.1)$$



**10.3.1 pav.** Elektronų masinės stabdymo gebos ore, aliuminyje ir švine priklausomybės nuo elektronų kinetinės energijos. Ištisinės linijos nusako jonizacinę masinę stabdymo gebą, o brūkšninės linijos nusako radiacinę masinę stabdymo gebą

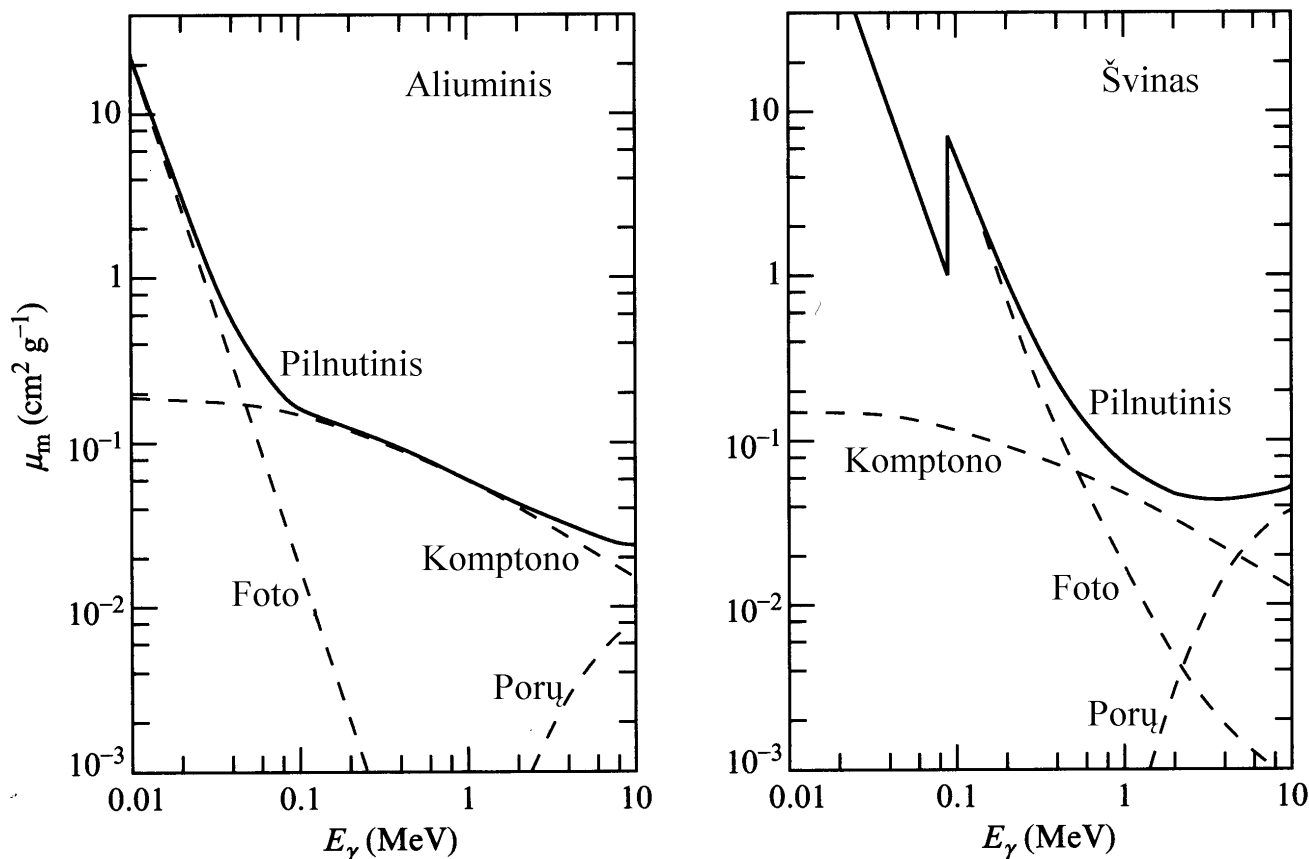


**10.3.2 pav.**  $\alpha$  dalelių ir elektronų lygiagretaus pluošto santykinio intensyvumo priklausomybė nuo sugėriklio sluoksnio storio.  $\alpha$  dalelių vidutinis siekis  $R_\alpha$  atitinka tokį sugėriklio storį, kai intensyvumas sumažėja du kartus lyginant su pradine verte. Elektronų ekstrapoliuotasis siekis yra  $R_e$  (horizontalioji skalė nėra vienoda abiejų rūšių spinduliuotei)



**10.3.3 pav.** Išmatuota elektronų ekstrapoliuotojo masinio siekio aliuminyje ir ore priklausomybė nuo elektronų energijos. Ši kreivė lieka apytiksliai tokia pati ir bet kuriam kitam sugėrikliui, nes šiame energijos intervale masinis siekis silpnai priklauso nuo sugėriklio medžiagos atominio numerio  $Z$

## 10.4. Gama spinduliuotės sąveika su medžiaga



**10.4.1 pav.** Fotonų masinio sugerties koeficiento aliuminyje ir švine priklausomybė nuo fotono energijos. Brūkšninės linijos rodo masinio sugerties koeficiento dėmenis, atitinkančius fotoelektrinę sugertį, Komptono sklaidą ir porų kūrimą. Staigus fotefekto tikimybės padidėjimas ties 0,09 MeV dešiniajame grafike atitinka „K kraštą“ – K sluoksnio elektronų ryšio energiją (kai fotono energija yra didesnė, tampa įmanomas fotoelektronų išlaisvinimas iš K sluoksnio, todėl padidėja  $\mu_m$ )

### Fotoelektrinis efektas

**Fotoelektrinio efekto** (trumpiau – fotoefekto) atveju visa fotono energija išsekvojama tam, kad išlaisvinti elektroną iš atomo vidinio elektronų sluoksnio. Fotoelektrono kinetinė energija:

$$T = E_\gamma - E_r, \quad (10.4.1)$$

Čia  $E_r$  yra elektrono ryšio energija atome.

Atomas, turintis vakansiją vidiniame sluoksnyje, yra sužadintos būsenos. Energijos perteklių jis gali atiduoti vienam iš savo išorinių elektronų, kuris išlėks iš atomo. Tai yra vadinamieji Ožė (*Auger*) elektronai. Be to, vienas iš aukštesnio sluoksnio elektronų gali pereiti į tą vakansiją. Tada energijos perteklius išspinduliuojamas rentgeno fotono pavidalu (rentgeno fluorescencija).

**K kraštas** atitinka gama fotono energiją, kuri lygi K sluoksnio elektronų ryšio energijai.

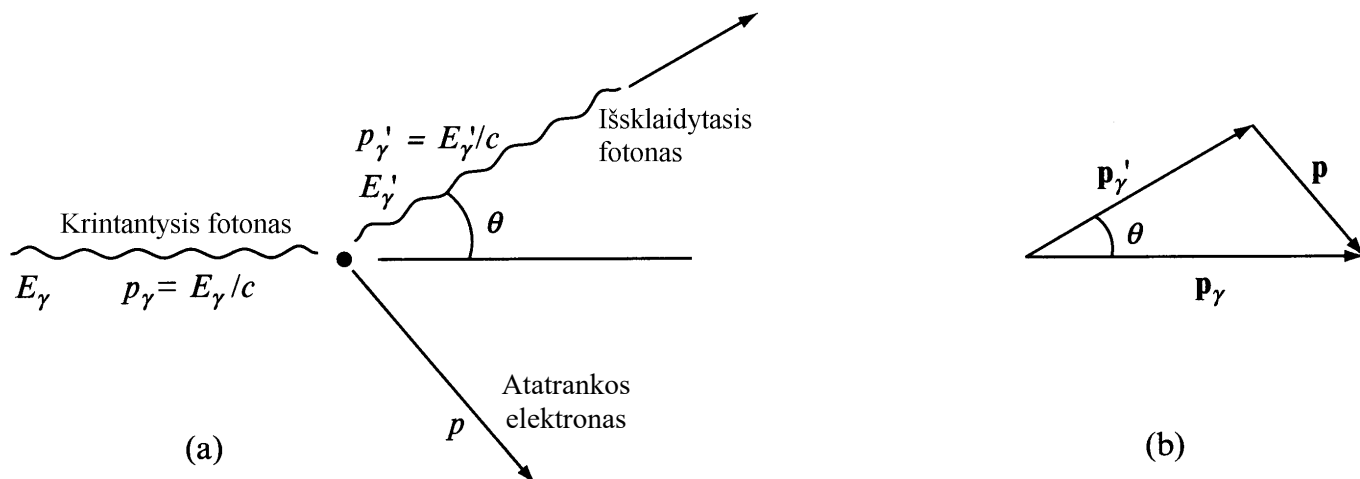
Fotoelektrinės sugerties skerspjūvis:

$$\sigma_{fe} \sim \frac{Z^5}{E_\gamma^{3,5}}, \quad (10.4.2)$$

kai fotono energija yra kelių šimtų keV eilės.



## Komptono sklaida



10.4.2 pav. (a) Komptono sklaidos geometrija; (b) vektorinis sąryšis tarp trijų impulso vektorių

**Komptono sklaidos** metu fotonas tampriai susiduria su elektronu (kurį dažniausiai galima laikyti laisvu). Elektrono kinetinės energija po sklaidos:

$$T = E_\gamma - E'_\gamma = E - mc^2. \quad (10.4.3)$$

Impulso tvermės dėsnis:

$$\mathbf{p} = \mathbf{p}_\gamma - \mathbf{p}'_\gamma. \quad (10.4.4)$$

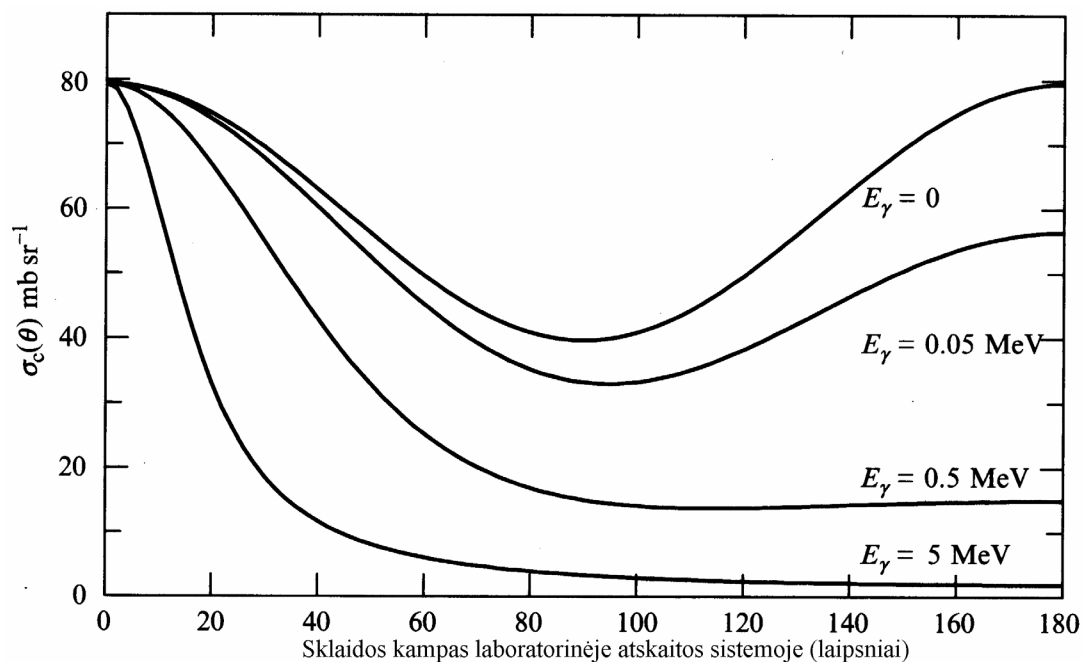
Pakėlus šį vektorinį sąryšį kvadratu ir atsižvelgus į tai, kad  $p_\gamma = E_\gamma / c$ ,

$$(pc)^2 = E_\gamma^2 + (E'_\gamma)^2 - E_\gamma E'_\gamma \cos \theta = E^2 - m^2 c^4. \quad (10.4.5)$$

Eliminavus  $E$  iš šių dviejų lygčių, gaunama išsklaidyto fotono energija:

$$E'_\gamma = \frac{E_\gamma}{1 + (E_\gamma / mc^2)(1 - \cos \theta)}. \quad (10.4.6)$$

Komptono sklaidos tikimybė yra tiesiog proporcinga elektronų koncentracijai, t. y. reiškiniai  $\rho Z / A$  (žr. (10.2.22)).



10.4.3 pav. Komptono sklaidos laisvaisiais elektronais diferencialinis skerspjūvis  $\sigma_c(\theta)$ , apskaičiuotas pagal Kleino ir Nišinos formulę, kai  $E_\gamma$  kinta nuo 0 iki 5 MeV

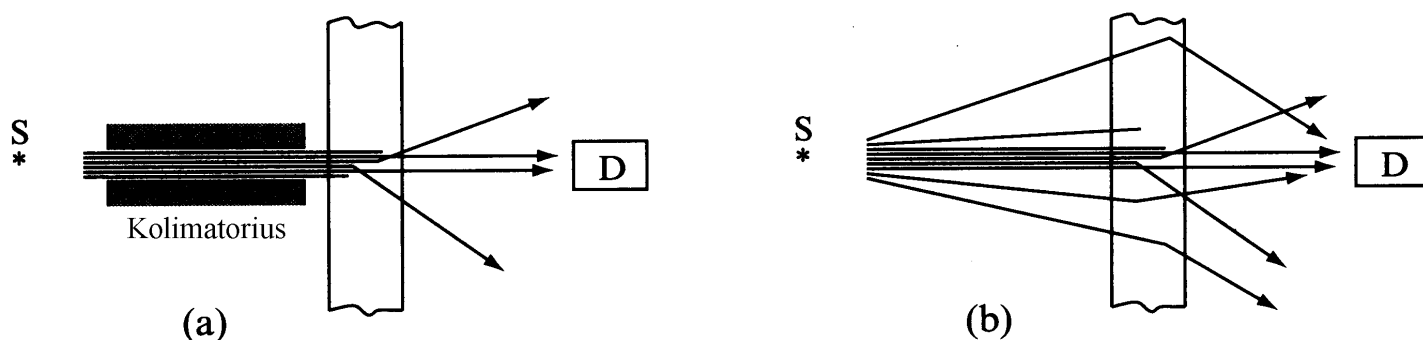
## Porų kūrimas

**Porų kūrimo** metu visa fotono energija išsekvojama kuriant elektrono ir pozitrono porą atomo elektriniame lauke. Elektrono ir pozitrono kinetinių energijų suma:

$$T_- + T_+ = E_\gamma - 2mc^2. \quad (10.4.7)$$

Kai pozitronas sulėtėja medžiagoje, jį pritraukia kuris nors tos medžiagos elektronas ir įvyksta vadinamoji **anihilacijos** reakcija, kurios metu pozitronas ir medžiagos elektronas nustoja egzistuoti, o jų rimties energija išspinduliuojama dviejų  $\gamma$  kvantų pavidalu (**anihilacinė spinduliuotė**). Du anihilaciniai fotonai išlekia priešingomis kryptimis, o kiekvieno jų energija lygi  $m_e c^2 = 0,511 \text{ MeV}$ .

## Silpimo koeficientas



**10.4.4 pav.** Gama spinduliuotės pluošto silpimo koeficiento matavimo metodika, kai pluoštas yra lygiagretus, t. y. kolimuotas (a), ir kai pluoštas yra nekolimuotas (b). S yra šaltinis, kurio skleidžiama spinduliuotė pereina per medžiagos sluoksnį ir pasiekia detektorių D. (a) atveju sklaida ir sugertis pasireiškia vienodai, nes mažina fotonų, kurie pataiko į detektorių D, skaičių. (b) atveju detektuojama daugiau fotonų, nes kai kurie fotonai išsklaidomi į detektorių. Todėl šiuo atveju eksperimentinė silpimo koeficiento vertė yra mažesnė už tikrąją

Pluošto intensyvumo (fotonų skaičiaus per sekundę) sumažėjimas perėjus storio  $dx$  medžiagos sluoksnį:

$$dI = -N\sigma I dx. \quad (10.4.8)$$

Čia  $N$  yra atomų koncentracija, o  $\sigma$  yra pilnutinis sąveikos skerspjūvis:

$$\sigma = \sigma_{fe} + Z\sigma_C + \sigma_p. \quad (10.4.9)$$

Suintegravus (10.4.8) lygybę:

$$I = I_0 \exp(-N\sigma x) = I_0 \exp(-\mu x). \quad (10.4.10)$$

Čia  $\mu$  yra (ilginis) **silpimo koeficientas**:

$$\mu = N\sigma. \quad (10.4.11)$$

**Masinis silpimo koeficientas**:

$$\mu_m = \frac{\mu}{\rho}. \quad (10.4.12)$$

**Pusėjimo storis**:  $\ln 2 / \mu$ .

### 10.5. Neutronų sąveika su medžiaga

Neutronai gali būti sugeriami dėl branduolinių reakcijų arba gali būti išsklaidomi.

*Neutronų pluošto intensyvumo mažėjimas medžiagoje*

$$I = I_0 \exp(-N\sigma x), \quad (10.5.1)$$

čia  $N$  yra medžiagos atomų koncentracija,  $x$  yra medžiagos sluoksnio storis, o  $\sigma$  yra pilnutinis neutrono sąveikos su branduoliu skerspjūvis:

$$\sigma = \sigma_s + \sigma_a, \quad (10.5.2)$$

$\sigma_s$  yra neutrono sklaidos skerspjūvis, o  $\sigma_a$  yra neutrono sugerties (absorbcijos) skerspjūvis.

Kitoks to paties sąryšio pavidalas:

$$I = I_0 \exp(-\Sigma x) = I_0 \exp(-x/\lambda), \quad (10.5.3)$$

čia  $\Sigma$  yra pilnutinis makroskopinis skerspjūvis, o  $\lambda$  yra *vidutinis silpimo atstumas*:

$$\Sigma = N\sigma, \quad (10.5.4)$$

$$\lambda = \frac{1}{\Sigma}. \quad (10.5.5)$$

*Vidutinis laisvasis kelias* – tai vidutinis atstumas, kurį neutronas nueina iki sąveikos įvykio:

$$l = \int_0^{\infty} x f(x) dx. \quad (10.5.6)$$

$f(x)$  yra nueito atstumo iki sąveikos įvykio tikimybės tankis.

$$f(x) \sim \exp\left(-\frac{x}{l}\right). \quad (10.5.7)$$

Todėl

$$l = \frac{\int_0^{\infty} x \exp(-x/\lambda) dx}{\int_0^{\infty} \exp(-x/\lambda) dx} = \lambda. \quad (10.5.8)$$

Vidutinis laisvasis kelias sklaidos atžvilgiu:

$$l_s = \frac{1}{\Sigma_s}, \quad (10.5.9)$$

vidutinis laisvasis kelias sugerties atžvilgiu:

$$l_a = \frac{1}{\Sigma_a}. \quad (10.5.10)$$

Kadangi

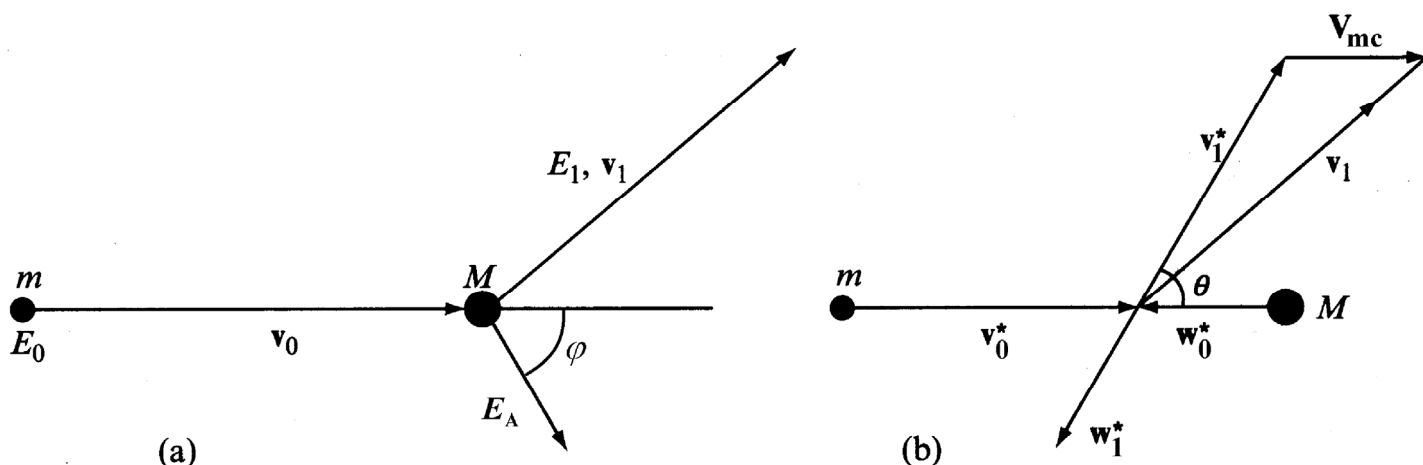
$$\Sigma = N(\sigma_s + \sigma_a) = \Sigma_s + \Sigma_a, \quad (10.5.11)$$

tai

$$\frac{1}{l} = \frac{1}{l_s} + \frac{1}{l_a}. \quad (10.5.12)$$

## Neutronų lėtinimas

Medžiagoje neutronai lėtėja dėl tamprųjų susidūrimų su branduoliais.



**10.5.1 pav.** Tampriosios sklaidos kinematika, kai krintančioji dalelė, kurios masė  $m$ , pradinė energija  $E_0$  ir greitis  $v_0$ , susiduria su nejudančia dalele, kurios masė  $M$ . (a) – laboratorinėje atskaitos sistemoje, (b) – masės centro sistemoje

Masių centro greitis:

$$V_{\text{mc}} = \frac{m}{m+M} v_0. \quad (10.5.13)$$

Greičiai masių centro sistemoje žymimi su žvaigždute.

Neutrono greičio modulis MC sistemoje nesikeičia susidūrimo metu, t. y.  $|v_0^*| = |v_1^*| = v^*$ .

Pradinis neutrono greitis:

$$v_0 = v^* + V_{\text{mc}}. \quad (10.5.14)$$

[\(10.5.13\)](#) → [\(10.5.14\)](#):

$$v^* = \frac{M}{m+M} v_0. \quad (10.5.15)$$

Neutrono greitis po sklaidos:

$$v_1 = v_1^* + V_{\text{mc}}. \quad (10.5.16)$$

Pakėlus kvadratu [\(10.5.16\)](#):

$$v_1^2 = (v^*)^2 + (V_{\text{mc}})^2 + 2v^*V_{\text{mc}} \cos \theta. \quad (10.5.17)$$

Čia  $\theta$  yra sklaidos kampas *masių centro sistemoje* (žr. [10.5.1b pav.](#)). Įrašius [\(10.5.13\)](#) ir [\(10.5.15\)](#) į [\(10.5.17\)](#) ir atsižvelgus į tai, kad  $E_1 / E_0 = (v_1 / v_0)^2$ ,

$$E_1 = E_0 \frac{M^2 + m^2 + 2Mm \cos \theta}{(M+m)^2} \approx E_0 \frac{A^2 + 1 + 2A \cos \theta}{(A+1)^2}. \quad (10.5.18)$$

$$E_1(\text{min}) = E_0 \left( \frac{M-m}{M+m} \right)^2 \approx E_0 \left( \frac{A-1}{A+1} \right)^2 = \alpha E_0. \quad (10.5.19)$$

Kad apskaičiuoti vidutinę neutrono energiją po sklaidos, reikia žinoti jo energijos tikimybės tankį  $P(E)$ , kuris priklauso nuo sklaidos kampo tikimybės tankio  $p(\theta)$ :

$$-p(\theta)d\theta = P(E_1)dE_1 \quad \text{arba} \quad P(E_1) = -\frac{p(\theta)}{dE_1/d\theta}. \quad (10.5.20)$$

Kai neutrono energija yra maža ( $< 10$  MeV), tada sklaida yra izotropinė. Tai reiškia, kad sklaidos į sferos paviršiaus elementą tikimybė lygi to elemento ploto ir visos sferos ploto santykiui:

$$\frac{dS}{4\pi r^2} = \frac{r^2 \sin\theta d\theta d\phi}{4\pi r^2} = \frac{\sin\theta d\theta d\phi}{4\pi}. \quad (10.5.21)$$

Suintegravus (10.5.21) kampo  $\phi$  atžvilgiu:

$$p(\theta)d\theta = \frac{2\pi \sin\theta d\theta}{4\pi} = \frac{1}{2} \sin\theta d\theta,$$

t. y.

$$p(\theta) = \frac{1}{2} \sin\theta. \quad (10.5.22)$$

Remiantis anksčiau išvesta  $E_1$  išraiška (10.5.18),

$$\frac{dE_1}{d\theta} = -\frac{2AE_0 \sin\theta}{(A+1)^2}. \quad (10.5.23)$$

(10.5.22), (10.5.23)  $\rightarrow$  (10.5.20):

$$P(E_1) = \frac{1}{(1-\alpha)E_0}. \quad (10.5.24)$$

Kadangi tai yra konstanta, tai vidutinė neutrono energija po sklaidos yra

$$\bar{E}_1 = \frac{1}{2}(E_1(\min) + E_0) = \frac{1}{2}(1+\alpha)E_0. \quad (10.5.25)$$

Vidutinis energijos sumažėjimas:

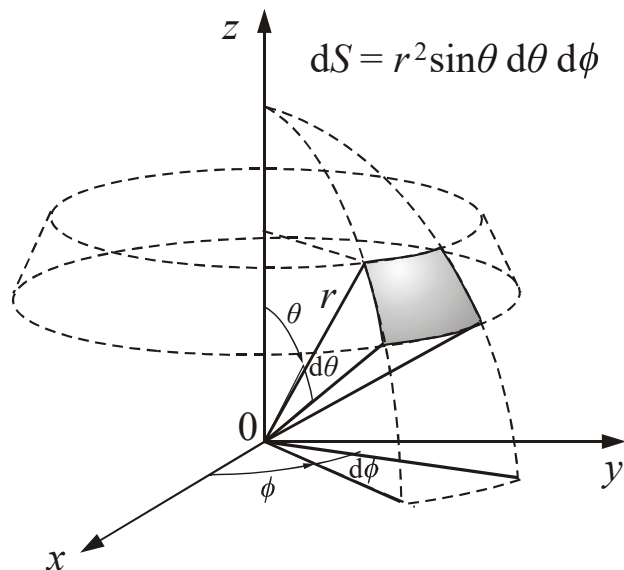
$$\Delta\bar{E} = E_0 - \bar{E}_1 = \frac{1}{2}(1-\alpha)E_0. \quad (10.5.26)$$

Vidutinis santykinis energijos sumažėjimas:

$$\Delta\bar{E}/E_0 = \frac{1}{2}(1-\alpha). \quad (10.5.27)$$

Po  $n$  tarpriųjų susidūrimų neutrono vidutinė energija lygi

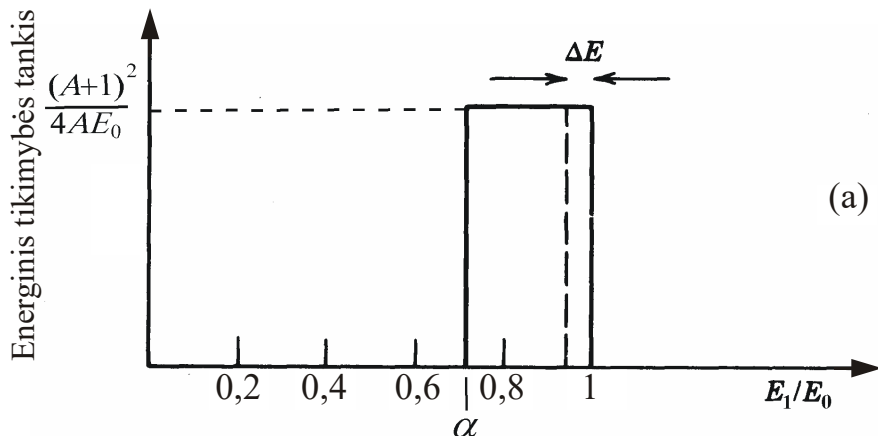
$$\bar{E}_n = E_0 \left( \frac{\bar{E}_1}{E_0} \right)^n = E_0 \left( \frac{1+\alpha}{2} \right)^n. \quad (10.5.28)$$



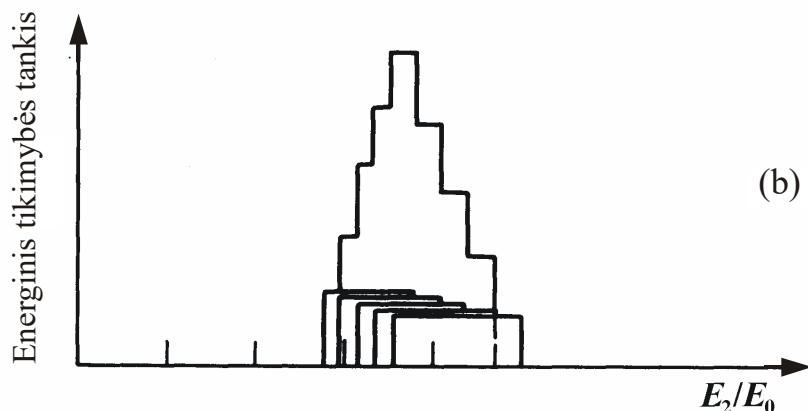
10.5.2 pav. Sferos paviršiaus elementas, į kurį yra išsklaidomas neutronas

**10.5.3 pav.** Neutrono energijos skirstinys po vieno arba kelių tamprųjų susidūrimų.

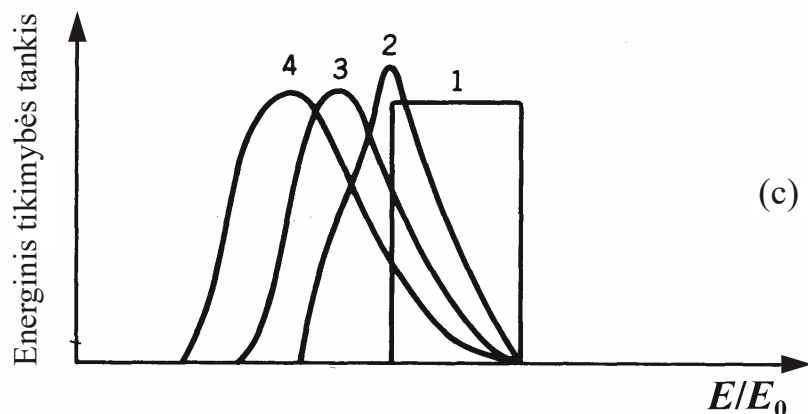
(a) Neutrono, kurio pradinė energija  $E_0$ , energijos skirstinys po pirmojo tampriojo susidūrimo su  $^{12}\text{C}$  branduoliu.



(b) Padalijus išsklaidytojo neutrono energijos skirstinį į 5 vienodus siaurus skirstinius, po antrojo tampriojo susidūrimo gaunami 5 tolydieji skirstiniai, kurių suma yra skirstinys su maksimumu.



(c) Tiksliai apskaičiuotieji energijos skirstiniai po 1, 2, 3 ir 4 tamprųjų susidūrimų.



Vietoj vidutinės neutrono energijos patogiau vartoti **vidutinę logaritminę neutrono energiją**  $E'_n$ :

$$E'_n \equiv \exp(\overline{\ln E_n}). \quad (10.5.29)$$

Neutrono energijos natūraliojo logaritmo vidutinį sumažėjimą po vieno sklaidos įvykio vadinamas **vidutiniu logaritminiu energijos dekrementu** ir žymimas  $\xi$ :

$$\xi = \ln E_0 - \overline{\ln E_1} = \overline{\ln(E_0/E_1)} = \int_{\alpha E_0}^{E_0} \ln(E_0/E_1) P(E_1) dE_1 = \int_{E_0}^{\alpha E_0} \ln(E_1/E_0) P(E_1) dE_1. \quad (10.5.30)$$

Irašius  $P(E_1)$  išraišką (10.5.24) į (10.5.30) ir apibrėžus naują integravimo kintamąjį  $x = E_1/E_0$ ,

$$\xi = \frac{1}{1-\alpha} \int_1^\alpha \ln x dx = 1 + \frac{\alpha}{1-\alpha} \ln \alpha = 1 + \frac{(A-1)^2}{2A} \ln \left( \frac{A-1}{A+1} \right). \quad (10.5.31)$$

Matome, kad  $\xi$  nepriklauso nuo pradinės energijos  $E_0$ . Todėl po  $n$  susidūrimų vidutinė  $\ln E_n$  vertė yra lygi

$$\overline{\ln E_n} = \ln E_0 - n\xi \quad \text{arba} \quad \ln E'_n = \ln E_0 - n\xi. \quad (10.5.32)$$

Todėl vidutinis sklaidos įvykių skaičius, kuris reikalingas, kad neutrono energija sumažėtų nuo  $E_0$  iki  $E'_n$ , yra

$$n = \frac{1}{\xi} \ln \frac{E_0}{E'_n}. \quad (10.5.33)$$

Susidūrimų skaičius, kuris reikalingas greitųjų neutronų pavertimui šiluminiais neutronais, yra apskaičiuojamas pagal tą pačią formulę, kai  $E'_n = kT$ .

**10.5.1 lentelė.** Kai kurių nuklidų neutronų sklaidos parametrai (pradinė neutrono energija yra 2 MeV)

Nuklidas	$\alpha$	$\xi$	$n$ (iki termalizacijos)
$^1\text{H}$	0	1,000	18
$^2\text{H}$	0,111	0,725	25
$^4\text{He}$	0,360	0,425	43
$^{12}\text{C}$	0,716	0,158	115
$^{238}\text{U}$	0,983	0,0084	2200

### Neutronų sukeltas radioaktyvumas

Vienas iš  $(n, \gamma)$  reakcijų taikymų yra radioaktyvių nuklidų gaminimas. Reakcijos įvykių skaičius per sekundę (reakcijos sparta) išreiškiama pagal (9.2.8):

$$R = Nj\sigma.$$

$N$  mažėjimas dėl neutronų pagavimo yra palyginti lėtas. Todėl  $R$  yra beveik pastovi. Antrinio nuklido (t. y. nuklido, kuris atsiranda dėl neutronų pagavimo) branduolių skaičiaus pokytis per nykstantį laiką  $dt$ :

$$dN_1 = Rdt - \lambda_1 N_1 dt, \quad (10.5.34)$$

čia  $\lambda_1$  yra antrinio nuklido skilimo konstanta. Diferencialinės lygties (10.5.34) sprendinys, atitinkantis pradinę sąlygą  $N_1(0) = 0$ :

$$N_1(t) = \frac{R}{\lambda_1} (1 - e^{-\lambda_1 t}). \quad (10.5.35)$$

Antrinio nuklido aktyvumas (žr. (8.1.7)):

$$\Phi(t) = \lambda_1 N_1(t) = R(1 - e^{-\lambda_1 t}). \quad (10.5.36)$$

Jeigu  $\lambda_1 t \ll 1$ ,

$$\Phi(t) \approx R\lambda_1 t. \quad (10.5.37)$$

Jeigu  $\lambda_1 t \gg 1$ ,

$$\Phi(t) \approx R. \quad (10.5.38)$$

## 11. Branduolinių ir termobranduolinių reaktorių fizikos pradmenys

### 11.1. Branduolių dalijimosi reakcija

*Branduolio dalijimosi metu išsiskirianti energija*

Kinetinė energija  $Q$ , kuri išsiskiria dalijantis branduoliui, kurio masės skaičius  $A$ , į dvi „skeveldras“ (antrinius branduolius), kurių masės skaičiai  $A_1$  ir  $A_2$ :

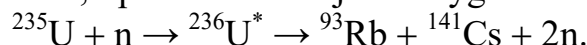
$$Q = E_{R1} + E_{R2} - E_R, \quad (11.1.1)$$

$$\begin{aligned} Q &= A_1 \delta E_{R1} + A_2 \delta E_{R2} - A \delta E_R = A_1 \delta E_{R1} + (A - A_1) \delta E_{R2} - A \delta E_R = \\ &= A_1 (\delta E_{R1} - \delta E_{R2}) + A (\delta E_{R2} - \delta E_R), \end{aligned} \quad (11.1.2)$$

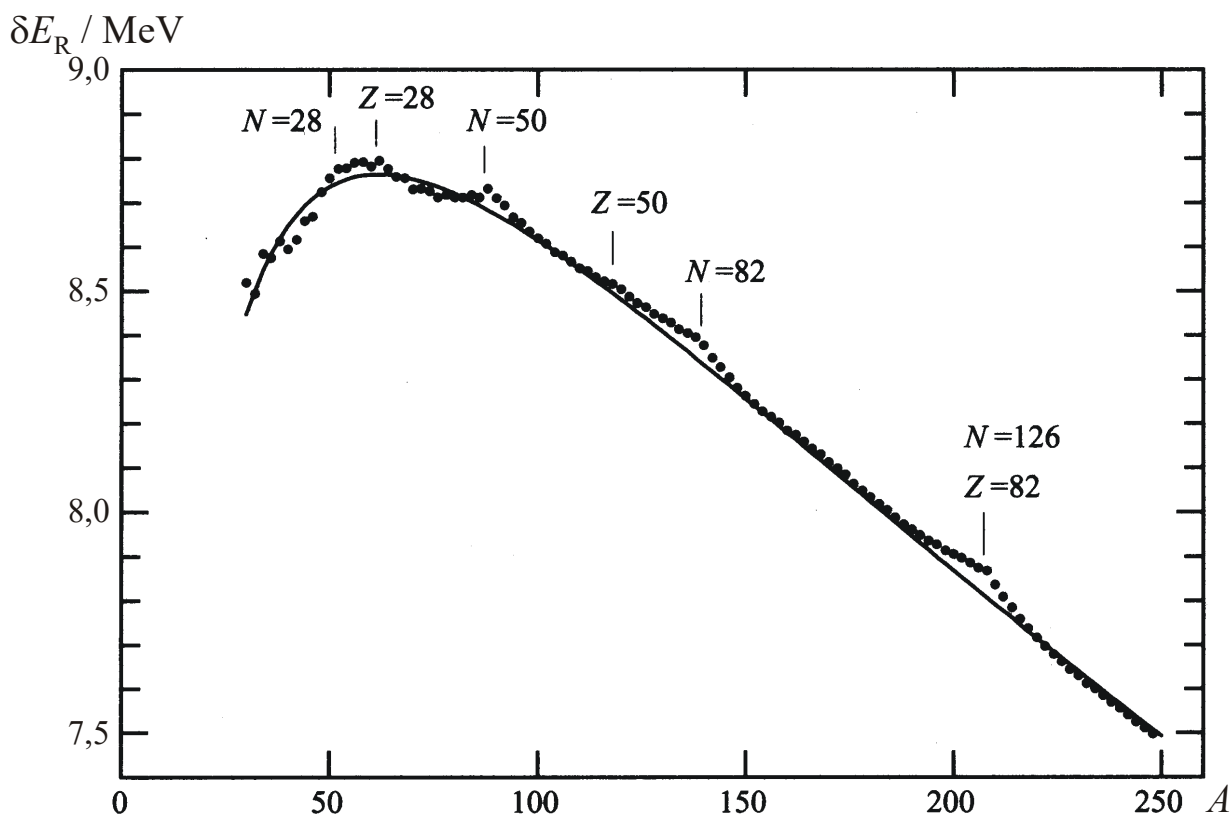
čia  $E_R$ ,  $E_{R1}$  ir  $E_{R2}$  yra pirminio branduolio ir abiejų skeveldrų ryšio energijos, o  $\delta E_R$ ,  $\delta E_{R1}$  ir  $\delta E_{R2}$  yra atitinkamos savitosios ryšio energijos. Pvz., jeigu pirminis branduolys yra urano izotopo  $^{238}\text{U}$ , o abi skeveldros yra vienodos, tada

$$Q = A(\delta E_{R2} - \delta E_R) = 238 \cdot (8,5 - 7,6) \text{ MeV} = 214 \text{ MeV}$$

(žr. [11.1.1 pav.](#)). Toks apskaičiavimas neatsižvelgia į tai, kad dalijimosi metu atsiranda ir keli neutronai (t. y.  $A_1 + A_2 < A$ ). Pvz., tipiška  $^{235}\text{U}$  dalijimosi lygtis:

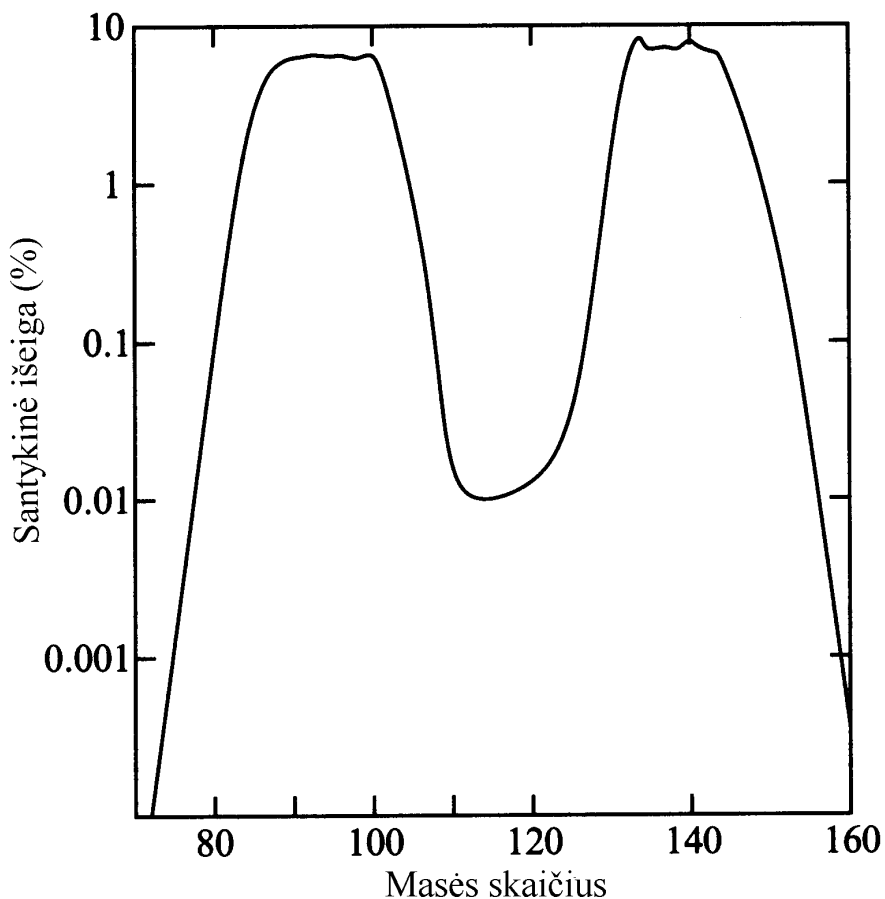


Tačiau ir tikslesnis apskaičiavimas rodo, kad vidutinė išsiskyrusi energija yra maždaug 200 MeV. Didžioji jos dalis (maždaug 170 MeV) – tai skeveldrų kinetinė energija. Likusioji energija – tai neutronų ir gama spinduliuotės energija.



**11.1.1 pav.** Savitosios ryšio energijos priklausomybė nuo branduolio masės skaičiaus  $A$ , kai  $A > 30$ . Glodžioji kreivė apskaičiuota pagal Veiczekerio formulę (7.3.7), o taškai atitinka matavimų duomenis. Kai  $A$  vertė yra lyginė, atidėtas branduolių su masės skaičiais  $A - 1$  ir  $A + 1$  savitųjų ryšio energijų verčių vidurkis, kad Veiczekerio formulės porų dėmuo neturėtų įtakos



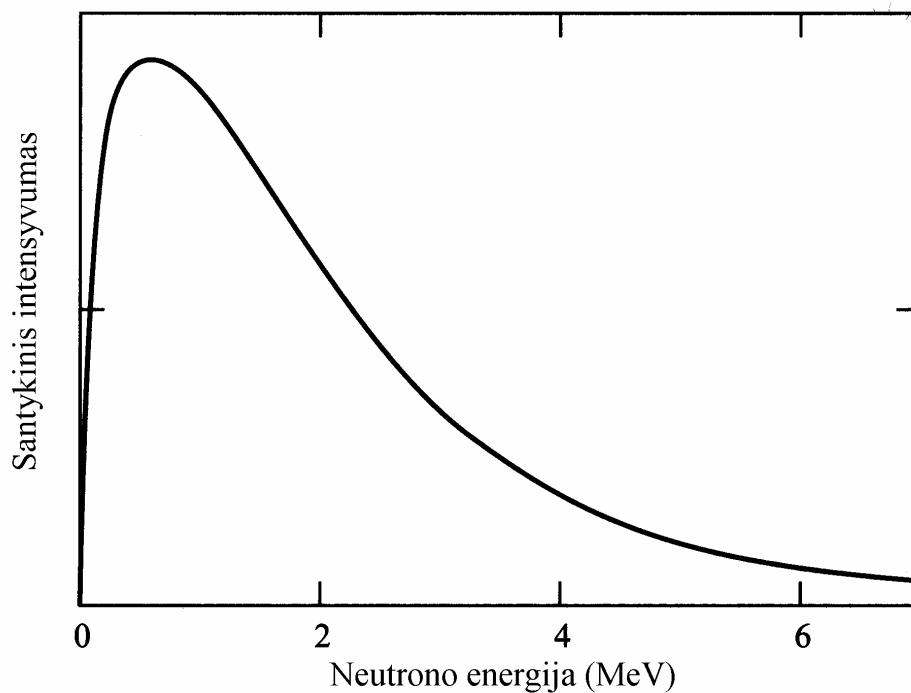


11.1.2 pav. Dalijimosi skeveldrų masių pasiskirstymas

Energija, kuri išsiskiria branduolio dalijimosi momentu, yra vadinama „greitąja“ (momentine) energija. Tačiau energija išsiskiria ir vėliau – dėl dalijimosi produktų  $\beta^-$  skilimo.

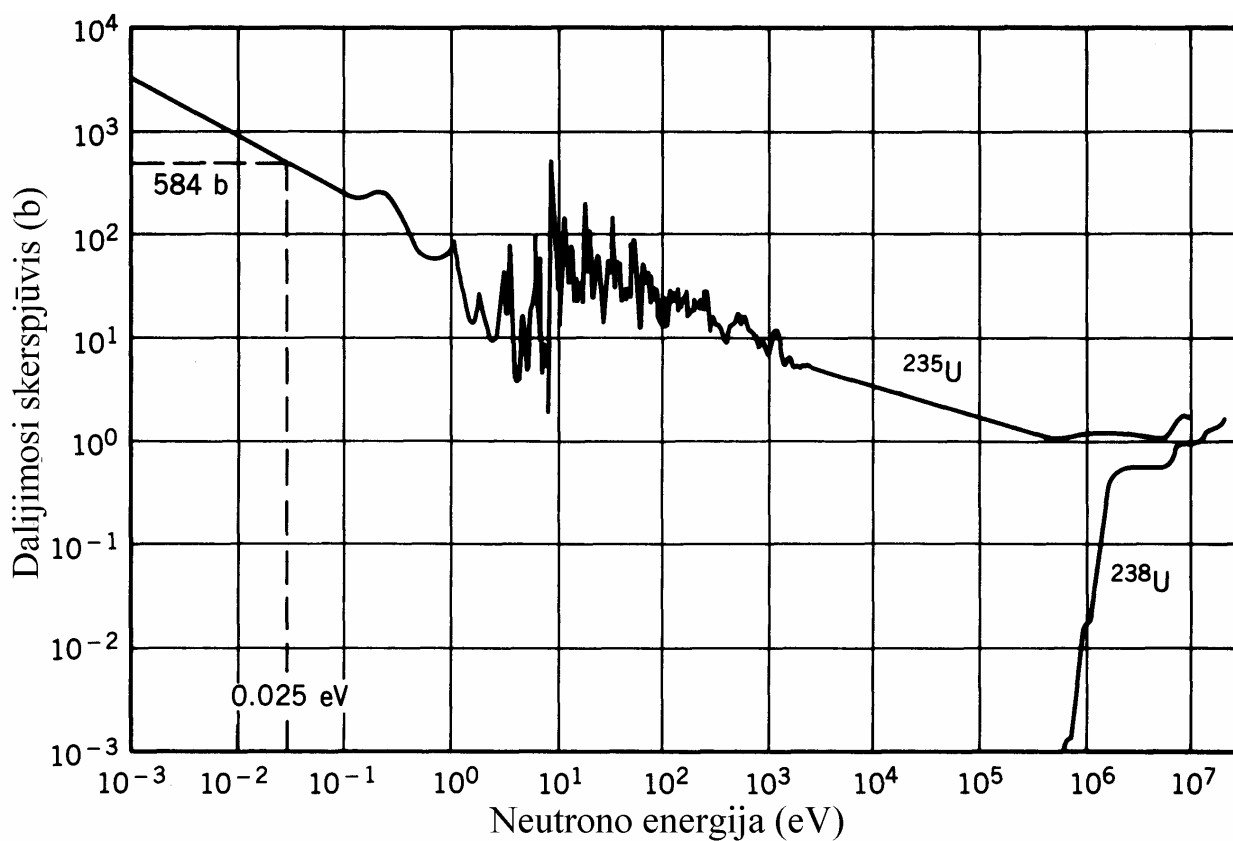
11.1.1 lentelė. Vieno  $^{235}\text{U}$  branduolio dalijimosi energijos pasiskirstymas

Šaltinis	Emituota energija (MeV)
Momentinė energija:	
Dalijimosi skeveldros	168
Momentiniai neutronai	5
Gama spinduliavimas ir vidinės konversijos elektronai	7
Skeveldrų radioaktyvumas:	
$\beta^-$ skilimas (elektronai)	8
$\beta^-$ skilimas (antineutrinai)	12
Gama spinduliavimas ir vidinės konversijos elektronai	7
Iš viso	207



11.1.3 pav. Neutronų, emituojamų dalijantis  $^{235}\text{U}$  branduoliams, energijos spektras

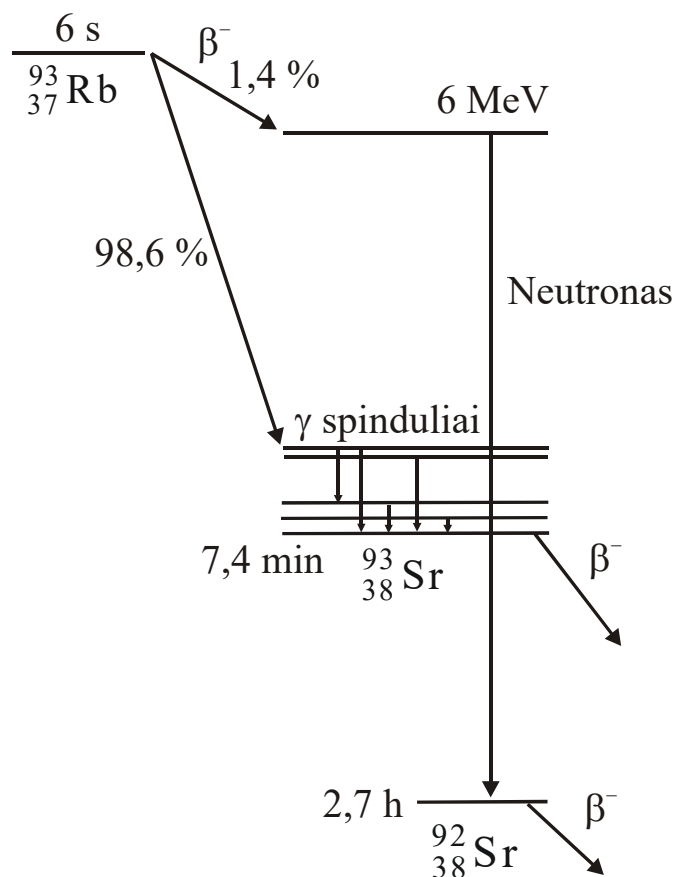
*Dalijimosi reakcijos skerspjūvis*



11.1.4 pav. Neutronų sukulto dalijimosi skerspjūvio priklausomybė nuo neutrono energijos

### Neutronų emisija dalijantis sunkiesiems branduoliams

**Momentiniai neutronai** išlekia iš branduolio kartu su dviem dalijimosi skeveldromis. Vidutinis momentinių neutronų skaičius, dalijantis vienam  $^{235}\text{U}$  branduoliui, yra 2,42. Neutronai, kuriuos emituoja dalijimosi skeveldros, vadinami **vėluojančiais neutronais**. Iš 100 dalijimosi įvykių vidutiniškai tik po vieno atsiranda vėluojantysis neutronas. Tačiau vėluojantieji neutronai vaidina esminį vaidmenį valdant grandininės reakcijos spartą šiluminių neutronų branduoliniuose reaktoriuose.



**11.1.5 pav.** Vėluojančiųjų neutronų emisija, skylančiam  $^{93}\text{Rb}$

## 11.2. Valdoma branduolių dalijimosi reakcija šiluminių neutronų reaktoriuje

### Grandininė branduolių dalijimosi reakcija

Grandininės branduolių dalijimosi reakcijos procesą apibūdina **neutronų daugėjimo faktorius**:

$$k = N_1/N. \quad (11.2.1)$$

Čia  $N_1$  yra laisvųjų neutronų skaičius duotojoje grandininės reakcijos kartoje, o  $N$  yra neutronų skaičius ankstesniojoje kartoje. Jeigu  $k < 1$ , grandininė reakcija nevyksta. Jeigu  $k = 1$ , laisvųjų neutronų skaičius yra pastovus, todėl per laiko vienetą skylančių branduolių skaičius taip pat yra pastovus (tokia grandininė reakcija vykdoma branduoliniuose reaktoriuose). Jeigu  $k > 1$ , tada laisvųjų neutronų skaičius ir skylančių per laiko vienetą branduolių skaičius nuolat didėja.

Daugumoje branduolinių reaktorių medžiaga, kurioje vyksta grandininė dalijimosi reakcija („branduolinis kuras“), yra uranas (atominis numeris 92). Gamtinis uranas yra dviejų izotopų mišinys:  $^{238}\text{U}$  (99,28 %) ir  $^{235}\text{U}$  (0,72 %).

Daugumą neutronų absorbuoja  $^{238}\text{U}$  branduoliai, kurie dalijasi tik tada, kai neutrono energija didesnė už 1 MeV.  $^{235}\text{U}$  dalijasi, sugėręs bet kokios energijos neutroną.

**Sodrinimas** – tai  $^{235}\text{U}$  kiekio padidinimas branduoliniame kure.

### Neutronų lėtikliai

**Neutronų lėtiklis** – tai medžiaga, kuri naudojama greitųjų neutronų energijos sumažinimui iki verčių, kurios artimos šiluminei energijai  $kT$ .

**11.2.1 lentelė.** Neutronų lėtiklių parametrai

Medžiaga	Tankis, g/cm <sup>3</sup>	$\sigma_s$ , b	$\sigma_a$ , b	$\xi$
H <sub>2</sub> O	1,0	49,2	0,66	0,920
D <sub>2</sub> O	1,1	10,6	0,001	0,509
Grafitas	1,6	4,7	0,0045	0,158

### Neutronų ciklas šiluminių neutronų reaktoriuje

**11.2.2 lentelė.** Šiluminių neutronų sąveikos su urano branduoliais skerspjūviai

Medžiaga	Tankis, g/cm <sup>3</sup>	$\sigma_d$ (b)	$\sigma_p$ , b	$\sigma_a$ , b	$\sigma_s$
<sup>235</sup> U	18,7	579	101	680	10
<sup>238</sup> U	18,9	0	2,72	2,72	8,3
Natūralus U	18,9	4,17	3,43	7,60	8,3

Reaktoriaus pagrindinės komponentės: 1) branduolinis kuras (<sup>235</sup>U ir <sup>238</sup>U mišinys), 2) lėtiklis. Neutrono sąveikos vyksmai: 1) neutronų absorbcija, 2) neutronų sklaida.

Neutrono absorbcija yra dviejų rūšių:

- 1) absorbcija dalijantis branduoliui (taip absorbuoti šiluminius neutronus gali tik <sup>235</sup>U),
- 2) spinduliuojamasis neutrono pagavimas (taip absorbuoti neutronus gali ir <sup>235</sup>U, ir <sup>238</sup>U).

Neutronų skaičius kinta šiuose neutrono gyvavimo etapuose:

- 1) šiluminių neutronų absorbcija branduoliniame kure (atsirandant antriniam neutronams);
- 2) neutronų sąveika su branduoliniu kuru, kol jų energija dar yra didelė (1 MeV eilės);
- 3) neutronų sąveika su branduoliniu kuru, kai jų energija yra (1 – 130) eV;
- 4) šiluminių neutronų sąveika su lėtiklio branduoliais iki absorbcijos branduoliniame kure;

Kiekvieną iš jų atitinka tam tikras daugiklis neutronų daugėjimo faktoriaus išraiškoje. 1 ir 2 etapuose atitinkamas daugiklis yra didesnis už vienetą (neutronų skaičius didėja), o 3 ir 4 etapuose atitinkamas daugiklis yra mažesnis už vienetą (neutronų skaičius mažėja). Jeigu branduolinis kuras yra išdėstytas strypais, kuriuos supa lėtiklis (**heterogeninis reaktorius**), tada neutronas po jo atsiradimo visų pirma juda kure, paskui išseina į lėtiklį, o paskui, praradęs didžiąją energijos dalį, pataiko į kuro strypą, kuriame yra absorbuojamas. Todėl neutronų energijos spektrai branduoliniame kure ir lėtiklyje yra skirtingi (kuro strypuose yra santykinai mažiau tarpinių energijų neutronų, negu lėtiklyje). Be to, heterogeninio reaktoriaus atveju neutronų energijos spektras branduoliniame kure priklauso nuo to, koku atstumu nuo strypo paviršiaus jis yra matuojamas, nes didžiąją šiluminių neutronų dalį absorbuoja kuro branduoliai, kurie yra arčiau strypo paviršiaus. Todėl heterogeninio reaktoriaus analizė yra daug sudėtingesnė, negu **homogeninio reaktoriaus**, kuriame lėtiklio ir branduolinio kuro atomai yra tolygiai sumaišyti tarpusavyje.

Toliau yra pateiktos kiekvieno iš minėtų keturių daugiklių išraiškos.

1. Vidutinis neutronų skaičius, kuris lieka, kai branduolinis kuras absorbuoja neutroną:

$$\eta = \nu \frac{\sigma_d}{\sigma_d + \sigma_p}. \quad (11.2.2)$$

Natūralaus urano dalijimosi ir pagavimo skerspjūviai:

$$\sigma_d = 0,0072 \sigma_d(^{235}\text{U}) + 0,9928 \sigma_d(^{238}\text{U}) = 4,17 \text{ b}$$

$$\sigma_p = 0,0072 \sigma_p(^{235}\text{U}) + 0,9928 \sigma_p(^{238}\text{U}) = 3,43 \text{ b}$$

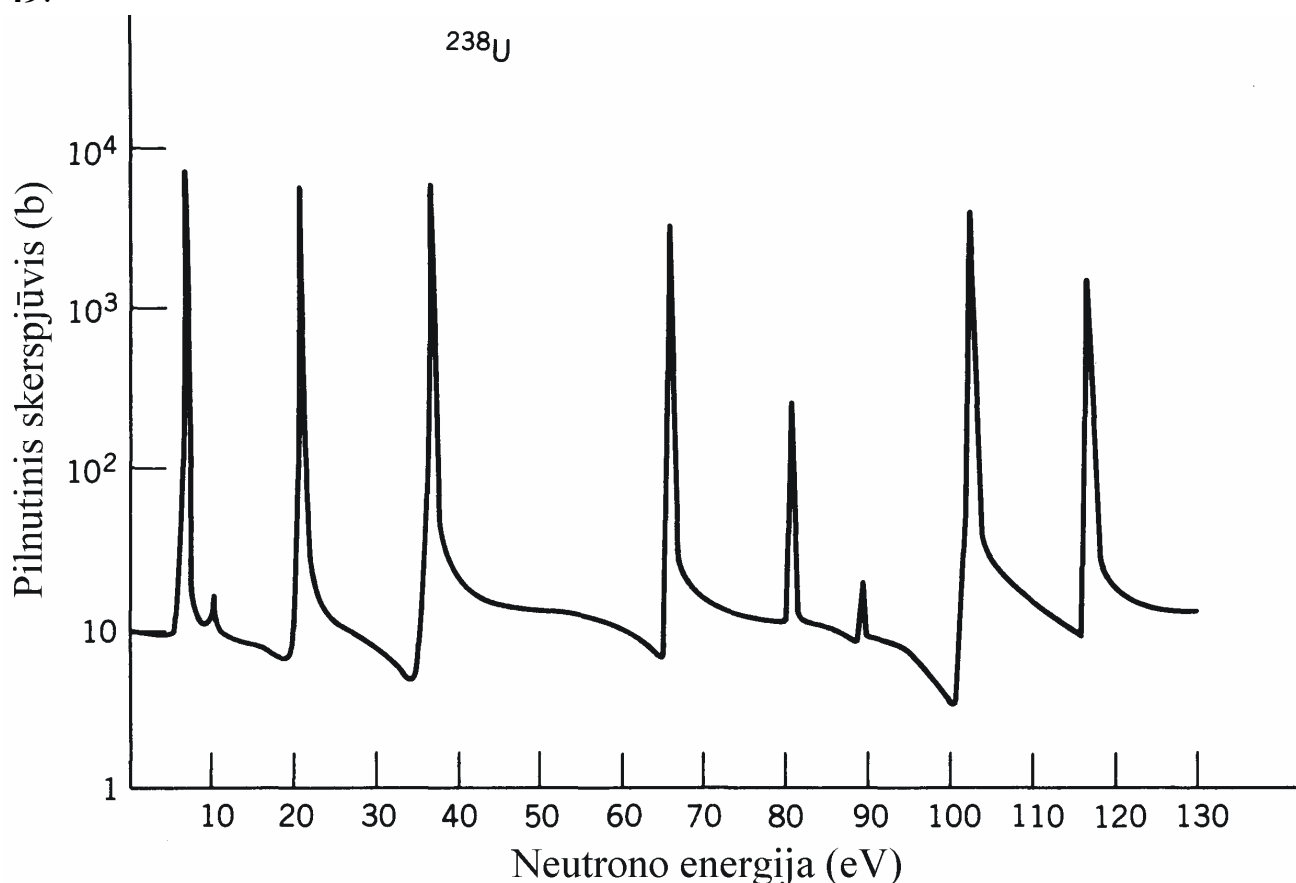
Todėl natūralaus urano  $\eta = 1.33$ . Jeigu uranas prisodrintas iki 1,6 %  $^{235}\text{U}$ , tada  $\eta = 1,654$ .

2. Sparčiojo dalijimosi koeficientas  $\varepsilon > 1$ . Gali siekti 1,03. Dažniausiai  $\varepsilon \approx 1$ .

3. Rezonansinis pagavimas. *Tikimybė išvengti rezonansinio pagavimo p*. Apytikslė  $p$  išraiška homogeniniam reaktoriui:

$$p = \exp \left[ -\frac{2,73}{\langle \xi \rangle} \left( \frac{N_{238}}{N_L \Sigma_s} \right)^{0,514} \right]; \quad \text{čia } \Sigma_s \equiv N \sigma_s \quad (\text{makroskopinis sklaidos skerspjūvis}). \quad (11.2.3)$$

Grafito-urano reaktoriui, kuriame uranas prisodrintas iki 1,6 % , o  $N_{238} / N_L = 1 / 600$ ,  $p = 0,749$ .



**11.2.1 pav.** Neutronų sąveikos su  $^{238}\text{U}$  branduoliais pilnutinio skerspjūvio priklausomybė nuo neutrono energijos rezonansinio neutronų pagavimo srityje. Smailės atitinka rezonansinį neutronų pagavimą

#### 4. Šiluminio panaudojimo koeficientas:

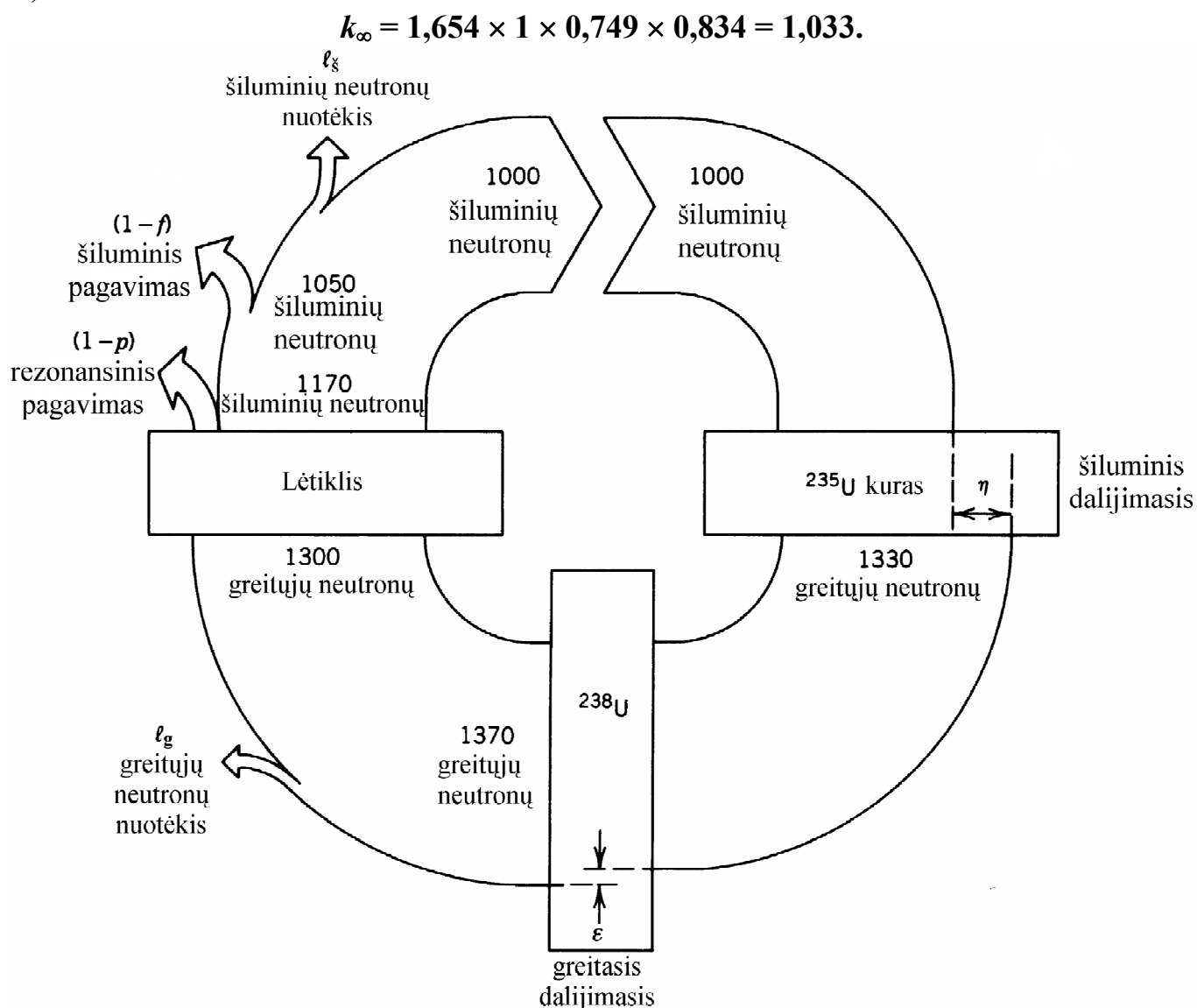
$$f = \frac{\Sigma_a(K)}{\Sigma_a(K) + \Sigma_a(L) + \Sigma_a(S)} \equiv \frac{N_K \sigma_a(K)}{N_K \sigma_a(K) + N_L \sigma_a(L) + N_S \sigma_a(S)}. \quad (11.2.4)$$

Homogeniniam grafito-urano reaktoriui, kuriame uranas prisodrintas iki 1,6 % , o  $N_L / N_K = 600$ ,  $f = 0,834$ .

Kai nėra neutronų nuotėkio (t. y. begalinių matmenų reaktoriaus atvejis),

$$k_\infty = \eta \epsilon p f. \quad (11.2.5)$$

Pvz.,



11.2.2 pav. Neutronų skaičiaus kitimas viename branduolinio reaktoriaus cikle

### 11.3. Branduolių sintezė

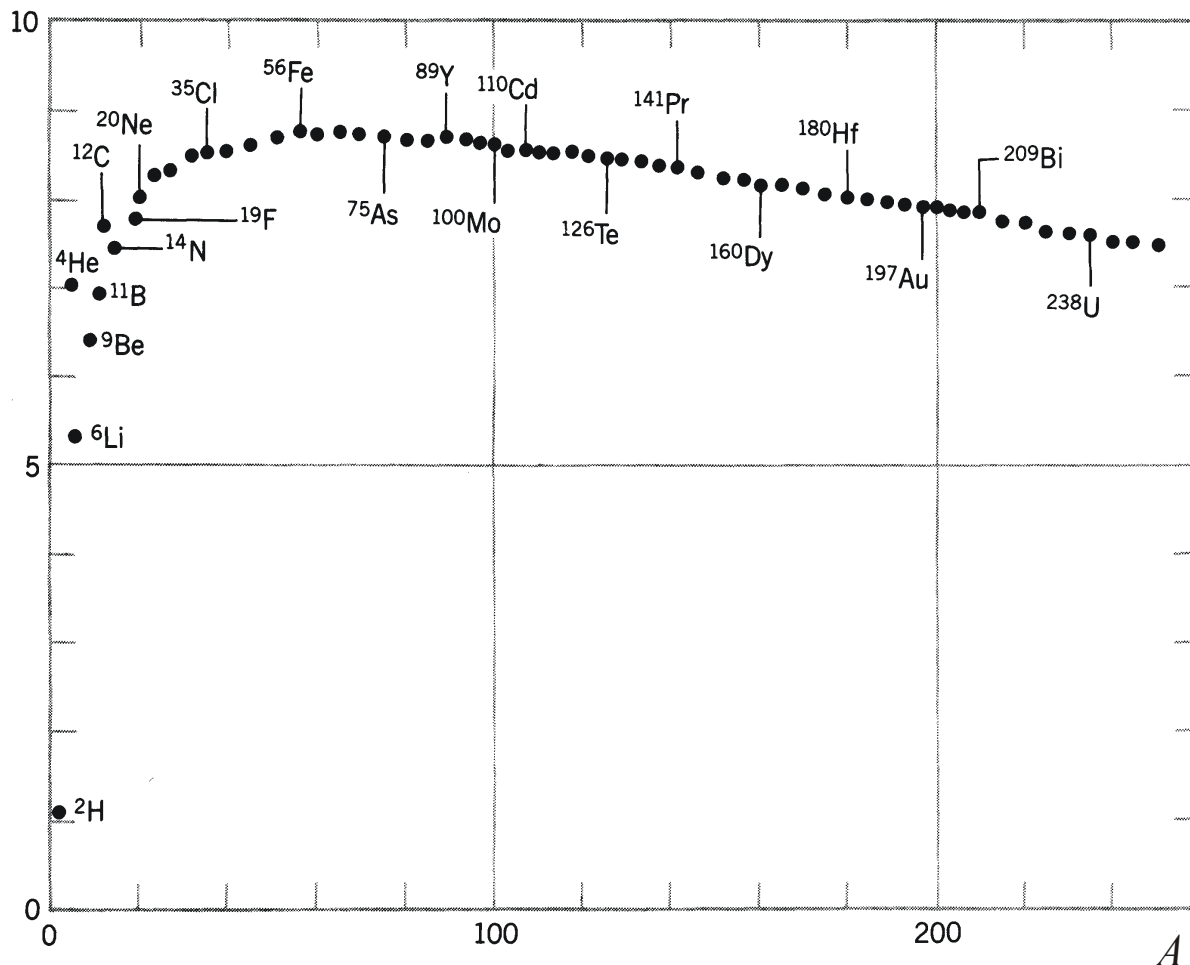
Energija  $Q$ , kuri išsiskiria susijungiant dviem branduoliams, kurių masės skaičiai  $A_1$  ir  $A_2$ , į vieną branduolį, kurio masės skaičius  $A$ :

$$Q = E_R - E_{R1} - E_{R2}. \quad (11.3.1)$$

$$\begin{aligned} Q &= A\delta E_R - A_1\delta E_{R1} - A_2\delta E_{R2} = A\delta E_R - A_1\delta E_{R1} - (A - A_1)\delta E_{R2} = \\ &= A_1(\delta E_{R2} - \delta E_{R1}) + A(\delta E_R - \delta E_{R2}). \end{aligned} \quad (11.3.2)$$

$Q$  ženklą lemia antrojo skirtumo ženklas. Todėl, kad  $Q$  būtų teigiamas,  $A_1$  ir  $A_2$  vertės turi būti toje priklausomybės  $\delta E_R(A)$  srityje, kurioje  $\delta E_R$  didėja didėjant  $A$ . Tai atitinka lengvuosius branduolius (žr. [11.3.1 pav.](#)).

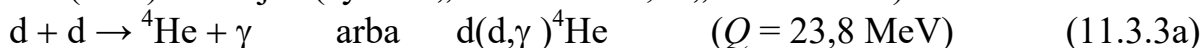
$\delta E_R / \text{MeV}$



**11.3.1 pav.** Savitosios ryšio energijos priklausomybė nuo branduolio masės skaičiaus  $A$

Lengviausia realizuoti mažiausio krūvio branduolių (vandenilio arba helio izotopų) sintezę. Reakcijų pavyzdžiai:

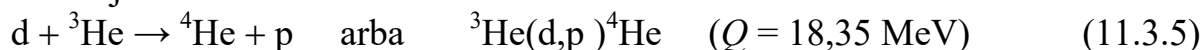
deuterio-deuterio (D-D) reakcijos (žymuo „d“ reiškia  $^2\text{H}$ , o „t“ reiškia  $^3\text{H}$ ):



deuterio-tričio (D-T) reakcija:



deuterio-helio reakcija:



### Branduolių sintezės reakcijos produktų kinetinė energija

Jeigu reakcijos metu atsiranda dvi nereliatyvistinės dalelės  $x$  ir  $Y$  ( $x$  – lengvoji dalelė, o  $Y$  – branduolys), tada

$$\frac{m_x v_x^2}{2} + \frac{m_Y v_Y^2}{2} \approx Q, \quad m_x v_x = m_Y v_Y, \quad (11.3.6)$$

$$\frac{1}{2} m_x v_x^2 = \frac{Q}{1 + m_x / m_Y}, \quad \frac{1}{2} m_Y v_Y^2 = \frac{Q}{1 + m_Y / m_x}, \quad (11.3.7)$$

$$\frac{\frac{1}{2} m_x v_x^2}{\frac{1}{2} m_Y v_Y^2} = \frac{m_Y}{m_x}. \quad (11.3.8)$$

Pvz., D-T reakcijoje 80 % visos išsiskyrusios energijos nusineša neutronas.

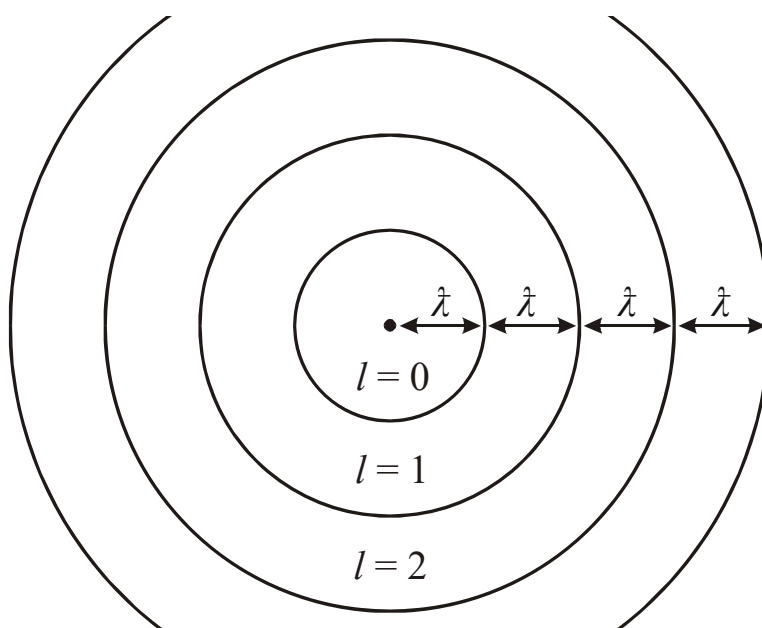
### Branduolių sintezės reakcijos skerspjūvis

Dviejų branduolių susidūrimą galima formaliai nagrinėti kaip vienos dalelės, kurios masė lygi abiejų branduolių redukuotajai masei  $m$ , o greitis lygus branduolių reliatyviajam greičiui  $v$  (t. y. jų greičių skirtumui), susidūrimą su nejudančiu taikiniu. Tos „efektinės“ dalelės būseną galima nusakyti plokščiąja banga. Kaip minėta [9.4 skirsnio](#) pabaigoje, tą plokščiąją bangą galima išreikšti sferinių dalinių bangų suma. Tada pagal [\(9.4.16\)](#) užtenka atsižvelgti tik į tas dalines sferines bangas, kurių

$$l < \frac{R}{\lambda} = l_{\max}, \quad (11.3.9)$$

čia  $R$  yra reaguojančių branduolių spindulių suma. Didžiausias reakcijos skerspjūvis – tai skritulio, kurio spindulys lygus didžiausios žiedinės zonos išoriniam spinduliui, plotas (žr. [11.3.2 pav.](#)), t. y.

$$\sigma = \pi(l_{\max} + 1)^2 \lambda^2 = \pi(R + \lambda)^2. \quad (11.3.10)$$



**11.3.2 pav.** Judesio kiekio momento sritys plokščiai krintančiajai bangai, kurios kryptis statmena brėžinio plokštumai. Dalelės, kurių orbitinis kvantinis skaičius  $l$ , pataiko į  $l$ -tąjį žiedą



Kai reaguoja vandenilio izotopų branduoliai, kurių energija yra  $\sim 10$  keV, tada pagal (1.9.5)

$$\lambda \gg R, \quad (11.3.11)$$

(11.3.11)  $\rightarrow$  (11.3.10):

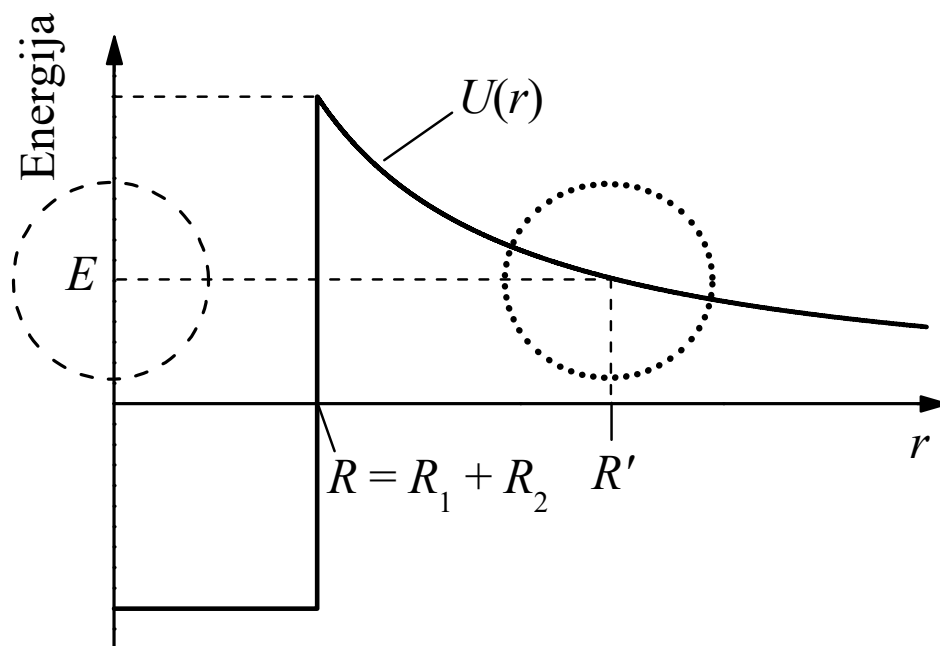
$$\sigma \approx \pi \lambda^2 = \frac{\pi}{k^2} = \frac{\pi \hbar^2}{p^2} = \frac{h^2}{4\pi m^2 v^2}. \quad (11.3.12)$$

Tikrasis sintezės reakcijos skerspjūvis yra mažesnis dėl reaguojančių branduolių Kulono stūmos, kurios energija lygi

$$U(r) = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{Z_1 Z_2}{r}. \quad (11.3.13)$$

Kulono potencialo barjero aukštis:

$$U_c = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{Z_1 Z_2}{R_1 + R_2}. \quad (11.3.14)$$



11.3.3 pav. Kulono potencialo barjeras branduolių sintezei

Branduoliai susijungia tik po tuneliavimo pro šį barjerą. Kulono barjero pavidalas ir tunelinio efekto matematinė analizė yra analogiški alfa skilimo atvejui (žr. 8.2 skirsnis). Kaip ir alfa skilimo konstantos išraiškoje, branduolių sintezės reakcijos skerspjūvio išraiškoje atsiranda papildomas daugiklis – barjero skaidris  $S$ , kuris nusakomas (2.2.11) formule:

$$\sigma \approx \frac{h^2}{4\pi m^2 v^2} S, \quad S = e^{-2G}, \quad G \equiv \frac{1}{\hbar} \int_R^{R'} \sqrt{2m(U(r) - E)} dr. \quad (11.3.15)$$

čia  $G$  yra **Gamovo faktorius**.  $R'$  yra atstumas, kur krintančiojo branduolio energija tampa lygi Kulono stūmos energijai, t. y. lygties  $U(r) = E$  sprendinys:

$$R' = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Z_1 Z_2 e^2}{E}. \quad (11.3.16)$$

Įrašius šią  $R'$  išraišką į  $G$  išraišką (11.3.15) ir apskaičiavus integralą, gaunama

$$G = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2 E}} \cdot \frac{Z_1 Z_2 e^2}{4\pi\epsilon_0} [\arccos \sqrt{x} - \sqrt{x(1-x)}], \quad (11.3.17)$$

čia  $x = R / R' = E / U_c$ . Kadangi  $x \ll 1$ , tai reiškiny s laužtiniuose skliaustuose yra apytiksliai lygus  $\pi / 2$ . Kadangi  $m / E = 2 / v^2$ , tai

$$G \approx \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{\pi Z_1 Z_2}{\hbar v} = \frac{e^2}{4\epsilon_0} \frac{Z_1 Z_2}{\hbar v}, \quad (11.3.18)$$

čia  $v$  yra reaguojančių branduolių reliatyvusis greitis. (11.3.18)  $\rightarrow$  (11.3.15):

$$\sigma \approx \frac{\hbar^2}{4\pi m^2} \cdot \frac{1}{v^2} \exp\left(-\frac{e^2}{2\epsilon_0} \frac{Z_1 Z_2}{\hbar v}\right). \quad (11.3.19)$$

T. y.

$$\sigma \sim \frac{1}{v^2} e^{-2G}, \quad G \sim \frac{1}{v}. \quad (11.3.20)$$

Todėl, didėjant greičiui  $v$ , skerspjūvis  $\sigma$  didėja (potencialo barjero skaidrio  $e^{-2G}$  didėjimas yra daug greitesnis negu daugiklio  $1 / v^2$  mažėjimas). Potencialo barjero skaidris didėja todėl, kad, didėjant energijai  $E$ , mažėja potencialo barjero plotis  $R' - R$  (žr. 11.3.3 pav.).

### Branduolių sintezės reakcijos sparta

Branduolių sintezės reakcijos sparta  $\Phi$  – tai sintezuojamų branduolių skaičius tūrio vienetu per laiko vienetą. Jeigu reaguoja skirtingi branduoliai, kurių koncentracijos  $n_1$  ir  $n_2$ , tada pagal (9.2.8)  $\Phi = n_1 n_2 \sigma v$ . Atsižvelgus į greičio  $v$  statistinį pasiskirstymą, sandaugą  $\sigma v$  reikia pakeisti jos statistiniu vidurkiu  $\langle \sigma v \rangle$ :

$$\Phi = n_1 n_2 \langle \sigma v \rangle, \quad (11.3.21)$$

$$\langle \sigma v \rangle = \int_0^{\infty} p(v) \sigma(v) v dv, \quad (11.3.22)$$

čia  $p(v)$  yra dviejų reaguojančių branduolių reliatyviojo greičio  $v$  tikimybės tankis. Sąlygomis, kuriomis yra vykdoma termobranduolinė sintezė, visi atomai yra jonizuoti, ir branduolinis kuras yra *plazmos* būsenos, t. y. elektriškai neutralus laisvų branduolių ir elektronų mišinys, kuris yra termodinaminėje pusiausvyroje. Todėl reliatyvusis greitis  $v$  yra pasiskirstęs pagal Maksvelo skirstinį, kurio tikimybės tankis (normavimo daugiklio tikslumu) yra lygus:

$$p(v) \sim v^2 \exp\left(-\frac{mv^2}{2kT}\right). \quad (11.3.23)$$

Išsiaiškinsime, kokia turėtų būti branduolių mišinio temperatūra, kad reakcijos sparta būtų pakankamai didelė praktiniams taikymams. Tam visų pirma reikia nustatyti reikalingą reakcijos spartos didumo eilę. Šiuolaikinių branduolinių jėgainių šiluminė galia ( $W$ ) yra  $\sim 10^9$  W eilės. Šiluminė galia lygi per laiko vienetą sintezuojamų branduolių skaičiaus ir vieno branduolio sintezės metu išsiskiriančio energijos kiekio  $Q$  sandaugai. Kadangi reakcijos sparta  $\Phi$  yra apibrėžta tūrio vienetui, tai šiluminė galia, atitinkanti visą tūrį  $V$ , kuriame vykdoma reakcija, yra lygi

$$W = \Phi V Q \quad (11.3.24)$$

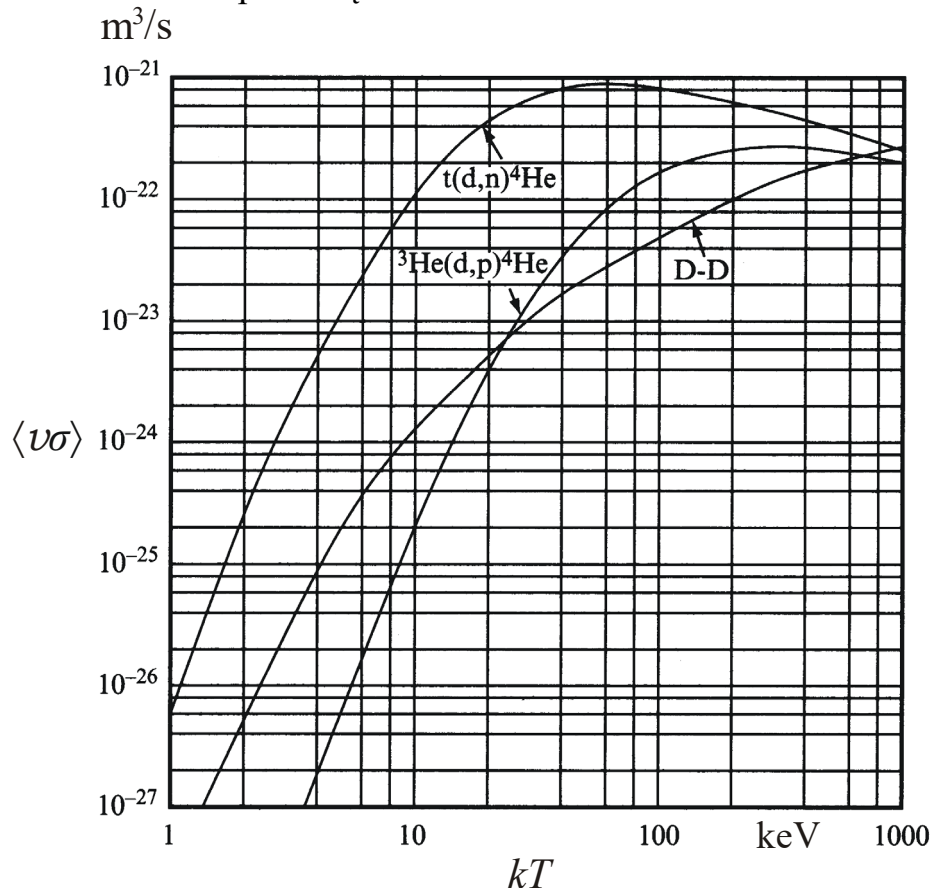
(nepainioti šiluminės galios žymėjimo  $W$  su jos SI matavimo vieneto – vato – žymėjimu  $W$ ). (11.3.21)  $\rightarrow$  (11.3.24):

$$\langle \sigma v \rangle = \frac{W}{n_1 n_2 V Q}. \quad (11.3.25)$$

Reakcijos šiluma  $Q$  yra kelių MeV eilės (žr. (11.3.3)–(11.3.5)), t. y.  $\sim 10^{-12}$  J. Tūris  $V$ , kuriame vykdoma termobranduolinė sintezė, yra  $\sim 100$  m<sup>3</sup> eilės, o branduolių koncentracija plazmoje ( $n_1$  ir  $n_2$ ) yra  $\sim (10^{20} - 10^{21})$  m<sup>-3</sup> eilės. Įrašius šias vertes ir reikalingą  $W$  didumo eilę ( $\sim 10^9$  W) į (11.3.25) formulę, apskaičiuojama:

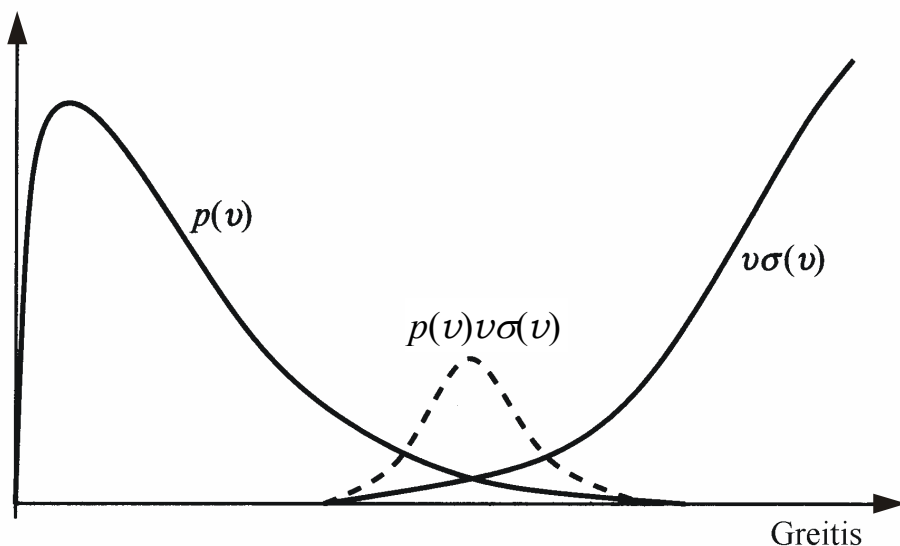
$$\langle \sigma v \rangle \sim 10^{-22} \text{ m}^3/\text{s}.$$

Pagal 11.3.4 pav. ši vertė yra pasiekama tik kai  $kT$  yra  $\sim 10$  keV eilės arba didesnė. Tai atitinka  $10^8$  K eilės temperatūrą.



**11.3.4 pav.** Vidurkio  $\langle \sigma v \rangle$  vertės kelioms sintezės reakcijoms

Net ir  $10^8$  K eilės temperatūroje tikimiausias reliatyvusis greitis (t. y.  $v$  vertė, kuri atitinka Maksvelo skirstinio tikimybės tankio (11.3.23) maksimumą) yra pernelyg mažas, kad *to greičio* branduoliai reaguotų pakankamai dideliu dažniu. Tai reiškia, kad didžioji dalis reaguojančių branduolių yra branduoliai, kurių greičiai yra daug didesni už tikimiausiąjį greitį. Tie greičiai yra dešiniajame Maksvelo skirstinio krašte, kuriame tikimybės tankis  $p(v)$  eksponentiškai mažėja didėjant greičiui  $v$  (žr. 11.3.5 pav.). Daugumos branduolių, kurie „tuneliuoja“ pro potencialo barjerą ir reaguoja su kitu branduoliu, greičiai yra arti pointegralinės funkcijos  $p(v)\sigma(v)v$  maksimumo (brūkšninė linija 11.3.5 pav.). Tame intervale  $p(v)$  mažėja, o  $\sigma(v)v$  didėja (žr. 11.3.5 pav.). Pakėlus temperatūrą,  $p(v)$  mažėja lėčiau (žr. (11.3.23)), todėl pointegralinės funkcijos  $p(v)\sigma(v)v$  maksimumas pasislenka į didesnių greičių pusę, o šios sandaugos vertė prie to maksimumo padidėja. Todėl vidurkis  $\langle \sigma v \rangle$  taip pat padidėja. Tai reiškia, kad reakcijos sparta (11.3.21) didėja kylant temperatūrai. Kai  $kT = (1-100)$  keV,  $\langle \sigma v \rangle$  vertė D-T reakcijai yra 10–100 kartų didesnė negu D-D reakcijai (žr. 11.3.4 pav.). Todėl šia prasme D-T reakcija yra perspektyviausia kuriant termobranduolinį reaktorių.



**11.3.5 pav.** Maksvelo skirstinio tikimybės tankio  $p$  ir reliatyviojo greičio  $v$  bei reakcijos skerspjūvio  $\sigma$  sandaugos  $v\sigma$  priklausomybė nuo  $v$ . Punktyrinė linija atitinka (11.3.22) integralo pointegralinį reiškinį, t. y.  $p(v)v\sigma$

#### Valdomos termobranduolinės reakcijos sąlygos

Valdoma termobranduolinė reakcija kol kas dar nėra realizuota. Egzistuoja kelios tarpinės stadijos, kurias reikia pereiti norint realizuoti valdomą branduolių sintezę. Viena iš tokių stadijų – tai **lygybės taškas** (angl. *break-even point*). Tai yra tokia būseną, kai dėl branduolių sintezės per laiko vienetą išsiskiriantis energijos kiekis yra lygus galiai, kurią reikia išiekvoti tam, kad būtų palaikomi plazmos temperatūra bei slėgis. Plazmą kaitina tik stipriai sugeriamos dalelės, kurios lieka plazmoje (pvz.,  $\alpha$  dalelės). Neutronai išeina iš reakcijos srities, nusinešdami dalį energijos. Todėl lygybės taško sąlygomis dar yra reikalingi išoriniai energijos šaltiniai. Kita stadija – **uždegimo taškas**, t. y. tokia būseną, kai  $\alpha$  dalelių energijos pakanka tam, kad palaikyti reakcijos sąlygas. Tada išoriniai energijos šaltiniai tampa nereikalingi.

Lousono (*Lawson*) kriterijus atitinka dar vieną tarpinę stadiją, kurią būtina realizuoti prieš pasiekiant lygybės tašką: kai sistemos būseną atitinka **Lousono kriterijų**, tada branduolių sintezės metu išsiskyrusi energija viršija energiją, kuri buvo išiekvota sukuriant tą plazmą. T. y. šiuo atveju yra lyginami ne energijos kiekiai per laiko vienetą, o *pilnutinė* išsiskyrusioji energija ir *pilnutinė* plazmos energija.

Per laiką  $\tau$  tūrio vienetė dėl branduolių sintezės reakcijos išsiskyręs energijos kiekis yra lygus

$$E_r = \Phi Q \tau = n_1 n_2 \langle \sigma v \rangle Q \tau . \quad (11.3.26)$$

Jeigu  $n_1 = n_2 = n/2$ ,

$$E_r = \Phi Q \tau = \frac{n^2}{4} \langle \sigma v \rangle Q \tau . \quad (11.3.27)$$

Vienos dalelės (elektrono arba branduolio) vidutinė kinetinė energija yra lygi  $3kT/2$ . Kadangi pilnutinė dalelių (elektronų ir branduolių) koncentracija yra  $2n$ , tai plazmos tūrio vieneto energija yra

$$E_p = 3nkT . \quad (11.3.28)$$

Lousono kriterijus yra

$$E_r > E_p . \quad (11.3.29)$$

(11.3.27), (11.3.28) → (11.3.29):

$$n\tau > \frac{12kT}{\langle\sigma v\rangle Q}. \quad (11.3.30)$$

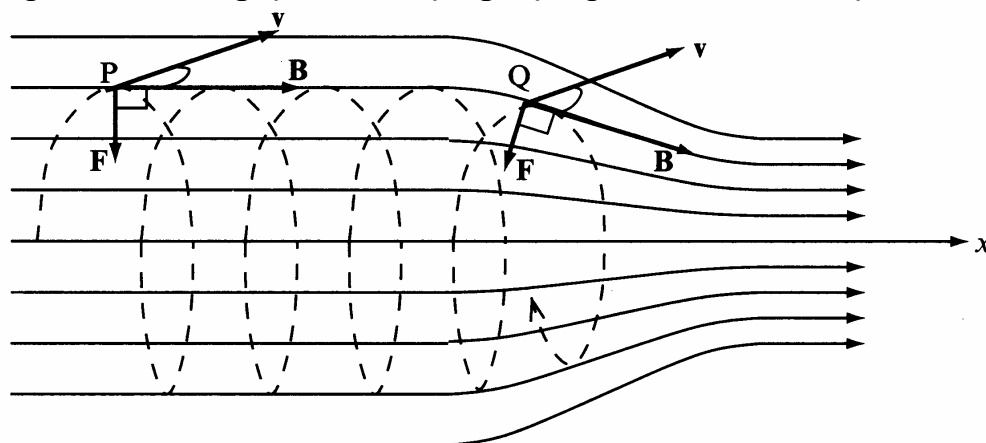
Pvz., jeigu D-T plazmos temperatūra yra  $kT = 20$  keV, tada  $\langle\sigma v\rangle = 4,5 \cdot 10^{-22}$  m<sup>3</sup>/s (žr. 11.3.4 pav.) Įrašę šią vertę į (11.3.30), gauname  $n\tau > 3 \cdot 10^{19}$  m<sup>-3</sup>/s. Pvz., jeigu  $n = 10^{20}$  m<sup>-3</sup>, tada plazmos išlaikymo trukmė turi būti ilgesnė už 0,3 s.

### Magnetinis plazmos išlaikymas

Magnetiniame lauke elektringąją dalelę, kurios krūvis  $q$ , veikia Lorencio jėga

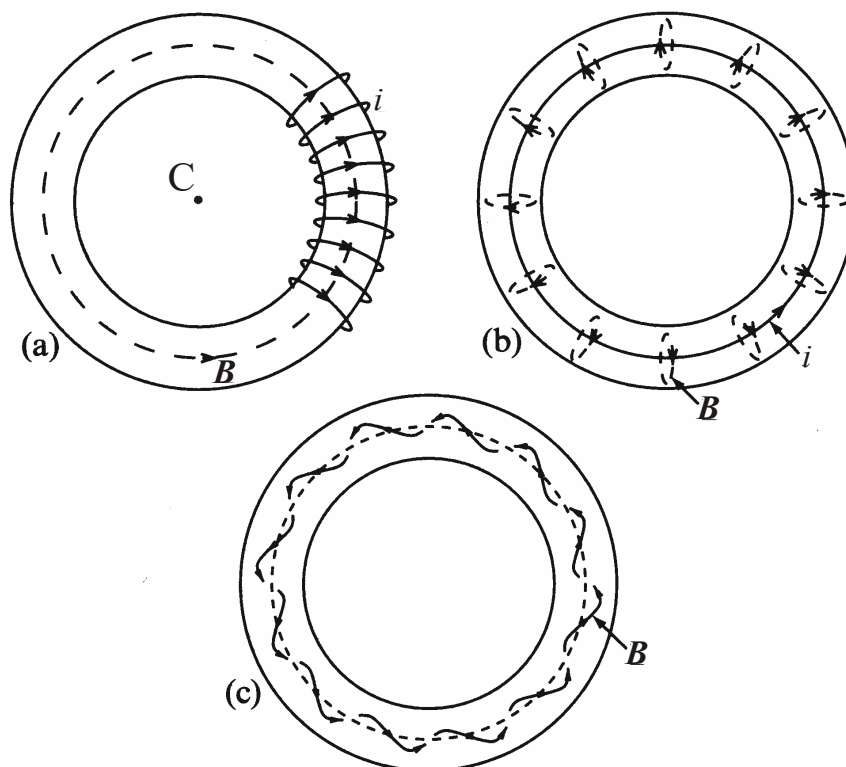
$$\mathbf{F} = q\mathbf{v} \times \mathbf{B}. \quad (11.3.31)$$

Dalelė juda spirale apie magnetinio lauko linijas. Taigi, yra apribotas dalelės judėjimas statmena laukui kryptimi. Judėjimą išilgai lauko linijų galima apriboti naudojant **magnetinius veidrodžius**, kuriuose silpno lauko sritis yra tarp dviejų stipraus lauko sričių. Stiprėjant magnetinei indukcijai, jos linijos užlinksta (žr. 11.3.6 pav.), todėl atsiranda Lorencio jėgos horizontalioji komponentė, kuri gražina dalelę atgal į silpnosios lauko sritį.

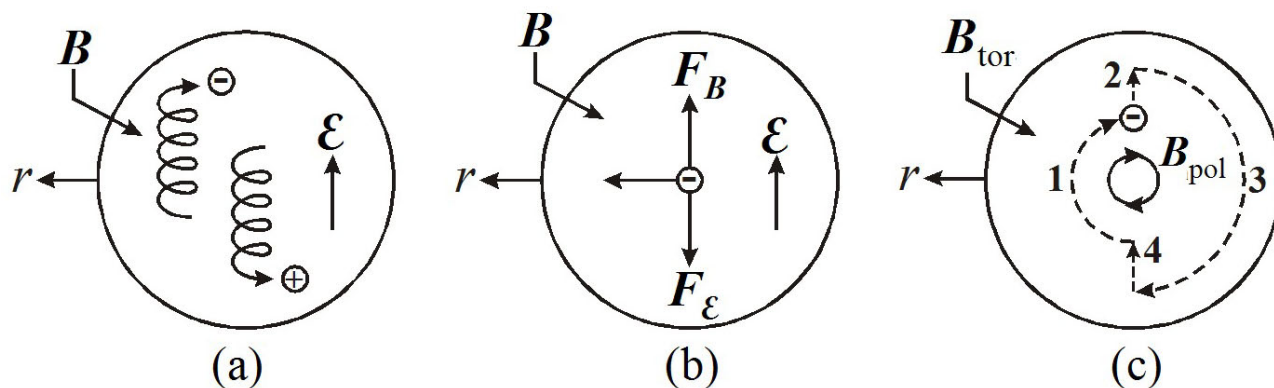


**11.3.6 pav.** Teigiamojo elektros krūvio ( $Q$ ) dalelės judėjimas magnetiniame veidrodyje. Dalelė juda iš vienalyčio magnetinio lauko srities (kairėje) į stiprėjančio lauko sritį (dešinėje)

Kitas būdas remiasi tuo, kad yra naudojamos *uždaros* lauko linijos. Paprasčiausias tokio tipo laukas – **toroidinis laukas**, t. y. laukas, kurio linijos yra apskritimai. Tokį lauką galima gauti naudojant toro formos ritę. Tačiau toks laukas yra nevienalytis – stipresnis prie toro vidinio krašto, negu prie išorinio. Todėl atsiranda elektronų ir branduolių dreifas vertikalia kryptimi, priešingomis kryptimis (žr. 11.3.7 pav.). Dėl šio krūvininkų atskyrimo atsiranda elektrinis laukas, kuris iš dalies kompensuoja magnetinio lauko poveikį, jeigu dalelės (elektrono arba branduolio) greitis nukreiptas į toro išorę. Kad to išvengti, įjungiamas **poloidinis laukas**, t. y. laukas, kurio linijos yra apskritimai, kurių centrai guli ant toro ašies. Tam plazmą sudarantys branduoliai ir elektronai yra įgreitinami išilgai toro ašies. Tokie įrenginiai vadinami **tokamakais** (šis žodis yra kilęs iš rusiškos santrumpos „**т**орoidalная **к**амера в **м**агнитных **к**атушках“). Kadangi poloidinis laukas stengiasi išlaikyti pastovų atstumą tarp dalelės ir toro ašies, tai elektrono dreifas, kai elektronas yra apatinėje toro dalyje, yra kompensuojamas elektrono dreifo, kai elektronas yra viršutinėje toro dalyje (žr. 11.3.8c pav.). Todėl pilnutinis krūvininkų poslinkis dėl dreifo tampa lygus nuliui. Tai reiškia, kad nėra krūvininkų atskyrimo ir nesudaro minėtasis elektrinis laukas.



**11.3.7 pav.** (a) Toroidinis magnetinis laukas  $B$ , kurį sukuria srovė  $i$ , tekanti aplink torą apšivijusia rite (paveiksle pavaizduotos kelios tos ritės vijos). (b) Poloidinis laukas, kurį sukuria srovė, tekanti išilgai toro ašies. (c) Toroidinio ir poloidinio laukų suma



**11.3.8 pav.** Toro pjūvis išilgai plokštumos, kuri statmena toroidinio magnetinio lauko linijoms. Magnetinio lauko indukcija  $B$  (ji nukreipta į brėžinio plokštumą) mažėja, didėjant atstumui  $r$  nuo toro centro (jį atitinka taškas  $C$  11.3.7 pav.). (a) Dalelių judėjimas brėžinio plokštumoje (judėjimas  $B$  kryptimi neparodytas). (b) Magnetinė ( $F_B$ ) ir elektrostatinė ( $F_E$ ) jėgos, kurios veikia elektroną, kuris juda  $r$  didėjimo kryptimi. (c) Supaprastintas elektrono judėjimas brėžinio plokštumoje, kai vienu metu yra toroidinis ( $B_{tor}$ ) ir poloidinis ( $B_{pol}$ ) laukai, laikant, kad elektrono dreifas dėl toroidinio lauko nevienalytiškumo ir jo judėjimas išilgai poloidinio lauko linijų yra atskirti laike

## 12. Elementariosios dalelės

*Elementarioji dalelė* – tai dalelė, kuri neturi struktūros.

Terminas „*subatominės dalelės*“ apima visas elementariąsias daleles, protoną ir visas mažiausias šiuo metu žinomas daleles, kurios nėra nei molekulės, nei atomai, nei branduoliai. Subatominių dalelių pavyzdys – mezonai (kiekvienas mezonas sudarytas iš dviejų elementariųjų dalelių – kvarko ir antikvarko).

### 12.1. Pagrindinės sąveikos

Dalelių *sąveika* – tai dalelių poveikis vienos kitai, dėl kurio pasikeičia tų dalelių būseną. Pagrindinės sąveikos (silpnėjimo tvarka):

- 1) stiprioji sąveika,
- 2) elektromagnetinė sąveika,
- 3) silpnoji sąveika,
- 4) gravitacinė sąveika.

*Stiprioji sąveika* susieja kvarkus į nukleonus, o nukleonus – į atomų branduolius.

*Elektromagnetinė sąveika* sąlygoja elektros krūvių Kulono stūmą ir trauką. Ši sąveika lemia atomų chemines savybes ir šviesos savybes. Elektromagnetinėje sąveikoje dalyvauja tik elektringosios dalelės ir fotonai.

*Silpnoji sąveika* pasireiškia beta skilimo metu ir lengviausių elementariųjų dalelių (elektronų, neutrinų ir kt.) tarpusavio reakcijose. Šioje sąveikoje dalyvauja visos dalelės, išskyrus fotonus.

*Gravitacinė sąveika* pasireiškia tarp bet kurių dviejų objektų, kurie turi masę. Gravitacinė sąveika yra daug silpnesnė už kitas tris sąveikas; ji praktiškai nepasireiškia tarp elementariųjų dalelių.

Dalelių sąveikų *standartinis modelis* – tai teorija, kuri aprašo stipriąją, elektromagnetinę ir silpnąją sąveikas. Atskirieji atvejai:

- 1) kvantinė elektrodinamika (aprašo elektromagnetinę sąveiką);
- 2) elektrosilpnosios sąveikos teorija (aprašo elektromagnetinę ir silpnąją sąveikas);
- 3) kvantinė chromodinamika (aprašo stipriąją sąveiką).

Pastarosios trys teorijos – tai kvantinės lauko teorijos. Pagal *kvantinę lauko teoriją* kiekviena elementarioji dalelė yra tam tikro lauko kvantas. *Laukas* – tai objektas, kuris gaunamas kiekvienam erdvės taškui priskyrus tam tikro fizikinio dydžio vertę. Skirtingos kvantinės lauko teorijos skiriasi kvantuojamojo lauko prigimtimi. Iš šių teorijų išplaukia, kad dalelės gali atsirasti ir išnykti, o kiekvienos rūšies sąveiką galima aprašyti kaip apsikeitimą tam tikromis dalelėmis, kurios atlieka *sąveikos nešiklio* (tarpininko) vaidmenį.

### 12.1 lentelė. Pagrindinių sąveikų stiprumo ir veikimo atstumo palyginimas

Sąveika	Sąveikos nešikliai	Stiprumas	Atstumas
Stiprioji	gliuonai	$\sim 1$	$\sim 10^{-15}$ m
Elektromagnetinė	fotonai	1 / 137	$\infty$
Silpnoji	$W^\pm$ ir Z bozonai	$\sim 10^{-10}$	$\sim 10^{-18}$ m
Gravitacinė	gravitonai	$\sim 10^{-38}$	$\infty$

Sąveikos nešikliai kartais vadinami „virtualiosiomis dalelėmis“, nes jie tiesiogiai nepriklauso tiriamai sistemai. „Tikrosios“ dalelės skiriasi nuo virtualiųjų dalelių tuo, kad „tikrosios“ dalelės egzistuoja prieš arba po sąveikos (kvantinio šuolio), o virtualiosios dalelės atsiranda ir išnyksta paties kvantinio šuolio metu.

Kartais „virtualioji“ dalelė virsta „tikraja“ dalele, t. y. tam tikrą laiką egzistuoja po kvantinio šuolio. Tai pasireiškia kaip naujos dalelės atsiradimas. Pavyzdys – fotono emisija vykstant atomo arba branduolio savaiminiam kvantiniam šuoliui į mažesnės energijos būseną.

Stiprioji ir silpnoji sąveikos yra *artisiekiškos*. Elektromagnetinė ir gravitacinė sąveikos yra *toliasiekiškos*.

Norint išreikšti sąveikos stiprumą dimensiniais vienetais (pvz., džauliais), reikia žinoti atitinkamą *ryšio konstantą* ( $C$ ), kuri priklauso nuo konkrečios sistemos. Pvz., dviejų protonų elektromagnetinės ir gravitacinės sąveikų potencinių energijų modulius galima išreikšti taip:

$$|U| = C/r, \quad (12.1.1)$$

čia  $C = e^2/(4\pi\epsilon_0)$  elektromagnetinės sąveikos atveju ir  $C = Gm_p^2$  gravitacinės sąveikos atveju ( $G$  yra gravitacinė konstanta,  $m_p$  yra protono masė).  $r$  yra atstumas tarp protonų. Kadangi stiprioji ir silpnoji sąveikos yra artisiekiškos, tai potencinės energijos išraiškoje atsiranda eksponentinis daugiklis:

$$|U| = \frac{C}{r} e^{-r/R}, \quad (12.1.2)$$

čia  $R$  yra būdingasis sąveikos atstumas.

### 12.2 lentelė. Dviejų protonų pagrindinių sąveikų palyginimas

Sąveika	Ryšio konstanta $C$ (J·m)	Atstumas $R$ (m)
Stiprioji	$2,5 \cdot 10^{-27}$	$1,5 \cdot 10^{-15}$
Elektromagnetinė	$2,31 \cdot 10^{-28}$	$\infty$
Silpnoji	$3,22 \cdot 10^{-31}$	$2 \cdot 10^{-18}$
Gravitacinė	$1,87 \cdot 10^{-64}$	$\infty$



## 12.2. Elementariųjų dalelių klasifikavimas

Visas subatomines daleles galima sugrupuoti į dvi grupes pagal jų sukinius:

**Fermionai** – tai dalelės su pusiniu sukiniu (t. y. jų sukinių skaičius yra  $1/2$  arba  $3/2$  arba  $5/2$  ir t. t.), pvz., elektronas, protonas ir neutronas (jų visų sukinių lygus  $1/2$ ).

**Bozonai** – tai dalelės su sveikuoju sukiniu (t. y. jų sukinių skaičius yra 0 arba 1 arba 2 ir t. t.).

Fermionams galioja Paulio draudimo principas, o bozonams – ne.

Elementariosios dalelės, sudarančios įprastinę (stabiliąją) materiją, yra fermionai.

Pagrindinių sąveikų nešikliai yra bozonai.

Pagal standartinį modelį egzistuoja 12 elementariųjų fermionų (neįskaitant jų antidalelių) ir 5 elementarieji bozonai.

Iš 5 elementariųjų bozonų keturi (gliuonas, fotonas,  $W^\pm$  bozonas ir  $Z$  bozonas) yra sąveikos nešikliai, o penktasis (Higso bozonas) sąlygoja visų kitų elementariųjų dalelių mases.

12.3 lentelė. Bozonų lentelė

Bozonas	Žymuo	Masė ( $\text{GeV}/c^2$ )	Sukinys	Elektros krūvis / $e$	Pastabos
Gluonas	$g$	0	1	0	Negali būti laisvas; yra tik hadronuose
Fotonas	$\gamma$	0	1	0	Stabilus
$W$ bozonas	$W^+, W^-$	80,42	1	+1, -1	Nestabilus
$Z$ bozonas	$Z$	91,19	1	0	Nestabilus
Higso	$H^0$	$\approx 125$	0	0	Nestabilus
Gravitonas		0	2	0	Stabilus; neaptiktas

Visų elementariųjų fermionų sukinių yra  $1/2$ . Jie skirstomi į 6 leptonus ir 6 kvarkus. **Leptonai** – tai elementariosios dalelės, tarp kurių nėra stipriosios sąveikos. **Kvarkai** – tai elementariosios dalelės, tarp kurių yra visos keturios sąveikos.

Elementarieji fermionai yra sugrupuoti į tris kartas. Skirtingų kartų atitinkami fermionai (pvz., elektronas, miuonas ir  $\tau$  leptonas) turi skirtingas mases ir gyvuoja skirtingą laiką, tačiau visos kitos jų savybės yra vienodos.

Įprastinė (stabilioji) materija yra sudaryta tik iš pirmosios kartos fermionų.

12.4 lentelė. Elementariųjų fermionų kartos

	Pirmoji karta	Antroji karta	Trečioji karta
Leptonai	Elektronas: $e^-$	Miuonas: $\mu^-$	Tau leptonas: $\tau^-$
	Elektroninis neutrinas: $\nu_e$	Miuoninis neutrinas: $\nu_\mu$	Tau neutrinas: $\nu_\tau$
Kvarkai	u kvarkas ( <i>up</i> )	c kvarkas ( <i>charm</i> )	t kvarkas ( <i>top</i> )
	d kvarkas ( <i>down</i> )	s kvarkas ( <i>strange</i> )	b kvarkas ( <i>bottom</i> )

12.5 lentelė. Leptonų lentelė

Karta	Dalelė	Žymuo	Leptoninis krūvis				$J$	Elektros krūvis $q$	Masė $M$ (MeV/ $c^2$ )	Vidutinė gyvavimo trukmė $\tau$ (s)
			$L$	$L_e$	$L_\mu$	$L_\tau$				
1	Elektronas	$e^-$	1	+1	0	0	1/2	-1	0,511	$\infty$
	Elektroninis neutrinas	$\nu_e$	1	+1	0	0	1/2	0	<0,0000022	$\infty$
2	Miuonas	$\mu^-$	1	0	+1	0	1/2	-1	105,7	$2,197 \cdot 10^{-6}$
	Miuoninis neutrinas	$\nu_\mu$	1	0	+1	0	1/2	0	<0,19	$\infty$
3	Tau ( $\tau$ ) leptonas	$\tau^-$	1	0	0	+1	1/2	-1	1777	$2,906 \cdot 10^{-13}$
	Tau ( $\tau$ ) neutrinas	$\nu_\tau$	1	0	0	+1	1/2	0	<18,2	$\infty$

12.6 lentelė. Kvarkų lentelė

Karta	Žymuo	$B$	$J$	$q$	$I_z$	$C$	$S$	$T$	$B'$	$M$ (MeV/ $c^2$ )	$\tau$ (s)
1	u	1/3	1/2	$+2/3$	+1/2	0	0	0	0	1,5–4,0	
	d	1/3	1/2	$-1/3$	-1/2	0	0	0	0	4–8	
2	c	1/3	1/2	$+2/3$	0	1	0	0	0	1150–1350	$10^{-12}$ – $10^{-13}$
	s	1/3	1/2	$-1/3$	0	0	-1	0	0	80–130	$10^{-8}$ – $10^{-10}$
3	t	1/3	1/2	$+2/3$	0	0	0	1	0	$171400 \pm 2100$	$\sim 10^{-25}$
	b	1/3	1/2	$-1/3$	0	0	0	0	-1	4100–4400	$10^{-12}$ – $10^{-13}$

### 12.3. Spalvinis krūvis. Hadronai

Žinome, kad elektromagnetinės sąveikos šaltiniai yra elektros krūviai. Analogiškai dalelėms, tarp kurių pasireiškia stiprioji sąveika – kvarkams ir gliuonams – galima priskirti tam tikrą dydį, kuris atlieka stipriosios sąveikos šaltinio vaidmenį. Jis vadinamas „spalviniu krūviu“ arba „spalva“.

Kvarko galimos spalvos: „raudona“, „žalia“ ir „mėlyna“.

Antikvarko galimos spalvos yra „anti-raudona“, „anti-žalia“ ir „anti-mėlyna“.

Visų dalelių, kurios gali būti laisvos, *pilnutiniai* spalviniai krūviai yra lygūs nuliui, t. y. jos yra „bespalvės“ („baltos“). Tokią dalelę galima gauti sujungus tris skirtingų spalvų kvarkus arba antikvarkus (analogija su balta šviesa) arba kvarką ir antikvarką. Todėl, pvz., būsenos „ $qq$ “ (du kvarkai) arba „ $qq\bar{q}$ “ (du kvarkai ir antikvarkas) yra uždraustos, nes tokios dalelės negali būti „bespalvės“. Kol kas eksperimentiškai aptikti tik tokie kvarkų ir antikvarkų dariniai:

- $3q$  (trys skirtingų spalvų kvarkai). Tokios dalelės vadinamos *barionais*.
- $3\bar{q}$  (trys skirtingų spalvų antikvarkai). Tai yra barionų antidalelės.
- $q\bar{q}$  (priešingų spalvų kvarkas ir antikvarkas). Tai yra *mezonai* ir jų antidalelės.

Subatominės dalelės, kurios sudarytos iš kvarkų arba antikvarkų (t. y. barionai ir mezonai bei jų antidalelės), vadinamos *hadronais*.

### 12.4. Izosukinys ir „aromato“ kvantiniai skaičiai. Antidalelės

Tiriant hadronus ir jų virsmus, buvo apibrėžti penki nauji kvantiniai skaičiai:

- 1)  $I_z$  (izosukinio projekcija);
- 2)  $S$  (angl. *strangeness*, „keistumas“);
- 3)  $C$  (angl. *charm*, „žavumas“);
- 4)  $B'$  (angl. *beauty* arba *bottomness*, „gražumas“);
- 5)  $T$  (angl. *truth* arba *topness*, „tikrumas“).

Šie skaičiai yra adityvūs: bet kurio hadrono kvantiniai skaičiai  $I_z$ ,  $S$ ,  $C$ ,  $B'$  ir  $T$  yra lygūs jų sudarančių kvarkų atitinkamų skaičių sumai. Kiekvienos rūšies kvarko tik vienas iš tų skaičių skiriasi nuo nulio. Paskutinių keturių kvantinių skaičių ( $S$ ,  $C$ ,  $B'$  ir  $T$ ) visuma vadinama duotojo kvarko (arba iš kvarkų sudarytos dalelės – hadrono) „aromatu“ (angl. *flavour*).

12.7 lentelė. Mezonų pavyzdžiai ( $B = 0$ )<sup>a</sup>

Mezonas	Žymuo	Anti-dalelė	Sudėtis	$M$ (MeV/c <sup>2</sup> )	$J$	$q$	$I$	$I_z$	$S$	$C$	$B'$	$\tau$ (s)	Skilimo produktai
Pionai	$\pi^+$	$\pi^-$	$u\bar{d}$	139,6	0	1	1	1	0	0	0	$2,60 \cdot 10^{-8}$	$\mu^+ + \nu_\mu$
	$\pi^0$	–	$\frac{u\bar{u} - d\bar{d}}{\sqrt{2}}$	135,0	0	0	1	0	0	0	0	$0,84 \cdot 10^{-16}$	$\gamma + \gamma$
Kaonai	$K^+$	$K^-$	$u\bar{s}$	493,7	0	1	1/2	1/2	+1	0	0	$1,24 \cdot 10^{-8}$	$\mu^+ + \nu_\mu$ arba $\pi^+ + \pi^0$
	$K^0$	$\bar{K}^0$	$d\bar{s}$	497,7	0	0	1/2	-1/2	+1	0	0	–	
	$K_S^0$	–	$\frac{d\bar{s} - s\bar{d}}{\sqrt{2}}$	497,7	0	0	1/2	–	–	0	0	$0,89 \cdot 10^{-10}$	$\pi^+ + \pi^-$ arba $\pi^0 + \pi^0$
	$K_L^0$	–	$\frac{d\bar{s} + s\bar{d}}{\sqrt{2}}$	497,7	0	0	1/2	–	–	0	0	$5,2 \cdot 10^{-8}$	$\pi^+ + e^- + \bar{\nu}_e$
Eta	$\eta$	–	$\frac{u\bar{u} + d\bar{d} - 2s\bar{s}}{\sqrt{6}}$	547,8	0	0	0	0	0	0	0	$5 \cdot 10^{-19}$	$\gamma + \gamma, \dots$
Eta brūkšnys	$\eta'$	–	$\frac{u\bar{u} + d\bar{d} + s\bar{s}}{\sqrt{3}}$	957,6	0	0	0	0	0	0	0	$3 \cdot 10^{-21}$	$\pi^+ + \pi^- + \eta, \dots$
Ro	$\rho^+$	$\rho^-$	$u\bar{d}$	776	1	1	1	1	0	0	0	$0,4 \cdot 10^{-23}$	$\pi^+ + \pi^0$
Fi	$\varphi$	–	$s\bar{s}$	1019	1	0	0	0	0	0	0	$16 \cdot 10^{-23}$	$K^+ + K^0, \dots$
D	$D^+$	$D^-$	$c\bar{d}$	1869	0	1	1/2	1/2	0	+1	0	$10,6 \cdot 10^{-13}$	
	$D^0$	$\bar{D}^0$	$c\bar{u}$	1865	0	0	1/2	-1/2	0	+1	0	$4,1 \cdot 10^{-13}$	
$D_s$	$D_s^+$	$D_s^-$	$c\bar{s}$	1968	0	1	0	0	+1	+1	0	$4,9 \cdot 10^{-13}$	
Džei-psi	$J/\psi$	–	$c\bar{c}$	3096,9	1	0	0	0	0	0	0	$7,2 \cdot 10^{-21}$	$e^+ + e^-$ arba $\mu^+ + \mu^-$ ...
B	$B^+$	$B^-$	$u\bar{b}$	5279	0	1	1/2	1/2	0	0	+1	$1,7 \cdot 10^{-12}$	
	$B^0$	$\bar{B}^0$	$d\bar{b}$	5279	0	0	1/2	-1/2	0	0	+1	$1,5 \cdot 10^{-12}$	
$B_s$	$B_s^0$	$\bar{B}_s^0$	$s\bar{b}$	5369	0	0	0	0	-1	0	+1	$1,46 \cdot 10^{-12}$	
$B_c$	$B_c^+$	$B_c^-$	$c\bar{b}$	6400	0	1	0	0	0	+1	+1	$5 \cdot 10^{-13}$	
Epsilon	$Y$	–	$b\bar{b}$	9460	1	0	0	0	0	0	0	$1,3 \cdot 10^{-20}$	$e^+ + e^-$ arba $\mu^+ + \mu^-$ ...

<sup>a</sup> Ši lentelė iš tinklalapio <[http://en.wikipedia.org/wiki/List\\_of\\_mesons](http://en.wikipedia.org/wiki/List_of_mesons)>.

12.8 lentelė. Barionų pavyzdžiai ( $B = 1$ )<sup>a</sup>

Dalelė	Žymuo	Sudėtis	$M$ (MeV/ $c^2$ )	$J$	$q$	$I$	$I_z$	$S$	$C$	$B'$	$\tau$ (s)	Galimieji skilimo produktai
Protonas	p	uud	938,3	1/2	1	1/2	1/2	0	0	0	Stabilus	–
Neutronas	n	ddu	939,6	1/2	0	1/2	-1/2	0	0	0	885,7±0,8	p + e <sup>-</sup> + ν <sub>e</sub>
Delta	$\Delta^{++}$	uuu	1232	3/2	2	3/2	3/2	0	0	0	6·10 <sup>-24</sup>	$\pi^+ + p$
	$\Delta^+$	uud	1232	3/2	1	3/2	1/2	0	0	0	6·10 <sup>-24</sup>	$\pi^+ + n$ arba $\pi^0 + p$
	$\Delta^0$	udd	1232	3/2	0	3/2	-1/2	0	0	0	6·10 <sup>-24</sup>	$\pi^0 + n$ arba $\pi^- + p$
	$\Delta^-$	ddd	1232	3/2	-1	3/2	-3/2	0	0	0	6·10 <sup>-24</sup>	$\pi^- + n$
Lambda	$\Lambda^0$	uds	1115,7	1/2	0	0	0	-1	0	0	2,60·10 <sup>-10</sup>	$\pi^- + p$ arba $\pi^0 + n$
	$\Lambda_c^+$	udc	2285	1/2	1	0	0	0	+1	0	2,0·10 <sup>-13</sup>	
	$\Lambda_b^0$	udb	5624	1/2	0	0	0	0	0	-1	1,2·10 <sup>-12</sup>	
Sigma	$\Sigma^+$	uus	1189,4	1/2	1	1	1	-1	0	0	0,8·10 <sup>-10</sup>	$\pi^0 + p$ arba $\pi^+ + n$
	$\Sigma^0$	uds	1192,5	1/2	0	1	0	-1	0	0	6·10 <sup>-20</sup>	$\Lambda^0 + \gamma$
	$\Sigma^-$	dds	1197,4	1/2	-1	1	-1	-1	0	0	1,5·10 <sup>-10</sup>	$\pi^- + n$
	$\Sigma_b^+$	uub		1/2	1	1	1	0	0	-1		$\Lambda_b^0 + \pi^+$
	$\Sigma_b^+$	udb		1/2	0	1	0	0	0	-1		Nežinomi
	$\Sigma_b^-$	ddb		1/2	-1	1	-1	0	0	-1		$\Lambda_b^0 + \pi^-$
Omega	$\Omega^-$	sss	1672	3/2	-1	0	0	-3	0	0	0,82·10 <sup>-10</sup>	$\Lambda^0 + K^-$ arba $\Xi^0 + \pi^-$

<sup>a</sup> Ši lentelė iš tinklalapio <[http://en.wikipedia.org/wiki/List\\_of\\_baryons](http://en.wikipedia.org/wiki/List_of_baryons)>.

Kiekvienai dalelei priskiriami keli adityvūs **krūviai**:

(a) hadrono **barioninis krūvis** (barionų skaičius)

$$B = (N_q - N_{\bar{q}})/3. \quad (12.4.1)$$

Kvarko  $B = 1/3$ .

(b) hadrono **elektros krūvis**:

$$q = I_z + \frac{1}{2}(B + S + C + B' + T), \quad (12.4.2)$$

(c) leptono **leptoninis krūvis** (leptonų skaičius)

$$L = n_l - n_{\bar{l}}. \quad (12.4.3)$$

Atskirų leptonų kartų leptoniniai krūviai (leptonų skaičiai):

(c.1) **elektroninis krūvis**  $L_e$  (+1 elektronui ir elektroniniam neutriniui),

(c.2) **miuoninis krūvis**  $L_{\mu}$ , (+1 miuonui ir miuoniniam neutriniui),

(c.3)  **$\tau$  leptoninis krūvis** (+1  $\tau$  leptonui ir  $\tau$  neutriniui).

Pilnutinis leptoninis krūvis:

$$L = L_e + L_{\mu} + L_{\tau}. \quad (12.4.4)$$

**Absoliučiai neutrali dalelė** – tai tokia dalelė, kurios  $q = 0$ ,  $B = 0$  ir  $L = 0$ .

Absoliučiai neutralių dalelių pavyzdžiai yra fotonas ir Z bozonas.

Bet kuri dalelė, kuri nėra absoliučiai neutrali, turi savo **antidalelę**. Dalelė ir antidalelė turi vienodą masę ir vienodą sukinių kvantinį skaičių, o visi krūviai, izosukinio projekcija ir aromato kvantiniai skaičiai yra priešingi.

Barionų  $B = 1$ , antibarionų  $B = -1$ , o mezonų  $B = 0$ .

Neturinčią elektros krūvio dalelę galima atskirti nuo jos antidalelės pagal **spirališkumą**  $h$  (angl. *helicity*) – dalelės sukinių projekcijos į dalelės judesio kiekio kryptį ženklą:

$$h = \frac{\mathbf{L}_s \cdot \mathbf{p}}{|\mathbf{L}_s \cdot \mathbf{p}|}, \quad (12.4.5)$$

čia  $\mathbf{L}_s$  yra dalelės sukinių vektorius, o  $\mathbf{p}$  yra jos judesio kiekio vektorius. Dalelės, kurių  $h = +1$  (t. y. kurių sukinytis nukreiptas judesio kiekio kryptimi), vadinamos „dešininėmis“, o dalelės, kurių  $h = -1$  (t. y. kurių sukinytis nukreiptas priešinga judesio kiekiui kryptimi), vadinamos „kairinėmis“. Neutrinoi yra kairinės dalelės, o antineutrinoi – dešininės.

Hadronus galima suskirstyti į **izomultipletus** – mažas hadronų šeimas, kurių nariai yra tapatūs vienas kitam stipriosios sąveikos atžvilgiu. Vieno izomultipleto narių masės yra apytiksliai vienodos, o elektros krūviai yra skirtingi. Izomultipleto pavyzdys – protonas ir neutronas (izodubletas). Izomultipleto nariai turi vienodus atitinkamus aromato kvantinius skaičius ( $S$ ,  $C$ ,  $B'$  ir  $T$ ) ir vienodą **izosukinį** ( $I$ ), tačiau skirtingą izosukinio projekciją. Izosukinio projekcija ( $I_z$ ) lemia u ir d kvarkų fizikinių savybių skirtumus. **Izosukinio projekcija** ( $I_z$ ) gali būti lygi kelioms vertėms, kurios nustatomos pagal tą pačią taisyklę, kaip impulso momento projekcijos galimos vertės (pvz., žr. (3.4.10)):

$$I_z = -I, -I + 1, \dots, I - 1, I. \quad (12.4.6)$$

u ir d kvarkų izosukinytis lygus  $1/2$ , o jo galimos projekcijos yra  $\pm 1/2$  (kaip ir įprastinio sukinio). Izomultipleto narių yra tiek, kiek yra galimų  $I_z$  verčių, t. y.  $2I + 1$ .

Hadrono izosukinytis bei jo projekcija apskaičiuojami pagal kvantinę impulso momentų sudėties taisyklę (3.4.6). Pvz., jeigu hadrono sudėtyje yra du u arba d kvarkai (t. y. „uu“, „ud“ arba „dd“), tada jo izosukinytis ( $I$ ) gali būti  $1/2 \pm 1/2$ , t. y. 0 arba 1. Hadrono izosukinio projekcija – tai jame esančių u ir d kvarkų izosukinio projekcijų suma. Jeigu izosukinytis lygus 1, tada jo projekcija gali būti 0 arba  $\pm 1$  (izotripletas):

„uu“ atitinka  $I_z = 1/2 + 1/2 = 1$ ,

„ud“ atitinka  $I_z = 1/2 - 1/2 = 0$ ,

„dd“ atitinka  $I_z = -1/2 - 1/2 = -1$ .

Tačiau hadronas negali būti sudarytas tik iš dviejų kvarkų (žr. 12.3 skirsnis). Realaus hadrono atveju vienas kvarkas turėtų būti pakeistas antikvarku (mezonas) arba reikėtų pridėti dar vieną kvarką (barionas). Mezonų izotripleto ( $I = 1$ ) pavyzdys:

$\pi^+$  ( $u\bar{d}$ ,  $I_z = +1$ ),

$\pi^-$  ( $\bar{u}d$ ,  $I_z = -1$ )

$\pi^0$  ( $\frac{u\bar{u} - d\bar{d}}{\sqrt{2}}$ ,  $I_z = 0$ ).

Izosingleto pavyzdys – omega ( $\omega$ ) mezonas:  $\frac{u\bar{u} + d\bar{d}}{\sqrt{2}}$ .

Jeigu hadrono sudėtyje yra trys kvarkai (barionas), tada pagal kvantinę impulso momentų sudėties taisyklę  $I = 1/2$  arba  $3/2$ . Vertė  $I = 1/2$  atitinka izodubletą (pavyzdys – protonas ir neutronas). Vertė  $I = 3/2$  atitinka izokvartetą (pavyzdys – Delta barionai).

Hadronų, kurie priklauso vienam izomultipletui, atitinkami aromato kvantiniai skaičiai ( $S$ ,  $C$ ,  $B'$  ir  $T$ ) yra vienodi. Jeigu bent vienas iš tų skaičių yra nenulinis, tada to hadrono antidalelė priklauso kitam izomultipletui. Pvz., kaonai  $K^+$  ir  $K^0$  sudaro vieną izodubletą, o jų antidalelės  $K^-$  ir  $\bar{K}^0$  – kitą.

## 12.5. Tvermės dėsniai

Tvermės dėsniai elementariųjų dalelių fizikoje vaidina daug didesnę vaidmenį negu bet kurioje kitoje fizikos srityje. Taip yra dėl dviejų priežasčių:

1. Egzistuoja keli tvermės dėsniai, kurie pasireiškia tik elementariųjų dalelių pasaulyje ir nevaidina jokio vaidmens makroskopiniame pasaulyje.
2. Mikropasaulyje visi vyksmai, kurių nedraudžia tvermės dėsniai, yra galimi.

Kiekvienas tvermės dėsnis yra susijęs su tam tikra gamtos dėsnių simetrija. Visus tvermės dėsnius galima suskirstyti į tris grupes:

1. Tvermės dėsniai, kurie susiję su keturmatės įvykių erdvės geometrija:
  - a) energijos tvermės dėsnis (susijęs su laiko vienalytiškumu),
  - b) judesio kiekio tvermės dėsnis (susijęs su erdvės vienalytiškumu),
  - c) judesio kiekio momento tvermės dėsnis (susijęs su erdvės izotropija).

Šie dėsniai yra tikslūs, t. y. jie galioja visomis sąlygomis.

2. **Tikslieji krūvio tvermės dėsniai:** elektros ( $q$ ), barioninis ( $B$ ) ir leptoninis ( $L$ ) krūviai yra adityvūs tvarūs dydžiai.
3. **Apytiksliai tvermės dėsniai** galioja tik tam tikromis sąlygomis (pvz., tik vyksmuose, kuriuos sukelia tam tikros rūšies sąveika). Vienas iš tokių dėsnių yra **aromato tvermės dėsnis:** virsmuose, kurie vyksta dėl stipriosios arba elektromagnetinės sąveikos, kvantiniai skaičiai  $I_z$ ,  $S$ ,  $C$ ,  $B'$ ,  $T$  nekinta. Silpnoji sąveika šio dėsnio neatitinka.

## 12.6. Dalelių virsmai

Susiduriant dalelėms, gali atsirasti *kitos* dalelės, nes kinetinė energija gali virsti rimties energija:

$$E = Mc^2. \quad (12.6.1)$$

**Skaidos metodas** – pagrindinis eksperimentinis dalelių virsmų tyrimo būdas. Iš pradžių suformuojami du priešiniai dalelių pluoštai arba vienas pluoštas nukreipiamas į nejudantį taikinį. Sąveikaujant (susiduriant) dalelėms tarpusavyje, keičiasi egzistuojančių dalelių būseną (vyksta sklaida) arba atsiranda naujos dalelės. Paskui detektoriais registruojamos išsklaidytosios arba atsiradusios dalelės ir matuojami jų būseną nusakantys dydžiai. Pagal gautus eksperimento duomenis daromos išvados apie dalelių sąveiką ir jų savybes.

Mažėjant tiriamosios erdvės srities matmenims, reikia didinti susidūrimo energiją. Tai išplaukia iš Heizenbergo nelygybės (1.9.6):

$$\Delta x \cdot \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2}. \quad (12.6.2)$$

Jeigu dalelė yra ultrareliatyvistinė, tada

$$E \approx cp. \quad (12.6.3)$$

Todėl

$$\Delta p \approx \Delta E / c. \quad (12.6.4)$$

(12.6.4) → (12.6.2):

$$\Delta E \Delta x \geq c\hbar / 2. \quad (12.6.5)$$

Išreiškus  $\Delta E$  elektronvoltais, o  $\Delta x$  – metrais,  $\Delta x \geq 10^{-7} / \Delta E$ . Didžiausios šiuo metu pasiekiamos dalelių energijos ( $\Delta E$ ) yra 1000 GeV eilės. Atitinkami mažiausieji tiriamieji atstumai ( $\Delta x$ ) yra  $10^{-19}$  m eilės.

Dalelių virsmai yra trijų rūšių:

**1. Tamprioji sklaida.** Apibendrintoji lygtis:

$$a + b \rightarrow a + b.$$

Šiuo atveju dalelės neišnyksta ir neatsiranda, o keičiasi tik dalelių judėjimo būseną.

**2. Netamprieji procesai (reakcijos):**

$$a + b \rightarrow c_1 + c_2 + \dots + c_n.$$

**Reakcijos šiluma:**

$$Q = (m_{01} + m_{02} - m'_{01} - m'_{02} - \dots - m'_{0n})c^2, \quad (12.6.6)$$

čia brūkšneliais pažymėtos antrinių dalelių rimties masės. Egzoterminės reakcijos pavyzdys:

$$e^- + e^+ \rightarrow \gamma + \gamma + 1,02 \text{ MeV}.$$

Endoterminės reakcijos pavyzdys:

$$p + p \rightarrow p + p + p + \bar{p} - 1,9 \text{ GeV}.$$

Visas galimas reakcijas nusako tvermės dėsniai (žr. 12.5 skirsnis). Absoliučiai neutralių dalelių išnykimo ir atsiradimo nedraudžia jokie krūvio tvermės dėsniai. Dalelės ir atitinkamos antidalelės atsiradimą gali uždrausti tik energijos (masės) tvermės dėsnis.

**3. Dalelių skilimas:**

$$a \rightarrow c_1 + c_2 + \dots + c_n.$$

Šio vyksmo ypatybė yra ta, kad jis yra savaiminis (yra tik viena pirminė dalelė).

Pvz., neutrono beta skilimas:

$$n \rightarrow p + e^- + \bar{\nu}$$

Skilimas visada yra „egzoterminis“ ( $Q > 0$ ), nes tik tokie vyksmai gali būti savaiminiai.



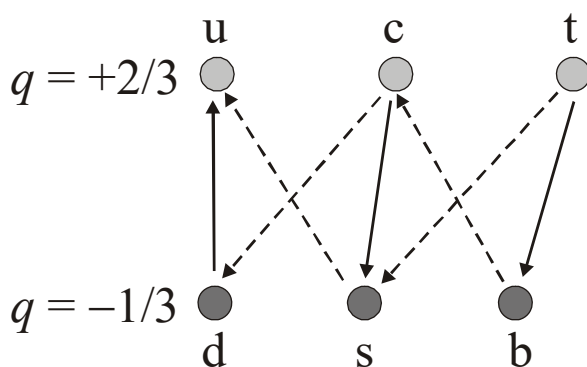
Hadronų skilimą gali sukelti silpnoji, elektromagnetinė arba stiprioji sąveika. Požymiai:

- 1) jeigu, skilus hadronui, susidarė dalelės, kurių pilnutiniai aromato skaičiai skiriasi nuo atitinkamų pirminio hadrono skaičių, tai reiškia, kad skilimas įvyko dėl silpnosios sąveikos,
- 2) hadronų skilimai, kuriuos sukelia elektromagnetinė sąveika, yra ypatingi tuo, kad jų metu išspinduliuojami fotonai,
- 3) hadronų skilimuose, kuriuos sukelia stiprioji sąveika, susidaro tik kiti hadronai.

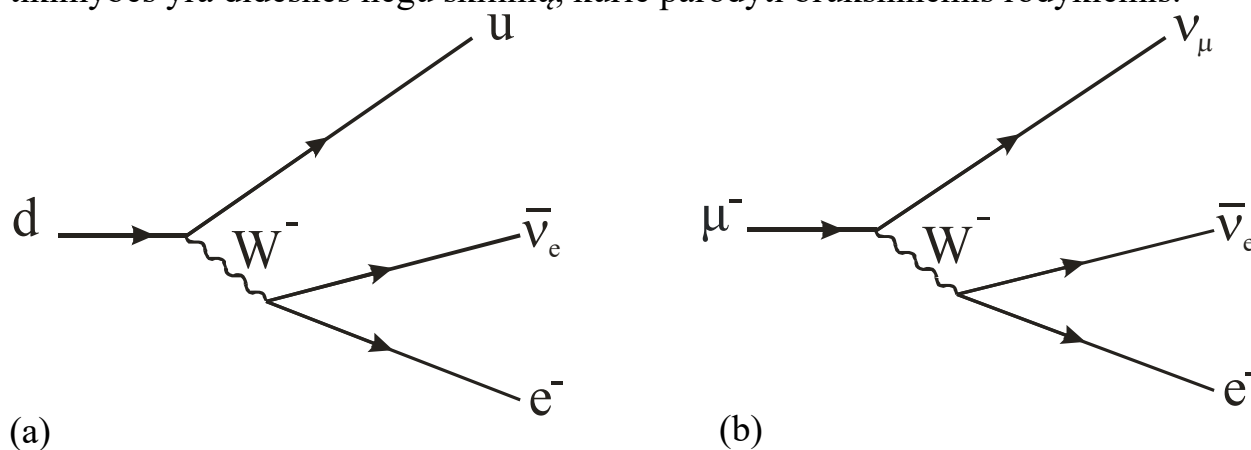
Jeigu hadrono skilimą sukelia silpnoji sąveika, tada vidutinė gyvavimo trukmė ( $\tau$ ) sparčiai mažėja didėjant  $Q$ : kuo didesnė  $Q$ , tuo trumpesnė  $\tau$ . Dažniausiai  $Q$  yra  $10^2$ – $10^3$  MeV eilės. Neutrono skilimas – išimtis:  $Q = 0,79$  MeV,  $\tau \approx 15$  min.

**12.9 lentelė.** Tipiška hadrono gyvavimo trukmė priklausomai nuo skilimo prigimties

Sąveika	Tipiška gyvavimo trukmė (s)
Stiprioji	$10^{-22}$ – $10^{-24}$
Elektromagnetinė	$10^{-16}$ – $10^{-21}$
Silpnoji	$10^{-7}$ – $10^{-13}$



**12.6.1 pav.** Galimi kvarkų skilimai. Skilimų, kurie parodyti ištisinėmis rodyklėmis, tikimybės yra didesnės negu skilimų, kurie parodyti brūkšninėmis rodyklėmis.



**12.6.2 pav.** d kvarko (a) ir miuono (b) skilimo schema

Miuono skilimo lygtis:

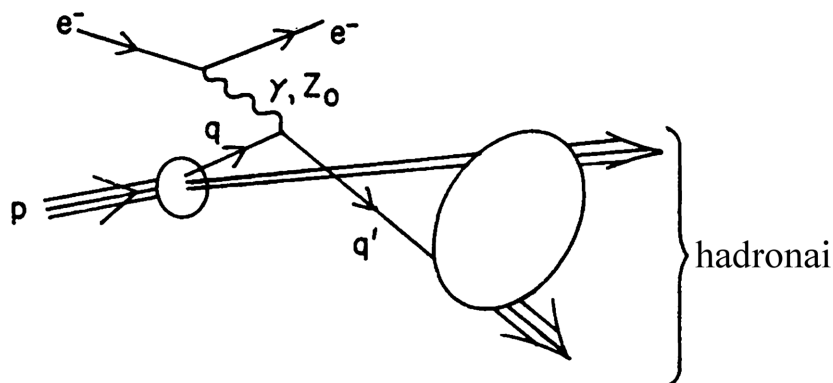
$$\mu^- \rightarrow e^- + \bar{\nu}_e + \nu_\mu.$$

Šis virsmas yra analogiškas d kvarko skilimui į u kvarką (plg. [12.6.2a pav.](#) ir [12.6.2b pav.](#)).

Protono vidinės struktūros tyrimui reikalingos dalelės, kurių energija  $> 100 \text{ MeV}$ . Jos neturi dalyvauti stipriojoje sąveikoje (pvz., elektronai). Tokie nukleonų sandaros tyrimai analogiški Rezerfordo eksperimentams, kurie patvirtino branduolinį atomo sandaros modelį.

Elektronų sklaidos protonais ir kitais hadronais tyrimų duomenys parodė, kad barionų viduje yra trys taškiniai sklaidos centrai, o mezonų viduje yra du taškiniai sklaidos centrai.

Tokia elektronų sklaida yra netamprioji: protonas yra suskaldomas į atskirus kvarkus („gilioji netamprioji sklaida“). Atsiradus laisvam kvarkui, savaime susikuria kiti kvarkai ir susijungia su laisvuoju kvarku, susidarant hadronams („kvarko hadronizavimas“).



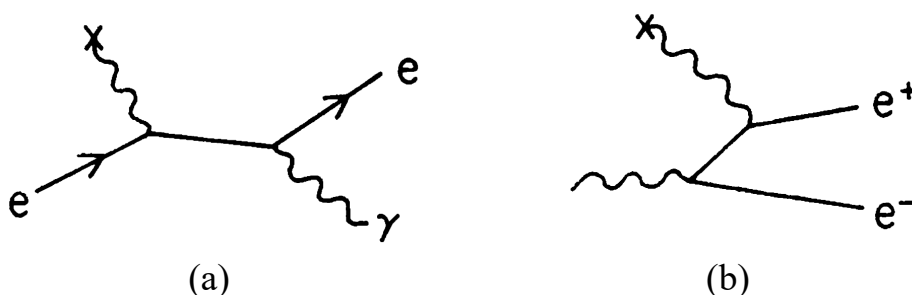
12.6.3 pav. Gili netamprioji elektronų sklaida protonais

Dalelių virsmus įprasta vaizduoti **Feinmano diagramomis**, kurias 1948 m. aprašė amerikiečių fizikas Ričardas Feinmanas (*Feynman*). Supaprastintos Feinmano diagramos sudarymo taisyklės:

- 1) sąveikos įvykiai vaizduojami taškais („mazgais“), iš kurių dažniausiai išeina trys linijos;
- 2) kiekviena linija atitinka elementariąją dalelę: linijos, kurios sujungtos tik su vienu mazgu, atitinka pradines arba galutines daleles, o linijos, kurios jungia du mazgus, atitinka virtualiąsias daleles;
- 3) jeigu dalelė yra fermionas, tada linija yra tiesi, o jeigu bozonas, tada linija yra vingiuota.

Kiekviena Feinmano diagrama turi laiko ašį (kryptis – iš kairės į dešinę arba iš apačios į viršų). Mazgų ir linijų išsidėstymas atitinka eiliškumą laike.

Mazgų skaičius Feinmano diagramoje – tai atitinkamo vyksmo „eilė“. Elementariojo vyksmo tikimybė sparčiai mažėja didėjant jo eilei, ir šis mažėjimas yra tuo spartesnis, kuo silpnesnė sąveika, sukelianti tą vyksmą.



12.6.4 pav. (a) stabdomosios spinduliuotės atsiradimas, (b) porų kūrimas