

**ŠIAULIŲ UNIVERSITETAS
GAMTOS MOKSLŲ FAKULTETAS
FIZIKOS KATEDRA**

RAMŪNAS MITKEVIČIUS

**POTENCIALINIO VAIZDAVIMO METODAS
VIENDALELIAM BRANDUOLIUI**

**Fizikos magistrantūros studijų programos “Fizika”
MAGISTRO DARBAS**

**Mokslinis vadovas
Prof. habil. dr. ARVYDAS JUOZAPAS JANAVIČIUS**

Šiauliai, 2007

ANOTACIJA

Norint išspręsti Šredingerio lygtį, įvairioms sudėtingoms atomų ir branduolių sistemoms tenka taikyti apytikslius lygties sprendimo metodus. Magistrinio darbo pirmame skyriuje trumpai aprašoma atomo sandara ir jame veikiančios jėgos. Antrame skyriuje aprašoma Šredingerio lygtis ir jos sprendimo galimybės. Trečiame skyriuje nagrinėjama analitinis Šredingerio lygties sprendimas viendaleliam branduoliui potencialinio vaizdavimo metodu. Naudojant šį metodą diferencialinės lygtys perrašomos integralinėmis lygtimis, kurias galima suskaidyti į dalis. Pasiūlytas lygties sprendimo metodas buvo pritaikytas skaičiuojant viendalelio švino energijas skirtingose būsenose. Lyginant teorinius skaičiavimus viendaleliam švino branduoliui su eksperimentiniais skaičiavimais, reliatyvistinės masės pataisos gerino rezultatus arba rezultatai beveik sutapo. Metodo taikymas naudingas aiškinant branduolių, turinčių daug neutronų ir didelį skersmenį, savybes. Jį galima naudoti skaičiuojant tiksliai reliatyvistines pataisas masei ir potencialinei energijai viendaleliame branduolyje. Pataisos padidina išorinių sluoksnių nukleonų ryšio energiją.

ANNOTATION

In order to solve the equation of Shredinger, it is necessary to apply methods of approximate solutions of equation to various complex systems of atoms and nuclei. In the first chapter of this study there is given a short description of atomic structure and functions of powers. The description of Shredinger equation and the variety of its decisions are presented in the second chapter of this work. In the third chapter, the analytic solution of Shredinger equation to the method of monopartical nuclear of potential representation is given. While using that method, differential equations are transcribed into integral equations, which can be reduced into elements. Such method of solution of the equation was applied in order to calculate monopartical lead powers in different states. If to compare theoretical calculations of monopartical lead nucleus with experimental calculations, relativistic errors of mass improved the results or these results were almost coincident. The application of this method is constructive while explaining the characteristics of nuclei which have many neutrons and a large diameter. It can be used to calculate the exact relativistic error to mass and to potential energy in a monopartical nucleus. These errors increase the binding energy of outer shells of nucleous.

Turinys

1. ŠIUOLAIKINĖS PAŽIŪROS Į ATOMŲ BRANDUOLIO SUDĖTĮ.....	6
1.1 Atomo branduolio sandara.....	6
1.2 Atomo branduolio modeliai.....	8
1.2.2 Lašelinis atomo modelis.....	14
1.3 Atomo branduolio viduje veikiančios jėgos.....	14
1.4 Branduolio ryšio energija.....	16
2. ATOMO TEORIJOS PAGRINDAI. ŠREDINGERIO LYGTIS.....	22
2.1 Bendroji Šredingerio lygtis.....	22
2.2 Stacionarios būsenos. Stacionarioji Šredingerio lygtis.....	23
2.3 Trikdymų (perturbacijų) teorija.....	26
3. POTENCIALINIO VAIZDAVIMO METODAS VIENDALELIAM BRANDUOLIUI	29
.....
3.1 Potencialinio vaizdavimo metodas Šredingerio lygties sprendime.....	29
3.2 Pagrindinės pusiau reliatyvistinės lygties sprendinio ypatybės.....	32
3.3 Integralinė lygtis teigiamoms ir neigiamoms energijoms potencialiniu vaizdavimo metodu.....	34
3.4 Reliatyvistinės centrinės branduolio dalies protonų ir neutronų lygmenų pataisos.....	38
3.5 Pusiau reliatyvistinė integralinė-diferencialinė lygtis.....	39
3.6 Sunkiųjų branduolių išorinio sluoksnio stabilumas pusiau reliatyvistiniame modelyje.....	43
3.7 Viendalelių būsenų energijų skaičiavimas švinui.....	48
IŠVADOS.....	51
LITERATŪROS SARAŠAS.....	52
PRIEDAI.....	55

ĮVADAS

Kodėl atomų branduoliai, susidedantys tik protonų ir neutronų, yra tokie stabilūs? Juk protonai, turintys vienodą elektros krūvį, būdami branduolyje taip arti vieni kitų, turėtų vieni kitus stumti milžiniška jėga – o tik atomų branduoliai yra itin stabilios sistemos. Norint suskaldyti į atskirus protonus ir neutronus, pavyzdžiui, helio branduolį, būtina išseikvoti šimtus tūkstančių kartų didesnę energiją, negu atplėšiant nuo branduolio abu jo elektronus. Vadinasi, branduolio viduje nukleonai sąveikauja nepaprasto didumo traukos jėgomis, daug kartų viršijančiomis elektrines jėgas.

Šiuolaikinė atomo teorija remiasi kvantine mechanika. Kvantinė mechanika atsirado, pradėjus tyrinėti objektus, kurių savybių ir judėjimo dėsnių klasikinė fizika negalėjo paaiškinti. Ji žengė į naują vystymosi etapą. Jos kūrėjai buvo austrų fizikas E. Šredingeris ir vokiečių fizikas V. Heizenbergas. **Kvantinė mechanika – fizikos šaka, tirianti mikrodalelių judėjimo išorinių jėgų laukuose dėsnius ir dalelių bei jų sistemų kai kurias vidines savybes.** [20, 184]. Pagrindinė nereliatyvistinės kvantinės mechanikos lygtis buvo suformuluota E. Šredingerio 1926 m. Jo lygtis, kaip ir visis pagrindiniai fizikos dėsniai nėra, išvedami, o nusakomi postuluojuant. Nagrinėjant atomą bei jo charakteristikas taip pat būtina spręsti stacionariąją Šredingerio lygtį. Ji bendriausiu atveju tiksliai neišsprendžia, todėl atomo teorijoje egzistuoja daugybė artutinių metodų, kurių pagalba vienokiu ar kitokiu tikslumu galima gauti įvairias atomo charakteristikas [3, 2]. Lygties teisingumą patvirtina daugybė atliktų eksperimentų. Daugeliu atveju nagrinėjant mikrodalelių reiškinius, ši lygtis sprendžiama darant įvairias prielaidas. B. Kušas, S. Vičas [20, 187] daro prielaidą, jog lygtyje esanti funkcija Ψ nepriklauso nuo laiko. A. Bandzaitis, D. Grabauskas nagrinėja sudėtingas sistemų būsenas aprašančią banginę funkciją, kuri teikia informaciją apie bet kurios sistemos dalies būseną. Autoriai pateikia „tankio matricos“ sprendimo metodą. **Trikdymų (perturbacijų) metodas** – dažniausiai taikomas apytikslis Šredingerio lygties sprendimo metodas.

Visi egzistuojantys atomo teorijoje metodai veda prie sudėtingų matematinių išraiškų. Vienas šios lygties sprendimo metodų – **potencialinio vaizdavimo metodas.**

Kartu tai ir didaktinė medžiaga fizikos dėstytojams, mokytojams bei fizikos specialybės studentams, besimokantiems branduolinės fizikos pagrindų. Besidomintys branduoline fizika moksleiviai, šį dalyką plačiau studijuojantys studentai gali susipažinti su atome vykstančiais procesais. Gilinti turimas žinias, prisidėti prie atome vykstančių procesų tyrinėjimo. A. I. Naumovas (1984) sakė, kad apie branduolyje vykstančius procesus žinoma tik 10% informacijos. Nors šiai mokslo šakai jau daugiau nei 100 metų, tačiau apie atome vykstančius

procesus žinome dar labai mažiai. Tai pakankamai nauja mokslo sritis, knygų lietuvių kalba nėra labai daug.

Problema. Vienintelis būdas Šredingerio lygčiai spręsti – apytikslis įvairių metodų taikymas, jeigu žinome, kad tyrinėjamos fizikinės sistemos mažai skiriasi nuo idealizuotų sistemų. Tada galimas tikslus (analitinis) lygties sprendimas.

Magistrinio darbo tikslas: Rasti viendalelio Saksono – Vudso potencialo parametrus taip, kad teoriniai viendalelio energijos lygmenys, įskaitant reliatyvistines pataisas, sutaptų su eksperimentiniais.

Uždaviniai:

1. Surinkti medžiagą apie atome branduolyje vykstančius procesus.
2. Išsiaiškinti potencialinio vaizdavimo metodą.
3. Kompiuterine programa įvairiuose lygmenyse apskaičiuoti švino energijas.

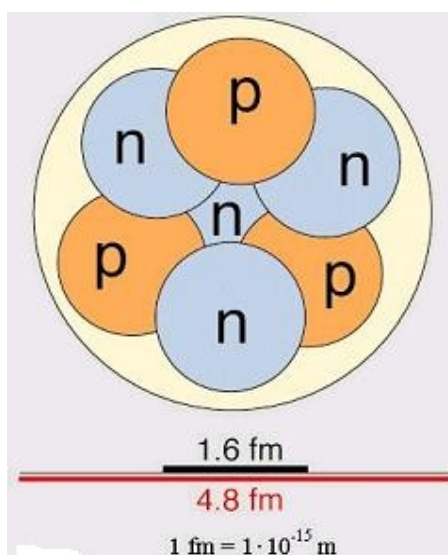
Tyrimo metodai:

1. Dalykinės literatūros analizė.
2. Prognozavimas.
3. Lyginamoji analizė.
4. Palyginimas.

1. ŠIUOLAIKINĖS PAŽIŪROS Į ATOMŲ BRANDUOLIO SUDĖTĮ

1.1 Atomo branduolio sandara

Šiandien atomų branduolius laikome sudarytus iš protonų ir neutronų. Tokios sudėties branduolyje elektronų nėra. Ernesto Rezerfordo tyrimai patvirtino branduolinį atomo sandaros modelį, pagal kurį visas teigiamas atomo krūvis ir beveik visa atomo masė yra sutelkti centriniame branduolyje. Buvo apskaičiuota, kad atomo branduolio matmenys yra bent 4 eilėms mažesni už viso atomo matmenis. Vėlesni tyrimai parodė, kad branduolio matmenys yra maždaug 5 eilėms mažesni už atomo matmenis, branduolio matmenys yra 10^{-13} cm eilės (atomo matmenys yra 10^{-8} cm eilės).



1 pav. Atomo branduolio sandara.

Atomai susideda iš branduolio ir aplink jį yra pasiskirstę neigiamo elektrinio krūvio elektronai. Atomai (1 pav.) sudaryti iš teigiamąjį krūvį turinčių **protonų (p)** ir neutralių dalelių – **neutronų (n)**. Protonas yra elementarioji dalelė, kurios krūvis teigiamas ir prilygsta elektrono krūviui. Jis šiek tiek lengvesnis už savo neutralų, neturintį krūvio partnerį – neutroną [6, 45]. Neutronas – krūvio neturinti branduolio dalelė ir jo masė yra nežymiai didesnė už protono masę.

1 lentelė

Nukleonų pagrindinės charakteristikos

Nukleonas	Protonas	Neutronas
Masės (10^{-27} kg)	1,672 623	1,674 929
Krūvis (e)	1.00	0,00

Protonas ir neutronas, kuriame praktiškai sutelkta jo masė, bendrai vadinami nukleonais. Periodinėje cheminių elementų lentelėje elementai išdėstyti taip, kad kiekvienas sekantis elementas savo branduolyje turi vienu protonu daugiau. Kiekvieną branduolį galima apibūdinti dviem dydžiais: eilės numeriu Z , kuris nusako jo elementariųjų krūvių skaičių, ir masės skaičiumi A , reiškiančiu branduolio masę. **Bendras branduolį sudarančių masės skaičius (A) vadinamas branduolio masės skaičiumi.** [31, 326] Kai atomo branduolys yra sudėtas iš protonų ir neutronų, branduolio eilės numeris Z nusako protonų skaičių, o masės skaičius A – atomą sudedančių dalelių – nukleonų bendrą skaičių branduolyje. Nors atomų su vienodais numeriais Z cheminės savybės yra vienodos, tačiau jų fizikinės savybės gali būti labai įvairios. Pažymėjus neutronų skaičių raide N , galima užrašyti:

$$A = Z + N. \quad (1.1.1)$$

Cheminio elemento atomų rūšys, kurios skiriasi tik masės skaičiumi A , yra vadinami to elemento **izotopais**. Kiekvienas elementas – tai atomas, turintis tam tikrą elektronų skaičių. Elemento elektronų skaičius nusako protonų skaičius jo branduolyje, nes žinome, kad atomas yra neutralus, visų o sandaros elementų elektrinių krūvių suma turi būti lygi nuliui [5, 47]. Elemento branduolyje turi būti tam tikras protonų skaičių, kuris yra lygus elemento elektronų skaičiui. Tačiau branduolyje esančių neutronų skaičius neribojamas. Todėl egzistuoja įvairūs to paties elemento izotopai, besiskiriantys tik neutronų skaičiumi. Dauguma cheminių elementų turi po kelis izotopus. Labiausiai paplitęs vandenilio 1_1H izotopai. Dar žinomi trys vandenilio izotopai: 2_1H – sunkusis vandenilis, arba deuteris, 3_1H – tritis, ir 4_1H . Pasaulyje atrasta apie 300 stabilų ir virš 2000 - radioaktyvių izotopų, tačiau ne visiems vieno elemento izotopams krūvio skaičius Z yra vienodas. Galima teigti, kad vieno elemento skirtingų izotopų atomų branduoliai skiriasi neutronų skaičiumi. Šis skaičius lygus masės skaičiaus A ir krūvio skaičiaus Z skirtumui:

$$N = A - Z. \quad (1.1.2)$$

Branduolio masė nėra visai lygi visų jo atskirai paimtų nukleonų masei. Ji visada mažesnė. Branduolio masės (M) ir jo nukleonų skaičiaus A skirtumas $\Delta M = M - A$ yra vadinamas **branduolio masės defektu**. Nors jis neturi tiesioginės fizikinės prasmės, bet juo naudojamosi branduolių ryšio energija ir branduolių reakcijų energijos efektui apskaičiuoti.

1.2 Atomo branduolio modeliai

Žinios apie branduolio struktūrą, jo savybes, sąveikas su dalelėmis ir kitais branduoliais, gaunamos lyginant eksperimento (energetiniai lygmenys, defektinės vertės, branduolinės reakcijos) rezultatus su teorinėmis žiniomis apie branduolius, kaip sistemą stipriai tarpusavyje sąveikaujančių dalelių – nukleonų. Atomo branduolys yra kvantinė sistema, sudaryta iš didelio, tačiau baigtinio nukleonų skaičiaus. Todėl tenka spręsti daugelio dalelių uždavinį, kuris net trijų dalelių sistemai nėra tiksliai išspręstas. A. Poškus įvardija pagrindines kliūtis, trukdančias sukurti nuoseklią branduolio teoriją [25, 88]:

1. Iki šiol nežinomas jėgų, kurios veikia tarp branduolio nukleonų, tikslus pavidalas;
2. Lygtys, kurios aprašo didelio sąveikaujančių dalelių skaičiaus judėjimą branduolyje, yra labai sudėtingos;
3. Dėl stiprios sąveikos tarp kaimyninių nukleonų reikia atsižvelgti į jų kolektyvinį judėjimą.

A. I. Naumovas teigia, kad atomo branduolio teorija remiasi modeliais, kuriuose branduolys pakeičiamas modeliuojama fizikine sistema, kuri pakankamai gerai atspindi kai kurias branduolio savybes. Kuriant tokius modelius patariama atsižvelgti į tokius faktorius [23, 640]:

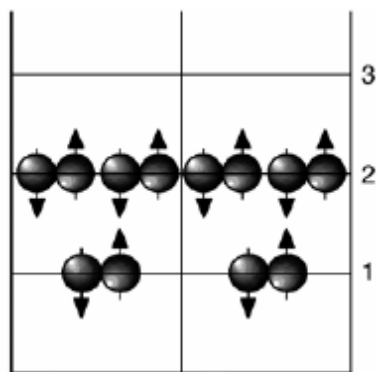
1. Nustatyti reiškinį, kurį būtina aprašyti;
2. Įvesti reikalingus papildomus, nepriklausomus kintamuosius;
3. Nustatyti ryšius tarp tyrinėjamų reiškinų ir nepriklausomų kintamųjų;
4. Pasirinkti matematinę skaičiavimo sistemą. Dažniausiai tyrinėtojai renkasi Šredingerio lygties sprendimą;
5. Skaičiavimo rezultatus lyginti su eksperimentiniais rezultatais.

Branduolio fizikoje naudojamus branduolio modelius galima suskirstyti į dvi grupes: viendaleliai modeliai ir kolektyviniai modeliai. Viendaleliuose modeliuose laikoma, kad kiekvienas branduolio nukleonas juda efektyviame jėgų lauke, atskirai nuo kitų nukleonų. Kolektyviniai modeliai aprašo didelio skaičiaus tarpusavyje susijusių dalelių judėjimą. Labiausiai paplitęs viendalelis branduolio modelis yra sluoksninis modelis, o labiausiai paplitęs kolektyvinis modelis yra lašelinis modelis. Modeliai turi paaiškinti pagrindinius

branduolių savumus: jų stabilumą, irimo būdus, sužadintų branduolių būvius ir kitus juose vykstančius procesus. Čia aptarsiu tik du modelius.

1.2.1 Sluoksninis atomo branduolio modelis

1949 m. JAV fizikė M. Hepr-Majer ir vokiečių fizikas G. Jensenas pasiūlė *sluoksninį* branduolio modelį. Modelis rėmėsi prielaida, kad jėgas, kurios veikia tarp nukleonų, galima pakeisti viena centrine jėga, ir ji yra bendra visiems nukleonams. Pagal jį (prielaidą) nukleonai branduolyje, panašiai kaip elektronai atome, išsidėstę sluoksniais ir pasluoksniais. Sluoksnių prigimtį aiškinančios teorijos remiasi *viendaleliu modeliu*. Šis jėgų laukas vadinamas **suderintuoju lauku**. Toks autorių pasiūlytas pavadinimas atspindėjo tą faktą, kad kiekvieną nukleoną veikianti jėga priklauso nuo visų kitų nukleonų būsenos, o ši būseną, priklauso nuo jėgų, kurios veikia tarp nukleonų. Apibrėžus suderintąjį lauką, daugelio dalelių judėjimo uždavinys virsta vienos dalelės judėjimo uždaviniu. Branduolio suderintame lauke judančiam nukleonui, išsprendę Šredingerio arba Dirako lygtį, gauname nukleono kvantines būsenas, kurių kiekviena apibūdinama tais pačiais kvantiniais skaičiais, kaip ir elektrono būseną atome, t.y., pagrindiniu kvantiniu skaičiumi n , orbitinio judesio kiekio momento kvantiniu skaičiumi l , pilnutinio judesio kiekio momento kvantiniu skaičiumi j ir pilnutinio judesio kiekio projekcijos (magnetiniu) kvantiniu skaičiumi m_j . Kiekvieną kvantinių skaičių ketvertą atitinka apibrėžta energijos vertė. Atomo energija gali būti lygi tik atskiroms n vertėms – energijos lygmenims. Pagal sluoksninį branduolio modelį, branduolio nukleonų erdvinio judėjimo kvantinės būsenos („orbitos“) sudaro sluoksnius. Kiekvieną sluoksnį atitinka grupė artimų energijos lygmenų. Skiriami protoniniai ir neutroniniai sluoksniai. Atomo elektroninį sluoksnį sudaro visi energijos lygmenys su vienodu n . Tačiau branduolio lygmenų skilimas dėl sukinių ir orbitos sąveikos yra žymiai stipresnis negu atomo, todėl lygmenys, kurie atitinka vienodas nukleono kvantinių skaičių poras (n, l), bet skirtingus $j = l \pm 1/2$, gali priklausyti skirtingiems sluoksniams. Gretimų branduolio sluoksnių energijų galimas skirtumas yra ~ 10 MeV, nes nukleonų tarpusavio traukos jėga yra žymiai stipresnė už Kulono jėgą, kuri veikia tarp atomo elektrono ir branduolio. Jiems galioja Paulio draudimo principas, kuris teigia, kad branduolyje negali būti du vienodos kvantinės būsenos nukleonai (du nukleonai, kurių visi keturi kvantiniai skaičiai sutampa) [26, 245]. Todėl branduolio nukleonai iš eilės užpildo sluoksnius, pradedant nuo žemiausios energijos sluoksnio. 2 pav. iliustruoja $^{12}_6\text{C}$ branduolio sluoksnių užpildą pagrindinėje (mažiausios energijos) būsenoje.

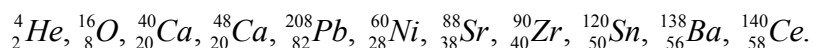


2 pav. ^{12}C branduolio sluoksnių užpildymas pagrindinėje būsenoje.

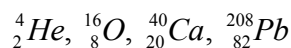
Rodyklės ant atskirų nukleonų nurodo jų sukinių tarpusavio orientaciją (t.y., sukinių magnetinį kvantinį skaičių m_s). Jeigu branduolio protoniniai arba neutroniniai sluoksniai yra pilnai užpildyti (nukleonai yra užėmę visas tą sluoksnį sudarančias kvantines būsenas), tuomet branduolys ypač stabilus. Bandymai parodė, kad egzistuoja labai stabilūs branduoliai, kuriuose protonų arba neutronų skaičius lygūs:

$$2, 8, 20, 28, 50, 82, 126,$$

Šie skaičiai vadinami **magiškaisiais skaičiais**, o branduoliai vadinami **magiškaisiais branduoliais**. Labiausiai paplitę šie elementai:



Dukart magiškaisiais vadinami elementai, kurių ir N , ir Z yra magiški. Šiai grupei priklauso elementai:



Ir jie ypač patvarūs. Šių elementų izotopai labiausiai paplitę gamtoje. Remiantis *sluoksniniu* modeliu, V. E. Kuzmyčiovas (1989) teigia, jog stabilesni yra tie elementai, kurie turi lyginį skaičių protonų ir lyginį skaičių neutronų (21, 16). Ne tokie stabilūs turi būti branduoliai, kurių tik vienas skaičius (N arba Z) yra lyginis, ir nepatvariausi – su nelyginiais N ir Z . I. Požėla, Č. Radvilavičius (2003) teigia, kad periodiškai vykstant atomų savybių, ypač turinčių magiškąjį protonų (neutronų) skaičių, pokyčiams, kaip ir branduoliuose, egzistuoja uždari sluoksniai.

1. Didelis elementų, kurių Z arba N skaičius.
2. Daugelis stabiliųjų elementų turi bent vieną radioaktyvų elementą, turintį magiškąjį skaičių protonų arba neutronų.
3. Elemente, turinčiame magiškąjį skaičių, ryšio energija yra didžiausia. Jeigu prisijungtų nors vienas neutronas, ši energija stipriai sumažėtų.
4. Didelė uždarytųjų sluoksnių sužadavimo energija.

Magiškųjų branduolių egzistavimas leidžia manyti, kad sluoksninė struktūra būdinga ir atomo branduoliams. Tai reiškia, kad nukleonai juda sužadintame lauke ir jų būsenos sukongruotos α sluoksnyje, atskirtame energetiniais intervalais $\partial E_{\alpha\beta}$, kurie viršija atstumą tarp lygių i , kiekvieno sluoksnio ribose. Tačiau skirtingai nuo atomo branduolyje nėra centrinės jėgos, o jėgos tarp nukleonų yra labai stiprios, bet trumpalaikės. Buvo teigiama, kad sužadintas laukas, kuriame juda nukleonai, yra sferiškai simetriškas, tačiau tokie modeliai negalėjo paaiškinti gautų eksperimentinių rezultatų, nors įvedamos pradinės sąlygos buvo sudėtingos. M. Majeris iškėlė teiginį, kad branduolyje 10 % visos sąryšio energijos sudaro sukinio-orbitinė sąveika. Nukleono sąryšio hamiltonianas sužadintame lauke užrašomas tokioje formoje:

$$\hat{H} = U(r) + V(r) \left(\hat{s}, \hat{l} \right) \quad (1.2.1.1)$$

Kur \hat{s} - nukleono sukinio operatorius, \hat{l} - orbitinio momento operatorius. Iš pradžių išsprendžiame Šredingerio lygtį su potencialu ir priklausomybės operatoriumi. Funkcijoms $U(r)$ ir $V(r)$ parenkami parametrai, kad nagrinėjama energetinių lygmenų sistema teisingai aprašytų empirinius duomenis. Branduolio sluoksnių analizinė pateikiama lentelėje:

2 lentelė

Branduolių, turinčių dvigubą magiškąjį skaičių, išorinių sluoksnių užpildymas

Sluoksnio numeris	Lygmenys	Z arba N skaičius sluoksnyje	Z arba N skaičius atome	Dvigubi magiškieji elementai
I	$1s_{1/2}$	2	2	${}^4_2\text{He}$
II	$1p_{3/2}, 1p_{1/2}$	6	8	${}^{16}_8\text{O}$
III	$1d_{5/2}, 2s_{1/2}, 1d_{3/2}$	12	20	${}^{40}_{20}\text{Ca}, {}^{48}_{20}\text{Ca}$

IV	$1f_{7/2}$	8	30	28	${}^{48}_{20}\text{Ca}$
	$2p_{3/2}, 1f_{5/2}, 2p_{1/2}, 1g_{9/2}$	22		50	${}^{132}_{50}\text{Sn}$
V	$1g_{7/2}, 2d_{5/2}, 2d_{3/2}, 3s_{1/2}, 1h_{1/2}$	32		82	${}^{132}_{50}\text{Sn}, {}^{208}_{82}\text{Pb}$
VI	$1h_{9/2}, 2f_{7/2}, 2f_{5/2}, 3p_{3/2}, 3p_{1/2}, 1i_{13/2}$	44		126	${}^{208}_{82}\text{Pb}$

Antrajame skiltyje nurodytas energetinių sluoksnių išsidėstymo eiliškumas. Paskutinėje stulpelyje pateikiami branduoliai, turintys dvigubą magiškąjį sluoksnį. Tokie branduoliai turi pilnai užpildytus nukleonų sluoksnius. Nagrinėjant šią lentelę, Jasiūnienė R. Valentinavičienė V siūlo atkreipti dėmesį į keletą pastebėjimų:

1. Jei pabrauktas elemento apatinis indeksas, tai visiškai užpildytas protonų sluoksnis. Jeigu pabrauktas elemento viršutinis indeksas, užpildytas neutronų sluoksnis.
2. Ketvirtasis sluoksnis turi pasluoksnį, kuriame yra 8 nukleonai, kurių energija yra pakankamai maža lyginat su kitų sluoksnių energijomis.
3. Nors elementas ${}^{132}_{50}\text{Sn}$ turi dvigubą magiškąjį skaičių, jis dėl neutronų pertekliaus nėra stabilus β skilimui.
4. Iš visų mums žinomų elementų tolimiausi sluoksniai, kurie užpildyti protonais ir neutronais, yra penktasis ir šeštasis. Gali būti, kad egzistuoja stabilus atomas, kurio $Z=126$, su užpildytu šeštuoju sluoksniu. Mokslininkai teigia, kad egzistuoja septintasis sluoksnis, kuriame atomas ($N=184$). Todėl gali egzistuoti branduoliai ${}^{310}_{126}?$ ir ${}^{298}_{114}?$

Pastebime, kad branduolio magiškieji skaičiai skiriasi nuo elektronų skaičiaus atomuose su visiškai užpildytais sluoksniais (pagal idealiąją atomo sluoksnių užpildymo schemą):

$$2, 10, 28, 60, 110,$$

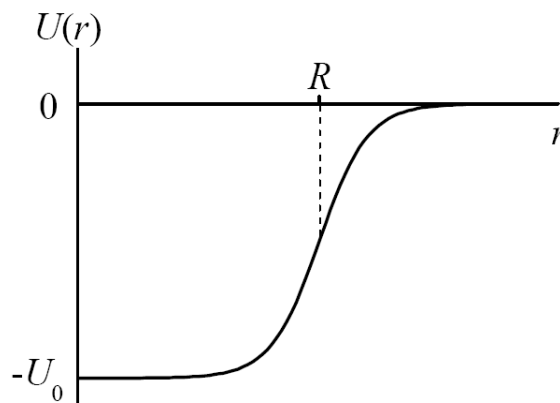
ir nuo elektronų skaičiaus inertinių dujų atomuose:

$$2, 10, 18, 36, 54, 86.$$

Taip yra todėl, kad nukleono potencinės energijos U branduolio suderintame lauke priklauso nuo atstumo r iki jėgos centro yra kitokio pavidalo negu atome.

$$U(r) \approx - \frac{U_0}{1 + \exp\left(\frac{r - R}{a}\right)} + U_{kul}(r) \quad (1.2.1.2)$$

Atome U yra apytiksliai proporcinga $1/r$. Vidutiniuose ir sunkiuosiuose branduoliuose čia pirmasis dėmuo atspindi nukleonų tarpusavio trauką, o antrasis Kulono atostūmį. Kadangi $U_{kul}(r)$ yra žymiai mažesnis už pirmąjį, tai $U(r)$ pavidalą lemia pirmasis dėmuo, kurio pavaizduotas dydis R yra apytiksliai lygus branduolio spinduliui (10^{-15} m eilės). Potencinė energija yra apytiksliai pastovi branduolio viduje, o prie branduolio ribos greitai sumažėja iki nulio (3 pav.).



3 pav. Nukleono potencinės energijos priklausomybė nuo atstumo r .

Būtina atkreipti dėmesį, kad jėga yra lygi potencinės energijos išvestinei su minuso ženklu, todėl A. Poškus (2004) teiginį galima suformuluoti šitaip: „kai nukleonas yra branduolio viduje, jį veikianti jėga apytiksliai lygi nuliui, o kai nukleonas yra branduolio paviršiuje, egzistuoja stipri jėga, kuri traukia nukleoną gilyn į branduolį“ [25, 83].

Šis modelis taip pat gerai paaiškino lengvų ir vidutinių branduolių sukinių, magnetinį momentą, savybių kitimo periodiškumą, elektromagnetinės spinduliuotės spektro ypatumus ir kt. Jei nukleonai visiškai užpildo sluoksnį, tai jų sukiniai susikompensuoja – kiekvieną lygmenį užima du priešingų sukinių nukleonai. Jei prisideda dar vienas nukleonas, tai jis jau patenka į naują neužpildytą sluoksnį ir visos sistemos sukinytis bus lygus prisidėjusio nukleono sukiniui. Pavyzdžiui, $^{17}_8\text{O}$ izotopo 8 protonų ir 8 neutronų skaičiai yra magiškieji ir jų sukinytis lygus nuliui; devintasis neutronas jau užims naują sluoksnį – jis ir nulems izotopo sukinių. $^{18}_7\text{N}$ izotopo 8 neutronų skaičius yra magiškas, o jų sukinytis lygus nuliui; 7 protonai sluoksnio neužpildo – trūksta vieno protono ir izotopo sukinytis lygus vieno protono sukiniui.

1.2.2 Lašelinis atomo modelis

1936 m. J. Frenkelis pasiūlė, o N. Boras išvystė *lašelinį* modelį, priskirdamas branduolinei medžiagai *skysčio savybes*. Lašelinis atomo modelis grindžiamas kai kuriais panašumais tarp branduolio ir įelektrinto skysčio lašo. Pagal šį modelį nukleonai atome, panašiai kaip molekulės lašelyje, juda chaotiškai ir tik trumpasiekės ir stiprios branduolinės jėgos išlaiko nukleonus mažame branduolio tūryje. Branduolinės medžiagos lašelis yra įelektrintas, jos tankis visuose atomuose yra praktiškai vienodas, o lašelis, panašiai kaip skysčiai, yra mažai spūdus. Lašelinis modelis naudojamas branduolinių reakcijų teorijoje bei aiškinant sunkiųjų atomų dalijimosi procesą. Įsiskverbus nukleonui į atomą, dėl branduolio medžiagos mažo spūdomo prasideda nukleonų kolektyvinis judėjimas, kurio metu atomas deformuojasi, nekintant jo tūriui. Protonų Kuloninio atostūmio jėga stengiasi padidinti deformaciją, o paviršiaus įtempimo jėga - grąžinti atomui pradinę formą. Kuo didesnis atomo krūvio skaičius Z , tuo didesnis Kuloninių jėgų vaidmuo ir tuo lengviau atomui dalintis.

1.3 Atomo branduolio viduje veikiančios jėgos

P. Brazdžiūnas (1965) *teigia*: „protonas ir neutronas vadinami nukleonais dar todėl, kad šias elementariosias dalelės galima laikyti viena ir ta pačia dalele – nukleonu, tik skirtinguose būviuose: viename būvyje jis yra elektrinta dalelė – protonas, kitame – neelektrinta – neutronas“. [2, 245]. Stiprioji sąveika jungia nukleonus atomo branduolyje. Šios jėgos dar vadinamos **branduolinėmis jėgomis**. Jos neleidžia nukleonams išsiskirti ir išlaiko atomą ir branduolį pusiausvyroje, nepaisant to, kad tarp protonų veikia elektromagnetinės stūmos jėgos. A. N. Matvejevas (1989) pateikia branduolinėms jėgoms būdingas savybes:

1. Jėgos labai stiprios, stipresnės už jėgas, veikiančias atomo elektroniniuose sluoksniuose.
2. Branduolinės jėgos yra *trumpasiekės*. Jos veikia labai mažuose atstumuose ($\sim 10^{-15}$ m).
3. Didėjant atstumui r , jos staigiai silpnėja (mažėjimo dėsnis eksponentinis: $(1/r) e^{-r/R_0}$).
4. Dar labiau sumažėjus atstumui tarp nukleonų pradeda veikti *stūmos jėgos*.

Kiti atomo viduje veikiančių jėgų ypatumai:

1. Branduolinės jėgos pasižymi *įsotinimu*. Kiekvienas nukleonas sąveikauja su ribotu gretimų nukleonų skaičiumi. Įsotinimas aiškinamas stūmos tarp nukleonų jėgomis, kurios neleidžia į vieno nukleono veikimo sritį patekti daug nukleonų. Tokioje srityje yra 4-5 nukleonai, todėl, pavyzdžiui, helyje veikiančios jėgos praktiškai yra soties būsenoje.
2. Sąveika tarp nukleonų priklauso nuo jų *sukinių orientacijos*. Todėl šios jėgos nėra centrinės, nėra nukreiptos išilgai du nukleonus jungiančios linijos.
3. Ji *nepriklauso* nuo *nukleonų krūvinės būsenos*: sąveika dviejų protonų, dviejų neutronų ar protono su neutronu branduolyje yra vienodo dydžio.

Nukleonai gali sąveikauti trejopu būdu:

- a) Du protonai,
- b) Protonas ir neutronas,
- c) Du neutronai.

Nors tarp dviejų nukleonų veikia vienodos jėgos, bet sąveika tarp dviejų protonų skiriasi nuo sąveikos tarp protono ir neutrono, nes tarp protonų veikia ir Kulono jėga. Tai rodo jų sąveikos potencialinės energijos U priklausomybę nuo nuotolio kreivės. (3 pav.). Kadangi tarp dviejų protonų veikia atstūmimo jėga, tai jiems artėjant potencialinė energija visą laiką didėja. Kai jie suartėja tiek, kad pradeda veikti branduolinė jėga, potencialinė energija labai staigiai sumažėja ir nebeprisklaido nuo nuotolio. Protono ir neutrono sąveikos potencialinė energija yra lygi nuliui, kol protonas ir neutronas suartėja iki branduolinio radiuso (10^{-13} cm) nuotolio. Tuomet ši jėga staigiai sustiprėja, ir potencialinė sąveikos energija mažėja - potencialinė energija yra neigiama.

Atome branduolyje nukleonai sąveikauja tik su tam tikru nukleonų skaičiumi. Jeigu nukleonai sąveikautų su bet kuriuo nukleonų skaičiumi, tai ryšio energija E turėtų priklausyti nuo $A(A-1)$, bet ne nuo A . Šiuo atveju branduolinės jėgos pasižymi prisotinimu. Jos prisotina, kai branduolyje yra keturi nukleonai: du protonai ir du neutronai, kurie sudaro α -dalelę. Pagal kvantinę mechaniką atomai gali būti įvairiuose energetiniuose būviuose. Pagrindiniame būvyje nukleonai užpildo mažesnės energijos lygius. Susiduriant jiems, turėtų kisti jų energija: vienas iš jų turėtų netekti jos ir pereiti į mažesnės energijos būvį; tada kito energija padidėtų. Tačiau mažesnės energijos būviai yra užpildyti ir, pagal Paulio draudimo principą, daugiau sutilpti nukleonų juose nebegali. Todėl atome nukleonai juda praktiškai tarpusavyje nesąveikaudami. Nukleono būvį atome apibūdiname kvantiniais skaičiais: n , kuris lygus banginės funkcijos mazgų skaičiui, ir orbitiniu kvantiniu skaičiumi l . Pagal Paulio

draudimo principą, kiekviename būvyje gali būti atskiros rūšies nukleonų $N=2(2l+1)$. Nukleono energijos lygiai sudaro atskiras grupes – sluoksnius; juose lygiai guli arti vienas kito. Atskirus sluoksnius sudaro šie lygiai:

1s; 2p; 1d ir 2s;

1f ir 2p;

1g, 2d ir 3s;

1h, 2f ir 3p.

Užpildytuose sluoksniuose nukleonų skaičius turi būti lygus magiškajam. Tokia lygybė buvo gauta, tik išskėlus stiprią nukleonų orbitinio ir sukinio momentų sąveiką, palyginus su nukleonų tarpusavio sąveika. Tuomet nusakomasis 1 energetinis būvis priklausomai nuo nukleono sukinio momento atitinka mažesnę būvio (didesnę sąveikos) energijos reikšmę.

Užpildytame būvyje gali tilpti nukleonų skaičius $N=2j+1$, o visame sluoksnyje $n = \sum N$.

1.4 Branduolio ryšio energija

Nukleonai atome sulaikomi specifinėmis branduolinėmis jėgomis. Dabartiniu požiūriu branduolinės jėgos – viena iš stipriosios sąveikos dalių. Tačiau visiškai išbaigtos teorijos šiuo klausimu kol kas nesukurta. Todėl neegzistuoja baigtinė atome veikiančių jėgų teorija, kuri paaiškintų daugelį jo savybių. Mokslininkams tenka eksperimentuoti, naudotis pusiau empirinėmis jėgų priklausomybėmis nukleonuose nuo atstumo, naudotis sukinių teoriją, kurti naujus modelius, aiškinančius stipriąją sąveiką. Branduolinės jėgos pasireiškia šiuose procesuose [23, 152]:

1. Dviejų savarankiškų nukleonų sąveika. Jos metu susidaro sąlygos atsirasti deuteriui ir sąlygoti nukleono – nukleonų sklaidą.
2. Branduolių tarpusavio sąveika. Šiame procese geriausiai galima aprašyti nukleonų sklaidą branduoliuose.
3. Nukleonų tarpusavio sąveika branduolyje. Aprašanti paties branduolio atsiradimo ir egzistavimo galimybes.

Autorius pateikia keletą branduolinių jėgų savybių:

1. Branduolinės jėgos įskaito dviejų dalelių artutinumo. Dviejų nukleonų tarpusavio sąveikos hamiltonianą galima užrašyti kaip visų porinių sąveikos hamiltonianų sumą.

$$\hat{H}_{saa} = \sum_{a < b}^A \hat{H}_{ab} \quad (1.4.1)$$

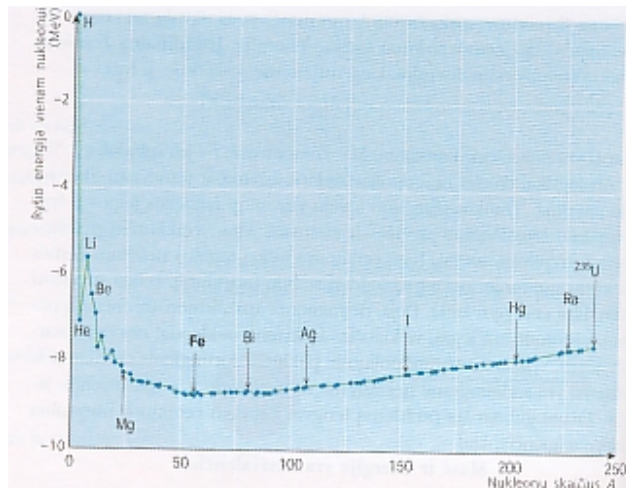
2. Jėgas galima laikyti potencialinėmis.
3. Šios jėgos, vienos iš stipriosios sąveikos dalių, yra labai intensyvios.
4. Jų veikimo sritis baigtinė.
5. Labai mažuose atstumuose traukos jėgos keičiasi į stūmos jėgas.
6. Atome veikiančios jėgos priklauso nuo sukinių \vec{s}_1 ir \vec{s}_2 tarpusavio orientacijos.
7. Branduolinės jėgos yra neutralios. Priklauso ne tik nuo atstumo tarp nukleonų ir sukinių orientacijos, bet ir sukinių orientacijos tiesės atžvilgiu.

Chemijos moksle, elementų izotopų masė išreiškiama skaičiais, kurie šiek tiek skiriasi nuo sveikųjų. Tai aiškinama, todėl, kad nukleonų masės nėra lygios vienetui. Masės yra kiek mažesnė už juos sudarančių nukleonų bendrąją masę. Ji sumažėja todėl, kad susidarant branduoliui, išsiskiria energija, nusakanti nukleonų ryšio atome tvirtumą. [2, 253]. Kvantinėje mechanikoje dalelių sąveika kiekybiškai charakterizuojama ne jėga, o sąveikos energija. Tarp nukleonų branduolyje veikia ypatingos branduolinės traukos jėgos. Apie nukleonų tarpusavio ryšio stiprumą galima spręsti pagal **branduolio ryšio energijos** vertę.

Branduolio ryšio energija – tai darbas, kurį reikia atlikti, norint suskaldyti branduolį į atskirus nukleonus. [25, 76]. **Nukleono ryšio energija** rodo nukleonų ryšio branduolyje stiprumą. [5, 51]. **Vieno nukleono ryšio energija** – vidutinė energija, kurios reikia norint pašalinti iš branduolio vieną nukleoną [25, 51]. Branduolio ryšio energiją apibūdina **masės defektas (ΔM)** – skirtumas tarp branduolio masės M ir jo masės skaičiaus A . [2, 253].

$$\Delta M = M - A. \quad (1.4.2)$$

Remiantis energijos tvermės dėsniu galima teigti, kad, susidarant iš atskirų nukleonų atomui, turi išsiskirti toks pats energijos kiekis, kokį reikia išiekvoti tam, kad jis būtų suskaldytas į nukleonus.



4 pav. Ryšio energijos, tenkančios vienam nukleonui, grafikas.

Eksperimentiškai išmatavus atomų mases, buvo nustatyta, kad branduolio masė M visada keliomis dešimtosiomis procento mažesnė už jį sudarančių nukleonų masių sumą $Zm_p + Nm_n$ [25, 77]. Ją galima išreikšti:

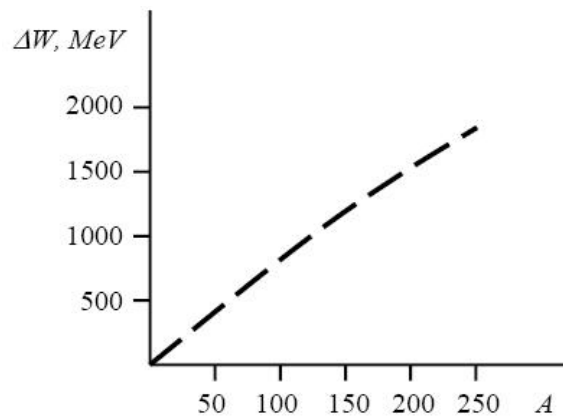
$$M = Zm_p + (A - Z)m_n - \Delta M, \quad (1.4.3)$$

čia m_p yra protono masė, m_n yra neutrono masė.

Atomo masės sumažėjimas aiškinamas ryšio energijos išsiskyrimu, susidarant branduoliui. Pagal energijos ir masės sąryšį ($E = mc^2$), jeigu, susidarant branduoliui, išsiskiria ryšio energija ΔE , išreiškiame šitaip:

$$\Delta E = [(Zm_p + Nm_n) - ma]c^2, \quad (1.4.4)$$

Branduolio ryšio energija, lyginant su elektrine cheminio ryšio energija, labai didelė. Todėl branduolių pakitimo metu gali atsipalaiduoti daug daugiau energijos negu cheminių reakcijų metu. Ryšio energija priklauso nuo nukleonų skaičiaus branduolyje, t.y. nuo masės skaičiaus A (4 pav.).



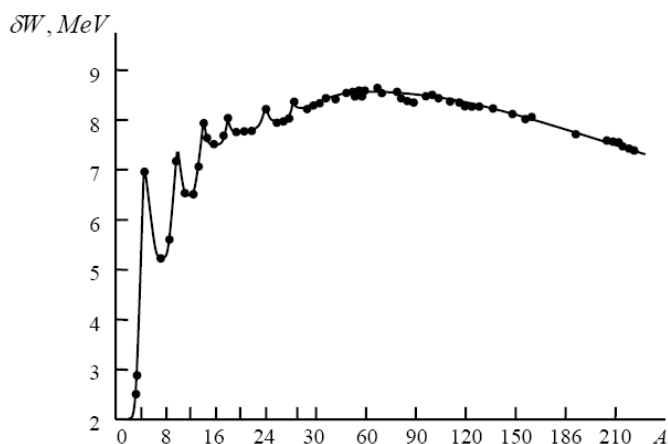
5 pav. Ryšio energijos priklausomybė nuo nukleonų skaičiaus branduolyje.

Iš grafiko matyti, kad priklausomybę vaizduojanti kreivė yra artima tiesei. Atomų stabilumą (tvirtumą) charakterizuoja *savitoji ryšio energija* $\delta W = \Delta W / A$, vienam nukleonui tenkanti ryšio energija.

1. Didžiausia specifinio ryšio energija branduoliuose elementų, esančių periodinės elementų sistemos viduryje ($28 \leq A \leq 138$). Šių atomų δW vertė ~ 8.7 MeV/nukleonui, jų nukleonai surišti stipriausiai, o patys atomai – stabiliausi. Kai $A > 100$, δW mažėja ir ${}^{238}_{92}\text{U}$, ji yra 7.5 MeV/nukleonui. Atomų, kurių masės skaičius $A > 20$, vidutinė savitoji ryšio energija nepriklauso nuo A . Ji apytiksliai lygi 8 MeV/nukleonui.
2. Mažėjant nukleonų skaičiui ($A < 20$), δW mažėja labai netolygiai. Didesnę specifinę ryšio energiją turi tie atomai, kuriuose protonų ir neutronų skaičius yra lyginis (${}^4_2\text{He}$, ${}^{12}_6\text{C}$, ${}^{16}_8\text{O}$).
3. Už gretimus atomus mažesnę ryšio energiją turi tie atomai, kuriuose jų skaičius yra nelyginis (${}^6_3\text{Li}$, ${}^7_5\text{B}$, ${}^{17}_7\text{Li}$).

5 paveiksle matome, kad skirtingų atomo savitosios ryšio energijos šiek tiek skiriasi. Kreivės poslinkis rodo, kad skirtinguose atomuose nukleonai surišti nevienodai. Didėjant masės skaičiui A , savitoji ryšio energija iš pradžių išauga, o po to pradeda lėtai mažėti. Didžiausią savitąją ryšio energiją turi atomai, kurių masės skaičius kinta tarp 40 iki 100. Jie yra stabiliausi. Vidutiniams ir sunkiesiems atomams ($A > 20$) savitoji ryšio energija kinta siaurose ribose: $\delta E = 7.5 - 9$ MeV. Toks δE pastovumas rodo, kad traukos jėgai, kuri veikia tarp nukleonų, yra būdinga *soties* savybė: kiekvienas branduolio nukleonas sąveikauja tik su gretimais nukleonais, išotindamas savo ryšius (jeigu nukleonas sąveikautų su visais likusiais branduolio nukleonais, tuomet ryšio energija būtų apytiksliai proporcinga nukleonų *porų*

skaičiui, t.y., $A(A-1)/2 \approx A^2/2$, todėl savitoji ryšio energija būtų proporcinga A). Vadinasi, branduolinės traukos jėga yra **artiesikė**: jos veikimo atstumas yra nukleono matmenų eilės, t.y., 10^{-15} m.



6 pav. Savitosios ryšio energijos priklausomybė nuo branduolio masės skaičiaus.

Staigus δE sumažėjimas, mažėjant A (5 pav.) aiškinamas tuo, kad atomo paviršiuje esantys nukleonai nevisiškai įsotina savo ryšius. Savitosios ryšio energijos sumažėjimas yra tuo ryškesnis, kuo didesnė nukleonų dalis yra branduolio paviršiuje, t.y. kuo lengvesnis branduolys. Ryšio energija priklauso ne tik nuo visų nukleonų skaičiaus, bet ir nuo protonų bei neutronų skaičiaus branduolyje. [2, 255]. A. Poškus (2004) teigia, kad nukleonams atome „energetiškai naudinga“ jungtis į ketvertus: "2 protonai + 2 neutronai" (tokia keturių nukleonų sistema – tai helio branduolys). Didėjant A , savitoji ryšio energija δE lėtai mažėja (5 pav.) ir sunkiausiajam gamtiniam elementui ${}^{238}_{92}\text{U}$ pasiekia 7.5 MeV. Toks nežymus sumažėjimas aiškinamas protonų elektrostatiinių atostūmiu. Kadangi Kulono jėga yra toliasiekė, kiekvienas protonas sąveikauja su visais likusiais atomo protonais, todėl šios sąveikos energija proporcinga protonų porų skaičiui. Ji auga greičiau negu protonų traukos energija, kuri proporcinga Z . Protonų kuloninio atostūmio energija yra teigiama, t.y. ji didina atomo masę ir mažina masės defektą Δm bei ryšio energiją ΔE . Savitosios ryšio energijos mažėjimas, augant A didelių A srityje reiškia kad, susidarant atomui iš didelio skaičiaus nukleonų ($A \geq 200$), išsiskiria mažesnė energija negu tuo atveju, kai tas pats nukleonų skaičius susijungia į du mažesnius vienodos masės atomus. Dviejų atomų, turinčių po $A/2$ nukleonų, pilnutinė rimities energija yra mažesnė už vieno atomo, turinčio A nukleonų, rimities energiją, jeigu $A \geq 200$. Todėl, kai toks atomas skyla į dvi apytiksliai vienodų masių M_1 ir M_2 skeveldras, išsiskiria energija, kuri lygi pradinio atomo rimities energijos Mc^2 ir skeveldrų rimities energijos $(M_1 + M_2)c^2$ skirtumui. Išsiskyrusi energija virsta skeveldrų kinetine energija, kuri, savo ruožtu,

virsta aplinkinės medžiagos vidine energija (šiluma). Tuo paremtas branduolinių reaktorių veikimas: šiuose reaktoriuose energija gaunama, skylant izotopų ^{235}U , ^{233}U arba ^{239}Pu branduoliams. Savitosios ryšio energijos mažėjimas, mažėjant A mažų A srityje, reiškia, kad, susidarant atomui iš mažo skaičiaus nukleonų ($A < 70$), išsiskiria didesnė energija negu tuo atveju, kai tas pats skaičius nukleonų susijungia į du mažesnius atomus. Dviejų atomų, turinčių po A_1 ir A_2 nukleonų, pilnutinė rimties energija yra didesnė už vieno atomo, turinčio $A = A_1 + A_2$ nukleonų, rimties energiją, jeigu $A < 70$. Todėl, kai du lengvi branduoliai susijungia į vieną atomą, išsiskiria energija, kuri lygi pradinių atomo pilnutinės rimties energijos rimties $(M_1 + M_2)c^2$ ir galutinio atomo rimties energijos Mc^2 skirtumui.

Pilnutinė ryšio energija proporcinga atome esančių nukleonų skaičiui, atomo dydis – jo masei [23, 163], paprastas teiginys, tačiau patekti faktai teoriškai sunkiai paaiškinami. Pavyzdžiui, branduolinėms jėgoms būtina įvertinti dviejų dalelių artutinumą ir jis yra centrinis. Tada nukleonų sąveikos potencialinė energija bus proporcinga dalelių porų skaičiui:

$$A \left(\frac{A-1}{2} \right) \quad (1.4.6)$$

arba apytiksliai $E_{Z,A} \approx A^2$. Praktiniai skaičiavimai parodė, kad tokiais atvejais visų branduolių

skersmuo turėtų būti vienodas $\frac{R_S}{2} \approx 1 \text{ fm}$, o branduolinės medžiagos tankumas turi didėti, didėjant nukleonų skaičiui A . Tokios autorius išvadoms [23, 163] prieštaravo eksperimentiniai rezultatai. Norint paaiškinti gautus rezultatus, buvo aprašyta tokia branduolinė sąveika, kuri stabdė didelį dalelių suartėjimą. Branduolinės jėgos turi **prisotinimo** savybę. Kiekvienas nukleonas pritraukia ribotą skaičių „kaimynų“ ir stumia likusias daleles. Prisotinimo savybė egzistuoja ir chemijos moksle: pavyzdžiui, vienas anglies atomas [23, 163] geba pritraukti tik keturis vandenilio atomus. Šiuo atveju mažuose atstumuose egzistuojanti traukos jėga virsta stūmos jėga. Autorius teigia, jog šiuo metu negalima tiksliai aprašyti branduolyje veikiančias jėgas ir nesvarbu, koks metodas bus pasirinktas.

2. ATOMO TEORIJS PAGRINDAI. ŠREDINGERIO LYGTIS.

2.1 Bendroji Šredingerio lygtis

Fizikai išvystė kvantinę teoriją tik dvidešimtajame amžiuje. Dobson K., Grace D., Lovett D. (2002) pateikia kvantinės teorijos atsiradimą iš dviejų visiškai skirtingų fizikos sričių [5, 44]:

1. Klasikinėje fizikoje buvo aptiktas nedidelis nesklandumas: mokslininkų išvystyta elektromagnetinės spinduliuotės teorija nesugebėjo paaiškinti karšto kūno, vadinamo juodojo kūnu, spinduliavimo spektro.
2. Fizikų atskleistas radioaktyvumo reiškinys privertė juos sukurti naują atomo modelį ir pradėti tyrinėti atomų branduolius. Pagal to meto teorijas atomas su apie branduolį skriejančiais elektronais turėjo tuoj pat suirti. Prarasdami energiją, jie turėjo kristi į branduolius.

Viena iš svarbiausių XIX a. pradžios kvantinės mechanikos problemų buvo rasti tokią lygtį, kuri atstotų Niutono judėjimo lygtį klasikinėje mechanikoje. Naudojantis Niutono lygtimis buvo sprendžiamas pagrindinis mechanikos uždavinys – žinant kūną veikiančią jėgą ir pradines sąlygas: kūno koordinatę ir greičio pradines reikšmes, bėgant laikui aprašyti kūno judėjimą erdvėje. Kvantinėje mechanikoje reikėjo atsižvelgti į tai, kad dalelėms būdinga dvejopa prigimtis, todėl klasikinės koordinatės bei greičio sąvokas buvo galima taikyti ribotai. Javorskis B., Detlafas A. (1975) teigia: „kaip negalėjo būti išvestos Niutono judėjimo lygtys, kuriomis grindžiama klasikinė mechanika, taip pat ir Šredingerio lygtis tiesiog pateikiama kaip postulas“ [18, 300].

Šredingerio lygtis – tiesinė diferencialinė lygtis, artimiausia klasikinei formai. Jos sprendimas priklauso nuo potencialinės energijos ir dalelių skaičiaus erdvėje. Daugeliu atveju lygties sprendimas – sunkus matematinis uždavinys, kurio neįmanoma išspręsti. Šią lygtį 1926 m. postulavo E. Šredingeris, todėl ji vadinama **bendraja Šredingerio lygtimi**. Ją galime užrašyti dviem žinomiausiomis formomis:

$$\nabla^2 \Psi(r) + \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right) [E - E_p(r)] \Psi(r) = 0, \quad (2.1.1)$$

Čia \hbar – Planko konstanta, m – dalelės masė, E – dalelės energija, E_p – dalelės potencialinė energija. Šią formą norint rasti banginę funkciją $\Psi(r)$, kaip diferencialinės lygties sprendinį. Kita forma:

$$\hat{H}\Psi = E\Psi, \quad (2.1.2)$$

Čia, \hat{H} - Hamiltono operatorius, kurio išraiška:

$$\hat{H} = - \left[\frac{\hbar^2}{2m} \right] \nabla^2 + E_p(r), \quad (2.1.3)$$

Ši forma patogesnė nagrinėjant esminius kvantinės mechanikos klausimus ir Šredingerio lygties apibendrinimus. Ši lygtis – postuluota antros eilės diferencialinė lygtis. Išsprendus lygtį gauti rezultatai sutapo su mokslininkų gautais eksperimentiniais duomenimis ir patvirtino kvantinės mechanikos postulatus.

2.2 Stacionarios būsenos. Stacionarioji Šredingerio lygtis

Šredingerio lygtis aprašo dalelės judėjimo būseną, kuri nepriklauso nuo laiko, bet jai nuolat reikalinga energija. A. N. Matvejevas (1989) tokią būseną vadina **stacionariąją**. Jis akcentuoja, jog stacionarioje būsenoje dalelės padėtis laiko atžvilgiu keičiasi tam tikra trajektorija. Klasikinėje mechanikoje dalelės judėjimą suprastume kaip padėties kitimą laiko atžvilgiu. Kvantinėje mechanikoje dalelės judėjimas suprantamas kaip judėjimas „kažkur“ [22, 99]. A. N. Matvejevas (1989) teigia, kad judėjimas susijęs ne su dalelės buvimu stacionarioje būsenoje, o pačios būsenos nuolatiniu kitimu. Autorius pateikia graikų filosofo Aristotelio mintį „Judėjimas susijęs ne su dalelės buvimu stacionarioje būsenoje, o pačios būsenos nuolatiniu kitimu. Pasaulis keičiasi tik tada, kai kas nors keičias, nes jeigu niekas nesikeis, nieko ir neįvyks“ [22, 99].

Fizikoje svarbus atvejis, kai dalelės juda stacionariųjų jėgų lauke. Tuomet lygtyje esantis dydis $V_p = V(x, y, z)$ yra dalelės potencinė energija, kuri tiesiogiai nuo laiko nepriklauso. Lygties sprendinį galima užrašyti dviejų funkcijų sandauga:

$$\Psi = \psi(x, y, z) \cdot \varphi(t), \quad (2.2.1)$$

Čia funkcija ψ priklauso nuo dalelės padėties, o funkcija φ – nuo laiko. Laplaso operatorius Δ

veikia funkciją ψ , o operatorius $\frac{\partial}{\partial t}$ – tik φ . Naudojantis Šredingerio lygtimis gauname:

$$- \frac{\hbar^2}{2m} \varphi \Delta \psi + \psi E_p \varphi = i\hbar \psi \frac{\partial \Psi}{\partial t}, \quad (2.2.2)$$

Šią lygybę padalijus iš sandaugos $\varphi \psi$, ją galima perrašyti:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\Delta \psi}{\psi} + E_p = i\hbar \frac{1}{\varphi} \frac{\partial \varphi}{\partial t}, \quad (2.2.3)$$

Funkcijos ψ ir V , esančios lygybės kairėje pusėje, priklauso nuo koordinatų, o dešinėje pusėje esanti funkcija φ – nuo laiko. Kai abi lygybės pusės yra lygios tai pačiai konstantai E , ji galioja bet kokiame laiko momentu ir bet kuriame erdvės taške. Lygybę:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\Delta \psi}{\psi} + E_p = i\hbar \frac{1}{\varphi} \frac{\partial \varphi}{\partial t}, \quad (2.2.4)$$

galima užrašyti dviem atskiramis lygtimis:

$$i\hbar \frac{1}{\varphi} \frac{\partial \varphi}{\partial t} = E, \quad (2.2.5)$$

ir

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\Delta \psi}{\psi} + E_p = E, \quad (2.2.6)$$

Iš čia

$$\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi + (E + E_p)\psi = 0, \quad (2.2.7)$$

arba

$$\Delta \psi + \frac{2m}{\hbar^2} (E + E_p)\psi = 0, \quad (2.2.8)$$

Konstantą E galima apibūdinti kaip energiją tada, kai sudedami ar atimami tik tais pačiais vienetais matuojami dydžiai. Jeigu dalelės potencinė energija $V_p=0$, tuomet jos kinetinė energija sutampa su laisvosios dalelės pilnutinė energija. Tada galima sakyti, kad skirtumas $E - E_p$ yra kinetinė, o E – pilnutinė energija. Lygtį (2.2.8) galima perrašyti tokia forma:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi + E_p \psi = E \psi, \quad (2.2.9)$$

Lygtis (2.2.9) yra nagrinėjamos dalelės Hamiltono operatoriaus tikrinių verčių lygtis:

$$\hat{H}\psi = E\psi, \quad (2.2.10)$$

Lygtis (2.2.10) vadinama **stacionariąją Šredingerio lygtimi**. Ji užrašyta banginės funkcijos Ψ koordinatų dedamajai ψ . Atskyrus kintamuosius, gauname pirmos eilės diferencialinę lygtį:

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} = -i \frac{E}{\hbar} \varphi, \quad (2.2.11)$$

Vienas šios lygties sprendinių yra funkcija:

$$\varphi = e^{-i \frac{E}{\hbar} t}, \quad (2.2.12)$$

Todėl stacionariojoje būsenoje esančios dalelės pilnutinę banginę funkciją galima užrašyti :

$$\Psi = \psi(x, y, z) e^{-i \frac{E}{\hbar} t}, \quad (2.2.13)$$

Klasikinėje mechanikoje nepriklausoma nuo laiko Hamiltoniano funkcija aprašo konservatyvias sistemas, kurių energija aprašoma judėjimo integralu. Lyginant su kvantine mechanika aprašyta funkcija (2.2.12) ir lygtis (2.2.10), galima teigti, jog energijos E sistema yra stacionarioje būsenoje, o funkciją ψ galima vadinti stacionariosios būsenos bangine funkcija. Potencialiniame lauke $V(r)$ lauke judančios dalelės stacionariąją Šredingerio lygtį užrašome tokiu pavidalu:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(r) \right] \psi(r) = E\psi(r), \quad (2.2.14)$$

Šios lygties sprendinys $\psi(r)$ vadinamas **tikrine funkcija**. Įveskime pradines sąlygas:

$$V(r) \rightarrow 0, \quad \text{kai } r \rightarrow \infty$$

Tada funkcija $\psi(r)$ bus tolygi visoje tyrinėjamoje erdvėje. Dauguma Hamiltoniano H reikšmių E sudaro spektrą tikrinių energijos reikšmių. V. E. Kuzmyčiovas (1989) aprašo tokias energijos spektro struktūras:

1. Kai energija $E < 0$, lygtis (2.2.14) turi sprendinius tik labai apibrėžtose reikšmių srityse $E = E_n$, sudarančių diskretinį spektrą. Indeksas n aprašo energijų reikšmes. Kai tikrinė funkcija $\psi_n(r)$ artėja į nulį (kai $r \rightarrow \infty$), tada modulio $\psi_n(r)$ integralą užrašome:

$$\int |\psi_n(r)|^2 dr \langle \infty \rangle, \quad (2.2.15)$$

Šiuo atveju dalelė yra lokalizuojama tolimiausiam erdvės taške. Tikimybė rasti tokią dalelę bus lygi nuliui. Ir apie tokią dalelę sakoma: ji yra surištoje būsenoje.

2. Kai energija $E > 0$, lygtis (2.2.14) turės sprendinį bet kurioje srityje. Esant teigiamoms energijos E reikšmėms, susidaro nenutrūkstamas spektras. Šiuo atveju tikrinė funkcija $\psi_E(r)$ neartėja į nulį (kai $r \rightarrow \infty$), Modulis $\psi_E(r)$ priklauso nuo $V(r)$ tipo: dalelė artėja į begalybę arba osciliuoja tarp atitinkamų baigtinių reikšmių ir ji niekada nepasieks tolimiausio erdvės taško. Ji gerai aprašo stacionarias būsenas uždavinių susijusių su dalelių sklaida. Tokie uždaviniai siejami su lauke $V(r)$ esančiomis nesurištomis būsenomis.

Paprastas potencialų $V(r)$ lygtis galima išspręsti analitiškai. Sudėtingas lygtis geriausiai spręsti su kompiuterinėmis skaičiavimo sistemomis.

2.3 Trikdymų (perturbacijų) teorija

A. N. Matvejevas (1989) teigia, jog daugeliu atveju Šredingerio lygtį ne visuomet galima tiksliai išspręsti. Tikslus Šredingerio lygties, aprašančių surišusių būsenų energiją E ir banginę funkciją ψ , galimas tik paprastoms potencialinių laukų sistemoms. Tyrinėjat sudėtingas atomų ir branduolių sistemas Šredingerio lygtis sprendžiama tik apytiksliais metodais. Uždavinio sprendimą galime supaprastinti, jeigu tyrinėjamas fizikines sistemas prilyginame idealioms sistemoms. **Trikdymų (perturbacijų) metodas** – viena svarbiausių Šredingerio lygties sprendimo metodų, dviem ir daugiau dalelių. Pagal šį metodą nagrinėjamos sistemos, nepriklausančios nuo laiko, hamiltonianas užrašomas iš dviejų operatorių:

$$\hat{H} = \hat{H}^0 + \lambda \hat{V}, \quad (2.3.1)$$

Čia: \hat{V} – labai nedidelė sistemos energijos dalis, \hat{H}^0 – operatorius, kurio tikrinės funkcijos ir tikrinės vertės, kurios leidžia išspręsti Šredingerio lygtį, λ – bedimensinis dydis. Tikslus uždavinio sprendimas operatoriui \hat{H}_0 yra žinomas:

$$\hat{H}^0 \phi_n = \hat{E}_n^0 \phi_n, \quad (2.3.2)$$

Kur \hat{E}_n^0 ir ϕ_n – tikrinės energijos ir banginės funkcijos reikšmės, n – indeksas, nurodantis stacionariųjų būsenų skaičių. Dydis V aprašomas kaip nagrinėjamos sistemos trikdymų operatorius lyginant aprašinėjamu hamiltonianu H^0 . Abu šie operatoriai mažai kuo tarpusavyje skiriasi. Jeigu bedimensinis dydis λ būtų lygus nuliui, tai uždavinio sprendimas susivestų į (2.3.2) lygtį. Realiai šis operatorius nėra lygus nuliui, todėl sprendžiamą lygtį:

$$\hat{H}_\psi = (\hat{H}^0 + \hat{V})\psi = E\psi, \quad (2.3.3)$$

galima rasti tokiu pavidalu:

$$\psi = \sum_n a_n \phi_n, \quad (2.3.4)$$

Šiuo atveju sumuojamos visos nesusąžadintos sistemos, o koeficientas a_n turi tenkinti sistemos algebrines lygtis:

$$(E - E_m^0) a_m = \lambda \sum_n W_{mn} a_n, \quad (2.3.5)$$

kur W_{mn} – matriciniai trikdymų operatoriaus elementai. Esant mažoms λ vertėms, lygties (2.3.5) sprendimas ieškomas eilučių pavidalu:

$$E = E_l^0 + \lambda E_l^1 + \lambda^2 E_l^2 + \dots \quad (2.3.6)$$

$$a_m = \delta_{ml} + \lambda a_m^1 + \lambda^2 a_m^2 + \dots$$

l – nagrinėjamų sistemų, sužadintų būsenų skaičius. Įstačius (2.3.6) į (2.3.5) gaunamos lygčių sistemos:

$$\begin{aligned} m = l \\ E_l^1 &= W_{ll} \\ E_l^2 + E_l^1 a_l^1 &= \sum_n W_{ln} a_n^1 \end{aligned} \quad (2.3.7)$$

.....

$$\begin{aligned}
& m \neq l \\
& a_m^1 (E_l^0 - E_m^0) = W_{ml} \\
& E_l^1 a_0^1 + (E_l^0 - E_m^0) = \sum_n W_{mn} a_n^1 \quad (2.3.8)
\end{aligned}$$

.....

Iš šių lygčių randama nagrinėjamos sistemos banginė funkcija ψ_l ir energija E_l :

$$\begin{aligned}
\psi_l &= \varphi_l + \sum_{m \neq l} \frac{\lambda W_{ml}}{E_l^0 - E_m^0} + \dots \\
E_l &= E_l^0 + \lambda W_{ll} + \sum_{m \neq l} \frac{|\lambda W_{lm}|^2}{E_l^0 - E_m^0} + \dots \quad (2.3.10)
\end{aligned}$$

Iš gautų lygčių autorius padarė keletą išvadų:

1. Pagrindinėje būsenoje antros eilės energijos pataisa yra visados neigiama ($E_l^0 < E_m^0$).
2. Pagrindinė trikdymų teorijos taikymo sąlyga:

$$\lambda \ll \left| \frac{E_l^0 - E_m^0}{W_{lm}} \right|, \text{ bet kuriam } m \neq l$$

Trikdymų operatoriaus matriciniai elementų λW vertės turi būti labai mažos lyginant su nesužadintos sistemos absoliutinėmis energijos vertėmis.

3. POTENCIALINIO VAIZDAVIMO METODAS VIENDALELIAM BRANDUOLIUI

3.1 Potencialinio vaizdavimo metodas Šredingerio lygties sprendime

Banginė funkcija dažniausiai priklauso nuo koordinačių arba nuo impulsų. Tuo atveju, kai potencialas yra vienareikšmė arba kintama koordinačių funkcija, nuo kurios priklauso banginė funkcija, tada ją galima išreikšti per potencialą. Tuomet ši funkciją tampa dalelių tarpusavio sąveikos potencialo funkcija. Šis sprendimo būdas profesoriaus A. J. Janavičiaus pavadintas **potencialiniu vaizdavimu**. Metodo taikymas leidžia kitaip pažvelgti į kai kuriuos kvantinės mechanikos uždavinius. Profesorius A. J. Janavičius ir R. Płaneta (1978) straipsnyje „Общее решения уравнения Шредингера в потенциальном представлении“ pasiūlė integralinėmis lygtimis užrašyti Šredingerio lygtį, naudojant potencialinį vaizdavimo metodą.

Pradžioje Šredingerio lygtį galima užrašyti tokiu pavidalu:

$$f(l, \pm k, x) = \varphi(l, \pm k, x) \cdot f_0(l, \pm k, x), \quad (3.1.1)$$

kur $f_0(l, \pm k, x)$ - laisvasis sprendinys tenkina kraštinę sąlygą:

$$\lim_{x \rightarrow \infty} f(l, \pm k, x) = \exp(\mp x), \quad (3.1.2)$$

Funkcija $f(l, \pm k, x)$ - Josto sprendinys nesant dalelių tarpusavio sąveikos. Iš lygčių (3.1.1) ir (3.1.2) gaunama kraštinė sąlyga:

$$\lim_{x \rightarrow \infty} \varphi(l, \pm k, x) = 1, \quad (3.1.3)$$

Šredingerio lygtį (3.1.1) perrašome radialine forma:

$$\frac{d^2}{dx^2} \varphi f_0 + \left[k^2 - \frac{l(l+1)}{x^2} - cV(x) \right] \varphi f_0 = 0, \quad (3.1.4)$$

Čia $c = \frac{2M_r}{h^2}$. Įvertinus, kad f_0 – laisvasis sprendinys, gauname:

$$f_0 \frac{d^2 \varphi}{dx^2} + 2 \frac{df_0}{dx} \frac{d\varphi}{dx} - f_0 cV(x) \varphi = 0, \quad (3.1.5)$$

Dalelių sąveiką galima įvertinti per funkciją φ ir skaitant, jog φ priklauso nuo x , Šredingerio lygtį (3.1.5) užrašome potencialo vaizdavimo metodu:

$$\left(\frac{dV}{dx}\right)^2 \frac{d^2\phi}{dV^2} + \left[\frac{d^2V}{dx^2} + 2\frac{f_0'}{f_0} \frac{dV}{dx}\right] \frac{d\phi}{dV} - cV\phi = 0, \quad (3.1.6)$$

Šią lygtį dalijame iš dėmens $\frac{d\phi}{dV}$:

$$\left(\frac{dV}{dx}\right)^2 \frac{\frac{d^2\phi}{dV^2}}{\frac{d\phi}{dV}} + \frac{d^2V}{dx^2} + 2\frac{f_0'}{f_0} \frac{dV}{dx} - cV \frac{\phi}{\frac{d\phi}{dV}} = 0, \quad (3.1.7)$$

Gautas reiškinys toliau dalijamas iš nario $\frac{dV}{dx}$:

$$\frac{\frac{d^2\phi}{dV^2}}{\frac{dV}{dx}} + 2\frac{f_0'}{f_0} = c \frac{V}{\frac{dV}{dx}} \frac{\phi}{\frac{d\phi}{dV}} - \left(\frac{dV}{dx}\right)^2 \frac{\frac{d^2\phi}{dV^2}}{\frac{d\phi}{dV}} = 0, \quad (3.1.8)$$

Gautą išraišką perrašome logaritminių išvestinių pavidalu:

$$\left(\ln \frac{dV}{dx}\right)'_x + \left(\ln f_0^2\right)'_x = \frac{cV}{(\ln \phi)'_x} - \left(\ln \frac{d\phi}{dV}\right)'_x, \quad (3.1.9)$$

Turimą lygtį pertvarkome:

$$\left[\ln \frac{d\phi}{dV} \frac{dV}{dx} f_0^2\right]'_x = c \frac{V}{(\ln \phi)'_x}, \quad (3.1.10)$$

Iš šios lygties galima išreikšti potencialą:

$$V = \frac{1}{c} [\ln \phi]'_x \cdot \left[\ln \frac{\partial \phi}{\partial x} f_0^2\right]'_x, \quad (3.1.11)$$

Suradus lygties išvestines ir gautą išraišką suprastinus iš ϕ_x , gaunama tokia potencialo forma:

$$V = \frac{1}{c} \cdot \frac{[\varphi'_x f_0^2]_x}{\varphi \cdot f_0^2}, \quad (3.1.12)$$

Analizuojant gautą lygtį matyti, kad potencialą galima išreikšti per funkciją φ . Atlikus nesudėtingus pertvarkymus ir suintegravus lygtį (3.1.12) gauname funkciją:

$$\varphi'_x \cdot f_0^2 = c \int V f_0^2 dx + A, \quad (3.1.13)$$

Išraišką padalijus iš $f_0^2(l, k, x)$ ir antrą kartą suintegravus gauname:

$$\varphi(l, k, x) = \int \frac{cdx}{f_0^2(l, k, x)} \int V f_0^2 dx + \int \frac{Adx}{f_0^2} + B, \quad (3.1.14)$$

Pasinaudojus kraštinėmis sąlygomis:

$$\begin{aligned} \lim_{x \rightarrow \infty} \varphi &= 1 \\ \lim_{x \rightarrow \infty} \varphi'_x &= 0 \end{aligned} \quad (3.1.15)$$

Iš abiejų integralinių lygčių gauname integravimo konstantas: $a=0$, $b=1$. Tada lygtį (3.1.14) galima perrašyti:

$$\varphi(l, k, x) = c \int_{\infty}^x \frac{dz}{f_0^2(l, k, x)} \int_{\infty}^z V(y) \varphi(l, k, y) f_0^2(l, k, y) dy + 1 \quad (3.1.16)$$

Profesorius A. J. Janavičius, naudodamasis Perey F. G. sukurtu modeliu, atliko branduolių ^{59}Fe , ^{90}Zr , ^{208}Pb neutronų sklaidos skaičiavimus, juos lygindamas su amerikiečių mokslininkų sukurta programa JIB [29, 66]. Daugeliu atveju gauti rezultatai beveik sutapo. Autorius pateikdamas šį metodą norėjo įrodyti, jog banginę funkciją galima sudaryti iš dviejų dalelių: viena priklauso nuo sąveikos potencialo, kita charakterizuoja dalelės laisvąjį judėjimą. Metodo taikymas leistų išspręsti uždavinius surištosioms būsenoms kvantinėje mechanikoje ir atvirkščiai, taikant ją sklaidos teorijoje. Gautas formules būtų galima taikyti tikslinant teorinius skaičiavimus ir juos lyginant su eksperimentiniais.

3.2 Pagrindinės pusiau reliatyvistinės lygties sprendinio ypatybės

Pusiau reliatyvistinį Hamiltonianą galima parašyti tokia forma:

$$\hat{H}_r = \frac{-\hat{p}^2}{8m^2c^2} + \frac{\hat{p}^2}{2m} - \frac{\hat{h}}{4m^2c^2} \left(\frac{d}{dr} V(r) \right) \frac{d}{dr} + V(r) + V_{sl}(r), \quad (3.2.1)$$

Pirmasis ir trečiasis Hamiltoniano narys – reliatyvistinės masės ir potencialo pataisos. Kitas narys:

$$V_{sl}(r) = -\kappa \frac{1}{r} \left(\frac{d}{dr} V(r) \right) (\hat{\sigma} \cdot \hat{l}), \quad (3.2.2)$$

Šis narys – reliatyvistinės prigimties orbitinis sukimosi potencialas. Pusiau reliatyvistinės lygties tikrinė funkcija $R_\alpha = U_\alpha$ gali būti gauta [16, 15] iš Hamiltoniano ir potencialo $V(r)$:

$$C_1 \hat{D} U_\alpha + C_2 r \frac{d}{dr} V \frac{d}{dr} \frac{u_\alpha}{r} + \frac{d^2}{dr^2} u_\alpha - \frac{l(l+1)}{r^2} u_\alpha + (C E_\alpha - C V - C V_{sl}) u_\alpha, \quad (3.2.3)$$

$$C = \frac{2m}{\hbar^2}, \quad (3.2.4)$$

$$C_1 = \left(\frac{\hbar}{2mc} \right)^2, \quad (3.2.5)$$

$$C_2 = \frac{1}{2mc^2}, \quad (3.2.6)$$

Kur \hat{D} - ketvirtos eilės diferencialinė lygtis:

$$\hat{D} U_\alpha = \frac{d^4}{dr^4} u_\alpha - \frac{2l_0}{r^2} \frac{d^2}{dr^2} u_\alpha + \frac{4l_0}{r^2} \frac{d}{dr} u_\alpha + \left[\frac{(l_0)^2 - 6l_0}{r^4} \right] u_\alpha, \quad (3.2.7)$$

$$l_0 = l(l+1), \quad (3.2.8)$$

Pertvarę (3.4.8) lygtį, kai $r \rightarrow 0$ ir įstatę (3.4.3) gausime keturis tarpusavyje nepriklausomus sprendinius:

$$u_{\alpha 0} \cong r^{l+1}, \quad (3.2.9)$$

$$F_{\alpha} \cong r^{-l}, \quad (3.2.10)$$

$$u_{\alpha 1} \cong r^{l+2}, \quad (3.2.11)$$

$$F_{\alpha 1} \cong r^{-l+2}, \quad (3.2.12)$$

Žinant, kad dideliuose atstumuose potencinė energija dingsta eksponentine forma $u_{\alpha} \cong e^{k_{\alpha} r}$:

$$k_{\alpha 1} = -k_{\alpha}, \quad (3.2.13)$$

$$k_{\alpha 2} = -k_{\alpha}, \quad (3.2.14)$$

$$k_{\alpha} = \frac{1}{\sqrt{2C_1}} \left(-1 + \sqrt{1 - 4C_1 C E_{\alpha}} \right)^{\frac{1}{2}}, \quad (3.2.15)$$

$$k_{\alpha 2} = ik_{\alpha m}, \quad (3.2.16)$$

$$k_{\alpha 4} = -ik_{\alpha m}, \quad (3.2.17)$$

$$k_{\alpha} = \frac{1}{\sqrt{2C_1}} \left(1 + \sqrt{1 - 4C_1 C E_{\alpha}} \right)^{\frac{1}{2}}, \quad (3.2.18)$$

Paprastai galima išreikšti $k_{\alpha} = \sqrt{-CE_{\alpha}}$. Todėl galima teigti, kad mažinant branduolio užimamą plotą pusiau reliatyvistinė banginė funkcija pranyksta greičiau nei Šredingerio banginė funkcija. Ją galima taikyti, tik nagrinėjant vienodas branduolio būsenas, nes jose ryšio energija būna labai didelė. Sprendimus galima užrašyti tokia forma:

$$u_{\alpha}(r) = r^{\beta} W(r) e^{-k_{\alpha} r}, \quad (3.2.19)$$

Kada reliatyvistinių pataisų vertės yra mažos, (3.2.19) lygties sprendiniai, kaip ir Šredingerio lygties sprendiniai, artėja į begalybę. Tačiau realiai lygtis turi du sprendinius $u_{\alpha 0}$ ir $u_{\alpha 1}$ su

skirtingomis savybėmis. Banginė funkcija $u_{\alpha 1}$ apibūdina surištasias būsenas, apribota dideliais atstumais ir mažomis ryšio energijos vertėmis. Autorius įvedė papildomą dydį $\rho = \frac{r}{F}$ ir

(3.2.3) lygtis įgauna tokią formą:

$$C_1 \hat{D}(\rho) U_{\alpha} + C_F C_{\rho} \frac{d}{d\rho} V \frac{d}{d\rho} \frac{u_{\alpha}}{\rho} + \frac{d^2}{d\rho^2} u_{\alpha} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} u_{\alpha} + CF^2(E_{\alpha} - V) u_{\alpha} = 0, \quad (3.2.20)$$

$$C_F = \frac{C_1}{F^2}, \quad (3.2.21)$$

$$C_2 = C_1 C, \quad (3.2.22)$$

Esant dideliame dydžiui F , pusiau reliatyvistinė lygtis mažina Šredingerio lygtį. Gauti praktiniai rezultatai parodė, kad norint apskaičiuoti branduolinės energijos lygius, būtina įvertinti galimai aukštą trikdžių įtaką. Šiame straipsnyje naudojama multiplikatyvinė trikdymų (perturbacijų) teorija [14, 12]. Vidutiniuose branduolio potencialo lygmenyse nukleonai nuo branduolio jėgos centro apriboti dideliu atstumu. Toks uždavinio sprendimo metodas gali būti naudojamas sprendžiant tiesinę funkciją.

3.3 Integralinė lygtis teigiamoms ir neigiamoms energijoms potencialiniu vaizdavimo metodu.

Naudojant potencialinio vaizdavimo metodą Šredingerio lygtis aprašomos integralinėmis lygtimis. Šiuo metodu banginė funkcija užrašoma kaip nesužadinto sprendinio rezultatas, priklausantis nuo sąveikos potencialo. Naudojant potencialinio vaizdavimo metodą, skaičiuojamos viendaleliame branduoliui teigiamos ir neigiamos energijos. Pirmiausiai lygtis sprendžiama teigiamoms energijoms. [17, 431] Po lygties (3.1.5) integravimo, įvertinus ribinės sąlygas, buvo gauta:

$$\varphi(l, k, r) = c \int \frac{1}{f_0^2} dr \int V f_0^2 \varphi dr + \int a \frac{1}{f_0^2} dr + b, \quad (3.3.1)$$

Šitokio pavidalo lygtį 1997 m. aprašė kinų mokslininkai C.K.Au, Chi-Keung Chow, Chong-Sun Chu. Įvertinus žinomą apibrėžimą Jost'o funkcijai:

$$f(l, k) = (2l + 1) \lim_{r \rightarrow 0} r^l f(l, k, r), \quad (3.3.2)$$

ir žinomas sklaidos matricos reikšmes galima aprašyti lygtimi:

$$S(l, k) = \frac{f(l, k)}{f(l, -k)} e^{i\pi l}, \quad (3.3.3)$$

Įvertinus Jost'o sprendinį:

$$f_0(l, k) = \frac{2^{l+1}}{\sqrt{\pi}} \Gamma\left(l + \frac{3}{2}\right) k^{-1} \exp\left(-i \frac{\pi}{2} l\right), \quad (3.3.4)$$

$$f_0(l, -k) = \frac{2^{l+1}}{\sqrt{\pi}} \Gamma\left(l + \frac{3}{2}\right) k^{-1} \exp\left(-i \frac{\pi}{2} l\right), \quad (3.3.5)$$

$$f(l, -k, r) = \varphi(l, -k, r) f_u(l, -k, r), \quad (3.3.6)$$

Ir sklaidos matricos išraiškas gauname:

$$S_l = \frac{\varphi(l, k, 0) f_0(l, k)}{\varphi(l, -k, 0) f_0(l, -k)} e^{i\pi l} \quad (3.3.7)$$

$$S_l = \frac{\varphi(l, k, 0)}{\varphi(l, -k, 0)}$$

Įvertinus (3.2.7) ir (3.2.5) formules, laisvąjį narį (3.2.4) buvo gauta tokia išraiška

$$S_l = \left[c \int_{\infty}^0 \frac{1}{f_u^2(l, k, x)} dx \int_{\infty}^x V \varphi(l, k, y) f_u^2(l, k, y) dy + 1 \right] \left[c \int_{\infty}^0 \frac{1}{f_u^2(l, -k, x)} dx \int_{\infty}^x V \varphi(l, -k, y) f_u^2(l, -k, y) dy + 1 \right]^{-1} \quad (3.3.8)$$

Šiuo atveju gautus sprendinius galima priskirti nesužadintoms būsenoms. Norėdami pereiti iš nesužadintos atomo būsenos į sužadintą turime (3.3.5) integralinę lygtį išspręsti nesužadintoms būsenoms. Autoriai siūlo naudotis laisvojo Jost'o, sprendiniais išreikštais per Hankel funkcijas.

$$f_0(l, k, x) = \left(\frac{\pi}{2} \right)^{\frac{1}{2}} \exp \left[-i \frac{\pi}{2} (l+1) \right] (kx)^{\frac{1}{2}} H_{l+\frac{1}{2}}^{2,1(kx)}, \quad (3.3.9)$$

$$f_0(l, -k, x) = \left(\frac{\pi}{2} \right)^{\frac{1}{2}} \exp \left[i \frac{\pi}{2} (l+1) \right] (kx)^{\frac{1}{2}} H_{l+\frac{1}{2}}^{1,1(kx)}, \quad (3.3.10)$$

Įvertinus lygtis (3.3.7), (3.3.2) ir (3.3.3) gauti rekursiniai santykiai matriciniams $S_{l,u}$ ir S_l elementams:

$$S_l = \left[c \int_{-\infty}^0 \frac{1}{f_u^2(l, k, x)} dx \int_{-\infty}^x V \varphi(l, k, y) f_u^2(l, k, y) dy + 1 \right] \left[c \int_{-\infty}^0 \frac{1}{f_u^2(l, -k, x)} dx \int_{-\infty}^x V \varphi(l, -k, y) f_u^2(l, -k, y) dy + 1 \right]^{-1} S_{l,u} \quad (3.3.11)$$

Lygtis (3.3.11) tinka sužadintoms ir nesužadintoms būsenoms. Prof. A. Janavičius ir A. Bakštys straipsnyje „Relativistic corrections the one-nucleon energy levels of ^{208}Pb “ akcentuoja: spendžiant tokio tipo lygtis būtina įvertinti reliatyvistines masės pataisas. Jie siūlo naudotis bandiniu diferencialiniu operatoriumi d

$$DF_l = \frac{d^4}{dy^4} F_l - \frac{2L_0}{y^2} \frac{d^2}{dy^2} F_l + \frac{L_0^2 - 6L_0}{y^4} F_l,$$

$$L_0 = L(L+1), \quad (3.3.12)$$

$$F_l(k, y) = \varphi(l, k, y) f_u(l, k, y).$$

Taip gauta sklaidos matricos pusiau reliatyvistinė išraiška.

$$S_l = \left[C_1 \int_{-\infty}^0 \frac{-1}{f_u^2(l, k, x)} dx \int_{-\infty}^x f_u(l, k, y) DF_l(k, y) dy + 1 \right] \left[C_1 \int_{-\infty}^0 \frac{-1}{f_u^2(l, -k, x)} dx \int_{-\infty}^x f(l, -k, y) DF_l(-k, y) dy + 1 \right]^{-1} S_{l,u} \quad (3.3.13)$$

Kur $C_1 = \left(\frac{\hbar}{2mc} \right)^2$ pusiau reliatyvistinė banginė funkcija.

Tikrinė funkcija gali būti išreikšta kaip nesužadintos bangos funkcijos $u_{au}(r)$ ir $\varphi_a(r)$, priklausančios nuo potencialo $V(r)$:

$$U_\alpha(r) = \varphi_\alpha u_{\alpha u}(r), \quad (3.3.14)$$

Laikome, kad nesužadinta dalelės būseną aprašoma:

$$\frac{d^2}{dr^2} u_{\alpha u}(r) - \frac{l(l+1)}{r^2} u_{\alpha u}(r) + c(E_{\alpha u} - V_0(r)) u_{\alpha u}(r) = 0, \quad (3.3.15)$$

Turimą lygtį galime spręsti:

$$\frac{d^2}{dr^2} U_\alpha - \frac{l(l+1)}{r^2} U_\alpha + c(E_{\alpha u} + \Delta E_\alpha - V_0(r) - V(r)) U_\alpha = 0, \quad (3.3.16)$$

Pakeitę lygties (3.3.14) išraišką į (3.3.16), įvertinę (3.3.15) lygtį, gausime Šredingerio lygtį surištoms sistemoms potencialiniu vaizdavimo metodu:

$$u_{\alpha u} \frac{d^2}{dr^2} \varphi_\alpha + 2 \left(\frac{d}{dr} u_{\alpha u} \right) \frac{d}{dr} \varphi_\alpha + c(\Delta E_\alpha - V(r)) u_{\alpha u} \varphi_\alpha = 0, \quad (3.3.17)$$

Padauginę turimą lygtį iš $u_{\alpha u}$ gausime

$$\frac{d}{dr} \left(u_{\alpha u}^2 \frac{d}{dr} \varphi_\alpha \right) = -c u_{\alpha u} (\Delta E_\alpha - V(r)) u_{\alpha u} \varphi_\alpha = 0, \quad (3.3.18)$$

Įvertinus kraštines sąlygas ir suintegravus lygtį turėsime:

$$\lim_{r \rightarrow 0} \varphi_\alpha = 1, \quad (3.3.19)$$

$$\varphi_\alpha = 1 - c \int_0^y \frac{1}{u_{\alpha u}^2} dy \int_0^y u_{\alpha u} (\Delta E_\alpha - V(z)) u_{\alpha u} \varphi_\alpha dz, \quad (3.3.20)$$

Surištoms sistemoms turime įvertinti tokią kraštines sąlygas:

$$\lim_{r \rightarrow 0} \varphi_\alpha(r) u_{\alpha u}(r) = 0, \quad (3.3.21)$$

$$\lim_{r \rightarrow \infty} \varphi_\alpha(r) = 0, \quad (3.3.22)$$

$$\lim_{r \rightarrow \infty} \varphi_{\alpha}(r) = 0, \quad (3.3.23)$$

Lengva patikrinti (patvirtinti), kad kraštinės sąlygos (3.3.21), (3.3.22), (3.3.23) patenkins (3.3.19) lygtį, jeigu:

$$\Delta E_{\alpha} = \frac{\int_0^{\infty} u_{\alpha u} V(r) u_{\alpha u} \varphi_{\alpha} dr}{\int_0^{\infty} u_{\alpha u} u_{\alpha u} \varphi_{\alpha} dr} \quad (3.3.24)$$

$$E_{\alpha} = E_{\alpha u} + \Delta E_{\alpha}$$

Sprendžiant iteracijų metodu (3.3.20) ir (3.3.24) lygtis, gaunamos tikrinės funkcijos ir reikšmės $\varphi_{\alpha} = 1$, $\Delta E_{\alpha} = 0$. Profesoriumi skaičiuojant branduolių ^{59}Fe , ^{90}Zr , ^{208}Pb sklaidą, plačiame energijų ruože gautos reikšmės beveik sutapo su rezultatais, gautais su JIB programa. Jie parodė, kad sužadintoje būsenoje tikrinę funkciją galima gauti dauginant iš nesužadintos funkcijos, kuri priklauso nuo potencialo.

3.4 Reliatyvistinės centrinės branduolio dalies protonų ir neutronų lygmenų pataisos.

Siekiant gauti tikslesnius branduolio energijos lygmenis apskaičiuota viendalelio nukleono reliatyvistinės masės ir potencialo pataisos. Viendalelio branduolio lygtis – tai supaprastinta pusiau reliatyvistinė lygtis, kuri proporcinga Gryno funkcijai. (13, 2195). Ją galima išreikšti nesužadintomis banginėmis funkcijomis ir nefizikiniais Šredingerio lygties sprendiniais. Toks sprendimo būdas branduolių viduriniams lygmenims yra pakankamai tikslus. Masės pataisos sutapatina su sužadintomis energijų būsenomis ir jos padidina tarp branduolių egzistuojančią ryšio energiją. Potencialo pataisų vertės yra labai mažos ir didelės įtakos skaičiavimams neturi. Keletui lengvųjų branduolių ši pataisa kompensuoja gaunamas neigiamas masės pataisas.

Pradžioje visi branduoliai laikomi nereliatyvistinėmis sistemomis. Būtina atkreipti dėmesį, kad branduolinė jėga turi stūmos jėgą ir didelę sukinią orbitą [19, 278]. Jeigu šalia vienas kito atome būna per daug branduolių, atsiranda stūmos jėga. Tokias problemas sunku arba neįmanoma išspręsti nesinaudojant Šredingerio arba Harti-Fokso lygtimis [30, 343]. Buvo apskaičiuotos reliatyvistinės masės, kinetinės ir potencinės energijų pataisos:

$$\delta \vec{M} = \delta \vec{T} + \delta \hat{V}, \quad (3.4.1)$$

$$\delta \hat{T} = \sum \left[\sqrt{(\hat{p}_i)^2 + m^2} - m - \frac{(\hat{p}_i)^2}{2m} \right], \quad (3.4.2)$$

Pavyzdžiui, buvo apskaičiuota, kad 4 nukleonų sistemos ryšio energija apytiksliai lygi -0,6 MeV. Vandenilio izotopui deuteriui 2_1H ryšio energiją -0,0727 MeV, reliatyvistinė masės pataisą -0,0212 MeV, potencialinė energijos pataisą +0,1400 MeV. Šiam elementui reliatyvistinės masės ir potencialinės energijos pataisų vertės kompensuoja vienas kitą.

Nukleonų masės pataisos viduriniajame branduolių potenciale yra labai svarbios ir jos negali kompensuoti teigiamos potencialinės energijos sąskaita. [16, 4]. Šias pataisas būtina įvertinti. Viendaleliam branduoliui tiesinę funkciją ir energijas galime gauti sprendžiant Harti-Fokso lygtį. Tokiu atveju reliatyvistinė masės pataisa priklausomai nuo branduolio būsenos gali pasiekti -1,12 MeV vertę. Šios pataisos apskaičiuojamos naudojantis bangine teorija.

3.5 Pusiau reliatyvistinė integralinė-diferencialinė lygtis.

Jeigu nagrinėjame reliatyvistines masės ir potencialo pataisas kaip trikdžius, pusiau reliatyvistinę lygtį galima rašyti:

$$\frac{d^2}{dr^2} u_\alpha - \frac{l(l+1)}{r^2} u_\alpha + c[E_\alpha + \hat{V}_D - V_1(r)] u_\alpha = 0, \quad (3.5.1)$$

Įvedamas diferencialinis operatorius:

$$\hat{V}_D = C_1 \frac{d}{d} V(r) \frac{d}{dr} \frac{1}{r} + \frac{C_1}{C} \hat{D}(r) + V_1(r) - V(r) + V_{sl}(r)$$

$$\hat{V}_D = V(r) + V_{sl} \quad (3.5.2)$$

Kur $V(r)$ – vidutinis branduolio potencialas. Radialinę Šredingerio lygties banginę funkciją galima užrašyti:

$$V_1(r) = \frac{m\omega^2 r^2}{2} \quad (3.5.3)$$

Lygties (3.5.2) ketvirtasis ir penktasis narys – reliatyvistiniai masės ir potencialo pataisų operatoriai:

$$u_{nl} = e^{-\frac{1}{2}\rho} \rho^{\frac{1}{2}(l+1)} \sum_{k=0}^{n-1} a_k \rho^k, \quad (3.5.4)$$

$$\rho = \frac{m\omega r^2}{\hbar}$$

$$n = 1, 2, 3, \dots$$

$$a_{k+1} = \frac{k - n + 1}{(k + 1) \left(k + l + \frac{3}{2} \right)} a_k, \quad (3.5.5)$$

Priklausomai nuo bangos būsenos, iš lygties sprendinių $U(r)$ ir $F(r)$ galima gauti šių nepriklausomų sprendinių Vronksianus:

$$W_0 = (2l + 1) \left(\frac{m\omega}{\hbar} \right)^{\frac{1}{2}}, \quad (3.5.6)$$

Trikdžių (perturbacijų) teorijos [11, 12] požiūriu, tikrinė funkcija (3.5.1) turi būti išreikšta dauginant funkciją u_{nl} potencialo $V_l(r)$, kuris priklauso nuo potencialo operatoriaus $\hat{V}_D(r)$:

$$u_\alpha = \varphi_{2,nlj} U_{nl} \quad (3.5.7)$$

Keičiant lygtį (3.5.8) į (3.5.1) gauname lygtį potencialiniu vaizdavimo metodu:

$$u_{nl} \frac{d^2}{dr^2} \varphi_2 + 2 \left(\frac{d}{dr} u_{nl} \right) - C \hat{V}_{nl} \varphi_2 = 0 \quad (3.5.8)$$

$$\hat{V}_\varphi(r) = \hat{V}_D(r) - \Delta E_{nlj}$$

$$E_\alpha = \hat{V}_{nl} - \Delta E_{nlj}$$

Naudodami Lagrandžo metodą [8, 24] tokio tipo lygtis buvo supaprastinta iki integralinės lygties:

$$\varphi_2 u_{nl} = u_{nl} \beta - \frac{f_{nl}}{W_0} \int_0^r u_{nl} C \hat{V}_\sigma \varphi_2 u_{nl} dx - \frac{u_{nl}}{W_0} \int_r^\infty f_{nl} C \hat{V}_\sigma \varphi_2 u_{nl} dx, \quad (3.5.10)$$

$$\beta = 1 + \frac{1}{W_0} \int C \hat{V}_\sigma \varphi_2 u_{nl} dx, \quad (3.5.11)$$

Šią lygtį galima perrašyti:

$$\varphi_2(r) u_{nl}(r) = \beta u_{nl}(r) + \int_0^r G(r > r_1, r < r_1) C \hat{V}_\sigma \varphi_2 u_{nl} dx, \quad (3.5.12)$$

kur šios lygties branduolys – Gryno funkcija [6, 661]:

$$G(r > r_1, r < r_1) = -\frac{1}{W_0} f_{nl}(r > r_1) u_{nl}(r < r_1)$$

Įprastinis $\varphi_2 u_{nl}$ sprendinys, surištom būsenoms ir įvertinus kraštines sąlygas (3.5.10), turi mažėti nuo nulio iki begalybės:

$$\Delta E_{nlj} = \frac{\int_0^\infty u_{nl} \hat{V}_D \varphi_2 u_{nl} dx}{\int_0^\infty u_{nl} \varphi_{2,nlj} u_{nl} dx} \quad (3.5.13)$$

(3.5.10) lygtį galime perrašyti paprastesne forma:

$$\varphi_2 U_{nl} = U_{nl} + \frac{U_{nl}}{W_0} \int_0^r F_{nl} C \hat{V}_\sigma \varphi_2 U_{nl} dr_1 - \frac{F_{nl}}{W_0} \int_0^r U C V_\sigma \varphi_2 U_{nl} dr_1 \quad (3.5.14)$$

Integralinės lygtys (3.5.14) ir (3.5.13) gali būti sprendžiamos iteracijų metodu, tuomet iš (3.5.13) randamas dydis ΔE_{nlj} , o dydis $\varphi_2 U_{nlj}$ - (3.5.14). Kontroliniuose ^{208}Pb neutronų energijos skaičiavimuose būsenoms buvo gautos tokios vertės -39,85 MeV, -29,43 MeV, -15,27 MeV. Atliktuose skaičiavimuose buvo gauti tokie rezultatai: -39,9 MeV, -29,5 MeV, -15,3 MeV. Galima atkreipti dėmesį, jog rezultatai panašūs, tačiau skaičiavimai nėra tikslūs. Tikslius skaičiavimus galima gauti sprendžiant integralines lygtis. Viendalelio branduolio energetiniai lygmenys E_{nlj} , reliatyvistinės masės E_m ir potencialo E_V pataisos srityje $15 \ll A \ll 209$ buvo apskaičiuoti naudojant sferiškai simetrišką Saksono-Vudso potencialą:

$$V(r) = -V^{n,p} \left[1 + \exp[\alpha^{n,p}(r - R)] \right]^{-1}, \quad (3.5.15)$$

sukinio orbitos potencialą su parametrais [26, 344] $\alpha^{n,p} = 1.5873 \text{ fm}^{-1}$, $R = 1.24A^{\frac{1}{3}} \text{ fm}$ ir

$$V^{n,p} = V_m \left(1 \pm \gamma \frac{N - Z}{A} \right), \quad (3.5.16)$$

$$\gamma = 0.63$$

$$V_m = 53.3 \text{ MeV}$$

$$\kappa = 0.263 \left(1 + 2 \frac{N - Z}{A} \right) \text{ fm}^2$$

Kulono potencialą galima užrašyti įprastine forma:

$$V_c(r) = \frac{(Z - 1)e^2}{4\pi\epsilon_0 r} P$$

$$P = \frac{3}{2} \frac{r}{R} - \frac{1}{2} \left(\frac{r}{R} \right)^2, \quad r \leq R$$

$$P = 1, \quad r > R$$

Lygtis (3.5.14) buvo išspręsta potencialiniu vaizdavimo metodu iš lygties eliminavus diferencialinį operatorių $D(r)$. Reliatyvistinės masės E_m ir potencialo E_V pataisos apskaičiuotos remiantis bangine teorija. Gauti rezultatai pakankamai tiksliai sutapo su V. A. Chepurnovo skaičiavimais [4, 995]. Artėjant į begalybę gautų banginių funkcijų tikimybės tankis yra apytiksliai lygus 10^{-6} . Šiuo atveju nebuvo įskaityti svyravimai. Reliatyvistinės masės E_m pataisos priklauso nuo pagrindinio ir orbitinio kvantinio skaičiaus ir nepriklauso nuo sukimosi orbitos. Šio dydžio skaičiavimai pateikti prieduose (I ir II lentelės).

Reliatyvistinės masės pataisos priklauso nuo pagrindinio ir orbitinio kvantinio skaičiaus esant pastoviajai sąveikai. Šiuo atveju reliatyvistinės masės E_m pataisos neutronams svyruoja nuo -0,2127 MeV, deuterio 2_1H būsenai $1s_{1/2}$ iki -0,9515 MeV. Protonams šis svyravimas gali kisti nuo -0.2268 MeV, geležies izotopui jam esant būsenoje $2s_{1/2}$ iki -1.118 MeV, vario izotopui ${}^{59}Cu$ būsenoje $2p_{3/2}$. Reliatyvistinės potencialo pataisos gali būti teigiamos.

Neutronuose jos gali kisti nuo -0.0105 MeV (^{207}Pb) iki $0,1400 \text{ MeV}$ () su pradinėmis reikšmėmis $\alpha = 3.75 \text{ fm}^{-1}$, $R = 2.4 \text{ fm}$, $V^n = 26.6 \text{ MeV}$. Parametrai E_m , $(E_m)^D$, $(E_V)^D$ buvo gauti sprendžiant integralinę-diferencialinę lygtį (3.5.14) kartu su potencialo operatoriumi:

$$\hat{V}_D = C_1 \frac{d}{d} V(r) \frac{d}{dr} \frac{1}{r} + \frac{C_1}{C} \hat{D}(r) + V_1(r) - V(r) + V_{sl}(r), \quad (3.5.17)$$

Reliatyvistinės potencialo pataisos yra labai mažos ir jos apytiksliai lygios $0,05 \text{ MeV}$. Galima ginčytis apie galimybę apskaičiuoti energijos būsenas viendaleliui branduoliui neįvertinus relatyvistines masės pataisų. Norint gauti tikslias reikšmes įvairiems lygmenims, reikia išspręsti integralinę – diferencialinę lygtį:

$$\varphi_2 U_{nl} = U_{nl} + \frac{U_{nl}}{W_0} \int_0^r F_{nl} C \hat{V}_\sigma \varphi_2 U_{nl} dr_1 - \frac{F_{nl}}{W_0} \int_0^r U C V_\sigma \varphi_2 U_{nl} dr_1 \quad (3.5.18)$$

įvertinant potencialo operatorių (3.5.2). Atliekant teorinius skaičiavimus ir po to juos lyginant su eksperimentiniais, gauti rezultatai beveik sutapo. Galima teigti, jog relatyvistinės masės pataisos gerina rezultatus. Šios pataisos labai padidina sunkiųjų branduolių (^{209}Pb , ^{209}Bi , ^{209}Po) ryšio energiją. [9, 33] Tai didina tikimybę, kad šie nestabilūs branduoliai yra aukšto grynumo. Daugeliu atveju gautos $(E_m)^D$, $(E_V)^D$ vertės sutampa su E_m , E_V reikšmėmis. Žinoma [27, 55], jog surištosios būsenos ir tampriosios sklaidos fazės pokyčiai gali būti aprašyti ta pačia potencialo funkcija. Tokiu būdu galima daryti išvadą, jog relatyvistinės masės pataisos turi būti įvertintos modelių skaičiavimuose. Pasiūlytas pusiau relatyvistinės lygties sprendimo metodas geriau apskaičiuoja modelio būsenas ir gali būti naudingas aiškinant branduolių, turinčių daug neutronų ir didelį skersmenį savybes. Reliatyvistinės masės pataisos neutronų būsenoms labai padidina neutronų stūmos energiją išoriniuose branduolio sluoksniuose. Egzistuoja tikimybė, kad gali egzistuoti branduoliai su per dideliu neutronų skaičiumi.

3.6 Sunkiųjų branduolių išorinio sluoksnio stabilumas pusiau relatyvistiniame modelyje.

Prof. A. Janavičiaus straipsnyje “Shell stability of heaviest atomic nuclei in the semi-relativistic model“ buvo apskaičiuoti vieno nukleono energetiniai lygmenys. Skaičiuojant lygmenys įvertinti relatyvistinės pataisos masei ir potencialui. Atlikus skaičiavimus buvo

atrasti galimi nauji, ypač sunkūs ir stabilūs, ${}_{114}^{298}X$, ${}_{114}^{328}X$, ${}_{120}^{334}X$ ir ${}_{126}^{340}X$ branduoliai. Uždariems protonų-neutronų $Z=114$, $N=184$, $Z = 114$, $N = 214$, $Z = 126$, $N = 214$ sluoksniams buvo rasti magiškieji skaičiai. Du elementai, kurių $N = 214$ turi dvigubą magiškąjį protonų ir neutronų skaičių. Pataisas masei buvo sutapatintos su pačių protonų ir neutronų masėmis, todėl skaičiuojant branduolių švino energijų būsenas privalėta į jas atsižvelgti.

Branduolyje, tarp protonų, ypač ryškėja Kuloninės stūmos jėgos. Dėl šios priežasties branduoliai, kurių $Z > 104$ yra stabilūs. Jeigu ši sąlyga netenkinama, šie elementai tuoj pat skyla į kitus elementus. Tik kvantiniai branduolio būsenų efektai leidžia ypač sunkiems elementams ($Z \geq 110$) egzistuoti stabilesnėje būsenoje. Norint įvertinti tokių labai sunkių branduolių stabilumą, žinant, jog jie yra labai nestabilūs, būtini tikslūs matematiniai skaičiavimo metodai. [24, 355] Kitos energijos rūšys išoriniuose sunkių branduolių sluoksniuose yra nežymios. Jas galima apskaičiuoti Saksono-Vudso potencialu, jeigu skaičiuotume viendaleliam branduoliui. Naudojant šį metodą būtina įvertinti reliatyvistinės masės pataisas. Todėl reikia spręsti pusiau reliatyvistinę diferencialinę lygtį. Šis metodas leidžia spręsti pusiau reliatyvistinę lygtį, kur reliatyvistinės masės ir potencialo pataisas būtina įvertinti. Pataisas galima sutapatinti su sužadintomis branduolių būsenomis. Jos didina sunkiųjų branduolių, esančių išoriniuose sluoksniuose, nukleonų ryšio energiją. Šis faktorius gali turėti lemiamos įtakos tokių elementų stabilumui. Potencialo pataisos yra teigiamos ir labai mažos, išskyrus keletui lengvųjų branduolių. Jos nedaro didelės įtakos stabilumui. Sunkiojo branduolio ${}_{114}^{285}X$ vieno nukleono energetinis lygmuo $E_{n\ell}$ su reliatyvistinėmis masės E_m ir potencialo E_v pataisomis, taip pat menamų branduolių ${}_{126}^{310}X$, ${}_{114}^{298}X$, ${}_{114}^{328}X$, ${}_{120}^{334}X$, ${}_{126}^{340}X$ skaičiavimai buvo atliekami su sferiškai simetrišku Saksono –Vudso potencialu [5, 5]:

$$V(r) = -V^{n,p} \left\{ 1 + \exp[\alpha^{n,p}(r - R)] \right\}^{-1}, \quad (3.6.1)$$

sukimosi orbitos potencialas:

$$V_{sl}(r) = -\kappa \frac{1}{r} \frac{d}{dr} V(r) (\vec{\sigma} \cdot \vec{l}) \quad (3.6.2)$$

Sprendžianti lygtis buvo panaudoti šie parametrai:

$$\alpha^{n.p} = 1.5873 fm^{-1},$$

$$R = 1.24 A^{\frac{1}{3}},$$

$$V^{n.p} = V_m \left(1 \mp \gamma \frac{N-Z}{A} \right), \quad (3.6.3)$$

$$\gamma = 0.63, \quad V_m = 53.3 MeV,$$

$$\kappa = 0.263 \left(1 + 2 \frac{N-Z}{A} \right) fm^2 \quad (3.6.4)$$

Šie parametrai buvo parinkti viendalelio nukleono lygmenims, kurių sritys kinta $15 \leq A \leq 209$. Kuloninis potencialas aprašytas tokia forma:

$$V_c(r) = \frac{(Z-1)e^2}{4\pi\epsilon_0 r} P,$$

$$P = \frac{3r}{2R} - \frac{1}{2} \left(\frac{r}{R} \right)^3, \quad (3.6.5)$$

$$r \leq R, \quad \text{jeigu } P = 1, \quad \text{tai } r > R$$

Jeigu vertiname reliatyvistinės masės ir potencialo pataisas bangine funkcija, tai pusiau reliatyvistinė lygtis gali būti aprašyta:

$$\frac{d^2}{dr^2} u_\alpha - \frac{l(l+1)}{r^2} u_\alpha + C[E_\alpha - V_D - V_1(r)] u_\alpha = 0, \quad (3.6.6)$$

Įvedamas ketvirtos eilės diferencialinis operatorius $D(r)$:

$$V_D = V(r) + V_{sl}(r) - V_1(r) + \frac{C_1}{C} D(r) + C_1 r \left(\frac{d}{dr} V(r) \right) \frac{d}{dr} \frac{1}{r}, \quad (3.6.7)$$

$$C = \frac{2m}{\hbar^2}, \quad C_1 = \left(\frac{\hbar}{2mc} \right)^2,$$

$$D(r) = \frac{d^4}{dr^4} - \frac{2l_0}{r^2} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{4l_0}{r^3} \frac{d}{dr} + \frac{(l_0)^2 - 6l_0}{r^4} \quad (3.6.8)$$

$$\text{kur } l_0 = l(l+1)$$

Du paskutiniai (3.6.7) lygties dėmenys apibūdina nukleonų reliatyvistinės masės ir potencialinės energijos pataisai. Čia $V_l(r)$ – idealios būsenos operatorius:

$$V_l(r) = \frac{m\omega^2 r^2}{2} \quad (3.6.9)$$

iš vidutinės branduolio srities. Radialinė banginė funkcija:

$$U_{nl} = e^{-0.5\rho} \rho^{0.5(l+1)} \sum_{k=0}^{n-1} a_k \rho^k, \quad (3.6.10)$$

$$\rho = \frac{m\omega r^2}{\hbar}, \quad n = 1, 2, 3,$$

$$a_{k+1} = \frac{k - 0.5(\varepsilon_{nl} - l - 1.5)}{(k+1)(k+l+1.5)} a_k, \quad (3.6.11)$$

$$a_0 = 1$$

Gaunami tiesiškai nepriklausomi idealaus potencialo sprendiniai:

$$u_{nl} = e^{-0.5\rho} \rho^{0.5(l+1)} \omega(\rho),$$

$$\omega = \sum_{k=0}^{\infty} b_k \rho^k, \quad (3.6.12)$$

$$b_{k+1} = \frac{k - 0.5(\varepsilon_{nl} - l - 1.5)}{(k+1)(k+l+1.5)} b_k, \quad (3.6.13)$$

$$b_0 = 1$$

Šiuo atveju būtina įvesti pradines reikšmes:

$$\begin{aligned} E_{nl} &= \varepsilon_{nl} \hbar \omega, \\ \varepsilon_{nl} &= 2n + l - 0.5 \end{aligned} \quad (3.6.14)$$

ir Vronskianą:

$$W_0 = (2l + 1) \left(\frac{m\omega}{\hbar} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (3.6.15)$$

Trikdymų (perturbacijų) teorijoje sužadintoji funkcija turi būti išreikšta dauginant funkciją u_{nl} , kad gautume idealų potencialą $V_I(r)$, kuris priklauso nuo potencialo operatoriaus $V_D(r)$.

$$u_a = \varphi_{2,nlj} u_{nl} \quad (3.6.16)$$

Įstačius (3.6.16) lygtį į (3.6.6) gaunama lygtis pagal potencialinį vaizdavimo metodą:

$$u_{nl} \frac{d^2}{dr^2} \varphi_{2,2} + 2 \left(\frac{d}{dr} \varphi_{2,2} \right) \left(\frac{d}{dr} u_{nl} \right) - CV_{\delta} u_{nl} \varphi_{2,2} = 0 \quad (3.6.17)$$

$$V_{\delta} = V_D(r) - \Delta E_{nlj},$$

$$E_a = E_{nl} + \Delta E_{nlj} \quad (3.6.18)$$

Naudojant Lagrandžo keitimo metodą gautos integralinės lygtys:

$$\varphi_{2,2} u_{nl} = u_{nl} + \frac{u_{nl}}{W_0} \int_0^r F_{nl} CV_{\delta} \varphi_{2,2} u_{nl} dr_1 - \frac{F_{nl}}{W_0} \int_0^r F_{nl} CV_{\delta} \varphi_{2,2} u_{nl} dr_1 \quad (3.6.19)$$

$$\Delta E_{nlj} = \frac{\int_0^{\infty} F_{nl} V_D \varphi_{2,2} u_{nl} dr_1}{\int_0^{\infty} F_{nl} \varphi_{2,2} u_{nl} dr_1} \quad (3.6.20)$$

Lygtis (3.6.19) buvo išspręsta iteracijų metodu. Gauta lygtį galima spręsti potencialiniu vaizdavimo metodu. Tačiau reikia pasirinkti nesužadintą banginę funkciją, nes ji artima sužadintajai $\varphi_{2,2} u_{nl}$. Tai leidžia gauti tikslesnius rezultatus negu sprendžiant iteracijų metodu.

Pirmuosiuose apskaičiuotuose branduolio ${}_{114}^{292}X$ protonų ir neutronų sluoksniuose, kurio turimi energijos lygmenys protonų būsenose $3p_{3/2}$, $2f_{5/2}$, $1i_{13/2}$ ($Z = 114$ – pilnai užpildyto sluoksnio protonų skaičius) lygus -1.409 MeV, -2.103 MeV, -4,417 MeV. Neutronų būsenoms $4s_{1/2}$, $3d_{3/2}$, $2g_{7/2}$ ($N=178$ – pilnai užpildyto sluoksnio neutronų skaičius) gautos energijos -7.326MeV, -7,783MeV, -9.049 MeV. Izotopo ${}_{114}^{285}X$, kurio gyvavimo pusperiodis $T_a=800 \mu s$,

protonų būsenos $3p_{3/2}$, $2f_{5/2}$, $1i_{13/2}$ ($Z=114$) buvo gautos energijų vertės -0.675 MeV, -1.464 MeV, $-3,711$ MeV. To paties izotopo ($N=178$) neutronų būsenose $4s_{1/2}$, $3d_{3/2}$, $2g_{7/2}$, energetinės vertės -8.126 MeV, -8.244 MeV, -9.142 MeV. elementui protonų būsenoms $3p_{3/2}$, $2f_{5/2}$, $1i_{13/2}$ ($Z=114$) gauta vertė $-2,816$ MeV, $-3,581$ MeV ir $-5,939$ MeV ir neutronams būsenose $1k_{17/2}$, $2h_{11/2}$, $4s_{1/2}$ gauti rezultatai $-4,436$ MeV, $-5,715$ MeV, $-7,177$ MeV. Tyrinėdami elemento gautas energijos vertes, galima manyti, jog tai pats stabiliausias izotopas, koks turi būti [11, 45]. Apžvelgiant viendalelio branduolio uždary sluoksnių energiją ir iš būsenos $1i_{13/2}$ pašalinus du protonus energija sumažėja iki $-6,122$ MeV. Šis skaičius apytiksliai lygūs α skilimo energija $Q = 2,692$ MeV. Palyginimui branduolio ^{239}Pu α skilimo energija $Q = 5,25$ MeV. Galima atkreipti dėmesį, jog branduolyje dėl gautų energijos verčių β skilimas negalimas. Tai rodo, kad branduolys yra daug stabilesnis negu ^{239}Pu [28, 2]. Autorius šias energijas skaičiavo vienai dalelei ir gautas rezultatas yra apytikslis. Autorius savo skurtą energijų skaičiavimo metodą pritaikė sunkiesiems branduoliams. Jis gavo α skilimo energijas $Q_1=8,384$ MeV, $Q_2=9,428$ MeV. Mokslininkas eksperimentiškai apskaičiavo šiems branduoliams energijas - $Q_1=9,85$ MeV, $Q_2=91,18$ MeV [24, 236]. Atlikus skaičiavimus atrasta, jog elementas yra stabilesnis. Jis turėjo visiškai užpildytą sluoksnį $3p_{1/2}$ ($Z=126$), gauta $-3,227$ MeV energija. Šiuo atveju reliatyvistinės pataisos masei būsenose $3p_{1/2}$ - $-0,7973$ MeV. Protonams ir neutronams neigiamos masės pataisos kinta nuo $-0,4$ MeV iki $-0,8$ MeV. Jos didelę reikšmę turi branduolio stabilumui. Sunkiesiems branduoliams pataisų vertės yra teigiamos ir neviršija $0,04$ MeV. Elementas būsenose $1k_{17/2}$ ir $4s_{1/2}$ išoriniame sluoksnyje turi 214 ir 184 neutronus. Buvo apskaičiuotas jo energetinės vertės - $-0,2303$ MeV, $-3,328$ MeV, $-7,628$ MeV, $-10,05$ MeV. Galima atkreipti dėmesį, jog skirtingų izotopų energijos yra artimos, tačiau protonų energija šiose būsenose žymiai skiriasi. Šiuo atveju magiškas protonų skaičius surištas su magiškuoju neutronų skaičiumi. (priedas 3 ir 4).

3.7 Viendalelių būsenų energijų skaičiavimas švinui.

Esant visiškai užpildytiems branduolio protoniniams arba neutroniniams sluoksniams, nukleonai yra užėmę visas tą sluoksnį sudarančias kvantines būsenas, tai branduolys tampa ypač stabilus. Eksperimentai parodė: kai neutronų arba protonų skaičius tampa lygus vienam iš skaičių (2, 8, 20, 28, 50, 82, 126), maždaug du kartus padidėja nukleono atskyrimo darbas, o branduolio ryšio energija išauga maždaug 1% [25, 83].

Švinas buvo žinomas VI – II tūkstantmetyje per. Kr. Jo pavadinimas kildinamas iš lotyniško žodžio *plumbum*, kuris reiškia garso „plomb“ mėgdžiojimą. [17, 264]. Tai melsvai pilkos spalvos metalas. Šviežiai atpjautas blizga, tačiau greitai apsitraukia oksido plėvele ir

tampa matiniu. Minkštas, plastiškas, lengvai kalamas, liejamas, valcuojamas. Slegiamas minkštėja, darosi takus. Tai sunkusis metalas ($\rho = 11,34 \text{ g/cm}^3$), $t_{\text{lyd}} = 327 \text{ }^\circ\text{C}$. [6, 206]. Švinas – priešpaskutinis stabilus, IV grupės periodinės sistemos elementas. Iš sunkiųjų elementų – žinomiausių ir dažniausiai vartojamų. Labai nedaug daiktų neturi švino arba komponentų į kuriuos įeina švinas. Švino izotopai padeda nustatyti uolienu, mineralų amžių. Radioaktyviojo skilimo metu urano ir torio izotopai virsta stabiliaisiais švino izotopais: iš ^{235}U ir ^{238}U izotopų susidaro ^{207}Pb ir ^{206}Pb izotopai. Nustačius uolienose esančių radioaktyviųjų elementų ir jų skilimo produktų (švino izotopų) kiekį, galima sužinoti uolienos ar mineralo susidarymo amžių.

Čia $n_l j$ – viendalelės būsenos, $E_{n_l j}$ – viendalelių būsenų energija, E_m – reliatyvistinės energijos pataisos masei, E_v – reliatyvistinės pataisos potencinei energijai. Kodėl energijos skaičiuojamos surišioms būsenoms? Nes nukleonai dėl ryšio energijos turi sumažėjusią masę, tai E_k irgi sumažėja, bet jos sumažėjimas (padidėjimas) lygus sumai dviejų energijų $\langle E_k + E_p \rangle$ - vidutinė pilnutinė energija. Kadangi vidutinė energija $\langle E \rangle$ dalelė tampa surišta. Sumažėjimas pastebimas tuomet, kai $\langle E_k \rangle$ yra didelė. Ji pasireiškia tik išoriniuose sluoksniuose. Jeigu E_k tiksliai nesutampa su teorija, todėl, kad būtina įskaityti reliatyvistines pataisas. Patikslinti Saksono-Vudso potencialo parametrus. Paviršiuje turi tendenciją mažėti, tačiau branduolyje nedaug, nes krūvis pasiskirstęs tolygiai [11, 55].

3 lentelė

Švino Pb_{82}^{208} branduolyje esančių protonų energijos

n,l,j	$E_{\text{ekspermetinė}}$ MeV	$E_{n,l,j}$ MeV	E_m MeV	E_v MeV	$\langle E_p \rangle$ MeV
3 $p_{3/2}$	-0,62	-0,75258	-0,14248	0,025841	23,10
2 $f_{5/2}$	-0,921	-0,36848	0,29398	0,341164	-22,58
2 $f_{7/2}$	-2,86	-0,36606	-0,29398	0,035016	-25,87
1 $h_{9/2}$	-3,76	-3,6927	-0,2658	0,039169	-25,93
3 $s_{1/2}$	-8,76	-8,7930	-0,29318	0,023764	-27,55
2 $d_{3/2}$	-9,32	-8,73656	-0,17730	0,028290	-27,61
1 $n_{11/2}$	-10,31	-9,19271	-0,26586	0,039169	-31,45
2 $d_{3/2}$	-10,64	-8,73656	-0,17730	0,028291	-27,61
1 $g_{7/2}$	-12,45	-11,7507	-0,18031	0,03503	-30,63

Apskaičiuotuose švino branduolio protonų ir neutronų sluoksniuose, kurio turimi energijos lygmenys protonų būsenose $3p_{3/2}$, $2f_{5/2}$, $2i_{7/2}$ gautos energijų vertės yra lygios -0,75258 MeV, -036848 MeV, -036606 MeV. Atlikus eksperimentinius skaičiavimus šioms būsenoms buvo gautos tokios energijų vertės -0,62 MeV, -0,921 MeV, -2,86 MeV. Įvertinus reliatyvistines masės pataisas, būsenoje 3 $p_{3/2}$ energijų vertės buvo panašių verčių. Protonų būsenos $1h_{9/2}$, $3s_{1/2}$, $2d_{3/2}$ buvo gautos energijų vertės -3,6927 MeV, -8,27930 MeV, -8,73656 MeV. Šiose būsenose eksperimentiškai buvo gauti rezultatai - 3,76 MeV, -8.76 MeV, -9,32

MeV. Lyginant šių būsenų teorinius rezultatus su eksperimentiniais galima atkreipti, jog rezultatai beveik sutampa arba teoriniai rezultatai pagerina eksperimentinius. Protonų būsenos $1n_{11/2}$, $2d_{3/2}$, $1g_{7/2}$ buvo gautos energijų vertės -9,19271 MeV, -8,73656 MeV, -11,7507 MeV, eksperimentinės švino energijų vertės būsenose $1n_{11/2}$, $2d_{3/2}$, $1g_{7/2}$ buvo gautos -10,31 MeV, -10,64 MeV, -12,45 MeV. Lyginant rezultatus geriausios vertės gautos būsenose $1n_{11/2}$ ir $1g_{7/2}$.

4 lentelė

Švino Pb_{82}^{208} branduolyje esančių neutronų energijos

n,l,j	E_{ekspermetinė} MeV	E_{n,l,j} MeV	E_m MeV	E_v MeV	<E_p> MeV
2 $g_{7/2}$	-1,39	-0,9996	-0,41367	0,007364	-26,543
4 $s_{1/2}$	-1,83	-1,3992	-0,54457	-0,001671	-26,799
3 $d_{5/2}$	-2,3	-2,1379	-0,39316	-0,000712	-27,69
1 $j_{15/2}$	-2,45	-1,5576	-0,47472	-0,025721	-30,518
1 $i_{11/2}$	-3,08	-2,7406	-0,36445	-0,031006	-28,357
2 $g_{9/2}$	-3,86	-4,0505	-0,41367	0,007363	-29,593
3 $p_{1/2}$	-7,36	-7,6679	-0,142878	0,009747	-30,024
2 $f_{5/2}$	-7,95	-8,3689	-0,29479	0,001724	-30,580
3 $p_{3/2}$	-8,25	-8,6362	-0,14287	0,009747	-30,993
1 $i_{13/2}$	-9	-8,4151	-0,36445	0,031008	-34,031
2 $f_{7/2}$	-10,3	-10,8241	-0,29479	0,017249	-33,036
1 $h_{9/2}$	-10,8	-10,805	-0,26659	0,032288	-33,060
2 $f_{7/2}$	-10,3	-10,871	-0,33539	0,029554	-34,166
1 $i_{13/2}$	-9	-9,3757	-0,42040	0,042566	-33,771
3 $p_{3/2}$	-8,25	-8,8012	-0,23443	0,045871	-33,701
2 $f_{5/2}$	-7,93	-8,5076	-0,36401	0,021455	-35,053
3 $p_{1/2}$	-7,36	-7,7569	-0,25888	0,005511	-32,831
2 $g_{9/2}$	-3,86	-4,2837	-0,47167	0,025985	-30,176
1 $i_{11/2}$	-3,09	-3,1791	-0,48644	0,036599	-31,992
1 $j_{15/2}$	-2,45	-2,6478	-0,60714	0,021451	-23,259
3 $d_{5/2}$	-2,30	-2,3718	-0,45016	0,055855	-20,587
4 $s_{1/2}$	-1,83	-1,9945	-0,27730	0,025921	-24,587
2 $g_{7/2}$	-1,39	-0,6534	-0,41662	0,001442	-29,335

Neutronų būsenoms $2g_{7/2}$, $4s_{1/2}$, $3d_{5/2}$ gautos energijos -0,9996 MeV, -1,3992 MeV, -2,1379 MeV. Šioms būsenoms atlikus eksperimentinius skaičiavimus buvo gauti tokios energijų vertės -1,39 MeV, -1,83 MeV, -2,3 MeV. Lyginant tarpusavyje teorinius ir eksperimentinius rezultatus galima pastebėti, jog geriausias sutapimas gautas neutronams esant būsenoje $3d_{5/2}$. Neutronų būsenose $1j_{15/2}$, $1d_{11/2}$, $2g_{9/2}$, energetinės vertės -1,5576 MeV, -2,7406 MeV, -4,0505 MeV. Eksperimentinės vertės buvo gautos -2,45 MeV, -3,08 MeV, -3,86 MeV. Patys artimiausi rezultatai gauti būsenose -3,08 MeV, -3,86 MeV. Švino neutronų būsenoms $3p_{1/2}$, $2f_{5/2}$, $3p_{3/2}$ gautos energijų vertės -7,6679 MeV, -8,3689 MeV ir -8,6362 MeV, o mokslininkų

paskaičiuoti rezultatai - -7,36 MeV, -7,95 MeV, -8,25 MeV. Geri rezultatų sutapimai gauti neutronams esant būsenose $3 p_{1/2}$, $3 p_{3/2}$. Švino Pb_{82}^{208} $1 i_{13/2}$, $2 f_{7/2}$, $1 h_{9/2}$ būsenoms gautos teoriniuose skaičiavimuose energijų vertės -8,4151 MeV, -10,8241 MeV ir -10,805 MeV. Lyginant duomenis, geriausias rezultatas gautas neutronams esant būsenoje $1 h_{9/2}$. Gauta eksperimentinė vertė yra lygi -10,8 MeV. Švino neutronų būsenoms $1 i_{13/2}$, $2 f_{7/2}$, $1 h_{9/2}$ gautos $E_{n,lj}$ vertės -8,4151 MeV, -10,8241 MeV ir -10,805 MeV. Atlikus skaičiavimus būsenose $2 f_{7/2}$ ir $1 i_{13/2}$ gauti rezultatai yra artimiausi eksperimentiniams. Neutronų būsenoms $1 i_{13/2}$, $2 f_{7/2}$, $1 h_{9/2}$ buvo gautos tokios energijų $E_{n,lj}$ vertės -8,4151 MeV, -10,8241 MeV ir -10,805 MeV. Geriausias sutapimas buvo pastebėtas būsenoje $3 p_{1/2}$ – 7,36 MeV. Švino neutronų būsenoms $1 i_{11/2}$, $2 f_{7/2}$, $3 d_{5/2}$, $4 s_{1/2}$, $2 g_{7/2}$ gautos vertės -3,1791 MeV, -2,6478 MeV, -2,3718 MeV, -1,9945 MeV, -0,6534 MeV. Šiose būsenose eksperimentiškai buvo gauti rezultatai -3,09 MeV, -2,45 MeV, -2,30 MeV, -1,83 MeV, -1,39 MeV. Lyginant rezultatus blogiausias sutapimas su eksperimentiniais rezultatais gautas neutronams esant būsenoje $2 g_{7/2}$ (-1,39 MeV).

IŠVADOS

1. Potencialinio vaizdavimo metodu gautos integralinės lygtys leidžia sudėtingą uždavinį spręsti skaidant Hamiltonianą į dalis.
2. Potencialinio vaizdavimo metodas gali būti naudojamas skaičiuojant tiksliai reliatyvistines pataisas masei ir potencialinei energijai viendaleliame branduolyje.
3. Pasiūlytas Šredingerio lygties sprendimo metodas tiksliau apskaičiuoja švino energijas skirtingose būsenose.
4. Reliatyvesnės pataisos masę padidina išorinių sluoksnių nukleonų ryšio energiją.
5. Atliekant teorinius skaičiavimus ir po to juos lyginant su eksperimentiniais, reliatyvistinės masės pataisos gerino rezultatus, gauti rezultatai beveik sutapo.
6. Įvertinus reliatyvistines mases, padidėja nestabilų branduolių, su padidintu neutronų skaičiumi išoriniuose sluoksniuose egzistavimo tikimybė.
7. Pasiūlytas pusiau reliatyvistinės lygties sprendimo metodas padeda geriau apskaičiuoti modelio būsenas ir gali būti naudingas aiškinant branduolių, turinčių daug neutronų ir didelį skersmenį, savybes.
8. Skaičiuojant švino branduolyje esančių protonų energijas būsenose $3 p_{3/2}$, $1 h_{9/2}$, $3 s_{1/2}$, $2 d_{3/2}$, $1 n_{11/2}$, $1 g_{7/2}$ gauti rezultatai buvo artimi eksperimentiniams arba juos pagerino.
9. Reliatyvistinės masės pataisos neutronų būsenose $3 d_{5/2}$, $1 i_{11/2}$, $2 g_{9/2}$, $3 p_{1/2}$, $3 p_{3/2}$, $1 h_{9/2}$, $2 f_{7/2}$, $1 i_{13/2}$, $3 p_{1/2}$, $1 i_{11/2}$, $j j_{15/2}$, $3 d_{5/2}$, $4 p_{1/2}$, žymiai padidino neutronų stūmos energija išoriniuose branduolio sluoksniuose. Egzistuoja tikimybė, kad gali egzistuoti branduoliai su per dideliu neutronų skaičiumi.

LITERATŪROS SĄRAŠAS

1. Bandzaitis A., Grabauskas D. Kvantinė mechanika. Vilnius, 1975.
2. Brazdžiūnas P. Bendroji fizika. IV dalis. Vilnius, 1965.
3. Блохинцев Д. И. Основы квантовой механики. Москва, 1983.
4. Byron F. W. Jr, Fuller R. W. Mathematics of Classical Physics, Dover Publications. New York. 1992.
5. Chepurnov V. A. „Average field of neutrons and protons. Shells with $N > 126$ and $Z > 82$,“ J. Nucl. Phys., V. 6. 1967 [in Russian].
6. Dobson K., Grace D., Lovett D. Fizika. 11-12 klasei. II dalis. Vilnius, 2002.
7. Enciklopedinis jaunojo chemiko žodynas. Maskva. 1990. (rusų klb.).
8. Janavičius A. J. Greens functions and nonphysical solutions // Lietuvos fizikos žurnalas. Vilnius. Nr. 5, 1998. p. 431-435.
9. Janavičius A. J. The general solution of the Schrödinger equation for positive energies and bound states in the one-particle case. // Lietuvos fizikos žurnalas. Vilnius. Nr. 5, 1998. p. 437-441.
10. Janavičius A. J. The method of potential representation for the scattering theory. 1998.
11. Янавичюс А. И. Интегральные уравнения для Шредингера в потенциальном представлении в случае связанных состояний. Томск, 1987.
12. Janawiczius A. J., Kwiatkowski K. Уравнения Шредингера в потенциальном представлении для потенциала Саксон – Вудса в случае S - волн. Краков, 1978.
13. Janawiczius A. J., Płaneta R. Общее решения уравнения Шредингера в потенциальном представлении. Краков, 1978.
14. Janavičius A. J. Relativistic corrections in the average field of neutron and proton shells. //Acta Phs. Pol. B 27. 1995.
15. Janavičius A. J. Jurgaitis D. T. Lithuanian Phys. Collection, 25, 33. 1985. In Russian.
16. Janavičius A. J., Bakštys A. Acta Phys. Pol. B24. 1993.
17. Janavičius A. J., Proc. High schools 2. 1983. In Russian.
18. Jasiūnienė R., Valentinavičienė V. Chemija 9. Mokytojo knyga, Vilnius. 1996.
19. Javorskis B., Detlafas A. Fizikos kursas. III tomas. Vilnius, 1975.
20. Jelley N. A. Fundamentals of Nuclear Physics, Cambridge University Press. 1990.
21. Kukšas B., Vičas S. Fizika. II tomas. Vilnius, 1988.
22. Кузьмичев В.Е. Законы и формулы физики. Справочник. Киев, 1989.
23. Матвеев А. Н. Атомная физика. Москва. 1989.

24. Naumovas A. I. Atomo branduolio ir elementariųjų dalelių fizika. Maskva, (rusų klb.). 1984.
25. Perey F. G., Local optical program with automatic parameters search.
26. Poškus A. Atomo ir branduolio fizikos laboratoriniai darbai. Vilnius, 2004.
27. Požėla I., Radvilavičius Č. Optika ir atomo fizika. Mokomoji knyga. Kaunas, 2003.
28. Rudzikas Z. Theoretical Atomic Spectroscopy, (Cambridge University Press, Cambridge, 1997.
29. Smolanczuk R. „Product of super-heavy elements“. 1999.
30. Ходгсон П. Е. Оптическая модель упругого рассеяния. Москва. 1966.
31. Veselov A. I. Kondratiuk L. A. J. Nucl. Phys. 36. 343 (1982) in Russian.
32. Вихман Э. Квантовая физика. Том IV. Москва, 1977.

PRIEDAI

Ivairių elementų neutronų lygmenys ir reliatyvistinės pataisos potencialui

Nukleonai	nlj	E_m , MeV	$(E_m)^D$, MeV	$(E_v)^D$, MeV	$(E_{nLj})^D$, MeV	E^n , MeV	d
^{17}O	1d _{5/2}	-0,438	-0,427	0,061	-4,148	50,10	0,85
^{17}O	2s _{1/2}	-0,535	-0,414	0,012	-3,254	50,10	0,613
^{15}O	1p _{1/2}	-0,534	-0,346	0,110	-15,654	57,10	0,90
^{41}Ca	1f _{1/2}	-0,524	-0,494	0,062	-8,388	52,00	1,00
^{41}Ca	2p _{3/2}	-0,488	-1,124	0,017	-6,135	52	0,80
^{39}Ca	1d _{3/2}	-0,334	-0,337	0,075	-15,72	54,30	0,90
^{39}Ar	1f _{7/2}	-0,502	-0,502	0,058	-6,600	50,25	1,00
^{37}Ar	1d _{3/2}	-0,354	-0,344	0,070	-11,88	50,35	1,00
^{37}S	1f _{3/2}	-0,490	-0,506	0,054	-4,500	48	1,00
^{35}S	1d _{3/2}	-0,353	-0,348	0,069	-9,882	49,35	1,00
^{49}Ca	2p _{3/2}	-0,418	-0,433	0,015	-5,152	46,70	0,80
^{49}Ca	2p _{1/2}	-0,395	-0,356	0,012	-3,120	46,70	0,80
^{47}Ca	1f _{7/2}	-0,438	-0,445	0,059	-9,937	49,80	1,00
^{53}Cr	2p _{3/2}	-0,951	-0,664	0,023	-7,978	49,10	0,80
^{51}Cr	1f _{7/2}	-0,432	-0,429	0,061	-12,00	51,32	1,00
^{55}Fe	2p _{3/2}	-0,550	-0,752	0,027	-9,284	50,27	0,80
^{53}Fe	1f _{7/2}	-0,445	-0,447	0,065	-13,63	52,80	1,05
^{57}Ni	2p _{3/2}	-0,669	-0,611	0,031	-10,27	51,10	0,80
^{89}Sr	2d _{5/2}	-0,528	-0,529	0,017	-6,390	48,10	0,75
^{87}Sr	1g _{9/2}	-0,458	-0,461	0,051	-11,11	49,60	1,05
^{91}Zr	2d _{5/2}	-0,546	-0,540	0,019	-7,184	48,76	0,75
^{89}Zr	1g _{9/2}	-0,454	-0,456	0,052	-12,00	50,40	1,05
^{93}Mo	2d _{5/2}	-0,520	-0,515	0,018	-8,046	50,02	0,90
^{91}Mo	1g _{9/2}	-0,479	-0,450	0,052	-12,58	50,77	1,05
^{139}Ba	2f _{7/2}	-0,539	-0,541	0,012	-4,725	46,65	1,05
^{137}Ba	2d _{3/2}	-0,430	-0,424	0,025	-9,923	47,00	0,90
^{137}Ba	1h _{11/2}	-0,495	-0,502	0,043	-9,157	47,00	1,10
^{209}Pb	2g _{9/2}	-0,693	-0,639	0,014	-4,158	45,50	1,15
^{209}Pb	1i _{11/2}	-0,585	-0,629	0,039	-2,946	45,50	1,20
^{209}Pb	3d _{5/2}	-0,486	-0,480	0,001	-2,215	45,50	0,90
^{207}Pb	3p _{1/2}	-0,494	-0,477	0,010	-7,379	45,38	1,00
^{207}Pb	2f _{5/2}	-0,497	-0,489	0,024	-8,023	45,38	1,20
^{209}Pb	3p _{3/2}	-0,654	-0,688	0,011	-8,696	45,38	0,95
^{211}Po	2g _{9/2}	-0,663	-0,871	0,013	-4,538	45,50	1,15
^{211}Po	3p _{1/2}	-0,555	-0,587	0,012	-7,654	45,20	0,93
^2H	1s _{1/2}	-0,533	-0,213	0,140	-2,218	26,60	0,34

2 Priedas

Įvairių elementų protonų lygmenys ir reliatyvistinės pataisos potencialui

Nukleona i	nlj	E_m , MeV	$(E_m)^D$, MeV	$(E_v)^D$, MeV	$(E_{nlj})^D$, MeV	E^p , MeV	d
¹⁷ F	1d _{5/2}	-0,664	-0,751	0,053	-0,606	50,65	0,80
¹⁷ O	2s _{1/2}	-0,227	-0,216	0,007	-0,122	50,65	0,551
¹⁵ N	1p _{1/2}	-0,341	-0,361	0,105	-12,00	57,60	0,75
⁴¹ Sc	1f _{7/2}	-0,480	-0,482	0,056	-1,096	52,44	1,00
³⁹ K	1d _{3/2}	-0,366	-0,350	0,070	-8,301	54,24	1,05
⁴⁹ Sc	1f _{7/2}	-0,473	-0,474	0,068	-9,643	58,10	1,05
⁴⁹ Sc	2p _{3/2}	-0,737	-0,705	0,022	-5,886	58,10	0,77
⁵⁵ Co	1f _{7/2}	-0,413	-0,419	0,062	-7,207	55,40	1,03
⁵⁹ Cu	2p _{3/2}	-1,118	-1,094	0,031	-3,387	53,70	0,77
⁵⁷ Co	1f _{7/2}	-0,441	-0,441	0,061	-8,105	55,37	1,03
¹²¹ Sb	1f _{7/2}	-0,516	-0,499	0,026	-5,753	59,05	0,80
¹²¹ Sb	1g _{7/2}	-0,566	-0,470	0,052	-5,109	59,05	1,20
¹¹⁹ In	1g _{9/2}	-0,373	-0,420	0,053	-10,86	58,40	1,05
²⁰⁹ Bi	1h _{9/2}	-0,417	-0,418	0,043	-3,792	60,23	1,15
²⁰⁹ Bi	2f _{7/2}	-0,474	-0,474	0,026	-3,601	60,23	1,15
²⁰⁷ Ti	3s _{1/2}	-0,384	-0,370	0,023	-8,054	60,00	0,90

**Branduolių, turinčių skirtingą nukleonų skaičių, potencialinės energijos ir potencialo
pataisos masei**

Nukleonai	nLj	E_{nLj},	(E_m)^P,	Nukleonai	nLj	E_{nLj},	(E_m)^P,
Z		MeV	MeV	Z		MeV	MeV
2	1 s _{1/2}	-29,83	-0,0094	64	2 d _{5/2}	-12,71	-0,1925
6	1 p _{3/2}	-27,97	-0,0472	76	1 h _{11/2}	-12,17	-0,3114
8	1 p _{1/2}	-27,23	-0,0308	80	2 d _{3/2}	-11,17	-0,2045
14	1 d _{5/2}	-24,67	-0,0975	82	3 s _{1/2}	-10,31	-0,2345
18	1 d _{3/2}	-23,95	-0,0530	92	1 h _{9/2}	-8,828	-0,2687
20	2 s _{1/2}	-22,33	-0,2261	100	2 f _{7/2}	-7,553	-0,3381
28	1 f _{7/2}	-21,15	-0,0857	114	1 i _{13/2}	-7,507	-0,3259
34	1 f _{5/2}	-19,45	-0,4987	120	2 f _{5/2}	-4,716	-0,3430
38	2 p _{3/2}	-17,79	-0,1213	124	3 p _{3/2}	-4,3414	-0,3837
40	2 p _{1/2}	-17,36	-0,8244	126	3 p _{1/2}	-3,227	-0,3837
50	1 g _{9/2}	-15,40	-0,2093	138	1 i _{11/2}	-1,859	-0,3351
58	1 g _{7/2}	-13,81	-0,2057	148	2 g _{9/2}	-1,103	-0,3975

**Branduolių, turinčių skirtingą nukleonų skaičių, potencialinės energijos ir potencialo
pataisos masei**

Nukleonai N	nLj	E_{nLj}, MeV	(E_m)^P, MeV	Nukleonai N	nLj	E_{nLj}, MeV	(E_m)^P, MeV
2	1 s _{1/2}	-41,35	-0,0108	92	1 h _{9/2}	-19,81	-0,2623
6	1 p _{3/2}	-38,31	-0,0198	100	2 f _{7/2}	-18,93	-0,2938
8	1 p _{1/2}	-38,21	-0,0217	114	1 i _{13/2}	-17,49	-0,3193
14	1 d _{5/2}	-34,99	-0,0453	120	2 f _{5/2}	-17,07	-0,3165
18	1 d _{3/2}	-34,61	-0,0473	126	3 p _{1/2}	-15,95	-0,3562
20	2 s _{1/2}	-33,94	-0,0517	138	1 i _{11/2}	-13,85	-0,3254
28	1 f _{7/2}	-31,18	-0,0157	148	2 g _{9/2}	-13,40	-0,4034
34	1 f _{5/2}	-29,74	-0,1078	164	1 j _{15/2}	-12,20	-0,4497
38	2 p _{3/2}	-29,43	-0,1053	172	2 g _{7/2}	-10,90	-0,4978
40	2 p _{1/2}	-28,73	-0,1732	178	3 d _{5/2}	-10,75	-0,4513
50	1 g _{9/2}	-25,28	-0,1985	182	3 d _{3/2}	-9,664	-0,4963
58	1 g _{7/2}	-24,35	-0,2043	184	4 s _{1/2}	-9,581	-0,4829
64	2 d _{5/2}	-24,06	-0,1715	196	2 h _{11/2}	-7,661	-0,5746
68	2 d _{3/2}	-23,20	-0,1998	214	1 k _{17/2}	-6,623	-0,5149
80	1 h _{11/2}	-22,47	-0,1969	234	1 i _{19/2}	-0,5879	-0,6352
82	3 s _{1/2}	-22,46	-0,2039				