

ŠIAULIŲ UNIVERSITETAS
INFORMATIKOS, MATEMATIKOS IR E.STUDIJŲ INSTITUTAS
PROGRAMŲ SISTEMŲ KATEDRA

Vaidotas Juodis
Informatikos specialybės II kurso magistrantas

**PUSIAU RELIATYVISTINIO ATOMO BRANDUOLIO MODELIO
KŪRIMAS IR TYRIMAS**

**THE DEVELOPMENT AND ANALYSIS OF SEMI-RELATIVISTIC MODEL
OF THE ATOMIC NUCLEUS.**

MAGISTRO DARBAS

Darbo vadovas:

Doc. Dr. Kęstutis Žilinskas

Recenzentas:

Doc. Dr. Vaidas Giedrimas

Šiauliai, 2015

„Tvirtinu, jog darbe pateikta medžiaga nėra plagijuota ir paruošta naudojant literatūros sąrašę pateiktus informacinius šaltinius bei savo tyrimų duomenis“

Darbo autorias _____
(vardas, pavardė, parašas)

Darbo tikslai ir uždaviniai

- **Tikslas:** Sudaryti pusiau reliatyvistinio branduolio modelį, sukurti jį realizuojančią programą ir atlikti skaitmeninį tyrimą.
- Uždaviniai:
 - Išanalizuoti literatūrą ir šaltinius.
 - Išanalizuoti atomo branduolio modelius.
 - Sukurti pusiau reliatyvistinio atomo branduolio modelį.
 - Sukurti modelį realizuosiančią programą.
 - Atlikti įvairių reliatyvistinių branduolių energijų spektrų skaičiavimus, naudojant Vudso-Saksono potencialą.
 - Atlikti tyrimą ir nustatyti reliatyvistinių paklaidų įtaką skaičiavimams.

Darbo vadovas _____
(vardas, pavardė, parašas)

Turinys

| | | |
|----------|---|----|
| I. | Įvadas | 6 |
| II. | Teorinė dalis | 8 |
| 1. | Temos analizė | 8 |
| 2. | Darbo srities analizė | 8 |
| 2.1. | Viendalelis sluoksninis branduolio modelis..... | 8 |
| 2.2. | Vudso-Saksono potencialas sluoksniniam branduolio modeliui..... | 10 |
| 2.3. | Reliatyvistinės pataisos nukleonų masei | 11 |
| 3. | Darbinės srities modelis | 12 |
| III. | Projektinė dalis | 13 |
| 1. | Įrankių ir priemonių pasirinkimo analizė | 13 |
| 1.1. | Technologijos ir realizavimo metodai..... | 13 |
| 1.1.1. | C# programavimo kalba..... | 13 |
| 1.1.2. | FORTTRAN programavimo kalba..... | 14 |
| 1.1.3. | UML..... | 14 |
| 1.2. | Darbo priemonių galimybių analizė..... | 14 |
| 1.2.1. | Compaq Visual Fortran 6.6..... | 14 |
| 1.2.2. | Microsoft Visual Studio 2010..... | 15 |
| 1.2.2.1. | Struktūra | 15 |
| 1.2.2.2. | Kodo redaktorius | 16 |
| 2. | Projekto (darbo) vykdymo planas..... | 18 |
| 3. | Pradinis projekto aprašymas | 18 |
| 3.1. | Aprašymas | 18 |
| 3.2. | Vartotojo sąsaja | 18 |
| 3.3. | Taikomosios programos veikimo diagramos | 20 |
| 3.3.1. | Taikomosios programos struktūra..... | 20 |
| 3.3.2. | Taikomosios programos algoritmo pakeitimai | 21 |
| 3.3.3. | Duomenų srauto diagrama | 22 |
| 3.3.4. | Būsenos diagrama | 23 |
| 3.3.5. | Sekų diagrama..... | 24 |
| IV. | Darbo eigos aprašymas | 25 |
| 1. | Problemų ir jų sprendimų aprašymai ir pagrindimai | 25 |
| 2. | Taikomosios programos testavimas..... | 26 |
| 2.1. | Testavimo tikslas..... | 26 |
| 2.2. | Pradiniai duomenys | 26 |
| 2.3. | Gautų ir laukiamų rezultatų palyginimas | 27 |

| | | |
|--------|---|----|
| 2.4. | Testavimo išvados..... | 27 |
| 3. | Branduolių energetinių sluoksnių tyrimas..... | 27 |
| 3.1. | Tyrimo tikslas..... | 27 |
| 3.2. | Tyrimo pradiniai duomenys | 27 |
| 3.3. | Laukiami rezultatai..... | 28 |
| 3.4. | Gauti rezultatai | 29 |
| 3.5. | Tyrimo išvados..... | 31 |
| 4. | Galutinio projekto būsenos aprašymas | 31 |
| 5. | Darbo rezultatų analizė..... | 32 |
| 6. | Patarimai, pastebėjimai ir rekomendacijos..... | 32 |
| V. | Išvados..... | 33 |
| VI. | Literatūra | 34 |
| VII. | Anotacija..... | 35 |
| VIII. | Priedai..... | 36 |
| 1. | Pagrindinės formulės ir pagrindinė teorija | 36 |
| 1.1. | Viendalelis sluoksninis branduolio modelis..... | 36 |
| 1.1.1. | Dalelių poros banginė funkcija..... | 37 |
| 1.2. | Vudso-Saksono potencialas sluoksniniam branduolio modeliui..... | 37 |
| 1.3. | Reliatyvistinės pataisos nukleonų masei..... | 39 |

I. Įvadas

1. Projekto dalykinė sritis

Projektas skirtas atlikti mokslinius elementariųjų dalelių skaičiavimus mokslininkams, universitetų dėstytojams ir studentams.

2. Projekto probleminė sritis

- Dar nėra sukurtos programos, kuri tiksliai apskaičiuotų elementariųjų dalelių energetinių lygmenų vertes.
- Reikia atlikti sudėtingus Šredingerio lygties skaičiavimus, parinkti tiksliausią sprendimo metodą teisingam rezultatui gauti.
- Apskaičiuoti reliatyvistines paklaidas.

3. Magistro darbo tikslas, uždaviniai

- **Tikslas:** Sudaryti pusiau reliatyvistinio branduolio modelį, sukurti jį realizuojančią programą ir atlikti skaitmeninį tyrimą.
- **Uždaviniai:**
 - Išanalizuoti literatūrą ir šaltinius.
 - Išanalizuoti atomo branduolio modelius modelius.
 - Sukurti pusiau reliatyvistinio atomo branduolio modelį.
 - Sukurti modelį realizuosiančią programą.
 - Atlikti įvairių reliatyvistinių branduolių energijų spektrų skaičiavimus, naudojant Vudso-Saksono potencialą.
 - Atlikti tyrimą ir nustatyti reliatyvistinių paklaidų įtaką skaičiavimams.

4. Tiriamojo projekto tikslas, uždaviniai

- **Tikslas:** ištestuoti programą, kuria galima gauti elementariųjų dalelių energijos vertes, panaudojant realius parametrus.
- **Uždavinys:** sukurta programa išspręsti Šredingerio lygtį ir gauti eksperimentinį rezultatą atitinkantį arba tikslesnį už hipotetinius teorinius rezultatus.
- **Hipotezė:** interpoliuojant gautas branduolinių energijų vertes, galima rasti tiriamos medžiagos neutronų skaičių ir nustatyti, kokia tai medžiaga.

5. Kuriamos PS nauda, jos teikiamos galimybės

Elementariųjų dalelių energijos lygmenų energetines vertes ir reliatyvistines paklaidas galima panaudoti:

- moksliniams tyrimams kvantinėje ir atomo branduolio fizikoje, sprendžiant sunkiųjų branduolių stabilumo problemą;
- astronomijoje, tiriant žvaigždėse vykstančias branduolines reakcijas;
- spektrų tyrimuose;
- branduolinėje energetikoje;
- medžiagotyroje.

6. Numanomi PĮ vartotojai

- Įvairių fizinių mokslų sričių mokslininkai.
- Universitetų dėstytojai, profesoriai.
- Studentai.

7. Pagrindiniai PĮ funkciniai reikalavimai, apribojimai

- Programa turi realizuoti pusiau reliatyvistinį atomo branduolio modelį.
- Reikia tiksliai žinoti dalelių duomenis: masę, sukinius, kvantinius lygmenų skaičius.
- Sprendžiant Šredingerio lygtį, panaudoti Vudso-Saksono potencialą.
- Parinkti tokias vertes, kad elementariosios dalelės neišlėktų už Vudso-Saksono potencialo ribų.
- Nustatyti reliatyvistines paklaidas.

8. Pagrindiniai nefunkciniai reikalavimai – palaikomos OS, duomenų bazės, pageidaujamas patikimumas, grafinė vartotojo sąsaja ir pan.

- Palaikomos OS: XP, Vista, Win7, Win8, Win8,1.
- Grafinė vartotojo sąsaja: parametrų įvedimo laukai su paaiškinimais, rezultatų pateikimo laukas.

II. Teorinė dalis

1. Temos analizė

Sunkūs elementai, egzistuojantys Žemėje, yra uranas, radis. Kiti sunkesni elementai yra išgaunami branduolinių reakcijų metu. Super-sunkieji branduoliai, tokie kaip ${}^{340}_{126}\text{X}$ susidaro žvaigždinės nukleosintezės būdu ir yra vadinami hipotetiniais, nes Žemės paviršiuje nėra stabilių branduolių su tokiu aukštu neutronų ir protonų santykiu. Žemėje paprasčiausiai nėra sąlygų sudaryti stabilius tokio svorio branduolius super-sunkiuosius su dalelių greitintuvais. Dar 1940 metais pirmas buvo išgautas neptūnis ($Z=93$). Netrukus po to greitai buvo atrasti elementai, kurių protonų skaičius yra tarp 93 ir 118, išskyrus 117.[16]

Iš atliktų skaičiavimų duomenų buvo padaryta išvada, kad visi branduoliai, kurių $Z>103$, egzistuoja todėl, kad jie turi uždarų sluoksnių struktūrą. Tokie branduoliai, kurie turi daug neutronų ir protonų, buvo pavadinti sunkiaisiais branduoliais, o atitinkamai elementai - sunkiaisiais elementais.

Kad branduolinė fizika galėtų toliau tobulėti, buvo sudėta daug mokslininkų pastangų ir eksperimentų naudojant greitintuvus, sukurtas ne vienas modelis, padedantis rasti stabilius super-sunkius branduolius. Darbe apžvelgsime vieną iš dažniausiai tyrimams naudojamų branduolio modelių – viendalelį sluoksninį branduolio modelį ir jo tyrinėjimo metodiką su Vudso-Saksono potencialu, kursime kompiuterinę programą, kuri padėtų ieškoti naujų stabilių izotopų, kas yra taip pat svarbu branduolinei pramonei ir energetikai.

2. Darbo srities analizė

2.1. Viendalelis sluoksninis branduolio modelis

Branduolio neutronai ir protonai, judėdami potencinėje duobėje, sudaro sluoksnius. Šiuos sluoksnius skiria energijos intervalai. Šitoks modelis yra vadinamas sluoksniniu modeliu. Norint aprašyti nukleonų koreliacijas, šis modelis turi būti pagrindas. Modelio pagalba yra nagrinėjamas nukleonų judėjimas bendroje potencinėje duobėje.

Sąveikos branduolinis potencialas gali būti dalinamas į dvi dalis, nes branduolinių jėgų veikimo spindulys yra labai nedidelis, tačiau jėgos yra labai intensyvios. Pirmoji – labai stipri ir trumpai veikianti stūma, kuri atsiranda dėl kietos šerdies, o antroji yra gerokai silpnesnė trauka, kuri veikia daug didesniu spinduliu. Dėl šerdies poveikio branduolys negali susitraukti. Šio nepriklausomų dalelių modelio panaudojimą, kuriant branduolio teoriją, įgalina Paulio principas ir stumiančių bei traukiančių branduolinių jėgų santykis.[1,2]

Paulio principas išjungia nukleonų potencialo toliveiką. Kai susiduria du nukleonai, tikimybė, kad jie apsikeis dideliais judesio kiekiais yra maža. Sakykime, kad du nukleonai su Gauso potencialu, kurie yra branduolyje ir kurių judesio kiekiai yra p_1 ir p_2 pradeda sąveikauti vienas su kitu.

$$V(r_1 - r_2) = -V_o \exp \left[-\frac{|r_1 - r_2|^2}{\mu^2} \right]. \quad (1.1)$$

Tikimybė, kad nukleonų sąveikos pabaigoje jų judesio kiekiai bus p_1' ir p_2' yra nusakoma sąveikos matricos elemento kvadratu. Įvedus $r = r_1 - r_2$ ir perduotą judesio kiekį $p = p_1' - p_2'$ ir gauname, kad sąveikos matricos elementas yra proporcingas

$$-V_o \int (dr) \exp(ipr) \exp \left(-\frac{r^2}{\mu^2} \right) = -\pi^{3/2} \mu^3 V_o \exp \left(-\frac{p^2 \mu^2}{4} \right). \quad (1.2)$$

Tai parodo, kad, kai sąveikauja du nukleonai, jų apsikeitimo dideliais judesio kiekiais tikimybė yra maža.[1,5]

Sąveikos su mažu judesio kiekio perdavimu yra įmanomos tik nukleonams, kurie yra aukščiausiuose energetiniuose užpildytuose lygiuose, nes kitu atveju nukleonai negali pereiti į kitus lygius. Taip yra dėl Paulio principo poveikio ir gretimų lygių užimtumo kitais nukleonais.[16]

Branduolinis potencialas vaizduojamas kaip sferiškai simetriška stačiakampė duobė arba harmoninis osciliatorius. Pasiremiant įvairiais eksperimentais, kurie tiria nukleonų išsklaidymą branduoliuose, galima teigti, kad aprašyti lengvuosius branduolius labiau tinka harmoninis osciliatorius, o stačiakampės duobės potencialas sunkiuosius. Realus branduolio potencialas privalo atitikti tam tikras sąlygas:

- būti baigtinis,
- riba neapibrėžta,
- priklausomybė nuo spindulio turi būti tarpinė tarp stačiakampės duobės ir harmoninio osciliatoriaus potencialų,
- priklausyti nuo greičio. [1,2]

Nagrinėjant lygių eiliškumą begalinėje sferinėje simetrinėje harmoninio osciliatoriaus duobėje, užrašome tokią potencialo išraišką:

$$V(r) = \frac{m\omega_o^2 r^2}{2} - V_o, \quad (1.3)$$

sprendinys yra

$$\varphi_{n/m} = \frac{u_{nl}(r)}{r} Y_{lm}(\theta, \varphi), \quad (1.4)$$

Ji yra orbitinio judesio kiekio momento (kvadrato L^2) ir ašies z projekcijos L^2 operatoriaus funkcija. Savosios šios lygties reikšmės yra tokios:

$$E_n = \left(N + \frac{3}{2}\right) \omega_o - V_o, \quad (1.5)$$

Harmoninio osciliatoriaus lygmenys yra numeruojami, pasitelkiant skaičių poras (n, l), pavyzdžiui: 1s; 1p; 2s; 1d; 2p, 1f ir t. t. l reikšmės žymėjimai[1]:

$$l = 0, 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10 \text{ arba } l = s, p, d, f, g, h, i, k, l, m, n. \quad [3,16]$$

Sferiškai simetriško harmoninio osciliatoriaus radialinė funkcija:

$$u_{nl}(r) = N_{nl} \exp\left(\frac{-m\omega_o r^2}{2}\right) (r\sqrt{m\omega_o})^l \alpha_{n-1}^{l+\frac{1}{2}}(m\omega_o r^2). \quad (1.7)$$

Rasime dydį ω_0 , kuris atitinka teisingą branduolio spindulį. Kai N - Z, nukleonų energijų suma yra lygi

$$\sum_{i=1}^Z E_i + \sum_{i=1}^N E_i = m\omega_o^2 A \langle r^2 \rangle, \quad (1.8)$$

čia $\langle r^2 \rangle \approx (3/5)R^2$ – vidutinis kvadratinis spindulys; branduolio spindulys $R = r_0 A^{1/3}$. Kadangi

$$E_n = (N + 3/2)\omega_0 - V_0 \text{ ir tai:}$$

$$\omega_o = 41A^{-1/3} \text{ MeV}. \quad (1.9)$$

Radome energetinį atstumą tarp harmoninio osciliatoriaus ekvidistancinių lygių iš ω_o . [1,2]

Sudarant sluoksninį branduolio modelį, padaryta prielaida, kad egzistuoja stipri sukinio ir orbitos sąveika. Sukinio ir orbitos sąveikos potencialas yra

$$V_{ls} = -V_{ls}(r)l_s, \quad (1.10)$$

Atsižvelgus į sukinio ir orbitos sąveiką, banginė funkcija yra

$$\varphi_{nljm}(r, \theta, \varphi) = \frac{u_{nl}(r)}{r} y_{ljm}(\theta, \varphi), \quad (1.11)$$

Prielaidą, kad egzistuoja palyginti didelė sukinio ir orbitinio momento sąveika vidutinio lauko potencialė geriausiai galima pastebėti branduoliuose, kurie turi vieną nukleoną virš uždaro sluoksnio arba jiems trūksta vieno nukleono.

Kai įvedama vidutinio lauko sukinio ir orbitos potencialo dalis, energetinis spektras pasikeičia. Dėl to sluoksnių užpildymo skaičiai jau sutampa su magiškais skaičiais 2, 8, 20, 28, 50, 82 ir 126. [1,3]

2.2. Vudso-Saksono potencialas sluoksniniam branduolio modeliui

Atomo fizikoje dažniausiai vidutiniu branduolio potencialu su neapibrėžta riba yra imamas Vudso ir Saksono potencialas. Tai sferiškai simetriškos duobės potencialas, kurio gylis baigtinis su paviršiumi $r = R_o$ ir yra lygus pusei reikšmės potencialo branduolio centre.

Vudso-Saksono potencialas yra sudaro centrinis $V(r)$ ir orbitinio sukiny $V_{ls}(r)$

$$V(r) = \frac{-V_o^{N,Z}}{[1 + \exp\{\alpha(r - R_o)\}]}, \quad (2.1)$$

$$V_{ls} = -k \frac{1}{r} \frac{dV(r)}{dr} (ls), \quad (2.2)$$

Panaudojus modifikuotą Lagranžo metodą, randamos patogios integralinės lygtys: banginei funkcijai[10]

$$\Phi_2 U_{nl} = U_{nl} + \frac{U_{nl}}{W_o} \int_0^r F_{nl} CV_\delta \Phi_2 U_{nl} dr_1 - \frac{F_{nl}}{W_o} \int_0^r U_{nl} CV_\delta \Phi_2 U_{nl} dr_1 \quad (2.10)$$

ir energijai

$$\Delta E_{nlj} = \frac{\int_0^\infty U_{nl} V_D \Phi_{2,nlj} U_{nl} dr_1}{\int_0^\infty U_{nl} \Phi_{2,nlj} U_{nl} dr_1}. \quad (2.11)$$

Nulinei aproksimacijai dešiniojoje integralinės lygties pusėje mes turime priskirti $\Phi_2 = 1$ ir surasti ΔE_{nlj} iš lygties (2.11). Naudojantis mūsų metodu, dažnis $\omega = d\omega_o$ harmoniniam potencialo modeliui yra randamas iš branduolio spindulio:[7,8]

$$\omega_o = 41A^{\frac{1}{3}} \frac{MeV}{\hbar}. \quad (2.12)$$

Norint išspręsti Šredingerio lygtį su Vudso-Saksono potencialu banginėje funkcijoje, turi būti atskirta kampinė priklausomybė. Po to reikia spręsti skaitinį uždavinį su diskretiniu spektru. Uždavinys gali būti ir su susijusios būsenos nepertraukiamu spektru. Banginės funkcijos radialinei daliai reikalinga ribinė sąlyga: $u_q(r) = 0$, kai $r = 0$

Palyginus nelyginių branduolių pagrindinių būsenų sukinių eksperimentų rezultatus, viendalelio modelio išvadomis, galima teigti, kad naudojantis šiuo modeliu, gautos nelyginių branduolių pagrindinių būsenų sukinių reikšmės yra teisingos. Tai negalioja, jeigu po posluksnių su mažu l užpildymu pradeda pildytis posluksnis su dideliu l , nes nelyginis nukleonas pasilieka lygyje su mažu l dėl likutinių sąveikų.[1,4]

2.3. Reliatyvistinės pataisos nukleonų masei

Reliatyvistinių masės pataisų vertės išreiškiamos šitaip:

$$E_m = -\frac{\hbar^4}{8m^3 c^2} \left\{ \int_0^\infty \left(\frac{d^2 U_{nlj}(r)}{dr^2} \right)^2 dr + 2l(l+1) \int_0^\infty r^{-2} \left(\frac{dU_{nlj}(r)}{dr} \right)^2 dr + l(l+1)(l^2 + l - 6) \int_0^\infty r^{-4} dU_{nlj}^2(r) dr \right\}. [11,12] \quad (3.5)$$

Šredingerio lygtis sprendžiama diskretizavimo metodu:

$$\frac{u_{i+1} - 2u_i - u_{i-1}}{h^2} + p(r_i)u_i = \lambda u_i \quad (3.6)$$

$$\lambda = -bE, \quad i = 0, 1, \dots, n, \quad h = \frac{C}{n}. [7,12]$$

Pilni Vudso-Saksono ir reliatyvistinių pataisų skaičiavimai ir teorija pateikiami darbo priede.

3. Darbinės srities modelis

Programos fizikinių skaičiavimų algoritmui parašyti buvo pasinaudota A. J. Janavičiaus ir A. Bakščio parašytu algoritmu. Magistro darbe pakeičiami Vudso-Saksono potencialo skaičiavimai ir Šredingerio lygties modelinio potencialo apskaičiavimo metodas. Tokiu atveju mes galime keisti modelinio potencialo režius ir pritaikyti juos prie Vudso-Saksono potencialo, ko negalėjome padaryti originaliame algoritme. Kadangi galime keisti modelinio potencialo režius skaičiuojant, nebereikia iš naujo nustatinėti branduolio spindulio skaičiavimo nuotolio, dėl šios priežasties gaunami tikslesni skaičiavimų rezultatai.

III. Projektinė dalis

1. Įrankių ir priemonių pasirinkimo analizė

1.1. Technologijos ir realizavimo metodai

1.1.1. C# programavimo kalba

C# yra moderni, bendrosios paskirties, objektinė programavimo kalba, sukurta Microsoft ir Europos kompiuterių gamintojų asociacijos (ECMA) ir patvirtinta tarptautinės standartizacijos organizacijos (ISO).

C# buvo sukurta Anderso Hejlsberg ir jo komandos, kuriant .NET Framework.

C# skirta bendros kalbos infrastruktūrai (CLI), kuri leidžia naudoti įvairių aukšto lygio kalbas skirtingose kompiuterių platformose.

C# yra plačiai naudojama profesionali kalba, nes:

- Tai moderni, bendrosios paskirties programavimo kalba.
- Objektiškai orientuota.
- Orientuota į atskirus komponentus.
- Ją lengva išmokti.
- Tai struktūrinė kalba.
- Ja galima rašyti efektyvias programas.
- Ji gali būti naudojama įvairiose kompiuterių platformose.
- Tai .NET Framework dalis.

Nors C# konstruktai yra panašūs į tradicinius aukštojo lygio kalbų C ir C++ ir būdama objektinė programavimo kalba, jis turi daug panašumų su "Java", ji turi daug stiprių programavimo savybių, kurios padaro ją priimtina dideliame programuotojų skaičiui visame pasaulyje:

- Boolean sąlygos.
- Automatinis šiukšlių rinkimas.
- Standartinė biblioteka.
- Versijų asamblėja.
- Savybės ir įvykiai.
- Delegatų ir įvykių valdymas.
- Lengvas naudojimas.
- Sąlyginis sudarymas.
- LINQ ir Lambda išraiškos.
- Integracija su Windows.[17]

1.1.2. FORTRAN programavimo kalba

FORTRAN visada buvo ir yra dominuojanti programavimo kalba moksliniams ir inžineriniams uždaviniams programuoti. Tai viena pirmųjų algoritminių kalbų, savo istoriją skaičiuojanti nuo 1957 m. Įvade ir norėtume trumpai peržvelgti FORTRAN kalbos istoriją.

Pačioje skaičiavimo mašinų eros pradžioje programavimas buvo itin sunkus, varginantis užsiėmimas. Programuotojas turėjo puikiai pažinti skaičiavimo mašinos skaičiavimo įrenginį - procesorių: jo komandų sistemą, registrus, magistrales ir daugelį kitų dalykų. Pati programa buvo rašoma mašinos instrukcijomis - žmogui sunkiai skaitomu dvejetainiu kodu. Laikui bėgant, imta naudoti simbolines šių instrukcijų santrumpas, o šias į mašinos instrukcijas pertvarkydavo specialios programos assembleriai. Tokios assemblerio kodais vadinamos programos irgi itin efektyviai išnaudoja mašinos procesoriaus galimybes, tačiau joms kurti ir derinti vis dėlto reikėjo pernelyg daug laiko.[18]

1.1.3. UML

UML (Unified Modeling Language) modeliavimo priemonės, diagramos

Unifikuota Modeliavimo kalba UML (Unified Modeling Language) - kalba, skirta programinės įrangos, verslo logikos ir kitų sistemų aprašymui, vizualizavimui ir dokumentavimui. UML - svarbi objektinio ir objektiškai orientuoto programavimo proceso dalis. UML pagalba galima vizualiai atvaizduoti sistemos architektūros elementus tokius kaip:

- veiksnius (actors);
- verslo procesus (business processes);
- komponentus (components);
- veiksmus (activities);
- programavimo kalbos elementus (programming language statements);
- duomenų bazių elementus (database schemas).

UML apjungia geriausias priemones iš duomenų modeliavimo (entity relationship diagrams), verslo modeliavimo (work flows), objektų modeliavimo

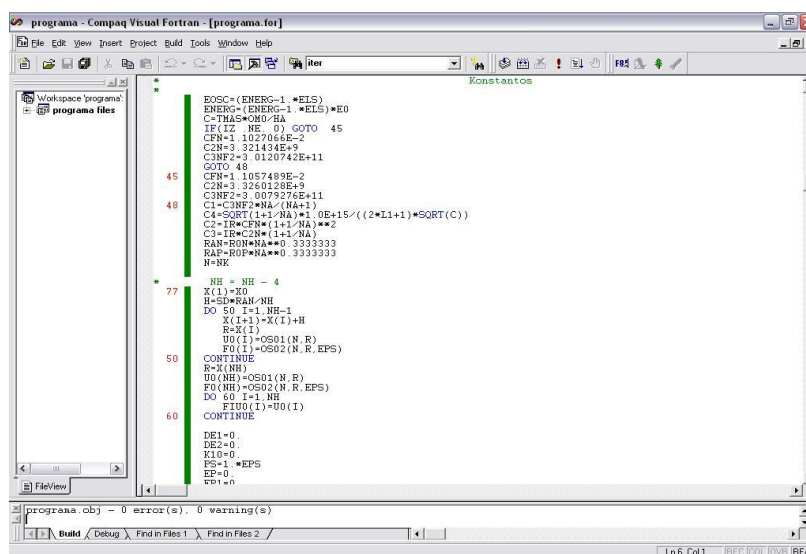
(object modeling) ir komponentų modeliavimo (component modeling). UML - tai Booch notacijos, objektinio modeliavimo (OMT) ir objektiškai orientuoto projektavimo sintezė, apjungianti šios elementus į vientisą modeliavimo kalbą.[19]

1.2. Darbo priemonių galimybių analizė

1.2.1. Compaq Visual Fortran 6.6

Visual Fortran naudoja Compaq Fortran kompiliatoriaus sistemą, kuri palaiko COMPAQ Fortran kalba apie įvairiose platformose (architektūros ir operacinių sistemų porų).

Compaq Extended matematikos biblioteka (CXML) sudaro matematikos šablonų, skirtų naudoti įvairių tipų mokslinėms ir inžinerijos programoms.



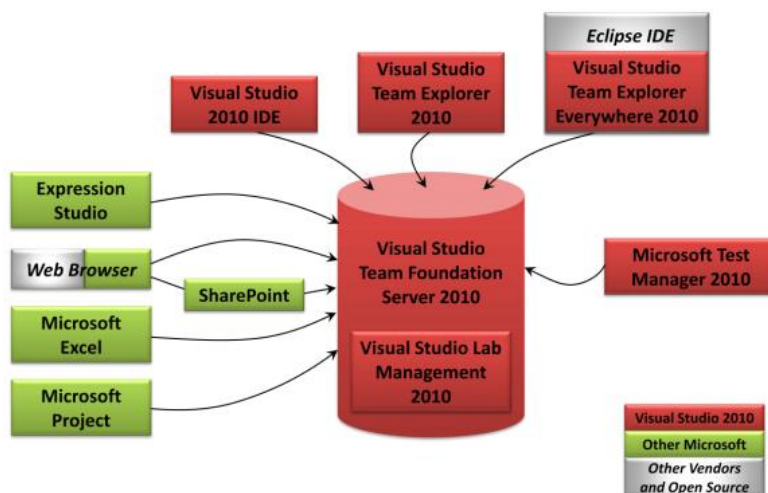
1 pav. Compaq Visual Fortran darbo aplinka

The Compaq Array Visualizer yra programinės įrangos įrankis, kuris leidžia jums peržiūrėti ir analizuoti duomenis grafiškai. Duomenų vizualizavimo metodai leidžia jums atrasti paslėptas struktūras dideliuose, daugiamačiuose masyvuose. Plati įvairovė pasirinkčių leidžia jums rasti svarbiausius jūsų duomenų aspektus.

Visual Fortran taip pat turi IMSL Fortran 90 MP biblioteką, kuri yra reikalinga teikti bendrųjų taikomosios matematikos ir mokslinių programų duomenis.[20]

1.2.2. Microsoft Visual Studio 2010

1.2.2.1. Struktūra



2 pav. Visual Studio 2010 dalių ir technologijų schema.

Visual Studio 2010 turi keletą atskirų dalių. Šios dalys gali bendrauti viena su kita ir kitomis technologijomis. 1 paveiksle parodyti pagrindiniai Visual Studio 2010 komponentai ir kai kurios kitos technologijos, kurios dažniausiai naudojamos su jais.

Pagrindinės sudedamosios Visual Studio 2010 (pažymėtos raudona):

- Visual Studio Team Foundation Server (TFS) 2010
- Visual Studio 2010 IDE
- Visual Studio Team Explorer 2010
- Visual Studio Team Explorer Everywhere 2010
- Microsoft Test Manager (MTM) 2010
- Visual Studio Lab Management 2010

Kitos "Microsoft" ir kitų gamintojų technologijos (rodomas žaliai ir baltai 1 paveiksle), kurios taip pat dažnai naudojamos kartu su Visual Studio 2010:

- Expression Studio
- Internet Explorer ir kitos naršyklės
- Eclipse IDE
- SharePoint
- Microsoft Excel
- Microsoft Project

Šiame magistro darbe panaudoti įrankiai:

Visual Studio Team Foundation Server (TFS) 2010: kiekviena kita produkto dalis prisijungia prie TFS, kuri veikia kaip centrinis koncentratorius informacijos visame procese. Ji suteikia vietą laikyti ir valdyti reikalavimus ir kitą informaciją, versijos kontrolę kodui, kūrimo valdymą, klaidų kontrolę, bandymo atvejų valdymą, ataskaitas, remiantis šia informacija ir dar daugiau. TFS taip pat suteikia taikomųjų programų sąsają (API), kuri leidžia kitai programinei įrangai naudotis savo paslaugas.

Visual Studio 2010 IDE: milijonai kūrėjų naudoja šią integruotą kūrimo aplinką (IDE), arba atskirai arba su ankstesnėmis TFS versijomis. Įrankis leidžia kurti, tikrinti ir paleisti kodą, kartu su testavimo ir kitomis funkcijomis.

Visual Studio Team Explorer 2010: šis įrankis skirtas vartotojams gauti informaciją iš TFS, pavyzdžiui, pranešimų ir kūrimo statusą. Jis gali veikti vienas pats, kaip 1 pav. parodo, ar būti integruotas į Visual Studio IDE.

1.2.2.2. Kodo redaktorius

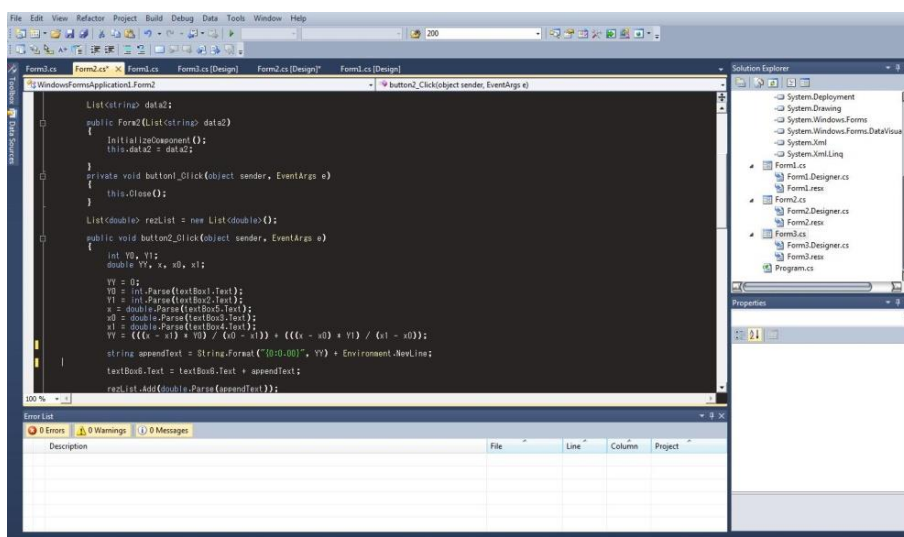
Įrankis suteikia tai, ko programuotojas ir tikisi iš IDE, įskaitant paprastą mechanizmą valdyti kodą ir konfigūracijos failus, kartu su galimybe parodyti skirtingų dalių įvairių spalvų kodą. Visual

Studio 2010 IDE taip pat palaiko kelis monitorius ir gali rodyti su skirtingų dalių sąsajas skirtinguose ekranuose.

Tas pats vartotojo sąsaja gali būti naudojama rašyti kodą bet kuria iš kalbų, palaikomų Visual Studio 2010, įskaitant:

- C#.
- VisualBasic.
- F#.
- C++.
- JScript.NET.

Nepriklausomai kalba kūrėjas pasirenka, jis sukuria projektą savo programai. Visual Studio 2010 suteikia įvairių įrankių asortimentą. Įskaitant WPF taikymą, Windows servise, klasių biblioteka, įvairių rūšių ASP.NET programas, bandomuosius projektus, modeliavimo projektus, ir daug daugiau. Vienas arba daugiau projektų gali būti sujungti kuriant problemos sprendimą.[21]



3 pav. Visual Studio 2010 IDE

2. Projekto (darbo) vykdymo planas

| | Veikla | Nuo | Iki |
|---------------|--|------------|------------|
| I Etapas | Literatūros analizė | 2013-09-10 | 2013-12-10 |
| | Šredingerio lygties sprendimas | 2013-10-01 | 2013-12-14 |
| II Etapas | Literatūros analizė | 2014-01-02 | 2014-02-24 |
| | Vudso-Saksono potencialo sprendimas | 2014-01-29 | 2014-04-18 |
| | Reliatyvistinių pataisų skaičiavimas | 2014-03-03 | 2014-05-30 |
| III Etapas | Grafinės vartotojo sąsajos kūrimas | 2014-09-02 | 2014-11-30 |
| | Programos testavimas | 2014-11-10 | 2014-12-15 |
| IV Etapas | Grafinės vartotojo sąsajos testavimas ir tobulinimas | 2015-01-02 | 2015-04-06 |
| | Gautų rezultatų tyrimas ir analizė | 2015-04-01 | 2015-04-30 |
| | Dokumentacija | 2013-09-10 | 2015-05-04 |

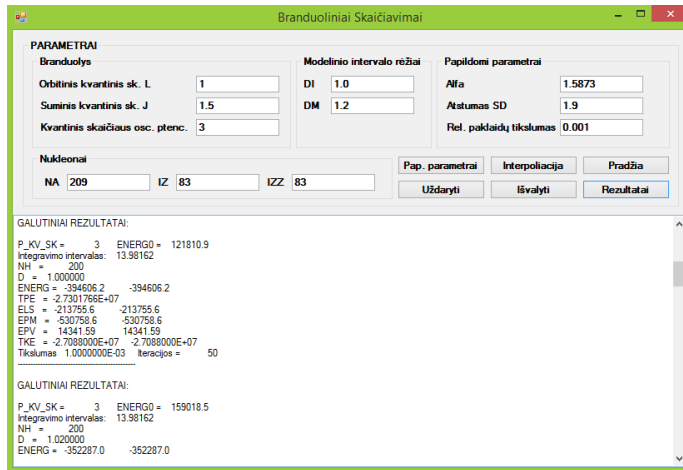
3. Pradinis projekto aprašymas

3.1. Aprašymas

Atsižvelgiant į darbo tikslą ir iškeltus uždavinius kuriamas ir tiriamas pusiau reliatyvistinis branduolio modelis turėtų:

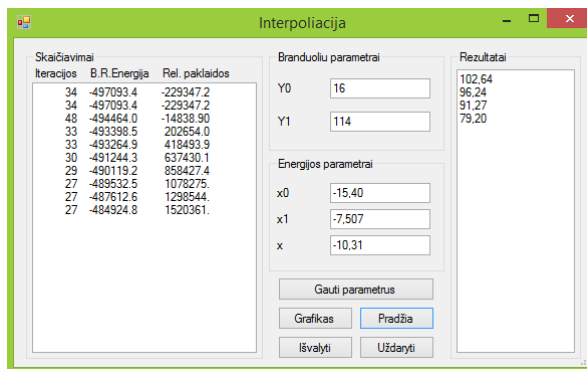
- Suteikti vartotojui įvesti ir keisti visus parametrus reikalingus branduoliniams tyrimams.
- Pasiūlyti vartotojui mažai keičiamų parametrų rekomenduojamas vertes.
- Gauti kuo tikslesnes reikšmes branduolinių energijų reikšmes.
- Suteikti galimybę interpoliuoti gautus rezultatus, tikrinant jų teisingumą.
- Suteikti galimybę nubrėžti interpoliuotų reikšmių grafiką.
- Automatiškai atrinkti skaičiavimų rezultatus reikalingus interpoliacijai:
 - Iteracijų skaičių.
 - Gaunamos energijos vertę.
 - Reliatyvistinių pataisų dydį.
- Rašyti duomenis (rezultatus) į failą.

3.2. Vartotojo sąsaja



5 pav. Taikomosios programos grafinė vartotojo sąsaja

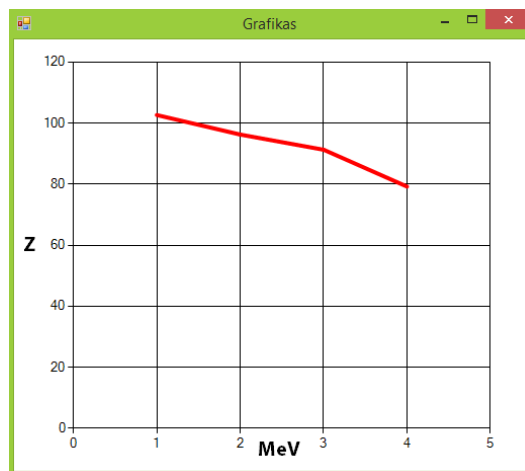
Sukurta vartotojo sąsaja, kuri leidžia vartotojui įvesti ir keisti visus parametrus reikalingus branduoliniams tyrimams atlikti, automatiškai vartotojui pasiūlys, kai kurias parametrų reikšmes,



6 pav. Interpoliacija

kad palengvintų darbą.

Suteikiama galimybė interpoliuoti gautas branduolio viendalelių lygmenų energijų vertes ir lengvai nustatyti gauto elemento uždarojo sluoksnio nukleonų skaičių paspaudus mygtuką „Interpoliacija“.



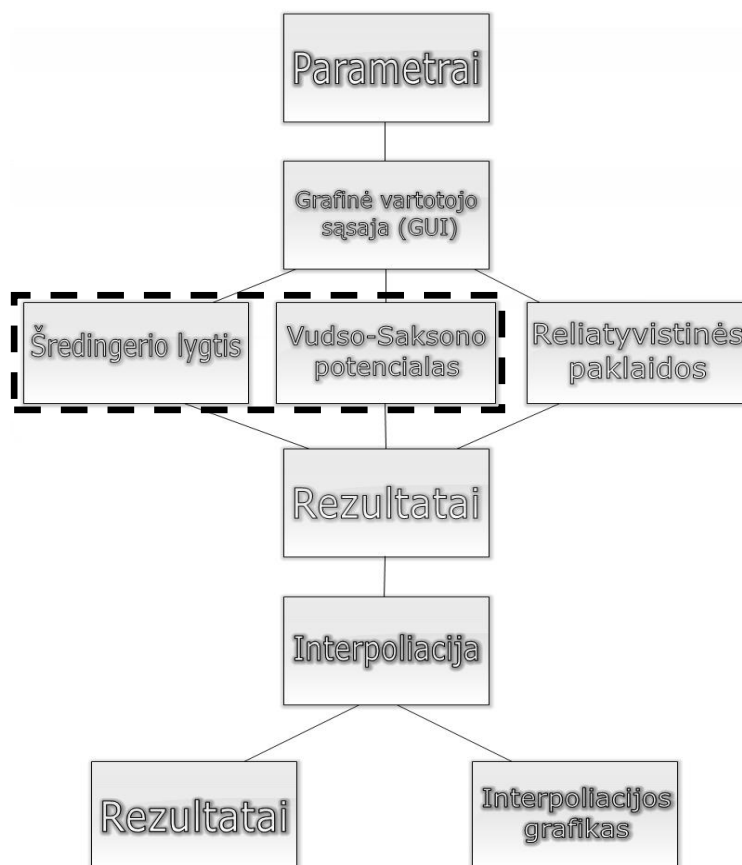
7 pav. Nukleonų priklausomybė nuo energijos lygmenų energijos

Atlikus kelių branduolių skaičiavimus galima lengvai išrinkti interpoliacijai reikalingus rezultatus, kurie parodomi kairiajame rezultatų lange. Spustelėjus mygtuką „Gauti parametrus“ surenkami rezultatai interpoliavimui: iteracijų skaičius, kuris nurodo rezultato tikslumą, branduolio lygmens energija ir reliatyvistinės pataisos masei, kurios kaip iteracijų skaičius nurodo rezultato tinkamumą interpoliavimui. Tada vartotojas iš atrinkto sąrašo pats turi suvesti norimus interpoliuoti rezultatus.

Kelis kartus atlikus interpoliaciją galima brėžti grafikus reikalingus atomo branduolio viendalelių energijos lygmenų energijos ir uždaryjū lygių nukleonų skaičių priklausomybėms tirti.

3.3. Taikomosios programos veikimo diagramos

3.3.1. Taikomosios programos struktūra

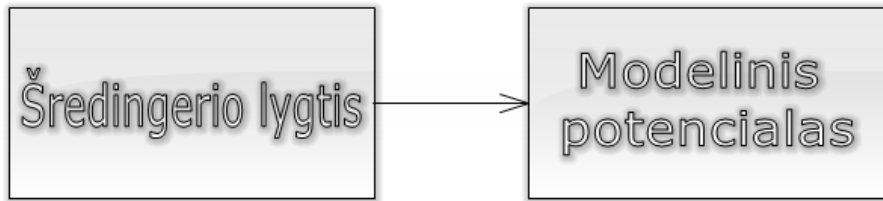


8 pav. Taikomosios programos struktūra

Programa sudaryta iš trijų pagrindinių dalių: Šredingerio lygties sprendimo modulio, Vudso-Saksono potencialo ir reliatyvistinių paklaidų. Atlikus Šredingerio lygties skaičiavimus yra gaunamas modelinis potencialas, kuriuo pasinaudojant randami reikalingi sprendiniai iš Vudso-Saksono potencialo skaičiavimų. Taip pat modelinis potencialas padeda nustatyti, kurie sprendiniai nėra tinkami jeigu elektringoji dalelė išlekia iš Vudso-Saksono potencialo ribų. Trečioji programos dalis įveda reliatyvistines masės pataisas ir taip patikslina gautus sprendinius. Galutiniai rezultatai išvedami vartotojui.

3.3.2. Taikomosios programos algoritmo pakeitimai

Įvykdomi Šredingerio lygties modelinio potencialo pakeitimai ir pakeičiami Vudso-Saksono potencialo parametrai prieš įvedant reliatyvistines paklaidas.



9 pav. Šredingerio lygties pakeitimas

```

FUNCTION OS02(N,R,EFS)
REAL J
COMMON VON,VOP,RAN,RAP,AN,AP,C,C1,C2,C3,C5,L,L1,
        J,KR,PIE4,FM,EL,TMAS,OMO,XO,V01,B0
C0=C*FM*FM
S=1
EP=2*(N-1)+L+1.5
A=1.0
SI=C0*R*R
I=0
I=I+1
A=A*(I-1-0.5*(EP+L-0.5))/(I*(I-0.5-L))
A=A*SI
S=S+A
IF(ABS(A) .LT. ABS(S)*1.E-41) GOTO 20
GOTO 10
S=S*SI**(-0.5*L)
IF(R.LT.1.) S=S*SI**(-0.5*(L1-L))
IF(0.5*SI .LT.200.) GOTO 30
OS02=0.
GOTO 40
OS02=S*EXP(-0.5*SI)
RETURN
END

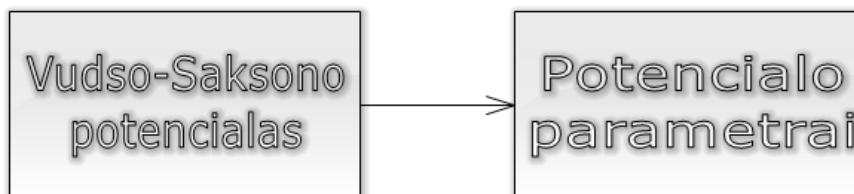
```

```

FUNCTION POT(R)
REAL J
COMMON VON,VOP,RAN,RAP,AN,AP,C,C1,C2,C3,C5,L,
        L1,J,KR,PIE4,FM,EL,TMAS,OMO,XO,V01,B0
IF (KR .NE. 0) GO TO 10
POT=-VON*C5*EL/(1+EXP(AN*(R-RAN)))
GO TO 30

```

10 pav. Šredingerio lygtis



11 pav. Vudso-Saksono potencialo pakeitimas

Saxon-Woods ir kuloninio potencialu ivestine

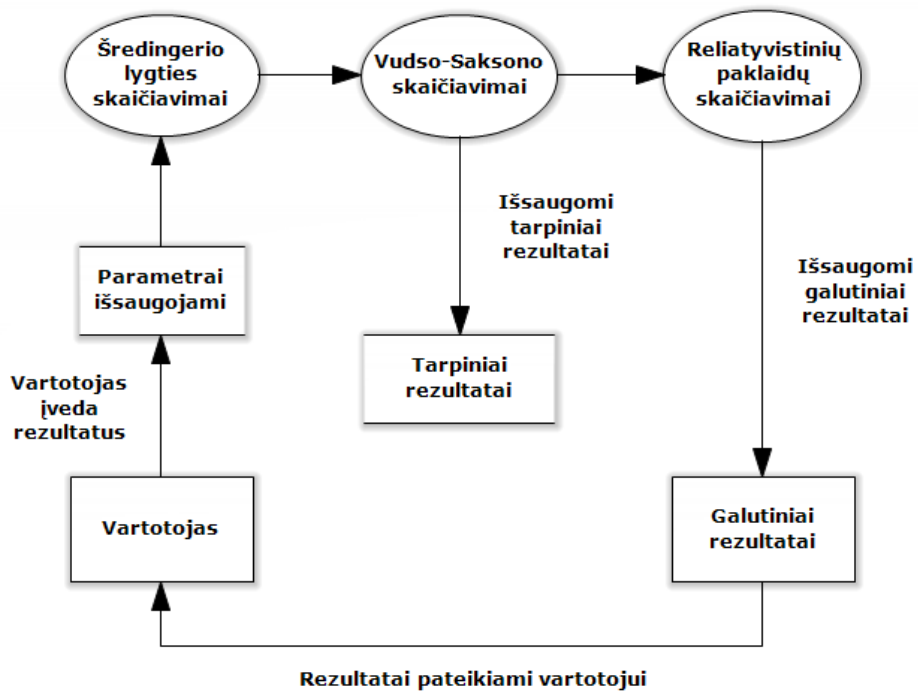
```

FUNCTION DPOT(R)
REAL J
COMMON VON,VOP,RAN,RAP,AN,AP,C,C1,C2,C3,C5,L,
        L1,J,KR,PIE4,FM,EL,TMAS,OMO,XO,V01,B0
IF (KR .NE. 0) GO TO 10
DN=-VON*EL/(1+EXP(AN*(R-RAN)))
DPOT=DN*(-DN/(EL*VON)-1)*AN
GO TO 30
DP=-VOP*EL/(1+EXP(AP*(R-RAP)))
DPOT=DP*(-DP/(EL*VOP)-1)*AP
IF (R .GT. RAP) GO TO 20
DPOT=DPOT-((KR-1)/(PIE4*RAP*FM))*(R/RAP)*(EL/RAP)*EL
GO TO 30
DPOT=DPOT-((KR-1)/(PIE4*R*FM))*(EL/R)*EL
RETURN
END

```

12 pav. Vudso-Saksono potencialas

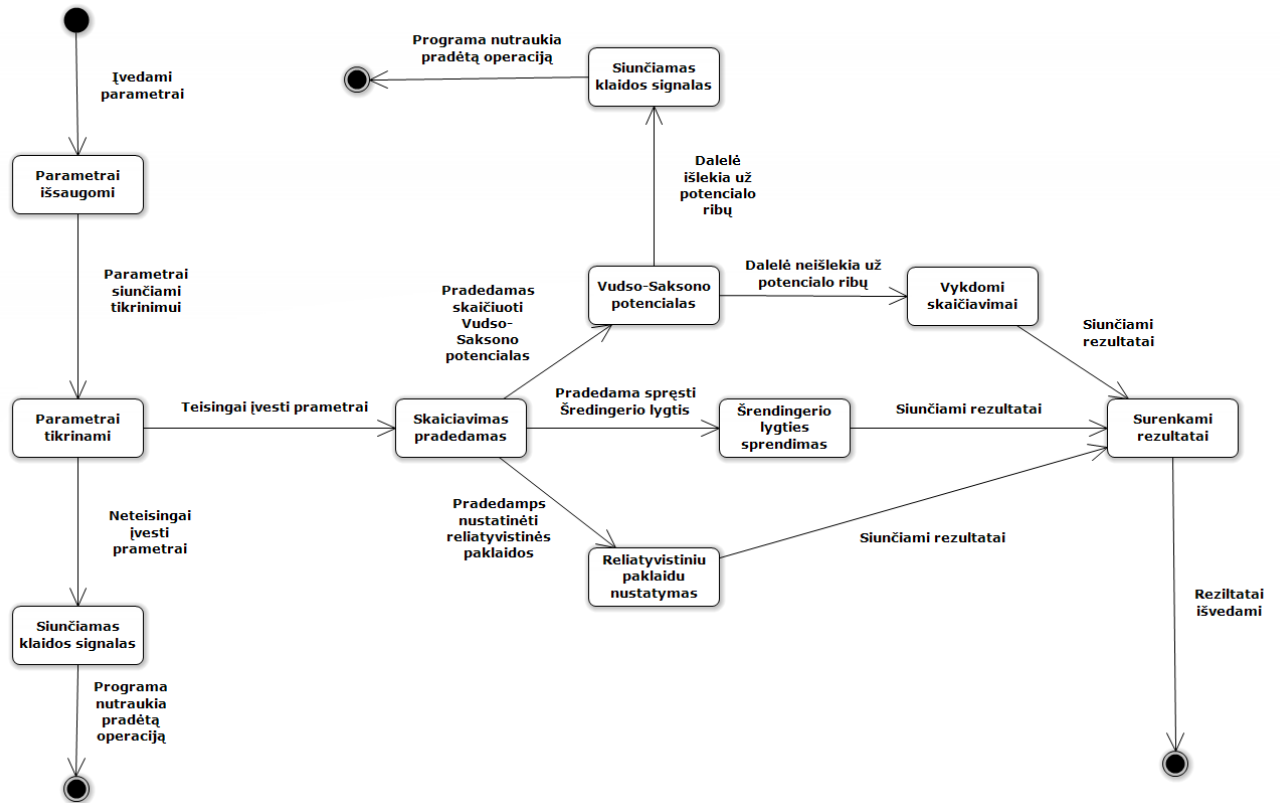
3.3.3. Duomenų srauto diagrama



13 pav. Duomenų srauto diagrama

Vartotojui įvedus parametrus, jie išsaugomi programoje. Atlikus Šredingerio lygties ir Vudso-Saksono skaičiavimus, tarpiniai rezultatai išsaugomi prieš taikant reliatyvistinių paklaidų skaičiavimus. Atlikus reliatyvistinių paklaidų taikymą, galutiniai rezultatai išsaugomi ir pateikiami vartotojui.

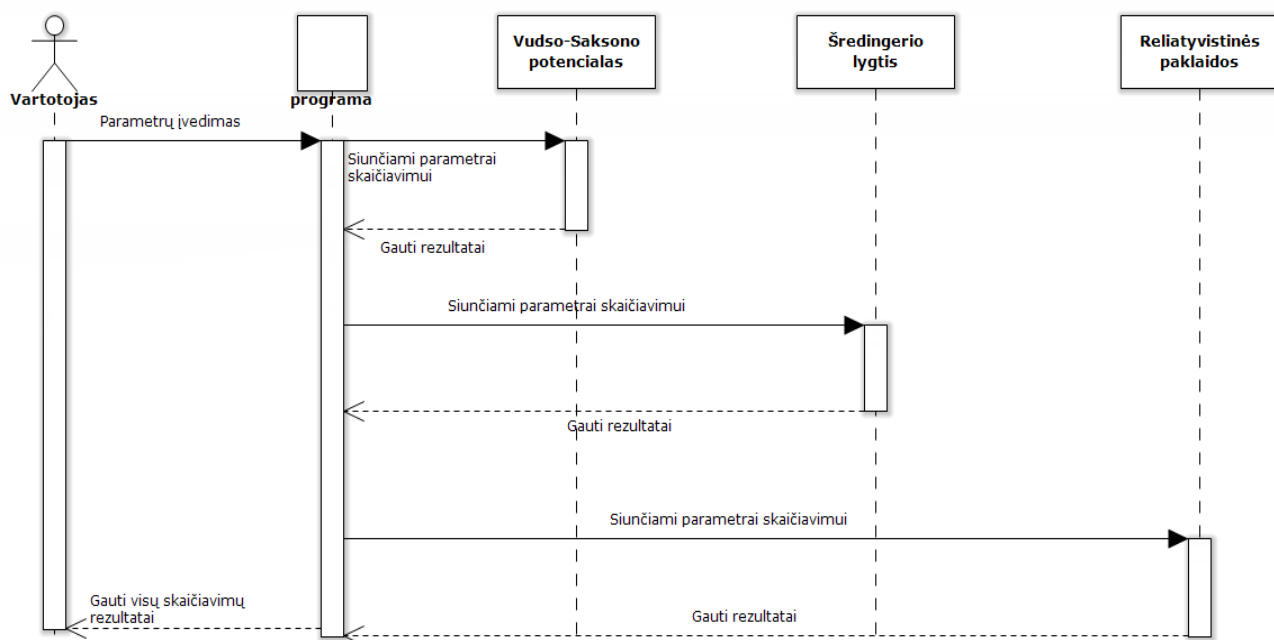
3.3.4. Būsenos diagrama



14 pav. Būsenos diagrama

Vartotojas suveda parametrus į programą. Suvedus parametrus programa atlieka parametru patikrinimą ir jeigu parametrai netinkami, neteisingai įvesti, programa informuoja vartotoją apie klaidą ir nevykdo tolesniu veiksmų. Teisingai įvedus reikalingus duomenis, po patikrinimo programa padeda skaičiavimus. Šredingerio lygtimi gautu modeliniu potencialu nustatoma ar yra tinkamų sprendinių. Jeigu sprendinių negauta programa informuoja vartotoją, kad su naudojamais parametrais dalelių Vudso-Saksono potenciale nėra – jos išlekia už jo ribų. Gavus tinkamus Vudso-Saksono potencialo sprendinius, pritaikant Šredingerio lygties modelinį potencialą, įvedamos reliatyvistinės masės pataisos. Atlikus skaičiavimus vartotojui pateikiami parametrai su pritaikytomis reliatyvistinėmis masės pataisomis.

3.3.5. Sekų diagrama



15 pav. Sekų diagrama

Sekų diagramos iliustruojamoje sekoje matyti, kad programa pirmiausia atlieka Vudso-Saksono skaičiavimus. Paskui atlikus Šredingerio lygties skaičiavimus gaunamas modelinis potencialas. Pritaikius modelinį potencialą Vudso-Saksono potencialo sprendiniams atmetami netinkami sprendiniai. Atrinktiems tinkamiems sprendiniams pritaikomos reliatyvistinės masės pataisos ir tada galutiniai skaičiavimų rezultatai yra pateikiami vartotojui.

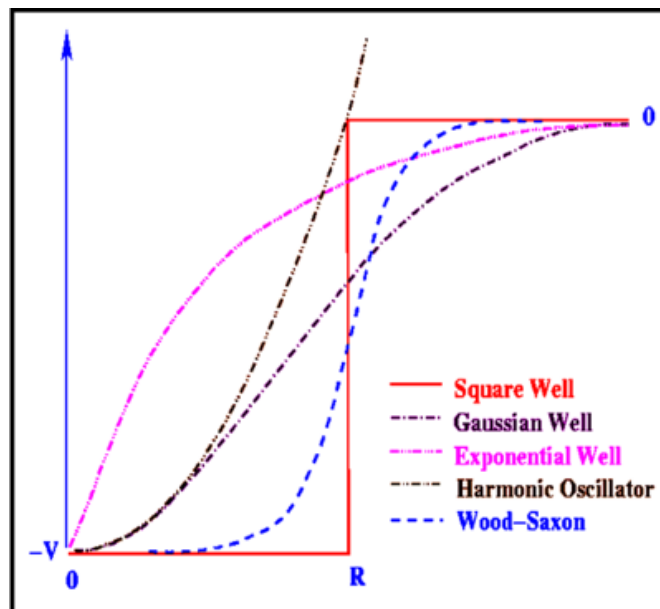
IV. Darbo eigos aprašymas

1. Problemų ir jų sprendimų aprašymai ir pagrindimai

Norint sudaryti pusiau reliatyvistinį atomo branduolio modelį, mes privalome vadovautis branduolinių potencialu, kuris dažniausiai vaizduojamas kaip sferiškai simetriška stačiakampė duobė arba harmoninis osciliatorius.

Mokslininkų A.Sobiczewski ir V.G.Soloviev(В.Г.СОЛОВЬЕВ) eksperimentai, tyrinėjantys nukleonų išsklaidymą branduoliuose, atskleidžia, kad lengviems ir sunkiems branduoliams aprašyti reikalingi skirtingi metodai. Lengviems - harmoninis osciliatorius, o sunkiems - stačiakampės duobės potencialas.

Kadangi realus branduolio potencialas privalo atitikti šias sąlygas: privalo būti baigtinis, jo riba neapibrėžta, priklausomybė nuo spindulio turi būti tarpinė tarp stačiakampės duobės ir harmoninio osciliatoriaus potencialų, o vidutinis branduolinis potencialas taip pat turi priklausyti nuo greičio, mums reikia sukurti potencialo algoritmą, kuris taip pat atitiktų visas šias sąlygas. Kadangi vidutinis potencialas priklauso nuo greičio, ši priklausomybė dažniausiai įeina į nukleono masės kinetinę energiją ir pakeičia į efektyvią masę. Esant tokiam atvejui, toks branduolinis potencialas išlieka statiškas. Tad rašydami algoritmą turime atsižvelgti į reliatyvistines masės pataisas.



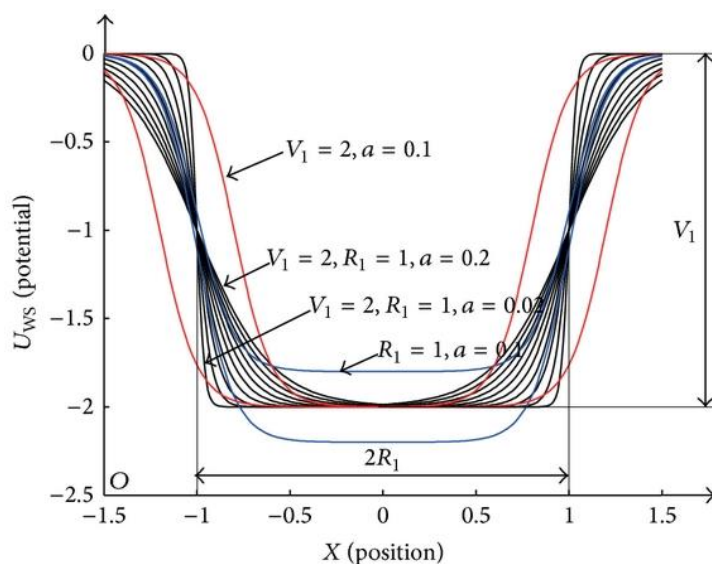
16 pav. Potencialų palyginimas

Dėl šių priežasčių pusiau reliatyvistinio atomo branduolio modelio vaizdavimui buvo pasirinktas Vudso-Saksono potencialas.

Vudso-Saksono potencialo parametrai nėra universaliai suderinti įvairių elementų pusiau reliatyvistiniams branduolių modeliams skaičiuoti. Šios problemos sprendimui, sudarant branduolio modelio potencialo algoritmą, buvo pasirinktas metodas įtraukti į Vudso-Saksono potencialo algoritmą Šredingerio lygties modelinį potencialą, kuris gaunamas atlikus sudėtingus skaičiavimus.

Vien tik Vudso-Saksono potencialui pritaikius Šredingerio lygties modelinį potencialą nepakanka tiksliai apskaičiuoti branduolių energijų vertes, nes egzistuoja vidutinio potencialo priklausomybė nuo greičio. Todėl privalome į algoritmą įtraukti reliatyvistinių masės paklaidų skaičiavimus branduolio masei ir dalelės energijai (3.5).

Į pusiau reliatyvistinio branduolio modelio Vudso-Saksono potencialo algoritmą įtraukus Šredingerio lygties modelinį potencialą ir reliatyvistines pataisas gautas optimizuotas Vudso-Saksono potencialas, kuris tinka tiek sunkiesiems, tiek lengviesiems branduoliams (17 pav.).



17 pav. Optimizuotas Vudso-Saksono potencialas

2. Taikomosios programos testavimas

2.1. Testavimo tikslas

Testuojami programos gaunami pradinių atomo branduolio lygių rezultatai lyginant su bakalauro darbo eksperimentų rezultatais. Siekiama išsiaiškinti ar programa tinkamai apskaičiuoja artimuosius branduolių energetinius lygmenis.

2.2. Pradiniai duomenys

Atomo branduolio pirminiai nukleonų energetiniai lygmenys Nlj ($2d_{3/2}$, $3s_{1/2}$, $3p_{3/2}, \dots$). Testavimo rezultatai pateikiami 1 ir 2 lentelėse.

2.3. Gautų ir laukiamų rezultatų palyginimas

1 lentelė. Pusiau reliatyvistiniai protonų energijos E_{nlj}^p lygmenys nlj ir reliatyvistinės pataisos masei E_m^p supersunkiam branduoliui ${}^{208}_{82}Pb$.

| Nlj | Laukiami Rezultatai | | Gauti rezultatai | |
|--------------------------------------|---------------------|---------------|-------------------|---------------|
| | E_{nlj}^p , MeV | E_m^p , MeV | E_{nlj}^p , MeV | E_m^p , MeV |
| Protono skylė (${}^{207}_{81}Tl$) | | | | |
| 2d _{3/2} | -8,36 | -0,3334 | -8,36 | -0,3529 |
| 3s _{1/2} | -8,22 | -0,3930 | -7,99 | -0,3205 |
| Protono dalelė (${}^{209}_{83}Bi$) | | | | |
| 3p _{3/2} | -0,75 | -0,5644 | -0,60 | -0,3822 |
| 3p _{1/2} | -0,17 | -0,4078 | -0,19 | -0,4125 |

2 lentelė. Pusiau reliatyvistiniai neutronų energijos E_{nlj}^n lygmenys nlj ir reliatyvistinės pataisos masei E_m^n supersunkiam branduoliui ${}^{208}_{82}Pb$.

| Nlj | Laukiami rezultatai | | Gauti rezultatai | |
|---------------------------------------|---------------------|---------------|-------------------|---------------|
| | E_{nlj}^n , MeV | E_m^n , MeV | E_{nlj}^n , MeV | E_m^n , MeV |
| Neutrono skylė (${}^{207}_{82}Pb$) | | | | |
| 2f _{5/2} | -8,00 | -0,4564 | -8,01 | -0,4198 |
| 3p _{1/2} | -7,37 | -0,4489 | -7,37 | -0,4385 |
| Neutrono dalelė (${}^{209}_{82}Pb$) | | | | |
| 2g _{7/2} | -1,52 | -0,8013 | -1,45 | -0,6072 |
| 3d _{3/2} | -1,47 | -0,4770 | -1,32 | -0,4396 |

2.4. Testavimo išvados

Gauti pradinių lygių rezultatai sutampa arba beveik sutampa su pradiniais eksperimentiniais rezultatais. Reliatyvistinės masės paklaidos yra labai panašios su pradinių duomenų, prie artimų atomo sluoksnių. Taigi, atsižvelgiant į gautus testavimo rezultatus, galima teigti, kad programa veikia tinkamai.

3. Branduolių energetinių sluoksnių tyrimas

3.1. Tyrimo tikslas

Tiriami programos gaunami rezultatai lyginant juos su bakalauro darbo eksperimentų rezultatais.

3.2. Tyrimo pradiniai duomenys

Dviejų elementų (švino ir alavo) atomų branduolių nukleonų energetiniai lygmenys Nlj (1g_{7/2}, 2d_{5/2}, 1h_{11/2},...). Tyrimo rezultatai pateikiami 7-10 lentelėse.

3.3. Laukiami rezultatai

3 lentelė. Pusiau reliatyvistiniai protonų energijos E_{nlj}^p lygmenys nlj ir reliatyvistinės pataisos masei E_m^p super-sunkiam branduoliui ${}^{208}_{82}Pb$.

| Nlj | $E_{nlj}^p, \text{ MeV}$ | $E_m^p, \text{ MeV}$ |
|--------------------------------------|--------------------------|----------------------|
| Protono skylė (${}^{207}_{81}Tl$) | | |
| $1g_{7/2}$ | -11,93 | -0,2840 |
| $2d_{5/2}$ | -10,46 | -0,3155 |
| $1h_{11/2}$ | -9,43 | -0,4350 |
| $2d_{3/2}$ | -8,36 | -0,3334 |
| $3s_{1/2}$ | -8,22 | -0,3930 |
| Protono dalelė (${}^{209}_{83}Bi$) | | |
| $1h_{9/2}$ | -3,97 | -0,4107 |
| $2f_{7/2}$ | -2,96 | -0,4423 |
| $1i_{13/2}$ | -2,13 | -0,4167 |
| $2f_{5/2}$ | -1,09 | -0,1478 |
| $3p_{3/2}$ | -0,75 | -0,5644 |
| $3p_{1/2}$ | -0,17 | -0,4078 |

4 lentelė. Pusiau reliatyvistiniai neutronų energijos E_{nlj}^n lygmenys nlj ir reliatyvistinės pataisos masei E_m^n super-sunkiam branduoliui ${}^{208}_{82}Pb$.

| Nlj | $E_{nlj}^n, \text{ MeV}$ | $E_m^n, \text{ MeV}$ |
|---------------------------------------|--------------------------|----------------------|
| Neutrono skylė (${}^{207}_{82}Pb$) | | |
| $1h_{9/2}$ | -10,77 | -0,8800 |
| $1f_{7/2}$ | -10,64 | -0,4144 |
| $1i_{13/2}$ | -9,69 | -0,4776 |
| $3p_{3/2}$ | -8,31 | -0,5450 |
| $2f_{5/2}$ | -8,00 | -0,4564 |
| $3p_{1/2}$ | -7,37 | -0,4489 |
| Neutrono dalelė (${}^{209}_{82}Pb$) | | |
| $2g_{9/2}$ | -4,07 | -0,5583 |
| $1i_{11/2}$ | -3,10 | -0,6491 |
| $1j_{15/2}$ | -2,64 | -0,5136 |
| $2d_{5/2}$ | -2,22 | -0,5265 |
| $4s_{1/2}$ | -1,64 | -0,1644 |
| $2g_{7/2}$ | -1,52 | -0,8013 |
| $3d_{3/2}$ | -1,47 | -0,4770 |

5 lentelė. Protonų būsenų nlj pusiau reliatyvistinė energija E_{nlj}^p ir reliatyvistinės pataisos E_m^p branduoliui $^{132}_{50}\text{Sn}$.

| Nlj | E_{nlj}^p , MeV | E_m^p , MeV |
|---|-------------------|---------------|
| Protono skylė ($^{131}_{49}\text{In}$) | | |
| 2p _{1/2} | -16,25 | -0,3266 |
| 1g _{9/2} | -15,78 | -0,3514 |
| Protono dalelė ($^{133}_{51}\text{Sb}$) | | |
| 1g _{7/2} | -9,5 | -0,4784 |
| 2d _{5/2} | -8,86 | -0,4036 |
| 2d _{3/2} | -6,87 | -0,4327 |
| 1h _{11/2} | -6,85 | -0,4780 |

6 lentelė. Neutronų būsenų nlj pusiau reliatyvistinė energija E_{nlj}^n ir reliatyvistinės pataisos E_m^n branduoliui $^{132}_{50}\text{Sn}$.

| Nlj | E_{nlj}^n , MeV | E_m^n , MeV |
|--|-------------------|---------------|
| Neutrono skylė ($^{131}_{50}\text{Sn}$) | | |
| 1g _{7/2} | -9,44 | -0,3863 |
| 2d _{5/2} | -9,01 | -0,3530 |
| 3s _{1/2} | -7,73 | -0,4136 |
| 1h _{11/2} | -7,55 | -0,5829 |
| 2d _{3/2} | -7,32 | -0,3987 |
| Neutrono dalelė ($^{133}_{50}\text{Sn}$) | | |
| 2f _{7/2} | -2,37 | -0,4603 |
| 3p _{3/2} | -1,65 | -0,3869 |
| 1h _{9/2} | -0,85 | -0,4393 |
| 2f _{5/2} | -0,73 | -0,4116 |

3.4. Gauti rezultatai

7 lentelė. Pusiau reliatyvistiniai protonų energijos E_{nlj}^p lygmenys nlj ir reliatyvistinės pataisos masei E_m^p super-sunkiam branduoliui $^{208}_{82}\text{Pb}$.

| Nlj | E_{nlj}^p , MeV | E_m^p , MeV |
|---|-------------------|---------------|
| Protono skylė ($^{207}_{81}\text{Tl}$) | | |
| 1g _{7/2} | -12,02 | -0,2811 |
| 2d _{5/2} | -10,03 | -0,3155 |
| 1h _{11/2} | -9,30 | -0,4233 |
| 2d _{3/2} | -8,36 | -0,3529 |
| 3s _{1/2} | -7,99 | -0,3205 |
| Protono dalelė ($^{209}_{83}\text{Bi}$) | | |
| 1h _{9/2} | -3,82 | -0,4197 |
| 2f _{7/2} | -2,96 | -0,3953 |
| 1i _{13/2} | -2,08 | -0,3127 |
| 2f _{5/2} | -1,01 | -0,2138 |
| 3p _{3/2} | -0,60 | -0,3822 |
| 3p _{1/2} | -0,19 | -0,4125 |

8 lentelė. Pusiaus reliatyvistiniai neutronų energijos E_{nlj}^n lygmenys nlj ir reliatyvistinės pataisos masei E_m^n supersunkiam branduoliui ${}^{208}_{82}Pb$.

| nlj | E_{nlj}^n , MeV | E_m^n , MeV |
|---------------------------------------|-------------------|---------------|
| Neutrons skyelė (${}^{207}_{82}Pb$) | | |
| 1h _{9/2} | -11,67 | -0,5528 |
| 1f _{7/2} | -9,77 | -0,3682 |
| 1i _{13/2} | -9,38 | -0,3725 |
| 3p _{3/2} | -8,21 | -0,3877 |
| 2f _{5/2} | -8,01 | -0,4198 |
| 3p _{1/2} | -7,37 | -0,4385 |
| Neutrons dalelė (${}^{209}_{82}Pb$) | | |
| 2g _{9/2} | -3,90 | -0,4286 |
| 1i _{11/2} | -3,18 | -0,5228 |
| 1j _{15/2} | -2,55 | -0,4968 |
| 2d _{5/2} | -2,30 | -0,5199 |
| 4s _{1/2} | -1,82 | -0,2796 |
| 2g _{7/2} | -1,45 | -0,6072 |
| 3d _{3/2} | -1,32 | -0,4396 |

9 lentelė. Protonų būsenų nlj pusiaus reliatyvistinė energija E_{nlj}^p ir reliatyvistinės pataisos E_m^p branduoliui ${}^{132}_{50}Sn$.

| nlj | E_{nlj}^p , MeV | E_m^p , MeV |
|--------------------------------------|-------------------|---------------|
| Protono skyelė (${}^{131}_{49}In$) | | |
| 2p _{1/2} | -16,05 | -0,4852 |
| 1g _{9/2} | -15,70 | -0,4214 |
| Protono dalelė (${}^{133}_{51}Sb$) | | |
| 1g _{7/2} | -9,61 | -0,4213 |
| 2d _{5/2} | -8,75 | -0,4695 |
| 2d _{3/2} | -6,92 | -0,4229 |
| 1h _{11/2} | -6,88 | -0,5120 |

10 lentelė. Neutronų būsenų nlj pusiaus reliatyvistinė energija E_{nlj}^n ir reliatyvistinės pataisos E_m^n branduoliui ${}^{132}_{50}Sn$.

| nlj | E_{nlj}^n , MeV | E_m^n , MeV |
|---------------------------------------|-------------------|---------------|
| Neutrons skyelė (${}^{131}_{50}Sn$) | | |
| 1g _{7/2} | -9,69 | -0,3714 |
| 2d _{5/2} | -8,92 | -0,3811 |
| 3s _{1/2} | -7,62 | -0,3971 |
| 1h _{11/2} | -7,52 | -0,4715 |
| 2d _{3/2} | -7,32 | -0,3256 |
| Neutrons dalelė (${}^{133}_{50}Sn$) | | |
| 2f _{7/2} | -2,39 | -0,3817 |
| 3p _{3/2} | -1,62 | -0,4262 |
| 1h _{9/2} | -0,89 | -0,4127 |
| 2f _{5/2} | -0,62 | -0,5622 |

3.5. Tyrimo išvados

Gauti rezultatai sutampa arba beveik sutampa su pradiniais eksperimentiniais rezultatais. Reliatyvistinės masės paklaidos yra labai panašios su pradinių duomenų, prie artimų atomo sluoksnių, tačiau mažesnės prie tolimųjų lygių h , i ir j . Taigi galima teigti, kad rezultatai gauti skaičiuojant tolimuosius atomo branduolio energijos lygmenis yra tikslesni negu pradinių duomenų.

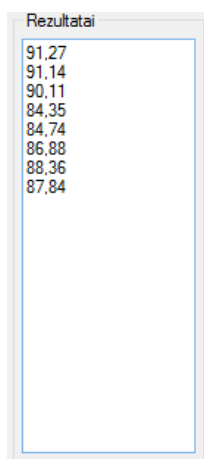
4. Galutinio projekto būsenos aprašymas

Sukurta pusiau reliatyvistinis branduolio modelį realizuojanti programa, kuri suteikia vartotojui galimybę įvedant branduolinius parametrus atlikti visus branduolinius energijos skaičiavimus. Modelis pateikia vartotojui, kai kurių parametru rekomenduojamas vertes, kad būtų sutaupoma laiko.

Modelis gali interpoliuoti gautus rezultatus, kurie automatiškai atrenkami iš skaičiavimų rezultatų, ir brėžti grafikus reikalingus moksliniams tyrimams.

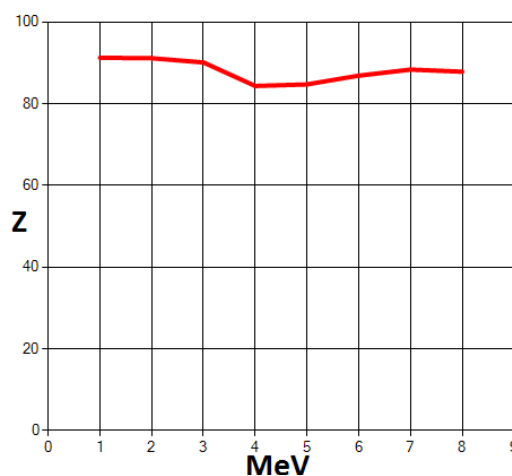
Gaunami rezultatai išsaugomi duomenų faile tolesniems tyrimams.

Interpoliuojant gautus rezultatus, galima gauti kitų elementų branduolių dalelių parametrus.:



| Rezultatai |
|------------|
| 91,27 |
| 91,14 |
| 90,11 |
| 84,35 |
| 84,74 |
| 86,88 |
| 88,36 |
| 87,84 |

18 pav. Interpoliacijos rezultatai



19 pav. Interpoliacijos grafikas

Suinterpoliavus gautus rezultatus dvejims branduoliams ($Z=50$ ir $Z=114$), bandyta nustatyti trečią elementą. Kaip pateikiama, 18 ir 19 paveikslėliuose, aiškiai matyti, kad gautos reikšmės yra labai artimos skaičiui 90, kuris nusako paskutinįjį Švino branduolio uždaraį sluoksnį. Taigi iš gautų rezultatų galima spręsti jog darbe iškelta hipotezė jog interpoliuojant gautas branduolinių energijų vertes, galima rasti tiriamos medžiagos neutronų skaičių ir nustatyti, kokia tai medžiaga, yra patvirtinta. Iš čia galime daryti išvadą jog parinktas skaičiavimų algoritmas yra teisingas ir programa tinkamai veikia.

5. Darbo rezultatų analizė

Atlikus modelio programos testavimą ir palyginus gautus rezultatus kitų mokslininkų gautais rezultatais buvo nustatyta, kad modelis, su naujai parinktais Šredingerio lygties modeliniu potencialu ir Vudso-Saksono potencialo parametrų moduliu nepaprastai tiksliai apskaičiuoja gaunamas branduolinių energijų vertes. Programoje realizuotos galimybės:

- Realizuoti Šredingerio lygties sprendimo ir Vudso-Saksono potencialo skaičiavimo algoritmo pakeitimai, kurie suteikia galimybę tiksliau apskaičiuoti branduoliu energijos lygmenų vertes prie nutolusių lygmenų h , i ir j .
- Realizuota galimybė skaičiavimų duomenis išsaugoti tolimesniems moksliniams tyrimams.
- Realizuota galimybė interpoliuoti dviejų branduolių energijų vertes ir nustatyti trečiojo (ieškomo) branduolio dalelių skaičių ir nustatyti medžiagą.
- Realizuota galimybė nubrėžti interpoliuotų dalelių skaičių priklausomybės nuo energijos lygmenų grafiką.

6. Patarimai, pastebėjimai ir rekomendacijos

1. Programą naudoti gali asmenys išmanantys arba studijuojantys branduolinę fiziką.
2. Programos naudojimui būtina žinoti kai kuriuos pagrindinius branduolių parametrus.
3. Programa gali būti plečiama ir tobulinama, kad su ja būtų galima atlikti daugiau įvairių skaičiavimų reikalingų moksliniams tyrimams.

V. Išvados

1. Atlikus programos testavimą galima teigti, kad matematinio modelio realizavimas yra teisingas.
2. Į matematinį modelį įtraukus reliatyvistines pataisas, apskaičiuotos reikšmės yra tikslesnės už hipotetinius teorinius rezultatus, todėl galima teigti, kad modelio patikslinimas pasiteisino.
3. Pusiau reliatyvistinis atomo branduolio modelis suteikia galimybę patikslinti atomo branduolio viendalelių energijų reikšmes ir eksperimentus, nustatant viendalelių būsenų energijas.
4. Remiantis testavimo išvadomis galima teigti, kad rezultatai gauti skaičiuojant tolimuosius atomo branduolio energijos lygmenis h , i ir j yra tikslesni.
5. Atliekant eksperimentą su sukurta programine įranga, nustatyta:
 - Hipotezė, kad interpoliuojant gautas branduolinių energijų vertes, galima rasti tiriamos medžiagos neutronų skaičių ir nustatyti, kokia tai medžiaga – pasiteisino. Suinterpoliavus gaunamas skaičius atitinka arba yra labai arti uždarojo nukleonų sluoksnio, to elemento, kurį norėta rasti.
 - Įskaičius reliatyvistines nukleonų masės pataisas, žymiai pagerinamas sluoksninis atomo branduolio modelis ir jo sutapimas su eksperimentais.

VI. Literatūra

1. Соловьев, В.Г., *Теория атомного ядра Ядерные модели*. Москва. 1985.[1]
2. Enge, H.A., *Introduction to nuclear physics*. 1966.[2]
3. Poškus, A., *Atomo fizika ir branduolio fizikos eksperimentiniai metodai*. Vilnius. 2008.[3]
4. Sobiczewski, A., *Heavy and super-heavy atomic nuclei*. The old and new concepts of Physics. 2008.[4]
5. Janavičius, A.J., Jurgaitis, D., Turskienė, S., *Potential representation method for schriodinger equation*. Mathematical modelling and analysis. Šiauliai. 2011.[5]
6. Hofmann, S., Munzenberg, G., *The discovery of the heaviest elements*. 2000.[6]
7. Janavičius, A.J., *Mathematical Methods in the Semi-relativistic Single-particle Model for Superheavy Nuclei*. Proceedings vol. 3. Orlando, Florida. 2006.[7]
8. Janavičius, A.J., *Shell stability of heaviest atomic nuclei in the semi-relativistic model*. Lithuanian journal of physics Journal of physics. Šiauliai. 2001.[8]
9. Oganessian, Y., *Synthesis and decay properties of the heaviest nuclei*. 2006. [9]
10. Schwierz, N., Wiedenhover, I., Volya, A., *Parameterization of the Woods-Saxon Potential for Shell-Model Calculations*. Florida. 2008.[10]
11. Savčiukas, T., *Reliatyvistinių pataisų įtaka branduolių stabilumui*. 2010.[11]
12. Janavičius, A.J., Bakštys, A., *Relativistic Corrections to the one-nucleon energy levels of ^{208}Pb* . Acta physica polonica B, vol. 24. Šiauliai. 1993.[12]
13. Janavičius, A.J., Jurgaitis, D., Korsakienė, D., *Integral-differential equalations for semi-relativistic nuclear shell model*. Acta physica polonica B, vol. 35. 2003.[13]
14. Liran, S., Marinov, A., Zeldes, N., *Semiempirical shell model masses with magic number $Z=126$ for superheavy elements*. Physical review C, vol. 62. Israel. 2000.[14]
15. Kalinkin, B.N., Gareev, F.A., *Synthesis of superheavy elements and theory of atomic nucleus*. Russia. 2001.[15]
16. Juodis, V., *Vudso-Saksono potencialo parametrai pusiau reliatyvistiniam branduolio modeliui.*, Bakalauro darbas, Lietuva. 2013.[16]
17. Sharp, J., *Microsoft Visual C# 2013 Step by Step.*, 2015.[17]
18. Chapman, S., *Fortran 95/2003 for Scientists & Engineers.*, 2007.[18]
19. Pender, R., *UML Bible.*, 2003[19]
20. Lawrence, N., *Compaq Visual Fortran: A Guide to Creating Windows Applications.*, 2001.[20]
21. Snell, M., *Microsoft Visual Studio 2010 Unleashed.*, 2011.[21]

VII. Anotacija

Žemėje kasdien bandoma atrasti vis daugiau naujų izotopų, tačiau tyrimai ir ieškojimai yra labai brangūs, todėl vis daugiau mokslininkų kuria modelius, kurie padėtų apskaičiuoti masyvių branduolių stabilumą. Darbe apžvelgiamas viendalelis sluoksninis branduolio modelis ir jo tyrimo metodika su Vudso-Saksono potencialu, taip pat nustatomi nauji universalesni Vudso-Saksono potencialo parametrai. Darbą sudaro:

- Įvadas;
- Literatūros apžvalga;
- Programos realizuojančios pusiau reliatyvistinio atomo branduolio modelį;
- Tiriamasis darbas;
- Išvados.

Sukūrus programą ir atlikus skaičiavimus buvo padaryta tokia išvada, kad reliatyvistinės pataisos daro didelę reikšmę masyvių branduolių stabilumui.

Annotation

Earth's daily attempt to find more isotopes, but the researches and searches are very costly, so an increasing number of researchers designed models to calculate the massive nuclear stability. In this work we will review one-nucleon shell model and its way of research – Woods-Saxon potential, also there will be optimized new universal parameters of Woods-Saxon potential. The work consists of:

- Introduction;
- Reviewing the literature;
- Creation of a program that realizes semi-relativistic model of the atomic nucleus;
- Test work;
- Conclusion.

After creating a program and calculations, it was concluded that the relativistic corrections of great importance to the stability of massive nuclei.

VIII. Priedai

1. Pagrindinės formulės ir pagrindinė teorija

1.1. Viendalelis sluoksninis branduolio modelis

$$V(r_1 - r_2) = -V_0 \exp\left[-\frac{|r_1 - r_2|^2}{\mu^2}\right]. \quad (1.1)$$

$$\int \exp[-i(p'_1 r_1 + p'_2 r_2)] V(r_1 - r_2) \exp(p_1 r_1 + p_2 r_2) (dr_1)(dr_2). \quad (1.2)$$

$$\begin{aligned} -V_0 \int (dr) \exp(ipr) \exp\left(-\frac{r^2}{\mu^2}\right) &= -V_0 \int (dr) \exp\left[-\frac{\left(r + \frac{ip\mu^2}{2}\right)^2}{\mu^2}\right] \exp\left(-\frac{p^2\mu^2}{4}\right) = \\ &= -\pi^{3/2} \mu^3 V_0 \exp\left(-\frac{p^2\mu^2}{4}\right). \end{aligned} \quad (1.3)$$

$$V(r) = \frac{m\omega_0^2 r^2}{2} - V_0, \quad (1.4)$$

$$\varphi_{n/m} = \frac{u_{nl}(r)}{r} Y_{lm}(\theta, \varphi), \quad (1.6)$$

$$\left\{ -\frac{\hbar}{2m} \frac{d^2}{dr^2} + V(r) + \frac{1}{2m} \frac{l(l+1)}{r^2} - E \right\} u_{nl} = 0. \quad (1.7)$$

$$E_n = \left(N + \frac{3}{2}\right) \omega_0 - V_0, \quad (1.8)$$

$$n_N = \sum_1 2(2l+1) = (N+1)(N+2). \quad (1.9)$$

$$\sum_N n_N = \frac{(N_0+1)(N_0+2)(N_0+3)}{3}. \quad (1.10)$$

$$u_{nl}(r=0) = 0, \quad u_{nl}(r \rightarrow \infty) \rightarrow 0. \quad (1.11)$$

$$u_{nl}(r) = N_{nl} \exp\left(\frac{-m\omega_0 r^2}{2}\right) (r\sqrt{m\omega_0})^l \alpha_{n-1}^{l+\frac{1}{2}}(m\omega_0 r^2). \quad (1.12)$$

$$u_{nl}(r) \approx \exp\left(\frac{-m\omega_0 r^2}{2}\right) \Phi(r), \quad (1.13)$$

$$\sum_{i=1}^Z E_i + \sum_{i=1}^N E_i = m\omega_0^2 A \langle r^2 \rangle, \quad (1.14)$$

$$\omega_0 = 41A^{-1/3} \text{ MeV}. \quad (1.18)$$

$$V_{ls} = -V_{ls}(r)ls, \quad (1.19)$$

$$ls = \frac{1}{2} \{j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)\} \quad (1.20)$$

$$\Delta\varphi_{1s} \approx -20 \text{lsA}^{-2/3} \text{ MeV}. \quad (1.21)$$

$$\varphi_{nljm}(r, \theta, \varphi) = \frac{u_{nlf}(r)}{r} y_{ljm}(\theta, \varphi), \quad (1.22)$$

1.1.1. Dalelių poros banginė funkcija

Dalelių poros banginė funkcija yra labai panaši į laisvųjų dalelių poros banginę funkciją. Skirtumus galima pastebėti tada, kai atstumas tarp dalelių branduolyje pasidaro mažesnis už vidutinį atstumą. Dėl didelių atstumų, skirtumas tarp branduolinės ir laisvųjų dalelių sąveikos banginių funkcijų beveik išnyksta. Taip yra todėl, kai viena dalelė iš poros priartėja prie trečiosios dalelės iki susilietimo, atstumas tarp pradinių dalelių poroje yra d. Atstumui esant tokiam mažam, dviejų dalelių judėjimo banginė funkcija įgauna dalelių banginės funkcijos pavidalą. Dėl to dauguma susidūrimų, vyksta, lyg tarp pradinės dalelių poros ir kitų dalelių iš viso nebūtų. Šis reiškinys vyksta todėl, kad veikiant sąveikos jėgoms, banginės funkcijos formos pokytis yra pasunkinamas, nes visos Furijė kitmos lygmens esančios dalelės yra nepasiekiamos nagrinėjamai dalelei.[16]

Visos E_n reikšmės yra išsigimusios, jas atitinka po kelias savąsias funkcijas su skirtingomis l reikšmėmis.

Visas dalelių skaičius, užpildęs sluoksnius nuo $N = 0$ iki $N = N_0$, lygus:

$$\sum_N n_N = \frac{(N_0 + 1)(N_0 + 2)(N_0 + 3)}{3}. \quad (1.23)$$

Sluoksniai yra užpildyti, kai neutronų (protonų) skaičiai yra: 2, 8, 20, 40, 70, 112, 168 ir t. t. Jie (išskyrus pirmus tris) neatitinka magiškų skaičių: 2, 8, 20, 28, 50, 82, 126. Kadangi magiški skaičiai turi sutapti su užpildytais sluoksniais, o stačiakampės duobės sluoksnių skaičiai taip pat nesutampa, reikia modifikuoti vidutinį branduolio potencialą.

1.2. Vudso-Saksono potencialas sluoksniniam branduolio modeliui

$$V(r) = \frac{-V_0^{N,Z}}{[1 + \exp\{\alpha(r - R_0)\}]}, \quad (2.1)$$

$$V_{1s} = -k \frac{1}{r} \frac{dV(r)}{dr} (\text{ls}), \quad (2.2)$$

$$V_c(r) = \frac{(Z - 1)e^2}{r}. \quad (2.3)$$

$$V_c(r) = \frac{(Z - 1)e^2}{4\pi\epsilon_0 r} P, \quad P = \frac{3r}{2R} - \frac{1}{2} \left(\frac{r}{R}\right)^3, \quad r \leq R, \quad P = 1, \quad r > R. \quad (2.4)$$

$$V_D = V(r) + V_{sl}(r) - V_1(r) + \frac{C_1}{C} D(r) + C_1 r \left(\frac{d}{dr} V(r) \right) \frac{d}{dr} \frac{1}{r}, \quad (2.6)$$

$$V_1(r) = \frac{m\omega^2 r^2}{2}. \quad (2.7)$$

$$U_{nl} = e^{-0,5p} p^{0,5(l+1)} \sum_{k=0}^{n-1} a_k p^k, \quad p = \frac{m\omega r^2}{\hbar}, \quad n = 1, 2, 3, \quad (2.8)$$

$$F_{nl} = e^{-0,5p} p^{0,5l} \omega(p), \quad (2.9)$$

$$\omega = \sum_{k=0}^{\infty} b_k p^k, \quad b_{k+1} = \frac{k - 0,5(\varepsilon_{nl} + l - 0,5)}{(k+1)(k-l+0,5)} b_k, \quad b_0 = 1$$

$$E_{nl} = \varepsilon_{nl} \hbar \omega, \quad \varepsilon_{nl} = 2n + l - 0,5, \quad (2.10)$$

$$W_0 = (2l + 1) \left(\frac{m\varepsilon}{\hbar} \right)^{\frac{1}{2}}. \quad (2.11)$$

$$U_\alpha = \Phi_{2,nlj} U_{nl}. \quad (2.12)$$

$$\Phi_2 U_{nl} = U_{nl} + \frac{U_{nl}}{W_0} \int_0^r F_{nl} C V_\delta \Phi_2 U_{nl} dr_1 - \frac{F_{nl}}{W_0} \int_0^r U_{nl} C V_\delta \Phi_2 U_{nl} dr_1 \quad (2.14)$$

$$\Delta E_{nlj} = \frac{\int_0^\infty U_{nl} V_D \Phi_{2,nlj} U_{nl} dr_1}{\int_0^\infty U_{nl} \Phi_{2,nlj} U_{nl} dr_1}. \quad (2.15)$$

$$\omega_0 = 41 A^{\frac{1}{3}} \frac{\text{MeV}}{\hbar}. \quad (2.16)$$

$$u_q(r) \approx \exp\{-\sqrt{-E(q)}r\}, \quad (2.17)$$

$$u_q(r) \approx \sin\left\{\sqrt{E_q}r + \delta(q) - \frac{l\pi}{2}\right\}. \quad (2.18)$$

$$V = V_0 \left(1 \pm k \frac{(N-Z)}{A}\right). \quad (2.19)$$

Norint apskaičiuoti protonų sistemos lygius, vidutinio lauko potencialas turi būti papildytas kulono sąveika, kai sfera yra įkrauta ir vienu metu turi tokią formą:[16]

$$V_c(r) = \frac{(Z-1)e^2}{r}. \quad (2.20)$$

Kadangi pastarasis potencialas yra lėčiau tolstantis nuo branduolio negu osciliatorinis, jis yra tarp stačiakampės duobės ir osciliatorinio potencialų. Tyrinėjant branduolinių reakcijas labai svarbus yra branduolio ribos neapibrėžtumas. Kadangi veikia Kulono stūma, protonų potencialas yra gilesnis už neutronų potencialą ir turi Kulono barjerą branduolio išorėje. Kulono stūmos jėgų slopinimas branduolio viduje yra šio barjero susidarymo priežastis, kurį sukelia stipresnis traukos potencialas. Branduolio paviršiuje yra sukinio ir orbitos sąveikos maksimumas.

Kai pereinama, nuo harmoninio osciliatoriaus prie Vudso-Saksono potencialo, sluoksniai nesikeičia, nes jų padėtis priklauso panaudotų parametrų.[1,2]

Kulono potencialą užrašome šitokia forma:

$$V_c(r) = \frac{(Z-1)e^2}{4\pi\epsilon_0 r} P, \quad P = \frac{3r}{2R} - \frac{1}{2} \left(\frac{r}{R}\right)^3, \quad r \leq R, \quad P = 1, \quad r > R. \quad (2.21)$$

Lygindami reliatyvistines pataisas masei ir potencialui, pusiau reliatyvistinę lygtį užrašome šitokia forma:

$$V_D = V(r) + V_{sl}(r) - V_1(r) + \frac{C_1}{C} D(r) + C_1 r \left(\frac{d}{dr} V(r) \right) \frac{d}{dr} \frac{1}{r}, \quad (2.23)$$

Paskutiniai du lygties (2.5) nariai atspindi reliatyvistines pataisas nukleonų masei ir potencinei energijai. $V_1(r)$ yra vidutinio nukleonų lauko modelio potencialas: [7,8]

$$V_1(r) = \frac{m\omega^2 r^2}{2}. \quad (2.24)$$

Tiesiškai nepriklausomi nefizikiniai sprendiniai modelio potencialui (2.6)

$$F_{nl} = e^{-0,5p} p^{0,5l} \omega(p), \quad (2.25)$$

energijos tikrinės vertės[5]:

$$E_{nl} = \varepsilon_{nl} \hbar \omega, \quad \varepsilon_{nl} = 2n + l - 0,5, \quad (2.26)$$

ir Vronskianas yra

$$W_o = (2l + 1) \left(\frac{m\varepsilon}{\hbar} \right)^{\frac{1}{2}}. \quad (2.27)$$

$2p_{1/2}$ ir $1d_{5/2}$ – gilios susijusios būsenos, o $3s_{1/2}$ ir $1h_{11/2}$ – kvazisusijusios būsenos, dėl šios priežasties branduolio išorėje visų šių funkcijų elgesys yra nusakomas priklausomybe.[1,9]

Vudso-Saksono potencialo banginių funkcijų skaičiavimai atlikti daugelyje darbų ir palyginti su eksperimentais, apskaičiuojant viendaleles energijas. Skaičiavimai to dėka yra patikslinami Vudso-Saksono potencialo centrinei $V(r)$ ir sukinio-orbitos $V_l(r)$ dalims. Taip parinkti skirtingi parametrai α ir r_0 centrinėje ir sukinio-orbitos dalyse.[16]

Taigi Vudso-Saksono potencialo izosukinio priklausomybė yra:

$$V = V_o \left(1 \pm k \frac{(N-Z)}{A} \right). \quad (2.28)$$

Tarp sunkių ir lengvų branduolių, kurių $N = Z$, yra ryškus skirtumas.[10,15]

Sluoksniniai efektai gana tiksliai atsiskleidžiami eksperimentuose. Branduoliai, kurių reikšmės Z arba N lygios magiškiems skaičiams, yra su užpildytai sluoksniais, esant tam tikroms N ir Z reikšmėms. Dėl sluoksnių egzistavimo branduolyje egzistuoja ir branduolių ryšių energijų trūkiai. Šis pokytis taip pat pastebimas α ir β skilimų metu. Vykstant posluoksnių užpildymui, kai kuriais atvejais irgi pasireiškia nedidelės anomalijos ryšių energijos dydžiuose.[11]

1.3. Reliatyvistinės pataisos nukleonų masei

$$\hat{H}_r = \hat{H}_m + \frac{\hat{p}^2}{2m} + \hat{H}_V + V(r) + V_{sl}(r). \quad (3.1)$$

$$\hat{H}_V = -\frac{\hbar^4}{8m^3c^2} \left[\frac{d^4}{dr^4} + \frac{4}{r} \frac{d^3}{dr^3} - \frac{\hat{L}^2}{\hbar^2} \left(\frac{2}{r^2} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r^4} \right) + \frac{\hat{L}^4}{\hbar^4 r^2} \right]. \quad (3.5)$$

$$\begin{aligned} c_1 \left[\frac{d^4 U_\alpha}{dr^4} + \left(\frac{1}{c_1} + \frac{2l(l+1)}{r^2} \right) \frac{d^2 U_\alpha}{dr^2} + \frac{4l(l+1)}{r^3} \frac{dU_\alpha}{dr} + \left(\frac{l^2(l+1)^2 - 6l(l+1)}{r^4} - \frac{l(l+1)}{c_1 r^2} \right) U_\alpha \right] \\ + c_2 r \frac{dV(r)}{dr} \frac{dU_\alpha}{dr} - c_0 V(r) U_\alpha - c_0 V_{sl}(r) U_\alpha - c_0 E_\alpha U_\alpha \\ = 0 \end{aligned} \quad (3.6)$$

$$\beta_1 = l+1, \quad \beta_2 = -1, \quad \beta_3 = l+3, \quad \beta_4 = -l+2. \quad (3.7)$$

$$E_m = \int_0^\infty U_\alpha \hat{H}_m U_\alpha dr, \quad (3.8)$$

$$E_V = \int_0^\infty U_\alpha \hat{H}_V U_\alpha dr. \quad (3.9)$$

$$\begin{aligned} E_m = -\frac{\hbar^4}{8m^3c^2} \left\{ \int_0^\infty \left(\frac{d^2 U_{nlj}(r)}{dr^2} \right)^2 dr + 2l(l+1) \int_0^\infty r^{-2} \left(\frac{dU_{nlj}(r)}{dr} \right)^2 dr \right. \\ \left. + l(l+1)(l^2+l-6) \int_0^\infty r^{-4} dU_{nlj}^2(r) dr \right\}. [12] \end{aligned} \quad (3.10)$$

$$\frac{u_{i+1} - 2u_i - u_{i-1}}{h^2} + p(r_i)u_i = \lambda u_i \quad (3.11)$$

$$\lambda = -bE, \quad i = 0, 1, \dots, n, \quad h = \frac{C}{n},$$

$$\left. \frac{d^k f}{dx^k} \right|_{x=\xi} = \sum_{i=0}^5 C_i f(x_i) + O(h^6 f^{(6)}), \quad 1 \leq k \leq 5. \quad (3.12)$$

$$V_S(r) = -V_0^{N,Z} [1 + \exp\{\alpha^{N,Z}(r-R)\}]^{-1} \quad (3.13)$$

$$V_C(r) = \frac{(Z-1)e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \begin{cases} \frac{3}{2} \frac{r}{R} - \frac{1}{2} \left(\frac{r}{R} \right)^3, & r \leq R, \\ 1, & r > R. \end{cases} \quad (3.14)$$

$$E_k = E_{nlj} - V_{nlj}. [7,12]$$

Užrašykime pusiau reliatyvistinį Hamiltonianą tokia forma:

$$\hat{H}_r = \hat{H}_m + \frac{\hat{p}^2}{2m} + \hat{H}_V + V(r) + V_{sl}(r). \quad (3.15)$$

Reliatyvistinių masės pataisų dydis priklauso nuo pagrindinių ir orbitinių kvantinių skaičių. Šios pataisos buvo gautos taip pat, kaip ir sukinio orbitos sąveikos. Todėl k nustatymas, neatsižvelgus į reliatyvistines masės pataisas, bus netikslus. Pagal operatorių $\hat{p}^2 = 2m\hat{T}$, kur \hat{T} yra kinetinės energijos operatorius, mes iš lygties (3.1) gauname:

$$\hat{H}_V = -\frac{\hbar^4}{8m^3c^2} \left[\frac{d^4}{dr^4} + \frac{4}{r} \frac{d^3}{dr^3} - \frac{\hat{L}^2}{\hbar^2} \left(\frac{2}{r^2} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r^4} \right) + \frac{\hat{L}^4}{\hbar^4} \frac{1}{r^2} \right]. \quad (3.16)$$

Paėmus pusiau reliatyvistinę Hamiltoniano lygtį (3.1) ir panaudojus tikrinę funkciją $R\alpha = U\alpha / r$ galime reliatyvistines pataisas apskaičiuoti pirmoje aproksimacijoje

$$E_m = \int_0^\infty U_\alpha \hat{H}_m U_\alpha dr, \quad (3.17)$$

$$E_V = \int_0^\infty U_\alpha \hat{H}_V U_\alpha dr. \quad (3.18)$$

Neutronų ir protonų energijos lygmenys E_{nlj} , tikėtinos potencinės energijos vertės V_{nlj} , reliatyvistinės pataisos masei E_m ir branduolio potencialas E_V suskaičiuojamos Vudso-Saksono potencialu:

$$V_S(r) = -V_0^{N,Z} [1 + \exp\{\alpha^{N,Z}(r - R)\}]^{-1} \quad (3.19)$$

Vartojome potencialą (3.4) su parametrais $V_0^N = 52,06$ MeV, $\alpha^N = \alpha^Z = 1,58$ fm⁻¹, $R = 1,24 A^{1/3}$ fm, $k = 0,639$ fm². Kuloninis branduolio potencialas: [7,12]

$$V_C(r) = \frac{(Z-1)e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \begin{cases} \frac{3}{2} \frac{r}{R} - \frac{1}{2} \left(\frac{r}{R}\right)^3, & r \leq R, \\ 1, & r > R. \end{cases} \quad (3.20)$$

Visos formulės, reikalingos branduolio modelio skaičiavimams ir reliatyvistinių masės paklaidų nustatymui pateiktos priede.