

VILNIAUS UNIVERSITETAS

Kietojo kūno elektronikos katedra

**ATOMO IR BRANDUOLIO FIZIKOS  
LABORATORINIAI DARBAI**

Parengė A. Poškus

Vilnius, 2004

<b>1. Teorinis įvadas. Atomo ir branduolio fizikos elementai</b>	<b>1</b>
1.1. Spinduliavimo kvantinė prigimtis	1
1.2. Fotoefektas. Einšteino lygtis	2
1.3. Komptono efektas	5
1.4. Branduolinis atomo sandaros modelis. Rezerfordo tyrimai	8
1.5. Vandenilio atomo spektras	10
1.6. Boro postulatai	11
1.7. Boro vandenilio atomo modelis	12
1.7.1. Elektronų orbitų spindulių skaičiavimas	14
1.7.2. Elektronų kinetinės energijos kiekvienoje orbitoje skaičiavimas	15
1.7.3. Elektronų potencinės energijos kiekvienoje orbitoje skaičiavimas	15
1.7.4. H atomo spektro skaičiavimas. Pagrindinė ir sužadintoji būsenos	15
1.8. Atomo magnetinės savybės pagal Boro teoriją	19
1.9. Boro atomo teorijos ribotumas	21
1.10. Medžiagos savybių korpuskulinis ir banginis dualumas	22
1.11. Neapibrėžtumų sąryšis	24
1.12. Banginė funkcija ir jos statistinė samprata	27
1.13. Šrėdingerio lygtis. Energijos lygmenys. Kvantiniai šuoliai	29
1.14. Dalelė potencinėje duobėje. Elektronas atome	31
1.15. Dalelės pereiga pro potencinį barjerą (tunelinė pereiga)	35
1.16. Operatoriai kvantinėje mechanikoje. Kvantinės mechanikos postulatai	36
1.17. Elektronų orbitinis judėjimas atome kvantinės mechanikos požiūriu	42
1.18. Sukinys. Elektronų sukinio ir orbitos sąveika. Momentų sudėtis	49
1.19. Dirako lygtis ir elektronų sukinys	54
1.20. Atrankos taisyklės. Atomo spektro linijų smulkioji struktūra	60
1.21. Daugiaelektroniai atomai. Paulio draudimo principas. Elektronų sluoksniai	61
1.22. Daugiaelektronio atomo judesio kiekio momentas ir magnetinis momentas	63
1.23. Elektronų sąveika helio atome. Dalelių tapatingumas. Pakaitinė sąveika	68
1.24. Branduolio sandara. Izotopai	73
1.25. Branduolio masė ir ryšio energija	76

1.26. Branduolio modeliai	81
1.26.1. Sluoksninis branduolio modelis	81
1.26.2. Lašelinis branduolio modelis	84
1.27. Pagrindinės sąveikos	84
1.28. Radioaktyvumas. Pagrindinis radioaktyviojo skilimo dėsnis	87
1.29. $\alpha$ skilimas	89
1.30. $\beta$ skilimas	96
1.31. Branduolių $\gamma$ spinduliavimas	97
1.32. Branduolių šuolių atrankos taisyklės. Metastabiliosios būsenos	100
1.33. $\gamma$ aktyvių branduolių gavimas. Vidinė konversija	103
1.34. Branduolinės reakcijos	103
1.35. Branduolinių reakcijų energija	105
1.36. Sunkiųjų branduolių dalijimosi reakcija. Grandininė reakcija	106
1.37. Jonizuojančiosios spinduliuotės dozių samprata	109
<b>2. Darbai Nr. 1–2. Kristalų struktūros rentgeninė analizė</b>	<b>114</b>
2.1. Įvadas	114
2.1.1. Kristalai, kristalo gardelė, elementarusis narvelis	114
2.1.2. Rentgeno spindulių difrakcija kristale	116
2.2. Lauės lygtys. Brego metodas	119
2.3. Brego lygtis	122
2.4. Kristalų simetrija	124
2.5. Kristalografinės plokštumos ir kristalografinės ašys. Milerio indeksai	129
2.6. Rentgenogramų analizė kubinės singonijos kristalų atveju	131
2.7. Darbas Nr. 1. Monokristalo struktūros rentgeninė analizė Brego metodu	133
2.7.1. Brego metodas	133
2.7.2. Darbo užduotys	135
2.7.3. Matavimų tvarka	135
2.7.4. Rentgenogramos analizė	137
2.7.5. Kontroliniai klausimai	138
2.8. Darbas Nr. 2. Polikristalo struktūros rentgeninė analizė	138
2.8.1. Polikristalų tyrimo metodo teorija	138
2.8.2. Darbo užduotys	140

2.8.3. Matavimų tvarka	140
2.8.4. Rentgenogramos analizė	142
2.8.5. Kontroliniai klausimai	143
<b>3. Darbas Nr. 3. Būdingosios Rentgeno spinduliuotės spektro tyrimas</b>	<b>144</b>
3.1. Įvadas	144
3.2. Stabdomoji Rentgeno spinduliuotė	145
3.3. Būdingoji Rentgeno spinduliuotė	148
3.4. Mozlio dėsnis	152
3.5. Būdingosios Rentgeno spinduliuotės spektro smulkioji struktūra	154
3.6. Tyrimo metodo teorija	158
3.7. Darbo užduotys	162
3.8. Matavimų tvarka	162
3.9. Rentgenogramos analizė	162
3.10. Kontroliniai klausimai	163
<b>4. Darbas Nr. 4. Branduolinės spinduliuotės statistinių dėsningumų tyrimas</b>	<b>166</b>
4.1. Įvadas	166
4.2. Dispersija ir standartinis nuokrypis. Aktyvumo matavimo paklaidos	167
4.3. Tikimybės sąvoka. Atsitiktinio dydžio skirstinys. Puasono skirstinys	170
4.4. Tikimybės tankio funkcija. Puasono skirstinio tolydusis artinys	175
4.5. Gauso skirstinys	177
4.6. Atsitiktinio dydžio skirstinio matavimas. Histogramos	178
4.7. Darbo užduotys	180
4.8. Matavimų tvarka	180
4.9. Matavimo duomenų analizė	180
4.10. Kontroliniai klausimai	181
<b>5. Darbas Nr. 5. Dirbtinio radioaktyvumo tyrimas</b>	<b>182</b>
5.1. Pagrindinis radioaktyviojo skilimo dėsnis. Skilimo kreivės	182
5.2. Dirbtinio radioaktyvumo sąvoka. Radiacinė neutronų pagava	183
5.3. Aktyvinimas. Aktyvacijos kreivė. Soties aktyvacija	185
5.4. Vieno izotopo ir izotopų mišinio skilimo kreivės	189
5.5. Darbo užduotys	192

5.6. Matavimų tvarka	192
5.7. Matavimo duomenų analizė	193
5.7.1. Matavimo rezultatų analizė, naudojant netiesinį aproksimavimą	193
5.7.2. Matavimo rezultatų analizė, naudojant tiesinį aproksimavimą	195
5.8. Kontroliniai klausimai	197
<b>6. Darbas Nr. 6. Beta spindulių sugerties medžiagoje tyrimas</b>	<b>198</b>
6.1. Įvadas	198
6.2. Jonizaciniai energijos nuostoliai	199
6.3. Radiaciniai energijos nuostoliai	205
6.4. Dalelių siekiai	207
6.5. Elektronų pereiga pro storas folijas. Silpimo koeficientas	208
6.6. Darbo užduotys	212
6.7. Matavimų tvarka	212
6.8. Matavimo duomenų analizė	213
6.9. Kontroliniai klausimai	214
<b>7. Darbas Nr. 7. Gama spindulių sugerties medžiagoje tyrimas</b>	<b>215</b>
7.1. Įvadas	215
7.2. Komptono sklaida	215
7.3. Fotoefektas	216
7.4. Porų kūrimas	216
7.5. Sąveikos skerspjūvis ir silpimo koeficientas	217
7.6. Darbo užduotys	220
7.7. Matavimų tvarka	220
7.8. Matavimo duomenų analizė	221
7.9. Kontroliniai klausimai	223
<b>8. Darbas Nr. 8. Geigerio ir Miulerio skaitiklio tyrimas</b>	<b>224</b>
8.1. Jonizuojančiosios spinduliuotės detektorių veikimo principas	224
8.2. Impulsinio dujinio detektoriaus jungimo schema	225
8.3. Elektroninė griūtis dujiniame detektoriuje	226
8.4. Proporcingieji skaitikliai	230
8.5. Geigerio ir Miulerio skaitikliai	231

8.6. Antrinių Geigerio išlydžių slopinimas	232
8.7. Dujinio detektoriaus signalo didumo prieklausa nuo įtampos	234
8.8. Geigerio ir Miulerio skaitiklio charakteristika	237
8.9. Skaitiklio neveikos trukmė	237
8.10. Skaitiklio efektyvumas	240
8.11. Skaitiklio neveikos trukmės matavimas dviejų šaltinių metodu	240
8.12. Skaitiklio efektyvumo matavimas	243
8.13. Darbo užduotys	243
8.14. Matavimų tvarka	244
8.15. Matavimo duomenų analizė	244
8.16. Kontroliniai klausimai	245
<b>9. Darbas Nr. 9. Komptono efekto tyrimas</b>	<b>246</b>
9.1. Įvadas	246
9.2. Komptono formulė	248
9.3. Sklaidos skerspjūvio sąvoka	250
9.4. Elektromagnetinės spinduliuotės sklaidos klasikinis aprašymas	253
9.5. Komptono sklaidos skerspjūvis	258
9.6. Darbo užduotys	261
9.7. Tyrimo metodo teorija	261
9.8. Matavimų tvarka	263
9.9. Matavimo duomenų analizė	264
9.10. Kontroliniai klausimai	264
<b>Priedas A. Radioaktyviųjų nuklidų skilimo schemas</b>	<b>267</b>
<b>Priedas B. Matavimo duomenų tiesinis aproksimavimas</b>	<b>269</b>
B.1. Uždavinio formuluotė	269
B.2. Tiesės koeficientų grafinis radimas	271
B.3. Mažiausiųjų kvadratų principas	272
B.4. Koeficientų pasikliautinieji intervalai	274
<b>Priedas C. Matavimo duomenų netiesinis aproksimavimas</b>	<b>277</b>
C.1. Naudojamoji terminologija ir uždavinio formuluotė	277

C.2. Svorinių daugiklių pasirinkimas	278
C.3. Mažiausių kvadratų principo matematinė formuluotė	280
C.4. Modelio parametrų pasikliautiniai intervalai	280
<b>Priedas D. Netiesinis aproksimavimas, dirbant su programa Microcal Origin</b>	<b>282</b>
D.1. Aproksimavimo dialogo langas	282
D.2. Modelio pasirinkimas	284
D.3. Naujos funkcijos apibrėžimas arba pasirinktosios funkcijos modifikavimas	284
D.4. Modelio parametrų pradinių verčių ir konstantų apibrėžimas	288
D.5. Parametrų kitimo ribų apibrėžimas	290
D.6. Funkcijų apibrėžimo failai	292
D.7. Aproksimuojamų duomenų pasirinkimas	294
D.8. Svorinių daugiklių skaičiavimo būdo pasirinkimas	296
D.9. Aproksimavimo seansas	298
D.10. Atvejai, kai aproksimavimo procedūra neranda kvadratų sumos minimumo	301
D.11. Kreivių modeliavimas	302
D.12. Sudėtingų skaitmeninių modelių panaudojimas	304
<b>Literatūra</b>	<b>306</b>

## 1. Teorinis įvadas. Atomo ir branduolio fizikos elementai

### 1.1. Spinduliavimo kvantinė prigimtis

Siekdamas paaiškinti absoliučiai juodo kūno spinduliuotės eksperimentinius dėsningumus, vokiečių fizikas Maksas Plankas 1900 m. padarė prielaidą, kad elektromagnetinė energija išspinduliuojama ir sklinda ne tolydžiai, o diskrečiai, tiksliai apibrėžtomis atskiromis porcijomis, kurios vadinamos *spinduliuotės kvantais*. Be to, vieno kvanto energija  $E$  yra proporcinga spinduliuotės dažniui  $\nu$ . Proporciningumo koeficientas vadinamas *Planko konstanta* ir žymimas  $h$ :

$$E = h\nu = h \frac{c}{\lambda} \quad (1.1.1)$$

(Planko konstanta lygi  $h = 6.625 \cdot 10^{-34}$  J·s).

Planko hipotezės pagrindu Albertas Einšteinas 1905 m. sukūrė *šviesos kvantinę (fotoninę) teoriją*. Pagal Einšteiną, šviesos energijos kvantą galima laikyti materialia dalele, kuri sklinda šviesos greičiu ir perneša energiją  $E = h\nu$ . Ši dalelė vadinama *fotonu*. Kadangi fotonas elgiasi kaip materialinė dalelė, tai jis privalo turėti masę ir judesio kiekį. Fotono masę  $m_f$  galima rasti, pasinaudojus energijos ir masės sąryšiu:  $h\nu = m_f c^2$ . Iš čia

$$m_f = \frac{h\nu}{c^2} = \frac{h}{c\lambda}. \quad (1.1.2)$$

Reikia turėti omenyje, kad tai yra šviesos greičiu judančio fotono masė: *fotono rimties masė lygi nuliui*. Tuo fotonas skiriasi nuo materialųjų dalelių, tokių, kaip elektronas, protonas ir neutronas, kurių rimties masė nelygi nuliui ir kurios gali būti rimties būsenos. Fotonas negali būti rimties būsenos, o jo greitis visuomet lygus šviesos greičiui  $c$ . Fotono judesio kiekis  $p_f$  (masės ir greičio sandauga) yra lygus

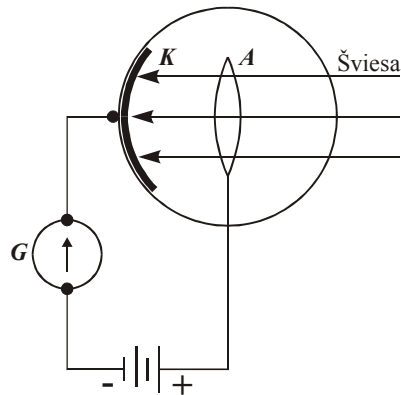
$$p_f = m_f c = \frac{h\nu}{c} = \frac{h}{\lambda}. \quad (1.1.3)$$

Taigi, elektromagnetinę spinduliuotę (vadinasi, ir šviesą) galima apibūdinti ne vien bangų parametrais  $\lambda$  ir  $\nu$ , bet ir dydžiais  $m_f$  ir  $p_f$ , kurie mechanikoje naudojami, apibūdinant materialųjų dalelių judėjimą. Tai rodo, kad šviesos reiškiniuose pasireiškia *dualumas* (dvejojumas): vieni reiškiniai (interferencija, difrakcija ir poliarizacija) rodo, kad šviesa yra banginis procesas, o kiti reiškiniai (absoliučiai juodo kūno spinduliuotės savybės ir žemiau aprašytieji fotoefektas bei Komptono efektas) rodo, kad šviesa yra diskretusis, arba *kvantinis*, procesas, kurį sukelia atskirų dalelių (fotonų) veikimas.

## 1.2. Fotoefektas. Einšteino lygtis

XIX a. pabaigoje buvo atrastas dar vienas optinis reiškinys, kurio neįmanoma paaiškinti, naudojantis klasikines fizikos dėsniais. Buvo pastebėta, kad, apšvietus metalo paviršių regimąja šviesa, metalas pradeda spinduliuoti elektronus. Toks reiškinys, kai šviesa išlaisvina iš metalų elektronus, vadinamas **išoriniu fotoefektu**.

Išorinio fotoefekto dėsningumams tirti dažniausiai naudojamas įrenginys, kurio schema pavaizduota 1.1 pav. Stikliniame balione, iš kurio išsiurbtas oras, įtaisomi du metaliniai elektrodai. Vienas elektrodas – tai šviesai jautrus metalo (pvz., Na, Cs arba Sb) sluoksnis, kuris dengia iš vidaus didžiąją dalį stiklinio baliono, išskyrus nedidelį plotelį šviesai įeiti. Kitas elektrodas – tai vielinis žiedas arba tinklelis, įtvirtintas baliono viduryje. Toks balionas su dviem elektrodais vadinamas **vakuuminis fotoelementu**. Matavimų metu prie elektrodo, kuris dengia stiklinio baliono paviršių, prijungiama neigiama įtampa (t.y., šis elektrodas atlieka **katodo** vaidmenį), o prie varinio tinklelio prijungiama teigiama įtampa (t.y., šis elektrodas atlieka **anodo** vaidmenį). Be to,

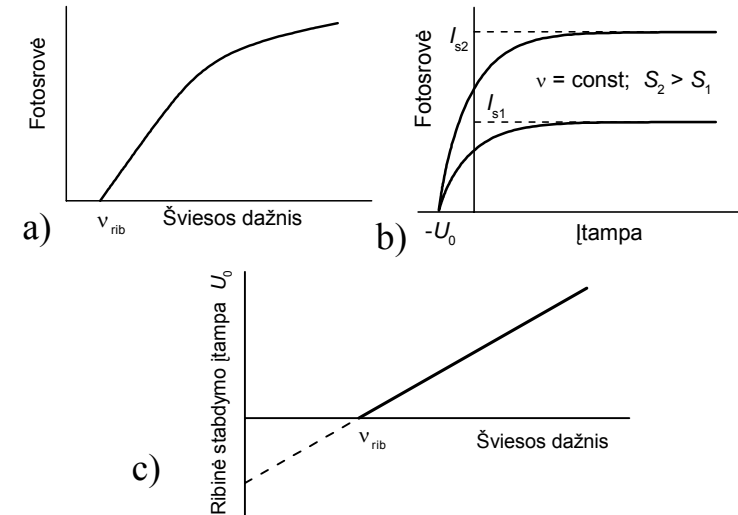


1.1 pav. Išorinio fotoefekto tyrimo schema (vakuuminis fotoelementas)

nuosekliai su fotoelementu prijungiamas ampermetras (pvz., galvanometras). Apšvietus katodą K, išlaisvintieji elektronai (**fotoelektronai**), veikiami elektrinio lauko, juda link anodo A, sukeldami elektros srovę, kurią matuoja galvanometras G. Ši elektros srovė vadinama **fotosrove**.

Pagal klasikinę teoriją, elektronus iš metalo “išplėšia” šviesos elektrinis laukas. Tačiau klasikinė teorija negali paaiškinti pagrindinių fotoefekto dėsningumų (juos galima nustatyti, naudojant 1.1 pav. schemą):

- Kiekvienam metalui būdingas tam tikras mažiausias šviesos dažnis  $\nu_{rib}$ , žemiau kurio fotoefektas nevyksta. Kitais žodžiais, egzistuoja tam tikras maksimalus šviesos bangos ilgis, virš kurio fotoefektas nevyksta. Pavyzdžiui, apšvietus cinko plokštelę regimosios šviesos spinduliais, jie neišmuš iš cinko elektronų, kad ir koks stiprus būtų šviesos srautas. Tuo tarpu ultravioletiniai spinduliai, net jeigu jų srautas yra labai silpnas, išmuša iš cinko elektronus. Vadinasi, cinko atveju mažiausias šviesos dažnis, kuriam esant, vyksta fotoefektas, yra ultravioletinių spindulių diapazone. Šis mažiausias dažnis arba didžiausias bangos ilgis vadinamas **fotoefekto raudonąja riba**. Raudonosios ribos egzistavimą iliustruoja



1.2 pav. Fotoefekto dėsningumai: a) raudonoji riba, b) fotoelektronų didžiausias greitis nepriklauso nuo apšvietimo, c) fotoelektronų didžiausia energija proporcinga šviesos dažniui.

1.2a pav.: fotosrovė skiriasi nuo nulio tik tuomet, kai  $\nu > \nu_{rib}$ . Šis eksperimentinis faktas prieštarauja klasikinei teorijai, pagal kurią elektrono išplėsimui iš metalo pakanka, kad jį veikianti jėga būtų pakankamai stipri, o šios jėgos kitimo dažnis neturi reikšmės. T.y., pagal klasikinę teoriją, fotosrovė turėtų skirtis nuo nulio, esant bet kokiam šviesos dažniui.

- Fotoelektronų didžiausias greitis  $v_{max}$  nepriklauso nuo katodo apšvietimo  $S$  (**apšvietumas** – tai spinduliuotės energijos kiekis, kuris krinta per laiko vienetą į ploto vienetą). Greitis  $v_{max}$  praktikoje matuojamas tokiu būdu. Prie elektrodo A, kuris surenka fotoelektronus, prijungiama neigiama įtampa atžvilgiu metalo K, kuris juos spinduliuoja. Tuomet fotoelektronai yra lėtinami, ir pasiekusių tinklelį fotoelektronų skaičius mažėja, augant lėtinančiai įtampai. Atitinkamai, fotosrovė mažėja (žr. 1.2b pav.). Kai lėtinančioji įtampa pasiekia vertę  $U_0$ , kuriai esant, netgi greičiausieji elektronai nepasiekia tinklelio, fotosrovė sumažėja iki nulio (žr. 1.2b pav.). Pagal išmatuotą įtampos  $U_0$  vertę galima apskaičiuoti didžiausią fotoelektronų greitį  $v_{max}$ . Esant šiai įtampai, greičiausieji elektronai kelyje nuo elektrodo K iki tinklelio A praranda visą savo kinetinę energiją, kuri lygi  $mv_{max}^2/2$  (čia  $m$  yra elektrono masė) Antra vertus, kai elektronas praeina lėtinančią įtampą  $U_0$ , jo kinetinė energija sumažėja dydžiu  $eU_0$  (čia  $e$  yra elektrono krūvis). Vadinasi,

$$eU_0 = \frac{mv_{\max}^2}{2} \quad \text{ir} \quad v_{\max} = \sqrt{\frac{2eU_0}{m}}. \quad (1.2.1)$$

Kaip parodyta 1.2b pav.,  $U_0$  nepriklauso nuo apšviestumo  $S$ . Tai prieštarauja klasikinei teorijai. Pagal klasikinę teoriją, apšviestumas yra proporcingas elektromagnetinės bangos elektrinio lauko amplitudės kvadratui. Ši amplitudė, savo ruožtu, yra proporcinga didžiausiai jėgai, kuria šviesa veikia metalo elektronus. Didėjant šiai jėgai, turėtų augti ir išmuštųjų elektronų maksimalus greitis. T.y., pagal klasikinę teoriją, fotoelektronų didžiausias greitis  $v_{\max}$  (ir ribinė stabdymo įtampa  $U_0$ ) turėtų augti, didėjant apšviestumui.

- c) Fotoelektronų didžiausioji energija yra proporcinga šviesos dažniui (žr. 1.2c pav.).

Šiuos fotoefekto dėsningumus 1905 m. paaiškino Einšteinas, pasinaudojęs fotonine šviesos prigimties hipoteze. Pagal Einšteiną, fotonas, pataikęs į metalą, gali atiduoti savo energiją  $h\nu$  vienam metalo elektronui. Šios energijos dalis išeikvojama darbui  $A$ , kuris atliekamas išlaisvinant elektroną iš metalo (*elektrono išlaisvinimo darbui*), o likusioji dalis virsta išlaisvintojo elektrono kinetine energija. Išmuštojo elektrono greitis yra lygus didžiausiam fotoelektronų greičiui  $v_{\max}$ , kuris nustatomas pagal stabdymo įtampą  $U_0$  (žr. aukščiau). Vadinas, jo kinetinė energija lygi  $mv_{\max}^2/2$  (čia  $m$  yra elektrono masė). Pagal energijos tvermės dėsni, fotono energija turi būti lygi išlaisvinimo darbo  $A$  ir išmuštojo elektrono kinetinės energijos sumai:

$$h\nu = A + \frac{mv_{\max}^2}{2}. \quad (1.2.2)$$

Tai yra *Einšteino lygtis fotoefektui*. Laisvasis elektronas dalį savo energijos gali prarasti, sąveikaudamas su metalo atomais. Tokiu atveju iš metalo jis išlekia greičiu, kuris mažesnis už didžiausią greitį  $v_{\max}$ . Todėl daugumos fotoelektronų greitis yra mažesnis už  $v_{\max}$ .

Naudojantis (1.2.2) lygtimi, galima paaiškinti visus tris minėtuosius fotoefekto dėsningumus:

- a) Fotoefekto raudonosios ribos (žr. 1.2a pav.) aiškinimas. Pagal (1.2.2) lygtį, fotoelektronų didžiausioji energija lygi fotono energijos ir išlaisvinimo darbo skirtumui:

$$\frac{mv_{\max}^2}{2} = h\nu - A. \quad (1.2.3)$$

Jeigu fotono energija  $h\nu$  yra mažesnė už išlaisvinimo darbą  $A$ , tuomet (1.2.3) lygybės dešinioji pusė yra neigiama. Tačiau kinetinė energija negali būti neigiama. Vadinas, jeigu  $h\nu < A$ , fotoefektas nevyksta. Taigi, mažiausias šviesos dažnis  $\nu_{\text{rib}}$ , kuriam esant, vyksta fotoefektas (fotoefekto raudonoji riba) atitinka lygybę

$$h\nu_{\text{rib}} = A. \quad (1.2.4)$$

Elektrono išlaisvinimo darbas  $A$  – būdingas katodo medžiagai dydis, todėl skirtingoms katodo medžiagoms ribinis dažnis  $\nu_{\text{rib}}$  yra skirtingas.  $A$  vertė lemia fotoefekto raudonąją ribą.

- b) Didžiausiojo greičio  $v_{\max}$  nepriklausomumo nuo apšviestumo (žr. 1.2b pav.) aiškinimas. Pagal (1.2.3) lygtį, fotoelektronų didžiausias greitis  $v_{\max}$  priklauso tik nuo fotonų dažnio  $\nu$  ir nuo išlaisvinimo darbo  $A$ . Vadinas, jis nepriklauso nuo apšviestumo.
- c) Fotoelektronų didžiausios energijos tiesinė prieklausa nuo šviesos dažnio (žr. 1.2c pav.) taip pat tiesiogiai išplaukia iš (1.2.3) lygties.

### 1.3. Komptono efektas

Kitas reiškinys, kuriame ypač ryškiai pasireiškia šviesos korpuskulinės (kvantinės) savybės, yra Komptono efektas. 1922 m. amerikiečių fizikas Arturas Komptonas, tirdamas trumpabangių Rentgeno spindulių sklaidą įvairiose medžiagose, pastebėjo, kad išsklaidytos spinduliuotės bangos ilgis yra didesnis už kritusios spinduliuotės bangos ilgį. Šis elektromagnetinės spinduliuotės bangos ilgio padidėjimas sklaidos metu vadinamas *Komptono efektu*.

Klasikinė teorija, kuri remiasi banginiu spinduliavimo modeliu, negali paaiškinti Komptono efekto. Pagal klasikinę teoriją, elektromagnetinės bangos ilgis sklaidos metu neturėtų pasikeisti. Klasikinė teorija elektromagnetinių bangų sklaidą aiškina šitaip. Medžiagos jonai ir elektronai, veikiami elektromagnetinės bangos elektrinio lauko, virpa dažniu, kuris lygus bangos dažniui. Šių virpesių kryptis sutampa su elektrinio lauko kryptimi (t.y., statmena bangos kryptčiai). Su pagreičiu judantis krūvininkas (šiuo atveju – jonas arba elektronas) spinduliuoja elektromagnetines bangas. Kadangi šiuo atveju krūvininko judėjimo pagreitis yra harmoninė laiko funkcija, krūvininkas spinduliuoja to paties dažnio elektromagnetines bangas. Tai ir yra išsklaidytos bangos. Taigi, klasikinė teorija teigia, kad sklaidos metu spinduliuotės dažnis nepakinta.

Fotoninės teorijos požiūriu, sklaidos įvykis – tai dviejų dalelių – fotono ir elektrono – tamprusis susidūrimas (t.y., sąveika, kurios metu nekinta dalelių kinetinių energijų suma). Fotonas, kurio energija lygi  $h\nu_0$ , sąveikaudamas su elektronu, perduoda jam dalį savo energijos. Dėl šios

sąveikos elektronas įgyja tam tikrą greitį, o fotonas pakeičia judėjimo kryptį (žr. 1.3 pav.). Kadangi dalis fotonų energijos perduota elektronui, tai aišku, kad išsklaidyto fotonų energija yra mažesnė, negu krintančiojo. Kadangi fotonų energija proporcinga dažniui (žr. (1.1.1) formulę), tai, sumažėjus fotonų energijai, sumažėja ir spinduliuotės dažnis, o bangos ilgis padidėja.

Taigi, Komptono efektas yra grynai korpuskulinis reiškinys: jis aprašomas taip pat, kaip dviejų rutuliukų tamprusis susidūrimas. Tai reiškia, kad kampų  $\theta$  išsklaidyto fotonų energiją galima rasti, naudojant energijos ir judesio kiekio tvermės dėsnius, kurie žinomi iš mechanikos kurso. Vienintelis skirtumas, lyginant su dviejų rutuliukų tampriuoju susidūrimu, yra tas, kad fotonų energiją reikia skaičiuoti pagal (1.1.1) formulę, o fotonų judesio kiekį – pagal (1.1.3) formulę. Elektrono kinetinę energiją ir judesio kiekį galima skaičiuoti pagal klasikinės mechanikos formules. Vadinasi, energijos ir judesio kiekio tvermės dėsniai, kai fotonas tampriai susiduria su nejudančiu elektronu, yra tokio pavidalo:

$$\begin{cases} h\nu_0 = h\nu + \frac{mv^2}{2}, \\ \mathbf{p}_0 = \mathbf{p} + m\mathbf{v}. \end{cases} \quad (1.3.1a)$$

$$(1.3.1b)$$

Čia  $h\nu_0$  ir  $h\nu$  yra fotonų energija iki ir po susidūrimo,  $m$  ir  $v$  yra elektrono masė ir greičio vektorius po susidūrimo, o  $\mathbf{p}_0$  ir  $\mathbf{p}$  yra fotonų judesio kiekio vektoriai iki ir po susidūrimo (pagal (1.1.3) formulę, šių vektorių absoliutinės vertės yra  $p_0 = h\nu_0/c$  ir  $p = h\nu/c$ ).  $v$  yra elektrono greičio absoliutinė vertė po susidūrimo. 1.3 pav. iliustruoja judesio kiekio tvermės dėsnį, t.y., (1.3.1b) lygtį.

(1.3.1b) lygtyje perkėlus  $\mathbf{p}$  į kairiąją pusę ir pakėlus kvadratu abi šios lygties puses,

$$\begin{cases} h\nu_0 = h\nu + \frac{mv^2}{2}, \\ (mv)^2 = \left(\frac{h\nu_0}{c}\right)^2 + \left(\frac{h\nu}{c}\right)^2 - 2\frac{h\nu_0}{c} \cdot \frac{h\nu}{c} \cos\theta. \end{cases} \quad (1.3.2a)$$

$$(1.3.2b)$$

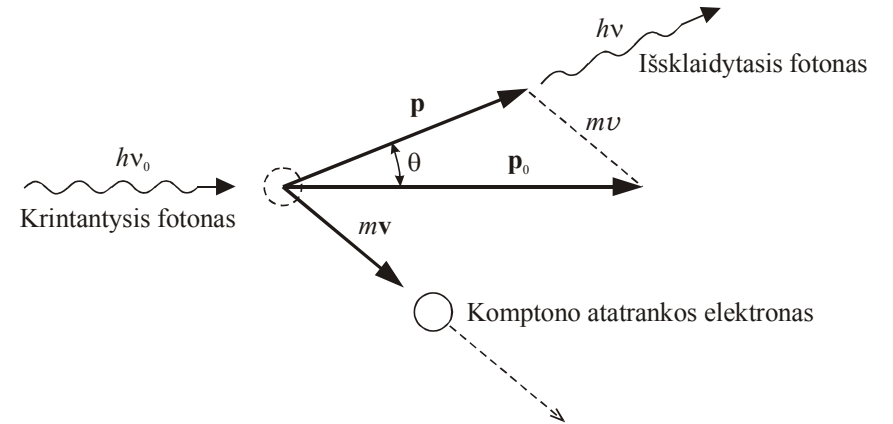
Čia  $\theta$  yra kampas tarp vektorių  $\mathbf{p}$  ir  $\mathbf{p}_0$ , t.y., sklaidos kampas (žr. 1.3 pav.). Tikslas – rasti duotuoju kampų  $\theta$  išsklaidyto fotonų dažnį  $\nu$ . Taigi, turime dviejų lygčių sistemą atžvilgiu dviejų nežinomųjų  $\nu$  ir  $v$ . Ją išsprendę ir pasinaudoję sąryšiu tarp bangos ilgio  $\lambda$  ir dažnio  $\nu = c/\lambda$ , randame tokią fotonų bangos ilgio pokyčio išraišką:

$$\Delta\lambda \equiv \lambda - \lambda_0 = c \left( \frac{1}{\nu} - \frac{1}{\nu_0} \right) = \frac{h}{mc} (1 - \cos\theta), \quad (1.3.3)$$

arba

$$\Delta\lambda = \lambda_K (1 - \cos\theta); \quad (1.3.4)$$

čia



1.3 pav. Judesio kiekio tvermės dėsnis, kai nejudantis laisvasis elektronas sklaido fotoną.  $\nu_0$  ir  $h\nu_0$  – krintančiojo fotonų dažnis ir energija,  $\nu$  ir  $h\nu$  – išsklaidyto fotonų dažnis ir energija,  $v$  ir  $mv$  – elektrono greičio ir judesio kiekio vektoriai po susidūrimo,  $\mathbf{p}_0$  ir  $\mathbf{p}$  – fotonų judesio kiekio vektoriai iki ir po susidūrimo (šių vektorių absoliutinės vertės yra  $p_0 = h\nu_0/c$  ir  $p = h\nu/c$ ),  $\theta$  – fotonų sklaidos kampas.  $h$  yra Planko konstanta,  $m = 9.10939 \cdot 10^{-31}$  kg yra elektrono masė.

$$\lambda_K = \frac{h}{mc} = 0.024263 \text{ Å}. \quad (1.3.5)$$

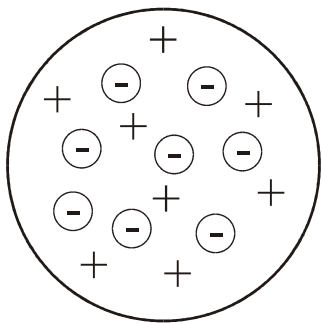
Bangos ilgio pokyčio išraiška (1.3.4) gaunama ir tuo atveju, kai lygčių sistemoje (1.3.1a,b) naudojamos reliatyvistinės kinetinės energijos ir judesio kiekio išraiškos (žr. 9.2 poskyrį). (1.3.4) formulė vadinama **Komptono formule**, o dydis  $\lambda_K$  vadinamas **Komptono bangos ilgiu**.



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

Aukščiau buvo aprašyti du reiškiniai, kuriuose pasireiškia šviesos (ir apskritai elektromagnetinės spinduliuotės) korpuskulinis-banginis dualumas. XX a. pradžioje palaipsniui paaiškėjo, kad toks korpuskulinis-banginis dualumas yra būdingas ir kitoms mikrodalelėms, pvz., elektronams. Per kelis dešimtmečius buvo sukurta teorija, kuri vieningu požiūriu aprašo ir elektromagnetinį spinduliavimą, ir materialijų dalelių (pvz., elektronų ir atomų branduolių) judėjimą bei tarpusavio sąveiką. Ši teorija – tai kvantinė mechanika. Pirmuoju kvantinės mechanikos kertiniu akmeniu tapo Planko hipotezė apie spinduliavimo kvantinį pobūdį (žr. 1.1 poskyrį). Maždaug tuo pačiu metu, kai Maksas Plankas suformulavo savo hipotezę, prie kvantinės mechanikos kūrimo buvo artėjama ir iš kitos pusės: tiriant atomo sandarą.

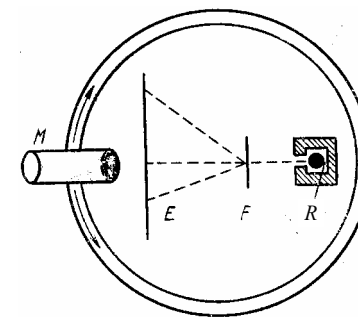
1897 m. anglų fizikas Dž. Dž. Tomsonas atrado elementariąją dalelę – elektroną, kuri turi neigiamą elektrinį krūvį. Šio krūvio absoliutinė vertė dažniausiai žymima raide  $e$  ir yra lygi  $1.6022 \cdot 10^{-19}$  C. Šis krūvis vadinamas **elementariuoju krūviu**, nes visų gamtoje egzistuojančių dalelių krūviai yra krūvio  $e$  kartotiniai. Elektrono masė  $m = 9.1 \cdot 10^{-31}$  kg. Tomsonas nustatė, kad elektronai yra atomų dalelės. Kadangi atomas yra visumoje neutralus, Tomsonas padarė išvadą, kad atome turi būti ir teigiamas krūvis, kuris yra priešingas elektronų krūviui. Pagal **Tomsono modelį**, atomą sudaro sferinis tolygiai pasiskirsčiusio teigiamo krūvio debesėlis, kuriame "plaukioja" neigiamieji elektronai (žr. 1.4 pav.).



1.4 pav. Tomsono atomo modelis

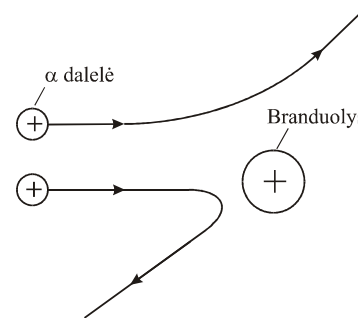
1909 m. kitas anglų fizikas Ernestas Rezerfordas tyrė  $\alpha$  dalelių pereigą pro plonas aukso bei kitų metalų folijas (apie  $\alpha$  daleles bus smulkiau kalbama skyriuje apie radioaktyvumą). Tuo metu jau buvo žinoma, kad  $\alpha$  dalelės yra teigiamosios dalelės, kurių krūvis lygus dvigubam elementariajam krūviui ( $+2e$ ), o masė maždaug 7000 kartų didesnė už elektrono masę. Rezerfordo matavimų schema pavaizduota 1.5 pav. Radioaktyvi medžiaga  $R$  spinduliuoja siaurą pluoštelį  $\alpha$  dalelių, kurių kelyje įtaisyta metalinė folija  $F$ . Praėjusios pro foliją,  $\alpha$  dalelės atsimuša į fluorescuojantį ekraną  $E$  ir sukelia blyksnius (**scintiliacijas**), kurie stebimi mikroskopu  $M$ . Mikroskopą kartu su ekranu galima sukoti aplink foliją (žr. 1.5 pav.). Tokiu būdu galima nustatyti, kokia dalis  $\alpha$  dalelių nukrypsta bet kokių duotuoju kampu. Rezerfordas pastebėjo, kad dalis  $\alpha$  dalelių, praeidamos foliją, yra išsklaidomos, t.y., pakeičia judėjimo kryptį. Jis padarė išvadą, kad  $\alpha$  dalelė pakeičia judėjimo kryptį dėl to, kad ją

stumia atomo teigiamasis elektrinis krūvis (žr. 1.6 pav.). Tačiau nuostabusia buvo tai, kad kai kurios dalelės buvo išsklaidomos didesniu už  $90^\circ$  kampu, t.y., atšokdavo atgal. Atsižvelgdamas į didelį  $\alpha$  dalelių greitį (maždaug 20000 km/s), Rezerfordas matematiškai įrodė, kad tai įmanoma tik tuo atveju, jeigu  $\alpha$  dalelę veikiantis teigiamasis krūvis sutelktas erdvės srityje, kurios matmenys maždaug 10000 kartų mažesni už atomo matmenis. Kad  $\alpha$  dalelė būtų išsklaidyta didesniu už  $90^\circ$  kampu, jos smūgis į šią erdvės sritį turi būti beveik centrinis (žr. apatinę kreivę 1.6 pav.).



1.5 pav. Rezerfordo matavimų schema

Apibendrinęs  $\alpha$  dalelių sklaidos tyrimų rezultatus, Rezerfordas 1911 m. pateikė naują atomo sandaros modelį, kuris vadinamas **branduoliniu atomo modeliu**. Pagal šį modelį, beveik visa atomo masė ir visas teigiamasis atomo krūvis yra sukonzentruotas atomo **branduolyje**, kurio matmenys maždaug 10000 kartų mažesni už viso atomo matmenis. Branduolio krūvis lygus elemento atominio numerio  $Z$  ir elementariojo krūvio  $e$  sandaugai  $Ze$ . Branduolio matmenys yra  $10^{-15} \div 10^{-14}$  m eilės (palyginimui: atomo matmenys yra  $10^{-10}$  m eilės). Išorinė atomo erdvė yra užpildyta elektronų, kurie skrieja aplink branduolį uždromis trajektorijomis, panašiai kaip planetos aplink Saulę. Elektronų pilnutinis neigiamasis krūvis yra lygus branduolio teigiamajam krūviui, todėl atomas yra neutralus.



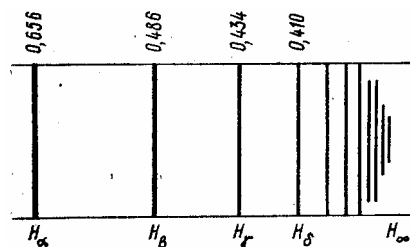
1.6 pav.  $\alpha$  dalelių sklaidos aiškinimas, remiantis branduoliniu atomo modeliu

Tačiau pagal klasikinę teoriją tokia sistema yra nestabili ir negali egzistuoti. Pagal klasikinę elektrodinamiką, elektronas, judėdamas aplink branduolį, turėtų nuolat spinduliuoti elektromagnetines bangas (nes judėjimas uždara orbita – tai judėjimas su pagreičiu, o su pagreičiu judantis krūvininkas spinduliuoja elektromagnetines bangas). Tas faktas, kad elektronas spinduliuoja, reiškia, kad jo energija nuolat mažėja. Vadinasi, elektronas turėtų spirale artėti prie branduolio. Per mažą sekundės dalį elektronas turėtų nukristi į branduolį, t.y., atomas nustotų egzistuoti. Tačiau patirtis rodo, kad atomai gali egzistuoti neribotai ilgai, nespinduliuodami elektromagnetinių bangų ir

neprarasdami energijos. Taigi, priėmus branduolinį atomo modelį, paaiškėjo, kad klasikinė elektrodinamika negali paaiškinti atomų egzistavimo.

### 1.5. Vandenilio atomo spektras

Žinias apie atomų sandarą teikia jų spinduliuotės spektrai. **Atomo spektrą** nusako atomo spinduliuojamų elektromagnetinių bangų (šviesos) dažniai. Matavimai rodo, kad atomai spinduliuoja tik atskirų tiksliai apibrėžtų dažnių elektromagnetines bangas. T.y., praleidus atomo spinduliuotę pro spektrinį prietaisą, pvz., pro difrakcinę gardelę, gaunamos siauros ryškios linijos (žr. 1.7 pav.). Todėl sakoma, kad atomų spektrai yra **linijiniai**. Kiekviena linija atitinka apibrėžto dažnio (ir apibrėžto bangos ilgio) šviesą. 1.7 pav. pavaizduota vandenilio atomo spektro dalis. Virš kiekvienos linijos nurodytas atitinkamas bangos ilgis ( $\mu\text{m}$ ). Po kiekviena linija pateiktas jos sutartinis žymėjimas.



1.7 pav. Vandenilio atomo spektro regimoji dalis

Matavimai rodo, kad linijos atomų spektruose išsidėsčiusios dėsningai. Anksčiausiai šis dėsningumas buvo pastebėtas lengviausiojo elemento – vandenilio – atomų spektre. 1885 m. šveicarų matematikas Johanas Balmeris paskelbė paprastą formulę vandenilio atomo spektro regimosios dalies linijų dažniui skaičiuoti:

$$\nu = R \left( \frac{1}{2^2} - \frac{1}{k^2} \right) \quad (k = 3, 4, 5, \dots). \quad (1.5.1)$$

Ši formulė vadinama **Balmerio formule**. Čia yra **Rydbergo konstanta**:  $R = 3.2931193 \cdot 10^{15} \text{ s}^{-1}$  ("Rydbergo konstanta" taip pat vadinamas dydžio  $R$  ir šviesos greičio santykis:  $R' = R/c = 1.0973732 \cdot 10^7 \text{ m}^{-1}$ ).  $k$  yra bet koks sveikasis skaičius, pradedant trim. Jeigu (1.5.1) formulėje vietoj  $k$  įrašytume 3, tuomet apskaičiavę gautume dažnį, kuris tiksliai sutampa su vandenilio spektro raudonosios linijos dažniu (ši linija žymima  $H_\alpha$ ). Įrašę  $k = 4$ , gautume žydrosios linijos  $H_\beta$  dažnį ir t.t. Ši vandenilio atomo linijų seka vadinama **Balmerio serija**. Žinant dažnį  $\nu$ , galima apskaičiuoti kiekvienos linijos bangos ilgį  $\lambda = c/\nu$ . Balmerio serijos pirmųjų keturių linijų bangų ilgiai nurodyti 1.7 pav.

Vėlesni vandenilio spektro tyrimai parodė, kad jame yra ir daugiau serijų. Ultravioletinėje srityje yra **Laimano serija**, kurios linijų dažniai yra

$$\nu = R \left( \frac{1}{1^2} - \frac{1}{k^2} \right) \quad (k = 2, 3, 4, \dots).$$

Infraraudonojoje srityje yra **Pašeno serija**, kurios linijų dažniai yra

$$\nu = R \left( \frac{1}{3^2} - \frac{1}{k^2} \right) \quad (k = 4, 5, 6, \dots).$$

Akivaizdu, kas visos vandenilio spektro serijų formulės gali būti išreikštos viena formule, kuri vadinama **Balmerio ir Rydbergo formule**:

$$\nu = R \left( \frac{1}{n^2} - \frac{1}{k^2} \right) \quad (k > n). \quad (1.5.2)$$

Laimano serijai  $n = 1$ , Balmerio serijai  $n = 2$ , o Pašeno serijai  $n = 3$ .

Vandenilio atomo spektro dėsningumai prieštarauja klasikiniam požiūriui į atomą. Pagal klasikinę elektrodinamiką, atomo spinduliuotės dažnis turėtų būti lygus elektrono apsisukimų dažniui. Tačiau pagal klasikinę teoriją elektronas turėtų nuolat spirale artėti prie branduolio (žr. 1.4 poskyrį). Tuomet elektrono sukimosi dažnis augtų. Atitinkamai, augtų ir spinduliuotės dažnis. T.y., klasikiniu požiūriu, atomas turėtų spinduliuoti ištisinio spektro spinduliuotę (o ne diskretaus dažnio spinduliuotę).

### 1.6. Boro postulatai

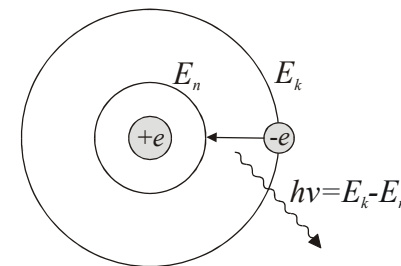
Danų fizikas Nilsas Boras 1913 m. suformulavo atomo teoriją, kuri susiejo tris tuo metu žinomus eksperimentinius faktus, prieštaraujančius klasikinei mechanikai:

- 1) branduolinis atomo modelis (žr. 1.4 poskyrį),
- 2) vandenilio atomo spektro dėsningumai (žr. 1.5 poskyrį),
- 3) Planko hipotezė apie spinduliavimo kvantinį pobūdį (žr. 1.1 poskyrį).

Boras atsisakė bandymų paaiškinti atomo sandarą klasikinės teorijos metodais. Vietoj to, jis pabandė atrasti kelis esminius principus, kurie yra suderinami su aukščiau minėtais eksperimentiniais faktais. Šiuos principus Boras suformulavo trijų postulatų pavidalu. "Postulatas" – tai teiginys, kuris naudojamas kaip išankstinė prielaida, formuluojant teoriją. Taigi, **Boro postulatai** yra šie.

**Pirmasis postulatąs (stacionariųjų būsenų postulatąs).** Elektronas gali skrieti apie branduolį tik tam tikromis orbitomis, nespinduliuodamas energijos. Šios orbitos vadinamos **stacionariomis**. Kiekvieną orbitą atitinka apibrėžta atomo energija  $E_n$  ( $n$  – orbitos numeris).

**Antrasis postulatąs (dažnių taisyklė).** Peršokant elektronui iš toliau nuo branduolio esančios orbitos  $k$  į artimesnę branduoliui orbitą  $n$ , išspinduliuojamas fotonas, kurio energija lygi



1.8 pav. Antrasis Boro postulatąs

$$h\nu = E_k - E_n. \quad (1.6.1)$$

(žr. 1.8 pav.).

**Trečiasis postulatų (orbitų kvantavimo taisyklė)** susieja orbitos numerį  $n$  su toje orbitoje esančio elektrono judesio kiekio momentu  $L$ . Pagal trečiąjį Boro postulatą,  $n$ -tojoje orbitoje esančio elektrono judesio kiekio momentas lygus

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

Čia  $h$  yra Planko konstanta ( $h = 6.63 \cdot 10^{-34}$  J·s), o  $\hbar$  yra **redukuotoji Planko konstanta**:  $\hbar = h/(2\pi)$ . Sveikasis skaičius  $n$  vadinamas **pagrindiniu kvantiniu skaičiumi**.

Pirmasis postulatų, iš vienos pusės, konstatuoja akivaizdų empirinį faktą, kad elektronas gali sukis aplink branduolį, nespinduliuodamas energijos (nors tai prieštarauja klasikinei elektrodinamikai), o iš kitos pusės, teigia, kad ne visos orbitos yra galimos. Pagal antrąjį postulatą (1.6.1), atomo spektrų linijų dažniai yra lygūs atomo orbitų energijų skirtumams, padalintiems iš Planko konstantos. Vadinasi, vandenilio atomo spektro linijinis pobūdis (dažnio diskretumas) yra pasekmė to fakto, kad vandenilio atomas gali turėti tik tam tikras tiksliai apibrėžtas energijos vertes. Antrasis postulatų taip pat yra nesutinkamas su klasikine fizika, pagal kurią elektrono spinduliuotės dažnis turėtų sutapti su jo sukimosi aplink branduolį dažniu. Trečiasis postulatų apibrėžia fizikinį dydį, kuris pilnai apibūdina kiekvieną orbitą. Tas fizikinis dydis – tai orbitoje esančio elektrono judesio kiekio momentas. Kaip žemiau pamatysime, pagal elektrono judesio kiekio momentą galima apskaičiuoti visus elektrono judėjimą apibūdinančius dydžius –  $n$ -tosios orbitos spindulį  $r_n$ , elektrono judėjimo greitį  $v_n$  ir elektrono judesio kiekį bei energiją. Žinant elektrono energijos galimas vertes, pagal antrąjį postulatą (1.6.1) galima apskaičiuoti atomo spektrą. Šie skaičiavimai pateikti žemiau.

### 1.7. Boro vandenilio atomo modelis

Prieš skaičiuojant vandenilio atomo spektrą pagal Boro teoriją, reikia prisiminti kelių mechanikoje naudojamų fizikinių dydžių apibrėžimus ir kelis mechanikos dėsnius:

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

$$\mathbf{F} = m\mathbf{a}. \quad (1.7.1)$$

- 2) Dalelę veikiančios jėgos  $\mathbf{F}$  atliktas **darbas**  $A$ , kai dalelė pasislenka vektoriumi  $\Delta\mathbf{r}$  – tai jėgos vektoriaus  $\mathbf{F}$  ir dalelės poslinkio vektoriaus  $\Delta\mathbf{r}$  skalarinė sandauga:

$$A = (\mathbf{F}, \Delta\mathbf{r}) = F \cdot \Delta r \cdot \cos \theta; \quad (1.7.2)$$

čia  $\theta$  yra kampas tarp vektorių  $\mathbf{F}$  ir  $\Delta\mathbf{r}$  (kaip matyti (1.7.2) formulėje, vektoriai žymimi pastorintu šriftu, o jų absoliutinės vertės – kursyvu).

- 3) Dalelės, kurios masė  $m$ , o greitis  $v$ , **judesio kiekio momento** (arba **mechaninio momento**) absoliutinė vertė yra lygi

$$L = rp = rmv; \quad (1.7.3)$$

čia  $r$  yra atstumas nuo taško, kurio atžvilgiu matuojamas judesio kiekio momentas, iki dalelės trajektorijos liestinės, išvestos per tašką, kuriame yra dalelė,  $p = mv$  yra dalelės judesio kiekis,  $m$  yra dalelės masė, o  $v$  yra jos greitis. Pvz., (1.7.3) nusako  $r$  spindulio apskrita orbita judančios dalelės judesio kiekio momentą orbitos centro atžvilgiu.

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

$$a = \frac{v^2}{r}. \quad (1.7.4)$$

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

$$W = \frac{mv^2}{2}. \quad (1.7.5)$$

- 6) Dviejų dalelių sąveikos **potencinė energija**  $U$ , kai dalelės yra duotuoju atstumu viena nuo kitos – tai darbas, kurį atliktų dalelių sąveikos jėga  $\mathbf{F}$ , nutolinant daleles vieną nuo kitos be galo dideliu atstumu. Jeigu dalelės traukia vienas kitą, tuomet, nutolinant jas vieną nuo kitos, dalelės juda priešinga sąveikos jėgai kryptimi, t.y., kampas tarp jėgos vektoriaus ir poslinkio vektoriaus lygus  $\theta = 180^\circ$ . Taigi, pasinaudojus darbo apibrėžimu (1.7.2), dviejų dalelių tarpusavio traukos potencinė energija, kai tos dalelės yra atstumu  $r$  viena nuo kitos, yra lygi

$$U = - \int_r^\infty F dr \quad (1.7.6)$$

(integralas čia naudojamas dėl to, kad sąveikos jėga  $F$  priklauso nuo atstumo  $r$ ). Iš (1.7.6) formulės išplaukia, kad dviejų dalelių tarpusavio traukos potencinė energija yra neigiama.

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

$$E = W + U. \quad (1.7.7)$$

Be to, skaičiavimuose bus naudojamas **Kulono dėsnis**, kuris teigia, kad dviejų dalelių, kurių elektriniai krūviai lygūs  $q_1$  ir  $q_2$ , sąveikos jėga lygi

$$F = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{q_1 q_2}{r^2}; \quad (1.7.8)$$

čia  $r$  yra atstumas tarp dalelių, o  $\varepsilon_0$  yra elektrinė konstanta:  $\varepsilon_0 = 8.854 \cdot 10^{-12} \text{ C}^2/(\text{N} \cdot \text{m}^2)$ . Jeigu dalelių elektriniai krūviai yra priešingo ženklo, tuomet pagal Kulono dėsnį (1.7.8) gaunama, kad jėga  $F$  yra neigiama. Tai reiškia, kad dalelės traukia viena kitą.

Remdamiesi Boro postulatais ir aukščiau minėtais apibrėžimais bei dėsniais, apskaičiuosime vandenilio atomo elektrono energijas ir tokiu būdu teoriškai pagrįsime Balmerio ir Rydbergo formulę (1.5.2). Šio uždavinio sprendimas susideda iš trijų dalių:

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

#### 1.7.1. Elektrono orbitų spindulių skaičiavimas

Visų pirma rasime elektrono orbitų spindulius  $r_n$  ( $n = 1, 2, 3, \dots$ ). Tuo tikslu pasinaudojame elektrono įcentrinio pagreičio išraiška (1.7.4). Pažymėjus elektrono greitį  $n$ -tojoje orbitoje  $v_n$ , elektrono įcentrinis pagreitis lygus

$$a = \frac{v_n^2}{r_n}. \quad (1.7.9)$$

Kita vertus, pagal antrąjį Niutono dėsnį (1.7.1) elektrono pagreitis yra lygus jį veikiančios jėgos ir elektrono masės  $m$  santykiui:

$$a = \frac{F_n}{m}; \quad (1.7.10)$$

čia  $F_n$  yra traukos jėga tarp branduolio ir elektrono, kai elektronas yra  $n$ -tojoje orbitoje. Šią jėgą nusako Kulono dėsnis (1.7.8). Vandenilio atomo branduolio krūvis lygus  $+e$ , o elektrono krūvis lygus  $-e$ . Įrašę tai į Kulono dėsnį (1.7.8), randame:

$$F(r) = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \cdot \frac{e^2}{r^2} \quad (1.7.11)$$

(čia nėra minuso ženklo, nes raide  $F$  susitarta žymėti jėgos absoliutinę vertę). Prilyginę lygybių (1.7.9) ir (1.7.10) dešiniąsias puses vieną kitai ir pasinaudoję jėgos  $F_n = F(r_n)$  išraiška (1.7.11), randame:

$$r_n = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \cdot \frac{e^2}{mv_n^2}. \quad (1.7.12)$$

Šioje orbitos spindulio išraiškoje yra vienas nežinomasis – elektrono greitis  $v_n$ . Jį galima išreikšti orbitos spinduliu  $r_n$ , pasinaudojus trečiuoju Boro postulatu (1.6.2). Tuo tikslu įrašome judesio kiekio momento apibrėžimą (1.7.3) į (1.6.2). Išreiškę  $v_n$ , randame:

$$v_n = n \frac{h}{2\pi m r_n} \quad (n = 1, 2, 3, \dots); \quad (1.7.13)$$

Įrašę (1.7.13) į (1.7.12), gauname:

$$r_n = n^2 \frac{\varepsilon_0 h^2}{\pi m e^2} \approx n^2 \cdot 0.529 \text{ Å} \quad (n = 1, 2, 3, \dots). \quad (1.7.14)$$

Šioje išraiškoje matyti, kad orbitos spindulys yra proporcingas orbitos numerio kvadratui. T.y., orbitos sunumeruotos spindulio  $r_n$  didėjimo tvarka. Pirmosios orbitos ( $n = 1$ ) spindulys pagal (1.7.14) formulę lygus  $r_1 \approx 5.3 \cdot 10^{-11} \text{ m} = 0.529 \text{ Å}$ . Šis dydis vadinamas **pirmuoju Boro spinduliu**. Įrašę šią vertę į (1.7.13) formulę, randame elektrono greitį pirmojoje orbitoje:  $v_1 \approx 2.2 \cdot 10^6 \text{ m/s}$ .

#### 1.7.2. Elektrono kinetinės energijos kiekvienoje orbitoje skaičiavimas

Pagal kinetinės energijos apibrėžimą (1.7.5), elektrono kinetinė energija  $n$ -tojoje orbitoje lygi

$$W_n = \frac{mv_n^2}{2}. \quad (1.7.15)$$

Įrašę  $v_n$  išraišką (1.7.13) į (1.7.15), gauname kinetinės energijos išraišką orbitos spinduliu  $r_n$ :

$$W_n = n^2 \frac{h^2}{8\pi^2 m r_n^2}. \quad (1.7.16)$$

Įrašę  $r_n$  išraišką (1.7.14) į (1.7.16), gauname  $n$ -tojoje orbitoje esančio elektrono kinetinę energiją:

$$W_n = \frac{1}{n^2} \cdot \frac{me^4}{8\varepsilon_0^2 h^2}. \quad (1.7.17)$$

#### 1.7.3. Elektrono potencinės energijos kiekvienoje orbitoje skaičiavimas

Dabar rasime potencinę energiją  $U$ . Pagal potencinės energijos apibrėžimą (1.7.6), tam reikia žinoti elektrono ir branduolio traukos jėgą. Šią jėgą nusako Kulono dėsnis (1.7.11). Įrašę (1.7.11) į (1.7.6) ir suintegravę nuo  $r$  iki  $\infty$ , gauname tokią potencinės energijos prieklausą nuo  $r$ :

$$U(r) = -\frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \cdot \frac{e^2}{r}. \quad (1.7.18)$$

Įrašę  $r_n$  išraišką (1.7.14) į (1.7.18), gauname  $n$ -tojoje orbitoje esančio elektrono potencinę energiją:

$$U_n = -\frac{1}{n^2} \cdot \frac{me^4}{4\varepsilon_0^2 h^2}. \quad (1.7.19)$$

#### 1.7.4. H atomo spektro skaičiavimas. Pagrindinė ir sužadintoji būsenos

Dabar galime apskaičiuoti vandenilio atomo energiją, kuri naudojama antrajame Boro postulata (1.6.1). Pagal (1.7.7), kai elektronas yra  $n$ -tojoje

orbitoje, vandenilio atomo pilnutinė mechaninė energija, kurią žymėsime  $E_n$ , yra lygi kinetinės energijos (1.7.17) ir potencinės energijos (1.7.19) sumai (čia neatsižvelgiama į atomo slenkamojo judėjimo kinetinę energiją). Tokiu būdu randame:

$$E_n = W_n + U_n = -\frac{1}{n^2} \frac{me^4}{8\varepsilon_0^2 h^2} \quad (n = 1, 2, 3, \dots). \quad (1.7.20)$$

Žinant atomo energijos vertes, galima apskaičiuoti atomo spektrą. Tačiau prieš tai reikia apibrėžti kelias naujas sąvokas. Atomas, kurio neveikia jokios išorinės jėgos, anksčiau ar vėliau pereina į mažiausios energijos būseną. Kaip matome energijos išraiškoje (1.7.20), atomo energijos algebrinė vertė yra mažiausia, kai elektronas skrieja pirmąja orbita ( $n = 1$ ). Tokia atomo būsena yra stabiliausia ir vadinama **pagrindine būsena**. Kol nėra jokių išorinių poveikių, atomas yra pagrindinės būsenos. Norint perkelti elektroną iš pirmosios orbitos į toliau nuo branduolio esančią orbitą, kurios numeris  $k > 1$ , atomui reikia suteikti energiją, kuri lygi orbitų energijų skirtumui  $E_k - E_1$ . Tokios būsenos atomas nėra stabilus. Sakoma, kad atomas **sužadintas**. Dingus išoriniam poveikiui, sužadintasis atomas per labai trumpą laiką ( $10^{-8}$  s eilės) savaime grįžta į pagrindinę būseną. Vandenilio atomo atveju tai reiškia, kad elektronas pereina iš aukštesnės orbitos į pirmąją orbitą. Tačiau sužadintojo atomo elektronas gali peršokti ne vien į pirmąją orbitą, bet ir į bet kurią arčiau branduolio esančią orbitą. Pvz., jeigu elektronas yra trečiojoje orbitoje, tuomet jis gali visų pirma pereiti į antrąją orbitą, o po to – į pirmąją. Kai elektronas peršoka iš tolimesnės  $k$ -tosios orbitos į artimesniąją  $n$ -tąją orbitą, atomas išspinduliuoja energijos kvantą  $h\nu = E_k - E_n$ . Tai atitinka atomo spektro liniją, kurios dažnis lygus

$$\nu = \frac{E_k - E_n}{h}. \quad (1.7.21)$$

Įrašę energijos išraišką (1.7.20) į (1.7.21), randame visų vandenilio atomo spektro linijų dažnius:

$$\nu = \frac{me^4}{8\varepsilon_0^2 h^3} \left( \frac{1}{n^2} - \frac{1}{k^2} \right) \quad (k > n). \quad (1.7.22)$$

Ši formulė labai panaši į eksperimentiškai gautą Balmerio ir Rydbergo formulę (1.5.2). Be to, formulėje (1.7.22) prieš skliaustus esančio daugiklio vertė gana tiksliai sutampa su išmatuotąja Rydbergo konstantos verte (žr. 1.5 poskyrį):

$$\frac{me^4}{8\varepsilon_0^2 h^3} = \frac{(9.11 \cdot 10^{-31}) \cdot (1.6022 \cdot 10^{-19})^4}{8 \cdot (8.854 \cdot 10^{-12})^2 \cdot (6.626 \cdot 10^{-34})^3} \approx 3.29 \cdot 10^{15} \text{ s}^{-1}.$$

Taigi, Boro atomo teorija paaiškino ne tik empirinės Balmerio formulės fizikinę prasmę, bet ir vandenilio atomo spektrinių serijų kilmę. Pagal Boro teoriją, Balmerio ir Rydbergo formulės (1.5.2) pirmojo dėmens vardiklyje esantis skaičius  $n$  yra eilės numeris orbitos, į kurią vyksta elektrono šuolis, o

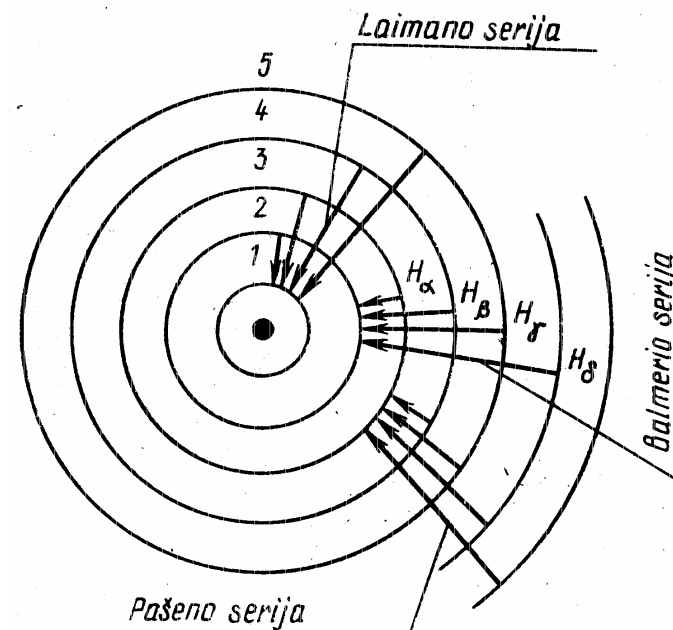
antrojo dėmens vardiklyje esantis skaičius  $k$  yra eilės numeris orbitos, iš kurios vyksta elektrono šuolis. Elektronui peršokant į pirmąją stacionariąją orbitą ( $n = 1$ ), išspinduliuojamos Laimano serijos linijos, peršokant į antrąją orbitą ( $n = 2$ ) – Balmerio serijos linijos ir t.t. 1.9 pav. šie elektrono šuoliai pažymėti rodyklėmis.

Visos atomo energijos vertės (1.7.20) vadinamos atomo **energijos lygmenimis**. Žemiausiasis energijos lygmuo, kuris atitinka atomo pagrindinę būseną, vadinamas **pagrindiniu lygmeniu**. Visi aukštesnieji lygmenys, kurie atitinka atomo sužadintąsias būsenas, vadinami **sužadintaisiais lygmenimis**. Grafiškai energijos lygmenys vaizduojami horizontaliomis atkarpomis (žr. 1.10 pav.). Įrašę konstantų  $m$ ,  $e$ ,  $\varepsilon_0$  ir  $h$  vertes į energijos išraišką (1.7.20), vandenilio atomo energijos lygmenis galime išreikšti šitaip:

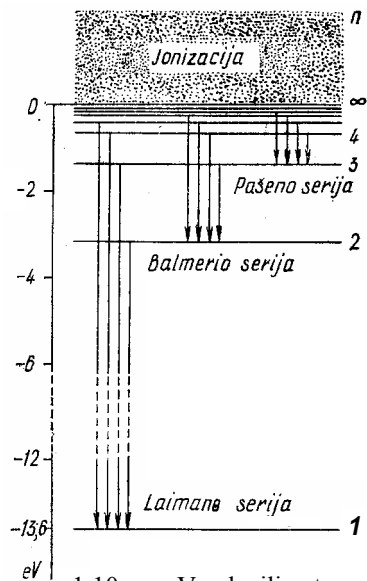
$$E_n = -\frac{13.6 \text{ eV}}{n^2} \quad (n = 1, 2, 3, \dots). \quad (1.7.23)$$

Čia “eV” reiškia elektronvoltą – dažniausiai atomo fizikoje naudojamą energijos vienetą. 1 eV atitinka energiją, kurią įgyja elektronas, pagreitintas 1 V įtampa:

$$1 \text{ eV} = e \cdot 1 \text{ V} = 1.6022 \cdot 10^{-19} \text{ C} \cdot 1 \text{ V} = 1.6022 \cdot 10^{-19} \text{ J}.$$



1.9 pav. Vandenilio spektro serijų susidarymas



1.10 pav. Vandenilio atomo energijos lygmenys

Kaip matome (1.7.23) formulėje, visos įmanomos atomo pilnutinės energijos vertės yra neigiamos. Matematinio požiūriu, taip yra todėl, kad neigiamos potencinės energijos absoliutinė vertė  $|U|$  yra didesnė už teigiamos kinetinės energijos vertę  $W$ . Fizikiniu požiūriu, taip yra todėl, kad elektroną ir branduolį sieja traukos jėga. Visų fizikinių sistemų, kurių dalelės susietos tarpusavyje traukos jėgomis, pilnutinė mechaninė energija yra neigiama.

Kuo didesnis orbitos numeris  $n$ , tuo energija  $E_n$  yra arčiau nulio. Nulinė energijos vertė atitinka laisvą, atitrūkusį nuo branduolio, elektroną (tuomet  $n = \infty$ ). Kai elektronas yra laisvas, tuomet jo ir branduolio tarpusavio traukos potencinė energija lygi nuliui, todėl pilnutinė energija tampa lygi elektrono kinetinei energijai. Pagal kinetinės energijos apibrėžimą (1.7.5), ji gali įgyti bet kokias neneigiamas vertes. Todėl virš nulinės energijos yra ištisinio spektro sritis (žr. 1.10 pav.).

Kuo žemesnis atomo energijos lygmuo, tuo stipriau elektronas susietas su branduoliu (tuo atomas patvaresnis). Pvz., pagrindinės būsenos energija  $E_1 = -13.6$  eV rodo, kad, norint išlaisvinti elektroną (t.y., jonizuoti atomą), atomui reikia suteikti 13.6 eV energiją; tuo tarpu elektronui išlaisvinti iš pirmojo sužadintojo lygmens ( $n = 2$ ) reikia  $13.6 / 4 = 3.4$  eV energijos ir t.t. Jeigu atomo gautoji energija yra didesnė už jonizacijos energiją, tuomet energijos perteklius virsta išlaisvintojo elektrono kinetine energija, kuri gali būti bet kokia.

Orbitų spindulių išraišką (1.7.14) ir kinetinės, potencinės bei pilnutinės energijų išraiškas (1.7.17), (1.7.19) ir (1.7.20) ir spektro linijų dažnių formulę (1.7.22) galima nesunkiai apibendrinti bet kokiam jonizuotam atomui, kuris yra praradęs visus elektronus, išskyrus vieną (tokie atomai vadinami **vandeniliškaisiais atomais**). Toks atomas skiriasi nuo vandenilio atomo tuo, kad branduolio krūvis lygus ne  $+e$ , o  $+Ze$ , kur  $Z$  yra sveikasis teigiamas skaičius. Tuomet Kulono dėsnio (1.7.11) dydį  $e^2$  reikia pakeisti dydžiu  $Ze^2$  (nes branduolio ir elektrono krūvių sandaugos absoliutinė vertė bendruoju atveju lygi  $Ze \cdot e = Ze^2$ ). Kadangi visose aukščiau pateiktose formulėse elektrono krūvis  $e$  „atsirado“ tik iš Kulono dėsnio, tai lygiai tą patį pakeitimą reikia atlikti ir kitose formulėse. T.y., norint pritaikyti bet kurią aukščiau

pateiktą formulę jonui su vieninteliu elektronu, dydį  $e^2$  reikia pakeisti dydžiu  $Ze^2$ . Pvz., vandeniliškojo jono  $n$ -tosios orbitos spindulys lygus

$$r_n = n^2 \frac{\varepsilon_0 h^2}{\pi m Z e^2} \approx n^2 \frac{0.529 \text{ Å}}{Z}. \quad (1.7.24)$$

Kaip matome, didėjant branduolio krūviui  $Z$ , orbitų spinduliai mažėja. Kadangi  $e^4 = e^2 \cdot e^2$ , tai energijos išraiškose dydį  $e^4$  reikia pakeisti dydžiu  $Z^2 e^4$ . Vadinasi, jono, aplink kurio branduolį sukasi vienintelis elektronas, pilnutinė mechaninė energija gali įgyti šias vertes:

$$E_n = W_n + U_n = -\frac{Z^2}{n^2} \cdot \frac{m e^4}{8 \varepsilon_0^2 h^2} = -\frac{Z^2}{n^2} \cdot 13.6 \text{ eV} \quad (n = 1, 2, 3, \dots). \quad (1.7.25)$$

Toks pats papildomas daugiklis  $Z^2$  atsiranda ir spektro linijų dažnių formulėje (1.7.22), kuri yra tapati Balmerio ir Rydbergo formulėi (1.5.2). Vadinasi, kai elektronas peršoka iš  $k$ -tosios į  $n$ -tąją orbitą, vandeniliškasis atomas išspinduliuoja fotoną, kurio dažnis

$$\nu = Z^2 R \left( \frac{1}{n^2} - \frac{1}{k^2} \right) \quad (k > n). \quad (1.7.26)$$

Čia  $R$  yra Rydbergo konstanta.

### 1.8. Atomo magnetinės savybės pagal Boro teoriją

Apskrita orbita judantis elektronas yra tapatus apskritu kontūru tekančiai elektros srovei. Kaip žinoma iš elektrodinamikos, tokia srovė turi magnetinį momentą, kuris lygus

$$M = \frac{eS}{T} = \frac{\pi e r^2}{T}; \quad (1.8.1)$$

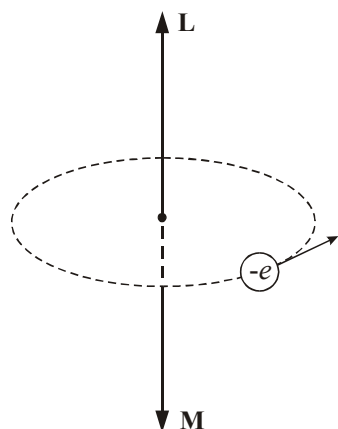
čia  $T$  yra apsisukimo periodas,  $S = \pi r^2$  yra orbitos plotas, o  $r$  yra orbitos spindulys. Antra vertus, greičiu  $v$  apskrita orbita judantis elektronas turi judesio kiekio momentą (1.7.3). Kadangi  $v = 2\pi r / T$ , tai

$$L = \frac{2\pi m r^2}{T}.$$

Išreiškę  $r^2 / T$  iš pastarosios formulės ir įrašę į (1.8.1), randame elektrono magnetinio ir judesio kiekio momentų sąryšį:

$$M = \frac{e}{2m} L.$$

Magnetinis ir judesio kiekio momentai yra vektoriniai dydžiai. Magnetinio momento vektoriaus  $\mathbf{M}$  kryptis susijusi su srovės kryptimi pagal dešiniojo sraigto taisyklę, t.y., patalpinus vektoriaus  $\mathbf{M}$  pradžią į srovės kontūro centrą ir žiūrint iš šio vektoriaus galo, srovė turi tekėti prieš laikrodžio rodyklę. Elektrono judesio kiekio momento  $\mathbf{L}$  kryptis susijusi su jo judėjimo kryptimi taip pat pagal dešiniojo sraigto taisyklę (žr. 1.11 pav.). Kadangi elektrono



1.11 pav. Apskrita orbita judančio elektrono mechaninis momentas  $L$  ir magnetinis momentas  $M$

krūvis yra neigiamas, tai jo sukuriamos srovės kryptis yra priešinga judėjimo kryptčiai. Vadinasi, elektrono magnetinio ir judesio kiekio momentų kryptys yra priešingos:

$$\mathbf{M} = -\frac{e}{2m} \mathbf{L} \quad (1.8.2)$$

(žr. 1.11 pav.). Kadangi judesio kiekio momento "natūralusis" matavimo vienetas yra  $\hbar$  (žr. III Boro postulata (1.6.2)), tai (1.8.2) patogiu užrašyti šitaip:

$$\mathbf{M} = -\mu_B \frac{\mathbf{L}}{\hbar}; \quad (1.8.3)$$

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

$$\mu_B = \frac{e\hbar}{2m}. \quad (1.8.4)$$

Boro magnetonas yra magnetinio momento natūralusis matavimo vienetas: pagal Boro teoriją, elektrono orbitinio magnetinio momento absoliutinė vertė lygi Boro magnetono ir orbitos numerio  $n$  sandaugai.

Patalpinus magnetinį momentą į išorinį magnetinį lauką, atsiranda jėga, kuri stengiasi orientuoti magnetinį momentą lauko kryptimi. Kadangi elektronas turi orbitinį mechaninį momentą, tai, esant išorinei jėgai, jis elgiasi kaip vilkelis: jo mechaninis momentas precesuoja aplink išorinės jėgos (magnetinio lauko) kryptį. Ši precesija vadinama **Larmoro precesija**, o jos dažnis vadinamas **Larmoro dažniu**. Elektrono Larmoro dažnis lygus

$$\nu_L = \frac{eB}{4\pi m} = \frac{\mu_B B}{2\pi\hbar} = \frac{\mu_B B}{h}; \quad (1.8.5)$$

čia  $B$  yra magnetinė indukcija. Šis dažnis yra labai didelis, todėl pasireiškia tik magnetinio momento vektoriaus vidurkis, kurio kryptis lygiagreti išoriniam magnetiniam laukui. Šio vidurkio vertė lygi magnetinio momento (1.8.3) projekcijai į išorinio magnetinio lauko kryptį.

Jeigu medžiagos atomai turi nenulinį magnetinį momentą, šie momentai dalinai orientuojasi magnetinio lauko kryptimi (tiksliai orientuotis trukdo šiluminis judėjimas). Tuomet medžiaga įmagnetėja lauko kryptimi. Tokios medžiagos vadinamos **paramagnetikais**. Kai kurių atomų elektronų magnetiniai momentai tiksliai kompensuoja vienas kitą, todėl atomo magnetinis momentas lygus nuliui ir medžiagos įmagnetėjimo mechanizmas yra kitoks. Tokios medžiagos įmagnetėja dėl minėtosios Larmoro precesijos. Mat, Larmoro precesija sukelia papildomą sukamąjį judėjimą aplink lauko kryptį. Larmoro precesijos kryptis susijusi su lauko kryptimi pagal dešiniojo sraigto taisyklę. Dėl Larmoro precesijos atsiranda papildoma sukurinė elektros

srovė, kurios kryptis priešinga precesijos kryptčiai (nes elektrono krūvis neigiamas). Todėl medžiagos, kurių atomai neturi pastovaus magnetinio momento, įmagnetėja priešinga laukui kryptimi. Tokios medžiagos vadinamos **diamagnetikais**.

### 1.9. Boro atomo teorijos ribotumas

Nors Boro teorija gana tiksliai aprašo vandenilio atomo spektrą, tačiau ji turi kai kurių esminių trūkumų, dėl kurių šiuo metu jau nėra naudojama praktiniuose skaičiavimuose. Pagrindinis trūkumas yra tas, kad ši teorija nebuvo nei nuosekliai kvantinė, nei nuosekliai klasikinė. Kaip ką tik įsitikinome, kiekybinėje analizėje Boro teorija naudojo klasikinės mechanikos dėsnius (pvz., antrasis Niutono dėsnis, potencinės ir kinetinės energijos išraiškos) bei tris Boro postulatus, kurie atspindi kvantinę šios teorijos pusę. Tačiau šie postulatai buvo naudojami kaip formalios išankstinės prielaidos, nebandoma jų paaiškinti. Dėl šių priežasčių Boro atomo teorija negalėjo paaiškinti platesnio masto atominių reiškinių. Pvz., buvo neįmanoma paaiškinti helio spektro bei molekulinį spektrų susidarymo, cheminių ryšių tarp atomų ir kt.

Boro teorija tapo pereinamuoju etapu tarp klasikinės fizikos ir kvantinės mechanikos, kurios pagrindai buvo sukurti XX a. trečiajame dešimtmetyje. Kvantinė mechanika dabartiniame mokslo etape geriausiai paaiškina atominius reiškinius. Kvantinės mechanikos požiūriu, atomo elektronas tolydžiai pasiskirstęs erdvėje aplink branduolį, t.y., sudaro "elektroninį debesį", o ne sukasi aplink branduolį tiksliai apibrėžta orbita ir tiksliai apibrėžtu greičiu (kaip teigė Boro atomo teorija).

Tačiau Boro atomo teorija, nors ir blogiau atspindinti tikrovę, yra žymiai vaizdesnė ir paprastesnė už kvantinę mechaniką, kurios matematinis aparatas yra gana sudėtingas. Be to, atomo energijos lygmenų sąvoka, kuri pirmą kartą panaudota Boro teorijoje, galioja ir kvantinėje mechanikoje. Todėl, jeigu siekiama vaizdžiai aprašyti kokį nors atominių reiškinių ir jeigu tai yra įmanoma, ir šiuo metu dažnai naudojama Boro atomo modeliu.



### 1.10. Medžiagos savybių korpuskulinis ir banginis dualumas

Prancūzų fizikas Luji de Broilis 1924 m. iškėlė hipotezę, kad korpuskulinis-banginis dualumas būdingas ne tik šviesai (fotonams), bet ir kiekvienai materialiajai dalelei – elektronams, protonams, atomams ir pan. Pagal de Broilį, kiekviena medžiagos dalelė pasižymi ir banginėmis, ir korpuskulinėmis savybėmis – korpuskulinis ir banginis dualumas būdingas visiems mikroobjektams.

Taigi, kiekvieną mikrodalelę galima apibūdinti ne tik korpuskuliniais dydžiais – energija  $E$  ir judesio kiekiu  $p$ , bet ir banginiais parametrais – dažniu  $\nu$  ir bangos ilgiu  $\lambda$ . Sąryšis tarp dalelės korpuskulinio ir banginio savybių kiekybiškai išreiškiamas tomis pačiomis lygtimis, kaip ir fotonams (žr. (1.1.1) ir (1.1.3)):

$$E = h\nu, \quad (1.10.1a)$$

$$p = \frac{h}{\lambda}. \quad (1.10.1b)$$

Vadinasi, bet kuri dalelė, kuri turi judesio kiekį, yra susijusi su banga, kurios ilgis išreiškiamas **de Broilio formule**:

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{mv}. \quad (1.10.2)$$

Čia  $p = mv$  yra dalelės, kurios masė  $m$ , o judėjimo greitis  $v$ , judesio kiekis. Šios bangos vadinamos **de Broilio bangom**.

Kelis metus nuo de Broilio hipotezės paskelbimo nebuvo jokio eksperimentinio jos patvirtinimo. Norint eksperimentiškai aptikti materialųjų dalelių banginę prigimtį, reikia atlikti bandymą, kuriame pasireikštų dalelių interferencija arba difrakcija. Dešimčių arba šimtų elektronvoltų energijos elektronų de Broilio bangos ilgis yra angstromų eilės, t.y., tos pačios eilės, kaip ir Rentgeno spindulių, kurie naudojami kristalų struktūros rentgeninėje analizėje (žr. 2.1.2 poskyrį). Vadinasi, jeigu elektronai turi banginių savybių, tuomet, atspindint maždaug 100 eV energijos elektronų pluošteliai nuo kristalo, atspindėjusios spinduliuotės intensyvumo maksimumai turėtų būti stebimi kryptimis, kurios tenkina Brego lygtį (2.3.1).

Taigi, vienas iš būdų patikrinti de Broilio hipotezę yra nuo kristalo atspindėjusių elektronų pluošto intensyvumo tyrimas. Tokį bandymą 1927 m. atliko amerikiečių fizikai K. Devisonas ir L. Džermeris. Bandymo metu kelių dešimčių elektronvoltų energijos elektronų pluoštas buvo nukreiptas į nikelio kristalo paviršių tam tikru fiksuotu kampu. Kristalas buvo pagamintas taip, kad jo paviršius būtų lygiagretus kažkurioms atominėms plokštumoms, kurių atstumas viena nuo kitos ( $d$ ) buvo žinomas. Todėl kampas tarp krintančiojo elektronų pluošto ir kristalo paviršiaus buvo lygus kampui  $\theta$  tarp elektronų pluošto ir tų plokštumų (žr. 2.6 pav.). Vadinasi, Brego lygties (2.3.1) kairiosios pusės vertė buvo žinoma. Eksperimento metu buvo matuojamas elektronų

srauto intensyvumas (t.y., elektronų skaičius per laiko vienetą į ploto vienetą) kryptimi, kuri atitinka veidrodinį atspindį nuo kristalo paviršiaus. Pagal Brego lygtį (2.3.1), šis intensyvumas turėtų būti maksimalus, kai elektronų de Broilio bangos ilgis  $\lambda$  tenkina sąlygą

$$\lambda = \lambda_{\max} = \frac{2d \sin \theta}{n} \quad (n = 1, 2, \dots). \quad (1.10.3)$$

T.y., mažinant bangos ilgį  $\lambda$ , atspindėjusio elektronų pluošto intensyvumas turėtų pakaitom sumažėti ir padidėti, o jo maksimumai turėtų atitikti bangos ilgio vertes, kurias nusako (1.10.3) formulė. Eksperimento metu buvo keičiama elektronų kinetinė energija  $E$ . Išreiškę iš de Broilio formulės (1.10.2) elektrono greitį  $v$ , randame, kad elektrono kinetinė energija yra atvirkščiai proporcinga de Broilio bangos ilgio kvadratui  $\lambda^2$ :

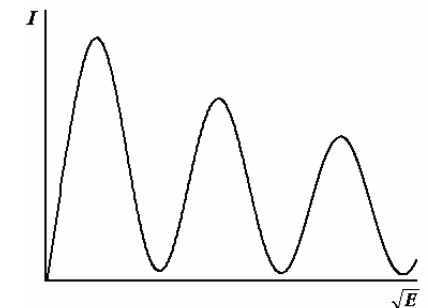
$$E = \frac{mv^2}{2} = \frac{m}{2} \left( \frac{h}{m\lambda} \right)^2 = \frac{h^2}{2m\lambda^2}. \quad (1.10.4)$$

Vadinasi, didinant energiją, taip pat turėtų būti stebimi intensyvumo padidėjimai ir sumažėjimai. Rasime elektronų energijos vertes, kurios atitinka atspindžio intensyvumo maksimumus. Irašę  $\lambda$  išraišką (1.10.3) į energijos formulę (1.10.4), gauname, kad intensyvumas turėtų būti didžiausias, kai elektronų kinetinė energija lygi

$$E = E_{\max} = \frac{h^2}{2m\lambda_{\max}^2} = \frac{h^2}{8md^2 \sin^2 \theta} \cdot n^2 \quad (n = 1, 2, 3, \dots) \quad (1.10.5)$$

Vadinasi, nubrėžus atspindėjusių elektronų srauto intensyvumo priklausą nuo kvadratinės šaknies iš elektronų energijos  $E$ , turėtume gauti kreivę su maksimumais, kurie išsidėstę vienodais atstumais vienas nuo kito. Būtent toks intensyvumo kitimas buvo gautas Devisono ir Džermerio eksperimente (žr. 1.12 pav.). Šie matavimai tapo pirmuoju eksperimentiniu de Broilio hipotezės patvirtinimu.

Vėlesniais tyrimais buvo pastebėta ne tik elektronų, bet ir protonų, neutronų ir net molekulių difrakcija. Visi šie eksperimentai galutinai patvirtino, kad mikrodalelės turi banginių savybių. Atradus mikrodalelių bangines savybes, buvo sukurti nauji metodai medžiagos struktūrai tirti, išsivystė nauja mokslo šaka – elektroninė optika. Elektroniniuose mikroskopuose vietoj šviesos pluošto naudojamas greitų elektronų pluoštas, o vietoj įprastinių lęšių naudojami magnetiniai lęšiai.



1.12 pav. Atspindėjusių nuo kristalo elektronų pluošto intensyvumo priklausą nuo kvadratinės šaknies iš elektrono energijos



Objektų, kuriuos galima stebėti elektroniniu mikroskopu, mažiausi matmenys yra žymiai mažesni, negu optinio mikroskopo atveju, nes šiuos matmenis lemia bangos ilgis, kuris elektronų atveju gali būti angstromų eilės, t.y., kelis tūkstančius kartų mažesnis, negu regimosios šviesos bangos ilgis.

Gali iškilti klausimas: kodėl banginės savybės nebūdingos makroskopiniams kūnams? Kūnams, kurių masė žymiai didesnė už mikrodalelių masę, de Broilio bangos ilgis (1.10.2) yra žymiai mažesnis. Pvz., 1 g masės dalelės, judančios 1 m/s greičiu, de Broilio bangos ilgis  $\lambda \approx 10^{-28}$  m. Tokių trumpų bangų eksperimentiškai aptikti neįmanoma. Todėl galima laikyti, kad makrokūnams būdingos tik korpuskulinės, o ne banginės savybės.

De Broilio hipotezės patvirtinimas iš pagrindų pakeitė požiūrį į mikroobjektų savybes. Visiems mikroobjektams būdingos ir korpuskulinės, ir banginės savybės, tačiau nė vienos mikrodalelės negalima laikyti klasikine dalele (kuriai galioja klasikinės mechanikos dėsniai) arba banga (tokia, kaip elektromagnetinės bangos).

### 1.11. Neapibrėžtumų sąryšis

Korpuskulinis ir banginis dualumas rodo, kad, aprašant mikrodaleles, reikia vienu metu naudotis ir banginėmis, ir korpuskulinėmis sampratomis.

Mikrodalelė negali vienu metu turėti tiksliai apibrėžtus judesio kiekį ir koordinatę. Tai išplaukia iš de Broilio formulės (1.10.2): jeigu dalelės judesio kiekis  $p$  yra tiksliai apibrėžtas, tai taip pat tiksliai apibrėžtas ir de Broilio bangos ilgis  $\lambda$ . Vadinasi, *dalelė, kurios judesio kiekis yra tiksliai apibrėžtas, elgiasi kaip apibrėžto bangos ilgio plokščioji banga*. Tačiau plokščioji banga yra pasiskirsčiusi visoje erdvėje. Tai reiškia, kad bangos koordinatė yra absoliučiai neapibrėžta. Pvz., tokia sąvoka, kaip “bangos ilgis duotajame taške” neturi prasmės. Vadinasi, *mikrodalelė su apibrėžtu judesio kiekiu turi visiškai neapibrėžtą koordinatę* (t.y., ją galima su vienoda tikimybe aptikti bet kuriame erdvės taške). Galioja ir atvirkščias teiginys: jeigu mikrodalelės koordinatės yra tiksliai žinomos, tai jos judesio kiekis yra visiškai neapibrėžtas.

“Neapibrėžtumo” sąvoka reiškia, kad, matuojant dalelės koordinatę arba judesio kiekį, skirtinguose matavimuose visuomet gausime šiek tiek skirtingas vertes, net jeigu matavimų metu dalelės judėjimo būseną nesikeičia. Šių verčių “išsibarstymo” apie vidurkį didumas ir nusako neapibrėžtumą. Tiksliau, neapibrėžtumas yra lygus standartiniam nuokrypiui (standartinio nuokrypio matematinis apibrėžimas pateiktas 4.2 poskyryje). Reikia turėti omenyje, kad mikrodalelių koordinatės ir judesio kiekio (arba greičio) standartiniai nuokrypiai, apie kuriuos čia kalbama, nėra susiję su matavimo metodų netobulumais. Šio matavimų rezultatų išsibarstymo priežastis yra mikrodalelių dvejojama – korpuskulinė ir banginė – prigimtis. Siekiant tai pabrėžti, vietoj “standartinio nuokrypio” sąvokos naudojama “neapibrėžtumo” sąvoka, nors matematiškai abi šios sąvokos apibrėžiamos vienodai.

Vokiečių fizikas Verneris Heizenbergas 1927 m. suformulavo *neapibrėžtumų sąryšį*. Pagal šį principą, mikrodalelės negali vienu metu turėti tiksliai apibrėžtus judesio kiekius ir koordinates. Dalelės koordinatės ir judesio kiekio neapibrėžtumai susiję tokiomis nelygybėmis:

$$\Delta x \cdot \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2}; \quad \Delta y \cdot \Delta p_y \geq \frac{\hbar}{2}; \quad \Delta z \cdot \Delta p_z \geq \frac{\hbar}{2}. \quad (1.11.1)$$

Čia  $\Delta x$ ,  $\Delta y$  ir  $\Delta z$  yra dalelės Dekarto koordinačių neapibrėžtumai (standartiniai nuokrypiai),  $\Delta p_x$ ,  $\Delta p_y$  ir  $\Delta p_z$  yra atitinkamų judesio kiekio komponentių neapibrėžtumai, o  $\hbar = h/(2\pi) \approx 1.05 \cdot 10^{-34}$  J·s yra *redukuotoji Planko konstanta*. Pavyzdžiui, jeigu mikrodalelės koordinatė  $x$  yra tiksliai nustatyta ( $\Delta x = 0$ ), tuomet pagal pirmąjį (1.11.1) neapibrėžtumų sąryšį dalelės judesio kiekio atitinkamos komponentės neapibrėžtumas  $\Delta p_x = \infty$ , t.y., ši judesio kiekio komponentė yra visiškai neapibrėžta. Kadangi judesio kiekis yra lygus dalelės masės ir greičio sandaugai, tai iš (1.11.1) lengvai gaunami koordinatės ir greičio neapibrėžtumų sąryšiai. Pvz.,  $x$  komponentei galioja sąryšis

$$\Delta x \cdot \Delta v_x \geq \frac{\hbar}{2m} \quad (1.11.2)$$

( $y$  ir  $z$  komponentėms galioja tokie patys neapibrėžtumų sąryšiai).

Neapibrėžtumų sąryšiai (1.11.1) arba (1.11.2) reiškia, kad dalelės judėjimo trajektorijos sąvoka, kuri naudojama klasikinėje mechanikoje, negalioja mikrodalelėms. Klasikinės mechanikos dėsniai (pvz., II Niutono dėsnis) tiksliai nusako dalelės padėtį erdvėje kiekvienu laiko momentu, jeigu yra žinomos dalelę veikiančios jėgos. Vadinasi, naudojantis klasikinės mechanikos dėsniais, galima apskaičiuoti dalelės koordinačių  $x$ ,  $y$  ir  $z$  prieklausas nuo laiko. Šios trys laiko funkcijos nusako dalelės judėjimo trajektoriją (dalelės kelią erdvėje). Tačiau, jeigu tiksliai žinoma, pvz., koordinatės  $x$  prieklausa nuo laiko  $x(t)$ , tuomet tiksliai žinoma ir šios funkcijos išvestinė laiko atžvilgiu, t.y., greičio komponentė  $v_x$ , o tai prieštarauja neapibrėžtumo sąryšiui (1.11.2). Taigi, neapibrėžtumų sąryšiai nusako, koku tikslumu galima taikyti klasikinės mechanikos dėsnius (pvz., trajektorijos sąvoką), aprašant dalelės judėjimą. Žemiau pateikti trys pavyzdžiai, kurie iliustruoja šį teiginį.

1. Tarkime, kad matuojama 1 g masės kūno, kuris juda išilgai  $X$  ašies 1 m/s greičiu, koordinatė tam tikru laiko momentu. Tarkime, kad kūno greitis išmatuotas  $10^{-9}$  m/s tikslumu (tai yra labai didelis tikslumas). Tuomet pagal koordinatės ir greičio neapibrėžtumų sąryšį (1.11.2) mažiausias įmanomas koordinatės neapibrėžtumas lygus

$$(\Delta x)_{\min} = \frac{\hbar}{2m\Delta v} \approx 5.3 \cdot 10^{-23} \text{ m}.$$

Tai yra toks mažas dydis, kad jį galima laikyti lygiu nuliui. Taigi, greičio ir koordinatės neapibrėžtumai šiame pavyzdyje yra praktiškai lygūs nuliui.

Vadinasi, masyviems kūnams, kurie sudaryti iš daugelio milijardų atomų, klasikinės mechanikos dėsniai galioja praktiškai idealiai tiksliai.

2. Kitas pavyzdys: elektrono, judančio vandenilio atome, koordinatės neapibrėžtumas yra apytiksliai lygus vandenilio atomo matmenims, t.y., maždaug  $10^{-10}$  m. Vadinasi, pagal neapibrėžtumų sąryšį (1.11.2), elektrono greičio neapibrėžtumas vandenilio atome yra didesnis už

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

Ši vertė yra tos pačios eilės, kaip vidutinis elektrono greitis atome. Pvz., ji yra tik 4 kartus mažesnė už pirmosios orbitos elektrono greitį Boro atomo modelyje (žr. (1.7.13)). Tai reiškia, kad nėra prasmės kalbėti apie elektrono judėjimą atome tam tikra orbita. Kitais žodžiais, aprašant elektrono judėjimą atome, negalima taikyti klasikinės mechanikos dėsnių.

3. Dabar tarkime, kad elektronas televizoriaus kineskope juda greičiu  $v_x = 10^6$  m/s ir kad šis greitis nustatytas 0.01% tikslumu, t.y.,  $\Delta v_x = 10^6 \cdot 0.0001 = 100$  m/s. Pagal (1.11.2) formulę, mažiausias elektrono koordinatės neapibrėžtumas lygus

$$(\Delta x)_{\min} = \frac{\hbar}{2m\Delta v} \approx 5.8 \cdot 10^{-7} \text{ m},$$

t.y., labai mažas dydis, lyginant su kineskopo matmenimis. Todėl klasikinės mechanikos dėsniai galioja pakankamu praktiniams pritaikymams tikslumu (nors ir ne taip tiksliai, kaip pirmajame pavyzdyje).

Remiantis šiais pavyzdžiais, galima teigti, kad, pagal neapibrėžtumų sąryšį, judėjimas apibrėžta trajektorija įmanomas tik pakankamai masyviems kūnams arba labai greitoms mikrodalelėms.

Neapibrėžtumų sąryšis tapo vienu iš pagrindinių (ir vienu iš pirmųjų) kvantinės mechanikos principų. **Kvantinė mechanika** arba **banginė mechanika** – tai fizikos šaka, kuri tiria mikrodalelių judėjimo išorinių jėgų laukuose dėsnius ir tų dalelių sistemų (pvz., atomų, molekulių, kristalų) vidines savybes. Kvantinės mechanikos dėsniai galioja ne vien mikrodalelių judėjimui, bet ir visų kūnų judėjimui, tačiau masyvių kūnų arba labai aukštos energijos mikrodalelių de Broilio bangos ilgis yra toks mažas, kad banginės savybės nepasireiškia ir galioja klasikinės Niutono mechanikos dėsniai. T.y., klasikinė mechanika – tai ribinis kvantinės mechanikos atvejis, kuris galioja didelių masių ir energijų kūnams. Kvantinės mechanikos pagrindai buvo sukurti 1925 – 1926 m. Jos kūrėjai buvo jau minėtas V. Heizenbergas ir austrų fizikas Ervinas Šrėdingeris.

## 1.12. Banginė funkcija ir jos statistinė samprata

1.10 poskyryje aprašyti matavimai patvirtino de Broilio hipotezę apie tai, kad materialios dalelės kai kuriomis sąlygomis elgiasi kaip bangos, kurios gali interferuoti lygiai taip pat, kaip elektromagnetinės bangos. Kaip žinoma iš banginės optikos, visus pagrindinius interferencijos dėsningumus galima paaiškinti, remiantis tuo, kad elektromagnetinėje bangoje elektrinis laukas kinta erdvėje ir laike harmoniniu dėsniu:

$$\mathcal{E}(x, t) = \mathcal{E}_0 \cos \left[ 2\pi \left( \frac{x}{\lambda} - \nu t \right) \right]; \quad (1.12.1)$$

čia  $x$  yra koordinatė bangos sklidimo kryptimi,  $t$  yra laikas,  $\lambda$  yra bangos ilgis,  $\nu$  yra dažnis, kuris lygus  $\nu = c / \lambda$ ;  $c$  yra šviesos greitis. Interferencija atsiranda dėl to, kad, sudedant dvi bangas, gali atsirasti taip, kad vienuose erdvės taškuose abiejų bangų elektriniai laukai yra vienodos krypties, t.y., bangos stiprina viena kitą, o kituose erdvės taškuose elektriniai laukai yra priešingų kryptų, t.y., bangos silpnina viena kitą. Eksperimentiniai faktai rodo, kad vienodos energijos ir vienos krypties materialijų dalelių srautui taip pat galima priskirti (1.12.1) pavidalo bangą, ir tuomet dalelių interferencijos dėsningumus galima paaiškinti lygiai taip pat, kaip elektromagnetinių bangų interferencijos dėsningumus. Tačiau tuomet iškyla klausimas, kokia šių bangų prigimtis, t.y., koks dydis atlieka elektrinio lauko (dydžio  $\mathcal{E}$  (1.12.1) formulėje) vaidmenį materialijų dalelių atveju.

Norint atsakyti į šį klausimą, galima pasinaudoti analogija tarp materijos dalelių (pvz., elektronų) ir fotonų. Fotonams, kaip ir elektronams, yra būdingas korpuskulinis ir banginis dualumas. Banginės teorijos požiūriu, šviesos intensyvumas kuriame nors ekrano taške yra proporcingas šviesos bangos amplitudės kvadratui. Fotoninės teorijos požiūriu, šviesos intensyvumas yra proporcingas skaičiui fotonų, pataikiusių į ekrano ploto vienetą per laiko vienetą. Šis skaičius, savo ruožtu, yra proporcingas fotono pataikymo į duotąjį ekrano tašką tikimybei. Iš čia galima daryti išvadą: *šviesos bangos amplitudės kvadratas kuriame nors erdvės taške yra fotono pataikymo į tą tašką tikimybės matas*. Taikant šią išvadą reiškiniams, kuriuose pasireiškia materialijų dalelių difrakcija (pvz., 1.10 poskyryje aprašytam Devisono ir Džermerio bandymui), galima teigti, kad *materialijų dalelių (pvz., elektronų) de Broilio bangų amplitudės absoliutinės vertės kvadratas kuriame nors erdvės taške taip pat yra tų dalelių aptikimo tame erdvės taške tikimybės matas*.

Dydis, kuris apibūdina dalelės buvimo duotajame erdvės taške tikimybę, vadinamas tikimybės tankiu. **Tikimybės tankis** – tai dalelės radimo duotojoje nykstamai mažoje erdvės srityje tikimybės  $dP$  ir tos srities tūrio  $dV$  santykis  $dP/dV$ . Iš to, kas aukščiau pasakyta, išplaukia, kad dydžio, kuris kinta erdvėje (1.12.1) dėsniu ir kuris aprašo materialijų dalelių interferenciją bei

difrakciją, absoliutinės vertės kvadratas yra lygus tikimybės tankiui aptikti dalelę duotajame erdvės taške. Dabar jau galime tiksliai apibrėžti banginės funkcijos sąvoką. Dalelės **banginė funkcija** – tai koordinačių ir laiko kompleksinė funkcija  $\Psi(x,y,z,t)$ , kuri apibūdina dalelės judėjimo būseną ir kurios absoliutinės vertės kvadratas lygus tikimybės tankiui aptikti duotosios būsenos dalelę erdvės taške su koordinatėmis  $x, y$  ir  $z$  laiko momentu  $t$ :

$$|\Psi|^2 = \frac{dP}{dV} \quad (1.12.2a)$$

arba

$$dP = |\Psi|^2 dV. \quad (1.12.2b)$$

Šiame banginės funkcijos apibrėžime reikia atkreipti dėmesį į teiginį, jog banginė funkcija apibūdina dalelės judėjimo būseną. Tai reiškia, kad, uždavus banginę funkciją, tuo pačiu pilnai apibūdinamas dalelės judėjimas visais laiko momentais. Skirtingų energijų dalelės turi skirtingas bangines funkcijas. Be to, reikia atkreipti dėmesį į tai, kad banginė funkcija yra kompleksinė. Vadinas, analogija su elektromagnetinių bangų elektriniu lauku, kuris yra realusis dydis, yra tik dalinė.

Iš banginės funkcijos apibrėžimo (1.12.2b) išplaukia, kad tikimybė aptikti dalelę baigtiniame tūryje  $V$  yra lygi

$$P = \int_V dP = \int_V |\Psi|^2 dV. \quad (1.12.3)$$

Jeigu tūris  $V$  artėja į begalybę, tuomet tikimybė  $P$  turi artėti į vienetą, nes dalelė tikrai yra kažkuriame erdvės taške. Iš čia išplaukia ši **banginės funkcijos normavimo sąlyga**:

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi|^2 dV = 1; \quad (1.12.4)$$

čia integruojama visoje erdvėje.

Banginei funkcijai galioja **superpozicijos principas**. Jo esmė yra tokia. Tarkime, kad kuris nors su dalele susijęs įvykis gali atsitikti keliais nepriklausomais būdais. Pvz., Devisono ir Džermerio bandyme elektronas gali atsispindėti nuo bet kurios kristalografinės plokštumos (žr. 2.6 pav.). Tuomet *tikroji dalelės banginė funkcija lygi funkcijų, atitinkančių visus įmanomus įvykius, tiesiniam dariniui*. Pvz., jeigu nuo viršutinės plokštumos atsispindėjusio elektrono banginę funkciją pažymėsime  $\Psi_1$ , o nuo žemiau esančios gretimos plokštumos atsispindėjusio elektrono banginę funkciją pažymėsime  $\Psi_2$  ir laikysime, kad elektronas gali su vienoda tikimybe atsispindėti nuo abiejų šių plokštumų, o nuo kitų kristalografinių plokštumų elektronai neatsispindi, tuomet tikroji atsispindėjusio elektrono banginė funkcija bus lygi

$$\Psi = \Psi_1 + \Psi_2. \quad (1.12.5)$$

Būtent dėl superpozicijos principo (1.12.5) vyksta materialijų dalelių interferencijos ir difrakcijos reiškiniai. Dviejų banginių funkcijų suma (1.12.5) gali būti ir didesnė, ir mažesnė už kiekvieną iš dedamųjų funkcijų  $\Psi_1$  ir  $\Psi_2$ . Banginės funkcijos padidėjimas kurioje nors erdvės srityje, pagal (1.12.3), reiškia, kad toje erdvės srityje padidėja tikimybė aptikti dalelę. Banginės funkcijos sumažėjimas reiškia, kad toje erdvės srityje dalelės buvimo tikimybė sumažėja.

Nors aukščiau banginės funkcijos sąvoka buvo taikoma materialiosioms dalelėms (pvz., elektronams), tačiau visi teiginiai galioja ir fotonams. T.y., šviesos interferencijos ir difrakcijos reiškiniai galima aprašyti, ne tik naudojant elektromagnetinių bangų sąvoką, bet ir naudojant fotono banginės funkcijos sąvoką.

Iš to, kas aukščiau pasakyta, išplaukia, kad banginė funkcija nėra tiesiogiai išmatuojamas dydis. Tiesiogiai išmatuoti galima tik jos absoliutinės vertės kvadratą, nes jis turi aiškia fizikinę prasmę (dalelės buvimo duotajame erdvės taške tikimybės tankis). Taigi, pačios banginės funkcijos neišmanoma sutapatinti su jokių fizikinių dydžių. Tuo de Broilio bangos iš esmės skiriasi nuo klasikinių bangų. Pvz., elektromagnetinės bangos – tai kintantys erdvėje ir laike elektrinis ir magnetinis laukai, kuriuos galima išmatuoti; garso bangos arba bangos ant vandens paviršiaus – tai kintantis erdvėje ir laike dalelių poslinkis atžvilgiu vidutinės padėties, kurį taip pat galima išmatuoti. Tuo tarpu banginė funkcija leidžia tik numatyti dalelės buvimo įvairiose erdvės srityse tikimybę, tačiau neišgalima tiksliai nustatyti nei dalelės trajektorijos, nei dalelės greičio. Banginės funkcijos sąvoka atspindi kvantinės mechanikos statistinį pobūdį, kuris susijęs su neapibrėžtumų sąryšiu (1.11.1). Tačiau dalelės banginė funkcija – tai pilniausias įmanomas dalelės judėjimo aprašymo būdas. Banginė funkcija pilnai nusako ir bangines, ir korpuskulines dalelės savybes.

### 1.13. Šrėdingerio lygtis. Energijos lygmenys. Kvantiniai šuoliai

Praeitame poskyryje buvo apibrėžta banginės funkcijos  $\Psi(x,y,z,t)$  sąvoka ir buvo paaiškinta jos prasmė:  $|\Psi(x,y,z,t)|^2 dx \cdot dy \cdot dz$  nusako tikimybę aptikti dalelę erdvės tūrio elemente  $dV = dx \cdot dy \cdot dz$  laiko momentu  $t$ . Taigi, jeigu žinomas banginės funkcijos pavidalas, tuomet bet kuriuo laiko momentu yra žinoma tikimybė aptikti dalelę bet kuriame erdvės taške, t.y., dalelės judėjimas yra pilnai apibrėžtas. Vadinas, norint pilnai aprašyti dalelės judėjimą, reikia žinoti banginės funkcijos  $\Psi(x,y,z,t)$  pavidalą.

Pagrindinė nereliatyvistinės kvantinės mechanikos lygtis, kuri matematiškai apibrėžia dalelės banginę funkciją  $\Psi$ , yra **Šrėdingerio lygtis**, kurią 1926 m. suformulavo austrų fizikas Ervinas Šrėdingeris. Šrėdingerio lygtis, kaip ir visi pagrindiniai fizikos dėsniai (pvz., Niutono dėsniai), negali būti griežtai matematiškai išvesta, o yra postuluojuama. Jos pavidalas yra toks:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi - U(x,y,z,t)\Psi = i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}; \quad (1.13.1)$$

čia  $m$  yra dalelės masė,  $\nabla$  yra diferencialinis "nabla" operatorius ( $\nabla = \mathbf{x}_0 \frac{\partial}{\partial x} + \mathbf{y}_0 \frac{\partial}{\partial y} + \mathbf{z}_0 \frac{\partial}{\partial z}$ , kur  $\mathbf{x}_0$ ,  $\mathbf{y}_0$  ir  $\mathbf{z}_0$  yra  $X$ ,  $Y$  ir  $Z$  ašių vienetiniai

vektoriai),  $\nabla^2$  yra Laplaso operatorius  $\left(\nabla^2\Psi = \frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\Psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\Psi}{\partial z^2}\right)$ ,

$i = \sqrt{-1}$  yra menamasis vienetas,  $U$  yra dalelės potencinė energija. Šrėdingerio lygties (1.13.1) vaidmuo kvantinėje mechanikoje yra toks pats, koks yra Niutono dėsnų vaidmuo klasikinėje mechanikoje.

(1.13.1) yra **bendroji Šrėdingerio lygtis**. Jeigu dalelės potencinė energija  $U$  nepriklauso nuo laiko (t.y., jeigu dalelė juda **stacionariajame potencialiniame lauke**), tuomet (1.13.1) lygties sprendiniai yra tokio pavidalo:

$$\Psi(x,y,z,t) = \psi(x,y,z)e^{-iEt/\hbar}, \quad (1.13.2)$$

o erdvinių koordinatų funkcija  $\psi(x,y,z)$  tenkina šią lygtį:

$$\nabla^2\psi + \frac{2m}{\hbar^2}[E - U(x,y,z)]\psi = 0; \quad (1.13.3)$$

čia  $E$  yra pilnutinė mechaninė dalelės energija. (1.13.3) lygtis vadinama **stacionariąja Šrėdingerio lygtimi**. Kadangi daugumoje atomo fizikos uždavinių (pvz., elektrono judėjimas atome arba dalelių laisvasis judėjimas vakuume) dalelės potencinė energija nepriklauso nuo laiko, "banginė funkcija" dažniausiai vadinama būtent erdvinių koordinatų funkcija  $\psi(x,y,z)$ , o ne pilnoji funkcija (1.13.2). Sprendžiant stacionariąją Šrėdingerio lygtį (1.13.3), reikia turėti omenyje, kad bendruoju atveju ne visi įmanomi sprendiniai gali atlikti dalelės banginės funkcijos vaidmenį. Taip yra todėl, kad banginės funkcijos absoliutinės vertės kvadratas turi tikimybės tankio prasmę. Tai reiškia, kad banginė funkcija turi būti:

- 1) baigtinė (tikimybė negali būti didesnė už vienetą);
- 2) vienareikšmė (tikimybė negali būti daugiareikšmė);
- 3) tolydi (tikimybės tankis erdvėje negali kisti šuoliais).

Vadinasi, iš visų galimų lygties (1.13.3) sprendinių reikia atrinkti tik tuos, kurie tenkina šiuos tris reikalavimus. Diferencialinių lygčių teorijoje įrodoma, kad bendruoju atveju (1.13.3) lygties sprendiniai, kurie yra baigtiniai, vienareikšmiai ir tolydūs, egzistuoja, tik esant tam tikroms pilnutinės energijos  $E$  vėrtėms:  $E = E_n$  ( $n = 1, 2, 3, \dots$ ). Naudojant diferencialinių lygčių teorijos terminologiją, šios vėrtės yra lygties (1.13.3) **tikrinės vėrtės**, o jas atitinkantys sprendiniai  $\psi = \psi_n$  ( $n = 1, 2, 3, \dots$ ) – lygties (1.13.3) **tikrinės funkcijos**. Naudojant kvantinės mechanikos terminologiją, kiekviena tikrinė funkcija  $\psi_n$  – tai dalelės banginė funkcija būsenoje, kurioje dalelės pilnutinė energija  $E$  yra

tiksliai apibrėžta ir lygi atitinkamai tikrinei vėrtei  $E_n$ . Dalelės būseną, kurios energija yra tiksliai apibrėžta, atitinka kažkurį dalelės **energijos lygmenį**. Taigi, stacionarioji Šrėdingerio lygtis (1.13.3) nusako visus dalelės energijos lygmenis  $E_n$  ir dalelės banginės funkcijas  $\psi_n$ , kai ji yra kiekviename iš tų lygmenų. Žemiausiasis energijos lygmuo vadinamas **pagrindiniu lygmeniu**. Energijos diagramose energijos lygmenys vaizduojami horizontaliomis atkarpomis (pvz., žr. 1.10 pav.).

Kvantinė sistema (pvz., atomas arba branduolys), kurios neveikia jokios išorinės jėgos, anksčiau ar vėliau savaime pereina į pagrindinį energijos lygmenį. Tokia sistemos būseną yra stabiliausia ir vadinama **pagrindine būsena**. Kol nėra jokių išorinių poveikių, sistema yra pagrindinės būsenos. Norint perkelti sistemą iš pagrindinio lygmens  $E_1$  į aukštesnį lygmenį  $E_n$ , sistemai reikia suteikti energiją, kuri lygi lygmenų skirtumui:  $\Delta E = E_n - E_1$ . Tokios būsenos sistema nėra stabili. Sakoma, kad sistema **suzadinta**. Dingus išoriniam poveikiui, sistema savaime grįžta į pagrindinę būseną. Atomo atveju tai įvyksta per  $10^{-8}$  s eilės laiką. Kvantinės sistemos perėjimas iš vieno energijos lygmens į kitą vadinamas **kvantiniu šuoliu**. Vykstant kvantiniam šuoliui iš aukštesnio energijos lygmens  $E_k$  į žemesnį energijos lygmenį  $E_n$ , išspinduliuojamas fotonas, kurio energija lygi tų lygmenų skirtumui:

$$h\nu = E_k - E_n. \quad (1.14.4)$$

Priešingas šuolis gali įvykti, tik sugėrus tos pačios energijos fotoną.

#### 1.14. Dalelė potencinėje duobėje. Elektronas atome

Kaip matyti (1.13.3) lygtyje, dalelės energijos lygmenys  $E_n$  ir atitinkamos banginės funkcijos  $\psi_n$  priklauso nuo potencinės energijos  $U(x,y,z)$  pavidalo. Tačiau kai kurias bendrąsias stacionariosios Šrėdingerio lygties (1.13.3) sprendinių savybes galima nustatyti, nekonkretizuojant potencinės energijos  $U(x,y,z)$  pavidalo. Kad būtų paprasčiau, nagrinėsime vienmatį dalelės judėjimo modelį. T.y., laikysime, kad potencinė energija  $U$  ir banginė funkcija  $\psi$  priklauso tik nuo vienos koordinatės  $x$ . Tuomet stacionarioji Šrėdingerio lygtis (1.13.3) įgyja tokį pavidalą:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E - U(x))\psi = 0. \quad (1.14.1)$$

Kvantinės mechanikos uždaviniuose dažnai sutinkama potencinės energijos prieklausa nuo koordinatės, kurios bendrasis pavidalas pavaizduotas 1.13a pav. Šios prieklausos pagrindinės savybės yra tokios:

- 1) potencinė energija turi neigiamą minimumą tam tikrame taške  $x_{\min} \geq 0$ ;
- 2) kai  $x \rightarrow \infty$ , potencinė energija auga, artėdama prie nulio;
- 3) kai  $x \rightarrow 0$ , potencinė energija auga ir tampa didesnė už nulį ( $x_{\min} > 0$ ).

Pvz., tokio pavidalo potencinė energija nusako sąveiką tarp molekulės atomų. Energijos minimumo taškas  $x_{\min}$  atitinka dviejų atomų sistemos pusiausvyros būseną. Nutolus nuo šio taško bet kuria kryptimi, atsiranda jėga

$$F = -\frac{dU}{dx}, \quad (1.14.2)$$

kuri stengiasi atstatyti pusiausvyrą tarp traukos ir stūmos jėgų. Todėl atomai virpa apie pusiausvyros padėtis. Šių virpesių energijos vertės – tai Šrėdingerio lygties (1.14.1) tikrinės vertės  $E$ .

Apskritai, jeigu potencinės energijos priklausoje nuo koordinatės yra minimumas (kaip 1.13a pav.), tuomet tokia priklausa vadinama **potencine duobe**. Prieš aprašant dalelės judėjimą potencinėje duobėje kvantinės mechanikos požiūriu, naudinga prisiminti klasikinės mechanikos išvadas tokiai sistemai.

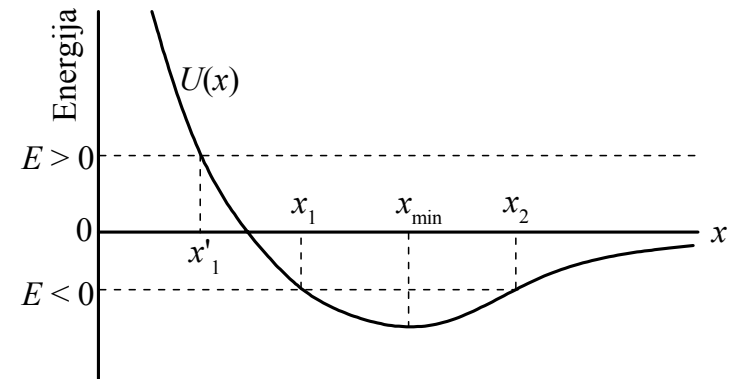
Klasikinės mechanikos požiūriu, dalelės pilnutinė energija  $E$  yra lygi dalelės kinetinės energijos  $W$  ir potencinės energijos  $U$  sumai:

$$E = W + U. \quad (1.14.3)$$

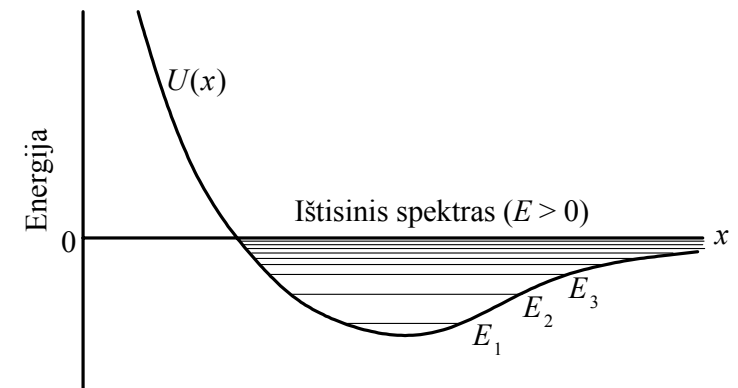
Kadangi kinetinė energija  $W$  negali būti neigiama, tai dalelės pilnutinė energija  $E$  negali būti mažesnė už potencinę energiją  $U$ . Vadinasi, klasikinės mechanikos požiūriu, potencinėje duobėje esanti dalelė, kurios pilnutinė energija  $E$  yra neigiama, negali išeiti iš intervalo  $[x_1, x_2]$  (žr. 1.13a pav.), o jeigu  $E > 0$ , tuomet dalelė gali būti bet kuriame taške, kurio koordinatė tenkina sąlygą  $x > x'_1$  (žr. 1.13a pav.). Todėl, jeigu  $E < 0$ , sakoma, kad dalelė yra **surištos būsenos**, o jeigu  $E > 0$ , dalelė yra **laisvos būsenos**. Klasikinė mechanika teigia, kad dalelės kinetinė energija gali būti lygi bet kokiai teigiamai vertei. Vadinasi, pagal klasikinę teoriją, dalelės pilnutinė energija gali būti lygi bet kokiai vertei, kuri didesnė už potencinės energijos mažiausią vertę  $U(x_{\min})$ .

Stacionariosios Šrėdingerio lygties (1.14.1) matematinė analizė rodo, kad dalelės energijos spektro ir banginės funkcijos pavidalas priklauso nuo to, ar kalbama apie laisvąją dalelę ( $E > 0$ ), ar apie surištąją dalelę ( $E < 0$ ). Jeigu  $E < 0$ , tuomet (1.14.1) lygtis turi sprendinius, *tik esant tam tikroms diskrečioms pilnutinės energijos  $E$  vėrtėms*. Jeigu  $E > 0$ , tuomet dalelės energija gali būti bet kokia, t.y., energijos spektras yra ištisinis (kaip ir klasikinėje mechanikoje). Pilnas dalelės energijos spektras pavaizduotas 1.13b pav. Kaip matome, neigiamųjų energijų srityje ( $E < 0$ ) yra atskiri energijos lygmenys, kurie artėja vienas prie kito, augant dalelės energijai, o kai dalelės energija yra teigiama, turime ištisinį energijos spektrą. Atstumas tarp energijos lygmenų, kurie atitinka surištąją dalelės būseną, yra tuo didesnis, kuo mažesnėje erdvės srityje lokalizuota dalelė (t.y., kuo stipresnė traukos jėga ją veikia).

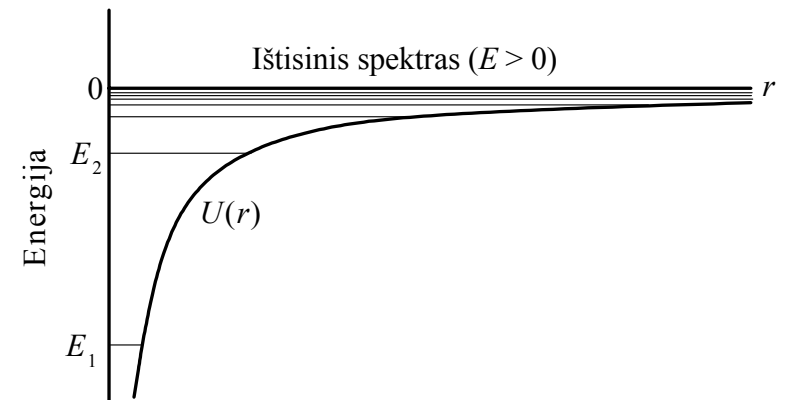
Šios išvados galioja ir trimatės potencinės duobės atveju. Tokios potencinės duobės pavyzdys yra elektrono ir atomo branduolio sistema (vandeniliškasis atomas). Tolstant nuo branduolio bet kuria kryptimi, vandeniliškojo atomo potencinė energija kinta pagal formulę



1.13a pav. Potencinės duobės pavyzdys – dviejų atomų sąveikos energija



1.13b pav. Potencinėje duobėje esančios dalelės virpesių energijos lygmenys



1.14 pav. Vandenilio atomo elektrono potencinė energija ir energijos lygmenys

$$U(r) = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze^2}{r}; \quad (1.14.4)$$

čia  $r$  yra atstumas tarp branduolio ir elektrono. Ši priklauso pavaizduota 1.14 pav. Ji skiriasi nuo 1.13 pav. pavaizduotos funkcijos  $U(x)$  tuo, kad potencinės duobės gylis yra begalinis (kai  $r \rightarrow 0$ ,  $U$  artėja į  $-\infty$ ), ir tuo, kad potencinė energija niekur nėra teigiama. Įrašę (1.14.4) į (1.13.3), gauname stacionariąją Šrėdingerio lygtį vandeniliškajam atomui:

$$\nabla^2 \psi + \frac{2m}{\hbar^2} \left( E + \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze^2}{r} \right) \psi = 0. \quad (1.14.5)$$

Šiuo atveju taip pat turime elektrono judėjimą potencinėje duobėje, kurią sukuria branduolio elektrinis laukas. Lygties (1.14.5) sprendimas yra sudėtingesnis, negu lygties (1.14.1), nes šiuo atveju uždavinys yra trimatis. Tačiau pagrindinė išvada lieka ta pati: kai  $E < 0$ , sistemos energija  $E$  gali būti lygi tik tam tikroms diskrečioms vertėms (lygties tikrinėms vertėms). Išsprendus šią lygtį, gaunamos tiksliai tos pačios energijos lygmenų vertės, kurias numatė Boro teorija (žr. (1.7.25)). Energijos lygmenys pavaizduoti 1.14 pav. Bora šį rezultatą gavo, remdamasis dirbtinai įvestais postulatais (žr. 1.6 poskyrį), o kvantinėje mechanikoje diskrečios energijų vertės yra pačios teorijos išvada, jos išplaukia iš Šrėdingerio lygties.

Lygties (1.14.5) tikrinių funkcijų išraiškos yra gana sudėtingos. Paprasčiausia yra žemiausios energijos tikrinės funkcijos  $\psi_1$  išraiška:

$$\psi_1(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi r_1^3}} \exp\left(-\frac{r}{r_1}\right); \quad (1.14.6)$$

čia  $r$  yra atstumas iki branduolio, o  $r_1$  yra pirmasis Boro spindulys, padalintas iš branduolio krūvio  $Z$  (žr. 1.7 poskyrį). Vandenilio atomo matmenys yra apytiksliai lygūs dvigubam pirmajam Boro spinduliui, t.y., maždaug 1 Å. Tokios pačios eilės yra ir visų kitų atomų matmenys.

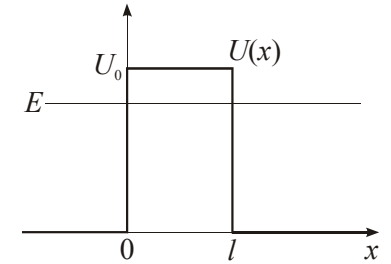
Iš (1.14.6) išplaukia, kad elektronas atome yra tolydžiai pasiskirstęs aplink branduolį. Sakoma, kad atomo elektronai (H atomo atveju – vienas elektronas) sudaro "elektronų debesį". Vadinasi, Boro teorijos įvaizdis apie elektroną, kuris juda apibrėžtu greičiu apskrita orbita apie branduolį, yra neteisingas.

Banginė funkcija (1.14.6) sparčiai mažėja, tolstant nuo branduolio. Pvz., atstumu  $r = 10r_1 = 5.3 \cdot 10^{-10}$  m banginės funkcijos vertė yra  $e^{10} \approx 22000$  kartų mažesnė už jos didžiausią vertę. Taigi, šio "elektronų debesies" matmenys vandenilio atome atitinka kelis pirmosios Boro orbitos spindulius.

Smulkesnė vandenilio atomo analizė pateikta 1.17 poskyryje.

### 1.15. Dalelės pereiga pro potencinį barjerą (tunelinė pereiga)

Jeigu potencinės energijos priklausoje nuo koordinatės yra maksimumas, tuomet tokia priklauso vadinama **potenciniu barjeru**. Klasikinė mechanika teigia, kad dalelė gali praeiti potencinį barjerą tik tuomet, kai jos pilnutinė energija yra didesnė už barjero aukštį (priešingu atveju dalelė atsispindi nuo barjero). Tarkime, mikrodalelė (pvz., elektronas), kurios energija  $E$ , sutinka savo kelyje stačiakampį potencinį barjerą, kurio aukštis  $U_0$ , o plotis  $l$  (žr. 1.15 pav.). Panašų barjerą sutinka elektronas, išeidamas iš metalo į vakuumą, ir jo įveikimas susijęs su išlaisvinimo darbu (dydis  $A$  fotoefekto lygtyje (1.2.2)). Potencinės energijos priklauso nuo koordinatės šiuo atveju yra tokia:



1.15 pav. Potencinis barjeras, kurį sukuria metalo paviršius metale esančiam elektronui

$$U(x) = \begin{cases} 0, & x < 0; \\ U_0, & 0 \leq x \leq l; \\ 0, & x > l. \end{cases} \quad (1.15.1)$$

Išsprendus Šrėdingerio lygtį (1.14.1), kai potencinė energija yra (1.15.1) pavidalo, gaunama, kad dalelės banginė funkcija barjero srityje ir už barjero nėra tiksliai lygi nuliui, net jeigu dalelės energija  $E$  yra mažesnė už barjero aukštį  $U_0$ . Kitais žodžiais, egzistuoja tam tikra tikimybė prasiskverbti dalelei pro potencinį barjerą, kai jos energija  $E$  yra mažesnė už barjero aukštį  $U_0$ . Šis reiškinys vadinamas **tuneline pereiga**. Tikimybė dalelei praeiti pro barjerą vadinama potencinio barjero **skaidriu**. Apytiksliai apskaičiuota, kad aukščio  $U_0$  ir pločio  $l$  potencinio barjero skaidris dalelei, kurios energija  $E$ , o masė  $m$ , yra

$$D = \exp\left[-\frac{4\pi}{h} l \cdot \sqrt{2m(U_0 - E)}\right]. \quad (1.15.2)$$

(1.15.2) formulėje matyti, kad, kuo platesnis ir aukštesnis potencinis barjeras, tuo sunkiau dalelei pro jį prasiskverbti. Pvz., laikant, kad  $l = 10^{-8}$  cm (atomo matmenys), o  $U_0 - E = 1$  eV, potencinio barjero skaidris elektronui lygus 0.359, t.y., daugiau nei trečdalis elektronų gali prasiskverbti pro barjerą dėl tunelinės pereigos. Tačiau, padidėjus barjero pločiui 10 kartų, barjero skaidris tampa lygus tik  $0.359^{10} = 3.5 \cdot 10^{-5}$ . Kaip matome šiame pavyzdyje, tunelinė pereiga pasireiškia tik tuomet, kai potencinio barjero plotis yra atomo matmenų eilės arba mažesnis, o energijų skirtumas  $U_0 - E$  yra elektronvoltų eilės arba mažesnis. Esant žymiai didesniems atstumams ir energijų skirtumams, galioja klasikinės mechanikos teiginys, kad dalelė, kurios energija mažesnė už potencinio barjero aukštį, negali pro jį prasiskverbti.

### 1.16. Operatoriai kvantinėje mechanikoje. Kvantinės mechanikos postulatai

Nuosekli matematinė kvantinės mechanikos formuluotė remiasi fizikinių dydžių operatorių sąvoka. Matematinio požiūriu, **operatorius** – tai atitinkamybė tarp funkcijų. T.y., paveikę operatoriumi funkciją, gauname kitą funkciją. Kitais žodžiais, operatorius *atvaizduoja* vieną funkciją į kitą. Pvz., diferencialinis operatorius  $d/dx$  atvaizduoja bet kurią funkciją  $f(x)$  į jos išvestinę  $df/dx$ . Tam tikra prasme operatoriai yra analogiški funkcijoms: funkcija – tai atitinkamybė tarp skaičių, t.y., funkcija  $f(x)$  atvaizduoja skaičių  $x$  į kažkokį kitą skaičių  $y = f(x)$ . Operatoriai dažniausiai žymimi didžiosiomis raidėmis su “stogeliu”, pvz.,  $\hat{A}$ . Operatorius veikia funkciją, kuri užrašyta po jo žymėjimo. Operatorius  $\hat{A}$  vadinamas **Ermito operatoriumi**, jeigu bet kurioms dviem kompleksinėms funkcijoms  $u(\mathbf{r})$  ir  $v(\mathbf{r})$  galioja lygybė

$$\int v^* \hat{A} u \cdot dV = \int u (\hat{A} v)^* \cdot dV ; \quad (1.16.1)$$

čia žvaigždutė reiškia kompleksinį jungimą, o  $\mathbf{r}$  reiškia taško spindulį vektorių (Dekarto koordinatų rinkinį  $x, y$  ir  $z$ ). T.y., paveikę funkciją  $u$  operatoriumi  $\hat{A}$ , padauginę gautąją funkciją iš funkcijos, kuri kompleksiškai jungtinė funkcijai  $v$  ir gautąją sandaugą suintegravę visoje erdvėje, gausime tą patį rezultatą, kaip ir paveikę operatoriumi  $\hat{A}$  funkciją  $v$ , apskaičiavę kompleksiškai jungtinę funkciją, padauginę iš funkcijos  $u$  ir suintegravę visoje erdvėje.

Funkcijos  $u(\mathbf{r})$  ir  $v(\mathbf{r})$  vadinamos **ortogonaliomis**, jeigu

$$\int u^* v \cdot dV = 0 . \quad (1.16.2)$$

Funkcija  $u(\mathbf{r})$  vadinama **normuotąja funkcija**, jeigu

$$\int |u|^2 \cdot dV = 1 . \quad (1.16.3)$$

Normuotosios funkcijos, kurios yra ortogonalios viena kitai, yra vadinamos **ortonormuotosiomis funkcijomis**.

Jeigu funkcija  $\varphi$  tenkina lygtį

$$\hat{A} \varphi = \lambda \varphi , \quad (1.16.4)$$

tuomet funkcija  $\varphi$  vadinama operatoriaus  $\hat{A}$  **tikrine funkcija**, o skaičius  $\lambda$  vadinamas operatoriaus  $\hat{A}$  **tikrine verte**, kuri atitinka tikrinę funkciją  $\varphi$ . Lygtis (1.16.4) vadinama operatoriaus  $\hat{A}$  **tikrinių verčių lygtimi**. Pvz., stacionariąją Šrėdingerio lygtį (1.13.3) galima užrašyti kaip Ermito operatoriaus

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U(x, y, z) \quad (1.16.5)$$

tikrinių verčių lygtį:

$$\hat{H} \psi = E \psi . \quad (1.16.6)$$

Ermito operatorių savybės:

- 1) Ermito operatorių tikrinės vertės yra realios;
- 2) Ermito operatorių tikrinės funkcijos, atitinkančios skirtingas tikrines vertes, yra ortogonalios;

Kaip matyti tikrinių verčių lygtyje (1.16.4), bet kuri funkcija, kuri gauta, padauginus operatoriaus  $\hat{A}$  tikrinę funkciją iš konstantos, taip pat yra operatoriaus  $\hat{A}$  tikrinė funkcija. Vadinasi, operatoriaus tikrinę funkciją visuomet galima normuoti į vienetą, t.y., padauginti iš tokios konstantos, kad tos funkcijos absoliutinės vertės kvadrato integralas būtų lygus vienetui (žr. (1.16.3)). Taigi, galima teigti, kad Ermito operatoriaus tikrinės funkcijos sudaro ortonormuotųjų funkcijų rinkinį.

Matematiškai galima įrodyti, kad bet kurio Ermito operatoriaus tikrinės funkcijos sudaro **pilnąją funkcijų sistemą**, t.y., bet kurią funkciją  $\psi(\mathbf{r})$  galima išreikšti (“išskleisti”) Ermito operatoriaus tikrinių funkcijų tiesiniu dariniu:

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_n c_n \psi_n(\mathbf{r}) ; \quad (1.16.7)$$

čia  $\psi_n(\mathbf{r})$  yra operatoriaus tikrinės funkcijos.

Naudojant aukščiau apibrėžtas sąvokas, galima suformuluoti keturis **kvantinės mechanikos postulatus**:

- I. Dalelės judėjimo būseną aprašo banginė funkcija  $\Psi(\mathbf{r}, t)$ .
- II. Kiekvieną dinaminį kintamąjį (t.y., dalelės spindulį vektorių, judesio kiekį ir bet kurią šių dydžių funkciją) atitinka apibrėžtas Ermito operatorius.
- III. Matuojant dinaminį kintamąjį, kurį atitinka operatorius  $\hat{A}$ , su tam tikra tikimybe gaunamos vertės  $\lambda_1, \lambda_2, \dots$ , kurios yra  $\hat{A}$  tikrinės vertės. Jeigu būsenos banginė funkcija yra  $\Psi$ , tuomet tos tikimybės yra lygios funkcijos  $\Psi$  skleidinio operatoriaus  $\hat{A}$  ortonormuotom tikrinėms funkcijom atitinkamų koeficientų absoliutinių verčių kvadratams.
- IV. Banginė funkcija  $\Psi(\mathbf{r}, t)$  tenkina Šrėdingerio lygtį (1.13.1).

Operatoriaus  $\hat{A}$  tikrinių verčių  $\lambda_i$  ( $i = 1, 2, 3, \dots$ ) rinkinys vadinamas to **operatoriaus spektru**. Jeigu vieną tikrinę vertę atitinka kelios tiesiškai nepriklausomos tikrinės funkcijos (t.y., nė vienos tikrinės funkcijos neįmanoma išreikšti kitų tą pačią tikrinę vertę atitinkančių tikrinių funkcijų tiesiniu dariniu), tuomet ta vertė vadinama **išsigimusia tikrine verte**, o didžiausias jų atitinkančių tiesiškai nepriklausomų funkcijų skaičius vadinamas **tikrinės vertės išsigimimo laipsniu**.

Operatorių  $\hat{A}$  ir  $\hat{B}$  sandauga  $\hat{A}\hat{B}$  – tai operatorius, kuris atvaizduoja bet kurią funkciją  $u$  į funkciją  $\hat{A}(\hat{B}u)$ . Bendruoju atveju  $\hat{A}\hat{B} \neq \hat{B}\hat{A}$ , t.y.,  $\hat{A}(\hat{B}u) \neq \hat{B}(\hat{A}u)$ . Operatorius

$$[\hat{A}, \hat{B}] \equiv \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} \quad (1.16.8)$$

vadinamas operatorių  $\hat{A}$  ir  $\hat{B}$  **komutatoriumi**. Jeigu dviejų operatorių komutatorius yra lygus nuliui, tuomet sakoma, kad tie operatoriai **komutuoja**.

Iš III postulato išplaukia, kad fizikinis dydis  $A$  turi apibrėžtą vertę (t.y., vertę, kurios gavimo matavimų metu tikimybė lygi 1) tada ir tik tada, kai sistemos banginė funkcija yra to dydžio operatoriaus  $\hat{A}$  tikrinė funkcija. Vadinasi, vienu metu matuojant du skirtingus dydžius, abu jie įgyja apibrėžtas vertes tik tuo atveju, kai sistemos banginė funkcija yra abiejų tų dydžių operatorių tikrinė funkcija. Pasinaudojus operatoriaus tikrinių verčių lygtimi (1.16.4), galima įrodyti, kad dviejų operatorių tikrinių funkcijų sistemos sutampa tada ir tik tada, kai tie operatoriai komutuoja. Vadinasi, vienu metu matuojant du dydžius, jie abu gali įgyti apibrėžtas vertes tada ir tik tada, kai jų operatoriai komutuoja.

Iš III postulato taip pat išplaukia, kad fizikinio dydžio, kurio operatorius yra  $\hat{A}$ , vidurkis būsenoje, kurią aprašo banginė funkcija  $\Psi$ , yra lygus

$$\langle \hat{A} \rangle = \int \Psi^* \hat{A} \Psi dV. \quad (1.16.9)$$

Antra vertus, pagal banginės funkcijos fizikinę prasmę (žr. 1.12 poskyrį), spindulio vektoriaus vidurkis yra lygus

$$\langle \mathbf{r} \rangle = \int \mathbf{r} |\Psi|^2 dV = \int \Psi^* \mathbf{r} \Psi dV. \quad (1.16.10)$$

Palyginus (1.16.9) ir (1.16.10), galima teigti, kad

$$\hat{\mathbf{r}} = \mathbf{r}, \quad (1.16.11)$$

t.y., spindulio vektoriaus operatorius yra lygus pačiam spinduliui vektoriui.

Pagal de Broilio hipotezę (žr. 1.10 poskyrį), laisvosios dalelės banginė funkcija yra plokščioji banga, kurios dažnis lygus  $E/\hbar$ , o bangos ilgis lygus  $\hbar/p$ ; čia  $E$  yra dalelės energija, o  $p$  yra dalelės judesio kiekis. Vadinasi, laisvosios dalelės banginė funkcija lygi

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \exp\left[-\frac{i}{\hbar}(Et - (\mathbf{p}, \mathbf{r}))\right]; \quad (1.16.12)$$

čia  $i = \sqrt{-1}$  yra menamasis vienetas. Ši funkcija tenkina tokį diferencialinį sąryšį:

$$\frac{\hbar}{i} \nabla \Psi = \mathbf{p} \Psi; \quad (1.16.13)$$

čia  $\nabla$  yra nabla operatorius ( $\nabla = \mathbf{x}_0 \frac{\partial}{\partial x} + \mathbf{y}_0 \frac{\partial}{\partial y} + \mathbf{z}_0 \frac{\partial}{\partial z}$ , kur  $\mathbf{x}_0$ ,  $\mathbf{y}_0$  ir  $\mathbf{z}_0$  yra  $X$ ,

$Y$  ir  $Z$  ašių vienetiniai vektoriai). Palyginus (1.16.13) su (1.16.4) ir atsižvelgus į III postulata, galima teigti, kad (1.16.13) yra judesio kiekio operatoriaus tikrinių verčių lygtis. Vadinasi, dalelės judesio kiekio operatorius yra lygus

$$\hat{\mathbf{p}} = \frac{\hbar}{i} \nabla; \quad \hat{p}_x = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}, \quad \hat{p}_y = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial y}, \quad \hat{p}_z = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial z}. \quad (1.16.14)$$

Lygybių (1.16.11) ir (1.16.14) išvedimas nėra matematiškai griežtas, todėl jas taip pat galima laikyti kvantinės mechanikos postulatais.

II postulata reikia papildyti šiuo teiginiu: bet kurios spindulio vektoriaus ir judesio kiekio funkcijos  $F(\mathbf{r}, \mathbf{p})$  operatorius gaunamas, funkcijos išraiškoje pakeitus  $\mathbf{r}$  ir  $\mathbf{p}$  spindulio vektoriaus ir judesio kiekio operatoriais  $\hat{\mathbf{r}}$  ir  $\hat{\mathbf{p}}$ . Pvz., operatorius  $\hat{H}$  (1.16.5) gaunamas, atlikus minėtuosius pakeitimus stacionariajame potencialiniame lauke judančios dalelės Hamiltono funkcijos išraiškoje. Dalelės **Hamiltono funkcija** arba **hamiltonianas** – tai dalelės pilnutinės mechaninės energijos išraiška spinduliu vektoriumi ir judesio kiekiu:

$$H(\mathbf{r}, \mathbf{p}) = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + U(\mathbf{r}) \quad (1.16.15)$$

(čia  $m$  yra dalelės masė). Todėl aišku, kad hamiltoniano operatoriaus (1.16.5) tikrinės vertės turi nusakyti dalelės energijos lygmenis, ką ir teigia stacionarioji Šrėdingerio lygtis (1.13.3). Taip pat gaunamas ir dalelės judesio kiekio momento operatorius. Dalelės judesio kiekio momentas  $\mathbf{L}$  atžvilgiu koordinatinių atskaitos taško – tai jos spindulio vektoriaus  $\mathbf{r}$  ir judesio kiekio  $\mathbf{p}$  vektorinė sandauga:  $\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}$ . Šios vektorinės sandaugos komponentės Dekarto koordinatinių sistemoje yra  $L_x = yp_z - zp_y$ ,  $L_y = zp_x - xp_z$  ir  $L_z = xp_y - yp_x$ . Pakeitę  $p$  komponentes atitinkamais operatoriais (1.16.14), gauname judesio kiekio momento operatoriaus  $\hat{\mathbf{L}}$  komponentes:

$$\begin{aligned} \hat{L}_x &= \frac{\hbar}{i} \left( y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right), \\ \hat{L}_y &= \frac{\hbar}{i} \left( z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right), \\ \hat{L}_z &= \frac{\hbar}{i} \left( x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right). \end{aligned} \quad (1.16.16)$$

Šie trys operatoriai nekomutuoja tarpusavyje:

$$[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = i\hbar \hat{L}_z, \quad [\hat{L}_y, \hat{L}_z] = i\hbar \hat{L}_x, \quad [\hat{L}_z, \hat{L}_x] = i\hbar \hat{L}_y. \quad (1.16.17)$$

Todėl, tiksliai apibrėžus kurią nors judesio kiekio momento komponentę (pvz.,  $L_z$ ), kitos dvi komponentės ( $L_x$  ir  $L_y$ ) tampa neapibrėžtos, išskyrus tą atvejį, kai judesio kiekio momentas lygus nuliui.



Fizikiniai dydžiai, kurių operatoriai komutuoja su hamiltonianu (1.16.5), vadinami **judesio integralais**. Tokie dydžiai yra tvarūs, t.y., užfiksavus kurio nors judesio integralo vertę, ta vertė išliks pastovi, kol nebus jokių išorinių poveikių. Nesunku įsitikinti, kad tuo atveju, kai  $U(\mathbf{r})$  priklauso tik nuo  $\mathbf{r}$  absoliutinės vertės  $r$  (t.y., kai dalelė juda centrinių jėgų lauke), kiekvienas iš trijų operatorių  $\hat{L}_x$ ,  $\hat{L}_y$  ir  $\hat{L}_z$  (vadinasi, ir judesio kiekio momento operatorius  $\hat{\mathbf{L}}$ ) komutuoja su hamiltoniano operatoriumi (1.16.5). Vadinasi, kai dalelė juda centrinių jėgų lauke, judesio kiekio momento operatorius ir bet kuri jo projekcija yra judesio integralas.

Stacionariajame potencialiniame lauke judančios dalelės energijos operatorių galima gauti, pasinaudojus šios dalelės pilnosios banginės funkcijos bendrąja išraiška (1.13.2) (atskiru atveju, kai potencinė energija lygi nuliui, galioja (1.16.12)). Išdiferencijavę šią išraišką laiko atžvilgiu, randame

$$-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \Psi}{\partial t} = E \Psi. \quad (1.16.18)$$

Akivaizdu, kad tai yra operatoriaus  $-(\hbar/i) \cdot \partial/\partial t$  tikrinių verčių lygtis. Kadangi šio operatoriaus tikrinės vertės sutampa su energijos vertėmis, tai galima teigti, kad tai yra energijos operatorius:

$$\hat{E} = -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t}. \quad (1.16.19)$$

Ši energijos operatoriaus išraiška galioja ne vien stacionariajame potencialiniame lauke judančiai dalelei, bet ir daugelio dalelių sistemoms.

Koordinatės ir judesio kiekio operatoriai (1.16.11) ir (1.16.14) nekomutuoja:

$$[\hat{p}_x, \hat{x}] = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} x - x \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} = \frac{\hbar}{i} \quad (1.16.20)$$

(tokie patys sąryšiai gaunami ir kitoms dviem Dekarto koordinatėms). Todėl, vienu metu matuojant šiuos dydžius, gaunamos vertės, išsibarsčiusios apie vidurkius. Pritaikius bendrąją vidurkio išraišką (1.16.9) vidutiniams kvadratiniais nuokrypiais  $\langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle$  ir  $\langle (p_x - \langle p_x \rangle)^2 \rangle$ , gaunami standartinių nuokrypių sąryšiai (1.11.1). Taigi, Heizenbergo neapibrėžtumo sąryšiai išplaukia iš kvantinės mechanikos postulatų. Apskritai, bet kuriems dviem dydžiams  $L$  ir  $M$ , kurių operatorių komutatorius yra  $\hat{K}$ , galioja neapibrėžtumų sąryšis

$$\Delta L \cdot \Delta M \geq \frac{1}{2} |\langle \hat{K} \rangle|; \quad (1.16.21)$$

čia  $\Delta L$  ir  $\Delta M$  yra dydžių  $L$  ir  $M$  standartiniai nuokrypiai, o  $\langle \hat{K} \rangle$  yra  $\hat{K}$  vidurkis.

Pasinaudojus (1.16.21), galima rasti ir energijos bei laiko neapibrėžtumų sąryšį. Energijos operatoriaus (1.16.19) ir laiko  $t$  komutatorius yra lygus

$$[\hat{E}, t] = -\frac{\hbar}{i}. \quad (1.16.22)$$

Vadinasi, atitinkamas neapibrėžtumų sąryšis yra

$$\Delta E \Delta t \geq \frac{\hbar}{2}.$$

Nors šio sąryšio matematinis pavidalas yra toks pats, kaip koordinatės ir judesio kiekio neapibrėžtumų sąryšių (1.11.1), tačiau jo prasmė yra visiškai kitokia. Visų pirma, tiesiogiai matuojama ne pilnutinė būsenos energija, o energijos pokytis, vykstant kvantiniam šuoliui iš vieno energijos lygmens  $E$  į kitą energijos lygmenį  $E'$ . Antra, laikas  $t$  neturi pastovaus vidurkio, kurio atžvilgiu būtų galima apskaičiuoti standartinį nuokrypį  $\Delta t$ . Todėl, norint suteikti šiam sąryšiui fizikinę prasmę, energijos lygmens neapibrėžtumą  $\Delta E$  reikia pakeisti dviejų lygmenų  $E$  ir  $E'$ , tarp kurių vyksta duotasis kvantinis šuolis, skirtumo neapibrėžtumu  $\Delta(E - E')$ , o laiko neapibrėžtumą  $\Delta t$  reikia laikyti laiko momento, kai sistema buvo "užfiksuota" lygmenyje  $E$ , ir laiko momento, kai sistema atsидūrė lygmenyje  $E'$ , skirtumo neapibrėžtumu. Bendruoju atveju dviejų energijos lygmenų skirtumo neapibrėžtumas yra didesnis už kiekvieno iš jų neapibrėžtumą. Šis faktas apytiksliai įskaitomas, padauginus pastarosios nelygybės dešiniąją pusę iš 2. Taigi, energijos ir laiko neapibrėžtumų sąryšio galutinis pavidalas yra toks:

$$\Delta(E - E') \Delta t \geq \hbar. \quad (1.16.23)$$

Laiko neapibrėžtumas  $\Delta t$  vadinamas **vidutine gyvavimo trukme** atžvilgiu duotojo kvantinio šuolio, o jo prasmė – vidutinis laikas, per kurį įvyksta tas šuolis. Dydis  $\Delta(E - E')$  nusako energijos, kuri išsiskiria šuolio iš lygmens  $E$  į lygmenį  $E'$  metu, verčių išsibarsavimo didumą. Dėl šio išsibarsavimo šuolio metu išspinduliuojamo fotono energija nėra tiksliai apibrėžta, o jos vertės yra pasiskirsčiusios aplink tam tikrą vidutinę vertę. Todėl atomų spektro linijos turi tam tikrą **natūralųjį plotį**.

Iš (1.16.23) išplaukia, kad, kuo trumpiau sistema išbūna duotajame energijos lygmenyje, tuo didesnis to lygmens energijos neapibrėžtumas. Vaizdžiai kalbant, nestabiliųjų būsenų energijos lygmenys yra "išplitę", ir šis išplitimas yra tuo didesnis, tuo nestabilesnė atitinkama būsena. Pagrindiniame (žemiausiame) energijos lygmenyje sistema gali būti neribotai ilgai, todėl pagrindinis lygmuo nėra išplitęs: jo energija apibrėžta absoliučiai tiksliai.

Kai kurių dydžių operatorių neįmanoma išreikšti erdvinėmis koordinatėmis ir laiku arba diferencialiniais operatoriais, kurie veikia erdvinės koordinatės ir laiką, nes jie neturi klasikinio atitikmens, kuris būtų išreiškiamas erdvinėmis koordinatėmis, judesio kiekio komponentėmis ir laiku. Tokio

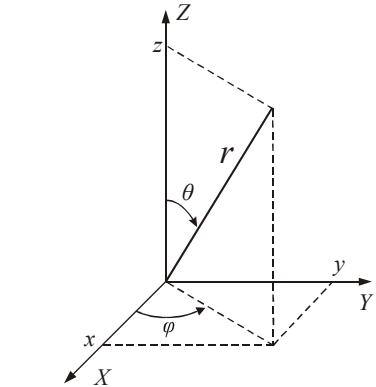
dydžio pavyzdys – elektrono, fotono ir kitų elementariųjų dalelių sukiny (sukiny – tai dalelės vidinis judesio kiekio momentas). Sukinio operatoriaus neįmanoma išreikšti erdvinėmis koordinatėmis arba jų išvestinėmis. Matematinis pavidalas užrašant tokius operatorius ir jų tikrines funkcijas, naudojamos operatorių ir funkcijų matricinės išraiškos (žr. 1.19 poskyrį).

Norint vienareikšmiškai nusakyti apibrėžtos energijos sistemos būseną (t.y., banginę funkciją), reikia nurodyti visų operatorių, kurie komutuoja su hamiltoniano operatoriumi ir vienas su kitu, tikrines vertes toje būsenoje. Taigi, pilnam sistemos aprašymui reikia turėti pilną komutuojančių operatorių rinkinį, į kurį įeina hamiltoniano operatorius.

### 1.17. Elektrono orbitinis judėjimas atome kvantinės mechanikos požiūriu

Stacionarioji Šrėdingerio lygtis dalelei, kuri juda centriniame jėgų lauke (pvz., elektronui vandenilio atome), yra šitokia:

$$\nabla^2 \psi + \frac{2m}{\hbar^2} (E - U(r)) \psi = 0; \quad (1.17.1)$$



1.16 pav. Sferinės koordinatės  $r$ ,  $\theta$  ir  $\varphi$  ir jų ryšys su Dekarto koordinatėmis  $x$ ,  $y$  ir  $z$ .

čia  $r$  yra atstumas iki jėgos centro (pvz., iki atomo branduolio), o  $U(r)$  yra dalelės potencinė energija (pvz., (1.14.4)). Šią lygtį patogiau spręsti sferinėse koordinatėse (žr. 1.16 pav.), nes tuomet kintamieji  $r$ ,  $\varphi$  ir  $\theta$  atsiskiria. T.y., trijų argumentų funkciją  $\psi(r, \varphi, \theta)$  galima išreikšti radialinės funkcijos  $R(r)$  ir kampinės funkcijos  $Y(\theta, \varphi)$  sandauga:

$$\psi(r, \varphi, \theta) = R(r)Y(\theta, \varphi). \quad (1.17.2)$$

Funkcijos  $R(r)$  ir  $Y(\theta, \varphi)$  yra šių diferencialinių lygčių tikrinės funkcijos:

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \left\{ \frac{2m}{\hbar^2} [E - U(r)] - \frac{\lambda}{r^2} \right\} R = 0, \quad (1.17.3a)$$

$$\hat{\mathbf{L}}^2 Y = \lambda \hbar^2 Y; \quad (1.17.3b)$$

čia  $\hat{\mathbf{L}}^2$  yra dalelės judesio kiekio momento kvadrato operatorius:

$$\hat{\mathbf{L}}^2 = -\hbar^2 \left[ \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right]. \quad (1.17.4)$$

Lygtyse (1.17.3a) ir (1.17.3b)  $\lambda$  yra atskyrimo konstanta (taip vadinama todėl, kad ji naudojama radialinio kintamojo  $r$  atskyrimui nuo kampinių kintamųjų  $\theta$

ir  $\varphi$ ). Lygtyje (1.17.3b) galima dar kartą atskirti kintamuosius. T.y., dviejų argumentų funkciją  $Y(\theta, \varphi)$  galima išreikšti dviejų vieno argumento funkcijų  $P(\theta)$  ir  $\Phi(\varphi)$  sandauga:

$$Y(\theta, \varphi) = P(\theta)\Phi(\varphi). \quad (1.17.5)$$

Funkcijos  $P(\theta)$  ir  $\Phi(\varphi)$  yra šių dviejų diferencialinių lygčių tikrinės funkcijos:

$$\frac{1}{\sin \theta} \frac{d}{d\theta} \left( \sin \theta \frac{dP}{d\theta} \right) + \left( \lambda - \frac{\mu^2}{\sin^2 \theta} \right) P = 0; \quad (1.17.6a)$$

$$\hat{L}_z \Phi = \mu \hbar \Phi; \quad (1.17.6b)$$

čia  $\hat{L}_z$  yra judesio kiekio momento projekcijos į  $Z$  ašį operatorius:

$$\hat{L}_z = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \varphi}. \quad (1.17.7)$$

Lygtyse (1.17.6a) ir (1.17.6b)  $\mu$  yra atskyrimo konstanta (ji naudojama kampinių koordinatė  $\theta$  ir  $\varphi$  atskyrimui vienai nuo kitos).

Akivaizdu, kad lygtys (1.17.3b) ir (1.17.6b) yra operatorių  $\hat{\mathbf{L}}^2$  ir  $\hat{L}_z$  tikrinių verčių lygtys (plg. su (1.16.4)), o šių operatorių tikrinės vertės yra atitinkamai  $\lambda \hbar^2$  ir  $\mu \hbar$ . Lygtys (1.17.6a,b) turi baigtinius, vienareikšmius ir tolydžius sprendinius tik tuomet, kai atskyrimo konstantos  $\lambda$  ir  $\mu$  tenkina šias sąlygas:

$$\lambda = l(l+1) \quad (l = 0, 1, 2, \dots);$$

$$\mu = -l, -l+1, \dots, l-1, l.$$

Vadinasi, operatorių  $\hat{\mathbf{L}}^2$  ir  $\hat{L}_z$  tikrinės vertės yra

$$|\mathbf{L}|^2 = l(l+1)\hbar^2 \quad (l = 0, 1, 2, \dots), \quad (1.17.8a)$$

$$L_z = m_l \hbar \quad (m_l = -l, -l+1, \dots, l-1, l), \quad (1.17.8b)$$

o atitinkamos tikrinės funkcijos yra šių lygčių sprendiniai:

$$\hat{\mathbf{L}}^2 Y = l(l+1)\hbar^2 Y, \quad (1.17.9a)$$

$$\hat{L}_z \Phi = m_l \hbar \Phi. \quad (1.17.9b)$$

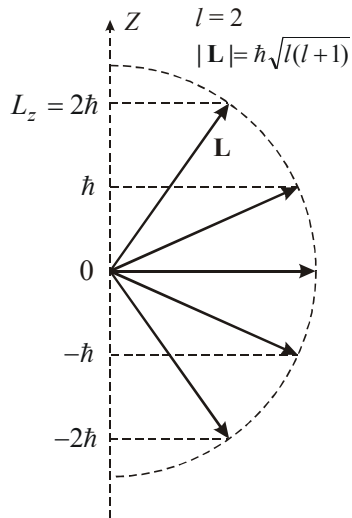
Aišku, kad pilnoji banginė funkcija (1.17.2) taip pat tenkina lygtis (1.17.9a) ir (1.17.9b), nes operatorius  $\hat{\mathbf{L}}^2$  veikia tik daugiklį  $Y(\theta, \varphi)$ , o operatorius  $\hat{L}_z$  veikia tik daugiklį  $\Phi(\varphi)$  (žr. (1.17.5)). Vadinasi, dalelės, kuri juda centriniame jėgų lauke (*rotatoriaus*), hamiltoniano, judesio kiekio momento kvadrato ir judesio kiekio momento projekcijos operatoriai turi bendrą tikrinių funkcijų sistemą. Kaip minėta 1.16 poskyryje, tai reiškia, kad šie trys operatoriai komutuoja, o atitinkami trys dydžiai gali vienu metu turėti apibrėžtas vertes (tuo, kad šie operatoriai komutuoja, galima įsitikinti, tiesiog apskaičiavus jų komutatorius (1.16.8)). Be to, šie trys dydžiai pilnai nusako centriniame jėgų lauke judančios dalelės erdvinio judėjimo būseną.

Iš (1.17.8b) išplaukia, kad judesio kiekio momento projekcija į duotąją kryptį  $Z$  gali įgyti tik kelias vertes, t.y., yra galimi tik keli kampai tarp judesio kiekio momento vektoriaus  $\mathbf{L}$  ir išskirtosios krypties  $Z$ . Pvz., kai  $l=2$ , kampas tarp  $\mathbf{L}$  ir  $Z$  ašies gali būti lygus penkioms vertėms. Šios penkios vektoriaus  $\mathbf{L}$  orientacijos parodytos 1.17 pav. Be to, judesio kiekio momento projekcijos absoliutinė vertė visuomet yra mažesnė už jo absoliutinę vertę

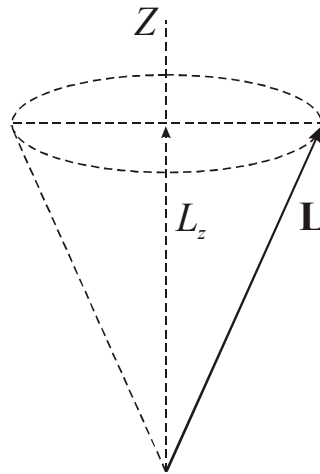
$$|\mathbf{L}| = \hbar\sqrt{l(l+1)} \quad (l=0, 1, 2, \dots), \quad (1.17.10)$$

išskyrus tą atvejį, kai  $|\mathbf{L}|=0$  (t.y.,  $l=0$ ). Taigi, judesio kiekio momento vektorius visuomet sudaro tam tikrą nenulinį kampą su išskirtąja kryptimi  $Z$ . Taip yra todėl, kad, apibrėžus judesio kiekio momento projekciją į  $Z$  ašį  $L_z$ , kitos dvi Dekarto komponentės  $L_x$  ir  $L_y$  tampa neapibrėžtos (žr. 1.16 poskyrį). Tai galima įsivaizduoti šitaip. Būsenoje, kurioje  $L_z$  ir  $|\mathbf{L}|$  turi apibrėžtas vertes, judesio kiekio momento vektorius  $\mathbf{L}$  precesuoja apie išskirtąją kryptį  $Z$  (žr. 1.18 pav.). Todėl komponentės  $L_x$  ir  $L_y$  nuolat kinta (yra neapibrėžtos). Reikia turėti omenyje, kad šiuo atveju "precesija" tėra tik būdas vaizdžiai paaiškinti judesio kiekio momento komponentių  $L_x$  ir  $L_y$  neapibrėžtumą, naudojant klasikinės mechanikos sąvokas. Bet koks kvantinės mechanikos teiginių aiškinimas, kuris remiasi klasikinės fizikos sąvokom (t.y., arba grynai korpuskulinėm, arba grynai banginėm), yra netikslus ir nepilnas.

Išrašę  $L_z$  ir  $|\mathbf{L}|$  vertes (1.17.8b) ir (1.17.10) į orbitinių magnetinio ir judesio kiekio momentų sąryšį (1.8.3), randame, kad elektrono orbitinio



1.17 pav. Judesio kiekio momento galimos orientacijos atžvilgiu išskirtosios krypties  $Z$



1.18 pav. Judesio kiekio momento vektoriaus precesija aplink išskirtąją kryptį  $Z$

magnetinio momento projekcija į bet kurią laisvai pasirinktą kryptį gali įgyti tik šias vertes:

$$M_z = -m_l \mu_B \quad (m_l = -l, -l+1, \dots, l-1, l), \quad (1.17.11a)$$

o magnetinio momento absoliutinė vertė – tik šias vertes:

$$M = \mu_B \sqrt{l(l+1)}. \quad (1.17.11b)$$

Operatorių  $\hat{L}^2$  ir  $\hat{L}_z$  tikrinės funkcijos bei tikrinės vertės nepriklauso nuo potencinės energijos  $U(r)$  pavidalo, o sąryšiai (1.17.8b) ir (1.17.10) galioja bet kokios prigimties (ne vien elektrono) judesio kiekio momentams.  $U(r)$  pavidalas lemia tik radialinės funkcijos  $R(r)$  pavidalą ir hamiltoniano tikrinės vertės  $E$ . Tuo atveju, kai tiriamoji sistema yra elektronas, kuris juda taškinio krūvio  $+Ze$  elektriniame lauke (1.14.4), radialinė lygtis (1.17.3a) turi baigtinius, vienareikšmius ir tolydžius sprendinius tik tuomet, kai konstanta  $E$  lygi

$$E = -\frac{Z^2}{n^2} \frac{me^4}{8\epsilon_0^2 \hbar^2} = -\frac{Z^2}{n^2} \cdot 13.6 \text{ eV} \quad (n=1, 2, 3, \dots). \quad (1.17.12)$$

Tai yra vandeniliškojo atomo energijos lygmenys. Be to, iš baigtinumo, vienareikšmiškumo ir tolydumo reikalavimo išplaukia, kad skaičius  $l$  turi būti mažesnis už  $n$ :

$$l=0, 1, 2, \dots, n-1. \quad (1.17.13)$$

Sveikieji skaičiai

$$n, l, m_l, \quad (1.17.14)$$

kurie nusako rotatoriaus judėjimo būseną, vadinami rotatoriaus **kvantiniais skaičiais**. Skaičius  $n$ , kuris nusako energijos lygmenį (1.17.12), vadinamas **pagrindiniu kvantiniu skaičiumi**. Skaičius  $l$ , kuris nusako judesio kiekio momento absoliutinę vertę (1.17.10), vadinamas **šalutiniu kvantiniu skaičiumi** arba **orbitiniu kvantiniu skaičiumi**, o skaičius  $m_l$ , kuris nusako orbitinio judesio kiekio momento ir magnetinio momento projekcijas (1.17.8b) ir (1.17.11a), vadinamas **magnetiniu kvantiniu skaičiumi**.

Apibūdinant elektrono orbitinio judėjimo būseną atome, vietoj  $l$  verčių 0, 1, 2, 3, 4, ... naudojamos raidės  $s, p, d, f, g, \dots$  Pvz., elektronas, kurio pagrindinis kvantinis skaičius yra  $n=2$ , o šalutinis  $l=1$ , vadinamas  $2p$  elektronu.

Ryškiausias skirtumas tarp kvantinio ir klasikinio požiūrio į orbitinį judesio kiekio momentą yra tas, kad kvantinė mechanika teigia, jog elektrono orbitinis judesio kiekio momentas gali būti lygus nuliui ( $l=0$ ). Pagal klasikinį judesio kiekio momento apibrėžimą (1.7.3) tai turėtų reikšti, kad  $r=0$ , t.y., kad  $s$  būsenos elektronas visą laiką juda išilgai tiesės, kuri eina per branduolį.

Banginės funkcijos (1.17.2), kurios atitinka įvairius kvantinių skaičių trejetus  $n, l, m_l$ , bendroju atveju yra gana sudėtingo pavidalo. Paprasčiausias yra  $s$  elektronų banginės funkcijos, nes jų kampinė funkcija  $Y(\theta, \varphi)$  yra lygi

konstantai  $1/(2\sqrt{\pi})$ , t.y., šios banginės funkcijos yra sferiškai simetrinės ir lygios  $R(r)/(2\sqrt{\pi})$ . Pvz., 1s elektrono banginė funkcija yra

$$\psi_{1s}(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi r_1^3}} \exp\left(-\frac{r}{r_1}\right); \quad (1.17.15)$$

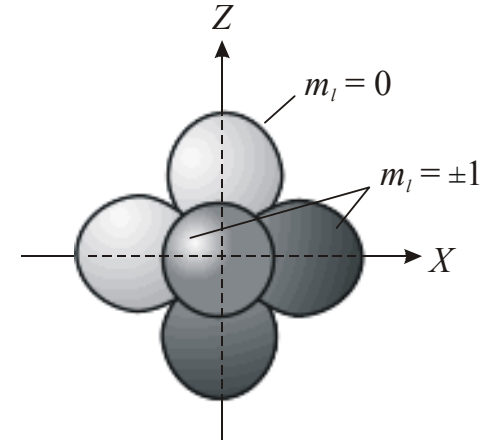
čia  $r_1$  yra pirmasis Boro spindulys, padalintas iš branduolio krūvio skaičiaus  $Z$  (žr. 1.7 poskyrį). Pagal banginės funkcijos statistinį aiškinimą (žr. 1.12 poskyrį), tikimybė  $dP$  aptikti 1s elektroną nykstamai mažo storio  $dr$  ir spindulio  $r$  sferiniame sluoksnyje yra lygi funkcijos (1.17.15) kvadrato ir to sluoksnio tūrio  $4\pi r^2 dr$  sandaugai. Vadinas, 1s elektrono radialinis tikimybės tankis lygus

$$\left(\frac{dP}{dr}\right)_{1s} = \psi_{1s}^2(r) \cdot 4\pi r^2 = R_{1s}^2(r) \cdot r^2 = \frac{4r^2}{r_1^3} \exp\left(-\frac{2r}{r_1}\right). \quad (1.17.16)$$

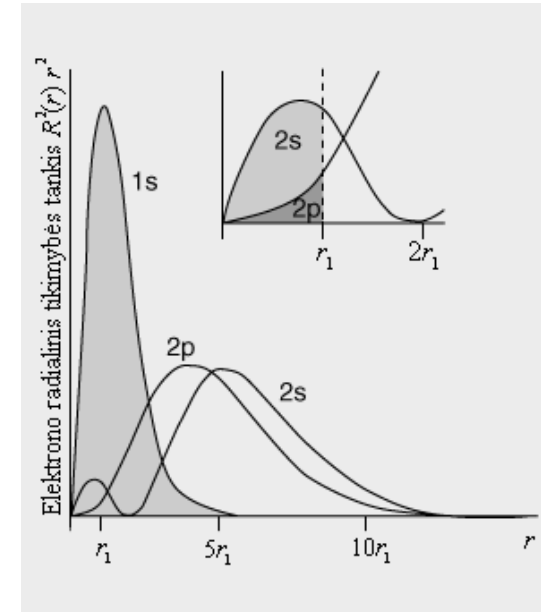
Banginės funkcijos, kurios atitinka būsenas  $l > 0$ , nėra sferiškai simetrinės. Pvz.,  $p$  elektronų ( $l = 1$ ) kampinės funkcijos  $Y(\theta, \varphi)$ , kurios atitinka tris galimas magnetinio kvantinio skaičiaus  $m_l$  vertes, yra trijų tarpusavyje statmenų "erdvinių aštuoniukių" pavidalo (žr. 1.19 pav.). Taigi, šiuo atveju radialinis tikimybės tankis priklauso nuo krypties, t.y., nuo kampų  $\theta$  ir  $\varphi$  (žr. 1.16 pav.).

Radialinio tikimybės tankio vidurkį kampų  $\theta$  ir  $\varphi$  atžvilgiu nusako funkcija  $R^2(r) \cdot r^2$ . Šios funkcijos pavidalas 1s, 2s ir 2p elektronams pavaizduotas 1.20 pav. Kaip matome, 1s elektrono radialinis tikimybės tankis yra didžiausias ties  $r_1$ . Kitais žodžiais, pirmasis Boro spindulys  $r_1$  nusako tikimiausią atstumą tarp 1s elektrono ir vandenilio atomo branduolio. Be to, iš (1.17.16) išplaukia, kad vidutinis atstumas tarp 1s elektrono ir H atomo branduolio yra lygus  $3r_1/2$ .

Aukščiau pateiktąją vandeniliškojo atomo analizę galima nesunkiai apibendrinti šarminių metalų atomams. Mat, šarminio metalo atomai turi vieną palyginti silpnai susijusį su branduoliu elektroną ir  $Z - 1$  arčiau branduolio esančių elektronų, kurie susiję su branduoliu žymiai stipriau. Pastarieji elektronai pasireiškia tik kaip sferiškai simetrinis neigiamo erdvinio krūvio pasiskirstymas, kuris dalinai ekranuoja teigiamąjį branduolio krūvį  $+Ze$ . Vadinas, šie vidiniai elektronai modifikuoja išorinio elektrono potencinės energijos priklausą nuo radialinės koordinatės  $U(r)$ . Todėl, aprašant šarminio metalo atomo išorinio elektrono judėjimą, galioja to paties pavidalo Šrėdingerio lygtis (1.17.1), kaip ir vandeniliškojo atomo atveju, tačiau su šiek tiek kitokia potencine energija  $U(r)$ . Šarminių metalų išorinio elektrono energijos lygmenys skiriasi nuo vandeniliškojo atomo energijos lygmenų (1.17.12) ir priklauso ne vien nuo pagrindinio kvantinio skaičiaus  $n$ , bet ir nuo šalutinio kvantinio skaičiaus  $l$ . Šią priklausomybę nuo  $l$  galima paaiškinti, pasinaudojus 1.20 pav. Pvz., ličio (Li) atomo vidiniai elektronai yra 1s būsenos, išorinio elektrono pagrindinė būsena yra 2s, o išorinio elektrono

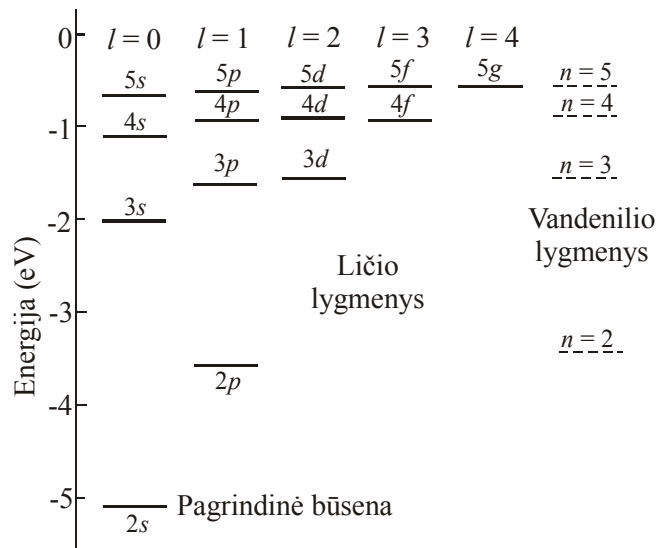


1.19 pav.  $p$  elektronų erdvinio tikimybės tankio kampinė dalis  $|Y(\theta, \varphi)|^2$ , atitinkanti tris kvantinio skaičiaus  $m_l$  vertes.  $|Y(\theta, \varphi)|^2$  vertę įvairiomis kryptimis nusako atstumai nuo koordinatės centro iki pavaizduotųjų paviršių.



1.20 pav. 1s, 2s ir 2p elektronų radialiniai tikimybės tankiai ( $r_1$  yra pirmasis Boro spindulys). Viršuje parodyta 2s ir 2p elektronų erdvinių pasiskirstymų dalis, kuri yra viduje sferos su spinduliu  $r_1$ .

sužadintosios būsenos yra  $2p$ ,  $3s$ ,  $3p$ ,  $3d$ ,  $4s$  ir t.t. Kaip matome 1.20 pav.,  $2s$  būsenos elektronas ilgiau laiko praleidžia arti brandulio (kur vidinių elektronų ekranuojantis poveikis yra mažesnis), negu  $2p$  būsenos elektronas. Vadinasi,  $2s$  būsenoje elektroną veikia didesnis teigiamas krūvis, negu  $2p$  būsenoje, todėl  $2s$  būsenos energija yra mažesnė, negu  $2p$  būsenos energija. Taip pat galima įrodyti, kad  $3s$  elektronų energija mažesnė už  $3p$  elektronų energiją, o pastaroji mažesnė už  $3d$  elektronų energiją ir t.t. Taigi, dėl išorinio elektrono skirtingas būsenas atitinkančių banginių funkcijų skirtingo erdvinio persiklojimo su vidinių elektronų banginėmis funkcijomis kiekvienas išorinio elektrono energijos lygmuo skyla į  $n$  lygmenų, kurie atitinka skirtingas šalutinio kvantinio skaičiaus vertes (1.17.13). 1.21 pav. pavaizduota ličio atomo energijos lygmenų diagrama. 1.21 pav. dešinėje parodyti vandenilio atomo energijos lygmenys, kurie apskaičiuoti pagal (1.17.12) su  $Z=1$ . Kaip matome, ličio atomo  $2s$  ir  $2p$  lygmenys yra žemiau už vandenilio atomo lygmenį  $n=2$ . Lygmenys  $3s$ ,  $3p$  ir  $3d$  taip pat yra žemiau už vandenilio lygmenį  $n=3$ , tačiau skirtumas yra mažesnis, negu lygmenų su  $n=2$ . Ličio išorinio elektrono energijos lygmenys, kurie atitinka  $n>4$ , beveik sutampa su atitinkamais vandenilio atomo lygmenimis. Taip yra dėl to, kad, esant didelėms  $n$  vėrtėms, išorinis elektronas yra palyginti toli nuo branduolio ir kitų elektronų, todėl branduolio ir vidinių elektronų poveikis išoriniam elektronui beveik toks pats, kaip teigiamo taškinio krūvio  $+e$ .



1.21 pav. Ličio (Li) atomo valentinio elektrono energijos lygmenų diagrama

### 1.18. Sukinys. Elektrono sukinio ir orbitos sąveika. Momentų sudėtis

Aukščiau apibūrinėti kvantiniai skaičiai  $n$ ,  $l$  ir  $m_l$  nėra pakankami, nusakant elektrono būseną atome, nes elektronas dar turi ir vidinį judesio kiekio momentą (**sukinį**). Taip pat, kaip elektrono orbitinio judesio kiekio momento absoliutinė vertė, kuri apibūdinama orbitiniu kvantiniu skaičiumi  $l$ , elektrono sukinio absoliutinė vertė apibūdinama **sukinio kvantiniu skaičiumi**  $s$ . Elektrono sukinio kvantinis skaičius visuomet lygus  $1/2$ :

$$s = \frac{1}{2}. \quad (1.18.1)$$

Sukinio absoliutinė vertė  $|\mathbf{L}_s|$  susijusi su sukinio kvantiniu skaičiumi  $s$  taip pat, kaip orbitinio judesio kiekio momento absoliutinė vertė  $|\mathbf{L}|$  susijusi su orbitiniu kvantiniu skaičiumi  $l$  (žr. (1.17.10)):

$$|\mathbf{L}_s| = \hbar \sqrt{s(s+1)} = \frac{\sqrt{3}}{2} \hbar, \quad (1.18.2)$$

o elektrono sukinio projekcija į laisvai pasirinktą koordinačių ašį  $Z$  išreiškiama sąryšiu, kuris analogiškas (1.17.8b):

$$L_{sz} = m_s \hbar \quad (m_s = \pm s = \pm 1/2). \quad (1.18.3)$$

Skaičius  $m_s$  vadinamas **sukinio magnetiniu kvantiniu skaičiumi**. (1.18.3) yra elektrono sukinio projekcijos operatoriaus tikrinės vėrtės. Sukinio projekcijos operatoriaus matricinė išraiška pateikta 1.19 poskyryje. Šis operatorius veikia sukinines koordinates, kurios gali būti lygios tik dviem vėrtėms:  $+1/2$  ir  $-1/2$ . Pilnoji banginė funkcija yra lygi erdvinės dalies (1.17.2) ir sukininės dalies, kuri priklauso nuo sukininių koordinačių, sandaugai (žr. 1.22 poskyrį).

Atomo fizikoje sukinio kvantinis skaičius dažniausiai vadinamas tiesiog sukiniu, o sukinio magnetinis kvantinis skaičius – tiesiog sukinio projekcija. Pvz., sakoma "elektrono sukinys lygus  $1/2$ " (nors tikroji vėrtė yra  $\hbar\sqrt{3}/2$ ), "elektrono sukinio projekcija lygi  $\pm 1/2$ " ir pan.

Su elektrono sukiniu yra susijęs elektrono vidinis (sukininis) magnetinis momentas  $\mathbf{M}_s$ . Sukininių magnetinio ir judesio kiekio momentų santykis yra dvigubai didesnis, negu orbitinių:

$$\mathbf{M}_s = -2\mu_B \frac{\mathbf{L}_s}{\hbar} \quad (1.18.4)$$

(plg. su (1.8.3)). Magnetinio momento ir atitinkamo judesio kiekio momento absoliutinių vėrtių santykis, išreikštas  $\mu_B/\hbar$  vienetais, yra vadinamas **giromagnetiniu santykiu**. Pagal (1.8.3) ir (1.18.4), elektrono orbitinis giromagnetinis santykis lygus 1, o sukininis giromagnetinis santykis lygus 2.

Sukininio magnetinio momento projekcijai ir absoliutinei vėrtei galioja sąryšiai, kurie analogiški (1.17.11a) ir (1.17.11b), tačiau vietoj orbitinių kvantinių skaičių  $m_l$  ir  $l$  reikia naudoti atitinkamus sukinio kvantinius skaičius  $m_s$  ir  $s$ , o vietoj  $\mu_B$  reikia naudoti  $2\mu_B$ :



$$M_{sz} = -2m_s\mu_B = \mp\mu_B \quad (m_s = \pm 1/2). \quad (1.18.5a)$$

$$|\mathbf{M}_s| = 2\mu_B\sqrt{s(s+1)} = \sqrt{3} \cdot \mu_B. \quad (1.18.5b)$$

Aprašant elektrono būseną atome, pilnąjį komutuojančiųjų operatorių rinkinį sudaro keturi minėtieji operatoriai: hamiltoniano operatorius (1.16.5), orbitinio judesio kiekio momento kvadrato operatorius (1.17.4), orbitinio judesio kiekio momento projekcijos operatorius (1.17.7) ir elektrono sukinio projekcijos operatorius. T.y., elektrono būseną atome pilnai nusako kvantiniai skaičiai

$$n, l, m_l, m_s. \quad (1.18.6)$$

Dvi būsenos, kurios skiriasi tik  $m_s$  vertėmis ( $m_s = \pm 1/2$ ), aprašomos vienoda erdvine bangine funkcija (1.17.2).

Kvantinių skaičių ketvertas (1.18.6) ir atitinkamas komutuojančiųjų operatorių ketvertas nėra vienintelis, kuriuo galima aprašyti elektrono būseną atome. Kvantiniai skaičiai (1.18.6) tinka tik tais atvejais, kai kampas tarp orbitinio ir sukininio judesio kiekio momentų vektorių  $\mathbf{L}$  ir  $\mathbf{L}_s$  yra nesvarbus, arba kai orbitinis judesio kiekio momentas lygus nuliui. Jeigu siekiama kvantiniais skaičiais vienareikšmiškai nusakyti elektrono energijos lygmenį, tuomet kvantiniai skaičiai (1.18.6) dažniausiai nėra tinkami, nes, kai  $l > 0$ , elektrono energija priklauso nuo kampo tarp orbitinio bei sukininio judesio kiekio momentų vektorių  $\mathbf{L}$  ir  $\mathbf{L}_s$ , kurio neįmanoma vienareikšmiškai nusakyti, naudojant kvantinius skaičius (1.18.6). Ši elektrono energijos priklausomybė nuo kampo tarp vektorių  $\mathbf{L}$  ir  $\mathbf{L}_s$  atsiranda dėl sukinio ir orbitos sąveikos.

**Sukinio ir orbitos sąveiką** galima paaiškinti dviem būdais:

**I būdas.** Žinome, kad elektronas turi sukininį magnetinį momentą  $\mathbf{M}_s$  (1.18.4). Elektrodinamikoje įrodoma, kad greičiu  $\mathbf{v}$  judantis magnetinis momentas  $\mathbf{M}_s$  turi dipolinį momentą

$$\mathbf{p}_e = \frac{1}{c^2} \mathbf{v} \times \mathbf{M}_s; \quad (1.18.7)$$

čia  $c$  yra šviesos greitis, o  $\mathbf{v} \times \mathbf{M}_s$  yra vektorių  $\mathbf{v}$  ir  $\mathbf{M}_s$  vektorinė sandauga, kurios absoliutinė vertė lygi  $v M_s \sin(\mathbf{v}, \mathbf{M}_s)$ , o kryptis statmena  $\mathbf{v}$  ir  $\mathbf{M}_s$ . Branduolio elektriniame lauke  $\mathbf{E}$  dipolinis momentas  $\mathbf{p}_e$  turi potencinę energiją

$$W = -(\mathbf{p}_e, \mathbf{E}) = -p_e E \cos(\mathbf{p}_e, \mathbf{E}); \quad (1.18.8)$$

čia  $(\mathbf{p}_e, \mathbf{E})$  yra vektorių  $\mathbf{p}_e$  ir  $\mathbf{E}$  skaliarinė sandauga. Energiją (1.18.8) reikia pridėti prie elektrono pilnutinės energijos. Iš (1.18.7) išplaukia, kad sukinio ir orbitos sąveikos energija (1.18.8) priklauso nuo kampo tarp elektrono greičio  $\mathbf{v}$  ir sukininio magnetinio momento  $\mathbf{M}_s$ . Kitais žodžiais, ši energija priklauso nuo kampo tarp elektrono orbitinio ir sukininio judesio kiekio momentų vektorių (orbitinio judesio kiekio momento kryptis susijusi su  $\mathbf{v}$  kryptimi pagal dešiniojo sraigto taisyklę, t.y., statmena orbitos plokštumai).

**II būdas.** Pereikime prie koordinačių sistemos, kuri susieta su judančiu elektronu. Šioje koordinačių sistemoje branduolys sukasi aplink elektroną. Kaip žinome iš elektrodinamikos, apskrita orbita judantis krūvis sukuria magnetinį lauką, kurio kryptis orbitos centre yra statmena orbitos plokštumai. Šiuo atveju orbitos centre yra elektronas. Šio efektinio magnetinio lauko indukciją pažymėsime  $\mathbf{B}_{ef}$ . Šiame lauke elektrono sukininis magnetinis momentas  $\mathbf{M}_s$  turi potencinę energiją

$$W = -(\mathbf{M}_s, \mathbf{B}_{ef}) = -M_s B_{ef} \cos(\mathbf{M}_s, \mathbf{B}_{ef}). \quad (1.18.9)$$

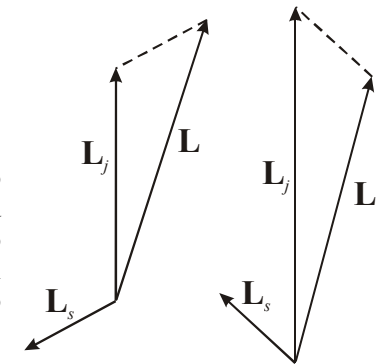
Tai yra kita sukinio ir orbitos sąveikos energijos išraiška (plg. su (1.18.8)). Vektoriaus  $\mathbf{B}_{ef}$  kryptis sutampa su elektrono orbitinio judesio kiekio momento  $\mathbf{L}$  kryptimi, o vektoriaus  $\mathbf{M}_s$  kryptis priešinga elektrono sukininio judesio kiekio momento  $\mathbf{L}_s$  kryptčiai (žr. (1.18.4)). Vadinasi,  $W$  vertė priklauso nuo kampo tarp vektorių  $\mathbf{L}_s$  ir  $\mathbf{L}$ .

Orbitinio ir sukininio judesio kiekio momentų vektorių suma

$$\mathbf{L}_j = \mathbf{L} + \mathbf{L}_s \quad (1.18.10)$$

nusako elektrono pilnutinį judesio kiekio momentą. Kadangi vektoriaus  $\mathbf{L}_s$  ilgis yra pastovus (žr. (1.18.2)), tai, uždavus vektoriaus  $\mathbf{L}$  ilgį, kampas tarp  $\mathbf{L}$  ir  $\mathbf{L}_s$  yra vienareikšmiškai susijęs su pilnutinio judesio kiekio momento  $\mathbf{L}_j$  absoliutine verte (žr. 1.22 pav.). Todėl teiginį apie elektrono energijos priklausomybę nuo minėtojo kampo galima suformuluoti šitaip: *esant duotiems pagrindiniam ir šalutiniam kvantiniams skaičiams, elektrono energija priklauso nuo pilnutinio judesio kiekio momento absoliutinės vertės*.

Pagal (1.18.9), sukinio ir orbitos sąveikos energija yra neigiama, kai kampas tarp  $\mathbf{M}_s$  ir  $\mathbf{B}_{ef}$  yra mažesnis už  $90^\circ$ , ir teigiama, kai šis kampas didesnis už  $90^\circ$ . Turint omenyje, kad vektorius  $\mathbf{B}_{ef}$  yra tos pačios krypties, kaip  $\mathbf{L}$ , o  $\mathbf{M}_s$  kryptis yra priešinga  $\mathbf{L}_s$  kryptčiai, pirmasis atvejis atitinka 1.22 pav. kairiąją diagramą, o antrasis – 1.22 pav. dešiniąją diagramą (kampas tarp vektorių matuojamas, sutapatinus jų pradžios taškus).



1.22 pav. Dvi galimos elektrono sukinio vektoriaus  $\mathbf{L}_s$  orientacijos atžvilgiu elektrono orbitinio judesio kiekio momento vektoriaus  $\mathbf{L}$  ir atitinkami elektrono pilnutinio judesio kiekio momento vektoriai  $\mathbf{L}_j$ .

Pilnutinio judesio kiekio momento  $\mathbf{L}_j$  absoliutinę vertę galima rasti, pasinaudojus šia bendrąja momentų sudėties taisykle: sudėjus du judesio kiekio momentus  $\mathbf{L}_1$  ir  $\mathbf{L}_2$ , kurių absoliutinės vertės lygios

$$L_1 = \hbar\sqrt{l_1(l_1+1)} \quad \text{ir} \quad L_2 = \hbar\sqrt{l_2(l_2+1)},$$

suminio momento  $\mathbf{L}_\Sigma = \mathbf{L}_1 + \mathbf{L}_2$  galimosios absoliutinės vertės yra

$$L_\Sigma = \hbar\sqrt{l_\Sigma(l_\Sigma+1)} \quad (l_\Sigma = |l_1 - l_2|, |l_1 - l_2| + 1, \dots, l_1 + l_2). \quad (1.18.11)$$

Sudedant elektrono orbitinį ir sukininį judesio kiekio momentus pagal šią taisyklę, kvantinį skaičių  $l_1$  reikia pakeisti šalutiniu kvantiniu skaičiumi  $l$ , o kvantinį skaičių  $l_2$  – sukinio kvantiniu skaičiumi  $s = 1/2$ . Tokiu būdu gaunama, kad pilnutinio momento  $\mathbf{L}_j$  galimosios absoliutinės vertės yra

$$|\mathbf{L}_j| = \hbar\sqrt{j(j+1)}, \quad (1.18.12)$$

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

$$\text{a) jeigu } l > 0, \quad j = l \pm \frac{1}{2}; \quad (1.18.13a)$$

$$\text{b) jeigu } l = 0, \quad j = \frac{1}{2}. \quad (1.18.13b)$$

Pilnutinio judesio kiekio momento projekcija į išskirtąją kryptį  $Z$  tenkina tą pačią sąlygą, kaip ir bet kurios kitos prigimtios judesio kiekio momento projekcija:

$$L_{jz} = m_j \hbar \quad (m_j = -j, -j+1, \dots, j-1, j). \quad (1.18.14)$$

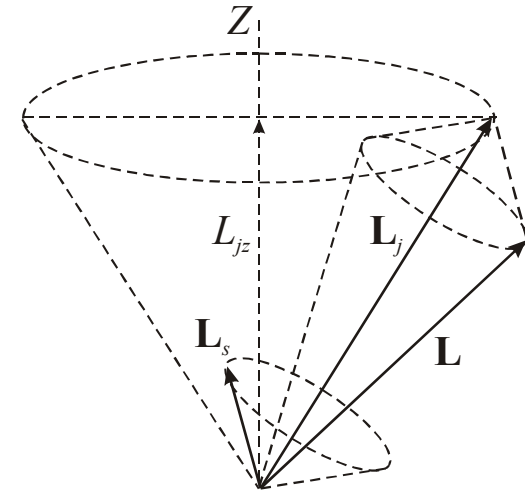
Gali iškilti klausimas, kaip galima kalbėti apie apibrėžtą kampą tarp vektorių  $\mathbf{L}$  ir  $\mathbf{L}_s$ , jeigu šių vektorių kryptys yra neapibrėžtos (jie precesuoja apie išskirtąją kryptį). Atsakymą į šį klausimą iliustruoja 1.23 pav. Būsenoje, kurioje  $l$  ir  $j$  yra apibrėžti, abu vektoriai  $\mathbf{L}$  ir  $\mathbf{L}_s$  precesuoja apie pilnutinio judesio kiekio momento vektorių  $\mathbf{L}_j$  taip, kad kampas tarp jų išlieka pastovus.

Vektorius  $\mathbf{L}_j$ , kaip ir bet kuris kitas judesio kiekio momentas, precesuoja aplink išskirtąją kryptį  $Z$ . Kaip matome 1.23 pav., vektorių  $\mathbf{L}$  ir  $\mathbf{L}_s$  projekcijos į tą kryptį yra neapibrėžtos. Taip yra todėl, kad operatoriai  $\hat{L}_z$  ir  $\hat{L}_{sz}$  nekomutuoja su operatoriumi  $\hat{\mathbf{L}}_j^2$ . Taigi, aprašant būseną su apibrėžtu  $j$ , kvantiniai skaičiai  $m_l$  ir  $m_s$  neturi apibrėžtų verčių. Todėl atomo fizikoje, apibūdinant elektrono būseną, dažniausiai naudojami kvantiniai skaičiai

$$n, l, j, m_j. \quad (1.18.15)$$

Šie skaičiai nusako komutuojančiųjų operatorių  $\hat{H}$ ,  $\hat{\mathbf{L}}^2$ ,  $\hat{\mathbf{L}}_j^2$  ir  $\hat{L}_{jz}$  tikrines vertes. T.y., vietoj orbitinio ir sukininio momentų projekcijų naudojamos pilnutinio momento absoliutinė vertė ir jo projekcija (plg. su (1.18.6)).

Elektrono būsenas, kuriose elektrono energija, orbitinio judesio kiekio momento absoliutinė vertė, pilnutinio judesio kiekio momento absoliutinė vertė ir šio momento projekcija vienu metu turi tiksliai apibrėžtas vertes, vadinsime elektrono *kvantinėmis būsenomis*.

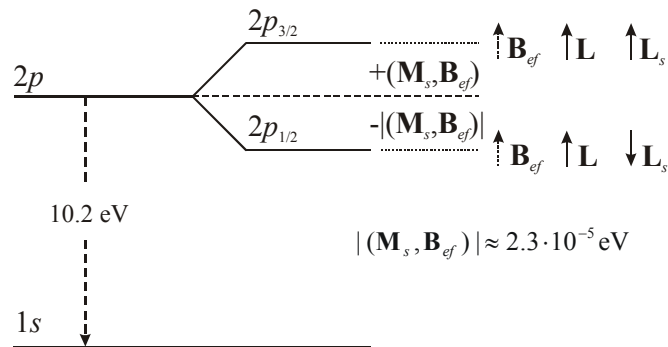


1.23 pav. Elektrono sukininio judesio kiekio momento vektoriaus  $\mathbf{L}_s$  ir orbitinio judesio kiekio momento vektoriaus  $\mathbf{L}$  precesija aplink pilnutinio judesio kiekio momento vektorių  $\mathbf{L}_j$  ir pastarojo vektoriaus precesija aplink išskirtąją kryptį  $Z$

Bendruoju atveju energijos lygmens negalima tapatinti su kvantine būseną, nes dažnai energija nepriklauso nuo vieno arba dviejų kvantinių skaičių. Pvz., jeigu nėra išorinio magnetinio lauko, tuomet elektrono energija nepriklauso nuo kvantinio skaičiaus  $m_j$ . T.y., energijos lygmenį su apibrėžtu kvantiniu skaičiumi  $j$  atitinka  $2j+1$  kvantinių būsenų, kurios skiriasi tik kvantiniu skaičiumi  $m_j$  (žr. (1.18.14)), o elektrono banginė funkcija tame lygmenyje lygi atitinkamų operatoriaus  $\hat{L}_{jz}$  tikrinių funkcijų tiesiniam dariniui (pagal kvantinės mechanikos III postulata). Todėl, norint apibūdinti elektrono energijos lygmenį, kai išorinis magnetinis laukas lygus nuliui, pakanka nurodyti tik kvantinius skaičius  $n$ ,  $l$  ir  $j$ . Kvantinis skaičius  $j$  nurodomas apatinio indekso pavidalu. Pvz., elektrono energijos lygmuo, kuris atitinka kvantinių skaičių vertes  $n = 2$ ,  $l = 1$  ir  $j = 3/2$ , žymimas tokiu būdu:  $2p_{3/2}$ .

Kadangi sukinio ir orbitos sąveikos energija priklauso nuo  $j$ , tai iš (1.18.13a,b) išplaukia, kad dėl sukinio ir orbitos sąveikos kiekvienas energijos lygmuo, išskyrus  $s$  lygmenis, skyla į du artimus lygmenis (žr. 1.24 pav.).

Didėjant  $n$  ir  $l$ , mažėja vidutinis elektrono greitis ir didėja vidutinis atstumas tarp branduolio ir elektrono, t.y., silpnėja vidutinis elektrinis laukas, kuriame juda elektronas. Pagal (1.18.7) ir (1.18.8), mažėjant elektrinio lauko stipriui ir elektrono greičiui, sukinio ir orbitos sąveikos energija mažėja. Vadinasi, kuo didesni  $n$  ir  $l$ , tuo mažesnis lygmenų skilimas. Tikslųjį šio lygmenų skilimo didumą numato reliatyvistinė Dirako lygtis, apie kurią kalbama kitame poskyryje.



1.24 pav. Vandenilio  $2p$  būsenos energijos lygmens skilimas dėl sukinio ir orbitos sąveikos. Lygmuo  $2p_{1/2}$  atitinka orbitinio judesio kiekio momento ir sukinio "priešingą" orientaciją (kaip 1.22 pav. kairiojoje diagramoje), o lygmuo  $2p_{3/2}$  atitinka šių momentų "vienodą" orientaciją (kaip 1.22 pav. dešiniojoje diagramoje).

### 1.19. Dirako lygtis ir elektrono sukinys

Elektrono sukinio vertė bei sukinio operatoriaus išraiška išplaukia iš reliatyvistinės elektrono judėjimo lygties<sup>1</sup>, kurią 1928 m. išvedė anglų fizikas Polisas Dirakas. Dirako lygties išvedimas yra panašus į Šrėdingerio lygties išvedimą: jeigu Šrėdingerio lygtis (1.17.1) gaunama iš elektrono nereliatyvistinės pilnutinės energijos išraiškos (1.16.15), pakeitus judesio kiekį  $\mathbf{p}$  atitinkamu operatoriumi (1.16.14), tai Dirako lygtis gaunama, remiantis reliatyvistinės pilnutinės laisvojo elektrono energijos kvadrato išraiška:

$$E^2 = c^2(m_0^2 c^2 + p^2); \quad (1.19.1)$$

čia  $m_0$  yra elektrono rimties masė,  $c$  yra šviesos greitis, o  $p$  yra elektrono judesio kiekis. Be to, išvedant Dirako lygtį, naudojama dar viena papildoma sąlyga: judėjimo lygtis turi būti pirmojo laipsnio tiesinė diferencialinė lygtis. Dirako lygtis laisvajam elektronui užrašoma šitaip:

<sup>1</sup> **Reliatyvistinė judėjimo lygtis** – tai judėjimo lygtis, kuri yra invariantiška Lorencio transformacijų atžvilgiu. **Lorencio transformacijos** susieja Dekarto koordinates ir laiką

dviejose inercinėse atskaitos sistemose:  $x' = \frac{x - vt}{\sqrt{1 - v^2/c^2}}$ ,  $y' = y$ ,  $z' = z$ ,  $t' = \frac{t - (v/c^2)x}{\sqrt{1 - v^2/c^2}}$ ;

čia koordinatės  $x'$ ,  $y'$ ,  $z'$  ir laikas  $t'$  – tai koordinatės ir laikas sistemoje, kuri juda "neštrichuotos" sistemos atžvilgiu  $X$  ašies kryptimi pastoviu greičiu  $v$  (laikoma, kad abiejų sistemų atitinkamų ašių kryptys sutampa). Sąvoka "lygties invariantiškumas Lorencio transformacijų atžvilgiu" reiškia, kad, išreiškus koordinates  $x$ ,  $y$ ,  $z$  ir laiką  $t$  štrichuotais dydžiais  $x'$ ,  $y'$ ,  $z'$  ir  $t'$ , lygties pavidalas nepasikeičia. Šrėdingerio lygtis (1.17.1) netenkina šios sąlygos, todėl ji netinka, kai dalelės greitis yra artimas šviesos greičiui. Reliatyvistinė judėjimo lygtis tinka, aprašant bet kokio greičio dalelę.

$$[\hat{E} - c(\alpha_0 m_0 c + \alpha_1 \hat{p}_x + \alpha_2 \hat{p}_y + \alpha_3 \hat{p}_z)]\Psi = 0; \quad (1.19.2a)$$

čia  $\hat{E}$  yra energijos operatorius (1.16.19),  $\hat{p}_x$ ,  $\hat{p}_y$  ir  $\hat{p}_z$  yra judesio kiekio operatoriaus komponentės (1.16.14),  $c$  yra šviesos greitis,  $m_0$  yra elektrono rimties masė, o dydžiai  $\alpha_0$ ,  $\alpha_1$ ,  $\alpha_2$  ir  $\alpha_3$  apibrėžiami taip, kad galiotų lygybė

$$E = c(\alpha_0 m_0 c + \alpha_1 p_x + \alpha_2 p_y + \alpha_3 p_z). \quad (1.19.2b)$$

Pakėlę abi lygybės (1.19.2b) puses kvadratu, turime gauti reliatyvistinę energijos ir judesio kiekio sąryšį (1.19.1). Todėl aišku, kad  $\alpha_0$ ,  $\alpha_1$ ,  $\alpha_2$  ir  $\alpha_3$  negali būti skaliariai, nes priešingu atveju, keliant kvadratu, dešiniojoje lygybės pusėje atsirastų dydžio  $m_0 c$  ir impulso komponentių  $p_x$ ,  $p_y$  ir  $p_z$  tarpusavio sandaugos, kurių nėra reiškinyje (1.19.1). Kad nebūtų šių sandaugų, dydžiai  $\alpha_0$ ,  $\alpha_1$ ,  $\alpha_2$  ir  $\alpha_3$  turi tenkinti sąlygą

$$\alpha_j \alpha_k = -\alpha_k \alpha_j \quad (j \neq k), \quad (1.19.3)$$

t.y., jie turi antikomuoti. Be to, šių keturių dydžių kvadratai turi būti lygūs vienetui:

$$\alpha_j^2 = 1 \quad (j = 0, 1, 2, 3). \quad (1.19.4)$$

Sąryšiai (1.19.3) ir (1.19.4) galioja tuomet, kai  $\alpha_0$ ,  $\alpha_1$ ,  $\alpha_2$  ir  $\alpha_3$  yra tokios ketvirtosios eilės kvadratinės matricos:

$$\alpha_0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad \alpha_1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \alpha_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & i & 0 \\ 0 & -i & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \alpha_3 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \quad (1.19.5)$$

čia  $i$  yra menamasis vienetas. Pasinaudojus matricų daugybos taisykle, nesunku įsitikinti, kad matricos (1.19.5) tenkina sąryšius (1.19.3) ir (1.19.4) (sąryšio (1.19.4) dešiniąją pusę reikia laikyti ketvirtosios eilės vienetine matrica). Kadangi  $\alpha_j$  yra ketvirtosios eilės matricos, tai Dirako lygties (1.19.2a) kairiojoje pusėje laužtiniuose skliaustuose esantis reiškinys taip pat yra ketvirtosios eilės matrica (šios matricos elementai skaičiuojami pagal bendrąsias matricų algebros taisykles). Todėl banginė funkcija  $\Psi$ , kuri įeina į Dirako lygtį (1.19.2a), turi keturias komponentes, kurias patogiau užrašyti stulpelio pavidalu:

$$\Psi(x, y, z, t) = \begin{pmatrix} \Psi_1(x, y, z, t) \\ \Psi_2(x, y, z, t) \\ \Psi_3(x, y, z, t) \\ \Psi_4(x, y, z, t) \end{pmatrix}. \quad (1.19.6)$$

Vadinasi, Dirako lygties (1.19.2a) kairioji pusė – tai ketvirtosios eilės kvadratinės matricos ir keturių funkcijų stulpelio sandauga. Todėl Dirako lygtį galima pakeisti keturių tiesinių pirmosios eilės diferencialinių lygčių sistema atžvilgiu keturių banginės funkcijos komponentių.



Jeigu elektronas juda potencialiniame lauke, kurio potencinė energija  $U(x,y,z,t)$ , tuomet Dirako lygties (1.19.2a) kairiojoje pusėje, laužtiniuose skliaustuose, atsiranda dėmuo  $-U$ :

$$[\hat{E} - c(\alpha_0 m_0 c + \alpha_1 \hat{p}_x + \alpha_2 \hat{p}_y + \alpha_3 \hat{p}_z) - U(x, y, z, t)]\Psi = 0. \quad (1.19.7)$$

Jeigu  $U$  nepriklauso nuo laiko (t.y., potencialinis laukas yra stacionarus), tuomet, kaip ir Šrėdingerio lygties atveju, pilnutinę banginę funkciją  $\Psi(x,y,z,t)$  galima išreikšti erdviųjų koordinačių funkcijos  $\psi(x,y,z)$  ir kompleksinės eksponentinės laiko funkcijos sandauga (1.13.2), tačiau dabar  $\psi(x,y,z)$  yra keturių funkcijų stulpelis:

$$\psi(x, y, z) = \begin{pmatrix} \psi_1(x, y, z) \\ \psi_2(x, y, z) \\ \psi_3(x, y, z) \\ \psi_4(x, y, z) \end{pmatrix}. \quad (1.19.8)$$

$\psi(x,y,z)$  ir elektrono energija  $E$  tenkina šią tikrinių verčių lygtį:

$$[c(\alpha_0 m_0 c + \alpha_1 \hat{p}_x + \alpha_2 \hat{p}_y + \alpha_3 \hat{p}_z) + U(x, y, z)]\psi = E\psi. \quad (1.19.9)$$

Tai yra hamiltoniano operatoriaus tikrinių verčių lygtis. Hamiltoniano operatorius šiuo atveju lygus

$$\hat{H} = c(\alpha_0 m_0 c + \alpha_1 \hat{p}_x + \alpha_2 \hat{p}_y + \alpha_3 \hat{p}_z) + U(x, y, z). \quad (1.19.10)$$

Kadangi dydžiai  $\alpha_j$  yra matricos, tai hamiltoniano operatorius šiuo atveju taip pat yra ketvirtos eilės kvadratinė matrica.

Kaip minėta 1.16 poskyryje, pilnam apibrėžtos energijos sistemos būsenos aprašymui reikia turėti pilną komutuojančiųjų operatorių rinkinį, į kurį įeina hamiltoniano operatorius. 1.17 poskyryje įrodyta, kad rotatoriaus (pvz., atomo elektrono) Šrėdingerio lygties atveju šį rinkinį sudaro trys operatoriai: hamiltonianas, orbitinio judesio kiekio momento kvadratas ir orbitinio judesio kiekio momento projekcija  $\hat{L}_z$ , kurią nusako formulė (1.16.16). Tačiau pastarasis operatorius nekomutuoja su reliatyvistiniu elektrono hamiltonianu (1.19.10). Taigi, kai elektronas turi apibrėžtą energiją, orbitinio judesio kiekio momentas neturi apibrėžtos vertės. Kitais žodžiais, elektrono orbitinis momentas nėra tvarus (nėra judesio integralas). Vadinasi, pagal judesio kiekio momento tvermės dėsnį, turi egzistuoti dar viena pilnutinio judesio kiekio momento dedamoji, kurią sudėjus su orbitiniu momentu, gaunamas tvarus dydis. Ši dedamoji – tai elektrono sukinys. Su hamiltonianu (1.19.10) komutuoja toks operatorius:

$$\hat{\mathbf{L}}_j = \hat{\mathbf{L}} + \frac{\hbar}{2}(\sigma_x \mathbf{x}_0 + \sigma_y \mathbf{y}_0 + \sigma_z \mathbf{z}_0); \quad (1.19.11)$$

čia  $\hat{\mathbf{L}}$  yra orbitinio judesio kiekio momento vektoriaus operatorius,  $\mathbf{x}_0$ ,  $\mathbf{y}_0$  ir  $\mathbf{z}_0$  yra  $X$ ,  $Y$  ir  $Z$  ašių vienetiniai vektoriai, o  $\sigma_x$ ,  $\sigma_y$  ir  $\sigma_z$  yra tokios ketvirtosios eilės matricos:

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (1.19.12)$$

Antrasis dėmuo reiškinyje (1.19.11) – tai elektrono sukinio vektoriaus operatorius  $\hat{\mathbf{L}}_s$ . T.y., matricų (1.19.12) ir dydžio  $\hbar/2$  sandaugos – tai elektrono sukinio operatoriaus Dekarto dedamosios:

$$\hat{L}_{sx} = \frac{\hbar}{2}\sigma_x, \quad \hat{L}_{sy} = \frac{\hbar}{2}\sigma_y, \quad \hat{L}_{sz} = \frac{\hbar}{2}\sigma_z. \quad (1.19.13)$$

Rasime elektrono sukinio operatoriaus dedamosios  $\hat{L}_{sz}$  tikrines vertes ir tuo pačiu išsiaiškinsime elektrono banginės funkcijos komponentių prasmę. Tuo tikslu paveikiame operatoriumi  $\hat{L}_{sz}$  elektrono banginę funkciją (1.19.6):

$$\hat{L}_{sz}\psi = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ -\psi_2 \\ \psi_3 \\ -\psi_4 \end{pmatrix}. \quad (1.19.14)$$

Vadinasi, jeigu komponentės  $\psi_2$  ir  $\psi_4$  lygios nuliui, tuomet galioja lygybė

$$\hat{L}_{sz}\psi = \frac{\hbar}{2}\psi,$$

t.y., tokiu atveju  $\psi$  yra elektrono sukinio projekcijos operatoriaus tikrinė funkcija, o atitinkama tikrinė vertė lygi  $\hbar/2$ . Jeigu komponentės  $\psi_1$  ir  $\psi_3$  lygios nuliui, tuomet galioja lygybė

$$\hat{L}_{sz}\psi = -\frac{\hbar}{2}\psi,$$

t.y., tokiu atveju  $\psi$  taip pat yra elektrono sukinio projekcijos operatoriaus tikrinė funkcija, o atitinkama tikrinė vertė lygi  $-\hbar/2$ . Kitų tikrinių verčių operatorius  $\hat{L}_{sz}$  neturi. Žinoma, tokios pačios yra ir kitų dviejų Dekarto dedamųjų tikrinių verčių, nes visos kryptys erdvėje yra lygiavertės<sup>1</sup>. Vadinasi, elektrono sukinio projekcija į bet kurią kryptį gali būti lygi tik dviem vertėm:  $\hbar/2$  arba  $-\hbar/2$ . Pilnutinio sukinio kvadratas lygus

$$\hat{L}_s^2 = \hat{L}_{sx}^2 + \hat{L}_{sy}^2 + \hat{L}_{sz}^2 = \frac{\hbar^2}{4}(\sigma_x^2 + \sigma_y^2 + \sigma_z^2) = \frac{3}{4}\hbar^2 \quad (1.19.15)$$

<sup>1</sup> Matricas (1.19.12) galima apibrėžti įvairiai. Šiuo atveju jos buvo apibrėžtos taip, kad sukinio  $Z$  dedamosios operatoriaus tikrinių verčių lygtis būtų kuo paprastesnė. Naudojant matricinės kvantinės mechanikos terminologiją, sukinio Dekarto dedamųjų operatoriai (1.19.12) "yra išreikšti operatoriaus  $\hat{L}_{sz}$  tikrinių funkcijų bazėje".

(čia pasinaudota tuo, kad matricų (1.19.12) kvadratai yra vienetinės matricos). Užrašę šį reiškinių (1.18.2) pavidalą, gauname, kad elektrono sukinio kvantinis skaičius (arba tiesiog sukinys) lygus  $s = 1/2$ . Dirako lygtis tinka ne vien elektronams, bet ir visoms kitoms dalelėms, kurių sukinys lygus  $1/2$  (pvz., neutronui ir protonui).

Taigi, nustatėme, kad kiekvieną iš dviejų galimų sukinio verčių atitinka dvi banginės funkcijos dedamosios:  $\psi_1$  ir  $\psi_3$  atitinka sukinio orientaciją  $Z$  ašies kryptimi, o  $\psi_2$  ir  $\psi_4$  atitinka sukinio orientaciją priešinga kryptimi. Norint išsiaiškinti, kuo skiriasi būsenos  $\psi_1$  ir  $\psi_3$  (arba  $\psi_2$  ir  $\psi_4$ ), galima pasinaudoti laisvojo elektrono judėjimo lygtimi, kuri gaunama, kai lygtyje (1.19.9)  $U \equiv 0$ . Kaip ir Šrėdingerio lygties atveju, laisvojo elektrono banginė funkcija yra plokščioji banga (žr. (1.16.12)), tačiau prieš kompleksinę eksponentę yra keturių koeficientų stulpelis:

$$\psi(x, y, z) = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \\ a_4 \end{pmatrix} \exp\left[\frac{i}{\hbar} p_z z\right]; \quad (1.19.16)$$

čia laikoma, kad elektronas sklinda  $Z$  ašies kryptimi (todėl  $p_x = p_y = 0$ ). Pareikalavus, kad funkcija (1.19.16) tenkintų stacionariąją Dirako lygtį (1.19.9), gaunamos dvi galimos elektrono pilnutinės energijos vertės (t.y., dvi hamiltoniano tikrinės vertės):

$$E = \pm c \sqrt{p_z^2 + m_0^2 c^2}. \quad (1.19.17)$$

Teigiamą energiją  $E = c \sqrt{p_z^2 + m_0^2 c^2}$  atitinka šie du koeficientų  $a_j$  ketvertai:

$$a_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{1 + \frac{m_0 c^2}{E}}, \quad a_2 = 0, \quad a_3 = \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{1 - \frac{m_0 c^2}{E}}, \quad a_4 = 0. \quad (1.19.18a)$$

$$a_1 = 0, \quad a_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{1 + \frac{m_0 c^2}{E}}, \quad a_3 = 0, \quad a_4 = -\frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{1 - \frac{m_0 c^2}{E}}. \quad (1.19.18b)$$

Neigiamą energiją  $E = -c \sqrt{p_z^2 + m_0^2 c^2}$  atitinka šie du koeficientų  $a_j$  ketvertai:

$$a_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{1 - \frac{m_0 c^2}{|E|}}, \quad a_2 = 0, \quad a_3 = -\frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{1 + \frac{m_0 c^2}{|E|}}, \quad a_4 = 0. \quad (1.19.19a)$$

$$a_1 = 0, \quad a_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{1 - \frac{m_0 c^2}{|E|}}, \quad a_3 = 0, \quad a_4 = \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{1 + \frac{m_0 c^2}{|E|}}. \quad (1.19.19b)$$

Prisiminus ankstesnę išvadą apie elektrono sukinio projekcijos operatoriaus tikrines funkcijas, galima teigti, kad koeficientų rinkiniai (1.19.18a) ir (1.19.19a) atitinka elektrono sukinio orientaciją  $Z$  ašies kryptimi, o rinkiniai

(1.19.18b) ir (1.19.19b) atitinka sukinio orientaciją priešinga kryptimi. Taigi, keturi koeficientų rinkiniai (1.19.18a), (1.19.18b), (1.19.19a), (1.19.19b) atitinka keturis įmanomus sukinio projekcijos ir pilnutinės reliatyvistinės energijos ženklo derinius. Tuo atveju, kai elektrono greitis yra žymiai mažesnis už šviesos greitį ( $v/c \ll 1$ ), šias koeficientų išraiškas galima pakeisti paprastesnėmis apytikslėmis formulėmis:

$$a_1 \approx 1, \quad a_2 = 0, \quad a_3 \approx v/(2c), \quad a_4 = 0; \quad (1.19.20a)$$

$$a_1 = 0, \quad a_2 \approx 1, \quad a_3 = 0, \quad a_4 \approx -v/(2c); \quad (1.19.20b)$$

$$a_1 \approx v/(2c), \quad a_2 = 0, \quad a_3 = -1, \quad a_4 = 0; \quad (1.19.21a)$$

$$a_1 = 0, \quad a_2 \approx v/(2c), \quad a_3 = 0, \quad a_4 \approx 1; \quad (1.19.21b)$$

Kadangi dydis  $v/(2c)$  šiuo atveju yra artimas nuliui, tai galima teigti, kad nereliatyvistinio elektrono banginės funkcijos dedamosios  $\psi_1$  ir  $\psi_2$  atitinka teigiamas energijos vertes, o dedamosios  $\psi_3$  ir  $\psi_4$  atitinka neigiamas energijos vertes.

Iš pirmo žvilgsnio, neigiama pilnutinė laisvojo elektrono energija neturi fizikinės prasmės. Tačiau gilesnė šio rezultato analizė rodo, kad elektrono būsenos su neigiama energija atitinka elektrono antdalelę – **pozitroną**. Pozitrono masė ir sukinys yra tokie patys, kaip elektrono, tačiau krūvio ženklas yra priešingas. Taigi, Dirako lygtis ne tik teisingai aprašo elektrono sukinį, bet ir numato pozitrono egzistavimą. Pozitronas buvo eksperimentiškai atrastas 1932 m.

Jeigu iš anksto žinoma, kad elektrono greitis yra nereliatyvistinis (pvz., tai galioja lengvųjų atomų elektronams) ir kalbama tik apie elektronus (o ne apie pozitronus), tuomet iš to, kas aukščiau pasakyta, išplaukia, kad elektrono būsenos aprašymui pakanka naudoti tik komponentes  $\psi_1$  ir  $\psi_2$  (nes komponentės  $\psi_3$  ir  $\psi_4$  yra artimos nuliui). Vadinasi, tokiu atveju galima laikyti, kad elektrono banginė funkcija turi ne keturias, o tik dvi komponentes:

$$\psi(x, y, z) = \begin{pmatrix} \psi_1(x, y, z) \\ \psi_2(x, y, z) \end{pmatrix}. \quad (1.19.22)$$

Atitinkamai, nereliatyvistinio elektrono sukinio operatorių galima išreikšti antrosios eilės matricom, kurios sudarytos iš ketvirtosios eilės matricų (1.19.12) pirmosiose dviejose eilutėse ir pirmuosiuose dviejuose stulpeliuose esančių elementų:

$$s_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad s_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad s_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (1.19.23)$$

Šitaip apibrėžus sukinio operatorių, banginės funkcijos komponentė  $\psi_1(x, y, z)$  nusako būseną, kurioje sukinio  $Z$  dedamoji lygi  $\hbar/2$ , o komponentė  $\psi_2(x, y, z)$  nusako būseną, kurioje sukinio  $Z$  dedamoji lygi  $-\hbar/2$ .

Sprendžiant Dirako lygtį (1.19.9) vandeniliškajam atomui, vietoj  $U$  reikia naudoti funkciją (1.14.4). Tuomet gaunamos tokios energijos lygmenų vertės:

$$E_{nj} = -\frac{Z^2}{n^2} \frac{m_0 e^4}{8 \varepsilon_0^2 h^2} \left[ 1 + \frac{\alpha^2}{n^2} \left( \frac{n}{j+1/2} - \frac{3}{4} \right) \right]; \quad (1.19.24)$$

čia  $j$  yra elektrono pilnutinio judesio kiekio momento kvantinis skaičius, kurį nusako formulės (1.18.13a,b), o  $\alpha$  yra bematė **smulkiosios struktūros konstanta**, kuri apibūdinama sąryšiu

$$\alpha = \frac{e^2}{2 \varepsilon_0 h c}. \quad (1.19.25)$$

Smulkiosios struktūros konstantos vertė apytiksliai lygi 1/137. Antrasis dėmuo reiškinių (1.19.24) laužtiniuose skliaustuose nusako vandeniliškojo atomo lygmenų skilimą į dubletus, kurį sąlygoja sukinio ir orbitos sąveika. Be to, palyginus reiškinių (1.19.24) su Šrėdingerio lygties numatomom energijos vertėm (1.17.12), akivaizdu, kad Dirako lygties numatomi energijos lygmenys yra ne tik suskilę, bet ir nežymiai pasislinkę atžvilgiu tų, kurie išplaukia iš Šrėdingerio lygties.

## 1.20. Atrankos taisyklės. Atomo spektro linijų smulkioji struktūra

Kiekviena atomo spektro linija atitinka atomo kvantinį šuolį tarp kažkurių dviejų energijos lygmenų. Linijos dažnis lygus lygmenų energijų skirtumui, padalintam iš Planko konstantos. Todėl 1.18 poskyryje minėtasis energijos lygmenų skilimas į du artimus lygmenis (dėl sukinio ir orbitos sąveikos) sąlygoja spektro linijų skilimą į dvi arba daugiau artimų linijų. Šis skilimas vadinamas **spektro linijų multiplėtiškumu**, o spektro linija, kuri sudaryta iš kelių artimų linijų, apibendrintai vadinama multiplėtu. Dviguba linija vadinama dubletu, triguba – tripletu ir t.t. Spektro linijų multiplėtinė struktūra, kuri atsiranda dėl sukinio ir orbitos sąveikos, vadinama spektro **smulkiaja struktūra**.

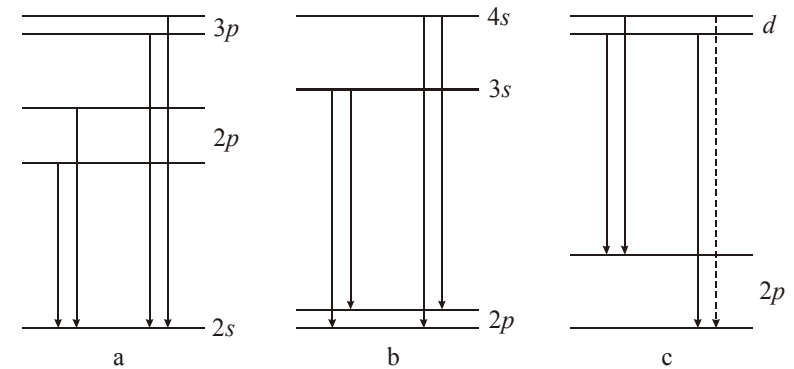
Skirtingų kvantinių šuolių dažniai (vadinasi, ir atitinkamų linijų intensyvumai) yra skirtingi. Kai kurių šuolių tikimybė yra tokia maža, kad ją galima laikyti lygia nuliui. Tokie šuoliai vadinami **draustiniais šuoliais**, o kvantiniai šuoliai, kurie gali vykti, vadinami **leistiniais šuoliais**. Taisyklės, kurios nusako, kurie šuoliai yra draustiniai, o kurie – leistiniai, vadinamos **atrakos taisyklėmis**. Atrankos taisyklės teigia, kad leistiniai kvantiniai šuoliai yra tie šuoliai, kurių metu elektrono kvantinių skaičių  $l$  ir  $j$  pokyčiai  $\Delta l$  ir  $\Delta j$  tenkina šias sąlygas:

$$\Delta l = \pm 1; \quad (1.20.1a)$$

$$\Delta j = 0, \pm 1 \quad (\text{šuoliai tarp lygmenų su } j = 0 \text{ yra draustiniai}). \quad (1.20.1b)$$

Atrankos taisyklės neriboja pagrindinio kvantinio skaičiaus  $n$  pokyčio.

Šios taisyklės kilo iš judesio kiekio momento tvermės dėsnio. Mat, vykstant šuoliui tarp dviejų energijos lygmenų, išspinduliuojamas arba sugeriamas fotonas. Fotono sukinys lygus 1. Pagal judesio kiekio momento



1.25 pav. Ličio atomo valentinio elektrono kvantiniai šuoliai, atsižvelgiant į smulkiają struktūrą. a – šuoliai iš  $p$  lygmenų į  $2s$  lygmenį, b – šuoliai iš  $s$  lygmenų į  $2p$  lygmenį, c – šuoliai iš  $d$  lygmenų į  $2p$  lygmenį.

tvermės dėsnį, išspinduliuavus fotoną, atomo judesio kiekio momentas tampa lygus atomo pradinio momento ir fotono sukinio vektoriniam skirtumui, o sugėrus fotoną, atomo judesio kiekio momentas tampa lygus atomo pradinio momento ir fotono sukinio vektorinei sumai.

Reikia turėti omenyje, kad atrankos taisyklės nėra absoliučiai griežtos. Draustinių šuolių tikimybė nėra tiksliai lygi nuliui, tačiau ji yra žymiai mažesnė už leistinių šuolių tikimybę. Pvz., šuolis, kurio metu  $\Delta l = 0$ , gali vykti, išspinduliuojant du fotonus. Galimos situacijos, kai nėra galimų leistinių šuolių į žemesnį energijos lygmenį. Tokiu atveju vyksta kuris nors iš draustinių šuolių. Tačiau tuomet atomas būna sužadintas žymiai ilgiau, negu įprasta, todėl tokios sužadintosios būsenos vadinamos **metastabiliosiomis būsenomis**.

Sukinio ir orbitos sąveika bei atrankos taisyklės pilnai paaiškina šarmiųjų metalų spektrų dėsningumus. Pvz., 1.25 pav. pavaizduoti ličio atomo valentinio elektrono šuoliai iš  $p$  lygmenų į  $2s$  lygmenį (a), iš  $s$  lygmenų į  $2p$  lygmenį (b) ir iš  $d$  lygmenų į  $2p$  lygmenį (c). Šuolis, kuris pavaizduotas punktyrine linija, yra draustinis (jis atitinka  $\Delta j = -2$ ).

## 1.21. Daugielektroniniai atomai. Paulio draudimo principas. Elektronų sluoksniai

Aprašant daugielektroninių atomų savybes, laikoma, kad daugielektronio atomo elektronai yra pasiskirstę tarp vienelektroninių kvantinių būsenų, kurios apibūdinamos tais pačiais kvantiniais skaičiais, kaip ir vandeniliškajame atome ( $n, l, j$  ir  $m_j$ ). Pagrindiniai principai, kurie nusako vienelektroninių būsenų užpildymą daugielektroniniame atome, yra Paulio draudimo principas ir energijos minimumo principas.

**Paulio draudimo principas** teigia, kad du elektronai negali būti vienos kvantinės būsenos. Kitais žodžiais, atomas negali turėti dviejų elektronų, kurių visi keturi kvantiniai skaičiai (1.18.15) arba (1.18.6) sutampa. Paulio draudimo principas galioja ne vien elektronams, tačiau ir visoms vienuose dalelėms, kurių sukinio kvantinis skaičius yra pusinis (t.y.,  $1/2$ ,  $3/2$ ,  $5/2$  ir t.t.). Tokios dalelės apibendrintai vadinamos **fermionais**. Fermionų pavyzdžiai yra elektronas, neutronas ir protonas (visų trijų sukiniai lygūs  $1/2$ ). Dalelės, kurių sukinio kvantinis skaičius yra sveikasis, vadinamos **bozonais**. Bozono pavyzdys yra fotonas (sukinys lygus 1). Bozonams Paulio draudimo principas negalioja.

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

Kaip matome 1.21 pav., augant pagrindiniam ir šalutiniam kvantiniams skaičiams  $n$  ir  $l$ , elektrono energija didėja. Elektrono energija stipriausiai priklauso nuo  $n$  ir silpniau priklauso nuo  $l$ . Be to, dėl sukinio ir orbitos sąveikos atsiranda lygmenų smulkioji struktūra (energijos priklausomybė nuo kvantinio skaičiaus  $j$ , esant fiksuotiems  $n$  ir  $l$ ). Šie dėsningumai išlieka ir daugiaelektronuose atomuose. Todėl mažiausios energijos būsenoje užpildomos būsenos su mažiausiais  $n$  ir  $l$ .

Augant  $n$ , sparčiai didėja vidutinis atstumas tarp branduolio ir elektrono (pvz., žr. (1.7.14)). Šio atstumo priklausomybė nuo  $l$  yra žymiai silpnė, negu nuo  $n$  (žr. 1.20 pav.). Todėl visi elektronai, kurių pagrindinis kvantinis skaičius  $n$  sutampa, sudaro **elektronų sluoksnį**. Turint omenyje, kad kiekvieną  $n$  vertę atitinka  $n$  galimų skaičiaus  $l$  verčių (žr. (1.17.13)), o kiekvieną  $l$  vertę atitinka  $2l + 1$  galimų skaičiaus  $m_l$  verčių (žr. (1.17.8b)) ir 2 galimos skaičiaus  $m_s$  vertės (žr. (1.18.3)), galima teigti, kad  $n$ -tajame sluoksnyje elektronų skaičius negali būti didesnis už

$$2 \sum_{l=0}^{n-1} (2l + 1) = 2n^2. \quad (1.21.1)$$

Pagal (1.21.1), pirmajame elektronų sluoksnyje ( $n = 1$ ) gali būti ne daugiau 2 elektronų, antrajame – ne daugiau 8 elektronų, trečiajame – ne daugiau 18 elektronų ir t.t. Visi elektronai, kurių pagrindinis ir šalutinis kvantiniai skaičiai  $n$  ir  $l$  sutampa, sudaro **elektronų posluoksnį**. Viena posluoksnyje gali būti ne daugiau  $2(2l+1)$  elektronų. Pvz.,  $1s$ ,  $2s$  ir kituose  $s$  posluoksniuose gali būti ne daugiau 2 elektronų, kiekviename  $p$  posluoksnyje – ne daugiau 6 elektronų ir t.t.

Elektronų sluoksniai žymimi raidėmis K, L, M ir t.t. Pvz., pirmasis elektronų sluoksnis ( $n = 1$ ), kuris yra arčiausiai branduolio, vadinamas **K sluoksniu**. Antrasis sluoksnis atitinka  $n = 2$  ir vadinamas **L sluoksniu**, ir t.t.

Vidiniai elektronų sluoksniai normaliomis sąlygomis yra pilnai užpildyti. Elektronų išlaisvinimas iš šių sluoksnių reikalauja daugiau energijos,

negu elektronų išlaisvinimas iš išorinio sluoksnio. Be to, pilnai užpildytų elektronų sluoksnių pilnutiniai orbitiniai ir sukininiai judesio kiekio momentai yra lygūs nuliui. Norint tuo įsitikinti, pakanka pastebėti, kad, pagal (1.17.8b) ir (1.18.3), pilnai užpildytame posluoksnyje kiekvienam elektronui su duotais kvantinais skaičiais  $m_l$  ir  $m_s$  galima surasti kitą elektroną, kurio atitinkami kvantiniai skaičiai yra priešingi, t.y., tiksliai kompensuoja pirmojo elektrono kvantinius skaičius  $m_l$  ir  $m_s$ . Taigi, pilnai užpildytame sluoksnyje visus elektronus galima "suporuoti" taip, kad kiekvienos tokios poros orbitinio ir sukininio judesio kiekio momentų projekcijos į koordinačių ašį  $Z$  būtų lygios nuliui. Kadangi šis rezultatas gautas, laisvai pasirinkus ašies  $Z$  kryptį, tai jis reiškia, kad pilnai užpildyto sluoksnio pilnutiniai orbitiniai ir sukininiai judesio kiekio momentai lygūs nuliui.

Dėl aukščiau išvardintų priežasčių normaliomis sąlygomis (t.y., kai vidiniai sluoksniai visą laiką lieka pilnai užpildyti) atomo fizikines ir chemines savybes lemia išorinio (dalinai užpildyto) sluoksnio elektronai. Pvz., šie elektronai dalyvauja, susidarant cheminiams ryšiams tarp atomų, jie lemia atomo judesio kiekio ir magnetinį momentus, spinduliuotės spektrą ir t.t. Išorinis sluoksnis vadinamas **valentiniu sluoksniu**, o jo elektronai vadinami **valentiniais elektronais**. Jeigu ir išoriniame sluoksnyje visi elektronai yra "suporuoti", tuomet cheminis elementas nesudaro cheminių junginių su jokiais kitais elementais, o jo molekulės yra vienuotės. Tokie cheminiai elementai – tai inertinės dujos (pvz., helis, argonas ir kt.).

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

Atomo pilnutinis judesio kiekio momentas – tai atomo elektronų orbitinių ir sukininių judesio kiekio momentų vektorinė suma. Ši suma gaunama, nuosekliai sudedant po du momentus ir taikant bendrąją momentų sudėties taisyklę (1.18.11). Tačiau atomo savybės priklauso nuo atskirų dėmenų sudėties tvarkos. Galima įsivaizduoti du būdus:

**I būdas.** Kiekvieno elektrono orbitinis judesio kiekio momentas  $\mathbf{L}$  vektoriškai sudedamas su jo sukiniu  $\mathbf{L}_s$ , sudarydami elektrono pilnutinį momentą  $\mathbf{L}_j$ :

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

Po to skirtingų elektronų pilnutiniai momentai  $\mathbf{L}_{jk}$  (čia  $k$  yra elektrono numeris) vektoriškai sudedami, sudarydami atomo pilnutinį judesio kiekio momentą  $\mathbf{L}_J$ :

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

Toks elektronų ryšys atome vadinamas **jj ryšiu**.

**II būdas.** Visų elektronų orbitinių judesio kiekio momentų vektoriai sudedami, sudarydami atomo orbitinį judesio kiekio momentą  $\mathbf{L}_L$ :

$$\mathbf{L}_L = \sum_k \mathbf{L}_k; \quad |\mathbf{L}_L| = \hbar \sqrt{L(L+1)}. \quad (1.22.1)$$

Visų elektronų sukininių judesio kiekio momentų vektoriai sudedami, sudarydami atomo sukininį judesio kiekio momentą  $\mathbf{L}_S$ :

$$\mathbf{L}_S = \sum_k \mathbf{L}_{sk} ; \quad |\mathbf{L}_S| = \hbar \sqrt{S(S+1)} . \quad (1.22.2)$$

Po to atomo orbitinis judesio kiekio momentas  $\mathbf{L}_L$  vektoriškai sudedamas su atomo sukininiu judesio kiekio momentu  $\mathbf{L}_S$ , sudarydami atomo pilnutinį judesio kiekio momentą:

$$\mathbf{L}_J = \mathbf{L}_L + \mathbf{L}_S ; \quad |\mathbf{L}_J| = \hbar \sqrt{J(J+1)} . \quad (1.22.3)$$

Toks elektronų ryšys atome vadinamas **LS ryšiu** arba **Raselo ir Saunderso ryšiu**.

Matavimų duomenys rodo, kad dažniausiai realizuojamas LS ryšys. Todėl atomų sandaros teorijoje šis ryšio tipas yra pagrindinis.

Kaip matome (1.22.1–3) formulėse, kvantiniai skaičiai, kurie nusako atomo orbitinį, sukininį ir pilnutinį judesio kiekio momentus, žymimi didžiosiomis raidėmis  $L$ ,  $S$  ir  $J$  (atitinkami elektrono kvantiniai skaičiai žymimi mažosiomis raidėmis  $l$ ,  $s$  ir  $j$ ). Kvantinių skaičių  $L$ ,  $S$  ir  $J$  vertės gaunamos pagal bendrąją judesio kiekio momentų sudėties taisyklę (1.18.11). Kadangi visų elektronų sukinio kvantiniai skaičiai yra vienodi ir lygūs  $1/2$ , tai lengviausia apskaičiuoti atomo sukinio kvantinį skaičių  $S$ . Jeigu atomas turi  $N$  elektronų, galimos skaičiaus  $S$  vertės yra

$$S = \sum_{k=1}^N \left( \pm \frac{1}{2} \right) = \begin{cases} 0, 1, \dots, \frac{1}{2}N-1, \frac{1}{2}N, & \text{jeigu } N \text{ lyginis;} \\ \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \dots, \frac{1}{2}N-1, \frac{1}{2}N, & \text{jeigu } N \text{ nelyginis.} \end{cases} \quad (1.22.4)$$

Didžiausia  $S$  vertė gaunama tuomet, kai visų elektronų sukiniai orientuoti ta pačia kryptimi, o vertė  $S=0$  gaunama tuomet, kai elektronų sukinų orientacija yra poromis priešinga<sup>1</sup> (aišku, kad tai įmanoma, tik kai elektronų skaičius  $N$  yra lyginis).

Pagal momentų sudėties taisyklę (1.18.11), būsenoje su apibrėžtais orbitiniu kvantiniu skaičiumi  $L$  ir sukinio kvantiniu skaičiumi  $S$  atomo pilnutinio judesio kiekio momento kvantinis skaičius  $J$  gali įgyti tik šias vertes:

$$J = |L - S|, |L - S| + 1, \dots, L + S - 1, L + S. \quad (1.22.5)$$

Kiekviena iš šių verčių atitinka apibrėžtą kampą tarp vektorių  $\mathbf{L}_L$  ir  $\mathbf{L}_S$ , taip pat, kaip vieno elektrono atveju (žr. 1.22 pav.). Tačiau daugiaelektronų atomų sukinys  $S$  gali būti didesnis už  $1/2$ , todėl vektorių  $\mathbf{L}_L$  ir  $\mathbf{L}_S$  galimų tarpusavio orientacijų skaičius gali būti didesnis už 2. Jeigu  $S \leq L$ , tuomet pagal (1.22.5)  $J$  gali įgyti  $2S + 1$  verčių, o jeigu  $S > L$ , tuomet  $J$  gali įgyti  $2L + 1$  verčių.

<sup>1</sup> Kai minima "vienoda" arba "priešinga" sukinų orientacija, turimos omenyje sukinų vektorių projekcijos į tam tikrą kryptį (pvz., į fiksuotą koordinačių ašį arba į atomo sukininio judesio kiekio momento vektoriaus kryptį). Iš tikrųjų atomo elektronų sukinų vektoriai negali būti visi lygiagretūs vienai tiesei (tai išplaukia iš bendrosios judesio kiekio momentų sudėties taisyklės (1.18.11)). Vienintelė išimtis – dviejų elektronų sistema, kurios  $S=0$ : šiuo atveju abiejų elektronų sukinų vektoriai yra priešingų krypčių.

Sukinio ir orbitos sąveika (žr. 1.18 poskyrį) daugiaelektroniuose atomuose pasireiškia tuo, kad būsenos su apibrėžtais  $L$  ir  $S$  energija priklauso nuo kampo tarp atomo orbitinio judesio kiekio momento  $\mathbf{L}_L$  ir atomo sukininio judesio kiekio momento  $\mathbf{L}_S$ . Todėl atomo energijos lygmuo, kuris atitinka duotąsias  $L$  ir  $S$  vertes, skyla į  $2S + 1$  artimų lygmenų (jeigu  $S \leq L$ ) arba į  $2L + 1$  artimų lygmenų (jeigu  $S > L$ ). Dėl šio energijos lygmenų skilimo atsiranda atomo spektro linijų multiptetinė struktūra, t.y., smulkioji struktūra (žr. 1.20 poskyrį). Kaip ir vieno elektrono atveju, esant duotiems kvantiniams skaičiams  $n$ ,  $L$  ir  $S$ , atomo energija auga, didėjant  $J$ .

Daugiaelektronio atomo energija palyginti stipriai priklauso nuo atomo sukinio  $S$ . Taip yra dėl elektronų pakaitinės sąveikos (žr. 1.23 poskyrį).

Iš (1.22.5) išplaukia, kad bendroju atveju, fiksuojant  $L$ , duotąją  $J$  vertę galima gauti, esant įvairioms  $S$  vėrtėms. Pvz., dviejų elektronų sistemoje (helio atomas)  $S = 1/2 \pm 1/2$ , t.y., 0 arba 1. Jeigu  $L = 1$ , tuomet, pvz., vertė  $J = 1$  gali būti gauta, ir kai  $S = 0$ , ir kai  $S = 1$ . Abu šie atvejai atitinka skirtingus energijos lygmenis. Todėl, nusakant atomo energijos lygmenį, nepakanka nurodyti kvantinius skaičius  $n$ ,  $L$  ir  $J$ , o reikia dar nurodyti ir atomo sukinio kvantinį skaičių  $S$ . Pagal tradiciją, nurodomas ne pats skaičius  $S$ , o **multiptetiškumas**  $2S + 1$ , kuris nusako, kiek yra galimų vektoriaus  $\mathbf{L}_S$  orientacijų atžvilgiu laisvai pasirinktos krypties erdvėje (be to, jeigu  $S \leq L$ , skaičius  $2S + 1$  nusako, kiek iš viso yra lygmenų su tais pačiais  $n$ ,  $L$  ir  $S$ , tačiau su skirtingais  $J$ ). Pilnasis atomo lygmens žymėjimas yra tokio pavidalo:  $n^{2S+1}L_J$ ; čia vietoj  $L$  verčių 0, 1, 2, ... naudojamos didžiosios raidės  $S$ ,  $P$ ,  $D$  ir t.t. Pvz., žymėjimas  $3^2P_{3/2}$  reiškia lygmenį, kuris atitinka  $n = 3$ ,  $S = 1/2$ ,  $L = 1$  ir  $J = 3/2$ .

Atrankos taisyklės, kurios nusako, kurie šuoliai tarp atomo energijos lygmenų yra leistiniai, o kurie draustiniai, yra tokios pačios, kaip vieno elektrono šuolių atrankos taisyklės (1.20.1a,b):

$$\Delta L = \pm 1; \quad (1.22.6a)$$

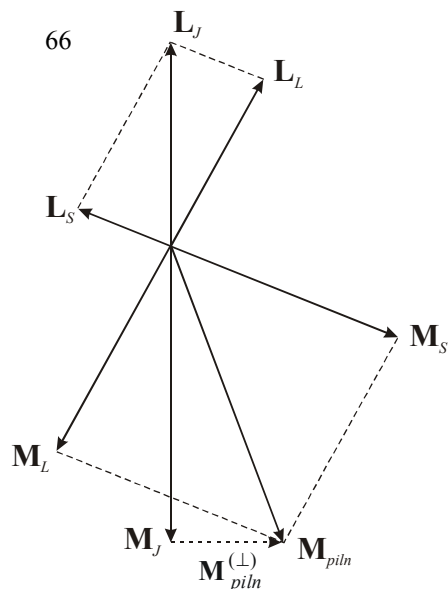
$$\Delta J = 0, \pm 1 \quad (\text{šuoliai tarp lygmenų su } J = 0 \text{ yra draustiniai}); \quad (1.22.6b)$$

$$\Delta S = 0. \quad (1.22.6c)$$

Atomas turi magnetinį momentą, kuris susijęs su atomo judesio kiekio momentu. Atomo pilnutinis magnetinis momentas  $\mathbf{M}_{piln}$  lygus atomo orbitinio magnetinio momento  $\mathbf{M}_L$  ir sukininio magnetinio momento  $\mathbf{M}_S$  vektorinei sumai:

$$\mathbf{M}_{piln} = \mathbf{M}_L + \mathbf{M}_S . \quad (1.22.7)$$

Kadangi orbitinis ir sukininis magnetiniai momentai susideda iš atskirų elektronų orbitinių ir sukininių magnetinių momentų, o šie susiję su atitinkamais judesio kiekio momentais pagal formules (1.8.3) ir (1.18.4), tai vektorius  $\mathbf{M}_L$  yra susijęs su vektoriumi  $\mathbf{L}_L$  pagal (1.8.3) formulę, o  $\mathbf{M}_S$  susijęs su  $\mathbf{L}_S$  pagal (1.18.4). Tačiau pilnutinio magnetinio momento (1.22.7) kryptis nėra priešinga pilnutinio judesio kiekio momento  $\mathbf{L}_J$  krypčiai, nes orbitinis ir sukininis giromagnetiniai santykiai yra skirtingi (orbitinis lygus 1, o sukininis lygus 2). Tai parodyta 1.26 pav. Kaip minėta 1.18 poskyryje,  $\mathbf{L}_L$  ir  $\mathbf{L}_S$



1.26 pav. Atomo orbitinio ir sukininio mechaninio ir magnetinio momentų vektorinė sudėtis

precesuoja apie  $L_J$ . Vadinasi,  $M_{piln}$  taip pat precesuoja apie  $L_J$ . Reiškiniuose, kurie priklauso nuo atomo pilnutinio judesio kiekio momento, pasireiškia tik vektoriaus  $M_{piln}$  vidurkis, kurio kryptis priešinga  $L_J$  kryptčiai, o absoliutinė vertė lygi  $M_{piln}$  projekcijai į  $L_J$  kryptį. Todėl toliau, kalbant apie atomo magnetinį momentą, bus turimas omenyje būtent šis vidurkis, o ne tikrasis pilnutinio magnetinio momento vektorius (1.22.7). Taigi, atomo magnetinis momentas  $M_J$  gaunamas, atėmus iš pilnutinio magnetinio momento vektoriaus  $M_{piln}$  vektorių  $M_{piln}^{(\perp)}$ , kuris nusako vektoriaus  $M_{piln}$  statmeną dedamąją (žr. 1.26 pav.). Taip apibrėžus atomo magnetinį momentą, jo absoliutinė vertė lygi

$$|M_J| = |M_L| \cos(L_L, L_J) + |M_S| \cos(L_S, L_J). \quad (1.22.8)$$

Kampų tarp  $L_L$  ir  $L_J$  bei tarp  $L_S$  ir  $L_J$  kosinusus galima išreikšti, pakėlus kvadratu sąryšius  $L_S = L_J - L_L$  ir  $L_L = L_J - L_S$ . Tuomet, atsižvelgę į absoliutinių verčių  $|L_L|$ ,  $|L_S|$  ir  $|L_J|$  išraiškas (1.22.1–3), randame

$$|M_J| = \mu_B g_J \sqrt{J(J+1)}; \quad g_J = 1 + \frac{J(J+1) + S(S+1) - L(L+1)}{2J(J+1)}. \quad (1.22.9)$$

Čia  $g_J$  yra atomo giromagnetinis santykis, kuris vadinamas **Landė daugikliu** arba **g daugikliu**.

Jeigu atomas turi pastovų magnetinį momentą (t.y., jeigu  $J > 0$ ), tuomet, patalpinus tą atomą į išorinį magnetinį lauką, atomo magnetinio momento  $M_J$  skirtingos orientacijos atžvilgiu išorinio lauko krypties nėra lygiavertės. Taip yra dėl to, kad atomas su magnetiniu momentu  $M_J$  išoriniame lauke, kurio indukcija  $B$ , įgyja papildomą potencinę energiją  $-(M_J, B) = -|M_J||B|\cos(M_J, B)$ . Kadangi ši energija priklauso nuo kampo tarp  $M_J$  ir  $B$ , kiekvienas energijos lygmuo skyla į tiek polygmenų, kiek yra galimų kampų tarp vektorių  $M_J$  ir  $B$ . Kaip žinome, atomo pilnutinio judesio kiekio momento ir atomo magnetinio momento projekcijas į laisvai pasirinktą kryptį  $Z$  nusako kvantiniai skaičiai  $m_J$ :

$$L_{Jz} = m_J \hbar, \quad (1.22.10)$$

$$M_{Jz} = -m_J g_J \mu_B, \quad (1.22.11)$$

$$m_J = -J, -J+1, \dots, J-1, J. \quad (1.22.12)$$

Šiuo atveju  $Z$  kryptį patogiau pasirinkti taip, kad ji sutaptų su  $B$  kryptimi, nes tuomet kiekvieną energijos lygmenį atitinka apibrėžta  $m_J$  vertė<sup>1</sup>. Taigi, išoriniame magnetiniame lauke kiekvienas atomo energijos lygmuo skyla į  $2J+1$  artimų lygmenų. Todėl magnetiniame lauke šalia aukščiau minėtosios spektro linijų smulkiosios struktūros, kurią sąlygoja sukinio ir orbitos sąveika, atsiranda papildomas spektro linijų skilimas. Šis atomo spektro linijų skilimas magnetiniame lauke vadinamas **Zėmano efektu**.

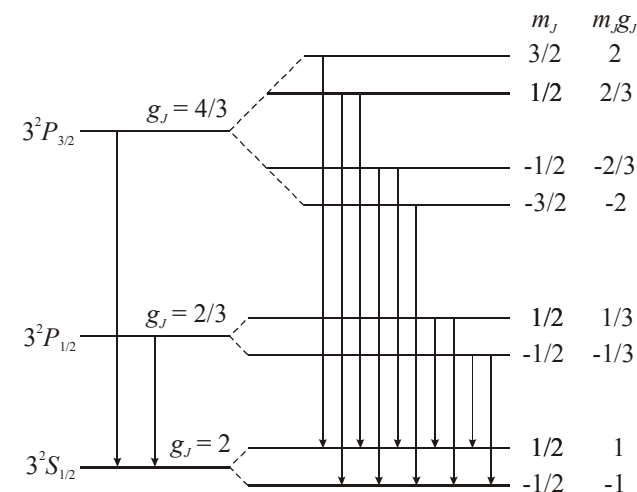
Norint aprašyti spektro linijų smulkiają struktūrą, esant Zėmano efektui, aukščiau minėtąsias atrankos taisykles (1.22.6a–c) reikia papildyti kvantinio skaičiaus  $m_J$  atrankos taisykle:

$$\Delta m_J = 0, \pm 1 \quad (1.22.13)$$

(šuo liai tarp lygmenų su  $m_J = 0$  ir vienodais  $J$  yra draustiniai).

1.27 pav. pavaizduoti natrio atomo lygmenų  $3^2S_{1/2}$ ,  $3^2P_{1/2}$  ir  $3^2P_{3/2}$  skilimas ir spektro linijų, kurios atitinka šuolius tarp  $3^2P$  ir  $3^2S$  būsenų, smulkioji struktūra, esant Zėmano efektui. Kaip matome, dėl Zėmano efekto dubletas virsta 10 artimų linijų.

Terminas "Zėmano efektas" naudojamas, aprašant atomo spektro linijų skilimą tik silpnuose magnetiniuose laukuose, kuriuose lieka galioti  $LS$  ryšys, t.y., kai atomo orbitinio ir sukininio magnetinių momentų sąveikos su išoriniu lauku energija yra mažesnė už sukinio ir orbitos sąveikos energiją.



1.27 pav. Natrio atomo energijos lygmenų skilimas magnetiniame lauke ir atitinkamas spektro linijų skilimas (Zėmano efektas)

<sup>1</sup> Jeigu  $Z$  ašis nebūtų lygiagreti vektoriui  $B$ , tuomet, matuojant  $L_{Jz}$ , kai atomas yra duotajame energijos lygmenyje, įvairiuose matavimuose būtų gaunamos visos įmanomos  $m_J$  vertės (1.22.12), o skirtingų  $m_J$  verčių pasikartojimo dažniai priklausytų nuo kampo tarp  $Z$  ašies ir magnetinio lauko krypties.

Priešingu atveju ryšys tarp sukininio ir orbitinio momentų nutraukiamas ir kiekvienas iš šių momentų pradeda savarankiškai sąveikauti su išoriniu lauku (t.y., precesuoja apie lauko kryptį).  $LS$  ryšio nutraukimas stipriame magnetiniame lauke vadinamas ***Pašeno ir Bako reiškiniu***.

### 1.23. Elektronų sąveika helio atome. Dalelių tapatingumas. Pakaitinė sąveika

Matematiškai aprašant elektronų tarpusavio sąveiką, Šrėdingerio lygtyje atsiranda dėmuo, kuris nusako elektronų tarpusavio sąveikos energiją. Pvz., Šrėdingerio lygtis helio atomui, kuris turi du elektronus, yra tokio pavidalo:

$$\nabla_1^2 \psi + \nabla_2^2 \psi + \frac{2m}{\hbar^2} (E - U(r_1) - U(r_2) - U(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)) \psi = 0; \quad (1.23.1)$$

čia  $\mathbf{r}_1$  ir  $\mathbf{r}_2$  yra abiejų elektronų spinduliai vektoriai,  $r_1$  ir  $r_2$  yra atstumai tarp kiekvieno elektrono ir branduolio,  $\nabla_1^2$  yra Laplaso operatorius, kuris veikia tik pirmojo elektrono koordinatės  $x_1, y_1$  ir  $z_1$ ,  $\nabla_2^2$  yra Laplaso operatorius, kuris veikia tik antrojo elektrono koordinatės  $x_2, y_2$  ir  $z_2$ ,  $U(r_1)$  yra pirmojo elektrono ir atomo branduolio sąveikos potencinė energija,  $U(r_2)$  yra antrojo elektrono ir atomo branduolio sąveikos potencinė energija, o  $U_{12}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$  yra elektronų tarpusavio sąveikos potencinė energija:

$$U_{12}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r_{12}}; \quad (1.23.2)$$

čia  $r_{12}$  yra atstumas tarp elektronų:  $r_{12} = |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|$ .

Šiuo atveju banginė funkcija  $\psi$  priklauso nuo abiejų elektronų spindulių vektorių:  $\psi = \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ . Šios banginės funkcijos statistinis aiškinimas yra šitoks: dydis  $|\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)|^2 dV_1 dV_2$  nusako tikimybę, kad pirmasis elektronas yra tūrio elemente  $dV_1$ , esančiame taško  $\mathbf{r}_1$  aplinkoje, o antrasis elektronas yra tūrio elemente  $dV_2$ , esančiame taško  $\mathbf{r}_2$  aplinkoje.

Jeigu (1.23.1) lygtyje nebūtų dėmens (1.23.2), tuomet, pritaikius kintamųjų atskyrimo metodą, ją būtų galima suskaidyti į dvi nepriklausomas (1.17.1) pavidalo lygtis, kurių viena priklausytų tik nuo pirmojo elektrono koordinatėms, o kita – tik nuo antrojo elektrono koordinatėms. Tai reiškia, kad (1.23.1) lygties visas tikrines funkcijas būtų galima išreikšti tokio pavidalo sandaugom:

$$\psi_a(\mathbf{r}_1) \psi_b(\mathbf{r}_2); \quad (1.23.3)$$

čia  $\psi_a$  yra vienelektronės Šrėdingerio lygties (1.17.1) tikrinė funkcija, atitinkanti erdvinio judėjimo būseną  $a$ , o  $\psi_b$  yra tos pačios Šrėdingerio lygties tikrinė funkcija, atitinkanti erdvinio judėjimo būseną  $b$  (žymėjimai " $a$ " ir " $b$ " atitinka du kvantinių skaičių trejetus (1.17.14)). Be to, pilnutinė atomo energija  $E$  tokiu atveju būtų lygi atitinkamų vienelektronų būsenų energijų  $E_a$  ir  $E_b$  sumai:

$$E = E_a + E_b. \quad (1.23.4)$$

Dėl elektronų tarpusavio sąveikos, kurią atspindi potencinės energijos dėmuo (1.23.2), toks kintamųjų atskyrimas tampa neįmanomas. Šrėdingerio lygtį (1.23.1) galima išspręsti tik apytiksliai, naudojant įvairius artutinius metodus. Vienas iš tokių metodų buvo minėtas 1.17 poskyryje, nagrinėjant šarminių metalų atomus. Jis remiasi tuo, kad valentinio elektrono sąveika su vidinių (užpildytųjų) sluoksnių elektronais yra apytiksliai tokia pati, kaip su neigiamu erdvinio krūviu, kuris sferiškai simetriškai pasiskirstęs aplink atomo branduolį. Todėl valentinių elektronų sąveiką su vidinių sluoksnių elektronais galima aprašyti, naudojant vienelektronę Šrėdingerio lygtį (1.17.1), tačiau su kitokia elektrono potencinės energijos priklausomybe nuo radialinės koordinatės  $U(r)$ . Dėl to elektrono energijos lygmenys pradeda priklausyti nuo šalutinio kvantinio skaičiaus  $l$ , tačiau Šrėdingerio lygties matematinė analizė iš esmės lieka tokia pati, kaip ir vandeniliškojo atomo atveju. Tokia analizė duoda pakankamai tikslius rezultatus, jeigu atomas turi tik vieną valentinį elektroną. Jeigu atomas turi daugiau negu vieną valentinį elektroną, tuomet reikia atsižvelgti ir į valentinių elektronų tarpusavio sąveiką. Tai yra žymiai sudėtingesnis uždavinys. Jį galima apytiksliai išspręsti, naudojant trikdžių teoriją, kuri remiasi prielaida, kad elektronų tarpusavio sąveikos energija (hamiltoniano "trikdys", kurį nusako (1.23.2) išraiška) yra maža, lyginant su "nesutrikdytos" sistemos potencine energija  $U(r_1) + U(r_2)$ .

Norint išsiaiškinti, kokią įtaką turi hamiltoniano trikdys (1.23.2) sistemos banginėms funkcijoms ir energijos lygmenims, visų pirma reikia iš (1.23.3) pavidalo sandaugų sudaryti nesutrikdytos sistemos bangines funkcijas. Tuo tikslu reikia pasinaudoti dalelių ***tapatingumo principu***, kuris teigia, kad, sukeitus vietomis bet kurias dvi vienasrūšes daleles (du elektronus, du protonus ir t.t.), sistemos būseną neturi pasikeisti. Kadangi fizikinę prasmę turi ne pati banginė funkcija, o jos absoliutinės vertės kvadratas, tai tapatingumo principas matematiškai išreiškiamas šitaip:

$$|\psi(1,2)|^2 = |\psi(2,1)|^2; \quad (1.23.5)$$

čia skaičiai 1 ir 2 žymėjime " $\psi(1,2)$ " reiškia pirmojo ir antrojo elektronų erdvinio koordinatėms trejetus ( $\mathbf{r}_1$  ir  $\mathbf{r}_2$ ). Sąlyga (1.23.5) reiškia, kad banginė funkcija turi tenkinti vieną iš šių lygybių

$$\psi(1,2) = \psi(2,1) \quad (1.23.6a)$$

arba

$$\psi(1,2) = -\psi(2,1). \quad (1.23.6b)$$

Funkcijos, kurios tenkina sąlygą (1.23.6a), vadinamos ***simetrinėmis funkcijomis***, o funkcijos, kurios tenkina sąlygą (1.23.6b), vadinamos ***antisimetrinėmis funkcijomis***. Jeigu erdvinio judėjimo būsenos  $a$  ir  $b$  yra vienodos ( $b = a$ ), tuomet (1.23.3) yra simetrinė funkcija  $\psi_a(1)\psi_a(2)$ , t.y., ji gali atlikti atomo banginės funkcijos vaidmenį. Jeigu būsenos  $a$  ir  $b$  yra skirtingos,



tuomet vienelektronių funkcijų sandauga (1.23.3) netenkinama tapatingumo reikalavimo:

$$\psi_a(1)\psi_b(2) \neq \pm \psi_a(2)\psi_b(1),$$

tačiau iš šių dviejų sandaugų galima sudaryti du tiesinius darinius, kurių vienas yra simetrinė funkcija:

$$\psi^{(+)}(1,2) = \psi_a(1)\psi_b(2) + \psi_a(2)\psi_b(1), \quad (1.23.7a)$$

o kitas – antisimetrinė funkcija:

$$\psi^{(-)}(1,2) = \psi_a(1)\psi_b(2) - \psi_a(2)\psi_b(1). \quad (1.23.7b)$$

Kadangi lygtis (1.23.1) yra tiesinė, tai bet kuris jos sprendinių tiesinis darinys taip pat tenkina tą lygtį. Vadinasi, funkcijos (1.23.7a,b) gali atlikti atomo banginių funkcijų vaidmenį. Abi šios funkcijos atitinka tą pačią sistemos energiją (1.23.4).

Pilnoji banginė funkcija gaunama, dauginant erdvinę funkciją (1.23.7a) arba (1.23.7b) iš sukininės funkcijos, kuri taip pat sudaroma iš atskirų elektronų sukininių funkcijų sandaugų  $S^{(+)}(1)S^{(+)}(2)$ ,  $S^{(+)}(2)S^{(+)}(1)$ ,  $S^{(+)}(1)S^{(-)}(2)$  ir t.t. Čia funkcija  $S^{(+)}$  aprašo elektrono būseną, kurioje jo sukinio magnetinis kvantinis skaičius lygus  $m_s = +1/2$ , o  $S^{(-)}$  atitinka elektrono būseną, kurioje  $m_s = -1/2$ . Skaičius "1" arba "2" skliaustuose šiuo atveju reiškia pirmojo arba antrojo elektrono sukininę koordinatę, kurios galimos vertės sutampa su kvantinio skaičiaus  $m_s$  galimomis vertėmis:  $+1/2$  ir  $-1/2$ . Funkcija  $S^{(+)}$  lygi vienetui, kai sukininė koordinatė lygi  $+1/2$ , ir nuliui, kai sukininė koordinatė lygi  $-1/2$ . Funkcija  $S^{(-)}$  lygi nuliui, kai sukininė koordinatė lygi  $+1/2$ , ir vienetui, kai sukininė koordinatė lygi  $-1/2$ . Kitais žodžiais, sukininė funkcija  $S$  – tai toks dviejų skaičių stulpelis, kurio pirmasis elementas atitinka  $m_s = +1/2$ , o antrasis elementas atitinka  $m_s = -1/2$ :

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

(t.p. žr. 1.19 poskyrį). Iš tapatingumo principo išplaukia, kad sukininė funkcija taip pat turi būti simetrinė arba antisimetrinė. Iš minėtųjų vienelektronių sukininių funkcijų sandaugų galima sudaryti tris simetrines sukinines funkcijas ir vieną antisimetrinę. Žemiau pateiktos šios funkcijos ir atitinkamos atomo sukinio magnetinio kvantinio skaičiaus  $m_s$  vertės, kurios lygios atskirų elektronų sukinio magnetinių kvantinių skaičių sumai:

a) simetrinės sukininės funkcijos

$$S^{(+)}(1)S^{(+)}(2) \quad (m_s = 1/2 + 1/2 = 1), \quad (1.23.8a)$$

$$S^{(+)}(1)S^{(-)}(2) + S^{(+)}(2)S^{(-)}(1) \quad (m_s = 1/2 - 1/2 = 0), \quad (1.23.8b)$$

$$S^{(-)}(1)S^{(-)}(2) \quad (m_s = -1/2 - 1/2 = -1); \quad (1.23.8c)$$

b) antisimetrinė sukininė funkcija

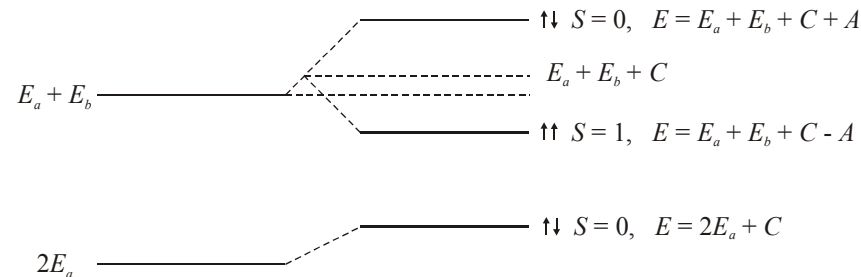
$$S^{(+)}(1)S^{(-)}(2) - S^{(+)}(2)S^{(-)}(1) \quad (m_s = 1/2 - 1/2 = 0). \quad (1.23.8d)$$

Simetrinės sukininės funkcijos (1.23.8a–c) atitinka vienodą abiejų elektronų sukinį orientaciją (t.y.,  $S = 1$ ), o antisimetrinė sukininė funkcija (1.23.8d) atitinka priešingą elektronų sukinį orientaciją ( $S = 0$ ).

Iš dviejų erdvinų funkcijų (1.23.7a,b) ir keturių sukininių funkcijų (1.23.8a–d) galima sudaryti aštuonias sandaugas. Visos jos tenkina dalelių tapatingumo principą, nes yra simetrinės arba antisimetrinės (dviejų simetrinių funkcijų sandauga yra simetrinė funkcija, dviejų antisimetrinių funkcijų sandauga yra simetrinė funkcija, o simetrinės ir antisimetrinės funkcijos sandauga yra antisimetrinė funkcija). Tačiau ne visos šios sandaugos tenkina Paulio draudimo principą (žr. 1.21 poskyrį), kuris teigia, kad nėra įmanomos atomo būsenos, kuriose kvantinių skaičių trejetai  $a$  ir  $b$  sutampa, o abiejų elektronų sukiniai orientuoti ta pačia kryptimi. Tai reiškia, kad pilnoji banginė funkcija turi būti tapachiai lygi nuliui, jeigu  $a = b$ , o  $S = 1$ . Be to, banginė funkcija neturi būti tapachiai lygi nuliui, kai  $S = 0$  (net jeigu  $a = b$ ). Nesunku įsitikinti, kad šiuos reikalavimus tenkina tik tos funkcijų (1.23.7a,b) ir (1.23.8a–d) sandaugos, kurios yra antisimetrinės. Taigi, atsižvelgus į dalelių tapatingumą, Paulio draudimo principą galima suformuluoti šitaip: *daugelio elektronų sistemos pilnoji banginė funkcija turi būti antisimetrinė bet kurių dviejų elektronų perstatos atžvilgiu*.

Vadinasi, dviejų nesąveikaujančių elektronų sistemos būsenose, kurios aprašomos simetrinėm sukininėm funkcijom (1.23.8a–c), erdvinė banginė funkcija yra antisimetrinė funkcija (1.23.7b), o būsenose, kurios aprašomos antisimetrine sukinine funkcija (1.23.8d), erdvinė banginė funkcija yra simetrinė funkcija (1.23.7a). Jeigu  $b = a$ , tuomet erdvinė banginė funkcija yra simetrinė funkcija  $\psi_a(1)\psi_a(2)$ , o sukininė – antisimetrinė funkcija (1.23.8d).

Sudarius nesutrikdytos sistemos bangines funkcijas (žr. aukščiau) ir žinant jos energiją (1.23.4) bei hamiltoniano trikdžio matematinę išraišką (1.23.2), pagal trikdžių teoriją galima apytiksliai įvertinti sistemos energijos lygmenis ir atitinkamas bangines funkcijas, esant trikdžiui. Trikdžių teorijos



1.28 pav. Helio atomo energijos lygmenų poslinkis ir skilimas, kuriuos sukelia elektronų tarpusavio sąveika. Šalia lygmenų parodyta elektronų sukinį tarpusavio orientacija.



pirmojo artinio rezultatai šiuo atveju yra tokie: esant trikdžiui (1.23.2), banginės funkcijos nepasikeičia, o energijos lygmenys pasislenka ir suskyla. Helio atomo energijos pokytį, kurį sukelia elektronų Kulono sąveika, galima išreikšti tokiu būdu:

$$a) \text{ jeigu } a = b, \quad \Delta E = C; \quad (1.23.9a)$$

$$b) \text{ jeigu } a \neq b, \quad \Delta E = C \pm A \quad (1.23.9b)$$

(žr. 1.28 pav.); čia

$$C = \int |\psi_a(1)|^2 \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{12}} |\psi_b(2)|^2 dV_1 dV_2, \quad (1.23.10)$$

$$A = \frac{1}{2} \int [\psi_a^*(1)\psi_b^*(2)\psi_a(2)\psi_b(1) + \psi_a(1)\psi_b(2)\psi_a^*(2)\psi_b^*(1)] \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{12}} dV_1 dV_2. \quad (1.23.11)$$

(1.23.9b) formulėje ženklas "+" atitinka priešingą sukinų orientaciją ( $S=0$ , simetrinė erdvinė banginė funkcija), o ženklas "-" atitinka vienodą sukinų orientaciją ( $S=1$ , antisimetrinė erdvinė banginė funkcija). Skaiciuojant integralus (1.23.10) ir (1.23.11), integruojama kiekvieno elektrono koordinatų atžvilgiu visoje erdvėje.

Išsiaiškinsime integralų  $C$  ir  $A$  fizikinę prasmę. Integralas  $C$  (1.23.10) yra dviejų erdvinų krūvių, kurių tankiai lygūs  $-e|\psi_a(\mathbf{r}_1)|^2$  ir  $-e|\psi_b(\mathbf{r}_2)|^2$ , Kulono sąveikos energija. Ši energija yra teigiama, nes elektronai stumia vienas kitą. Taigi, dėl elektronų sąveikos atomo energija padidėja dydžiu  $C$ . Dėmuo  $\pm A$ , kurį nusako integralas (1.23.11), nusako energijos lygmens skilimą į du lygmenis. Matematinio požiūriu, energijos pataisa  $\pm A$  atsirado dėl to, kad erdvinės banginės funkcijos buvo išreikštos vienelektronų būsenų sandaugų tiesiniais dariniais (1.23.7a) ir (1.23.7b), kurie, kai nėra sąveikos tarp elektronų, atitinka tą pačią sistemos energiją (1.23.4). Jeigu būtume laikę, kad banginė funkcija yra lygi vienai sandaugai (1.23.3), tuomet, nepriklausomai nuo elektronų sukinų tarpusavio orientacijos, galiotų (1.23.9a), t.y., energijos lygmenys tik pasislinktų, tačiau neskiltų. Banginės funkcijos išraiška simetriniu arba antisimetriniu pavidalu (1.23.7a) arba (1.23.7b) atspindi elektronų tapatingumo principą. Taigi, atomo lygmenų skilimas, kurį nusako dėmuo  $\pm A$  formulėje (1.23.9b), yra elektronų tapatingumo pasekmė. Tai yra grynai kvantinis efektas, kuris atspindi pakaitinę sąveiką tarp elektronų. **Pakaitinė sąveika** atsiranda dėl to, kad elektronai gali keistis vietomis dėl jų tapatingumo. Integralas  $A$  (1.23.11) vadinamas **pakaitiniu integralu**, o dėmuo  $\pm A$  energijos pataisoje (1.23.9b) vadinamas **mainų energija**. Jeigu pakaitinio integralo (1.23.11) pointegralinės funkcijos abiejuose dėmenyse sukeistume bet kuriuos du indeksus  $a$  ir  $b$  vietomis, gautume  $C$  (1.23.10). Tai leidžia šitaip aiškinti mainų energijos fizikinę prasmę: dėl galimybės keistis elektronais tarp būsenų  $a$  ir  $b$  kiekvienas elektronas tartum dalinai yra būsenos  $a$  ir dalinai būsenos  $b$ . Tos "skirtingos elektrono dalys" sąveikauja pagal Kulono dėsnį. Šios sąveikos energija ir yra mainų energija.

Priklausomai nuo pakaitinio integralo  $A$  ženklo ir elektronų sukinų tarpusavio orientacijos, mainų energija gali būti teigiama arba neigiama. Šiuo atveju pakaitinis integralas (1.23.11) yra teigiamas. Vadinasi, kai elektronų sukiniai orientuoti vienodai ( $S=1$ ), mainų energija yra neigiama, o kai sukiniai orientuoti priešingom kryptim ( $S=0$ ), mainų energija yra teigiama. Todėl tripletinės būsenos ( $2S+1=3$ ) helio atomo energija yra mažesnė, negu singletinės būsenos ( $2S+1=1$ ). T.y., *elektronų sukinų vienoda orientacija atome yra energiška naudingesnė už jų priešingą orientaciją*. Ši taisyklė galioja ne vien helio atomui, bet ir kitiems atomams. Taigi, jeigu vienoda elektronų sukinų orientacija neprieštarauja Paulio draudimo principui, tuomet atomo elektronų sukiniai orientuojasi vienoda kryptimi.

Pakaitinis integralas  $A$  yra tos pačios eilės, kaip elektronų Kulono stūmos energija  $C$  (žr. 1.28 pav.). Ši energija yra žymiai didesnė už elektronų magnetinių momentų sąveikos energiją, todėl elektronų sukinų vienodo orientavimosi negalima paaiškinti sukininių magnetinių momentų sąveika.

Lygmens  $E_a + E_b$  poslinkis  $C$  yra mažesnis už lygmens  $2E_a$  poslinkį  $C$  (žr. 1.28 pav.), nes skirtingų erdvinio judėjimo būsenų banginės funkcijos silpniau persikloja erdvėje (žr.  $C$  išraišką (1.23.10)).

Šiame poskyryje aprašytą metodiką galima pritaikyti, ir nagrinėjant dviejų nukleonų (t.y., dviejų protonų, dviejų neutronų arba protono ir neutrono) tarpusavio sąveiką. Pvz., tokiu būdu įrodoma, kad branduolio nukleonams energiška naudingiausia jungtis į protono ir neutrono poras su priešingai orientuotais sukiniais (žr. 1.25 poskyrį).

Sąvokos "pakaitinė sąveika" ir "mainų energija" naudojamos, ne tik aprašant elektronų arba nukleonų tarpusavio sąveiką, bet ir aprašant kovalentinį cheminį ryšį tarp atomų. Tačiau pastaruoju atveju šios sąvokos turi šiek tiek kitą prasmę. Kovalentinis cheminis ryšys atsiranda ne dėl elektronų keitimosi vietomis tarp skirtingų erdvinio judėjimo būsenų, o dėl elektrono "subendrinimo" tarp dviejų atomų. Pvz., todėl gali egzistuoti vandenilio molekulės  $H_2$  vienvaleintis jonas  $H_2^+$ . "Mainų energija" šiuo atveju reiškia subendrintojo elektrono energijos sumažėjimą, lyginant su jo energija izoliuotame atome (būtent todėl susidaro kovalentinis cheminis ryšys).

#### 1.24. Branduolio sandara. Izotopai

1911 m. Ernesto Rezerfordo tyrimai patvirtino branduolinį atomo sandaros modelį, pagal kurį visas teigiamas atomo krūvis ir beveik visa atomo masė yra sutelkti centriniame branduolyje. Jau iš Rezerfordo rezultatų buvo nustatyta, 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, t.y., branduolio matmenys yra  $10^{-13}$  cm eilės (atomo matmenys yra  $10^{-8}$  cm eilės). Aplink branduolį yra pasiskirstę neigiamo elektrinio krūvio elektronai. Kadangi atomas visumoje yra

neutralus, tai reiškia, kad branduolio elektrinis krūvis yra priešingas pilnutiniam elektronų krūviui. Pažymėjus elektronų skaičių neutraliajame atome raide  $Z$ , branduolio krūvis yra lygus  $+Ze$ , kur  $e = 1.6022 \cdot 10^{-19}$  C yra elementarusis krūvis (elektrono krūvio absoliutinė vertė). Skaičius  $Z$  vadinamas branduolio krūvio skaičiumi arba tiesiog branduolio krūviu.

Būtent atomo branduolio krūvis  $Z$  (t.y., atomo elektronų skaičius) lemia atomo chemines savybes. Todėl skirtingi atomai klasifikuojami pagal branduolio krūvio skaičių  $Z$ . Atomų rūšis su vienodu  $Z$  vadinama **cheminiu elementu**. Branduolio krūvio skaičius  $Z$  lygus elemento **atominiam numeriui** (t.y., elemento eilės numeriui periodinėje elementų sistemoje).

Nors visų atomų su vienodais numeriais  $Z$  cheminės savybės yra vienodos, tačiau jų branduolių fizikinės savybės gali būti labai įvairios. Taip yra todėl, kad atomo branduolys yra sudarytas iš dviejų rūšių dalelių – protonų ir neutronų. **Protonas** – tai vandenilio atomo branduolys, vadinasi, jo krūvio skaičius lygus 1. Protono masė yra lygi  $m_p = 1.672 \cdot 10^{-27}$  kg; ji yra maždaug 1840 kartų didesnė už elektrono masę ( $m_e = 9.11 \cdot 10^{-31}$  kg). **Neutronas** – tai krūvio neturinti branduolio dalelė. Neutrono masė yra nežymiai didesnė už protono masę:  $m_n = 1.675 \cdot 10^{-27}$  kg. Protonas ir neutronas bendrai vadinami **nukleonais**.

Taigi, norint pilnai apibūdinti branduolį, reikia nurodyti du skaičius – krūvio skaičių  $Z$  (kuris lygus protonų skaičiui branduolyje), ir pilnutinį nukleonų skaičių  $A$  (kuris lygus protonų ir neutronų skaičiaus branduolyje sumai). Pažymėjus neutronų skaičių raide  $N$ , galima užrašyti

$$A = Z + N. \quad (1.24.1)$$

Nukleonų skaičius branduolyje ( $A$ ) vadinamas branduolio **masės skaičiumi**, nes jis nusako branduolio masę.

Vieno elemento atomai gali turėti skirtingą masės skaičių  $A$ , t.y., skirtingą neutronų skaičių  $N$  branduolyje. Cheminio elemento atomų rūšys, kurios skiriasi tik masės skaičiumi  $A$ , yra vadinamos to elemento **izotopais**. Dauguma cheminių elementų turi kelis izotopus. Labai artimą žodžiui "izotopas" prasmę turi sąvoka **nuklidas** – cheminio elemento atomų rūšis su apibrėžtais masės ir krūvio skaičiais<sup>1</sup>. Nuklidai žymimi, nurodant krūvio ir masės skaičius šalia cheminio elemento žymėjimo; masės skaičius nurodomas viršuje, o krūvio skaičius – apačioje. Labiausiai paplitęs vandenilio izotopas yra  ${}^1_1\text{H}$  ( $Z = 1$  ir  $A = 1$ , t.y., neutronų skaičius lygus nuliui). Žinomi dar trys vandenilio izotopai:  ${}^2_1\text{H}$  (arba  ${}^2_1\text{D}$ ) – sunkusis vandenilis, arba deuteris,  ${}^3_1\text{H}$  (arba  ${}^3_1\text{T}$ ) – ultrasunkusis vandenilis, arba tritis, ir  ${}^4_2\text{He}$ . Dviejų chloro izotopų

<sup>1</sup> Terminas "izotopas" dažniausiai naudojamas žodžių junginyje "cheminio elemento izotopas", pvz., "urano izotopas", o žodis "nuklidas" naudojamas, kalbant apie tiksliai apibrėžtą atomų arba branduolių rūšį, pvz., sakoma "nuklidai uranas-235 ir plutonis-239 gali dalyvauti grandininėje reakcijoje".

pavyzdžiai yra  ${}^{35}_{17}\text{Cl}$  ( $Z = 17$ ,  $A = 35$ ) ir  ${}^{37}_{17}\text{Cl}$  ( $Z = 17$ ,  $A = 37$ ). Aišku, kad visiems vieno elemento izotopams krūvio skaičius  $Z$  yra vienodas, nes jis nusako duotąjį cheminį elementą. Todėl, skaitant nuklido žymėjimą, paminimas tik masės skaičius (pvz., sakoma "chloras-35" arba "chloras-37"). Dažnai naudojami sutrumpinti nuklidų žymėjimai, kuriuose nenurodyti krūvio skaičiai (pvz.,  ${}^{35}\text{Cl}$ ,  ${}^{37}\text{Cl}$ ).

Iš to, kas aukščiau pasakyta, išplaukia, kad vieno elemento skirtingų izotopų atomų branduoliai skiriasi neutronų skaičiumi. Šis skaičius lygus masės skaičiaus  $A$  ir krūvio skaičiaus  $Z$  skirtumui:

$$N = A - Z. \quad (1.24.2)$$

Vadinasi, minėtų chloro izotopų branduoliuose neutronų skaičius yra  $N = 35 - 17 = 18$  ir  $N = 37 - 17 = 20$ .

Nuklidai, kurie turi vienodą masės skaičių  $A$ , tačiau skirtingą krūvį  $Z$ , vadinami **izobarais**. Pvz., cezio izotopas  ${}^{137}_{55}\text{Cs}$  ir bario izotopas  ${}^{137}_{56}\text{Ba}$  yra izobarai. Nuklidai, kurie turi vienodą neutronų skaičių (1.24.2), vadinami **izotonais**. Pvz., chloro izotopas  ${}^{37}_{17}\text{Cl}$  ir kalio izotopas  ${}^{39}_{19}\text{K}$  yra izotonai.

Protonas ir neutronais turi vidinį judesio kiekio momentą – **sukinį**, kuris yra tokio paties didumo, kaip ir elektrono sukiny, t.y.,  $1/2$  (žr. 1.18 poskyrį). Todėl branduolys turi sukininį judesio kiekio momentą, kuris lygus nukleonų sukininių vektorių sumai. Be to, protonas ir neutronas (taigi, ir branduolys) turi sukininį magnetinį momentą. Protono sukininis magnetinis momentas lygus  $p_{mp} = 2.793 \mu_N$ , kur  $\mu_N$  yra **branduolinis magnetonas**:

$$\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_p} \quad (1.24.3)$$

(plg. su Boro magnetonu (1.8.4)). Protono sukininio magnetinio momento kryptis sutampa su jo sukininio judesio kiekio momento kryptimi. Neutrono sukininis magnetinis momentas lygus  $p_{mn} = -1.913 \mu_N$ . Čia minuso ženklas reiškia, kad neutrono sukinio ir magnetinio momento vektorių kryptys yra priešingos. Branduolio pilnutinį magnetinį momentą sąlygoja nukleonų sukininiai magnetiniai momentai bei jų "orbitiniai" magnetiniai momentai, kurie susiję su nukleonų judėjimu branduolio viduje. Branduolio pilnutinio magnetinio momento išraiška yra analogiška atomo pilnutinio magnetinio momento išraiškai (1.22.9):

$$p_{mbr} = \mu_N g \sqrt{J(J+1)}; \quad (1.24.4)$$

čia  $J$  yra branduolio pilnutinio judesio kiekio kvantinis skaičius, o  $g$  yra branduolio giromagnetinis santykis. Įvairiems branduoliams  $g = (-4 \div 6)$ .

Branduolio magnetinio momento sąveika su atomo elektronų magnetiniais momentais sukelia atomų spinduliuotės spektrų smulkiosios struktūros linijų (žr. 1.20 ir 1.22 poskyrius) papildomą skilimą, kuris vadinamas **hipersmulkiaja struktūra**. Šis papildomas skilimas yra labai

silpnas, ir, norint jį pastebėti, reikia naudoti ypač aukštos skiriamosios gebos spektrinius prietaisus.

Laisvos būsenos neutronas yra nestabilus – jo vidutinė gyvavimo trukmė yra maždaug 17 min. Laisvos būsenos neutronas savaime virsta protonu ir elektronu, ir kartu atsiranda dar viena neutralioji dalelė – **antineutrinas**. Naudojant aukščiau apibrėžtus žymėjimus, šį virsmą galima užrašyti tokiu būdu:

$${}_0^1n \rightarrow {}_1^1p + {}_{-1}^0e + \tilde{\nu}; \quad (1.24.5)$$

Čia  ${}_0^1n$ ,  ${}_1^1p$ ,  ${}_{-1}^0e$  ir  $\tilde{\nu}$  žymi, atitinkamai, neutroną, protoną, elektroną ir antineutrino (elektrono ir neutrino masės skaičiai lygūs nuliui). Šis virsmas įmanomas ne tik laisvojo neutrono atveju, bet ir tuo atveju, kai neutronas yra kai kurių izotopų branduolių sudėtyje (žr. 1.28 poskyrį).

Laisvos būsenos protonas yra stabilus. Tačiau kai kurių izotopų branduoliuose protonas gali savaime virsti neutronu ir pozitronu (žr. 1.28 poskyrį). **Pozitronas** – tai elektrono antidalelė, kurios krūvis yra priešingas elektrono krūviui, o masė yra tokia pati, kaip elektrono (pozitroną galima vadinti “teigiamu elektronu”). Be to, protono virsmo metu atsiranda dar viena neutrali dalelė – **neutrinas**. Taigi, šį protono virsmą galima užrašyti tokiu būdu:

$${}_1^1p \rightarrow {}_0^1n + {}_{+1}^0e + \nu; \quad (1.24.6)$$

čia  ${}_{+1}^0e$  yra pozitrono žymėjimas, o  $\nu$  yra neutrino žymėjimas. Neutrinas ir antineutrinas neturi rimties masės ir skrieja šviesos greičiu.

Pirmuoju artinumu branduolį galima laikyti rutuliu, kurio spindulys lygus

$$r = r_0 A^{1/3}; \quad r_0 = (1.2 \div 1.3) \cdot 10^{-15} \text{ m}. \quad (1.24.7)$$

Iš šios lygybės išplaukia, kad branduolio masės skaičius  $A$  yra proporcingas branduolio tūriui. Vadinasi, visų branduolių medžiagos tankis yra apytiksliai vienodas ir lygus

$$\rho_{br} \approx 10^{17} \text{ kg/m}^3. \quad (1.24.8)$$

### 1.25. Branduolio masė ir ryšio energija

Tarp nukleonų branduolyje veikia ypatingos branduolinės traukos jėgos (žr. 1.27 poskyrį). Nesigilinant į šių jėgų prigimtį, apie nukleonų tarpusavio ryšio stiprumą galima spręsti pagal branduolio ryšio energijos vertę. Branduolio **ryšio energija**  $\Delta E$  – tai darbas, kurį reikia atlikti, norint suskaldyti branduolį į atskirus nukleonus. Iš energijos tvermės dėsnio išplaukia, kad, susidarant iš atskirų nukleonų branduoliui, turi išsiskirti toks pats energijos kiekis, kokį reikia išseikvoti tam, kad jis būtų suskaldytas į nukleonus.

Tiksčiai išmatavus branduolių mases, nustatyta, kad branduolio masė  $M$  visuomet keliom dešimtosiom procento mažesnė už jį sudarančių nukleonų masių sumą. T.y., branduolio masę galima išreikšti šitaip:

$$M = Zm_p + (A - Z)m_n - \Delta m; \quad (1.25.1)$$

čia  $m_p$  yra protono masė,  $m_n$  yra neutrono masė, o  $\Delta m$  yra branduolio **masės defektas**. Šį branduolio masės sumažėjimą galima paaiškinti ryšio energijos išsiskyrimu, susidarant branduoliui. Pagal energijos ir masės sąryšį ( $E = mc^2$ ), jeigu, susidarant branduoliui, išsiskiria ryšio energija  $\Delta E$ , tuomet branduolio masė sumažėja dydžiu

$$\Delta m = \frac{\Delta E}{c^2}. \quad (1.25.2)$$

Vadinasi, dydį  $\Delta m$  galima panaudoti ryšio energijos  $\Delta E$  matavimui:

$$\Delta E = \Delta mc^2. \quad (1.25.3)$$

Išreiškę  $\Delta m$  iš (1.25.1) ir įrašę į (1.25.3), gauname

$$\Delta E = [Zm_p + (A - Z)m_n - M]c^2. \quad (1.25.4)$$

Praktikoje branduolio ryšio energija dažniausiai matuojama megaelektronvoltais (MeV):

$$1 \text{ MeV} = 10^6 \text{ eV} = 10^6 \cdot 1.6022 \cdot 10^{-19} \text{ J} = 1.6022 \cdot 10^{-13} \text{ J},$$

o elementariųjų dalelių masė dažniausiai išreiškiama **atominiais masės vienetais** (a.m.v.):

$$1 \text{ a.m.v.} = 1.66057 \cdot 10^{-27} \text{ kg}.$$

Tikslios protono, neutrono ir elektrono masės atominiais masės vienetais yra:

$$m_p = 1.007285 \text{ a.m.v.}, \quad m_n = 1.008665 \text{ a.m.v.}, \quad m_e = 5.48578 \cdot 10^{-4} \text{ a.m.v.}$$

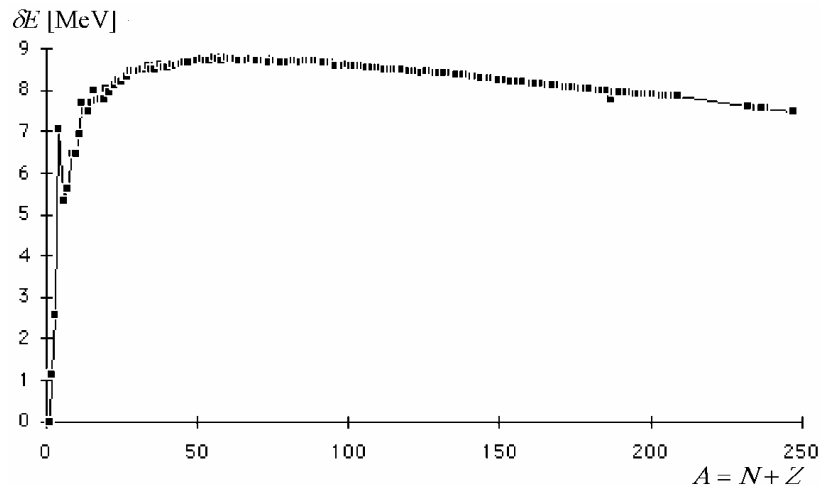
Žemiau (1.25.4) formulė užrašyta tokiu pavidalu, kad ji iš karto duotų ryšio energijos vertę megaelektronvoltais, kai protono, neutrono ir branduolio masės išreikštos atominiais masės vienetais:

$$\Delta E = 931.1 \cdot [Zm_p + (A - Z)m_n - M]. \quad (1.25.5)$$

Kita sąvoka, kuri turi didelę praktinę vertę, yra **savitoji ryšio energija**  $\delta E$  – ryšio energija, tenkanti vienam nukleonui:

$$\delta E = \frac{\Delta E}{A} = \frac{931.1}{A} \cdot [Zm_p + (A - Z)m_n - M]. \quad (1.25.6)$$

1.29 pav. matome, kad skirtingų branduolių savitosios ryšio energijos šiek tiek skiriasi. Didėjant branduolio masės skaičiui  $A$ , savitoji ryšio energija iš pradžių išauga, o po to pradeda lėtai mažėti. Didžiausią savitąją ryšio energiją turi periodinės sistemos viduryje esančių elementų atomų branduoliai (šių elementų atominiai numeriai yra  $Z = 40 \div 60$ ). Šie branduoliai yra stabiliausi. Be to, akivaizdu, kad vidutiniams ir sunkiesiems branduoliams ( $A > 20$ ) savitoji ryšio energija kinta palyginti siaurose ribose:  $\delta E = 7.5 - 9 \text{ MeV}$ . Šis apytikslis  $\delta E$  pastovumas rodo, kad traukos jėgai, kuri veikia tarp nukleonų, yra būdinga **soties** savybė: kiekvienas branduolio nukleonas sąveikauja tik su gretimais



1.29 pav. Savitosios ryšio energijos prieklausa nuo branduolio masės skaičiaus

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.

Staigus  $\Delta E$  sumažėjimas, mažėjant  $A$  (žr. 1.29 pav.) aiškinamas tuo, kad branduolio paviršiuje esantys nukleonai nepilnai išotina savo ryšius. Aišku, kad šis savitosios ryšio energijos sumažėjimas yra tuo ryškesnis, kuo didesnė nukleonų dalis yra branduolio paviršiuje, t.y., kuo lengvesnis branduolys. Tačiau greitas  $\Delta E$  mažėjimas, mažėjant  $A$ , yra tik apytikslis. Mažų  $A$  srityje yra keli maksimumai, kurie siekia 7–8 MeV. Šie maksimumai atitinka branduolius, kurių masės skaičius  $A$  dalijasi iš 4, o krūvio skaičius  $Z$  yra lyginis:  ${}^4_2\text{He}$ ,  ${}^8_4\text{Be}$ ,  ${}^{12}_6\text{Be}$ ,  ${}^{16}_8\text{O}$ . Tai rodo, kad nukleonams branduolyje "energiškai naudinga" jungtis į ketvertus "2 protonai + 2 neutronai" (tokia keturių nukleonų sistema – tai helio branduolys).

Didėjant  $A$ , savitoji ryšio energija  $\Delta E$  lėtai mažėja (žr. 1.29 pav.) ir sunkiausiajam gamtiniam elementui  ${}^{238}_{92}\text{U}$  pasiekia 7.5 MeV. Šis nežymus sumažėjimas aiškinamas protonų elektrostatiiniu atostūmiu. Kadangi Kulono jėga yra toliasiakė, kiekvienas protonas sąveikauja su visais likusiais branduolio protonais, todėl šios sąveikos energija proporcinga protonų porų skaičiui  $Z(Z-1)/2 \approx Z^2/2$ , t.y., ji auga greičiau, negu protonų traukos energija, kuri proporcinga  $Z$ . Protonų kuloninio atostūmio energija yra teigiama, t.y., ji didina branduolio masę ir mažina masės defektą  $\Delta m$  bei ryšio energiją  $\Delta E$ .

Atsižvelgus į visus veiksnius, nuo kurių priklauso branduolio ryšio energija  $\Delta E$ , gaunama **Vaiczekerio formulė**:

$$\Delta E = \alpha A - \beta A^{2/3} - \gamma Z^2 A^{-1/3} - \eta(N-Z)^2 A^{-1} + C; \quad (1.25.7)$$

Koeficientų vertės šioje formulėje buvo nustatytos empiriškai:

$$\alpha = 15.75 \text{ MeV}, \quad \beta = 17.8 \text{ MeV}, \quad \gamma = 0.71 \text{ MeV}, \quad \eta = 23.7 \text{ MeV},$$

$$C = \begin{cases} +\Delta & \text{jeigu } Z \text{ ir } N \text{ lyginiai;} \\ 0 & \text{jeigu } A \text{ nelyginis;} \\ -\Delta & \text{jeigu } Z \text{ ir } N \text{ nelyginiai;} \end{cases} \quad \Delta \approx \frac{12}{A^{1/3}} \text{ MeV}$$

Žemiau paaiškintas kiekvieno Vaiczekerio formulės (1.25.7) dėmens vaidmuo:

- 1) Pirmasis dėmuo nusako išotintų ryšių indėlį į ryšio energiją. Šis dėmuo proporcingas nukleonų skaičiui  $A$ , nes laikoma, kad kiekvienas nukleonas yra apsuptas vienodo skaičiaus kaimyninių nukleonų.
- 2) Antrasis dėmuo atspindi paviršinius efektus: branduolio paviršiuje esantys nukleonai nepilnai išotina savo ryšius, todėl iš energijos, kurią numato pirmasis dėmuo, reikia atimti energiją, kuri atitinka "laisvuosius" ryšius. Ši pataisa yra proporcinga branduolio paviršiuje esančių nukleonų skaičiui. Šis skaičius yra proporcingas branduolio paviršiaus plotui. Laikant, kad branduolys yra rutulio formos, jo paviršiaus plotas yra proporcingas  $A^{2/3}$ .
- 3) Trečiasis dėmuo nusako protonų kuloninio atostūmio energiją. Ši energija yra proporcinga protonų porų skaičiui  $Z(Z-1)/2 \approx Z^2/2$  ir atvirkščiai proporcinga vidutiniam atstumui tarp dviejų protonų vienoje poroje (žr. (1.23.2)), t.y., branduolio matmenims. Pagal (1.24.7), branduolio matmenys yra proporcingi  $A^{1/3}$ .
- 4) Ketvirtasis dėmuo nusako ryšio energijos sumažėjimą dėl to, kad protonų skaičius  $Z$  nėra lygus neutronų skaičiui  $N$ . Mat, branduolyje nukleonams energiškai naudingiausia jungtis į protono ir neutrono poras<sup>1</sup>. Todėl branduoliai, kuriuose protonų skaičius lygus neutronų skaičiui, esant

<sup>1</sup> Tai galima įrodyti, pasinaudojus tuo, kad nukleonai yra fermionai, t.y., jiems galioja Paulio draudimo principas (žr. 1.21 poskyrį), ir tuo, kad visi nukleonai yra tapatūs branduolinės traukos atžvilgiu. Todėl dviejų nukleonų sistemos analizė yra panaši į dviejų elektronų sistemos analizę (žr. 1.23 poskyrį), tačiau vietoj Kulono sąveikos energijos (1.23.2) reikia naudoti branduolinės traukos energiją. Šios analizės pagrindinis rezultatas yra toks: jeigu Paulio principas leidžia abi nukleonų sukinių tarpusavio orientacijas, tuomet dėl nukleonų sąveikos energijos lygmenys pasislenka ir skyla į du polygmenis, o jeigu ne, tuomet lygmenys tik pasislenka. Todėl protono ir neutrono sistemos pagrindinis energijos lygmuo skyla, o dviejų protonų arba dviejų neutronų sistemos pagrindinis lygmuo neskyla (kaip 1.28 pav.). Vadinasi, protono ir neutrono sistemos pagrindinis energijos lygmuo atsiduria žemiau už dviejų neutronų arba dviejų protonų sistemos pagrindinį lygmenį. Be to, kadangi šiuo atveju sąveika yra traukos pobūdžio, lygmenų poslinkis yra neigiamas, o skilusio lygmens apatinį polygmenį atitinka priešinga nukleonų sukinių orientacija (kitai, negu elektronų sistemoje: plg. su 1.28 pav.). Taigi, nukleonams branduolyje energiškai naudingiausia jungtis į protono ir neutrono poras su priešingais sukiniais.

vienodoms kitoms sąlygoms, yra stabilesni (turi didesnę savitąją ryšio energiją), negu branduoliai su skirtingais protonų ir neutronų skaičiais. Ryšio energijos sumažėjimas, kuris atsiranda dėl to, kad  $Z \neq N$ , yra vadinamas *simetrijos energija*.

- 5) Penktasis dėmuo atspindi tą faktą, kad nukleonams branduolyje energiškai naudinga jungtis į grupes "2 protonai + 2 neutronai", t.y., į  ${}^4_2\text{He}$  branduolius. Todėl stabiliausi yra branduoliai, kuriuose abu skaičiai  $Z$  ir  $N$  yra lyginiai (tuomet visi nukleonai yra susijungę į  ${}^4_2\text{He}$  branduolius), mažiau stabilūs yra branduoliai, kuriuose  $A$  nelyginis (tuomet iki optimalios konfigūracijos trūksta vieno nukleono arba vienas nukleonas yra atliekamas) ir dar mažiau stabilūs yra branduoliai, kuriuose abu skaičiai  $Z$  ir  $N$  yra nelyginiai (tuomet iki optimalios konfigūracijos trūksta vieno protono ir vieno neutrono).

Savitosios ryšio energijos mažėjimas, augant  $A$  didelių  $A$  srityje reiškia, kad, susidarant branduoliui iš didelio skaičiaus nukleonų ( $A \geq 200$ ), išsiskiria mažesnė energija, negu tuo atveju, kai tas pats nukleonų skaičius susijungia į du mažesnius vienodos masės branduolius. Kitais žodžiais, dviejų branduolių, turinčių po  $A/2$  nukleonų, pilnutinė rimties energija yra mažesnė už vieno branduolio, turinčio  $A$  nukleonų, rimties energiją, jeigu  $A \geq 200$ . Todėl, kai toks branduolys skyla į dvi apytiksliai vienodų masių  $M_1$  ir  $M_2$  skeveldras, išsiskiria energija, kuri lygi pradinio branduolio rimties energijos  $Mc^2$  ir skeveldrų rimties energijos  $(M_1 + M_2)c^2$  skirtumui. Išsiskyrusi energija virsta skeveldrų kinetine energija, kuri, savo ruožtu, virsta aplinkinės medžiagos vidine energija (t.y., šiluma). Tuo paremtas branduolinių reaktorių veikimas: šiuose reaktoriuose energija gaunama, skylančiam izotopų  ${}^{235}\text{U}$ ,  ${}^{233}\text{U}$  arba  ${}^{239}\text{Pu}$  branduoliams (žr. 1.36 poskyrį).

Savitosios ryšio energijos mažėjimas, mažėjant  $A$  mažų  $A$  srityje reiškia, kad, susidarant branduoliui iš mažo skaičiaus nukleonų ( $A < 70$ ), išsiskiria didesnė energija, negu tuo atveju, kai tas pats skaičius nukleonų susijungia į du mažesnius branduolius. Kitais žodžiais, dviejų branduolių, turinčių po  $A_1$  ir  $A_2$  nukleonų, pilnutinė rimties energija yra didesnė už vieno branduolio, turinčio  $A = A_1 + A_2$  nukleonų, rimties energiją, jeigu  $A < 70$ . Todėl, kai du lengvi branduoliai susijungia į vieną branduolį, išsiskiria energija, kuri lygi pradinių branduolių pilnutinės rimties energijos rimties  $(M_1 + M_2)c^2$  ir galutinio branduolio rimties energijos  $Mc^2$  skirtumui. Pvz., susijungiant  ${}^2_1\text{H}$  ir  ${}^3_1\text{H}$  branduoliams, susidaro  ${}^4_2\text{He}$  branduolys ir neutronas, ir šios branduolinės reakcijos metu išsiskiria energija. Kaip ir branduolių skilimo atveju, išsiskyrusi energija virsta susidariusių dalelių kinetine energija, kuri, savo ruožtu, virsta šiluma. Vadinasi, lengvųjų branduolių sintezę, kaip ir sunkiųjų branduolių skilimą, galima panaudoti energijai gaminti. Ateityje šiuo principu veiks termobranduoliniai reaktoriai.

## 1.26. Branduolio modeliai

Pagrindinės kliūtys, trukdančios sukurti nuoseklią branduolio teoriją, yra šios:

- iki šiol nežinomas jėgų, kurios veikia tarp branduolio nukleonų, tikslus pavidalas;
- kvantinės lygtys, kurios aprašo didelio sąveikaujančių dalelių skaičiaus judėjimą branduolyje, yra labai sudėtingos;
- dėl stiprios sąveikos tarp kaimyninių nukleonų reikia atsižvelgti į jų kolektyvinį judėjimą; tačiau nukleonų branduolyje nėra tiek daug, kad branduolį būtų galima laikyti ištisine makroskopine aplinka.

Todėl atomo branduolio teorija remiasi modeliais, kuriuose branduolys pakeičiamas kažkokia modeline fizikine sistema, kuri pakankamai gerai atspindi kai kurias branduolio savybes ir kartu sudaro sąlygas pakankamai paprastam tų savybių matematiniam aprašymui.

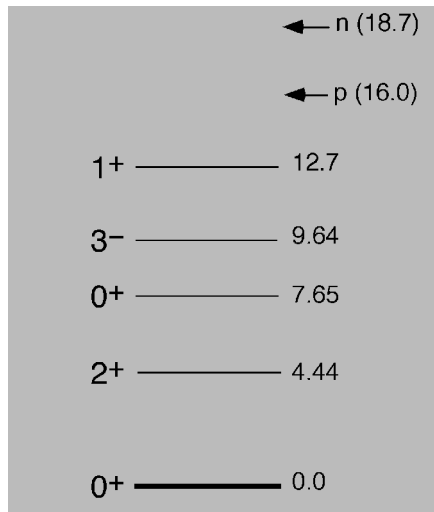
Branduolio fizikoje naudojamus branduolio modelius galima suskirstyti į dvi grupes: viendaleliai modeliai ir kolektyviniai modeliai. Viendaleliuose modeliuose laikoma, kad kiekvienas branduolio nukleonas juda efektyviame visų kitų nukleonų jėgų lauke. Kolektyviniai modeliai aprašo didelio skaičiaus tarpusavyje susijusių dalelių judėjimą.

Labiausiai paplitęs viendalelis branduolio modelis yra sluoksninis modelis, o labiausiai paplitęs kolektyvinis modelis yra lašelinis modelis. Žemiau šie du modeliai yra trumpai aprašyti.

### 1.26.1. Sluoksninis branduolio modelis

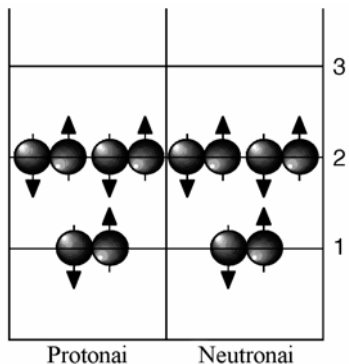
**Sluoksninis branduolio modelis** remiasi prielaida, kad tikrąsias jėgas, kurios veikia tarp nukleonų, galima pakeisti viena centrine jėga, kuri yra bendra visiems nukleonams. Šis jėgų laukas vadinamas *suderintiniu lauku*. Toks pavadinimas atspindi tą faktą, kad kiekvieną nukleoną veikianti jėga priklauso nuo visų kitų nukleonų būsenos, o ši būsena, savo ruožtu, priklauso nuo jėgų, kurios veikia tarp nukleonų. Apibrėžus suderintinį lauką, daugelio dalelių judėjimo uždavinys virsta vienos dalelės judėjimo uždaviniu.

Išsprendę Šrėdingerio lygtį (1.17.1) arba Dirako lygtį (1.19.9) branduolio suderintiniame lauke judančiam nukleonui (taip pat, kaip ir išsprendę tą lygtį atomo suderintiniame lauke judančiam elektronui), gauname nukleono kvantines būsenas, kurių kiekviena apibūdinama tais pačiais kvantiniais skaičiais, kaip ir elektrono būsena atome (žr. (1.18.15)), 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. Taigi, branduolio energija (kaip ir atomo energija), gali būti lygi tik atskiroms



1.30 pav.  $^{12}_6\text{C}$  branduolio žemiausieji energijos lygmenys bei protono ir neutrono išlaisvinimo energijos (MeV)

(žr. 1.18 ir 1.22 poskyrius) 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 skirtumas yra  $\sim 10$  MeV. Palyginimui – iš vandeniliškojo atomo energijos lygmenų išraiškos (1.17.12) išplaukia, kad atstumas tarp bet kurių dviejų vandenilio atomo energijos lygmenų visuomet yra mažesnis už 13.6 eV. Taigi, atstumai tarp branduolio energijos lygmenų yra žymiai (3–6 eilėms) didesni už atstumus tarp atomo energijos lygmenų. Taip yra dėl to, kad nukleonų tarpusavio traukos jėga yra žymiai stipresnė už Kulono jėgą, kuri



1.31 pav.  $^{12}_6\text{C}$  branduolio sluoksnių užpildą pagrindinėje būsenoje

vertėms – energijos lygmenims (žr. 1.13 ir 1.14 poskyrius). Pvz., 1.30 pav. pavaizduoti pagrindinis ir 4 sužadintieji  $^{12}_6\text{C}$  branduolio lygmenys bei neutrono ir protono išlaisvinimo energijos. Šioje diagramoje energijos vertės (MeV) yra užrašytos kiekvieno lygmens dešinėje (žymėjimai, kurie užrašyti lygmenų kairėje, paaiškinti 1.32 poskyryje).

Pagal sluoksninį branduolio modelį, branduolio nukleonų erdvinio judėjimo kvantinės būsenos ("orbitos") sudaro sluoksnius, taip pat, kaip ir atomo elektronų orbitos (žr. 1.21 poskyrį). Kiekvieną sluoksnį atitinka grupė artimų energijos lygmenų. Skiriami **protoniniai sluoksniai** ir **neutroniniai sluoksniai**.

Kaip žinome, atomo elektroninių sluoksnių sudaro visi energijos lygmenys su vienodu  $n$ . Tačiau branduolio lygmenų skilimas dėl sukinio ir orbitos sąveikos (žr. 1.18 ir 1.22 poskyrius) 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 skirtumas yra  $\sim 10$  MeV. Palyginimui – iš vandeniliškojo atomo energijos lygmenų išraiškos (1.17.12) išplaukia, kad atstumas tarp bet kurių dviejų vandenilio atomo energijos lygmenų visuomet yra mažesnis už 13.6 eV. Taigi, atstumai tarp branduolio energijos lygmenų yra žymiai (3–6 eilėms) didesni už atstumus tarp atomo energijos lygmenų. Taip yra dėl to, kad nukleonų tarpusavio traukos jėga yra žymiai stipresnė už Kulono jėgą, kuri veikia tarp atomo elektrono ir branduolio (šios jėgos yra palygintos 1.27 poskyryje).

Kadangi nukleonai, kaip ir elektronai, yra fermionai (t.y., turi pusinį sukinį), tai jiems galioja Paulio draudimo principas (žr. 1.21 poskyrį), kuris teigia, kad branduolyje negali būti du vienodos kvantinės būsenos nukleonai (t.y., du nukleonai, kurių visi keturi kvantiniai skaičiai sutampa). Todėl branduolio nukleonai iš eilės užpildo sluoksnius, pradedant nuo žemiausios energijos sluoksnio. 1.31 pav. iliustruoja  $^{12}_6\text{C}$

branduolio sluoksnių užpildą pagrindinėje (mažiausios energijos) būsenoje. Rodyklės ant atskirų nukleonų nurodo jų sukinį tarpusavio orientaciją (t.y., sukininį magnetinį kvantinį skaičių  $m_s$ ).

Jeigu branduolio protoniniai arba neutroniniai sluoksniai yra pilnai užpildyti (t.y., jeigu nukleonai yra užėmę visas tą sluoksnį sudarančias kvantines būsenas), tuomet branduolys yra ypač stabilus. Ši išvada yra analogiška atomo su pilnai užpildytais elektroniniais sluoksniais atvejui: toks atomas taip yra neįprastai stabilus, t.y., chemiškai inertiškas (žr. 1.21 poskyrį). Matavimai rodo, kad iš tikrųjų, kai neutronų arba protonų skaičius tampa lygus vienam iš skaičių

$$2, 8, 20, 28, 50, 82, 126, \quad (1.26.1)$$

tuomet žymiai (maždaug 2 kartus) padidėja vidutinis nukleono atskyrimo darbas, o branduolio ryšio energija išauga maždaug 1%. Šie skaičiai vadinami **magiškaisiais skaičiais**, o tokie branduoliai vadinami **magiškaisiais branduoliais**. Branduoliai, kuriuose magiškieji yra ir protonų, ir neutronų skaičiai, vadinami **dvigubai magiškaisiais**. Žinomi penki tokie branduoliai:

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

Matome, kad branduolio magiškieji skaičiai (1.26.1) skiriasi nuo elektronų skaičiaus atomuose su pilnai užpildytais sluoksniais (pagal idealiąją atomo sluoksnių užpildymo schemą (1.21.1))

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

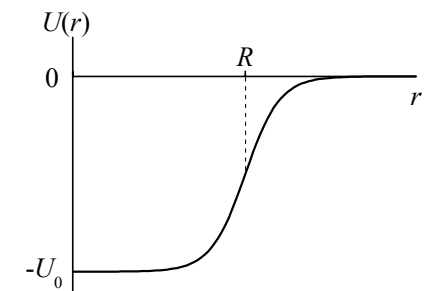
ir nuo elektronų skaičiaus inertinių dujų atomuose:

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

Taip yra todėl, kad nukleono potencinės energijos  $U$  branduolio suderintiniame lauke priklauso nuo atstumo  $r$  iki jėgos centro yra kitokio pavidalo, negu atome. Atome  $U$  yra apytiksliai proporcinga  $1/r$  (pvz., žr. (1.14.4) ir 1.14 pav.), o vidutiniuose ir sunkiuosiuose branduoliuose

$$U(r) \approx -\frac{U_0}{1 + \exp\left(\frac{r-R}{a}\right)} + U_{kul}(r); \quad (1.26.2)$$

čia pirmasis dėmuo atspindi nukleonų tarpusavio trauką, o antrasis dėmuo ( $U_{kul}(r)$ ) atspindi Kulono atostūmį (neutrono atveju  $U_{kul}(r) \equiv 0$ ). Kadangi antrasis dėmuo yra žymiai mažesnis už pirmąjį, tai  $U(r)$  pavidalą lemia pirmasis dėmuo, kuris pavaizduotas 1.32 pav. Dydis  $R$  yra apytiksliai lygus branduolio spinduliui ( $10^{-15}$  m eilės). Matome, kad potencinė energija yra apytiksliai pastovi branduolio viduje, o prie branduolio ribos greitai sumažėja



1.32 pav. Nukleono potencinės energijos branduolio suderintiniame lauke pavidalas

iki nulio. Turint omenyje, kad jėga yra lygi potencinės energijos išvestinei su minuso ženklu, tą patį teiginį galima suformuluoti šitaip: kai nukleonas yra branduolio viduje, jį veikianti jėga apytiksliai lygi nuliui, o kai nukleonas yra ant branduolio paviršiaus, egzistuoja stipri jėga, kuri traukia nukleoną gilyn į branduolį.

Sluoksninis branduolio modelis sėkmingai paaiškina magiškųjų skaičių vertes (1.26.1). Be to, šis modelis teisingai numato daugumos branduolių pagrindinių bei sužadintųjų būsenų sukinius bei magnetinių momentų vertes.

#### 1.26.2. Lašelinis branduolio modelis

**Lašelinis branduolio modelis** grindžiamas kai kuriais panašumais tarp branduolio ir įelektrinto skysčio lašo. Šie panašumai atsiranda dėl to, kad jėga, kuri sieja branduolio nukleonus vieną su kitu, yra artieskė (žr. 1.25 poskyrį), kaip ir skysčio molekulių sąveikos jėga. Be to, iš (1.24.7) išplaukia, kad skirtingų branduolių medžiagos tankis yra vienodas, t.y., branduolio medžiaga, kaip ir skystis, yra praktiškai nespūdi.

Naudojant lašelinį branduolio modelį, galima paprastai paaiškinti pirmuosius tris Vaiczerio formulės (1.25.7) dėmenis. Pvz., antrasis dėmuo, kuris proporcingas branduolio paviršiaus plotui, gali būti laikomas paviršiaus laisvąja energija, kuri atsiranda dėl paviršiaus įtempio (**paviršiaus įtempis** – tai darbas, kurį reikia atlikti, padidinant paviršiaus plotą vienetu, o **paviršiaus laisvoji energija** – tai paviršiaus įtempio ir paviršiaus ploto sandauga).

Lašelinis modelis naudojamas branduolinių reakcijų teorijoje bei aiškinant sunkiųjų branduolių dalijimosi procesą (žr. 1.36 poskyrį). Įsiskverbus nukleonui į branduolį, dėl branduolio medžiagos mažo spūdumo prasideda nukleonų kolektyvinis judėjimas, kurio metu branduolys deformuojasi, nekintant jo tūriui. Protonų kuloninio atostūmio jėga stengiasi padidinti deformaciją, o paviršiaus įtempio jėga stengiasi grąžinti branduoliui pradinę formą. Kuo didesnis branduolio krūvio skaičius  $Z$ , tuo didesnis Kulono jėgų vaidmuo ir tuo lengviau branduoliui dalintis.

#### 1.27. Pagrindinės sąveikos

Visus procesus, kuriuose dalyvauja subatominės dalelės, sąlygoja sąveika tarp jų. Šiuo metu žinomos keturių tipų sąveikos. Šios sąveikos, silpnėjimo tvarka, yra:

- 1) stiprioji sąveika,
- 2) elektromagnetinė sąveika,
- 3) silpnoji sąveika,
- 4) gravitacinė sąveika.

Visos žinomos gamtos jėgos – tai šių keturių sąveikų pasekmė. Gravitacinė ir elektromagnetinė sąveikos buvo atrastos anksčiausiai, nes jų poveikis

įprastiems objektams yra akivaizdus kasdieniniame gyvenime. Stiprioji ir silpnoji sąveikos buvo atrastos XX a., pradėjus tirti atomo branduolio sandarą.

**Stiprioji sąveika** išlaiko branduolio nukleonus (protonus ir neutronus) vieną greta kito, nors tarp protonų veikia Kulono atostūmio jėga. Šiuo metu manoma, kad nukleonai yra sudaryti iš fundamentaliųjų dalelių – **kvarkų**, tarp kurių taip pat veikia stipriosios sąveikos jėga<sup>1</sup>. Visos stipriojoje sąveikoje dalyvaujančios dalelės yra palyginti sunkios (jų masė yra bent 2 eilėms didesnė už elektrono masę).

**Elektromagnetinė sąveika** sąlygoja vienodo ženklo elektrinių krūvių tarpusavio atostūmį ir skirtingo ženklo krūvių tarpusavio trauką; ši sąveika lemia atomų chemines savybes ir šviesos savybes. Elektromagnetinėje sąveikoje dalyvauja tik elektringosios dalelės ir fotonai.

**Silpnoji sąveika** pasireiškia  $\beta$  skilimo metu (žr. 1.30 poskyrį) ir lengviausių subatominių dalelių (elektronų, neutrino ir mioonų) tarpusavio reakcijose. Šioje sąveikoje dalyvauja visos dalelės, išskyrus fotonus.

**Gravitacinė sąveika** pasireiškia tarp bet kurių dviejų masyvių objektų, ji lemia planetų orbitas aplink Saulę. Gravitacinė sąveika yra žymiai silpnesnė už kitas tris sąveikas; ji praktiškai nepasireiškia tarp elementariųjų dalelių.

Bet kurią jėgą, kuri veikia tarp dviejų objektų, galima aprašyti kaip apsikeitimą tam tikromis dalelėmis, kurios atlieka sąveikos tarpininko vaidmenį. Tos dalelės perduoda vieno objekto judėjimo kiekį ir energiją kitam objektui. Paprasta analogija: du žmonės mēto vienas kitam kamuolį. Judėjimo kiekis, kurį vienas žmogus suteikė kamuoliui, yra perduodamas kitam žmogui, kai tas pagauna kamuolį.

1.1 lentelėje yra palyginti pagrindinių sąveikų stiprumai. Be to, šioje lentelėje pateikti kiekvienos sąveikos tarpininkų pavadinimai ir atstumai, kuriuose pasireiškia kiekviena sąveika.

**1.1 lentelė.** Pagrindinių sąveikų stiprumo ir veikimo atstumo palyginimas

Sąveika	Sąveikos tarpininkas	Stiprumas	Atstumas
Stiprioji	gliuonas	$\sim 1$	$\sim 10^{-15}$ m
Elektromagnetinė	fotonas	$1 / 137$	$\infty$
Silpnoji	tarpinis bozonas	$\sim 10^{-10}$	$\sim 10^{-18}$ m
Gravitacinė	gravitonas	$\sim 10^{-38}$	$\infty$

<sup>1</sup> Kvarkai yra šešių rūšių, tačiau nukleonai sudaryti tik iš dviejų rūšių kvarkų, kurie žymimi raidėmis  $u$  (nuo angliško žodžio "up" – "viršutinis") ir  $d$  (nuo angliško žodžio "down" – "apatinis").  $u$  kvarko elektrinis krūvis lygus  $+2/3e$ , o  $d$  kvarko elektrinis krūvis lygus  $-1/3e$ ; čia  $e$  yra elementarusis krūvis (elektrono krūvio absoliutinė vertė). Kvarko sukinytis lygus  $1/2$ . Protonas sudarytas iš dviejų  $u$  kvarkų ir vieno  $d$  kvarko, o neutronas sudarytas iš vieno  $u$  kvarko ir dviejų  $d$  kvarkų.

1.1 lentelėje matome, kad, nors stiprioji sąveika yra stipriausia, tačiau ji veikia tik labai mažuose atstumuose: iki  $10^{-15}$  m. Šis atstumas yra branduolio matmenų eilės. Atstumas, kuriame veikia silpnoji sąveika, yra dar 3 eilėm mažesnis. Todėl stiprioji ir silpnoji sąveikos nepasireiškia makroskopiniame pasaulyje. Sakoma, kad stiprioji ir silpnoji sąveikos yra **artisieklės** sąveikos. Tuo tarpu elektromagnetinė ir gravitacinė sąveikos veikia be galo dideliuose atstumuose. T.y., gravitacinė trauka veikia tarp visų kūnų Visatoje, nepriklausomai nuo to, kaip toli vienas nuo kito jie yra, o elektromagnetinė banga (pvz., tolimos žvaigždės šviesa) sklinda vakuumu neslopdoma, kol jos nesugeria koks nors kūnas. Todėl sakoma, kad elektromagnetinė ir gravitacinė jėgos yra **toliasieklės** jėgos.

1.1 lentelėje sąveikų stiprumai išreikšti santykiniais vienetais. Elektromagnetinės sąveikos stiprumas čia laikomas lygiu smulkiosios struktūros konstantai (1.19.25), kuri nusako elektrono sukinio ir orbitos sąveiką (žr. 1.18 ir 1.19 poskyrius). Kiekvienos iš šių keturių jėgų tikroji vertė (išreikšta niutonais) bei sąveikos tikroji potencinė energija (išreikšta džauliais) priklauso nuo konkrečios sistemos. Pvz., palyginsime kiekvienos iš keturių pagrindinių sąveikų potencines energijas dviejų protonų sistemoje. Protonai sąveikauja visomis keturiomis pagrindinėmis jėgomis. Elektromagnetinės ir gravitacinės sąveikų potencinių energijų absoliutines vertes šiuo atveju galima išreikšti taip:

$$|U| = \frac{C}{r};$$

čia  $C = e^2/(4\pi\epsilon_0)$  elektromagnetinės sąveikos atveju ir  $C = Gm_p^2$  gravitacinės sąveikos atveju ( $G$  yra gravitacinė konstanta,  $m_p$  yra protono masė).  $r$  yra atstumas tarp dalelių. Kadangi stiprioji ir silpnoji sąveikos yra artisieklės, tai potencinės energijos išraiškoje atsiranda eksponentinis daugiklis:

$$|U| = \frac{C}{r} e^{-r/R};$$

čia  $R$  yra būdingasis sąveikos atstumas. Dėl šio eksponentinio daugiklio sąveikos stiprumas labai sumažėja, kai  $r > R$ . Pastarosiose dviejose formulėse matome, kad sąveikos stiprumą nusako koeficientas  $C$ , kuris vadinamas **ryšio konstanta**. Ryšio konstantos bei būdingieji sąveikos atstumai  $R$  kiekvienai iš keturių pagrindinių jėgų, kurios veikia tarp dviejų protonų, yra pateikti 1.2 lentelėje.

**1.2 lentelė.** Pagrindinių sąveikų ryšio konstantų ir veikimo atstumo palyginimas dviejų protonų sistemoje

Sąveika	Ryšio konstanta (J·m)	Atstumas (m)
Stiprioji	$2.5 \cdot 10^{-27}$	$1.5 \cdot 10^{-15}$
Elektromagnetinė	$2.31 \cdot 10^{-28}$	$\infty$
Silpnoji	$3.22 \cdot 10^{-31}$	$2 \cdot 10^{-18}$
Gravitacinė	$1.87 \cdot 10^{-64}$	$\infty$

## 1.28. Radioaktyvumas. Pagrindinis radioaktyviojo skilimo dėsnis

**Radioaktyvumas** – tai yra kai kurių izotopų branduolių savaiminis virtimas kitų izotopų branduoliais. Tokio virsmo ypatybė yra ta, kad jo metu vietoj vieno (*pirminio*) branduolio atsiranda dvi arba daugiau *antrinių* dalelių (pvz., kito izotopo branduolys ir elektronas, arba du lengvesni branduoliai). Todėl toks branduolio virsmas vadinamas branduolio **skilimu**. Kad branduolys galėtų skilti savaime, toks procesas turi būti "energiškai naudingas", t.y., dalelių, kurios atsiranda, skylančiam branduoliui, pilnutinė rimties energija turi būti mažesnė už pradinio branduolio rimties energiją. Ši sąlyga tenkinama tik kai kuriems izotopams ir tik tam tikriems antrinių dalelių deriniams. Pvz., kaip minėta 1.25 poskyryje, ši sąlyga tenkinama tuo atveju, kai sunkusis branduolys ( $A > 200$ ) skyla į dvi apytiksliai vienodos masės skeveldras. Skilimo metu šis pirminio branduolio ir antrinių dalelių rimties energijų skirtumas išsiskiria antrinių dalelių kinetinės energijos pavidalu. Kuo lengvesnė dalelė, tuo didesnė jai tenkanti išsiskyrusios energijos dalis (tai išplaukia iš energijos ir impulso tvermės dėsnių). Pvz., kai branduolys skyla į kitą branduolį ir elektroną, beveik visa išsiskyrusi energija virsta to elektrono kinetine energija. Dalelių, kurios atsiranda, skylančiam branduoliui, kinetinė energija yra palyginti aukšta – žymiai didesnė už energijas, kurios pasireiškia atominiuose reiškiniuose. Pvz., elektrono, kuris atsirado, skilus branduoliui, kinetinė energija yra 4 – 6 eilėm didesnė už vidutinę orbitinio elektrono kinetinę energiją vandenilio atome. Būtent ši ypač aukšta išlekiančių dalelių energija ir yra tas požymis, pagal kurį praktikoje lengviausia aptikti branduolio skilimą. Aukšta dalelių energija sąlygoja didelę jų skvarbą ir sugebėjimą jonizuoti medžiagos atomus. Jonizavimo reiškinys panaudojamas šių dalelių detektavimui (žr. 8.1 poskyrį).

Pagal spinduliuojamų dalelių rūšį skiriami  $\alpha$  skilimas,  $\beta$  skilimas ir savaiminis dalijimasis.  **$\alpha$  dalelės** – tai aukštos energijos  ${}^4\text{He}$  branduoliai, o  **$\beta$  dalelės** – tai aukštos energijos elektronai arba pozitronai. Savaiminis dalijimasis stebimas tik pačiuose sunkiausiuose branduoliuose ir pasireiškia branduolio skilimu į dvi artimų masių skeveldras. Kiekvieną iš šių trijų skilimo procesų dažnai lydi elektromagnetinė  **$\gamma$  spinduliuotė**. Šios spinduliuotės kvantai (aukštos energijos fotonai) vadinami  **$\gamma$  kvantais**.

$\alpha$  ir  $\beta$  skilimas bei  $\gamma$  spinduliuotė smulkiai aprašyti sekančiuose poskyriuose. Todėl likusioji šio poskyrio dalis skirta kai kuriems bendriems teiginiams, kurie galioja bet kurios rūšies skilimui.

Branduolio skilimo metu galioja keli tvermės dėsniai. Tai reiškia, kad egzistuoja keli fizikiniai dydžiai, kurių vertės po skilimo (įskaičius visus skilimo produktus) turi būti lygios vertėms prieš skilimą. Šie tvarieji dydžiai yra:



- 1) pilnutinė energija (įskaitant rimties energiją, t.y., masę);
- 2) elektros krūvis;
- 3) judesio kiekis;
- 4) judesio kiekio momentas;
- 5) nukleonų skaičius;
- 6) **leptonų skaičius**<sup>1</sup>, t.y., elektronų, neutrinų ir jų antidalelių – pozitronų ir antineutrinų – skaičių suma, kurioje kiekvieną elektroną arba neutriną atitinka +1, o kiekvieną antidalelę atitinka -1.

Kadangi, vykstant radioaktyviajam skilimui, radioaktyvieji izotopai virsta kitų elementų izotopais, tai pradinio radioaktyviojo elemento atomų skaičius bandinyje visą laiką mažėja. Jeigu tam tikru laiko momentu  $t$  radioaktyviojo elemento atomų skaičius bandinyje buvo  $N$ , tai dėl  $\alpha$  arba  $\beta$  skilimo arba dėl savaiminio dalijimosi per laiką  $dt$  tokių atomų skaičius sumažės dydžiu  $-dN$ . Dėsnį, kuris nusako šį atomų skaičiaus pokytį, 1902 m. atrado anglų fizikai Ernestas Rezerfordas ir Frederikas Sodis. Jie nustatė, kad

$$\frac{dN}{dt} = -\lambda N; \quad (1.28.1)$$

čia  $N$  – radioaktyviojo izotopo branduolių skaičius, o  $\lambda$  – radioaktyviojo izotopo **skilimo konstanta**, rodanti, kuri branduolių dalis suskyla per 1 s. Diferencialinės lygties (1.28.1) sprendinys yra eksponentinė laiko funkcija:

$$N(t) = N_0 e^{-\lambda t}, \quad (1.28.2)$$

kur  $N_0$  yra radioaktyviojo izotopo branduolių skaičius pradinio laiko momentu  $t = 0$ . Vadinasi, radioaktyviojo izotopo atomų skaičius bandinyje mažėja laike pagal eksponentinį dėsnį. (1.28.1) arba (1.28.2) lygybė išreiškia **pagrindinį radioaktyviojo skilimo dėsnį**. Šį dėsnį galima užrašyti šitaip:

$$N(t) = N_0 \cdot 2^{-t/T_{1/2}}; \quad (1.28.3)$$

čia  $T_{1/2}$  yra radioaktyviojo izotopo fizikinė pusėjimo trukmė:

$$T_{1/2} = \frac{\ln 2}{\lambda}. \quad (1.28.4)$$

Radioaktyviojo izotopo **fizikinė pusėjimo trukmė** arba **skilimo pusamžis** – tai laikas, per kurį to izotopo branduolių skaičius sumažėja 2 kartus dėl radioaktyviojo skilimo<sup>2</sup>. Vadinasi, per laiką  $2T_{1/2}$  branduolių skaičius sumažėja

<sup>1</sup> Leptonais vadinamos dalelės, kurios dalyvauja tik elektromagnetinėje, silpnosios ir gravitacinėje sąveikoje (žr. 1.27 poskyrį) ir kurių sukinytis lygus 1/2. Šiuo metu žinomuose fizikiniuose procesuose dažniausiai pasireiškiantys leptonai yra elektronas ir neutrinas bei jų antidalelės.

<sup>2</sup> Dar naudojama biologinės pusėjimo trukmės sąvoka, kuri reiškia laiką, per kurį radioaktyviojo izotopo kiekis dėl biologinių procesų (biologinio išskyrimo) organe, audinyje arba organizme sumažėja du kartus.

$2^2 = 4$  kartus, per laiką  $3T_{1/2} - 2^3 = 8$  kartus ir t.t. Vietoj pusėjimo trukmės kartais vartojama branduolio vidutinės gyvavimo trukmės sąvoka. **Vidutinė gyvavimo trukmė** – tai vidutinis laikas iki branduolio skilimo momento. Vidutinė gyvavimo trukmė  $\tau$  lygi laikui, per kurį nestabiliųjų branduolių skaičius sumažėja  $e = 2.7183$  karto, t.y.,  $\tau = 1/\lambda$ .

Reikia turėti omenyje, kad neįmanoma iš anksto numatyti, kada ir kuris būtent atomas skils, o galima kalbėti tik apie kiekvieno atomo skilimo per apibrėžtą laiką tikimybę. Skilimo konstanta  $\lambda$  – tai nestabiliojo branduolio skilimo tikimybė per vieną sekundę.

Iš trijų aukščiau minėtų dydžių, kurie apibūdina skilimo spartą ( $\lambda$ ,  $\tau$  ir  $T_{1/2}$ ), praktikoje dažniausiai naudojama pusėjimo trukmė  $T_{1/2}$ . Radioaktyviųjų izotopų pusėjimo trukmės yra labai įvairios ir svyruoja nuo sekundės dalių iki daugelio milijardų metų. Pvz., urano izotopo  $^{238}_{92}\text{U}$  pusėjimo trukmė lygi  $4.5 \cdot 10^9$  m., radžio izotopo  $^{226}_{88}\text{Ra}$  – 1590 m., radono  $^{222}_{86}\text{Rn}$  – 3.8 dienos, polonio  $^{214}_{84}\text{Po}$  –  $1.6 \cdot 10^{-4}$  s.

Vidutinis per sekundę skylančių branduolių skaičius

$$I = -\frac{dN}{dt} \quad (1.28.5)$$

vadinamas radioaktyviojo šaltinio **aktyvumu**. Aktyvumas dažniausiai išreiškiamas vidutiniu skilimų skaičiumi per sekundę (skil./s). Šis aktyvumo vienetas vadinamas **bekereliu (Bq)**: 1 Bq = 1 skil./s. Tačiau naudojami ir kitokie vienetai: **kiuris (Ci)**; 1 Ci =  $3.7 \cdot 10^{10}$  skil./s) ir **rezerfordas (Rd)**; 1 Rd =  $10^6$  skil./s).

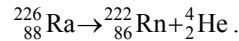
Kadangi skilimo metu branduolys išspinduliuoja vieną arba daugiau dalelių, tai radioaktyviojo bandinio aktyvumą galima įvertinti, matuojant tų dalelių vidutinį skaičių per laiko vienetą.

### 1.29. $\alpha$ skilimas

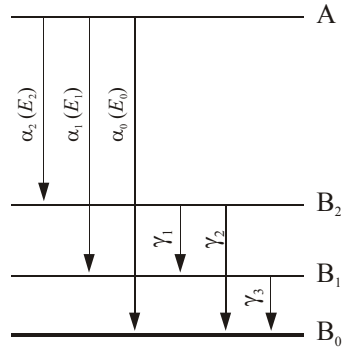
**$\alpha$  skilimas** yra toks atomo branduolio virsmas, kurio metu branduolys savaime išspinduliuoja  $\alpha$  dalelę ( $^4_2\text{He}$  branduolį). Kai branduolys išspinduliuoja  $\alpha$  dalelę, branduolio krūvio skaičius sumažėja 2 vienetais (nes  $\alpha$  dalelės krūvio skaičius lygus 2), o masės skaičius sumažėja 4 vienetais (nes  $\alpha$  dalelės masės skaičius lygus 4). T.y., jeigu pradinį izotopą pažymėsime  $^A_Z\text{X}$ , tuomet po  $\alpha$  dalelės išspinduliavimo susidaro izotopas  $^{A-4}_{Z-2}\text{Y}$ . Vadinasi,  $\alpha$  skilimo metu susidaro naujas elementas, kuris periodinėje elementų sistemoje yra pasislinkęs dviem vietom į pradžią spinduliuojančio elemento atžvilgiu.  $\alpha$  skilimo schema yra šitokia:



Pvz., radis  $^{226}_{88}\text{Ra}$ , išspinduliuavęs  $\alpha$  dalelę, virsta radonu:



$\alpha$  dalelių, kurias spinduliuoja  $\alpha$  radioaktyvus izotopas, greičiai nežymiai skiriasi. Be to,  $\alpha$  dalelės greitis gali būti lygus tik kelioms tiksliai apibrėžtomis vertėms. Taip yra todėl, kad, pagal energijos tvermės dėsnį,  $\alpha$



1.33 pav.  $\alpha$  dalelių greičių pasiskirstymo aiškinimas

$\alpha$  dalelės energija yra lygi pirminio ir antrinio branduolių energijų skirtumui, o antrinis branduolys gali būti įvairiuose energijos lygmenyse (žr. 1.33 pav.). 1.33 pav. pavaizduotoje lygmenų diagramoje viršutinis lygmuo (A) žymi pirminio branduolio pagrindinę būseną, o lygmenys  $B_0$ ,  $B_1$  ir  $B_2$  – antrinio branduolio pagrindinę ir dvi sužadintas būsenas. Kaip matome, antrinio branduolio energija gali būti lygi trimis vertėms, priklausomai nuo to, kuriame lygmenyje atsидuria branduolys po  $\alpha$  dalelės išspinduliavimo.

Žemiau išvardintos pagrindinės  $\alpha$  skilimo ypatybės:

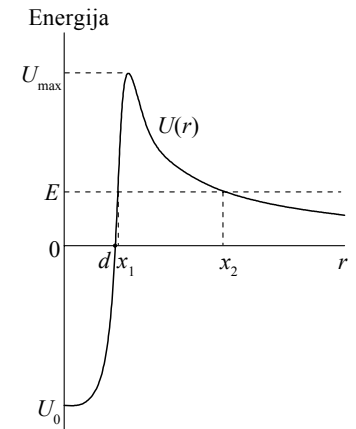
- 1) išskyrus keletą retų išimčių,  $\alpha$  skilimas stebimas tik branduoliams, kurių  $Z > 82$  (izotopai, kurie periodinėje elementų sistemoje yra už Pb);
- 2) daugumos žinomų  $\alpha$  radioaktyvių izotopų spinduliuojamų  $\alpha$  dalelių kinetinės energijos priklauso palyginti siauram intervalui  

$$E = (4 \div 8.7) \text{ MeV};$$
pagal kinetinės energijos apibrėžimą ( $Mv^2/2$ , kur  $M$  yra dalelės masė, o  $v$  – jos greitis), tai atitinka keliolikos tūkstančių km/s greitį;
- 3)  $\alpha$  radioaktyvių izotopų fizikinės pusėjimo trukmės kinta labai plačiose ribose. Pvz.,  $^{212}\text{Po}$  pusėjimo trukmė lygi  $T_{1/2} = 3 \cdot 10^{-7} \text{ s}$ , o  $^{238}\text{U}$  pusėjimo trukmė  $T_{1/2} = 4.5 \cdot 10^9$  metų. Be to, pusėjimo trukmė  $T_{1/2}$  susijusi su  $\alpha$  dalelių energija  $E$ . Šį sąryšį nusako empirinis **Geigerio ir Nėtolo dėsnis**:

$$\lg T_{1/2} = C + \frac{D}{\sqrt{E}}. \quad (1.29.2)$$

Konstantos  $C$  ir  $D$  silpnai priklauso nuo atominio numerio  $Z$ : jeigu energija  $E$  išreikšta MeV, o pusėjimo trukmė  $T_{1/2}$  – s, tuomet, kai  $Z = 84$ , šios konstantos lygios  $C = -50.15$  ir  $D = 128.8$ , o kai  $Z = 90$ ,  $C = -51.94$ ,  $D = 139.4$ .

Pusėjimo trukmės priklauso nuo  $\alpha$  dalelių kinetinės energijos (1.29.2) yra labai stipri: sumažėjus energijai 1%, pusėjimo trukmė padidėja eile, o sumažėjus energijai 10%, pusėjimo trukmė padidėja 2 ÷ 3 eilėms.



1.34 pav.  $\alpha$  dalelės ir antrinio branduolio sąveikos energijos  $U$  priklauso nuo atstumo tarp jų.

2) ir 3)  $\alpha$  skilimo ypatybės paaiškina teorija, kurią 1928 m. sukūrė rusų kilmės amerikiečių fizikas G. Gamovas. Pagal šią teoriją,  $\alpha$  dalelės potencinės energijos  $U$  priklauso nuo atstumo  $r$  iki branduolio centro apytiksliai yra tokio pavidalo:

$$U(r) \approx \begin{cases} Ze^2 / (2\pi\epsilon_0 r), & \text{kai } r > d, \\ U_0 < 0, & \text{kai } r \leq d. \end{cases} \quad (1.29.3)$$

Atstumas  $d$  – tai skilimo produktų ( $\alpha$  dalelės ir taške  $r = 0$  esančio antrinio branduolio) spindulių suma ( $10^{-14} \text{ m}$  eilės dydis), o  $Z$  – antrinio branduolio krūvio skaičius. (1.29.3) išraiškoje akivaizdu, kad erdvės srityje  $r > d$  funkcija  $U(r)$  sutampa su taškinio krūvio  $+Ze$  ir  $+2e$  Kulono sąveikos energija.  $U$  priklauso nuo atstumo iki branduolio centro pavaizduota 1.34 pav. Pagal potencinės energijos apibrėžimą, jos išvestinė  $r$  atžvilgiu yra priešinga radialinei jėgai  $F$ , kuri veikia  $\alpha$  dalelę. Kaip akivaizdu 1.34 pav., nutolus nuo branduolio centro atstumu  $d$ , ši išvestinė staigiai išauga. Taip yra todėl, kad tokiu atstumu nuo branduolio tarp jo ir  $\alpha$  dalelės veikia stipri branduolinė traukos jėga ( $F = -dU/dr < 0$ ). Būtent dėl šios priežasties įmanomas pirminio branduolio  $^A_ZX$  egzistavimas. Kai  $r < d$ , koordinatė  $r$  netenka prasmės, nes abu skilimo produktai susilieja į vieną (pirminį) branduolį. Kai  $r > d$ , potencinės energijos išvestinė  $r$  atžvilgiu yra neigiama, nes tarp dviejų vieno ženklo krūvių veikia Kulono stūmos jėga. ( $F = -dU/dr = Ze^2 / (2\pi\epsilon_0 r^2) > 0$ ).

Vadinasi,  $\alpha$  dalelės išlėkimui iš branduolio egzistuoja potencinis barjeras, kurio aukštis apytiksliai lygus

$$U_{\max} \approx U(d) = \frac{Ze^2}{2\pi\epsilon_0 d} \quad (1.29.4)$$

Laikant, kad  $Z = 100$ , o  $d = 10^{-14}$  m,  $U_{\max} \approx 30$  MeV. Palyginus šią vertę su išlekiančių iš branduolio  $\alpha$  dalelių energija ( $4 \div 8.7$  MeV), akivaizdu, kad  $\alpha$  dalelių energija yra mažesnė už potencinio barjero aukštį. Toks reiškiny, kai dalelė praeina pro potencinį barjerą, kurio aukštis didesnis už dalelės energiją, vadinamas **tuneline pereiga** (t.p. žr. 1.15 poskyrį). Tunelinė pereiga yra grynai kvantinis reiškiny, t.y., jis nepasireiškia klasikinių dalelių atveju: klasikinė dalelė, susidūrusi su potenciniu barjeru, visuomet atsispindi nuo jo. **Klasikinė dalelė** – tai dalelė, kurios koordinatė ir judesio kiekis bet kuriuo laiko momentu *vienu metu* turi tiksliai apibrėžtas vertes. Kaip minėta 1.11 poskyryje, dalelės koordinatė ir judesio kiekis iš principo negali būti tiksliai apibrėžti vienu metu: dalelės koordinatės ir judesio kiekio neapibrėžtumai (standartiniai nuokrypiai) susiję **Heizenbergo neapibrėžtumų sąryšiu**

$$\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}; \quad (1.29.5)$$

čia  $\Delta x$  yra koordinatės neapibrėžtumas,  $\Delta p$  yra judesio kiekio neapibrėžtumas, o  $\hbar \approx 1.06 \cdot 10^{-34}$  J·s  $\approx 6.6 \cdot 10^{-16}$  eV·s yra redukuotoji Planko konstanta. Norint nustatyti, ar duotosios dalelės judėjimą galima aprašyti klasikiniiais metodais, galima pasinaudoti tokia taisykle: jeigu

$$\Delta x \Delta p \gg \frac{\hbar}{2}, \quad (1.29.6)$$

tuomet dalelę galima laikyti klasikine, o jeigu ši griežtoji nelygybė negalioja (t.y., neapibrėžtumų sandauga yra  $\hbar$  eilės), tuomet dalelės judėjimas turi būti aprašomas kvantinės mechanikos metodais. Įsitikinsime, kad  $\alpha$  dalelei branduolyje sąryšis (1.29.6) negalioja, t.y., klasikinis aprašymas netinka. Kadangi branduolyje esančių dalelių judesio kiekiai ir koordinatės svyruoja aplink nulinę vidutinę vertę, tai  $\Delta x = x$ , o  $\Delta p = p$ , kur  $x$  ir  $p$  yra atitinkamai koordinatės ir judesio kiekio vidutinės kvadratinės vertės:  $x \approx d \approx 10^{-14}$  m,  $p \approx \sqrt{2ME}$ , kur  $M \approx 4m_p \approx 6.7 \cdot 10^{-27}$  kg yra  $\alpha$  dalelės masė, o  $E$  yra  $\alpha$  dalelės energija, kuri, kaip minėta, yra kelių MeV eilės. Laikydami, kad  $E = 10$  MeV, randame  $x \cdot p \approx 10^{-33}$  J·s. Kaip matome,  $\alpha$  dalelės koordinatės ir judesio kiekio neapibrėžtumų sandauga yra tik eile didesnė už  $\hbar$ , todėl kvantiniai efektai pasireiškia gana ryškiai.

Kvantinės mechanikos metodais įrodoma, kad vienmačio judėjimo atveju dalelės tunelinės pereigos tikimybė apytiksliai lygi

$$D = \exp \left[ -\frac{2}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{2M(U(x) - E)} dx \right]; \quad (1.29.7)$$

čia  $x_1$  ir  $x_2$  yra lygties  $U(x) = E$  sprendiniai (žr. 1.34 pav.). Ši tikimybė vadinama potencinio barjero **skaidriu**. Formulė (1.29.7) galioja tik ribiniu mažo skaidrio atveju, kai eksponentinės funkcijos argumento absoliutinė vertė žymiai didesnė už vienatę:

$$-\ln D = \frac{2}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{2M(U(x) - E)} dx \gg 1 \quad (1.29.8)$$

(tuomet  $D \ll 1$ ). Įvertinsime  $D$  eilę  $\alpha$  skilimo atveju. 1.34 pav. akivaizdu, kad  $x_1 \approx d \approx 10^{-14}$  m. Įrašę  $U(x)$  išraišką (1.29.4) į lygtį  $U(x) = E$ , gauname

$$x_2 = \frac{Ze^2}{2\pi\epsilon_0 E}. \quad (1.29.9)$$

Laikant, kad  $Z = 100$ , o  $E = 10$  MeV, gauname  $x_2 - x_1 \approx 1.88 \cdot 10^{-14}$  m. Laikydami, kad vidutinė  $U - E$  vertė pointegraliniame reiškinyje lygi  $0.5 \cdot (U_{\max} - E) \approx 10$  MeV, randame  $D \approx \exp(-52) \approx 2 \cdot 10^{-23}$ .

Žinant barjero skaidrį  $D$ , skilimo konstantą  $\lambda$  (tunelinės pereigos tikimybę per laiko vienetą arba  $\alpha$  dalelių išlėkimo vidutinį dažnį) galima įvertinti taip: jeigu  $\alpha$  dalelės greitis  $d$  spindulio branduolyje lygus  $v$ , tai dalelė atsiduria branduolio krašte vidutiniškai  $v/d$  kartų per laiko vienetą. Vadinasi,

$$\lambda \approx \frac{v}{d} D. \quad (1.29.10)$$

$\alpha$  dalelės greičio branduolyje eilę galima rasti, laikant, kad dalelės pilnutinė energija  $E$  apytiksliai lygi jos kinetinei energijai ( $E - U_0$ ) branduolyje, ir remiantis klasikine kinetinės energijos išraiška  $E = Mv^2/2$ . Jeigu  $E = 10$  MeV, tokiu būdu randame  $v \approx 2 \cdot 10^7$  m/s. Kadangi  $v$  yra proporcingas  $\sqrt{E}$ , o  $E$  kitimo ribos yra palyginti siauros, tai šią  $v$  vertę galima naudoti, skaičiuojant ir kitų energijų  $\alpha$  dalelių išlėkimo iš branduolio dažnį. Vadinasi,

$$\lambda \approx 10^{21} \cdot D \text{ (s)}. \quad (1.29.11)$$

Įrašę  $\lambda$  vertę (1.29.11) į pusėjimo trukmės išraišką (1.28.4), randame tokią apytikslę pusėjimo trukmės dešimtainio logaritmo vertę:

$$\lg T_{1/2} \approx B - 0.434 \ln D; \quad (1.29.12)$$

čia konstanta  $B$  yra artima  $-21$ . Dydžio  $-\ln D$  prieklausą nuo energijos  $E$  nesunku įvertinti, pastebėjus, kad beveik visoje integralo (1.29.8) integravimo srityje galioja nelygybė  $E \ll U$  (išskyrus integravimo režius, kuriuose  $U = E$ ). Dėl to, apytiksliai skaičiuojant, galima neatsižvelgti į dėmenį  $-E$  po šaknies ženklų. Tuomet, įrašę  $U(x)$  išraišką (1.29.3) ir viršutiniojo režio išraišką (1.29.9) į integralą (1.29.8), gauname, kad  $-\ln D$  proporcingas  $1/\sqrt{E}$ , t.y., gauname Geigerio ir Netolo dėsnį (1.29.2).

Taigi,  $\alpha$  skilimo aprašymas tunelinės pereigos pagrindu leidžia paaiškinti pusėjimo trukmės prieklausą nuo  $\alpha$  dalelių energijos (Geigerio ir Netolo dėsnį). Ši priklausomybė yra tokia stipri todėl, kad  $T_{1/2}$  išraiškoje energija yra laipsnio rodiklyje, į kurį įeina labai didelis koeficientas  $1/\hbar$  (žr. (1.29.7) ir (1.29.12)). Žinomų  $\alpha$  radioaktyviųjų izotopų spinduliuojamų  $\alpha$  dalelių energijų intervalas yra toks siauras dėl to, kad izotopų, kurie spinduliuoja kitų energijų  $\alpha$  daleles, skilimą sunku aptikti eksperimentiškai:

branduolių, kurių spinduliuojamų dalelių energija būtų didesnė už 9 MeV, gyvavimo trukmė yra pernelyg maža, o branduolių, kurių spinduliuojamų  $\alpha$  dalelių energija mažesnė už 4 MeV, gyvavimo trukmė yra tokia didelė, kad juos galima laikyti stabiliais. Kai kurių  $\alpha$  radioaktyviųjų izotopų spinduliuojamų  $\alpha$  dalelių energijos ir pusėjimo trukmės pateiktos 1.3a lentelėje.

1.3b lentelėje tie patys izotopai išdėstyti energijos didėjimo tvarka.

**1.3a lentelė.** Kai kurių izotopų spinduliuojamų  $\alpha$  dalelių energijos ir pusėjimo trukmės

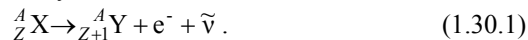
Elemento atominis numeris	Izotopo masės skaičius	Elemento žymėjimas ir senasis izotopo žymėjimas	$\alpha$ dalelių energija, MeV	Pusėjimo trukmė
83	209	Bi	3.2	$2 \cdot 10^{17}$ m.
83	211	Bi (AcC)	6.62 (84 %), 6.28 (16 %)	2.13 min.
83	212	Bi (ThC)	6.05 (25 %), 6.09 (10 %)	60.60 min.
84	210	Po (RaF)	5.305	138.4 d.
84	211	Po (AcC')	7.45 (99 %)	0.52 s
84	212	Po (ThC')	8.78	$3.04 \cdot 10^{-7}$ s
84	214	Po (RaC')	7.69	$1.64 \cdot 10^{-4}$ s
84	215	Po (AcA)	7.38	$1.778 \cdot 10^{-3}$ s
84	216	Po (ThA)	6.78	0.145 s
84	218	Po (RaA)	6.00	3.05 min.
86	220	Rn (Tn)	6.29	53 s
86	222	Rn	5.49	3.8229 d.
88	224	Ra (ThX)	5.68 (94 %), 5.45 (6 %)	3.64 d.
88	226	Ra	4.78 (94 %), 4.60 (6 %)	1620 m.
90	228	Th (RdTh)	5.43 (71 %), 5.34 (28 %)	1.91 m.
90	230	Th	4.68 (76 %), 4.62 (24 %)	$8.0 \cdot 10^4$ m.
90	232	Th	4.01 (76 %), 3.95 (24 %)	$1.41 \cdot 10^{10}$ m.
91	231	Pa	5.01 (24 %), 5.02 (23 %), 4.95 (22 %), 5.06 (10 %)	$3.25 \cdot 10^4$ m.
92	233	U	4.82 (83 %), 4.78 (15 %)	$1.62 \cdot 10^5$ m.
92	234	U (U <sub>II</sub> )	4.77 (72 %), 4.72 (28 %)	$2.47 \cdot 10^5$ m.
92	235	U (AcU)	4.40 (57 %), 4.58 (8 %)	$7.1 \cdot 10^8$ m.
92	238	U (U <sub>I</sub> )	4.20 (75 %), 4.15 (25 %)	$4.51 \cdot 10^9$ m.
93	237	Np	4.78 (75 %), 4.65 (12 %)	$2.14 \cdot 10^6$ m.
94	239	Pu	5.16 (88 %), 5.11 (11 %)	24390 m.
95	241	Am	5.49 (85 %), 5.44 (13 %)	458 m.

**1.3b lentelė.** Kai kurių  $\alpha$  radioaktyviųjų izotopų spinduliuojamų dalelių energijos ir pusėjimo trukmės (izotopai išdėstyti energijos didėjimo tvarka)

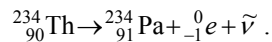
Elemento atominis numeris	Izotopo masės skaičius	Elemento žymėjimas ir senasis izotopo žymėjimas	$\alpha$ dalelių energija, MeV	Pusėjimo trukmė
83	209	Bi	3.2	$2 \cdot 10^{17}$ m.
90	232	Th	4.01 (76 %), 3.95 (24 %)	$1.41 \cdot 10^{10}$ m.
92	238	U (U <sub>I</sub> )	4.20 (75 %), 4.15 (25 %)	$4.51 \cdot 10^9$ m.
92	235	U (AcU)	4.40 (57 %), 4.58 (8 %)	$7.1 \cdot 10^8$ m.
90	230	Th	4.68 (76 %), 4.62 (24 %)	$8.0 \cdot 10^4$ m.
92	234	U (U <sub>II</sub> )	4.77 (72 %), 4.72 (28 %)	$2.47 \cdot 10^5$ m.
93	237	Np	4.78 (75 %), 4.65 (12 %)	$2.14 \cdot 10^6$ m.
88	226	Ra	4.78 (94 %), 4.60 (6 %)	1620 m.
92	233	U	4.82 (83 %), 4.78 (15 %)	$1.62 \cdot 10^5$ m.
91	231	Pa	5.01 (24 %), 5.02 (23 %), 4.95 (22 %), 5.06 (10 %)	$3.25 \cdot 10^4$ m.
94	239	Pu	5.16 (88 %), 5.11 (11 %)	24390 m.
84	210	Po (RaF)	5.305	138.4 d.
90	228	Th (RdTh)	5.43 (71 %), 5.34 (28 %)	1.91 m.
86	222	Rn	5.49	3.8229 d.
95	241	Am	5.49 (85 %), 5.44 (13 %)	458 m.
88	224	Ra (ThX)	5.68 (94 %), 5.45 (6 %)	3.64 d.
84	218	Po (RaA)	6.00	3.05 min.
83	212	Bi (ThC)	6.05 (25 %), 6.09 (10 %)	60.60 min.
86	220	Rn (Tn)	6.29	53 s
83	211	Bi (AcC)	6.62 (84 %), 6.28 (16 %)	2.13 min.
84	216	Po (ThA)	6.78	0.145 s
84	215	Po (AcA)	7.38	$1.778 \cdot 10^{-3}$ s
84	211	Po (AcC')	7.45 (99 %)	0.52 s
84	214	Po (RaC')	7.69	$1.64 \cdot 10^{-4}$ s
84	212	Po (ThC')	8.78	$3.04 \cdot 10^{-7}$ s

### 1.30. $\beta$ skilimas

$\beta^-$  skilimas yra toks atomo branduolio virsmas, kurio metu branduolys savaime išspinduliuoja elektroną (žymėjimas –  $e^-$  arba  ${}_{-1}^0e$ ) ir antineutrą (žymėjimas –  $\bar{\nu}$ ). Antineutrinas yra neutrino antidalelė. Neutrinas ir antineutrinas yra neutraliosios dalelės, kurių rimties masė lygi nuliui. Šio virsmo metu branduolio masės skaičius nepasikeičia (t.y., pirminis ir antrinis branduoliai yra izobarai), o branduolio krūvis padidėja vienu elementariuoju krūviu.  $\beta$  skilimo lygtį galima užrašyti tokiu būdu:



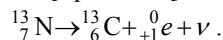
Taigi,  $\beta^-$  skilimo metu vienas iš branduolio neutronų virsta protonu. Pvz., toris  ${}_{90}^{234}\text{Th}$ , išspinduliuavęs  $\beta$  dalelę, virsta protaktiniu (Pa):



$\beta^+$  skilimas yra toks atomo branduolio virsmas, kurio metu branduolys savaime išspinduliuoja elektrono antidalelę – pozitroną (žymėjimas –  $e^+$  arba  ${}_{+1}^0e$ ) ir neutrą  $\nu$ . Šio virsmo metu branduolio masės skaičius taip pat nepasikeičia, o branduolio krūvis sumažėja vienu elementariuoju krūviu, t.y., vienas iš branduolio protonų virsta neutronu:



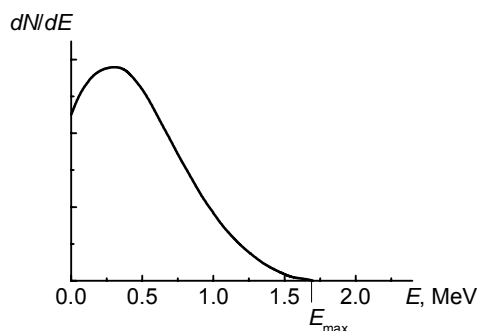
Pvz., azoto izotopas, išspinduliuavęs pozitroną, virsta anglies izotopu:



Trečiasis branduolio virsmas, kuris taip pat priskiriamas prie  $\beta$  skilimo procesų, yra **elektrono pagava**. Šio virsmo metu branduolys “pagauna” vieną iš atominio apvalkalo elektronų (dažniausiai – iš artimiausio branduoliui K sluoksnio), ir vienas iš branduolio protonų virsta neutronu, išspinduliuodamas neutrą:



Nustatyta, kad radioaktyviojo elemento spinduliuojamų  $\beta$  dalelių energijos spektras yra ištisinis. 1.35 pav. pavaizduotas  $\beta$  dalelių kinetinės energijos spektro pavyzdys. Čia  $dN/dE$  yra dalelių skaičius, tenkantis vienetiniam energijų intervalui. Matome, kad  $\beta$  dalelių kinetinė energija gali įgyti visas vertes nuo 0 iki tam tikros didžiausios energijos  $E_{\max}$ . Ši didžiausioji  $\beta$  dalelės kinetinė energija yra lygi



1.35 pav. Fosforo izotopo  ${}^{32}\text{P}$  spinduliuojamų elektronų spektras.

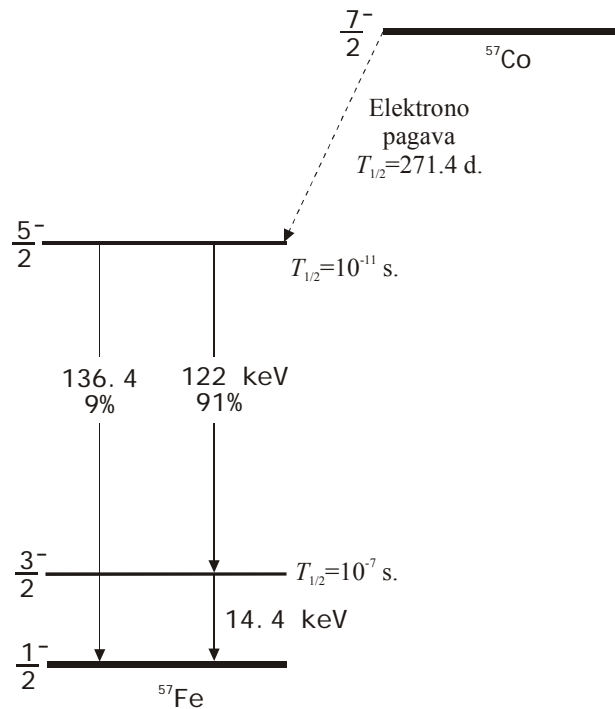
pirminio branduolio rimties energijos ir antrinio branduolio bei elektrono pilnutinės rimties energijos skirtumui. Jeigu branduolys spinduliuotų tik  $\beta$  daleles, tuomet, pagal energijos tvermės dėsnį, jų visų kinetinė energija būtų lygi  $E_{\max}$ . Tačiau, kaip matyti  $\beta$  skilimo lygtyje (1.30.1) arba (1.30.2), šio skilimo metu atsiranda ir neutrinas arba antineutrinas. Taigi, skilimo metu išsiskirianti energija yra pasiskirsčiusi tarp dviejų dalelių – elektrono ir antineutrino, arba tarp pozitrono ir neutrino. Būtent todėl išlekiančio elektrono kinetinė energija gali būti bet kokia: jeigu didesniąją energijos  $E_{\max}$  dalį nusineša antineutrinas, tuomet elektrono kinetinė energija artima nuliui, o jeigu antineutrinas gauna tik mažą dalį energijos, tuomet elektrono kinetinė energija artima  $E_{\max}$ .

$\beta$  dalelių, kurias spinduliuoja nestabilieji branduoliai, energija kinta nuo šimtų keV iki dešimčių MeV, o greitis artimas šviesos greičiui. Taigi,  $\beta$  dalelės yra žymiai greitesnės už  $\alpha$  daleles (žr. 1.29 poskyrį). Be to,  $\beta$  dalelės yra žymiai lengvesnės už  $\alpha$  daleles (elektronas yra maždaug 7000 kartų lengvesnis už  ${}^4\text{He}$  branduolį).

### 1.31. Branduolių $\gamma$ spinduliavimas

$\gamma$  spinduliuotė vadinamos elektromagnetinės bangos, kurių bangos ilgis yra žymiai mažesnis už atstumą tarp kietojo kūno atomų, t.y., žymiai mažesnis už  $10^{-8}$  cm (1 Å). Korpuskuliniu požiūriu, elektromagnetinės bangos yra dalelių – **fotonų** – srautas. Kalbant apie  $\gamma$  spinduliuotę, fotonai dažniausiai vadinami  **$\gamma$  kvantais**.

Branduolių  $\gamma$  spinduliuotė atsiranda šitaip. Dėl  $\alpha$  arba  $\beta$  skilimo arba dėl branduolinės reakcijos susidaręs branduolys dažnai būna sužadintosios būsenos (turi energijos perteklių). Tokiu atveju jis savaime pereina į pagrindinę (mažiausios energijos) būseną. Energijos perteklius išspinduliuojamas fotono ( $\gamma$  kvanto) pavidalu. Taigi, **branduolių  $\gamma$  spinduliuotė** – tai elektromagnetinė spinduliuotė, kuri atsiranda, vykstant sužadintojo branduolio kvantiniams šuoliams į žemesnius energijos lygmenis. Šio vyksmo metu branduolio sudėtis (masės skaičius  $A$  ir krūvio skaičius  $Z$ ) nepakinta; pakinta tik jo energija. Branduolių  $\gamma$  spinduliuotės spektras yra sudarytas iš atskirų linijų, nes branduolio energijos vertės yra diskrečios (žr. 1.26.1 poskyrį). Šis energijos verčių diskretumas išplaukia iš pagrindinių kvantinės mechanikos postulatų (tiksliau, iš Šrėdingerio lygties: žr. 1.13 ir 1.14 poskyrius). Kvantinėje mechanikoje įrodoma, kad tuo atveju, kai sistemą sudarančios dalelės lokalizuotos erdvėje (dėl tarpusavio traukos), sistemos vidinė energija gali įgyti tik diskrečias vertes. Energijos diagramose šios vertės vaizduojamos energijos lygmenimis (pvz., žr. 1.30 pav. ir 1.36 pav.). Kuo mažesnėje erdvės srityje lokalizuotos dalelės, tuo didesnis atstumas tarp lygmenų. Todėl, pvz., tipiškas atstumas tarp branduolio energijos lygmenų ( $100 \div 1000$  keV) yra  $10^4 \div 10^6$  kartų didesnis už tipišką atstumą tarp atomo valentinių elektronų lygmenų, kuris yra elektronvoltų eilės (žr. (1.17.12) formulę).



1.36 pav. Radioaktyviojo skilimo  $^{57}\text{Co} \rightarrow ^{57}\text{Fe}$  schema

Atskaitos sistemoje, kurioje branduolys nejuda, išspinduliuoto arba sugerto fotono energija lygi energijos lygmenų skirtumui. T.y., jeigu turime du branduolio energijos lygmenis, kurių energijos  $E_1$  ir  $E_2$ , ir jeigu  $E_1 > E_2$ , tuomet šuolio iš lygmens  $E_1$  į lygmenį  $E_2$  metu branduolys išspinduliuoja fotoną, kurio energija lygi

$$h\nu = E_1 - E_2, \quad (1.31.1)$$

o šuolio iš  $E_2$  į  $E_1$  metu sugeria tos pačios energijos fotoną. Čia  $\nu$  yra išspinduliuoto arba sugerto fotono dažnis branduolio atskaitos sistemoje, o  $h$  yra Planko konstanta ( $h = 6.626 \cdot 10^{-34}$  J.s). Vykstant kvantiniams šuoliams tarp branduolio energijos lygmenų, spinduliuojamų fotonų energijos dažniausiai priklauso intervalui  $0.01 \div 5$  MeV.

Laikas, per kurį sužadintasis branduolys praranda energijos perteklių, dažniausiai būna  $10^{-14} - 10^{-6}$  s eilės. Tačiau kai kurių izotopų branduoliai išlieka sužadintosios būsenos žymiai ilgesnį laiką. Pvz., vykstant  $^{137}\text{Cs}$  (cezio-137) branduolio  $\beta^-$  skilimui, susidaro sužadintasis  $^{137}\text{Ba}$  (bario-137) branduolys antrajame sužadintajame energijos lygmenyje, kurio vidutinė gyvavimo trukmė lygi 2.6 min (žr. priedo A-1 pav.). Branduoliai, kurie turi vienodą sudėtį (t.y.,

vienodą masės skaičių  $A$  ir vienodą krūvio skaičių  $Z$ ), tačiau skirtingą energiją, ir kurių energija nekinta ilgiau negu  $10^{-11}$  s, yra vadinami **branduoliniais izomerais**. Ypač ilgai išlieka sužadintosios būsenos (tokios, kaip  $^{137}\text{Ba}$  branduolio būsena, kuri atitinka antrąjį sužadintąjį lygmenį) vadinamos **metastabiliosiomis būsenomis** (smulkiau apie metastabiliąsias būsenas kalbama 1.32 poskyryje).

Energijos perteklių sužadintasis branduolys gali prarasti trim būdais. Dažniausiai įvyksta aukščiau aprašytieji branduolio kvantiniai šuoliai į žemesnius energijos lygmenis, kurių metu energijos perteklius išspinduliuojamas fotonų pavidalu. Kiti du galima vyksmai aprašyti žemiau.

Energijos perteklių sužadintasis branduolys gali prarasti ne vien fotono pavidalu, bet ir tiesiogiai perduoti jį vienam iš savo atomo elektronų. Kadangi elektrono gautoji energija yra žymiai didesnė už jo ryšio energiją atome, tai elektronas išlekia iš atomo. Toks procesas vadinamas **vidine konversija**. Vidinė konversija visuomet lydi  $\gamma$  spinduliuotę. T.y., dalis sužadintųjų branduolių praranda energiją, išspinduliuodami  $\gamma$  fotoną, o kita dalis praranda energiją vidinės konversijos būdu. Pvz., tik 90%  $^{137}\text{Ba}$  branduolių antrajame sužadintajame energijos lygmenyje pereina į pagrindinį lygmenį, išspinduliuodami  $\gamma$  kvantą; likusieji praranda energiją vidinės konversijos būdu.

Jeigu sužadintojo branduolio energijos perteklius yra didesnis už dvigubą elektrono rimties energiją, t.y., už  $2mc^2 = 1.02\text{MeV}$ , tuomet energijos perteklius gali virsti elektrono ir pozitrono pora. Šios dvi dalelės išlekia iš atomo. Toks procesas vadinamas **vidiniu porų kūrimu**.

Iš aukščiau minėtųjų trijų procesų ( $\gamma$  kvanto išspinduliavimas, vidinė konversija ir vidinis porų kūrimas) labiausiai tikėtinas yra pirmasis procesas, t.y., kvantinis šuolis, išspinduliuojant fotoną.

$\gamma$  spinduliuotė gali atsirasti, ne tik vykstant kvantiniams šuoliams tarp branduolio energijos lygmenų, bet ir anihiliuojant elementariajai daliai ir jos antidalelei. **Anihiliacijos** metu dalelė ir jos antidalelė susiduria ir išnyksta, išspinduliuodamos energijos kiekį, kuris lygus abiejų dalelių pilnutinei reliatyvistinei energijai prieš pat susidūrimą:

$$E = Mc^2; \quad (1.31.2)$$

čia  $c$  yra šviesos greitis, o  $M$  yra abiejų dalelių pilnutinė reliatyvistinė masė (t.y., rimties masė + reliatyvistinis masės padidėjimas dėl dalelių judėjimo). Žemės sąlygomis dažniausiai stebima elektrono ir jo antidalelės – pozitrono – anihiliacija. Pozitronai praktikoje gaunami, panaudojant  $\beta^+$  radioaktyvius izotopus (pvz.,  $^{22}\text{Na}$ ). Greitieji pozitronai, kuriuos spinduliuoja tokie izotopai, sulėtėja, praeidami pro medžiagą, ir anihiliuoja su medžiagos elektronais. Šios anihiliacijos metu priešingom kryptim išspinduliuojami du fotonai, kurių kiekvieno energija lygi elektrono rimties energijai  $m_e c^2 = 511$  keV, t.y., priklauso  $\gamma$  spinduliuotės diapazonui.

### 1.32. Branduolių šuolių atrankos taisyklės. Metastabiliosios būsenos

Pavyzdyje, kuris pavaizduotas 1.36 pav., matyti, kad pusėjimo trukmė, kuri atitinka  $^{57}\text{Fe}$  branduolio šuolį iš pirmojo sužadintojo lygmens į pagrindinį lygmenį ( $10^{-7}$  s), yra 4 eilėms didesnė už pusėjimo trukmę, kuri atitinka šuolį iš antrojo sužadintojo lygmens į pirmąjį sužadintąjį lygmenį ( $10^{-11}$  s). T.y., pirmojo šuolio tikimybė per laiko vienetą yra 4 eilėms mažesnė už antrojo šuolio tikimybę per laiko vienetą. Dažnai kai kurių šuolių tikimybės yra tokios mažos, kad jas galima laikyti lygiomis nuliui, lyginant su kitų galimų šuolių tikimybėmis. Taisyklės, kurios nusako, kurie šuoliai yra galimi, o kurie – ne, vadinamos **atrankos taisyklėmis**. Formuluojant atrankos taisykles, be branduolio energijos, naudojamos dar dvi branduolio būsenos charakteristikos – branduolio judesio kiekio momentas (sukinys) ir branduolio būsenos lyginumas.

**Branduolio pilnutinis judesio kiekio momentas** – tai vektorinė suma nukleonų orbitinio judesio kiekio momentų ir nukleonų sukinų (vidinių judesio kiekio momentų). Pagal bendrąją judesio kiekio momentų sudėties taisyklę (1.18.11), branduolio pilnutinio judesio kiekio momento  $\mathbf{J}$  absoliutinė vertė  $|\mathbf{J}|$  gali įgyti tik šias vertes:  $\sqrt{J(J+1)} \cdot \hbar$ , kur  $J = 0, 1, 2, \dots$  branduoliams su lyginiu masės skaičiumi  $A$  ir  $J = 1/2, 3/2, 5/2, \dots$  branduoliams su nelyginiu  $A$  (plg. su 1.22 poskyriu, kuriame nagrinėjama atomo elektronų judesio kiekio momentų sudėtis). Skaičius  $J$  vadinamas branduolio **pilnutinio judesio kiekio momento kvantiniu skaičiumi** arba tiesiog **branduolio sukinu**. Kiekvieną branduolio būseną (lygmenį) atitinka apibrėžta sukinio  $J$  vertė. Branduolio sukinio vertė energijos diagramose nurodoma šalia lygmens žymėjimo (žr. 1.30 pav. ir 1.36 pav.). Branduolio judesio kiekio momentas yra vektorinis dydis. Kvantinis skaičius  $J$  nusako tik šio vektoriaus absoliutinę vertę, tačiau nieko nesako apie jo kryptį. Jeigu yra žinoma, kad kvantinio šuolio metu branduolys pereina iš būsenos su  $J = J_1$  į būseną su  $J = J_2$ , tai bendruoju atveju neįmanoma vienareikšmiškai pasakyti, kokia yra judesio kiekio momento pokyčio vektoriaus  $|\Delta\mathbf{J}|$  absoliutinė vertė, nes nėra žinomas judesio kiekio momento krypties pokytis. Tačiau, pagal bendrąją judesio kiekio momentų sudėties taisyklę (1.18.11), yra žinoma, kad  $|\Delta\mathbf{J}|$  gali įgyti tik šias vertes:

$$|\Delta\mathbf{J}| = \Delta J \cdot \hbar \quad (\Delta J = |J_1 - J_2|, |J_1 - J_2| + 1, \dots, |J_1 + J_2|); \quad (1.32.1)$$

čia  $J_1$  ir  $J_2$  yra pradinės ir galutinės branduolio būsenų sukiniai.

**Būsenos lyginumas** nusako, ar šios būsenos funkcija (branduolio banginė funkcija) yra lyginė nukleonų spindulių vektorių atžvilgiu, ar ne. Energijos lygmenyje  $E$  esančio branduolio **banginė funkcija** – tai nukleonų spindulių vektorių  $(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N)$  ir laiko  $(t)$  kompleksinė funkcija

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N, t) = \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) \exp\left(-i \frac{E}{\hbar} t\right),$$

kurios absoliutinės vertės kvadratas  $|\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N)|^2$  nusako sistemos pasiskirstymo konfigūracinėje erdvėje tikimybės tankį. T.y., dydis

$|\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N)|^2 dV_1 dV_2 \dots dV_N$  nusako tikimybę, kad pirmasis nukleonas bus tūrio elemente  $dV_1$ , esančiame taško  $\mathbf{r}_1$  aplinkoje, antrasis nukleonas bus tūrio elemente  $dV_2$ , esančiame taško  $\mathbf{r}_2$  aplinkoje, ir t.t. Taigi, lyginės būsenos atveju, pakeitus bet kurio nukleono spindulio vektoriaus vertę į priešingą, banginės funkcijos vertė nepasikeičia:

$$\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_{i-1}, -\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_{i+1}, \dots, \mathbf{r}_N) = \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_{i-1}, \mathbf{r}_i, \mathbf{r}_{i+1}, \dots, \mathbf{r}_N) \quad (i = 1, 2, \dots, N),$$

o nelyginės būsenos atveju ši vertė pasikeičia į priešingą:

$$\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_{i-1}, -\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_{i+1}, \dots, \mathbf{r}_N) = -\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_{i-1}, \mathbf{r}_i, \mathbf{r}_{i+1}, \dots, \mathbf{r}_N) \quad (i = 1, 2, \dots, N).$$

Energijos diagramose būsenos lyginumas žymimas ženklų “+” arba “-” šalia branduolio sukinio vertės (žr. 1.36 pav.): “+” atitinka lyginę būseną, o “-” – nelyginę. Sukinio vertė kartu su būsenos lyginiu vadinami **būsenos charakteristika** arba **lygmens charakteristika**. Pvz.,  $^{57}\text{Co}$  branduolio pagrindinės būsenos charakteristika yra  $7/2^-$  (žr. 1.36 pav.).

Supaprastintai atrankos taisyklės galima suformuluoti taip: tikimiausi yra tie kvantiniai šuoliai, kurių metu branduolio sukinio pokyčio absoliutinė vertė  $\Delta J$  yra mažiausia (žr. (1.32.1)), o būsenos lyginumas nepakinta. Šuoliai, kurių metu  $\Delta J = 0$  arba 1, o lyginumas nepakinta, vadinami **leistiniais šuoliais**, o visi kiti kvantiniai šuoliai vadinami **draustiniais šuoliais**. Išimtis iš šios taisyklės yra šuolis tarp dviejų lygmenų, kurių sukiniai lygūs nuliui: šis šuolis yra draustinis. Reikia turėti omenyje, kad kvantinio šuolio “leistinumas” arba “uždraustumas” yra reliatyvus. Pvz., magnio izotopo  $^{24}_{12}\text{Mg}$  branduolio trijų žemiausių energijos lygmenų charakteristikos yra  $0^+$ ,  $2^+$  ir  $4^+$ . Vadinasi, atsidūrus šiam branduoliui antrajame sužadintajame lygmenyje (kurio charakteristika yra  $4^+$ ), neišvengiamai įvyks vienas iš draustinių šuolių, kurių metu  $\Delta J \geq 2$ , nes kitų galimų šuolių nėra. Tuo atveju, kai branduolys gali pereiti į pagrindinį lygmenį tik draustinio šuolio būdu, branduolio buvimo sužadintajame lygmenyje trukmė yra kelioms eilėms didesnė, negu tuo atveju, kai galimi ir leistiniai šuoliai.

Tikslesnėje šuolių tikimybių analizėje naudojamas sąryšis tarp sužadintųjų branduolių vidutinės gyvavimo trukmės **duotojo šuolio atžvilgiu**  $\tau$  ir to šuolio parametrų: lygmenų energijų skirtumo, branduolio sukinio pokyčio absoliutinės vertės  $\Delta J$  ir lyginumo pokyčio. Šį sąryšį galima suformuluoti tokiu būdu:

- a) jeigu kvantinio šuolio metu  $\Delta J$  yra lyginis, o būsenos lyginumas nepakinta, arba  $\Delta J$  yra nelyginis, o būsenos lyginumas pakinta, tuomet

$$\frac{1}{\tau} \sim \frac{1}{\lambda} \left( \frac{r}{\lambda} \right)^{2\Delta J}; \quad (1.32.2a)$$

- b) jeigu kvantinio šuolio metu  $\Delta J$  yra lyginis, o būsenos lyginumas pakinta, arba  $\Delta J$  yra nelyginis, o būsenos lyginumas nepakinta, tuomet



$$\frac{1}{\tau} \sim \frac{1}{\lambda} \left( \frac{r}{\lambda} \right)^{2(\Delta J+1)}. \quad (1.32.2b)$$

Čia  $r$  yra branduolio spindulys ( $10^{-13}$  cm eilės dydis), o  $\lambda$  yra redukuotasis bangos ilgis:

$$\lambda = \frac{hc}{E} = \frac{2 \cdot 10^{-11}}{E_{\text{MeV}}} \text{ cm}. \quad (1.32.3)$$

Taigi,  $\lambda$  dažniausiai yra žymiai didesnis už  $r$ . Todėl, pagal (1.32.2a,b), duotąjį šuolį atitinkanti gyvavimo trukmė  $\tau$  (taigi, ir pusėjimo trukmė, kuri lygi  $T_{1/2} = \tau \ln 2$ ) stipriai priklauso nuo šuolio energijos ir nuo  $\Delta J$ .

Pritaikę (1.32.1) ÷ (1.32.2) sąryšius energijos lygmenų diagramai, kuri pavaizduota 1.36 pav., randame:

- šuolio  $5/2^- \rightarrow 1/2^-$  atveju tikimiausia  $\Delta J$  vertė yra  $\Delta J = 5/2 - 1/2 = 2$  ir galioja (1.32.2a);
- šuolio  $5/2^- \rightarrow 3/2^-$  atveju  $\Delta J = 2$  ir galioja (1.32.2a) arba  $\Delta J = 1$  ir galioja (1.32.2b) (čia pasinaudota tuo, kad, pagal (1.32.1), yra galimos visos  $\Delta J$  vertės nuo  $5/2 - 3/2 = 1$  iki  $5/2 + 3/2 = 4$ );
- šuolio  $3/2^- \rightarrow 1/2^-$  atveju  $\Delta J = 3/2 + 1/2 = 2$  (galioja (1.32.2a)) arba  $\Delta J = 3/2 - 1/2 = 1$  (galioja (1.32.2b)).

Visais atvejais  $1/\tau \sim 1/\lambda (r/\lambda)^4$ . T.y., visi šuoliai yra “vienodo leistinumo”. Dėl branduolio struktūros ypatybių šuolių  $5/2^- \rightarrow 1/2^-$  ir  $5/2^- \rightarrow 3/2^-$  spartos skiriasi maždaug 10 kartų (žr. 1.36 pav.). Ryškų šuolių  $5/2^- \rightarrow 3/2^-$  ir  $3/2^- \rightarrow 1/2^-$  spartų skirtumą galima paaiškinti tuo, kad šuolio  $3/2^- \rightarrow 1/2^-$  energija yra beveik eile mažesnė už šuolio  $5/2^- \rightarrow 3/2^-$  energiją, t.y., bangos ilgis beveik eile didesnis ( $T_{1/2} \sim \lambda^5$ ; žr. (1.32.2a,b)).

Egzistuoja branduoliai, kurių sužadintųjų būsenų gyvavimo trukmė gali siekti net kelias valandas arba daugiau. Tokios ilgaamžės sužadintosios būsenos vadinamos **metastabiliosiom būsenom**. Iš (1.32.2a,b) išplaukia, kad metastabiliosios būsenos egzistavimo sąlyga – tai maža šuolio energija ir ypač didelis šuolio “uždraustumo laipsnis”, kurį nusako laipsnio rodiklis  $2\Delta J$  arba  $2(\Delta J+1)$ . Pvz., bario izotopo  $^{137}_{56}\text{Ba}$  pagrindinės būsenos charakteristika yra  $3/2^+$ , pirmosios sužadintosios būsenos charakteristika yra  $1/2^+$ , o antrosios sužadintosios būsenos charakteristika yra  $11/2^-$  (žr. priedo A-1 pav.). Todėl, atsідūręs  $^{137}\text{Ba}$  branduoliui antrajame sužadintajame lygmenyje, tikimiausias yra kvantinis šuolis į pagrindinį lygmenį, kurio metu  $\Delta J = 5$  ir galioja (1.32.2a) arba  $\Delta J = 4$  ir galioja (1.32.2b) (čia pasinaudota tuo, kad  $\Delta J$  gali būti lygus visiems sveikiesiems skaičiams nuo  $11/2 - 3/2 = 4$  iki  $11/2 + 3/2 = 7$ ). Vadinasi, šiuo atveju  $1/\tau \sim 1/\lambda (r/\lambda)^{10}$ . Šis šuolis yra taip stipriai uždraustas, kad  $^{137}\text{Ba}$  branduolio vidutinė gyvavimo antrajame sužadintajame lygmenyje yra palyginti didelė – 2.6 min.

### 1.33. $\gamma$ aktyvių branduolių gavimas. Vidinė konversija

Paprasčiausias ir dažniausiai naudojamas  $\gamma$  radioaktyvių branduolių gavimo būdas – tai  $\beta$  skilimas, kurio metu susidaręs antrinis branduolys yra sužadintosios būsenos. Priežastys, dėl kurių antrinis branduolys iš pat pradžių nebūna pagrindiniame energijos lygmenyje – tai aukščiau minėtos atrankos taisyklės. Mat, dažnai antrinio branduolio pagrindinės būsenos sukinys žymiai skiriasi nuo pirminio branduolio pagrindinės būsenos sukinio. Tokiu atveju šuolis vyksta į tą antrinio branduolio sužadintąjį energijos lygmenį, kurio sukinys yra artimiausias pirminio branduolio pagrindinės būsenos sukiniui, lyginumas yra toks pats, o energija mažesnė (žr. 1.36 pav.). Kaip žinome,  $\beta$  skilimas yra trijų tipų –  $\beta^-$ ,  $\beta^+$  ir elektrono pagava.  $\gamma$  spinduliuotė gali atsirasti, vykstant bet kuriam iš minėtųjų trijų  $\beta$  procesų. Pvz., 1.36 pav. pavaizduota  $\gamma$  spinduliuotės atsiradimo schema, kai  $^{57}\text{Co}$  izotopo branduolys pagauna vieną iš vidinių Co atomo elektronų. Šio virsmo metu branduolio masės skaičius nepakinta, o krūvio skaičius sumažėja vienetu, t.y.,  $^{57}_{27}\text{Co}$  branduolys virsta  $^{57}_{26}\text{Fe}$  branduoliu. Įvykus šiam virsmui, susidaręs  $^{57}\text{Fe}$  branduolys visuomet atsідuria antrajame sužadintajame energijos lygmenyje. Kaip akivaizdu 1.36 pav., iš šio lygmens branduolys gali pereiti į pagrindinį lygmenį dviem būdais – tiesiogiai (136.4 keV šuolis) arba per pirmąjį sužadintąjį energijos lygmenį (122 keV ir 14.4 keV šuoliai). Todėl, vykstant  $^{57}\text{Co}$  radioaktyviajam skilimui, spinduliuojami trijų energijų  $\gamma$  kvantai – 136.4 keV, 122 keV ir 14.4 keV.

Vykstant branduolio šuoliui iš sužadintojo energijos lygmens į pagrindinį, sužadinimo energija gali būti perduota ne vien  $\gamma$  kvantui, bet ir vienam iš atomo elektronų. Toks reiškinys vadinamas **vidine konversija**. Vidinės konversijos metu išspinduliuojamas elektronas, kurio energija ( $E_e$ ) yra mažesnė už sužadinimo energiją ( $E$ ) dydžiu, kuris lygus elektrono ryšio energijai atomo elektronų sluoksnyje ( $\epsilon$ ):

$$E_e = E - \epsilon. \quad (1.33.1)$$

Vadinasi, vidinės konversijos elektronų energijos spektras sudarytas iš atskirų linijų, kaip ir branduolio  $\gamma$  spinduliuotės spektras. Tuo vidinės konversijos elektronai skiriasi nuo elektronų, kurie spinduliuojami  $\beta^-$  skilimo metu (pastarųjų spektras yra tolydus; žr. 1.30 poskyrį).

### 1.34. Branduolinės reakcijos

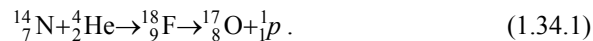
**Branduolinė reakcija** – tai yra bet koks branduolio virsmas dėl sąveikos su dalele. Ši sąveika yra labai trumpa, todėl praktikoje ji dažnai vadinama “susidūrimu”. Taigi, pagrindinis branduolinės reakcijos skirtumas nuo branduolio savaiminio skilimo yra tas, kad branduolinės reakcijos atveju prieš branduolio virsmą turime ne vieną dalelę (pirminį branduolį), o bent dvi daleles (pirminį branduolį ir į jį smogiančiąją dalelę). Branduolinių reakcijų mechanizmai yra labai įvairūs. Branduolines reakcijas gali sukelti ir stiprioji

sąveika (pvz., radiacinė neutrono pagava), ir elektromagnetinė sąveika (pvz., branduolio sužadinimas dėl Kulono sąveikos su  $\alpha$  dalele). Apšaudant branduolius dešimčių ir šimtų MeV energijos  $\gamma$  kvantais, gali vykti fotobranduolinės reakcijos, kurių metu branduolys sugeria  $\gamma$  kvantą ir išspinduliuoja protoną, neutroną arba kitą dalelę. Bet kokia dalelė, kurios kinetinė energija yra šimtų MeV eilės, gali suskaldyti branduolį į daugelį smulkių skeveldrų.

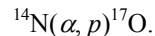
Jeigu branduoliai apšaudomi protonais, neutronais arba iš jų sudarytom dalelėmis (pvz.,  $\alpha$  dalelėmis), kurių kinetinė energija neviršija kelių dešimčių MeV, tačiau yra pakankama, kad krintančioji dalelė priartėtų prie branduolio  $10^{-15}$  m eilės atstumu, tuomet branduolinės reakcijos dažniausiai vyksta dėl branduolio ir krintančiosios dalelės stipriosios (branduolinės) sąveikos. Stiprioji sąveika yra stipriausia iš keturių sąveikos tipų, kurie veikia tarp elementariųjų dalelių (žr. 1.27 poskyrį). Stiprioji sąveika pasireiškia, kai atstumas tarp dalelių yra  $10^{-15}$  m eilės arba mažesnis. Elektronai nedalyvauja stipriojoje sąveikoje, todėl jie gali sukelti branduolines reakcijas tik dėl elektromagnetinės sąveikos su branduoliu.

Branduolinių reakcijų metu galioja tie patys tvėrmės dėsniai, kaip ir savaiminio skilimo atveju (žr. 1.28 poskyrį). Tačiau branduolinės reakcijos atveju, skaičiuojant tvarių dydžių vertę prieš branduolio virsmą, reikia įskaityti visas daleles (t.y., ne tik pirminį branduolį, bet ir į jį smogiančiąją dalelę).

Pirmąją branduolinę reakciją 1919 m. atliko E. Rezerfordas. Jis pastebėjo, kad, švitinant azoto dujas  $\alpha$  dalelėmis, azoto branduolys virsta deguonies branduoliu ir, be to, išsiskiria vienas protonas. Šis branduolių virsmas aiškinamas šitaip. Į azoto branduolį  $^{14}_7\text{N}$  prasiskverbusi  $\alpha$  dalelė ( $^4_2\text{He}$ ) sudaro naujo elemento fluoro branduolį  $^{18}_9\text{F}$ . Tačiau šis branduolys nėra stabilus. Absorbuota  $\alpha$  dalelė perduoda savo energiją azoto branduolio nukleonams, kurie, tarpusavyje susidurdami, taip pat pasikeičia energija. Per labai trumpą laiką (maždaug  $10^{-20}$  s) visą branduolio energijos perteklių gauna vienas protonas, ir jis išlekia iš branduolio. Lieka stabilusis deguonies izotopo branduolys  $^{17}_8\text{O}$ . Taigi, šią branduolinę reakciją galima užrašyti šitaip:



Dažnai naudojamas branduolinių reakcijų sutrumpintas užrašymas: po branduolio-taikinio simbolio skliaustuose nurodoma apšaudančioji dalelė, o už jos – visos dalelės, išsiskyrusios reakcijos metu; už skliaustų rašomas susidariusio branduolio simbolis:

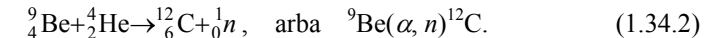


Dalelių žymėjimai: neutronas – n, protonas – p,  $\alpha$  dalelė –  $\alpha$ , deuteronas – d, elektronas –  $e^-$ , pozitronas –  $e^+$ , elektroninis neutrinas –  $\nu_e$ , elektroninis

antineutrinas –  $\bar{\nu}_e$ ,  $\gamma$  kvantas –  $\gamma$ . Elektroninis neutrinas ir elektroninis antineutrinas dažnai vadinami tiesiog neutrinu ir antineutrinu ir žymimi  $\nu$  ir  $\bar{\nu}$ .

Rezerfordui tokiu pačiu būdu pavyko sukelti ir kitų lengvųjų elementų virsmus (Al, B, P). Tačiau sunkesniųjų elementų pakeisti nepavyko, nes Rezerfordas naudojo gamtinius  $\alpha$  dalelių šaltinius (radioaktyviuosius nuklidus), kurie spinduliuoja  $\alpha$  daleles su energijom nuo 4 MeV iki 9 MeV. Norint sukelti sunkesniųjų elementų branduolines reakcijas, reikalingos aukštesnės energijos  $\alpha$  dalelės. Taip yra todėl, kad ir branduolys, ir  $\alpha$  dalelė yra teigiamo krūvio dalelės, todėl jos stumia viena kitą. Norint, kad  $\alpha$  dalelė atsitrenktų į branduolį ir sukeltų branduolinę reakciją, reikia, kad ta dalelė įveiktų kuloninę stūmos jėgą. Ši jėga yra tuo didesnė, kuo didesnis branduolio krūvis, t.y., kuo didesnis apšaudomojo elemento eilės numeris periodinėje sistemoje.

Šios problemos nelieka, jeigu branduoliai apšaudomi neutronais. Neutronas yra neutrali dalelė, todėl nedalyvauja kuloninėje sąveikoje. Vadinasi, neutronas gali priartėti prie branduolio, net ir neturėdamas didelio greičio. Neutronas buvo atrastas 1932 m., vykdant tokią branduolinę reakciją:



Branduolinės reakcijos, kurią sukelia neutronai, pavyzdys yra reakcija  $^{14}\text{N}(n, p)^{14}\text{C}$ . Kaip matyti iš užrašymo, šios reakcijos metu azoto atomo branduolys sugeria neutroną ir išspinduliuoja protoną, virstamas anglies atomo branduoliu. Ši reakcija įdomi tuo, kad ji nepaliaujamai vyksta atmosferoje. Neutronai atsiranda, veikiant atmosferą kosminiams spinduliams. Po to dalis šių neutronų paverčia atmosferos azoto branduolius anglies izotopo  $^{14}\text{C}$  branduoliais. Šis anglies izotopas yra radioaktyvus;  $\beta^-$  skilimo būdu jis virsta stabilium azoto izotopu  $^{14}_7\text{N}$ . Šio skilimo pusamžis yra 5730 m. Todėl nuklido  $^{14}\text{C}$  kiekis atmosferoje nekinta: kiek atomų per laiko vienetą pasigamina, tiek ir suskyla. Radioaktyvusis anglies izotopas  $^{14}\text{C}$  turi didelę praktinę vertę, nustatant archeologinių iškasenų amžių (radiokarboninis metodas).

### 1.35. Branduolinių reakcijų energija

Kiekvienos branduolinės reakcijos metu yra sugerama arba išskiriama energija. Kalbant apie branduolio ryšio energiją (1.25 poskyris), buvo minėta, kad energija išsiskiria tuo atveju, kai sunkusis branduolys skyla į du lengvesnius, arba kai susijungia du lengvieji branduoliai. Išsiskyrusią energiją galima apskaičiuoti, žinant nukleonų savitąją ryšio energiją. Pvz., apskaičiuosime energiją, kuri išsiskiria, skylant urano izotopo  $^{238}\text{U}$  branduoliui į dvi vienodos masės skeveldras. Pradinio izotopo masės skaičių ir savitąją ryšio energiją pažymėsime  $A_1$  ir  $\delta E_1$ , o susidariusio izotopo –  $A_2$  ir  $\delta E_2$ . Šiame pavyzdyje  $A_1 = 238$ , o  $A_2 = 119$ . Kaip matyti 1.29 pav., urano savitoji ryšio energija lygi  $\delta E_1 = 7.6$  MeV, o skeveldrų  $\delta E_2 = 8.6$  MeV. Naudojantis šiais

duomenimis, galima apskaičiuoti energiją, kuri išsiskiria branduolio skilimo metu. Tuo tikslu reikia apskaičiuoti energiją  $E_1$ , kurią reikia išieškoti, norint urano branduolį suskaldyti į atskirus nukleonus, ir ją atimti iš energijos  $E_2$ , kuri išsiskiria, kai iš tų nukleonų susidaro du vienodos masės branduoliai. Energijos  $E_1$  prasmė yra urano branduolio ryšio energija, o energijos  $E_2$  prasmė – dviejų skeveldrų pilnutinė ryšio energija. Šiuo atveju

$$E_1 = \delta E_1 A_1 = 7.6 \cdot 238 \approx 1809 \text{ MeV},$$

$$E_2 = 2\delta E_2 A_2 = 2 \cdot 8.6 \cdot 119 \approx 2047 \text{ MeV}.$$

Išsiskyrusi energija lygi

$$E_2 - E_1 = 2047 - 1809 = 238 \text{ MeV}.$$

Tokiu pačiu būdu galima apskaičiuoti ir energiją, kuri išsiskiria, susijungiant dviems lengviesiems branduoliams. Pvz., tuo atveju, kai du deuterio ( $^2\text{H}$ ) branduoliai susijungia į vieną helio ( $^4\text{He}$ ) branduolį,  $A_1 = 2$ ,  $\delta E_1 = 1.09 \text{ MeV}$  ir  $A_2 = 4$ ,  $\delta E_2 = 7.1 \text{ MeV}$  (žr. 1.29 pav.). Vadinasi, pradinių dviejų branduolių pilnutinė ryšio energija lygi

$$E_1 = 2\delta E_1 A_1 = 2 \cdot 1.09 \cdot 2 = 4.36 \text{ MeV},$$

o galutinio branduolio ryšio energija

$$E_2 = \delta E_2 A_2 = 7.1 \cdot 4 \approx 28.4 \text{ MeV}.$$

Vadinasi, šios sintezės reakcijos metu išsiskirianti energija lygi

$$\Delta E = E_2 - E_1 = 28.4 - 4.36 \approx 24 \text{ MeV}.$$

Taigi, branduolinė energija išsiskiria, vykstant sunkiųjų branduolių dalijimosi ir lengvųjų branduolių sintezės reakcijoms. Išsiskyrusi energija  $\Delta E$  yra lygi reakcijos metu atsiradusių branduolių pilnutinės ryšio energijos  $E_2$  ir pradinių branduolių pilnutinės ryšio energijos  $E_1$  skirtumui.

Šiuo principu pagrįsti praktiniai būdai branduolinei energijai gauti. Pavyzdžiui, atominuose reaktoriuose panaudojama sunkiųjų elementų branduolių skilimo reakcija. Skylant tokiam branduoliui, energija  $\Delta E$  išsiskiria jo skeveldrų kinetinės energijos pavidalu. T.y., skeveldros dideliu greičiu išlekia iš skilimo vietos. Susiduriant šioms skeveldroms su medžiagos atomais, skeveldrų kinetinė energija virsta medžiagos atomų šiluminio judėjimo energija. T.y., branduolinė energija virsta šiluma. Ši šiluma ir yra ta branduolinės energijos dalis, kurią galima panaudoti praktiniams tikslams.

Sekančiame poskyryje smulkiau kalbama apie sunkiųjų branduolių dalijimosi reakciją, kuri vyksta branduoliniuose reaktoriuose.

### 1.36. Sunkiųjų branduolių dalijimosi reakcija. Grandininė reakcija

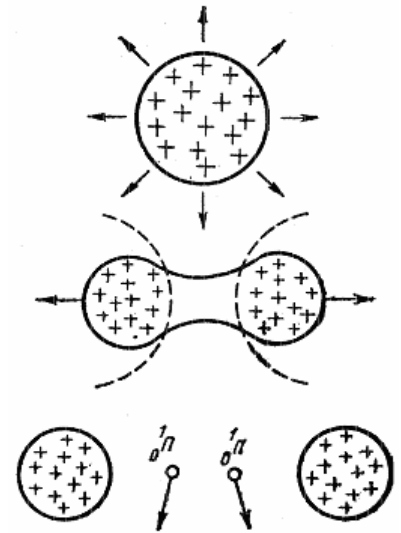
Sunkiojo branduolio dalijimosi reakcija efektyviausiai vyksta tuomet, kai branduolys apšaudomas neutronais. Neutronai neturi krūvio, todėl nesunkiai įsiskverbia į branduolį. Įstrigęs branduolyje, neutronas atiduoda jam savo kinetinę energiją. Jeigu pilnoji branduoliui suteikta energija yra didesnė už tam tikrą ribinę vertę, tuomet branduolys skyla. Ši ribinė branduoliui

suteiktos energijos vertė vadinama **aktyvacijos energija**. 1.37 pav. pavaizduota antroji tokios branduolinės reakcijos stadija, po to, kai branduolys absorbavo neutroną. Skilus branduoliui, skeveldros išlekia priešingom kryptim, veikiamos tarpusavio atostūmio jėgos. Sunkiojo branduolio dalijimosi procesas matematiškai aprašomas, naudojant lašelinį branduolio modelį (žr. 1.26.2 poskyrį).

Branduolinei energetikai ypač didelę reikšmę turi tas faktas, kad, skylančiam branduoliui, išsilaisvina du arba trys neutronai, kurie vadinami **antriniais neutronais** (žr. 1.37 pav.). Šie antriniai neutronai gali sukelti kitų branduolių dalijimąsi. Tokiu būdu sukeliama **grandininė reakcija**, kuri ir panaudojama praktikoje.

Grandininės reakcijos procesą apibūdina **neutronų daugėjimo koeficientas**. Jeigu kurioje nors grandininės reakcijos kartoje laisvųjų neutronų skaičius yra  $N_1$ , o prieš tai buvusioje kartoje jų buvo  $N$ , tuomet neutronų daugėjimo koeficientas lygus  $k = N_1/N$ . Jeigu  $k < 1$ , grandininė reakcija nevyksta. Jeigu  $k = 1$ , laisvųjų neutronų skaičius yra pastovus, todėl per laiko vienetą skylančių branduolių skaičius taip pat yra pastovus (tokia reakcija vyksta atominuose reaktoriuose). Jeigu  $k > 1$ , tuomet laisvųjų neutronų skaičius ir skylančių per laiko vienetą branduolių skaičius nuolat auga, ir gali įvykti sprogimas (toks atvejis realizuojamas atominėse bombose).

Daugėjimo koeficientas priklauso nuo skylančio elemento prigimties, jo kiekio ir formos. Antriniai neutronai iki susidūrimo su branduoliu nueina kelių centimetrų atstumą. Todėl, jeigu medžiagos tūris yra mažas, kai kurie neutronai gali išlėkti iš medžiagos, nesukėlę dalijimosi reakcijos. Didžiausia neutrono pagavimo tikimybė tuomet, kai medžiaga yra rutulio formos, nes tuomet paviršiaus plotas yra mažiausias (taigi, mažiausia neutrono išlėkimo tikimybė). Rutulio formos medžiagos masė, kuriai esant, neutronų daugėjimo koeficientas yra tiksliai lygus vienetui, vadinama **krizine mase**. Pvz., gryno urano  $^{235}\text{U}$  krizinė masė yra 60 kg. Tai atitinka 9 cm skersmens rutulį. Jeigu urano masė didesnė už krizinę, tuomet  $k > 1$ , grandininė reakcija staiga sustiprėja ir įvyksta sprogimas. Šiuo principu įrengta atominė bomba. Jos viduje esantis uranas yra išdalintas į keletą dalių, kurių kiekvienos masė mažesnė už krizinę. Reikiamu momentu šios dalys suartinamos, tokiu būdu gaunamas urano rutulys, kurio masė didesnė už krizinę, ir įvyksta sprogimas.

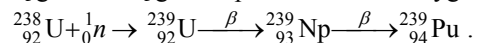


1.37 pav. Sunkiojo branduolio dalijimasis pagal lašelinį branduolio modelį

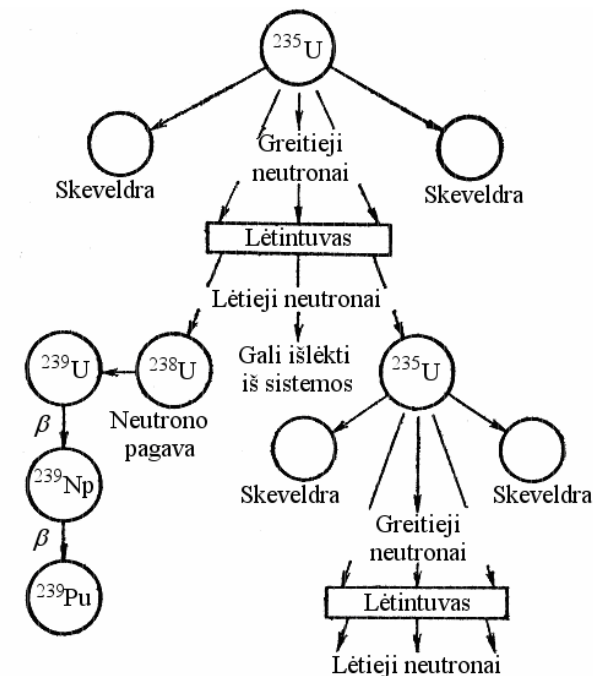
Tačiau net labai gryname gamtiniame urane, kad ir koks būtų jo kiekis, grandininė reakcija nevyksta. Taip yra todėl, kad gamtinis uranas yra dviejų izotopų mišinys:  $^{238}\text{U}$  (99.3%) ir  $^{235}\text{U}$  (0.7%). Daugumą neutronų, kurie atsiranda  $^{235}\text{U}$  branduolių skilimo metu, absorbuoja  $^{238}\text{U}$  branduoliai. Šių branduolių ypatybė yra ta, kad jų aktyvacijos energija yra palyginti didelė (1 MeV), todėl jie, absorbavę mažesnės už 1 MeV kinetinės energijos neutroną, nesidalija, o energijos perteklių išspinduliuoja  $\gamma$  kvanto pavidalu.  $^{235}\text{U}$  branduoliai dalijasi, absorbavę bet kokios energijos neutroną (t.y., jų aktyvacijos energija lygi nuliui), tačiau gamtiniame urane izotopo  $^{235}\text{U}$  yra tik 0.7%, todėl tokio proceso tikimybė yra maža. Izotopo  $^{235}\text{U}$  dalijimosi įvykių dažnį galima padidinti dviem būdais: 1) dirbtinai padidinus šio izotopo kiekį gamtiniame urane; 2) sulėtinus antrinius neutronus. Mat, lėtuosius neutronus žymiai lengviau „pagauna“  $^{235}\text{U}$  branduolys, negu  $^{238}\text{U}$  branduolys. Todėl, nors šie neutronai žymiai dažniau susiduria su  $^{238}\text{U}$  branduoliais, kurių yra didžioji dauguma, tačiau didžiąją neutronų dalį vis tiek absorbuoja  $^{235}\text{U}$  branduoliai.  $^{235}\text{U}$  branduolys po kiekvieno tokio įvykio dalijasi, išlaisvindamas 2 arba 3 antrinius neutronus. Tokiu būdu galima pasiekti, kad neutronų daugėjimo koeficientas taptų didesnis už vienetą, t.y., kad vyktų grandininė reakcija.

1.38 pav. pavaizduota grandininės reakcijos schema urano izotopų mišinyje, panaudojant neutronų lėtintuvą. Lėtintuvas – tai medžiaga, kurios atomų branduoliai beveik neabsorbuoja neutronų, tačiau po susidūrimų su šiais branduoliais neutronai netenka daug energijos. Šios medžiagos vaidmenį gali atlikti, pvz., grafitas (anglies mineralas), sunkusis vanduo ( $\text{D}_2\text{O}$ ), berilis. Naudojant lėtintuvą, urano strypai išdėstomi tam tikrais atstumais vienas nuo kito, o tarpai tarp jų užpildomi lėtintuvu.

Kaip parodyta 1.38 pav., nors urano izotopas  $^{238}\text{U}$  slopina grandininę reakciją, tačiau kitu požiūriu jis yra naudingas. Šio izotopo branduolys, pagavęs lėtąjį neutroną, išspinduliuoja  $\gamma$  kvantą ir virsta urano izotopu  $^{239}\text{U}$ . Pastarasis izotopas yra  $\beta^-$  radioaktyvus. Skilimo metu jis virsta neptūnio  $^{239}\text{Np}$  branduoliu, kuris taip pat yra  $\beta^-$  radioaktyvus.  $^{239}\text{Np}$  virsta plutonio izotopu  $^{239}\text{Pu}$ , kurio branduoliai savo savybėmis labai panašūs į  $^{235}\text{U}$ . T.y., šie branduoliai dalijasi, absorbavę lėtuosius neutronus, ir išskiria branduolinę energiją. Šią virsmų grandinę galima pavaizduoti tokia lygtimi:



Vadinasi, kartu su branduoline energija atominame reaktoriuje gaminamas ir branduolinis kuras – plutonis, kurį vėliau taip pat galima panaudoti branduolinei energijai gauti.



1.38 pav. Grandininės reakcijos schema urano izotopų mišinyje, panaudojant neutronų lėtintuvą

### 1.37. Jonizuojančiosios spinduliuotės dozių samprata

Aukštos energijos fotonai (t.y.,  $\gamma$  spinduliai ir Rentgeno spinduliai) bei  $\alpha$  ir  $\beta$  dalelės, jonizuodami arba sužadindami medžiagos atomus, praranda energiją (t.y., medžiaga sugeria spinduliuotės energiją). Spindulių poveikis medžiagai priklauso nuo to, kiek atomų buvo jonizuota. Šis skaičius yra proporcingas medžiagoje sugertos energijos kiekiui. Vadinasi, apie spinduliuotės jonizuojantį poveikį galima spręsti pagal sugertos energijos kiekį. Šiam energijos kiekiui apibūdinti naudojama spindulių dozės sąvoka. Praktikoje naudojami trys dozės apibrėžimai:

**Sugertoji dozė** – tai energijos kiekis, kurį jonizuojančiosios dalelės perdavė švitinamosios medžiagos masės vienetui. T.y., sugertąją dozę galima išreikšti taip:

$$D_s = \frac{\Delta E}{\Delta m}; \quad (1.37.1)$$

čia  $\Delta m$  yra kūno dalies, kurioje sugerama spinduliuotė, masė, o  $\Delta E$  yra toje dalyje sugertos energijos kiekis. Sugertosios dozės SI vienetas yra **grėjus** (Gy):

1 Gy = 1 J/kg. Tačiau praktikoje dažniau naudojamas šimtą kartų mažesnis vienetas, kuris vadinamas **radu** (rad): 1 rad =  $10^{-2}$  J/kg.

Sugertoji dozė tinka visų rūšių jonizuojančiosios spinduliuotės poveikiui įvertinti, tačiau ją sunku tiesiogiai išmatuoti.

**Ekspozicinė dozė** – tai pilnutinis vieno ženklo jonų krūvis, kuris susidarė atmosferos oro masės vienetė dėl Rentgeno arba  $\gamma$  spindulių poveikio. T.y., ekspozicinę dozę galima išreikšti šitaip:

$$D_e = \frac{\Delta q}{\Delta m}; \quad (1.37.2)$$

čia  $\Delta m$  yra oro tūrio, kuriame sugerama spinduliuotė, masė, o  $\Delta q$  yra tame tūryje sukurtų vieno ženklo jonų krūvis. Šios dozės SI vienetas yra 1 C/kg. Praktikoje dažniausiai naudojamas nesisteminis ekspozicinės dozės vienetas – **rentgenas** (R). Ekspozicinė dozė lygi 1 R tuomet, kai jonizuojančiosios spinduliuotės sukurtų vieno ženklo jonų krūvis normalaus tankio oro 1 cm<sup>3</sup> (t.y.,  $1.293 \cdot 10^{-6}$  kg) yra lygus  $1/3 \cdot 10^{-9}$  C (t.y., CGS sistemos krūvio vienetui). Taigi, 1 R =  $0.333 \cdot 10^{-9}$  C /  $1.293 \cdot 10^{-6}$  kg =  $2.58 \cdot 10^{-4}$  C/kg.

Kai spinduliuotę sugeria oras, tuomet 1 R ekspozicinė dozė atitinka 0.88 rad sugertąją dozę. Tuo galima įsitikinti tokiu būdu. Kadangi vienvalenčio jono (elektrono) krūvis  $e = 1.6 \cdot 10^{-19}$  C, tai 1 R dozė 1 cm<sup>3</sup> oro jonizuoja  $3.33 \cdot 10^{-10} / 1.6 \cdot 10^{-19} = 2.08 \cdot 10^9$  atomų, o 1 kg oro –  $2.08 \cdot 10^9 / 1.293 \cdot 10^{-6} = 1.61 \cdot 10^{15}$  atomų. Kadangi vienam atomui jonizuoti reikia vidutiniškai  $34 \text{ eV} \approx 54.4 \cdot 10^{-19}$  J energijos,  $1.61 \cdot 10^{15}$  atomų jonizavimui reikalingas energijos kiekis  $1.61 \cdot 10^{15} \cdot 54.4 \cdot 10^{-19} \text{ J} = 0.88 \cdot 10^{-2} \text{ J}$ . Vadinasi, 1 R ekspozicinė dozė yra tapati  $0.88 \cdot 10^{-2} \text{ J/kg} = 0.88 \text{ rad}$  sugertajai dozei ore. Tokiu pačiu būdu nustatyta, kad 1 R ekspozicinė dozė yra tapati 0.96 rad sugertajai dozei biologiniame audinyje. T.y., jeigu tam tikrame oro tūryje ekspozicinė dozė lygi 1 R, tuomet galima teigti, kad, patalpinus į tą oro tūrį biologinį audinį, jo sugertoji dozė bus lygi 0.96 rad. Taigi, pagal ekspozicinės dozės didumą galima tiesiogiai įvertinti biologiniame audinyje sugertąją dozę. Dauguma dozimetriinių prietaisų matuoja būtent ekspozicinę dozę.

**Lygiavertė dozė.** Spinduliuotės poveikis biologiniams audiniams priklauso ne vien nuo sugertosios dozės didumo, bet ir nuo spinduliuotės rūšies. Taip yra todėl, kad jonizuojančiosios spinduliuotės biologinis poveikis didėja, augant ilginei jonizacijai (jonizuotų atomų skaičiui dalelės trajektorijos ilgio vienetė). Vadinasi, esant fiksuotam jonizuotų atomų skaičiui tūrio vienetė (t.y., esant fiksuotai sugertajai dozei), spinduliuotės biologinis poveikis yra tuo didesnis, kuo daugiau yra *artimų* jonizuotų atomų. Duotosios sugertosios dozės  $\alpha$  spinduliuotės biologinis poveikis yra stipresnis už tos pačios sugertosios dozės  $\gamma$  spinduliuotės biologinį poveikį, nes  $\alpha$  spinduliuotės atveju visi jonizuoti atomai yra “išsirikiavę” išilgai  $\alpha$  dalelių trajektorijų, o  $\gamma$  spinduliuotės atveju jie tolygiai pasiskirstę audinio tūryje. Todėl, įvertinant spinduliuotės

biologinį poveikį, sugertoji dozė dauginama iš **kokybės faktoriaus**  $k$ , kuris nusako, kiek kartų duotojo tipo spinduliuotės biologinis poveikis yra didesnis už tos pačios sugertosios dozės 200 keV energijos  $\gamma$  spinduliuotės biologinį poveikį. Šitaip apskaičiuotas dydis vadinamas **lygiaverte doze**. Taigi, lygiavertė dozė lygi

$$D_b = k D_s. \quad (1.37.3)$$

Lygiavertė dozė matuojama **biologiniais rentgeno ekvivalentais** arba “remais” (“Roentgen equivalent man”, rem). Tikslus šio vieneto pavadinimas būtų “biologinis rado ekvivalentas”, nes jis nusako sugertąją dozę, kuri savo biologiniu poveikiu yra lygiavertė 200 keV energijos  $\gamma$  spinduliuotės 1 rad sugertajai dozei. Kitais žodžiais, 1 rem – tai jonizuojančiosios spinduliuotės sugertoji dozė, kuri lygi 1 rado ir to tipo spinduliuotės kokybės koeficiento santykiui:

$$1 \text{ rem} = 1 \text{ rad} / k.$$

Biologinis grėžaus ekvivalentas vadinamas **sivertu**:

$$1 \text{ Sv} = 1 \text{ Gy} / k = 100 \text{ rem}.$$

Kokybės faktoriai, kurie atitinka skirtingus jonizuojančiosios spinduliuotės tipus, pateikti 1.4 lentelėje. Kaip matyti šioje lentelėje, pvz., 1 rad  $\alpha$  spinduliuotės sugertoji dozė savo biologiniu poveikiu yra tapati 10 rad  $\gamma$  spinduliuotės sugertajai dozei. T.y.,  $\alpha$  spinduliuotės atveju 1 rad sugertoji dozė reiškia 10 rem lygiavertę dozę.

**Dozės galia** – tai dozė, kurią kūnas sugėrė per laiko vienetą. Dozės galios vienetas – tai nagrinėjamosios dozės vienetas (pvz., radas, rentgenas arba sivertas), padalintas iš laiko vieneto (pvz., metų, valandos arba sekundės).

Sugertieji spinduliai jonizuoja molekules, todėl jos pakinta arba suyra. Jeigu pažeistoji molekulė yra būtina ląstelės funkcionavimui (pvz., DNR molekulė), tuomet ląstelė gali mirti. Taigi, jonizuojančioji spinduliuotė yra biologiškai kenksminga.

Žmogaus organizmą nuolat veikia vadinamoji **foninė spinduliuotė** (kosminiai spinduliai, Žemės plutos ir atmosferos radioaktyvioji spinduliuotė bei organizme esančių radioaktyviųjų kalio <sup>40</sup>K ir anglies <sup>14</sup>C izotopų  $\beta$  spinduliuotė). Žmogaus gaunama metinė dozė yra apytiksliai lygi 0.14 rem. Tai atitinka 16  $\mu\text{R/h}$  (16 mikrorentgenų per valandą). Personalui, dirbančiam didesnės radiacijos aplinkoje, yra nustatyta **leistinoji dozė**, kuri organizme nesukelia liekamųjų pakitimų. Tarptautiniu mastu priimtoji didžiausia leidžiamoji metinė dozė yra 5 rem. Žmogus, per trumpą laiką paveiktas 200 – 600 rem dozės  $\gamma$  spinduliais, susergera spinduline liga, kuri dažniausiai baigiasi mirtimi.

Visi dozimetrijoje naudojami vienetai ir jų sąryšiai pateikti 1.5 lentelėje. Kadangi sisteminiai vienetai Gy ir Sv praktiniams pritaikymams yra per dideli, tai vietoj jų dažniausiai naudojami 1000 kartų mažesni vienetai – miligrėjus (mGy) ir milisivertas (mSv).

**1.4 lentelė.** Skirtingų rūšių jonizuojančiosios spinduliuotės kokybės faktoriai

Spinduliuotės rūšis	$k$	Spinduliuotės rūšis	$k$
$\gamma$ spinduliuotė	1	Šiluminiai neutronai	3
Rentgeno spinduliuotė	1	5 keV energijos neutronai	2.5
$\beta$ spinduliuotė	1	20 keV energijos neutronai	5
$\alpha$ spinduliuotė ( $\leq 10$ MeV)	10	100 keV energijos neutronai	8
Protonai (10 MeV)	10	1 MeV energijos neutronai	10.5
Sunkieji atatrakos branduoliai	20	10 MeV energijos neutronai	6.5

**1.5 lentelė.** Jonizuojančiosios spinduliuotės matavimo vienetai

Dydžio pavadinimas	SI vienetas	Nesisteminis vienetas	Santykis
Aktyvumas	Bekerelis, Bq	Kiuris, Ci	1 Ci = $3.7 \cdot 10^{10}$ Bq
Ekspozicinė dozė	Kulonas kilograme, C/kg	Rentgenas, R	1 R = $2.58 \cdot 10^{-4}$ C/kg
Sugertoji dozė	Grėjus, Gy	Radas, rad	1 rad = 0.01 Gy
Lygiavertė dozė	Sivertas, Sv	REM, rem	1 rem = 0.01 Sv

Jeigu yra žinomi radioaktyviojo šaltinio aktyvumas, spinduliuojamų dalelių rūšis ir energija bei atstumas iki šaltinio, tuomet radioaktyviojo šaltinio spinduliuotės dozės galią galima apskaičiuoti. Tam naudojama jonizuojančiosios spinduliuotės konstantos sąvoka. Radioaktyviojo izotopo **spinduliuotės konstanta** – tai ekspozicinės dozės galia (rentgenais per valandą, R/h), kurią sukuria taškinis 1 mCi ( $3.7 \cdot 10^7$  Bq) aktyvumo šaltinis 1 cm atstumu.

Šaltinio, kuris spinduliuoja vienos energijos  $\gamma$  kvantus, spinduliuotės konstanta apytiksliai lygi

$$K_{\gamma} = 1.959 \cdot 10^6 \cdot (\tau + \sigma) E_{\gamma} \left( \frac{\text{R} \cdot \text{cm}^2}{\text{mCi} \cdot \text{h}} \right); \quad (1.37.4)$$

čia  $\tau$  ir  $\sigma$  yra atitinkamai fotoefekto ir Komptono sklaidos indėliai į spinduliuotės silpimo koeficientą ( $\text{cm}^{-1}$ ), o  $E_{\gamma}$  yra  $\gamma$  kvanto energija (MeV). Kelių izotopų  $\gamma$  spinduliuotės konstantos pateiktos 1.6 lentelėje.

**1.6 lentelė.** Įvairių izotopų  $\gamma$  spinduliuotės konstantos

Izotopas	Pusėjimo trukmė	$E_{\gamma}$ , MeV	$K_{\gamma}$ , $\text{R} \cdot \text{cm}^2 / (\text{mCi} \cdot \text{h})$
$^{24}\text{Na}$	14.9 valandos	1.368; 2.753	18.0
$^{60}\text{Co}$	5.3 m.	1.173; 1.333	13.5
$^{131}\text{I}$	8 dienos	Ištisinis spektras	2.6
$^{134}\text{Cs}$	2.3 m.	Ištisinis spektras	11.5
$^{137}\text{Cs}$	33 m.	0.6617	4.0
$^{152}\text{Eu} + ^{154}\text{Eu}$	15 m.	Ištisinis spektras	5.5
$^{170}\text{Tm}$	127 dienos	0.084	0.47
$^{192}\text{Ir}$	78 dienos	Ištisinis spektras	2.7
$^{226}\text{Ra}$	1620 m.	Ištisinis spektras	8.4

1.6 lentelėje matyti, kad  $\gamma$  spinduliuotės konstanta priklauso nuo šaltinio spinduliuojamų  $\gamma$  kvantų energijos  $E_{\gamma}$  ir nuo vieno skilimo metu išspinduliuotų  $\gamma$  kvantų skaičiaus. Didėjant  $\gamma$  kvanto energijai arba vieno branduolio skilimo metu išspinduliuojamų  $\gamma$  kvantų skaičiui,  $\gamma$  spinduliuotės konstanta auga.

Žinant taškinio  $\gamma$  šaltinio aktyvumą ir spinduliuotės konstantą  $K_{\gamma}$ , galima apskaičiuoti jo spinduliuotės ekspozicinės dozės galią bet kuriuo atstumu nuo šaltinio. Taškinio  $\gamma$  šaltinio ekspozicinės dozės galia lygi

$$P = \frac{K_{\gamma} A}{R^2}; \quad (1.37.5)$$

čia  $A$  yra šaltinio aktyvumas (mCi),  $R$  yra atstumas iki šaltinio (cm).

## 2. Darbai Nr. 1–2. Kristalų struktūros rentgeninė analizė

### 2.1. Įvadas

#### 2.1.1. Kristalai, kristalo gardelė, elementarusis narvelis

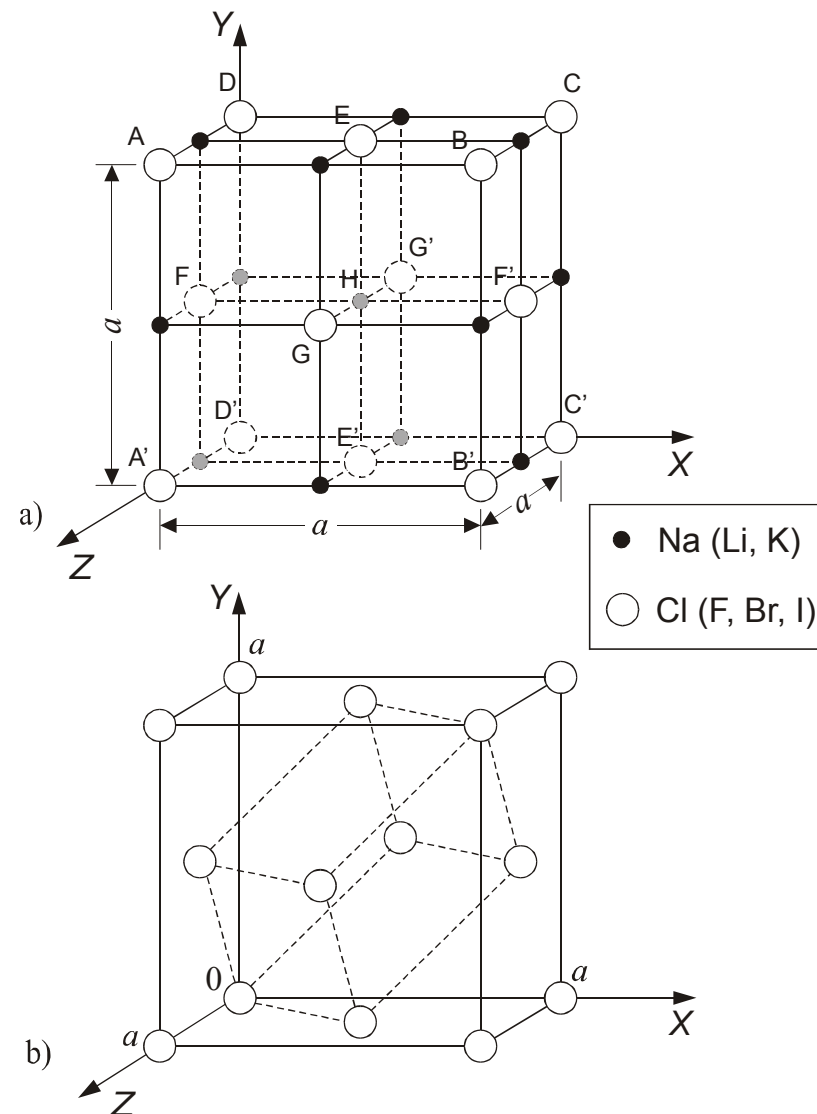
**Kristalas** – tai kietasis kūnas, kurio struktūriniai elementai (atomai, molekulės arba jonai) visoje erdvėje išsidėstę tvarkingai. Šis atomų išsidėstymo tvarkingumas pasireiškia tuo, kad kristalai yra taisyklingų briaunainių formos. Pavieniai kristalai vadinami **monokristalais**, o kūnai, kurie sudaryti iš didelio skaičiaus smulkių, netvarkingai išsidėsčiusių erdvėje kristalų, vadinami **polikristalais**. Pvz., metalai dažniausiai būna polikristalinės struktūros.

Jeigu kiekvienam kristalo struktūriniam elementui erdvėje priskirtume tašką, tuomet tokių taškų visuma sudaro kristalo gardelę. Taigi, **kristalo gardelė** – tai visuma begalinėje erdvėje (analizės patogumui) išdėstytų taškų, kurių kiekvienas atitinka kristalo struktūrinį elementą. Šie taškai vadinami **gardelės mazgais**, o kristalo struktūrinis elementas vadinamas gardelės **baze**.

Pvz., natrio chlorido (NaCl) kristalo struktūriniai elementai – tai vienodai orientuotos gretimų Na ir Cl atomų poros (žr. 2.1a pav.). Taigi, NaCl kristalo bazė yra Na ir Cl atomų pora. Norint sudaryti šio kristalo gardelę, kiekvienai tokiai porai reikia priskirti tašką erdvėje. Vienintelis reikalavimas yra tas, kad šio taško padėtis atžvilgiu struktūrinio elemento būtų vienoda visiems struktūriniais elementams. Pvz., galima laikyti, kad gardelės mazgai yra Cl atomuose. Atitinkama kristalo gardelė pavaizduota 2.1b pav. Tačiau gardelės mazgus galima pasirinkti ir Na atomuose, vienodai orientuotų gretimų Na ir Cl atomų porų centruose ir t.t.

Mažiausias atstumas tam tikra kryptimi tarp dviejų gardelės mazgų yra vadinamas **gardelės konstanta** arba **gardelės periodu** ta kryptimi. Pvz., NaCl kristalo gardelės, kuri pavaizduota 2.1b pav., periodai  $X$ ,  $Y$  ir  $Z$  kryptimis yra vienodi ir lygūs  $a = 5.64 \cdot 10^{-10} \text{ m} = 5.64 \text{ \AA}$  ( $1 \text{ \AA} = 1 \text{ angstromas} = 10^{-10} \text{ m}$ ). Erdvės sritis, kuri yra viduje gretasienio, sudaryto trijų gardelės periodų pagrindu, yra vadinama **elementariuoju narveliu**. Pvz., 2.1a ir 2.1b pav. pavaizduotasis kubas yra elementarusis narvelis. Gretasienis, kuris pavaizduotas 2.1b pav. punktyrinėmis linijomis, taip pat yra elementarusis narvelis. Taigi, elementariojo narvelio briaunų ilgiai (gardelės periodai) ir kampai tarp jų priklauso nuo pasirinktųjų krypčių. Mažiausio tūrio elementarusis narvelis vadinamas **primityviuoju narveliu** arba **paprastuoju narveliu**. Pvz., elementarusis narvelis, kuris pavaizduotas 2.1b pav. punktyrinėmis linijomis, yra primitivusis.

Pasirinkus bet kurį kristalo gardelės mazgą, visų likusių mazgų išsidėstymas aplink jį yra vienodas, nepriklausomai nuo pasirinktojo mazgo.



2.1 pav. a) Atomų išsidėstymas šarminių metalų halogenidų (pvz., NaCl, LiF ir kt.) kristaluose.

b) Centruotojo paviršiaus Bravė gardelės elementarusis narvelis (ištinės linijos) ir primitivusis narvelis (punktyrinės linijos).



Todėl vienas elementarusis narvelis suteikia visą informaciją apie kristalo struktūrą: visą kristalą galima sudaryti, sudėjus vienodus elementariusius narvelius vieną šalia kito.

Elementarusis narvelis visuomet sudaromas taip, kad kiekvienoje jo viršūnėje būtų po mazgą. Vadinasi, elementariajame narvelyje visuomet yra bent vienas gardelės mazgas, nes kiekvienas mazgas, esantis narvelio viršūnėje, priklauso aštuoniems kaimyniniams narveliams (t.y., vienam narveliui tenka  $1/8$  mazgo), o gretasienis turi aštuonias viršūnes. Primityviajame narvelyje mazgai yra tik narvelio viršūnėse, t.y., primityviajame narvelyje yra tik vienas gardelės mazgas. Bendruoju atveju gardelės mazgai gali būti ne tik narvelio viršūnėse, bet ir narvelio viduje arba jo sienų vidinėse srityse (kaip 2.1b pav.). Narvelio sienos vidinėje srityje esantis mazgas yra dviejų gretimų narvelių riboje (t.y., vienam narveliui tenka  $1/2$  mazgo). Todėl bendruoju atveju mazgų skaičius elementariajame narvelyje skaičiuojamas pagal formulę

$$N = 1 + \frac{1}{2} N_p + N_t, \quad (2.1.1)$$

kur  $N_p$  yra narvelio paviršiuje (tiksliau, jo sienų vidinėse srityse) esančių mazgų skaičius, o  $N_t$  yra narvelio tūryje esančių mazgų skaičius. Sudarius NaCl elementarųjį narvelį taip, kaip pavaizduota 2.1b pav.,  $N_p = 6$  (šeši gardelės mazgai narvelio sienų centruose), o  $N_t = 0$  (narvelio tūryje mazgų nėra). Pasinaudoję (2.1.1) formule, randame, kad šiuo atveju elementariajame narvelyje yra 4 gardelės mazgai, t.y., 4 Na atomai ir 4 Cl atomai.

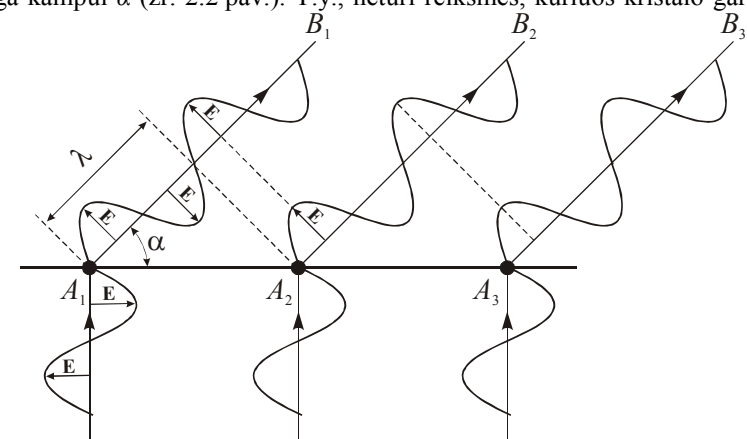
### 2.1.2. Rentgeno spindulių difrakcija kristale

Kaip žinoma iš optikos kurso, apšvietus difrakcinę gardelę (vienodų lygiagrečių siaurų plyšių sistemą) monochromatine šviesa, įvyksta šviesos difrakcija: patalpinus ekraną už difrakcinės gardelės, vietoj geometriškai tikslaus plyšių atvaizdo gaunamos lygiagrečios šviesios ir tamsios juostos, kurių plotis priklauso nuo bangos ilgio ir nuo atstumo tarp gretimų plyšių (difrakcinės gardelės periodo). Todėl, žinant gardelės periodą ir išmatavus difrakcinių juostų plotį, galima įvertinti bangos ilgį. Ir atvirkščiai: žinant bangos ilgį, pagal difrakcinių juostų plotį galima įvertinti gardelės periodą. Tačiau ryškus difrakcinis vaizdas susidaro tik tuo atveju, kai gardelės periodas yra tos pačios eilės, kaip bangos ilgis: jeigu periodas žymiai didesnis už bangos ilgį, tuomet gaunamas geometriškai tikslus plyšių sistemos atvaizdas, o jeigu žymiai mažesnis, tuomet gaunamas tolygus apšvietumas.

Tas pats principas panaudojamas ir kristalų struktūros rentgeninėje analizėje, tačiau čia difrakcinės gardelės vaidmenį atlieka kristalas. Pirminė difrakcijos priežastis yra elektromagnetinės spinduliuotės sklaida medžiagoje. Mat, elektromagnetinė banga yra sklindantis erdvėje elektrinio ir magnetinio laukų virpesiai. Elektrinio lauko virpesiai sukelia medžiagos elektronų virpesius, kurių dažnis lygus bangos dažniui. Elektrodinamikoje įrodoma, kad virpantis krūvininkas spinduliuoja elektromagnetines bangas, kurių dažnis

lygus virpesių dažniui. Šios bangos spinduliuojamos visomis kryptimis, išskyrus virpesių kryptį (žr. 9.4 pav.). Vadinasi, kritus į kristalą apibrėžtos krypties elektromagnetinei bangai, atsiranda įvairiomis kryptimis sklindančios to paties dažnio *išsklaidytosios* bangos. Skirtinguose kristalo taškuose išsklaidytos bangos yra koherentinės, t.y., turi pastovų fazių skirtumą, kuris priklauso nuo sklaidos krypties, ir yra vienodai poliarizuotos. Kaip žinoma iš optikos, koherentinės bangos interferuoja, t.y., susidedant dviem koherentinėms bangoms, suminis intensyvumas gali skirtis nuo tų bangų intensyvumų sumos, priklausomai nuo jų fazių skirtumo. Skaičiuojant kristale išsklaidytų bangų interferencinių maksimumų ir minimumų kryptis, pakanka atsižvelgti tik į bangas, kurios išsklaidytos vienuose kristalo taškuose (t.y., taškuose, kurių aplinka yra vienoda), nes tuose taškuose išsklaidytų bangų amplitudės yra vienodos, todėl jos gali tiksliai "panaikinti" viena kitą dėl interferencijos. Šie taškai – tai kristalo gardelės mazgai. Jeigu visuose gardelės mazguose duotąją kryptimi išsklaidytų bangų fazės sutampa (tiksliau, skiriasi dydžiu  $2\pi n$ , kur  $n$  yra sveikasis skaičius), tuomet visų ta kryptimi išsklaidytų bangų amplitudės susideda, t.y., bangos "stiprina" viena kitą dėl tarpusavio interferencijos. Tokios kryptys vadinamos *difrakcinių maksimumų* kryptimis. Pvz., 2.2 pav. mazge  $A_1$  išsklaidytos bangos  $A_1B_1$  elektrinio lauko kryptis visais laiko momentais sutampa su gretimame mazge  $A_2$  ta pačia kryptimi išsklaidytos bangos  $A_2B_2$  elektrinio lauko kryptimi (fazių skirtumas lygus  $2\pi$ ), todėl abi bangos  $A_1B_1$  ir  $A_2B_2$  stiprina viena kitą. Kadangi visi gardelės mazgai yra išsidėstę vienodais intervalais vienas nuo kito, tai sekančiame mazge  $A_3$  ta pačia kryptimi išsklaidytos bangos  $A_3B_3$  amplitudė taip pat susideda su bangos  $A_1B_1$  amplitude ir t.t. Todėl kryptis  $A_1B_1$ , kurią nusako kampas  $\alpha$ , atitinka difrakcinį maksimumą.

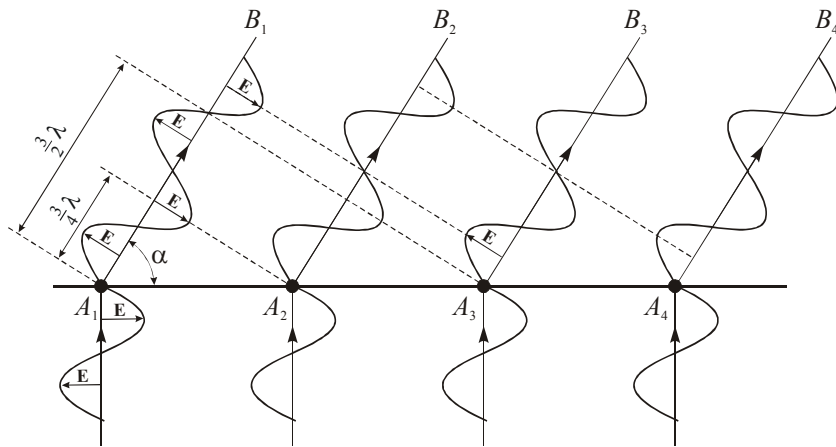
Reikia atkreipti dėmesį į tai, kad difrakcinio maksimumo sąlyga – tai sąlyga kampui  $\alpha$  (žr. 2.2 pav.). T.y., neturi reikšmės, kuriuos kristalo gardelės



2.2 pav. Difrakcinio maksimumo susidarymas

mazgus laikysime sklaidos centrais, svarbu tik, kad sklaidos *kryptis* tenkintų difrakcinio maksimumo sąlygą. Mat, atstumas tarp sklaidos srities (t.y., kristalo dalies, į kurią krinta pradinė spinduliuotė) ir skirtinguose atomuose išsklaidytų bangų spindulių sankirtos taško, kuriame stebima išsklaidytų bangų interferencija (pvz., fotografinės plėvelės) visuomet būna žymiai didesnis už sklaidos srities matmenis. Taigi, nors šie spinduliai nėra tiksliai lygiagretūs (kitaip jie nesikirstų), tas nuokrypis nuo lygiagretumo yra toks mažas, kad dažniausiai jo galima nepaisyti. Todėl, tiriant difrakciją kristaluose, galima laikyti, kad visi spinduliai, kurie susikerta duotajame taške, yra lygiagretūs, t.y., sklinda viena kryptimi, kaip pavaizduota 2.2 pav.

Dažniausiai egzistuoja kelios difrakcinių maksimumų kryptys. Visomis kitomis kryptimis kiekvienam gardelės mazgui galima surasti kitą mazgą, kuriame išsklaidytos bangos fazė yra priešinga, t.y., visus gardelės mazgus galima sugrupuoti į poras taip, kad kiekvienoje poroje išsklaidytos bangos duotąją kryptimi susidėdamos pasinaikintų. Pvz., 2.3 pav. atveju kryptimi  $A_1B_1$  mazge  $A_1$  išsklaidytos bangos elektrinio lauko vektorius visais laiko momentais yra priešingas mazge  $A_3$  ta pačia kryptimi išsklaidytos bangos elektrinio lauko vektoriui, todėl abi išsklaidytos bangos silpnina viena kitą. Analogiškai, bangos  $A_2B_2$  ir  $A_4B_4$  taip pat susidėdamos pasinaikina, ir t.t. Vadinasi, kryptimi  $A_1B_1$ , kurią nusako kampas  $\alpha$ , šiuo atveju stebimas nulinis spinduliuotės intensyvumas (*difrakcinis minimumas*). Iš šio aiškinimo akivaizdu, kad svarbiausias veiksnys difrakcijoje yra periodinis vienu ar kelių atomų išsidėstymas erdveje. Jeigu atomai būtų išsidėstę netvarkingai, tuomet, nepriklausomai nuo pasirinktos sklaidos krypties ir nuo pasirinkto atomų grupavimo į poras būdo, vienose atomų porose bangos silpnintų viena kitą, o kitose stiprintų viena kitą, todėl išsklaidytoji spinduliuotė būtų tolygiai pasiskirsčiusi visomis kryptimis (be ryškių maksimumų ir minimumų).



2.3 pav. Difrakcinio minimumo susidarymas

Pagal difrakcinį vaizdą, kuris susidaro, kai pro kristalą praeina Rentgeno spinduliuotė, galima nustatyti kristalo struktūrą (t.y., elementariojo narvelio briaunų ilgį, kampus tarp jų ir atomų išsidėstymą elementariajame narvelyje). Ir atvirkščiai: jeigu kristalo struktūra yra žinoma, tuomet pagal difrakcinį vaizdą galima nustatyti spinduliuotės bangos ilgį. Kaip ir optikoje, difrakcinio vaizdo susidarymui reikia, kad gardelės periodas būtų tos pačios eilės, kaip spinduliuotės bangos ilgis. Daugumos kristalų gardelės periodai yra kelių angstromų eilės. Todėl kristalų struktūros analizei naudojamos 0.5 – 2.5 Å bangos ilgio elektromagnetinės bangos. Šie bangos ilgiai priklauso Rentgeno spindulių diapazonui.

Esminis skirtumas tarp optinių difrakcinių gardelių ir kristalų yra tas, kad optinės gardelės yra vienmatės (periodiškumas pasireiškia tik viena kryptimi), o kristalai yra trimatės (erdvinės) difrakcinės gardelės, t.y., periodiškumas pasireiškia trim kryptim, kurios nėra lygiagrečios vienai plokštumai. Todėl difrakcinių vaizdų analizė kristalografijoje yra sudėtingesnė, negu optikoje.

## 2.2. Lauės lygtys. Brego metodas

Rentgeno spindulių difrakciją erdvinėse gardelėse galima matematiškai aprašyti, iš pradžių išnagrinėjus difrakcijos reiškinį vienmatėje (tiesinėje) gardelėje. Tarkime, kad gardelės mazgai išsidėstę ant tiesės vienodu atstumu  $a$  vienas nuo kito (žr. 2.4 pav.). Kampą tarp šios tiesės ir pradinės spinduliuotės krypties žymėsime  $\alpha_0$ , o kampą tarp tos tiesės ir stebėjimo krypties žymėsime  $\alpha$ . Kaip žinoma iš optikos, praėjusios pro difrakcinę gardelę spinduliuotės intensyvumą duotąją kryptimi lemia tos krypties lygiagrečių spindulių, praėjusių pro skirtingus plyšius (šiuo atveju – gardelės mazgus), tarpusavio interferencija. Intensyvumas nelygus nuliui tik tomis kryptimis, kuriomis fazių skirtumas tarp spindulių, einančių per gretimus mazgus, yra lygus  $2\pi n$ , kur  $n$  sveikasis skaičius. Kadangi bangos fazės pokytis dydžiu  $2\pi$  atitinka bangos ilgio nueitą kelią, tai intensyvumas nelygus nuliui tik tomis kryptimis, kuriomis interferuojančių spindulių eigos skirtumas yra lygus sveikam bangos ilgių skaičiui (pvz., 2.2 pav. atveju šis eigos skirtumas lygus vienam bangos ilgiui). Kaip matyti 2.4 pav., eigos skirtumas yra lygus

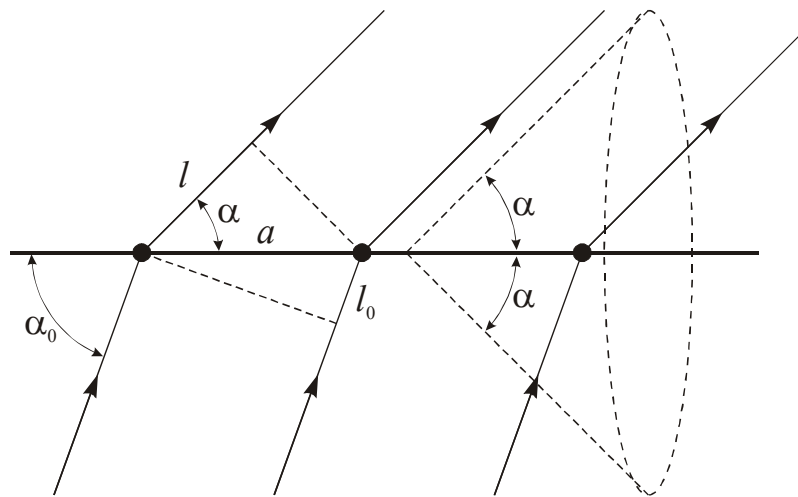
$$\Delta l = l - l_0 = a(\cos \alpha - \cos \alpha_0).$$

Vadinasi, tiesinės gardelės atveju difrakcinių maksimumų kryptys (kampas  $\alpha$ ) tenkina sąlygą

$$a(\cos \alpha - \cos \alpha_0) = H \cdot \lambda \quad (H = 0, \pm 1, \pm 2, \dots); \quad (2.2.1a)$$

čia  $\lambda$  yra spinduliuotės bangos ilgis, o sveikasis skaičius  $H$  vadinamas *interferencijos indeksu*. Jeigu kampas  $\alpha_0$  lygus  $90^\circ$  (kaip 2.2 pav.), tuomet lygtis (2.2.1a) supaprastėja:

$$a \cos \alpha = H \cdot \lambda \quad (H = 0, \pm 1, \pm 2, \dots). \quad (2.2.1b)$$



2.4 pav. Rentgeno spinduliuotės difrakcija tiesinėje gardelėje

Kryptys, kurios tenkina (2.2.1a) arba (2.2.1b) sąlygą, sudaro bendros ašies kūgių šeimą (vienas toks kūgis pavaizduotas 2.4 pav.). Vadinasi, jeigu gardelės ašiai statmenoje plokštumoje būtų patalpinta fotografinė plokštelė, tuomet, ją išryškinę, matytume koncentrinis apskritus žiedus (difrakcines juostas): kiekvienas žiedas atitiktų kažkurią interferencijos indeksio  $H$  vertę.

Dvimatėje (plokščioje) gardelėje turime periodiškumą dviem kryptim (struktūriniai elementai išsidėstę plokštumoje), todėl difrakcinių maksimumų kryptys sudaro dvi kūgių šeimas, kurios tenkina šias sąlygas:

$$a(\cos \alpha - \cos \alpha_0) = H \cdot \lambda \quad (H = 0, 1, 2, \dots); \quad (2.2.2a)$$

$$b(\cos \beta - \cos \beta_0) = K \cdot \lambda \quad (K = 0, 1, 2, \dots); \quad (2.2.2b)$$

čia  $a$  ir  $b$  yra gardelės konstantos dviem kryptim,  $\alpha_0$  ir  $\beta_0$  yra kampai tarp pradinės spinduliuotės krypties ir tų dviejų kryptų, o  $\alpha$  ir  $\beta$  yra kampai tarp difrakcinio maksimumo krypties ir tų dviejų kryptų. Difrakciniai maksimumai stebimi tik tomis kryptimis, kuriomis vienu metu galioja (2.2.2a) ir (2.2.2b) sąlygos, t.y., kuriomis kūgis iš pirmosios šeimos (lygtis (2.2.2a)) susikerta su kūgiu iš antrosios šeimos (lygtis (2.2.2b)). Du kūgiai, kurie turi bendrą viršūnę, tačiau skirtingas ašis, gali kirstis dviejose tiesėse, arba liestis vienoje tiesėje, arba liestis tik viršūnėje. Todėl fotografinėje plokštelėje matytume jau ne žiedus, o taškus, kuriuose tos sankirtos tiesės kerta plokštelę. Jeigu fotografinė plokštelė yra statmena tiesei, išilgai kurios matuojamas periodas  $a$ , tuomet tie taškai išsidėsto ant tų pačių žiedų, kuriuos nusako (2.2.1a) formulė (žr. 2.4 pav.).

Trimatėje (erdvinėje) gardelėje turime periodiškumą trimis kryptimis, todėl difrakcinių maksimumų kryptys sudaro tris kūgių šeimas, kurios tenkina šias sąlygas:

$$a(\cos \alpha - \cos \alpha_0) = H \cdot \lambda \quad (H = 0, 1, 2, \dots); \quad (2.2.3a)$$

$$b(\cos \beta - \cos \beta_0) = K \cdot \lambda \quad (K = 0, 1, 2, \dots); \quad (2.2.3b)$$

$$c(\cos \gamma - \cos \gamma_0) = L \cdot \lambda \quad (L = 0, 1, 2, \dots); \quad (2.2.3c)$$

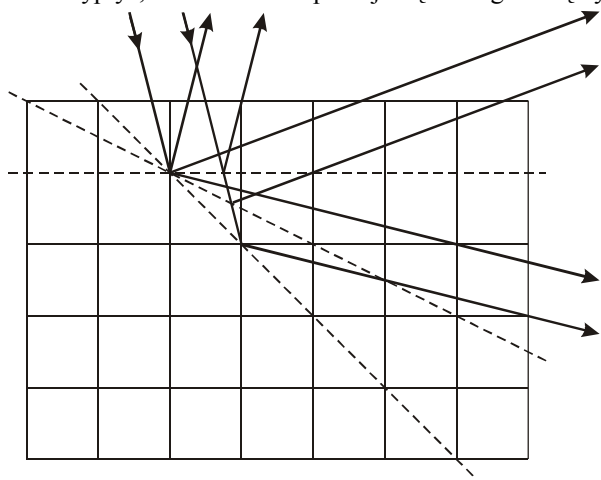
čia  $a$ ,  $b$  ir  $c$  yra gardelės konstantos trim kryptim,  $\alpha_0$ ,  $\beta_0$  ir  $\gamma_0$  yra kampai tarp pradinės spinduliuotės krypties ir tų trijų kryptų, o  $\alpha$ ,  $\beta$  ir  $\gamma$  yra kampai tarp difrakcinio maksimumo krypties ir tų trijų kryptų. Lygtys (2.2.3a–c) vadinamos **Lauės lygtimis** (jas 1912 m. išvedusio vokiečių fiziko M. Laue garbei). Difrakciniai maksimumai stebimi tik tomis kryptimis, kuriomis vienu metu galioja visos trys sąlygos, t.y., kuriomis susikerta kūgiai iš visų trijų šeimų. Laisvai pasirinkus pradinės spinduliuotės kryptį ir bangos ilgį  $\lambda$ , tokių kryptų nėra, nes trys kūgiai, turintys bendrą viršūnę, tačiau skirtingas ašis, kurios nėra lygiagrečios vienai plokštumai, bendruoju atveju nesikerta vienoje tiesėje (kaip minėta, dviejų kūgių sankirta yra tiesė, kuri bendruoju atveju nepriklauso trečiojo kūgio paviršiui). Tai galima paaiškinti ir šiek tiek kitaip. Kryptį į difrakcinį maksimumą nusako kampai  $\alpha$ ,  $\beta$  ir  $\gamma$  tarp tos krypties ir koordinatinių ašių. Tačiau, norint pilnai nusakyti kryptį erdvėje, pakanka nurodyti tik du kampus (pvz., sferines kampines koordinates: žr. 1.16 pav.). Vadinasi, kampai  $\alpha$ ,  $\beta$  ir  $\gamma$  susiję dar vienu – geometrinu – sąryšiu. Šis sąryšis yra paprasčiausias tuo atveju, kai koordinatinių ašys yra statmenos viena kitai. Tuomet

$$\cos^2 \alpha + \cos^2 \beta + \cos^2 \gamma = 1. \quad (2.2.4)$$

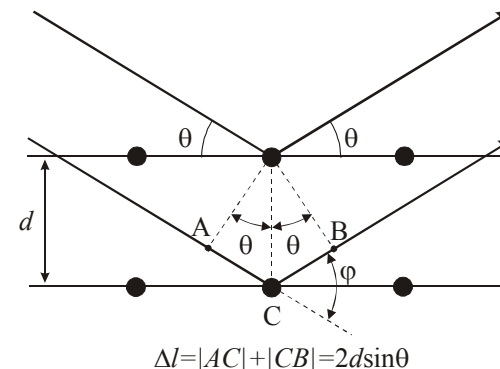
Taigi, turime keturias lygtis (2.2.3a), (2.2.3b), (2.2.3c) ir (2.2.4) su trim nežinomaisiais  $\alpha$ ,  $\beta$  ir  $\gamma$ . Kadangi lygčių skaičius didesnis už nežinomųjų skaičių, tai, laisvai pasirinkę pradinės spinduliuotės bangos ilgį ir kryptį, bendruoju atveju difrakcinio vaizdo negausime, t.y., išsklaidytoji spinduliuotė bus tolygiai pasiskirsčiusi įvairiomis kryptimis. Vadinasi, tiriant kristalo struktūrą, reikia keisti dar vieną parametą. Pvz., galima keisti bangos ilgį  $\lambda$ . Tuo tikslu vietoj būdingosios (monochromatinės) Rentgeno spinduliuotės naudojama stabdomoji (ištinio spektro) Rentgeno spinduliuotė (žr. 3 skyrių). Tuomet difrakcinio vaizdo susidaryme dalyvauja tik tam tikrų bangos ilgių spinduliuotė. Šie bangų ilgiai priklauso nuo kristalo gardelės struktūros. Kitas būdas – naudoti monochromatinę spinduliuotę, tačiau ekspozicijos metu sukti kristalą aplink vieną ašį (toks kristalo struktūros tyrimo metodas vadinamas **Brego metodu**). Tuomet kampai  $\alpha_0$ ,  $\beta_0$  ir  $\gamma_0$ , kurie įeina į Lauės lygtis (2.2.3), yra posūkio kampo funkcijos. Todėl ir kampai  $\alpha$ ,  $\beta$  ir  $\gamma$ , kurie gaunami iš šių lygčių, yra posūkio kampo funkcijos. Įrašę šias funkcijas į geometrinę sąlygą (pvz., (2.2.4)), gauname lygtį posūkio kampo atžvilgiu. Šios lygties sprendiniai nusako kristalo posūkio kampus, kuriems esant, susidaro difrakcinis vaizdas.

### 2.3. Brego lygtis

Rentgeno spindulių difrakciją, jiems praeinant pro kristalą, galima laikyti atspindžiu nuo kristalografinių plokštumų (taip vadinamos plokštumos, kuriose išsidėstę kristalo gardelės mazgai). Per kiekvieną kristalo gardelės mazgą galima nubrėžti daug kristalografinių plokštumų (žr. 2.5 pav.), ir kiekviena plokštuma atspindės bangą tokia kryptimi, kad atspindžio kampas būtų lygus kritimo kampui. Šis teiginys galioja, nepriklausomai nuo bangos ilgio. Tačiau reikia atsižvelgti į tai, kad atspindys duotąja kryptimi vyksta ne nuo vienos kristalografinės plokštumos, kuri eina per duotąjį mazgą, tačiau ir nuo visų kitų kristalografinių plokštumų, kurios lygiagrečios duotajai plokštumai. Šios bangos, kurios atsispindėjo nuo skirtingų lygiagrečių kristalografinių plokštumų, yra koherentinės, todėl interferuoja tarpusavyje. Gali atsitikti taip, kad kiekvienai kristalografinei plokštumai, kuri atspindi bangą duotąja kryptimi, galima surasti kitą lygiagrečią plokštumą, nuo kurios atsispindėjusi banga turi priešingą fazę (tiksliau, šių dviejų atsispindėjusių bangų fazių skirtumas lygus  $(2n + 1)\pi$ , kur  $n$  yra sveikasis skaičius). Tuomet visos duotąja kryptimi atsispindėjusios bangos poromis pasinaikina ir ta kryptimi stebimas nulinis intensyvumas (difrakcinis minimumas). Jeigu nuo gretimų lygiagrečių kristalografinių plokštumų atsispindėjusių bangų fazių skirtumas yra skaičiaus  $2\pi$  kartotinis, tuomet visos ta kryptimi atsispindėjusios bangos viena kitą stiprina ir stebimas difrakcinis maksimumas. Kadangi bangos fazės pokytis dydžiu  $2\pi$  atitinka bangos ilgio nueitą kelią, tai difrakcinio maksimumo sąlygą galima suformuluoti šitaip. Difrakcinių maksimumų kryptys – tai tos kryptys, kuriomis atsispindėjusių nuo gretimų lygiagrečių



2.5 pav. Bangos atspindys nuo plokštumų, kuriose išsidėstę kristalo gardelės mazgai (kristalografinių plokštumų). Gardelės mazgus vaizduoja kvadratinio tinklo mazgai, o kristalografinės plokštumos – punktyrinės linijos.



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

kristalografinių plokštumų bangų eigos skirtumas lygus sveikam bangos ilgių skaičiui (žr. 2.6 pav.). Šią sąlygą išreiškia **Brego lygtis**:

$$2d \sin \theta = n\lambda \quad (n = 0, 1, 2, \dots); \quad (2.3.1)$$

čia  $d$  yra atstumas tarp gretimų kristalografinių plokštumų duotoje šeimoje, o  $\theta$  yra kampas tarp krintančiojo spindulio ir kristalografinės plokštumos (žr. 2.6 pav.). Kampas  $\theta$  vadinamas **spindesio kampu**. Skaičius  $n$  vadinamas **atspindžio eile**. Atspindžio dėsnį (2.3.1) 1912 m. atrado anglų fizikas W. L. Bregas.

Brego lygtis (2.3.1) yra matematiškai tapati Lauės lygtims (2.2.3a–c). Todėl rentgenogramų analizę galima atlikti, ir remiantis Lauės lygtimis, ir remiantis Brego lygtimi; analizės rezultatai nuo to nepriklausys. Tačiau vienais atvejais analizę paprastesnė, kai naudojamos Lauės lygtys, o kitais atvejais – kai naudojama Brego lygtis. Pvz., tiriant monokristalo struktūrą Brego metodu, patogiau naudoti Lauės lygtis, o tiriant polikristalus – Brego lygtį.

Lauės lygtys arba Brego lygtis nusako būtinąją difrakcinio maksimumo sąlygą: skirtinguose gardelės mazguose išsklaidytų bangų (arba bangų, kurios atsispindėjo nuo skirtingų lygiagrečių kristalografinių plokštumų) fazės turi sutapti. Tačiau ši sąlyga nėra pakankama, kad duotąja kryptimi būtų stebimas difrakcinis maksimumas. Taip yra todėl, kad šios lygtys išvestos, atsižvelgiant tik į vienerūšiuose taškuose išsklaidytas bangas. Tuos vienerūšius taškus galima pasirinkti įvairiai (pvz., 2.1a pav. atveju juos galima pasirinkti Na atomuose, Cl atomuose, vienodai orientuotų Na ir Cl atomų porų centruose ir t.t.). Gali atsitikti taip, kad vieno tipo taškuose (pvz., tik Na atomuose arba tik Cl atomuose) duotąja kryptimi išsklaidytos bangos stiprina viena kitą, tačiau skirtingo tipo taškuose (pvz., Na ir Cl atomuose) ta pačia kryptimi išsklaidytos bangos silpnina viena kitą, todėl ta kryptimi išsklaidytos spinduliuotės intensyvumas sumažėja arba netgi tampa tiksliai lygus nuliui (smulkiau apie tai kalbama 2.6 ir 2.7.1 poskyriuose).

## 2.4. Kristalų simetrija

Kūno simetriją apibūdina *simetrijos operacijos* – kūno posūkiai, atspindžiai, poslinkiai (transliacijos) ir kitos operacijos, po kurių kūnas atsiduria padėtyje, neatskiriama nuo pradinės. Baigtinių matmenų kūnai neturi poslinkio simetrijos. Paslinkus kūną (pvz., kristalą) bet kuriuo atstumu, dalis kūno atsiduria erdvės srityje, kuri iki poslinkio buvo tuščia, o kita erdvės sritis išsilaisvina, todėl kūno padėtis po poslinkio yra atskiriama nuo jo padėties iki poslinkio. Poslinkio (arba transliacinę) simetriją gali turėti tik begalinių matmenų objektas, pvz., kristalo gardelė.

Su kiekviena simetrijos operacija yra susietas geometrinis elementas, kuris vadinamas *simetrijos elementu*, pvz., posūkio ašis, atspindžio plokštuma, inversijos centras, transliacijos kryptis.

Kristalo simetrijos elementai yra simetrijos plokštumos, simetrijos ašys, inversijos centras ir veidrodinės simetrijos ašys. Kristalo (baigtinių matmenų kūno) simetrijos elementai kartu yra ir kristalo gardelės (begalinių matmenų objekto) simetrijos elementai. Tačiau kristalo gardelė dar turi transliacijos ašis. Be to, kristalo gardelė gali turėti slydimo plokštumas ir sraigtinės simetrijos ašis.

**Simetrijos plokštuma** – tai plokštuma, kuri dalija figūrą į dvi lygias dalis taip, kad viena dalis yra kitos dalies veidrodinis atspindys (žr. 2.7 pav.).

**Simetrijos ašis** – tai tiesė, apie kurią pasukus tam tikru kampu figūrą, ji atsiduria padėtyje, kuri neatskiriama nuo pradinės (žr. 2.8 pav.). Figūros padėčių sutapimų skaičius, apsukus ją aplink ašį  $360^\circ$  kampu, nusako ašies eilę. Kitais žodžiais, simetrijos ašies eilė – tai  $360^\circ$  ir mažiausio simetrinio posūkio kampo santykis. Pvz., jeigu mažiausias simetrinio posūkio kampas lygus  $90^\circ$ , tuomet simetrijos ašies eilė lygi 4. Kristalo (ir kristalo gardelės) simetrijos ašys gali būti tik antros, trečios, ketvirtos ir šeštos eilės.

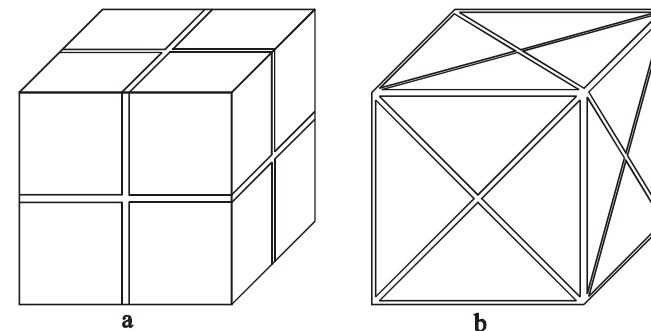
**Inversijos centras** – tai taškas, kuriame atspindėjus kitus figūros taškus, figūra atsiduria padėtyje, neatskiriama nuo pradinės (žr. 2.9 pav.).

**Veidrodinės simetrijos ašis** – tai tiesė, aplink kurią pasukus figūrą tam tikru kampu ir atspindėjus plokštumoje, kuri statmena posūkio ašiai, figūra atsiduria padėtyje, kuri neatskiriama nuo pradinės.

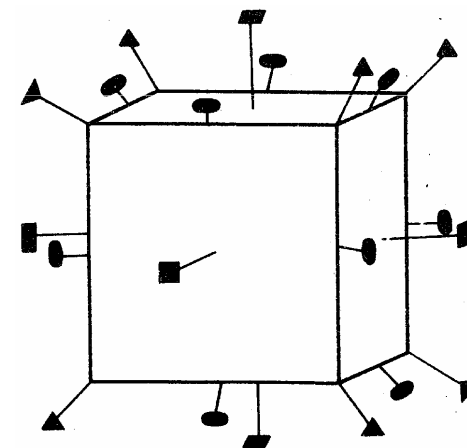
**Transliacijos ašis** yra tokia kryptis, kuria paslinkus kristalo gardelę tam tikru atstumu (gardelės periodu), gardelė atsiduria padėtyje, kuri neatskiriama nuo pradinės.

**Slydimo plokštuma** yra tokia plokštuma, kurioje atspindėjus kristalo gardelę ir lygiagrečiai tai plokštumai paslinkus kristalo gardelę puse gardelės periodo, gardelė atsiduria padėtyje, kuri neatskiriama nuo pradinės.

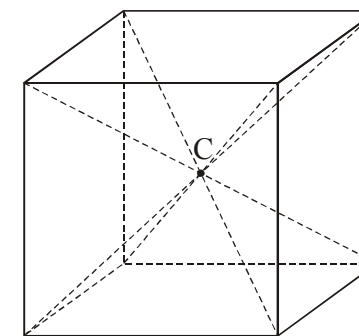
**Sraigtinės simetrijos ašis** yra tokia kryptis, aplink kurią pasukus kristalo gardelę tam tikru kampu ir išilgai tos krypties ją paslinkus tam tikru atstumu, kuris mažesnis už gardelės periodą, gardelė atsiduria padėtyje, kuri neatskiriama nuo pradinės.



2.7 pav. Devynios kubo simetrijos plokštumos (vaizduojamos dvigubomis linijomis), iš jų trys – pagrindinės (a) ir šešios – diagonalinės (b).



2.8 pav. Ketvirtos (■), trečios (▲) ir antros (●) eilės kubo simetrijos ašys.



2.9 pav. Kubo inversijos centras.



Pirmosios keturios aukščiau apibrėžtos simetrijos operacijos (atspindys plokštumoje, posūkis aplink ašį, inversija ir veidrodinis posūkis) turi vieną bendrą savybę: jų metu bent vienas erdvės taškas lieka vietoje. Inversijos metu nepasislenka inversijos centras, posūkio metu nejuda visi taškai, kurie priklauso simetrijos ašiai, o atspindžio metu nejuda visi taškai, kurie priklauso simetrijos plokštumai. Todėl šio tipo simetrija vadinama **taškine simetrija**. Visuma taškinės simetrijų operacijų, kurių neįmanoma gauti, paeiliui atliekant keletą kitų operacijų, sudaro **taškinės simetrijos grupę**. Pvz., kubo taškinės simetrijos elementai (žr. 2.7 – 2.9 pav.) yra: devynios simetrijos plokštumos (trys lygiagrečios sienoms ir šešios einančios per priešingų sienų įstrižaines), trys ketvirtos eilės simetrijos ašys (einančios per priešingų sienų centrus), keturios trečios eilės simetrijos ašys (einančios per priešingas viršūnes), šešios antros eilės simetrijos ašys (einančios per priešingų briaunų centrus) ir inversijos centras. Bet kurią kitą kubo taškinės simetrijos operaciją galima gauti, paeiliui atlikus dvi arba daugiau iš minėtųjų 23 operacijų.

Visų taškinės simetrijos elementų sankirtos taškas vadinamas **simetrijos centru**. Kubo simetrijos centras sutampa su jo inversijos centru (žr. 2.9 pav.).

Bet kurio kristalo taškine simetrija nusako viena iš 32 taškinės simetrijos grupių. Pagal tai kristalai skirstomi į 32 **kristalo simetrijos klases**. Šios 32 simetrijos klasės, savo ruožtu, yra sugrupuotos į septynias **singonijas** arba **kristalografines sistemas**. Šis grupavimas remiasi tuo, kad kristalo elementarųjį narvelį visuomet galima sudaryti taip, kad elementariojo narvelio taškinės simetrijos elementai sutaptų su visos kristalo gardelės taškinės simetrijos elementais. Mažiausio tūrio elementarusis narvelis, kurio taškinės simetrijos elementai sutampa su kristalo gardelės taškinės simetrijos elementais, vadinamas **Bravė narveliu** (XIX a. prancūzų fiziko A. Bravė garbei). Taip sudarius elementarųjį narvelį, visas įmanomas jo formas galima suklasifikuoti pagal jo briaunų ilgių santykį ir kampus tarp briaunų. Ši klasifikacija pateikta 2.1 lentelėje. Čia kampas tarp  $a$  ir  $b$  briaunų žymimas  $\gamma$ , kampas tarp  $b$  ir  $c$  briaunų –  $\alpha$ , o kampas tarp  $a$  ir  $c$  briaunų –  $\beta$  (žr. II stulpelį 2.10 pav.).

**2.1 lentelė.** Kristalografinės sistemos (singonijos)

Singonija	Bravė narvelio briaunų ilgiai	Kampai tarp Bravė narvelio briaunų
Triklininė	$a \neq b \neq c \neq a$	Visi kampai skirtingi ir nelygūs $90^\circ$
Monoklininė	$a \neq b \neq c \neq a$	$\alpha = \beta = 90^\circ, \gamma \neq 90^\circ$
Rombinė	$a \neq b \neq c \neq a$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
Tetragoninė	$a = b \neq c$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
Trigoninė	$a = b = c$	$\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ, 60^\circ, 120^\circ$
Heksagoninė	$a = b$	$\alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 60^\circ, 120^\circ$
Kubinė	$a = b = c$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ, 60^\circ$

Heksagoninė singonija išsiskiria iš kitų singonijų tuo, kad jos Bravė narvelis yra ne gretasienis, o šešiakampė prizmė (žr. 2.10 pav.).

NaCl kristalo Bravė narvelis pavaizduotas 2.1b pav. ištisinėmis linijom. Šis narvelis yra kubo formos, nes NaCl kristalas priklauso kubinei singonijai.

Bendruoju atveju Bravė narvelis nėra mažiausio tūrio elementarusis narvelis (t.y., nėra primityvusis narvelis). Taip yra todėl, kad primityviojo narvelio simetrija dažnai būna žemesnė už visos gardelės simetrija. Pvz., NaCl kristalo primityvusis narvelis, kuris pavaizduotas 2.1b pav. punktyrinėmis linijom, nėra kubo formos ir neturi kristalo gardelės taškinės simetrijos elementų. Tokiu atveju Bravė narvelyje yra daugiau negu vienas gardelės mazgas. Papildomieji mazgai gali būti išsidėstę Bravė narvelių sienų centruose arba narvelio centre. Pagal mazgų, kurie nėra Bravė narvelio viršūnėse, išsidėstymą narvelyje skiriami keturių tipų Bravė narveliai:

- 1) **primityvusis Bravė narvelis** – gardelės mazgai yra tik narvelio viršūnėse;
- 2) **centruotojo tūrio Bravė narvelis** – papildomasis mazgas yra narvelio centre;
- 3) **centruotosios bazės Bravė narvelis** – papildomieji mazgai yra dviejų priešingų narvelio sienų centruose;
- 4) **centruotojo paviršiaus Bravė narvelis** – papildomieji mazgai yra visų narvelio sienų centruose.

Kiekvienos singonijos kristalų gardelės klasifikuojamos pagal jų Bravė narvelio centravimo pobūdį. Tokiu būdu galima sudaryti 14 Bravė gardelių, kurios skiriasi viena nuo kitos singonija arba centravimo tipu (tai 1848 m. įrodė A. Bravė, kurio vardu ir pavadintos šios gardelės). 4 Bravė gardelės priklauso rombinei singonijai, 3 – kubinei singonijai, po 2 – monoklininei ir tetragoninei singonijoms, po 1 – triklininei, trigoninei ir heksagoninei singonijai. Visų šių Bravė gardelių narveliai pavaizduoti 2.10 pav.

Šarminių metalų halogenidų (pvz., NaCl) Bravė gardelė yra kubinė centruotojo paviršiaus (žr. 2.1b pav.). Tokio paties tipo yra ir daugumos metalų Bravė gardelės. Tačiau metalo gardelės bazę sudaro tik vienas atomas (o ne skirtingų atomų pora, kaip šarminių metalų halogeniduose).

Kalbant apie kristalo gardelės simetrija, reikia atsižvelgti ir į simetrijos operacijas, kurių metu nė vienas erdvės taškas nelieta vietoje, t.y., į translacijas, veidrodinius poslinkius ir sraigtnius poslinkius. Šios simetrijos operacijos kartu su taškinės simetrijos operacijom sudaro kristalo **erdvinės simetrijos grupę**. Iš viso yra 230 erdvinės simetrijos grupių.

Singonija \ Tipas	Primityvusis	Centruotojo tūrio	Centruotosios bazės	Centruotojo paviršiaus
Triklininė				
Monoklininė				
Rombinė				
Tetragoninė				
Trigoniinė				
Heksagoninė				
Kubinė				

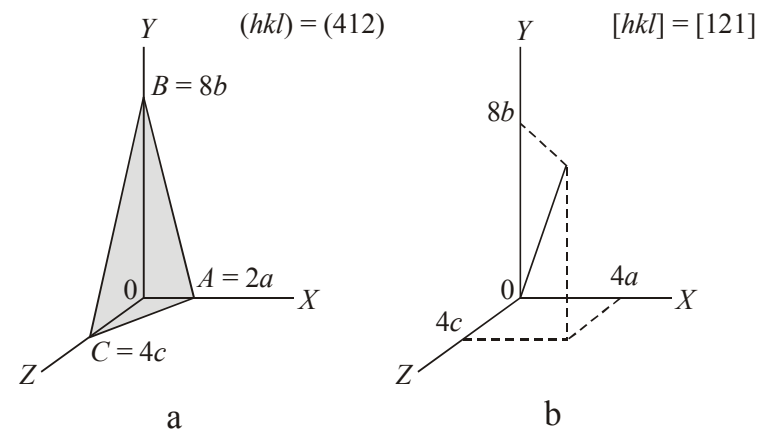
2.10 pav. Bravė gardelių elementarieji narveliai.

## 2.5. Kristalografinės plokštumos ir kristalografinės ašys. Milerio indeksai

**Kristalografinė plokštuma** – tai bet kuri plokštuma, kurioje yra nepriklausančių vieni tiesiai Bravė gardelės mazgų. Visos lygiagrečios kristalografinės plokštumos sudaro **kristalografinių plokštumų šeimą**. Kiekvienas kristalo gardelės mazgas priklauso be galo dideliame skaičiui skirtingų kristalografinių plokštumų (žr. punktyrines linijas 2.5 pav.).

**Kristalografinė ašis** – tai viena iš trijų krypčių, kurios lygiagrečios Bravė narvelio briaunoms. Kristalų struktūros analizėje kristalografinės ašys atlieka koordinatinių ašių vaidmenį.

Bet kurios kristalografinės plokštumos orientaciją galima nusakyti trimis atkarpomis  $A$ ,  $B$  ir  $C$ , kurias ta plokštuma atkerta kristalografinėse ašyse (žr. 2.11a pav.). Atkarpų  $A$ ,  $B$  ir  $C$  ilgį galima išreikšti dydžiais  $A/a$ ,  $B/b$  ir  $C/c$ ; čia  $a$ ,  $b$  ir  $c$  yra kristalo gardelės periodai (Bravė gardelės elementariojo narvelio briaunų ilgiai). 2.11a pav. atveju šie santykiai lygūs atitinkamai 2, 8 ir 4. Tačiau kristalų struktūros analizėje kristalografinės plokštumos orientaciją patogiau nusakyti ne santykiais  $A/a$ ,  $B/b$  ir  $C/c$ , o jiems atvirkštiniais dydžiais, padalintais iš didžiausio bendrojo daliklio. Šie trys skaičiai vadinami kristalografinės plokštumos Milerio indeksais. Taigi, **kristalografinės plokštumos Milerio indeksai** – tai trys neturintys bendro daliklio sveikieji skaičiai, kurie proporcingi atvirkštinėms koordinatėms taškų, kuriuose kristalografinė plokštuma kerta kristalografines ašis. Kristalografinės plokštumos Milerio indeksai rašomi tarp apvaliųjų skliaustų:  $(hkl)$ . Pvz., 2.11a pav. pavaizduotos plokštumos Milerio indeksai yra  $(412)$ . Jeigu kuris nors Milerio indeksas yra neigiamas, tuomet minusas rašomas virš skaičiaus, pvz.,  $(1\bar{1}1)$ . Plokštumos, kuri lygiagreti kuriai nors kristalografinei ašiai,



2.11 pav. Plokštumos (a) ir krypties (b) Milerio indeksų skaičiavimo pavyzdžiai.



atitinkamas Milerio indeksas lygus nuliui. Pvz., 2.1a pav. plokštumos AB'C' Milerio indeksai yra (110) (ši plokštuma lygiagreti Z ašiai), o plokštumos A'B'E Milerio indeksai yra (012) (ši plokštuma lygiagreti X ašiai). Plokštumos (100), (010) ir (001), kurios vienu metu lygiagrečios dviem kristalografinėms ašims, vadinamos **pagrindinėmis kristalografinėmis plokštumomis**. Pvz., 2.1a,b pav. pagrindinės kristalografinės plokštumos yra lygiagrečios koordinatinių plokštumoms  $x = 0$ ,  $y = 0$  ir  $z = 0$ .

Milerio indeksai naudojami, ne tik nusakant kristalografinių plokštumų orientaciją, bet ir nusakant kryptį kristale (pvz., kurią nors simetrijos ašį). **Krypties Milerio indeksai** randami tokiu būdu. Per koordinatinių pradžių tašką nubrėžiama tiesė, kuri lygiagreti duotajai kryptčiai, ir randamos kurio nors tai tiesei priklausančio taško koordinatės  $x$ ,  $y$  ir  $z$  (pražulniosios koordinatinių sistemos atveju taško koordinatės yra to taško spindulio vektoriaus pražulnioji, o ne statmenoji projekcija į koordinatinių ašis). Tos koordinatės dalinamos iš atitinkamų gardelės periodų. Šie santykiai  $x/a$ ,  $y/b$  ir  $z/c$  padalinami iš didžiausio bendrojo daliklio. Gautieji skaičiai ir yra duotosios krypties Milerio indeksai. Krypties Milerio indeksai rašomi tarp laužtinių skliaustų:  $[hkl]$ . Pvz., 2.11b pav. pavaizduotos krypties Milerio indeksai yra  $[121]$ . Kristalografinių ašių Milerio indeksai yra  $[100]$ ,  $[010]$  ir  $[001]$ .

Kubinės singonijos kristale kristalografinės plokštumos Milerio indeksai sutampa su jai statmenos krypties Milerio indeksais (ši taisyklė negalioja kitų singonijų kristalams).

Naudojant Milerio indeksus, galima trumpai nusakyti kristalografinės plokštumos arba simetrijos ašies kryptį. Pvz., kubinės singonijos kristalo simetrijos plokštumų ir ašių Milerio indeksai yra:

simetrijos plokštumos – (100), (010), (001), (110),  $(1\bar{1}0)$ , (101),  $(10\bar{1})$ , (011),  $(01\bar{1})$ ;

ketvirtos eilės simetrijos ašys –  $[100]$ ,  $[010]$ ,  $[001]$ ;

trečios eilės simetrijos ašys –  $[111]$ ,  $[11\bar{1}]$ ,  $[1\bar{1}1]$ ,  $[1\bar{1}\bar{1}]$ ;

antros eilės simetrijos ašys –  $[110]$ ,  $[1\bar{1}0]$ ,  $[101]$ ,  $[10\bar{1}]$ ,  $[011]$ ,  $[01\bar{1}]$ .

Matome, kad visų simetrijos plokštumų Milerio indeksai sutampa su ketvirtos ir antros eilės simetrijos ašių Milerio indeksais. Vadinasi, kubinės singonijos kristalo simetrijos plokštumos – tai plokštumos, kurios statmenos ketvirtos ir antros eilės simetrijos ašims.

Visuma kristalografiškai tapačių plokštumų (t.y., plokštumų, kurios atvaizduojamos viena į kitą kristalo simetrijos operacijų metu) žymima riestiniais skliaustais:  $\{hkl\}$ . Pvz., plokštumų visuma  $\{100\}$  susideda iš šešių plokštumų, kurios lygiagrečios kubo sienoms: (100),  $(\bar{1}00)$ , (010),  $(0\bar{1}0)$ , (001),  $(00\bar{1})$ .

## 2.6. Rentgenogramų analizė kubinės singonijos kristalų atveju

Kaip minėta 2.3 poskyryje, Rentgeno spindulių difrakciją kristale galima laikyti atspindžiu nuo kristalografinių plokštumų. Kubinės singonijos kristalų atveju interferencijos indeksai  $H$ ,  $K$ ,  $L$ , kurie įeina į Lauės lygtis (2.2.3a–c), yra lygūs atspindžio plokštumos Milerio indeksų ( $h$ ,  $k$  ir  $l$ ) ir atspindžio eilės  $n$  (kuri įeina į Brego lygtį (2.3.1)) sandaugai:

$$H = nh, K = nk, L = nl. \quad (2.6.1)$$

Rasime ryšį tarp kampų, nusakančių difrakcinių maksimumų kryptis, ir gardelės konstantos bei bangos ilgio. Visų pirma Brego lygtį (2.3.1) užrašysime tokiu pavidalu, kad joje nebūtų daugiklio  $n$ . Tuo tikslu vietoj tikrojo tarpplokštuminio atstumo  $d = d_{hkl}$  naudojamas  $n$  kartų mažesnis fiktyvusis tarpplokštuminis atstumas

$$d_{HKL} = \frac{d_{hkl}}{n}. \quad (2.6.2)$$

Tuomet  $n$ -tosios eilės atspindį nuo plokštumų ( $hkl$ ) formaliai galima laikyti pirmosios eilės atspindžiu nuo tos pačios orientacijos įsivaizduojamų plokštumų, kurios nutolusios viena nuo kitos  $n$  kartų mažesniu atstumu  $d_{HKL}$ . T.y., Brego lygtį (2.3.1) galima užrašyti šitaip:

$$2d_{HKL} \sin \theta = \lambda. \quad (2.6.3)$$

Praktikoje vietoj spindesio kampo  $\theta$  patogiau naudoti 2 kartus didesnę **sklaidos kampą**  $\varphi$ , t.y., kampą tarp pradinės spinduliuotės krypties ir krypties į difrakcinį maksimumą (žr. 2.6 pav.). Iš Brego lygties (2.6.3) išplaukia toks sklaidos kampo  $\varphi_{HKL}$ , atitinkančio difrakcinį maksimumą su interferencijos indeksais ( $HKL$ ), ir atitinkamo fiktyviojo tarpplokštuminio atstumo  $d_{HKL}$  sąryšis:

$$\sin \frac{\varphi_{HKL}}{2} = \frac{\lambda}{2d_{HKL}}. \quad (2.6.4)$$

Vadinasi, sklaidos kampas  $\varphi_{HKL}$  mažėja, augant fiktyviajam tarpplokštuniam atstumui  $d_{HKL}$ . Kubinės singonijos kristale  $d_{HKL}$  šitaip susijęs su interferencijos indeksais  $H$ ,  $K$ ,  $L$ :

$$d_{HKL}^2 = \frac{a^2}{H^2 + K^2 + L^2}. \quad (2.6.5)$$

Taigi, kubinės simetrijos kristale fiktyvųjį tarpplokštuminį atstumą nusako kristalo gardelės konstanta  $a$  ir interferencijos indeksų kvadratų suma. Įrašę (2.6.5) į (2.6.4), randame

$$\sin^2 \frac{\varphi_{HKL}}{2} = \frac{\lambda^2}{4a^2} (H^2 + K^2 + L^2). \quad (2.6.6)$$

Iš šios formulės išplaukia, kad mažiausią sklaidos kampą (po nulinio) atitinka interferencijos indeksai (100) (nuo šiol, užrašant interferencijos indeksų trejetą, bus turimi omenyje visi įmanomi šių indeksų ir jiems priešingų indeksų kėliniai):

$$\sin^2 \frac{\varphi_{001}}{2} = \frac{\lambda^2}{4a^2}. \quad (2.6.7)$$

Interferencijos indeksų (110) kvadratų suma yra antroji pagal didumą, po to eina (111), (200), (210), (211) ir t.t. Pirmieji 40 interferencijos indeksų trejetų, išdėstyti kvadratų sumos didėjimo tvarka (t.y., sklaidos kampo didėjimo tvarka), yra:

$$\begin{aligned} &(100), (110), (111), (200), (210), (211), (220), (300), (221), (310), \\ &(311), (222), (320), (321), (400), (410), (322), (330), (411), (331), \\ &(420), (421), (332), (422), (500), (430), (510), (431), (511), (333), \\ &(520), (432), (521), (440), (441), (522), (530), (433), (531), (600). \end{aligned} \quad (2.6.8a)$$

Jeigu Bravė gardelės elementarusis narvelis yra sudėtingas (t.y., centruotojo tūrio, centruotosios bazės arba centruotojo paviršiaus), tuomet kai kuriomis kryptimis, kurios tenkina Lauės lygtis ir Brego lygtį, difrakcinių maksimumų nesimato. Taip yra todėl, kad, skaičiuojant interferencijos indeksus Lauės lygtyse arba atspindžio eilę Brego lygtyje, atsižvelgiama tik į Bravė narvelio viršūnėse esančius gardelės mazgus. Bangos, kurios buvo išsklaidytos narvelio viršūnėje ir narvelio centre arba narvelio sienos centre, tam tikromis kryptimis silpnina viena kitą dėl tarpusavio interferencijos. Kaip žinoma iš optikos, duotąją kryptimi interferencijos minimumas stebimas tuo atveju, jeigu interferuojančių bangų eigos skirtumas ta kryptimi yra lygus nelyginiam pusbangių skaičiui, t.y., pusiniam bangų skaičiui (pvz., 2.3 pav. šis eigos skirtumas lygus  $3\lambda/2$ ). Jeigu tokia kryptis sutampa su kryptimi, nusakančia difrakcinio maksimumo kryptį pagal Lauės lygtis arba Brego lygtį, tuomet to difrakcinio maksimumo nesimato. Pvz., 2.1a pav. plokštumos ABC ir A'B'C' laikomos gretimomis kristalografinėmis plokštumomis (t.y., atitinka dvi plokštumas, kurios pavaizduotos 2.6 pav.), nors tarp jų dar yra kristalografinė plokštuma FGF', nuo kurios Rentgeno spinduliai taip pat atsispindi. Jeigu tam tikra kryptimi spindulių, atsispindėjusių nuo plokštumų ABC ir A'B'C', eigos skirtumas lygus  $\lambda$ , tuomet ta pačia kryptimi spindulių, atsispindėjusių nuo plokštumų ABC ir FGF', eigos skirtumas lygus  $\lambda/2$ . Todėl ta kryptimi šie spinduliai „panaikina“ vienas kitą, nors pagal Brego lygtį ta kryptimi turėtų būti stebimas intensyvumo maksimumas.

Taigi, visi difrakciniai maksimumai (2.6.8a) matomi vienu metu tik tuo atveju, kai kubinės singonijos kristalo Bravė gardelė yra primityvioji. Kubinės centruotojo paviršiaus gardelės atveju iš (2.6.8a) sekos reikia pašalinti trejetus, kurių indeksai yra skirtingo lyginumo, o kubinės centruotojo tūrio gardelės atveju – trejetus, kurių indeksų suma yra nelyginis skaičius. Tokiu būdu gauname tokias interferencijos indeksų trejetų sekas (sklaidos kampo didėjimo tvarka):

$$\begin{aligned} &\text{kubinės centruotojo tūrio Bravė gardelės atveju –} \\ &(110), (200), (211), (220), (310), (222), (321), (400), (330), (411), \\ &(420), (332), (422), (510), (431), (521), (440), (530), (433), (600); \end{aligned} \quad (2.6.8b)$$

$$\begin{aligned} &\text{kubinės centruotojo paviršiaus Bravė gardelės atveju –} \\ &(111), (200), (220), (311), (222), (400), (331), (420), (422), (511), \\ &(333), (440), (531), (600), (442). \end{aligned} \quad (2.6.8c)$$

Kadangi (2.6.6) lygybės kairioji pusė negali būti didesnė už vienetą, tai stebimų difrakcinių maksimumų interferencijos indeksai yra apriboti iš viršaus: didžiausia įmanoma interferencijos indeksų kvadratų suma lygi  $4a^2/\lambda^2$ . Pvz., jeigu kristalo gardelės konstantos ir spinduliuotės bangos ilgio santykis lygus 2, ši maksimali kvadratų suma lygi 16, t.y., gali atsirasti tik maksimumai nuo (100) iki (400). Be to, iš čia išplaukia, kad bangos ilgis  $\lambda$  neturi būti didesnis už  $2a$ ; priešingu atveju matysis tik nulinis maksimumas (000).

## 2.7. Darbas Nr. 1. Monokristalo struktūros rentgeninė analizė Brego metodu

### 2.7.1. Brego metodas

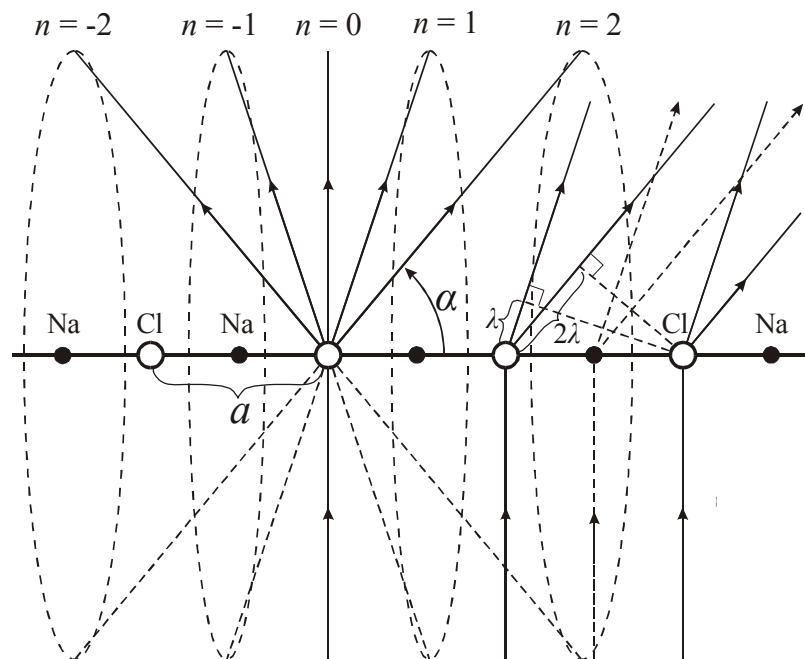
Tiriant kristalą **Brego metodu**, kristalas apšviečiamas siauru žinomo bangos ilgio monochromatinės Rentgeno spinduliuotės pluoštelio, kurio kryptis yra statmena kuriai nors kristalografinei ašiai, ir kristalas nuolat sukamas aplink šią ašį. Vadinasi, vienas (pvz., pirmasis) iš trijų kampų  $\alpha_0$ ,  $\beta_0$  ir  $\gamma_0$ , kurie įeina į Lauės lygtis (2.2.3a–c), yra pastovus ir lygus  $\alpha_0 = 90^\circ$  (kaip 2.2 pav.), o kampai  $\beta_0$  ir  $\gamma_0$  nuolat kinta. Tuomet pirmoji Lauės lygtis yra tokio pavidalo:

$$a \cos \alpha = n\lambda \quad (n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots); \quad (2.7.1)$$

čia  $a$  yra kristalo gardelės konstanta kryptimi, kuri lygiagreti sukimo ašiai (kubinės simetrijos kristalo atveju kitos dvi gardelės konstantos taip pat lygios  $a$ ). T.y., kampas  $\alpha$  tarp difrakcinio maksimumo krypties ir duotosios kristalografinės ašies gali įgyti tik vertes, kurios tenkina šią sąlygą:

$$\cos \alpha = \frac{n\lambda}{a} \quad (n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots). \quad (2.7.2)$$

Šios kryptys sudaro kūgių šeimą, kuri pavaizduota 2.12 pav. Difrakcinis vaizdas fiksuojamas fotografinio popieriaus juostoje, kuri sulenкта į cilindrą, kurio ašis sutampa su sukimo ašimi (žr. 2.13 pav.). Difrakcinių maksimumų pėdsakai (jie vadinami **refleksais**) fotografinio popieriaus juostoje išsidėsto ant linijų, kuriose kūgiai, tenkinantys (2.7.2) sąlygą, kerta fotografinę juostą (žr. 2.13 pav.). Kiekviena linija atitinka apibrėžtą interferencijos indekso  $n$  vertę. Linija, kurios plokštumoje guli pradinės spinduliuotės kryptis, atitinka  $n = 0$ , gretimos linijos atitinka  $n = 1$  ir  $n = -1$ , tolimesnės linijos atitinka  $n = \pm 2$  ir t.t. Ištiesus ir išryškinus juostą, šios linijos virsta lygiagrečiomis tiesėmis, kurių kiekviena sudaryta iš atskirų refleksų. Šios tiesės nėra ištisinės, nes difrakciniai maksimumai atsiranda tik tam tikrose tiksliai apibrėžtose kristalo



2.12 pav. Kūgiai, kurių paviršiams priklauso difrakcinių maksimumų kryptys, kai pradinės spinduliuotės kryptis yra statmena kristalografinei ašiai.

padėtyse, kurioms esant, trys kūgiai, atitinkantys kiekvieną iš trijų Lauė lygčių, kertasi vienoje tiesėje (žr. 2.2 poskyrį). Žinant interferencijos indeksą  $n$ , kuris atitinka duotąją refleksų tiesę, ir išmatavus atitinkamą kampą  $\alpha$  tarp sukimo ašies ir krypties į difrakcinį maksimumą, pagal (2.7.2) formulę galima apskaičiuoti gardelės konstantą  $a$  kryptimi, kuri lygiagrečiai nejudančiai kristalografinei ašiai (t.y., sukimo ašiai):

$$a = \frac{n\lambda}{\cos \alpha}. \quad (2.7.3)$$

Kitas dvi gardelės konstantas galima išmatuoti tokiu pačiu būdu: pakanka parinkti kristalo sukimo ašį taip, kad ji būtų lygiagrečiai kitai kristalografinei ašiai.

Tuo atveju, kai kristalo bazė sudaryta iš dviejų arba daugiau atomų (pvz., Na ir Cl atomai NaCl kristale), refleksų ryškumui gali turėti didelę įtaką bangų išsklaidytų skirtingos rūšies atomuose, tarpusavio interferencija. Pvz., jeigu spindulių, kurie eina per gretimus Cl atomus, eigos skirtumas yra lygus  $\lambda$ , tuomet tos pačios krypties spindulių, kurie eina per gretimus Cl ir Na atomus,

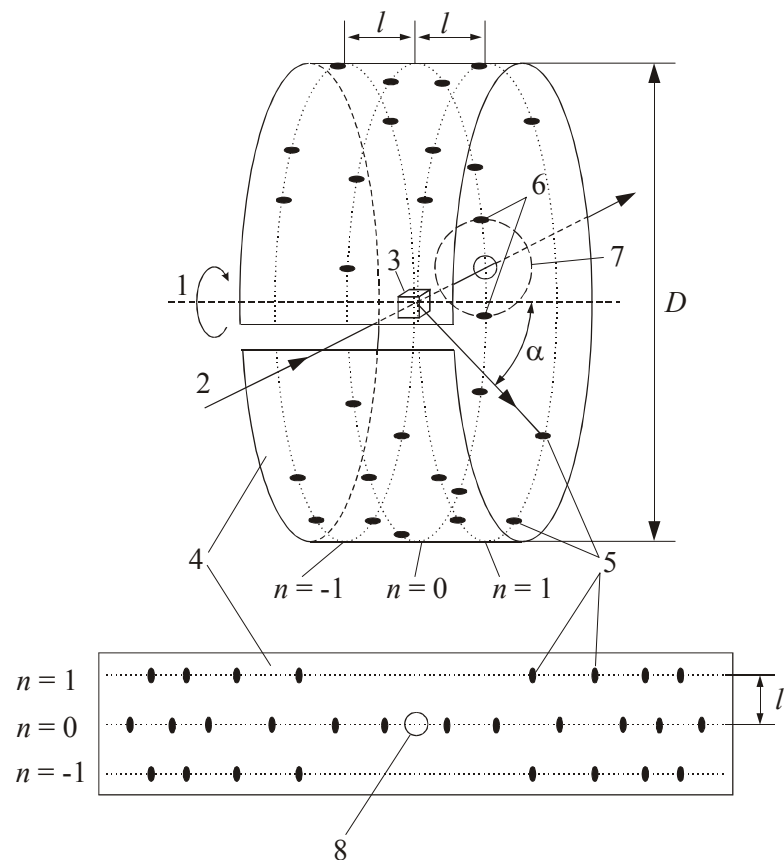
eigos skirtumas yra  $\lambda/2$  (žr. 2.12 pav.). Vadinasi, šia kryptimi bangos, kurios išsklaidytos gretimuose Cl ir Na atomuose, silpnina viena kitą. Šios dvi bangos tiksliai nepanaikina viena kitos, nes Cl ir Na atomai nėra vienas kitam lygiavertiniai, tačiau šis susilpnėjimas yra toks žymus, kad atitinkamas difrakcinis maksimumas gali būti nepastebimas. Dėl šios priežasties NaCl ir kitų šarminių metalų halogenidų kristalų (pvz., LiF, LiCl, NaI, NaF, KF, KCl) rentgenogramose gali nesimatyti maksimumų, kurių bent vienas interferencijos indeksas yra nelyginis. Tokiu atveju matomųjų difrakcinių maksimumų kryptys yra tokios pačios, kaip ir kubinės simetrijos kristale su primitivia Bravė gardele, kurios konstanta 2 kartus mažesnė už tikrąją gardelės konstantą (tokią gardelę gautume, laikydami, kad Na ir Cl atomai yra fiziškai lygiavertiniai).

### 2.7.2. Darbo užduotys

1. Cilindrinėje Rentgeno kameroje centruoti kubinės singonijos monokristalą ir gauti difrakcinį vaizdą, kai kristalas sukamas aplink vieną kristalografinę ašį, kuri statmena pradinės monochromatinės spinduliuotės kryptčiai.
2. Išmatuoti atstumą tarp dviejų tiesių, kurioms priklauso difrakcinių maksimumų pėdsakai fotografinio popieriaus juostelėje.
3. Naudojant žinomus Rentgeno kameros skersmenį ir spinduliuotės bangos ilgį, apskaičiuoti kristalo gardelės konstantą  $a$  ir jos paklaidą  $\Delta a$ .

### 2.7.3. Matavimų tvarka

1. Bandinys (šarminio metalo halogenido kristalas) centruojamas cilindrinėje Rentgeno kameroje.
2. Į Rentgeno kamerą įdedama fotografinio popieriaus juostelė. Dedant juostelę į kamerą, juostelė priglaudžiama prie kameros vidinio paviršiaus (žr. 2.13 pav.). Dedant juostelę, negalima kliudyti bandinio. Užkliudžius bandinį, jį reikia centruoti iš naujo.
3. Rentgeno kamera pastatoma ant Rentgeno aparato taip, kad kameros anga, pro kurią į ją pateks Rentgeno spinduliuotė, būtų tiksliai prieš Rentgeno vamzdžio gaubto angą, iš kurios sklis Rentgeno spinduliuotė.
4. Įjungiamas Rentgeno aparatas.
5. Įjungiamas bandinio sukimo mechanizmas, kuris yra ant kameros.
6. Stebint bandinio šešėlį ekrane, kuris yra ant Rentgeno kameros, įsitikinama, kad bandinys yra teisingai centruotas. Jeigu bandinio šešėlio nesimato arba jis nėra horizontalus, bandinį reikia centruoti iš naujo.
7. Ekspozicijos (švitinimo) trukmė – ne mažiau 30 min (kuo ilgesnė ekspozicija, tuo ryškesnis difrakcinis vaizdas).
8. Rentgeno aparatas išjungiamas, juostelė išryškinama, užfiksuojama ir išdžiovinama.



2.13 pav. Difrakcinių maksimumų pėdsakų (refleksų) išsidėstymas fotografinio popieriaus juostelėje, tiriant monokristalą Brego metodu. 1 – kristalo sukimo ašis, kuri lygiagrečiai vienai iš kristalografinių ašių, 2 – pradinės Rentgeno spinduliuotės kryptis, kuri statmena sukimo ašiai, 3 – tiriamasis monokristalas, 4 – fotografinis popierius, 5, 6 – refleksai, 7 – žiedas, į kurį išplistų refleksai 6, jeigu tiriamasis bandinys būtų polikristalinis (žr. 2.15 pav. ir 2.8.1 poskyrio paskutinę pastraipą), 8 – anga, kuri skirta bandinio stebėjimui (žr. matavimų tvarkos 6 punktą; anga, pro kurią į kamerą patenka Rentgeno spinduliuotė, yra priešingoje kameros pusėje).  $n$  – interferencijos indeksas, atitinkantis nejudančią kristalografinę ašį. Taškinėms linijoms pažymėtos tiesės, kuriose išsidėsto refleksai su vienuodu  $n$ .  $\alpha$  – kampas tarp sukimo ašies ir difrakcinio maksimumo krypties,  $D$  – Rentgeno kameros skersmuo,  $l$  – atstumas tarp duotosios refleksų tiesės ir tiesės, kuri atitinka  $n = 0$ .

#### 2.7.4. Rentgenogramos analizė

Rentgenogramoje (išryškintoje juostelėje) randami difrakcinių maksimumų pėdsakai (refleksai). Randamos dvi lygiagrečios refleksų tiesės, kurios atitinka interferencijos indekso vertes  $n = 0$  ir  $n = 2$ . Refleksų, kurie atitinka  $n = 1$ , ryškumas yra žymiai mažesnis, ir jų gali nesimatyti (žr. 2.7.1 poskyrį). Tiesė  $n = 0$  eina per tašką, kuriame krintantis spindulys kerta fotografinio popieriaus juostelę, t.y., per angą juostelėje (žr. 2.13 pav.). Jeigu ekspozicijos metu bandinys nebuvo tinkamai centruotas, refleksai gali sudaryti grupes po du arba tris. Tokiu atveju tiesės brėžiamos per vidutines refleksų padėtis. Išmatuojamas atstumas  $l$  tarp tiesių (žr. 2.13 pav.). Kampas  $\alpha$  tarp difrakcinio maksimumo krypties ir sukimo ašies randamas pagal formulę

$$\alpha = \arctg \frac{D}{2l}; \quad (2.7.4)$$

čia  $D$  yra Rentgeno kameros skersmuo (tiksliau, cilindro, į kurį buvo sulenkta fotografinė juosta, skersmuo: žr. 2.13 pav.). Pagal (2.7.3) formulę apskaičiuojama kristalo gardelės konstanta  $a$ . Kadangi Rentgeno vamzdyje naudojamas vario anodas, vietoj  $\lambda$  (2.7.3) formulėje reikia naudoti vario  $K_{\alpha 1}$  ir  $K_{\alpha 2}$  linijų bangų ilgių vidurkį, kuris lygus  $1.544 \text{ \AA}$  (vario  $K_{\beta}$  liniją nufiltruoja nikelio folija, kuri yra Rentgeno kameroje).

Apskaičiuojama gardelės konstantos  $a$  matavimo paklaida  $\Delta a$ :

$$\Delta a = \left| \frac{da}{d\alpha} \right| \Delta \alpha = a \cdot |\operatorname{tg} \alpha| \cdot \Delta \alpha = a \frac{D}{2l} \Delta \alpha; \quad (2.7.5)$$

čia  $\Delta a$  yra kampo  $\alpha$  matavimo paklaida (išreikšta radianais). Ji priklauso nuo skersmens  $D$  matavimo paklaidos  $\Delta D$  ir nuo atstumo tarp refleksų tiesių matavimo paklaidos  $\Delta l$  (žr. (2.7.4) formulę):

$$\Delta \alpha = \sqrt{\left( \frac{\partial \alpha}{\partial D} \Delta D \right)^2 + \left( \frac{\partial \alpha}{\partial l} \Delta l \right)^2} = \frac{1}{2l} \cdot \frac{1}{1 + \left( \frac{D}{2l} \right)^2} \sqrt{(\Delta D)^2 + \left( \frac{D}{l} \right)^2 (\Delta l)^2}. \quad (2.7.6)$$

Atstumo  $l$  matavimo paklaida  $\Delta l$  priklauso nuo difrakcinio vaizdo kokybės ir gali siekti kelis milimetrus.  $\Delta D$  priklauso nuo to, kaip tiksliai fotografinis popierius buvo priglundęs prie kameros sienelių, ir taip pat gali siekti kelis milimetrus.

Gautoji  $a$  vertė palyginama su šių kristalų gardelės konstantom:

$$\begin{array}{lll} \text{LiF} - a = 4.03 \text{ \AA}, & \text{NaF} - a = 4.63 \text{ \AA}, & \text{LiCl} - a = 5.14 \text{ \AA}, \\ \text{NaCl} - a = 5.64 \text{ \AA}, & \text{LiI} - a = 6.01 \text{ \AA}, & \text{KBr} - a = 6.60 \text{ \AA}. \end{array}$$

Šio palyginimo metu reikia atsižvelgti į  $a$  matavimo paklaidą  $\Delta a$ . Nustatoma, kuris iš šių kristalų buvo tiriamas.

### 2.7.5. Kontroliniai klausimai

1. Simetrijos elemento sąvoka. Kristalų gardelių simetrijos elementų rūšys.
2. Bravė gardelės sąvoka.
3. Kristalografinės sistemos.
4. Kubinės singonijos kristalo taškinės simetrijos elementai.
5. Bravė gardelių rūšys.
6. Kristalografinių ašių ir plokštumų sąvokos. Krypties ir kristalografinės plokštumos Milerio indeksai.
7. Lauės lygtys. Interferencijos indeksai.
8. Brego lygtis.
9. Brego metodo esmė. Kodėl ekspozicijos metu kristalas yra sukamas?

## 2.8. Darbas Nr. 2. Polikristalo struktūros rentgeninė analizė

### 2.8.1. Polikristalų tyrimo metodo teorija

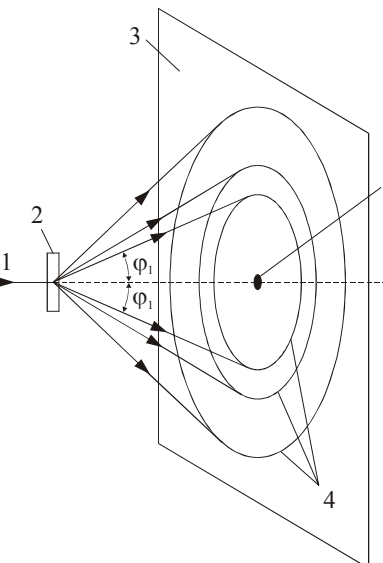
Polikristalinę medžiagą sudaro netvarkingai orientuoti  $\sim 0.01$  mm dydžio kristalai, kurie vadinami *kristalitais*. Pvz., tokios struktūros yra metalai ir jų lydiniai.

Kaip minėta 2.2 ir 2.3 poskyriuose, vykstant monochromatinės Rentgeno spindulių difrakcijai monokristale, difrakciniai maksimumai stebimi keliomis tiksliai apibrėžtomis kryptimis. Kiekviena iš šių kryptų atitinka atspindį nuo tam tikros kristalografinių plokštumų šeimos (žr. 2.6 pav.). Jeigu kristalas būtų sukamas aplink pradinės spindulių kryptį, taip pat suktųsi ir difrakcinis vaizdas. Kadangi pakankamai didelių matmenų polikristaliniame bandinyje yra visomis kryptimis orientuotų kristalitų, tai išsklaidytos Rentgeno spindulių difrakcinių maksimumų kryptys sudaro bendros viršūnės kūgių šeimą, kurios simetrijos ašis sutampa su pradinės spindulių kryptimi. T.y., šiai kryptiai statmenoje fotografinėje plokštelėje spindulių pėdsakai sudaro ištisinius apskritimus – *difracinius žiedus* (žr. 2.14 pav.).

Jeigu kristalas priklauso kubinei singonijai, tuomet difrakcinių maksimumų kryptys priklauso tik nuo bangos ilgio  $\lambda$ , gardelės konstantos  $a$  ir interferencijos indeksų kvadratų sumos (žr. (2.6.6)). Vadinasi, sunumeravus visus difracinius žiedus sklaidos kampo didėjimo tvarka ir priskyrus kiekvienam iš jų interferencijos indeksų trejetą ( $HKL$ ) ta pačia tvarka, kuria tie trejetai išdėstyti vienoje iš sekų (2.6.8a,b,c), pagal (2.6.6) formulę galima apskaičiuoti gardelės konstantą  $a$ :

2.14 pav. Rentgeno spindulių difrakcija polikristale.

1 – pradinė spindulių kryptis,  
2 – tiriamasis polikristalas,  
3 – fotografinė plokštelė,  
4 – difrakciniai žiedai,  
5 – pradinės krypties pluošto pėdsakas.  
 $\varphi_1$  – sklaidos kampas, atitinkantis pirmąjį difracinį žiedą.



$$a = \frac{\lambda}{2 \sin \frac{\varphi_{HKL}}{2}} \sqrt{H^2 + K^2 + L^2}. \quad (2.8.1)$$

Mažiausio skersmens žiedui priskiriamas pirmasis indeksų trejetas (t.y., (100) primitivios Bravė gardelės atveju, (110) centruotojo tūrio gardelės atveju, arba (111) centruotojo paviršiaus gardelės atveju), sekančiam pagal didumą žiedui priskiriamas antrasis trejetas iš tos pačios sekos ir t.t. Taigi, atliekama tiek pat nepriklausomų gardelės konstantos matavimų, kiek yra difracinių žiedų.

Šiuo metodu galima ne tik išmatuoti gardelės konstantą, bet ir nustatyti kubinės simetrijos kristalo Bravė gardelės tipą (primitivioji, centruotojo tūrio arba centruotojo paviršiaus). Tuo tikslu reikia rasti, kuri iš trijų sekų (2.6.8a,b,c) atitinka išmatuotų sklaidos kampų seką. Teisingai pasirinkus interferencijos indeksų trejetų seką, pagal skirtingus sklaidos kampus apskaičiuotos gardelės konstantos vertės sutampa.

Cilindrinėje Rentgeno kameroje gautų difracinių žiedų išsidėstymą (2.15 pav.) galima nesunkiai susieti su difrakciniu vaizdu, kuris gaunamas, tiriant monokristalą Brego metodu (žr. 2.13 pav.). Pagal Brego atspindžio dėsnį (2.6 pav.) difracinių maksimumų kryptys priklauso tik nuo kristalografinių plokštumų orientacijų. Plokštumos orientaciją nusako jos normalės kryptis (plokštumos normalė – tai tiesė, kuri statmena plokštumai). Šią kryptį galima nusakyti įvairiais būdais: pvz., nurodant tos krypties vienetinio vektoriaus projekcijas į koordinatinių ašis arba nurodant du kampus tarp tos krypties ir kitų dviejų kryptų. Tačiau, norint susieti Brego metodu gautų refleksų padėtis su

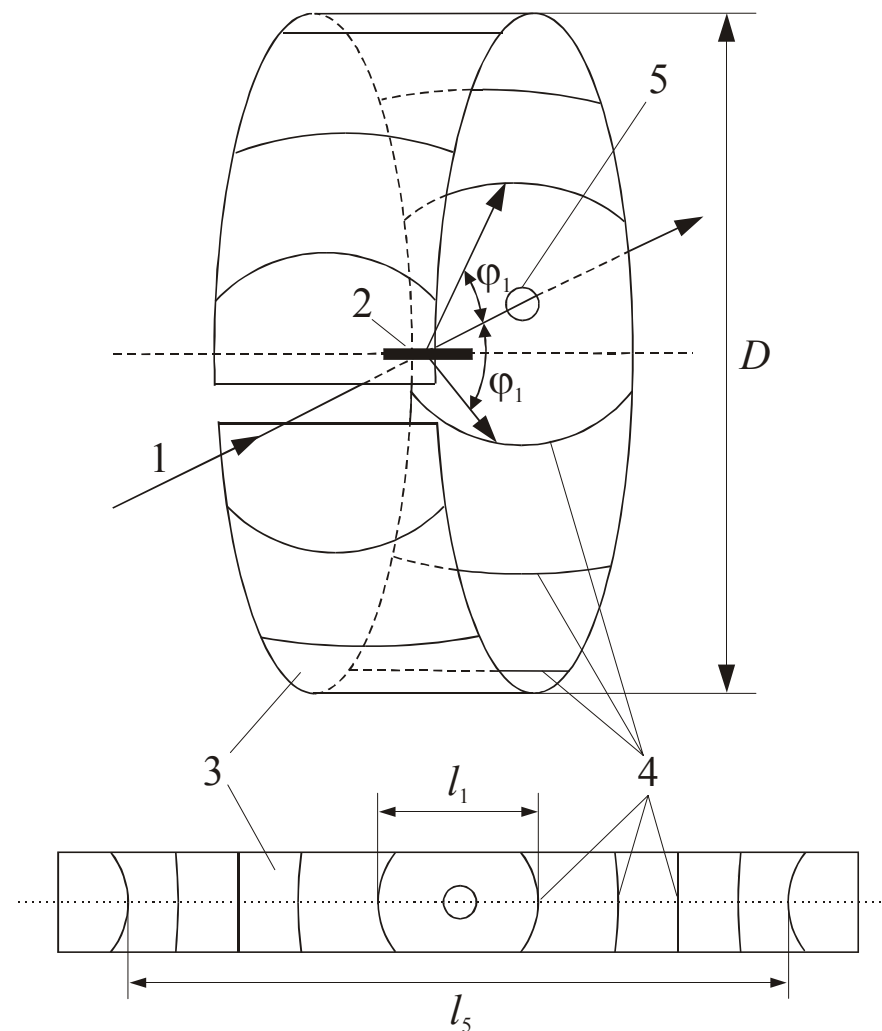
difrakcinių žiedų padėtimis, kristalografinės plokštumos normalės kryptį patogiau nusakyti, nurodant jos *posūkio* kampus aplink dvi tarpusavyje statmenas kryptis. Tarkime, kad šios dvi kryptys – tai cilindrinės kameros simetrijos ašis (2.13 pav. 1 tiesė) ir pradinės spinduliuotės kryptis (2.13 pav. 2 tiesė). Tarkime, kad pradinė plokštumos normalės kryptis lygiagreti 2.13 pav. 1 tiesei. Tuomet šią normalę galima nukreipti bet kuria kita kryptimi tokiu būdu: iš pradžių normalė pasukama tam tikru kampu aplink 2 tiesę, o po to – aplink 1 tiesę. Šie du posūkio kampai ir nusako duotosios kristalografinės plokštumos orientaciją. Tiriant monokristalą Brego metodu, kinta tik posūkio aplink 1 tiesę kampas. Polikristalo kristalitų orientacija yra netvarki. T.y., efektas toks pats, lyg kiekviena kristalografinė plokštuma būtų vienu metu sukama aplink abi minėtąsias tieses. Vadinasi, lyginant su Brego metodu, prisideda sukimas aplink pradinės spinduliuotės kryptį. Sukant kristalografinę plokštumą aplink pradinės spinduliuotės kryptį, spindesio kampas  $\theta$  nesikeičia (žr. 2.6 pav.). Vadinasi, jeigu prieš šį posūkį galiojo difrakcinio maksimumo sąlyga (2.3.1), tai ji lieka galioti ir po posūkio, o sukimo metu difrakcinio maksimumo pėdsakas fotografiniame popieriuje brėžia uždara kreivę. Taip susidaro difrakcinis žiedas. T.y., pereinant nuo monokristalo prie polikristalo, kiekvienas refleksas “išplinta” į žiedą (žr. 2.13 pav.). Tokiu būdu skirtingi refleksai, kurių kryptys sudaro vienodus kampus su pradinės spinduliuotės kryptimi, susilieja į vieną difrakcinį žiedą. Pvz., jeigu tiriamas kubinės simetrijos polikristalas, tuomet visi refleksai, kurių interferencijos indeksų kvadratų suma yra vienoda (pvz., (333) ir (115)), priklauso vienam difrakciniam žiedui.

### 2.8.2. Darbo užduotys

1. Cilindrinėje Rentgeno kameroje centruoti kubinės singonijos polikristalinį bandinį (vario viela) ir gauti difrakcinį vaizdą.
2. Išmatuoti kampus tarp pradinės spinduliuotės krypties ir difrakcinių maksimumų kryptių.
3. Naudojant žinomą spinduliuotės bangos ilgį, apskaičiuoti kristalo gardelės konstantą ir jos paklaidą, nustatyti kristalo Bravė gardelės tipą.

### 2.8.3. Matavimų tvarka

1. Bandinys (vario viela) centruojamas cilindrinėje Rentgeno kameroje.
2. Į Rentgeno kamerą įdedama fotografinio popieriaus juostelė. Dedant juostelę į kamerą, juostelė priglaudžiama prie kameros vidinio paviršiaus (žr. 2.15 pav.). Dedant juostelę, negalima kliudyti bandinio. Užkliudžius bandinį, jį reikia centruoti iš naujo.
3. Rentgeno kamera pastatoma ant Rentgeno aparato taip, kad kameros anga, pro kurią į ją pateks Rentgeno spinduliuotė, būtų tiksliai prieš Rentgeno vamzdžio gaubto angą, iš kurios sklis Rentgeno spinduliuotė.



2.15 pav. Polikristalo struktūros rentgeninė analizė, naudojant cilindrinę Rentgeno kamerą. 1 – pradinė spinduliuotės kryptis, 2 – tiriamasis polikristalas, 3 – fotografinio popieriaus juostelė, 4 – difrakciniai žiedai, 5 – anga, kuri skirta bandinio stebėjimui (žr. matavimų tvarkos 5 punktą; anga, pro kurią į kamerą patenka Rentgeno spinduliuotė, yra priešingoje kameros pusėje).  $\varphi_1$  – sklaidos kampas, atitinkantis pirmąjį difrakcinį žiedą.  $l$  – atstumas, kuris naudojamas, skaičiuojant sklaidos kampą.  $D$  – Rentgeno kameros skersmuo.

4. Įjungiamas Rentgeno aparatas.
5. Stebint bandinio šešėlį ekrane, kuris yra ant Rentgeno kameros, įsitikinama, kad bandinys yra teisingai centruotas. Jeigu bandinio šešėlio nesimato arba jis nėra horizontalus, bandinį reikia centruoti iš naujo.
6. Ekspozicijos (švitinimo) trukmė – ne mažiau 30 min.
7. Rentgeno aparatas išjungiamas, juostelė išryškinama, užfiksuojama ir išdžiovinama.

#### 2.8.4. Rentgenogramos analizė

Išmatuojami sklaidos kampai. Tuo tikslu išmatuojamas atstumas  $l$  tarp difrakcinio žiedo taškų, kurie guli ant tiesės, einančios per juostelės vidurį (taškinė linija 2.15 pav. apačioje). Po to atitinkamas sklaidos kampas  $\varphi$  apskaičiuojamas pagal formulę

$$\varphi = \frac{l}{D} \text{ (rad);} \quad (2.8.2)$$

čia  $D$  yra Rentgeno kameros skersmuo (žr. 2.15 pav.). Visi difrakciniai žiedai sunumeruojami kampo  $\varphi$  didėjimo tvarka. Pagal (2.8.1) formulę kiekvienam difrakciniam žiedui apskaičiuojama gardelės konstanta. Kadangi Rentgeno vamzdyje naudojamas vario anodas, vietoj  $\lambda$  reikia naudoti vario  $K_{\alpha 1}$  ir  $K_{\alpha 2}$  linijų bangų ilgį vidurki, kuris lygus  $1.544 \text{ \AA}$  (vario  $K_{\beta}$  liniją nufiltruoja nikelio folija, kuri yra Rentgeno kameroje). Parenkant interferencijos indeksų trejetą ( $HKL$ ) duotajam difrakciniam žiedui, išbandomos visos trys indeksų trejetų sekos (2.6.8a,b,c). Pasirinkus kurią nors iš šių sekų, interferencijos indeksų trejetas parenkamas taip, kad jo eilės numeris duotojoje sekoje sutaptų su difrakcinio žiedo numeriu. Teisingoji seka yra ta, pagal kurią apskaičiuotos  $a$  vertės yra apytiksliai vienodos visiems žiedams. Tokiu būdu nustatomas vario kristalo Bravė gardelės tipas. Apskaičiuojami gardelės konstantos  $a$  vidurkis  $\bar{a}$  ir jo standartinis nuokrypis  $\Delta a$ . Vidurkio standartinio nuokrypio apytiksliam įvertinimui naudojama formulė

$$\Delta a = \sqrt{\frac{1}{n(n-1)} \sum_{i=1}^n (a_i - \bar{a})^2}; \quad (2.8.3)$$

čia  $n$  yra difrakcinių žiedų skaičius, o  $a_i$  yra gardelės konstantos vertė, kuri apskaičiuota pagal  $i$ -tąjį difrakcinį žiedą. Patikrinama, ar tikroji vario gardelės konstantos vertė ( $3.615 \text{ \AA}$ ) priklauso 95 % pasikliautinajam intervalui  $[\bar{a} - 2\Delta a; \bar{a} + 2\Delta a]$ .

Jeigu, nepriklausomai nuo pasirinktos indeksų trejetų sekos, skirtingiems difrakciniams žiedams gaunamos skirtingos  $a$  vertės, tai gali reikšti, kad žiedai neteisingai sunumeruoti. Pvz., kurie nors žiedai galėjo būti praleisti dėl to, kad yra neryškūs, arba difrakciniu žiedu galėjo būti laikoma pašalinė linija, kuri gali atsirasti dėl spinduliuotės sklaidos Rentgeno kameros

detalėse. Norint patikrinti, ar teisingai sunumeruoti difrakciniai žiedai, reikia palyginti žiedų skaičių su didžiausiu įmanomu skaičiumi, kurį numato (2.8.1) formulė vario kristalui. T.y., pagal šią formulę reikia apskaičiuoti didžiausią įmanomą interferencijos indeksų kvadratų sumą  $H^2 + K^2 + L^2$  (ji atitinka didžiausią įmanomą sklaidos kampą, t.y.,  $\varphi_{HKL} = 180^\circ$ ) ir kiekvienoje iš trijų sekų (2.6.8a,b,c) suskaičiuoti indeksų trejetus, kurių kvadratų suma mažesnė už didžiausią įmanomą (atsižvelgiant į tai, kad indeksų trejetai, kurių kvadratų sumos sutampa, atitinka tą patį difrakcinį žiedą). Jeigu visais trim atvejais gautasis skaičius skiriasi nuo žiedų skaičiaus, tai reiškia, kad žiedai neteisingai sunumeruoti.

#### 2.8.5. Kontroliniai klausimai

1. Simetrijos elemento sąvoka. Kristalų gardelių simetrijos elementų rūšys.
2. Bravė gardelės sąvoka.
3. Kristalografinės sistemos.
4. Kubinės singonijos kristalo taškinės simetrijos elementai.
5. Bravė gardelių rūšys.
6. Kristalografinių ašių ir plokštumų sąvokos. Krypties ir kristalografinės plokštumos Milerio indeksai.
7. Bregio lygtis.

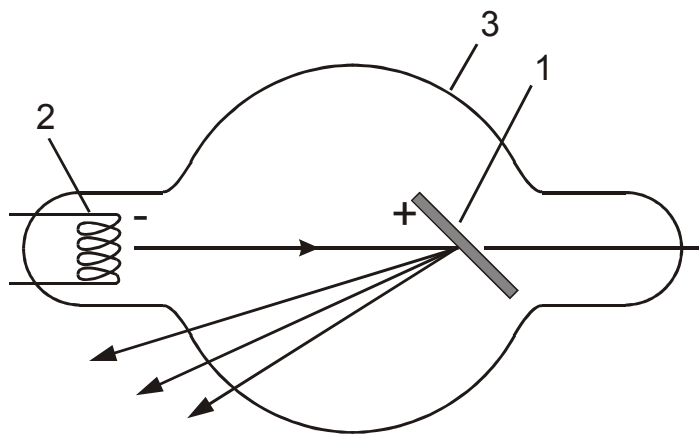


### 3. Darbas Nr. 3. Būdingosios Rentgeno spinduliuotės spektro tyrimas

#### 3.1. Įvadas

Rentgeno spinduliuotė – tai elektromagnetinės bangos, kurių bangos ilgis kinta nuo kelių šimtų angstromų iki šimtatūkstantųjų angstromo dalių (vienas angstromas yra lygus  $10^{-10}$  m).

Rentgeno spinduliuotės šaltinio vaidmenį dažniausiai atlieka specialūs (Rentgeno) vamzdžiai. Rentgeno vamzdžio supaprastinta schema pavaizduota 3.1 pav. Tai yra dviejų elektrodų elektrovakuuminis prietaisas, sudarytas iš teigiamojo elektrodo – anodo (1), neigiamojo elektrodo – katodo (2) ir kolbos (3). Tarp katodo ir anodo sudaromas didelis potencialų skirtumas (aukšta įtampa). Rentgeno spinduliuotė atsiranda, greitiams elektronams bombarduojant anodo paviršių. Naudojami dviejų tipų Rentgeno vamzdžiai, kurie skiriasi elektronų pluoštelio sužadinimo būdu: joniniai ir elektroniniai. **Joniniuose vamzdžiuose** laisvieji elektronai susidaro, praretintųjų dujų teigiamiems jonams bombarduojant šaltą katodą. Šie jonai atsiranda, vykstant ruseniančiam išlydžiui praretintose dujose. **Elektroniniuose vamzdžiuose** laisvieji elektronai atsiranda dėl termoelektroninės emisijos iš katodo (termoelektroninė emisija – tai elektronų išlaisvinimas iš metalo, jį kaitinant). Įprastuose Rentgeno vamzdžiuose spinduliuotę sužadinančių elektronų energija yra  $10^4 \div 10^5$  eV. Ypač trumpo bangos ilgio Rentgeno spinduliai gaunami, naudojant betatroną (arba kito tipo elektronų greitintuvą). Pastaruoju atveju elektronų, generuojančių Rentgeno spinduliuotę, energija gali siekti  $\sim 10^9$  eV. Rentgeno spindulius taip pat skleidžia radioaktyvieji elementai, skylantys K



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

arba L elektrono pagavos būdu. Daugelis dangaus kūnų yra Rentgeno spinduliuotės šaltiniai (Saulė, žvaigždės). Plazma taip pat yra Rentgeno spinduliuotės šaltinis.

Rentgeno spinduliuotė yra nematoma, tačiau veikia fotografinę plokštelę, jonizuoja dujas, sukelia kai kurių medžiagų švytėjimą (fluorescenciją). Šios savybės panaudojamos, kuriant įvairius registravimo prietaisus.

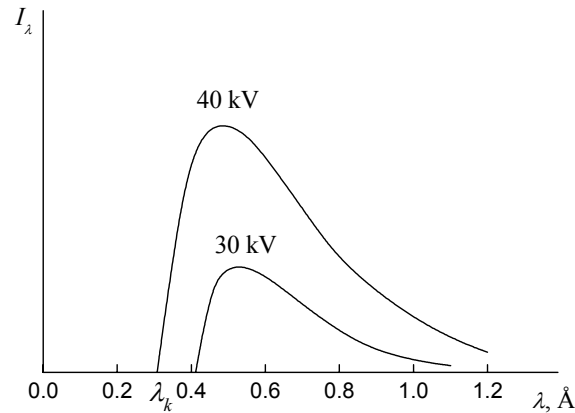
Elektronams smogiant į anodo medžiagos atomus, yra sužadinama dviejų rūšių Rentgeno spinduliuotė: stabdomoji ir būdingoji. **Stabdomoji spinduliuotė** atsiranda dėl to, kad elektronas anodo medžiagoje yra stabdomas, t.y., juda su pagreičiu. Kaip teigia klasikinė elektrodinamika, elektringajai dalelei judant su pagreičiu, yra spinduliuojamos elektromagnetinės bangos. Tai ir yra stabdomoji Rentgeno spinduliuotė. Stabdomosios Rentgeno spinduliuotės spektras yra ištisinis, t.y., į spinduliuotės sudėtį įeina visi bangų ilgiai tam tikrame intervale (pvz., visi bangos ilgiai, kurie tenkina sąlygą  $\lambda > 1 \text{ Å}$ ). **Būdingoji spinduliuotė** atsiranda dėl to, kad aukštos energijos elektronas gali išmušti elektroną iš anodo medžiagos atomo vidinio elektronų sluoksnio. Tuomet šiame sluoksnyje atsiranda vakansija, į kurią peršoka elektronas iš aukštesnio elektronų sluoksnio (žr. 3.4 pav.). Vykstant tokiam šuoliui, išspinduliuojamas fotonas, kurio energija lygi abiejų elektronų sluoksnių energijų skirtumui. Šie fotonai ir yra būdingoji Rentgeno spinduliuotė. Būdingosios Rentgeno spinduliuotės spektras yra linijinis, t.y., į spinduliuotės sudėtį įeina keli tiksliai apibrėžti bangos ilgiai. Šie bangos ilgiai priklauso tik nuo anodo medžiagos, t.y., „apibūdina“ ją (iš čia – pavadinimas „būdingoji“ spinduliuotė).

Žemiau pateiktas smulkesnis stabdomosios ir būdingosios Rentgeno spinduliuotės aprašymas.

#### 3.2. Stabdomoji Rentgeno spinduliuotė

Kol anode stabdomų elektronų energija neviršija tam tikros ribinės anodo medžiagai būdingos vertės, sužadinama tik stabdomoji spinduliuotė. Stabdomosios spinduliuotės spektras yra ištisinis. Intensyvumo spektrinio tankio  $I_\lambda$  (pro vienetinio ploto paviršių per laiko vienetą praėjusio energijos kiekio, tenkančio vienetiniam bangos ilgių intervalui) priklauso nuo bangos ilgio  $\lambda$ , esant dviem greitinimo įtampos vertėms, pateikta 3.2 pav. Šis energijos pasiskirstymas turi maksimumą. Intensyvumo spektrinio tankio mažėjimas, einant nuo šio maksimumo į ilgų ir trumpų bangų pusę, yra skirtingas. Į ilgų bangų pusę kreivė asimptotiškai artėja į nulį, didėjant bangos ilgiui ( $\lambda \rightarrow \infty$ ). Į trumpų bangų pusę kreivė krenta staiga ir nutrūksta, esant tam tikram bangos ilgiui. Šis krizinis bangos ilgis  $\lambda_k$  yra ištisinio stabdomojo spektro trumpabangė riba ir priklauso nuo greitinimo įtampos.





3.2 pav. Stabdomosios spinduliuotės spektras.

Empiriškai buvo nustatyta, kad krizinį bangos ilgį  $\lambda_k$  nusako lygybė

$$\lambda_k = \frac{12.345}{U} \text{ Å}; \quad (3.2.1)$$

čia  $U$  yra vamzdelio elektrodų potencialų skirtumas (kV). Taigi, krizinis bangos ilgis nepriklauso nuo anodo medžiagos, o priklauso tik nuo greitinimo įtampos.

Kvantinė mechanika teigia, kad elektromagnetinę spinduliuotę (taigi, ir Rentgeno spinduliuotę) galima aprašyti kaip elementariųjų dalelių – **fotonų** – srautą (fotonai dar vadinami **spinduliuotės kvantais**). Fotono energija lygi  $h\nu = hc/\lambda$ ; čia  $\nu$  yra spinduliuotės dažnis,  $h$  yra Planko konstanta ( $h = 6.626 \cdot 10^{-34} \text{ J}\cdot\text{s}$ ), o  $c$  yra šviesos greitis ( $c = 3 \cdot 10^8 \text{ m/s}$ ). Pvz., 2 Å bangos ilgio Rentgeno spinduliuotės fotono energija lygi maždaug 6.2 keV (palyginimui – regimosios šviesos fotonų energija yra kelių elektronvoltų eilės). Taigi, galima teigti, kad, pataikius į anodą aukštos energijos elektronui, atsiranda aukštos energijos fotonai. Šis reiškinys yra atvirkštinis **fotoefektui** – elektronų išlaisvinimui iš metalo paviršiaus, kai metalas apšviečiamas ultravioletine šviesa arba mažesnio bangos ilgio elektromagnetine spinduliuote. Einšteino lygtį fotoefektui (1.2.2) užrašysime tokiu būdu:

$$\frac{mv^2}{2} = eU = h\nu + A_1; \quad (3.2.2)$$

čia  $h\nu$  yra krintančiojo fotono energija,  $A_1 = -A$  yra elektrono išlaisvinimo

darbas su minuso ženklu,  $\frac{mv^2}{2} = eU$  – išlaisvintojo elektrono kinetinė

energija,  $U$  yra lėtinančioji įtampa, kuri reikalinga pilnam išlaisvintojo elektrono sustabdymui. Fotoefekto atveju  $A_1 = -A < 0$ . Tačiau lygybė (3.2.2) galioja ir tuo atveju, kai vyksta atvirkštinis fotoefektui procesas: kai įtampos  $U$

pagreitintas elektronas sąveikauja su medžiagos atomu, dalis jo energijos išspinduliuojama fotono  $h\nu$  pavidalu, o likusioji dalis  $A_1$  perduodama medžiagos atomams ( $A_1 > 0$ ). Šis greitai judančių elektronų energijos virtimas fotonų energija ir yra stabdomosios Rentgeno spinduliuotės atsiradimo priežastis. Elektronas anodo medžiagoje yra stabdomas dėl Kulono sąveikos su anodo medžiagos elektringosiomis dalelėmis – atomų branduoliais ir elektronais. Ši sąveika mažina elektrono judėjimo greitį, t.y., suteikia jam neigiamą pagreitį. Kaip teigia klasikinė elektrodinamika, elektringajai dalelei judant su pagreičiu, yra spinduliuojamos elektromagnetinės bangos, kurių energijos srautas (energijos kiekis per laiko vienetą) yra proporcingas dalelės pagreičio kvadratu.

Fotono, kuris išspinduliuojamas elektrono sąveikos su branduoliu metu, energija yra didžiausia tuomet, kai fotonas gauna visą elektrono kinetinę energiją ( $A_1 = 0$ ), t.y.,

$$eU = h\nu. \quad (3.2.3)$$

Vadinasi, krizinis bangos ilgis yra lygus

$$\lambda_k = \frac{ch}{eU}. \quad (3.2.4)$$

Įrašę  $c$ ,  $e$  ir  $h$  vertes į (3.2.4) formulę, randame

$$\lambda_k = \frac{12.345}{U(kV)} \text{ Å}.$$

Ši formulė tiksliai sutampa su eksperimentine išraiška (3.2.1).

Lygtį (3.2.4) galima panaudoti Planko konstantos  $h$  nustatymui. Tai yra vienas tiksliausių Planko konstantos matavimo būdų.

Stabdomojo spektro maksimumą atitinkantis bangos ilgis  $\lambda_{\max}$  yra šitaip susijęs su kriziniu bangos ilgiu  $\lambda_k$ :

$$\lambda_{\max} = \frac{3}{2} \lambda_k. \quad (3.2.5)$$

Eksperimentiškai buvo nustatyta, kad stabdomosios spinduliuotės intensyvumas auga, didėjant anodo atomų branduolių krūviui. Taip pat buvo nustatyta, kad sunkiųjų elektringųjų dalelių (pvz., protonų) stabdomosios spinduliuotės intensyvumas tomis pačiomis sąlygomis yra mažesnis, negu lengvųjų dalelių – elektronų.

Elektringajai dalelei judant atomo branduolio, kurio krūvis  $Ze$ , elektriniame lauke, ji nukrypsta, veikiama jėgos

$$\mathbf{ma} = -e\mathbf{E}; \quad (3.2.6)$$

čia  $m$ ,  $e$  yra dalelės masė ir krūvis,  $\mathbf{a}$  – jos pagreičio vektorius,  $\mathbf{E}$  – branduolio elektrinio lauko stiprio vektorius:

$$\mathbf{E} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{Ze}{r^3} \mathbf{r}; \quad (3.2.7)$$

čia  $\mathbf{r}$  yra dalelės spindulys vektorius koordinačių sistemoje, kurios centre yra branduolys,  $r$  yra atstumas iki branduolio:  $r = |\mathbf{r}|$ ;  $\epsilon_0 = 8.854 \cdot 10^{-12}$  F/m yra elektrinė konstanta. Įrašę (3.2.7) į (3.2.6), randame pagreičio išraišką:

$$\mathbf{a} = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{Ze^2}{mr^3} \mathbf{r}. \quad (3.2.8)$$

Klasikinėje elektrodinamikoje įrodoma, kad su pagreičiu  $a$  judanti dalelė per laiką  $dt$  išspinduliuoja energijos kiekį

$$dE = \frac{1}{6\pi\epsilon_0} \cdot \frac{e^2}{c^3} a^2 dt. \quad (3.2.9)$$

Taigi, atomo elektriniame branduolio lauke judanti dalelė per laiką  $dt$  išspinduliuoja energijos kiekį

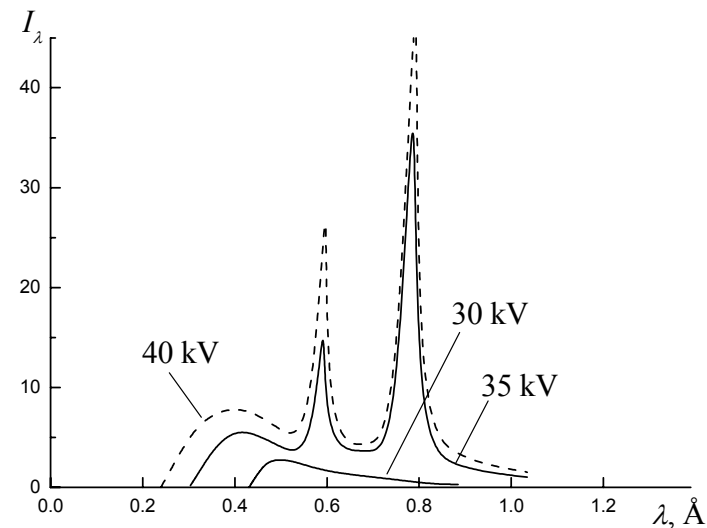
$$dE = \frac{1}{96\pi^3 \epsilon_0^3} \cdot \frac{e^6 Z^2}{c^3 m^2 r^4} dt. \quad (3.2.10)$$

Iš (3.2.10) lygties išplaukia, kad iš sunkiųjų elementų sudarytame taikinyje elektringosios dalelės energijos nuostoliai yra didesni, negu taikinyje iš lengvųjų elementų ( $\sim Z^2$ ). Šie nuostoliai sparčiai mažėja, augant stabdomosios dalelės masei ( $\sim 1/m^2$ ). Todėl lengvųjų dalelių (elektronų) energijos nuostoliai yra žymiai didesni, negu sunkiųjų dalelių (protonų). Jeigu tyrimams reikalingas ištisinis Rentgeno spinduliuotės spektras, tai spinduliuotės žadinimui naudingiau panaudoti sunkiuosius elementus (esant aukštomis įtampoms  $50 \div 80$  kV, volframą naudoti 2.5 karto naudingiau už varį).

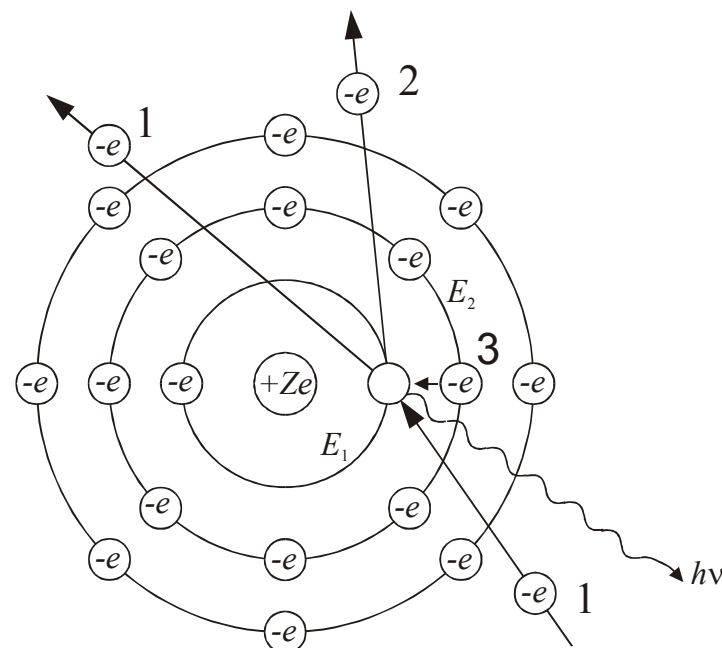
### 3.3. Būdingoji Rentgeno spinduliuotė

Į anodą krintančiųjų elektronų energijai viršijus tam tikrą ribą, ištisinio spektro fone pasirodo spinduliuotės spektras, kuris sudarytas iš atskirų linijų (3.3 pav.). Ši spinduliuotė yra vadinama **būdingąja Rentgeno spinduliuote**, nes jis „apibūdina“ anodo medžiagą: kiekvieną liniją atitinkantis bangos ilgis priklauso tik nuo medžiagos prigimties ir nepriklauso nuo greitinimo įtampos. Didinant greitinimo įtampą, linijų intensyvumas didėja; be to, trumpabangėje spektro dalyje gali atsirasti naujos linijos. Tačiau jau esančių linijų padėtis spektre nesikeičia.

Būdingosios Rentgeno spinduliuotės atsiradimo schema pavaizduota 3.4 pav. Į anodą krintantis elektronas (**pirminis elektronas**) 1, jeigu jo energija yra pakankamai didelė, gali savo energiją perduoti vienam iš vidinių medžiagos atomo elektronų 2 ir jį iš atomo išmušti. Dėl to atomas yra jonizuojamas: viename iš vidinių elektronų sluoksnių (pvz., K sluoksnyje, kaip pavaizduota 3.4 pav.) atsiranda vakansija (skylė). Į šią laisvąją būseną pereina vienas iš tolimesniųjų sluoksnių elektronų 3 (pvz., L sluoksniu elektronas, kaip pavaizduota 3.4 pav.). Pereinant elektronui 3 iš energijos  $E_2$  būsenos į



3.3 pav. Būdingasis spektras.



3.4 pav. Būdingosios Rentgeno spinduliuotės atsiradimo schema.

mažesnės energijos  $E_1$  būseną, energijų skirtumas išspinduliuojamas fotono  $h\nu = E_2 - E_1$  pavidalu. Kadangi šis energijų skirtumas yra tiksliai apibrėžtas, tai spinduliuojama tiksliai apibrėžto dažnio  $\nu$  spinduliuotės spektro linija.

Taigi, pirminio elektrono energijos virsmas būdingosios Rentgeno spinduliuotės kvantu vyksta dviem etapais:

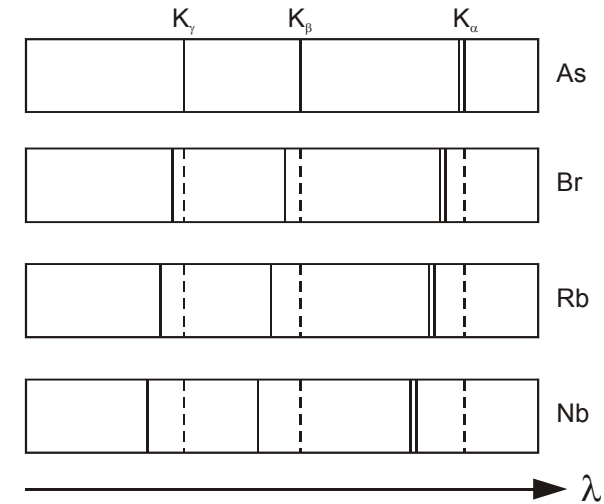
- 1) iš pradžių pirminis elektronas atomą jonizuoja, t.y., dalis pirminio elektrono energijos išieikvojama elektrono ryšio atome nutraukimui, o likusioji energijos dalis virsta išmuštojo laisvojo elektrono (*antrinio elektrono*) kinetine energija;
- 2) kadangi susidaręs teigiamasis jonas yra nestabilios sužadintosios būsenos, atomo elektronai persiskirsto tarp būsenų, tuo pačiu emituodami fotoną, t.y., sužadinimo energija virsta fotono energija (būdingosios Rentgeno spinduliuotės energijos kvantu).

Kiekvienas elemento būdingosios spinduliuotės spektras nepriklauso nuo to, ar elementas yra laisvas, ar cheminio junginio sudėtyje. Pvz., jodo atomo ir jodo molekulės būdingieji Rentgeno spektrai yra vienodi. Tuo būdingieji Rentgeno spektrai skiriasi nuo optinių.

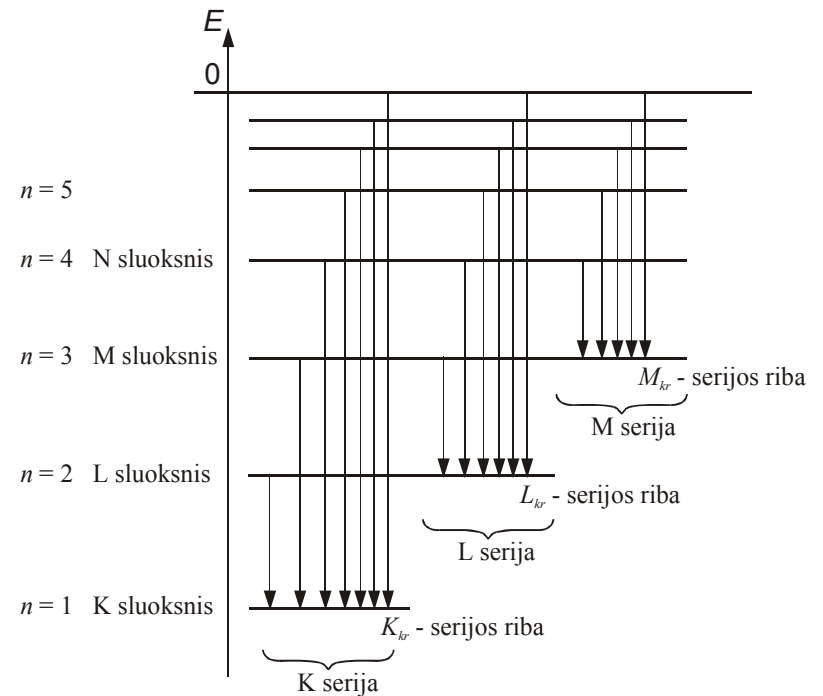
Būdingosios Rentgeno spinduliuotės linijų išsidėstymas spektruose yra dėsningas: linijos sudaro serijas, esančias įvairiose spektro vietose. Linijų serija, kurią sudaro mažiausio bangos ilgio linijos, žymima raide K. Sekančios serijos, su ilgesnių bangų linijomis, atitinkamai žymimos raidėmis L, M ir t.t.

Augant anodo elemento atominiam numeriui, didėja spektre sužadinamų serijų skaičius. Reikia pažymėti, kad elementų Rentgeno spektrai yra paprasti, sudaryti iš palyginti mažo linijų skaičiaus. Optiniai spektrai dažniausiai yra sudėtingi. Juos sudaro šimtai ir tūkstančiai linijų. Be to, skirtingų elementų Rentgeno būdingieji spektrai yra labai panašūs. Vienintelis pakitimas, kuris yra stebimas Rentgeno būdinguosiuose spektruose, pereinant nuo lengvųjų elementų prie sunkesnių, yra laipsniškas linijų poslinkis į trumpųjų bangų pusę. 3.5 pav. yra pavaizduotos kai kurių elementų K serijos. K serija yra sudaryta iš trijų linijų:  $K_\alpha$ ,  $K_\beta$  ir  $K_\gamma$ .  $K_\alpha$  linija šioje serijoje yra didžiausio bangos ilgio, intensyviausia ir turi dubletinę struktūrą, t.y., sudaryta iš dviejų artimų linijų.  $K_\beta$  ir  $K_\gamma$  linijos irgi yra dubletai, bet išskirti jų smulkiąją struktūrą yra sunku. Kitos elementų būdingosios Rentgeno spinduliuotės spektro serijos (L, M, N) turi sudėtingesnę struktūrą ir taip pat yra sudarytos iš nedidelio skaičiaus linijų.

Būdingosios spinduliuotės spektro pavidalas aiškinamas šitaip. Jeigu pirminis elektronas išmuša vieną iš dviejų giliausio vidinio K sluoksnio elektronų, tai atsiradusi vakansija gali būti užpildyta elektronu iš kurio nors mažiau gilaus sluoksnio L, M, N. Pirmuoju atveju spinduliuojama  $K_\alpha$  linija,



3.5 pav. As, Br, Rb ir Nb būdingosios Rentgeno spinduliuotės K serijos.



3.6 pav. Rentgeno būdingosios spinduliuotės serijų atsiradimo schema.

antruoju atveju –  $K_\beta$  linija, trečiuoju atveju –  $K_\gamma$  linija. K serijos kraštas  $h\nu_{kr}$  atitinka laisvo, esančio už atomo ribų, elektrono ( $E=0$ ) perėjimą į K sluoksnyje esančią vakansinę vietą (3.6 pav.). Laisvųjų elektronų, kurie už atomo ribų gali turėti bet kokią kinetinę energiją ( $E>0$ ), perėjimas į K sluoksnyje esančią laisvą vietą yra lydimas ištisinio spektro (prigludusio prie K serijos ribos) fotonų su energijom  $h\nu > h\nu_{kr}$  spinduliuotės (3.6 pav.).

Vakansijos užpildymo tikimybė yra tuo didesnė, kuo mažesnis energijų skirtumas tarp aukščiau esančio sluoksnio ir to, kuriame yra vakansija. K sluoksnyje esanti vakansija su didžiausia tikimybe bus užpildoma L sluoksnio elektronų, spinduliuojant  $K_\alpha$  liniją. Vakansijos užpildymo M sluoksnio elektronais, spinduliuojant  $K_\beta$  liniją, tikimybė mažesnė. Linijos intensyvumas yra proporcingas atitinkamo šuolio tikimybei. Todėl K serijoje intensyviausia yra  $K_\alpha$  linija, antroji pagal intensyvumą yra  $K_\beta$ , trečioji –  $K_\gamma$ , t.y., linijos intensyvumas serijoje mažėja nuo pirmos linijos link serijos krašto.

### 3.4. Mozlio dėsnis

Kvantinės mechanikos metodais (žr. 1.17 poskyrį) arba naudojant Boro atomo modelį (žr. 1.7 poskyrį), įrodoma, kad nejudančio vandeniliškojo atomo (t.y., vandenilio atomo arba jono, turinčio tik vieną elektroną), pilnutinė mechaninė energija gali būti lygi tik vertėms, kurias nusako (1.17.12) formulė, t.y.,

$$E_n = -\frac{Z^2}{n^2} \frac{me^4}{8\varepsilon_0^2 h^2} \approx -\frac{Z^2}{n^2} \cdot 13.6 \text{ eV} \quad (n=1, 2, \dots); \quad (3.4.1)$$

čia  $Ze$  yra branduolio krūvis,  $\varepsilon_0 = 8.854 \cdot 10^{-12} \text{ F/m}$  yra elektrinė konstanta,  $m = 9.11 \cdot 10^{-31} \text{ kg}$  yra elektrono masė. Sveikasis skaičius  $n$  nusako elektronų sluoksnio numerį:  $n=1$  atitinka K sluoksnį,  $n=2$  atitinka L sluoksnį ir t.t. Vadinasi, fotono, kuris emituojamas, L elektronui pereinant į vakansiją K sluoksnyje, energija lygi

$$h\nu_{K_\alpha} = E_L - E_K = \frac{me^4}{8\varepsilon_0^2 h^2} Z^2 \left( \frac{1}{1^2} - \frac{1}{2^2} \right). \quad (3.4.2)$$

Tačiau ši formulė tiksliai galioja tik vandeniliškiems atomams. Jeigu atomas turi daugiau negu vieną elektroną, tuomet, skaičiuojant šuolio energiją, reikia atsižvelgti į elektronų tarpusavio sąveiką. Į K sluoksnyje esančią vakansiją pereinantį elektroną veikia branduolio krūvio  $+Ze$  laukas, susilpnintas K sluoksnyje esančio antro elektrono lauko. Todėl branduolio efektinis krūvis  $+Z_1e$ , kuris lemia elektrinį lauką, kuriame vyksta elektrono šuolis iš L (M, N) sluoksnio į K sluoksnį, yra mažesnis už branduolio krūvį  $+Ze$  dydžiu, apytiksliai lygiu elementariajam krūviui  $e$ . T.y.,

$$Z_1 = Z - \sigma;$$

čia  $\sigma$  yra **ekranavimo konstanta**. Ekranavimo konstanta priklauso nuo to, į kurią sluoksnį pereina elektronas. Jeigu šuolis vyksta į K sluoksnį, tuomet  $\sigma = \sigma_K \approx 1$ ,

o jeigu į L sluoksnį, tuomet  $\sigma = \sigma_L \approx 7.4$ . Ekranavimo konstanta silpnai priklauso nuo  $Z$ .

Atsižvelgus į aukščiau minėtąjį ekranavimo efektą, (3.4.2) formulėje branduolio krūvio skaičių  $Z$  reikia pakeisti efektiniu krūvio skaičiumi  $Z - \sigma_K$ :

$$h\nu_{K_\alpha} = \frac{me^4}{8\varepsilon_0^2 h^2} (Z - \sigma_K)^2 \left( \frac{1}{1^2} - \frac{1}{2^2} \right). \quad (3.4.3)$$

Iš čia  $K_\alpha$  linijos bangos skaičius

$$k_{K_\alpha} \equiv \frac{1}{\lambda_{K_\alpha}} = \frac{\nu}{c} = \frac{me^4}{8\varepsilon_0^2 h^3 c} (Z - \sigma_K)^2 \left( \frac{1}{1^2} - \frac{1}{2^2} \right) = R'(Z - \sigma_K)^2 \left( \frac{1}{1^2} - \frac{1}{2^2} \right); \quad (3.4.4)$$

čia  $R'$  yra **Rydbergo konstanta**, kuri apibrėžiama šitaip:

$$R' = \frac{R}{c} = \frac{me^4}{8\varepsilon_0^2 h^3 c} = 1.097373177 \cdot 10^7 \text{ m}^{-1} \quad (3.4.5)$$

(t.p. žr. 1.5 poskyrį). Taip pat galima gauti bangos skaičiaus formules kitoms būdingosios Rentgeno spinduliuotės spektro linijoms. Pvz.,  $K_\beta$  linijos, kuri spinduliuojama, kai M elektronas ( $n=3$ ) pereina į vakansiją K sluoksnyje ( $n=1$ ), bangos skaičius

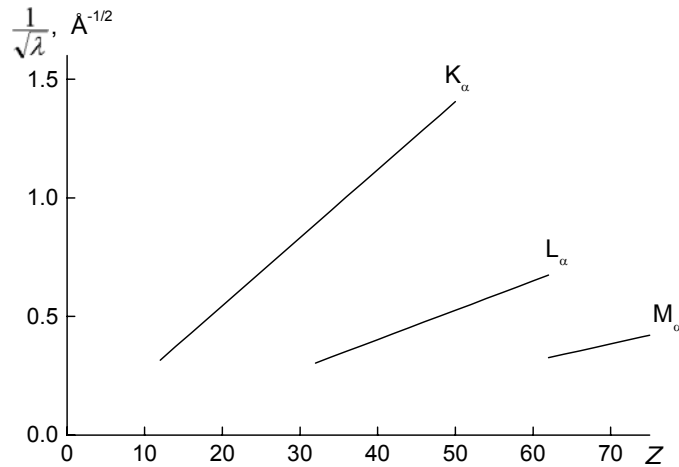
$$k_{K_\beta} = \frac{1}{\lambda_{K_\beta}} = R'(Z - \sigma_K)^2 \left( \frac{1}{1^2} - \frac{1}{3^2} \right); \quad (3.4.6)$$

$L_\alpha$  linijos, kuri spinduliuojama, kai M elektronas ( $n=3$ ) pereina į vakansiją L sluoksnyje ( $n=2$ ), bangos skaičius

$$k_{L_\alpha} = \frac{1}{\lambda_{L_\alpha}} = R'(Z - \sigma_L)^2 \left( \frac{1}{2^2} - \frac{1}{3^2} \right); \quad (3.4.7)$$

$M_\alpha$  linijai vietoj  $\sigma_L$ ,  $1/2^2$  ir  $1/3^2$  yra atitinkamai  $\sigma_M$ ,  $1/3^2$  ir  $1/4^2$  ir t.t. Apskritai,  $\alpha$  linijoms paskutinis daugiklis yra pavidalo  $\frac{1}{n^2} - \frac{1}{(n+1)^2}$ , kur  $n$  yra serijos numeris (K serijai  $n=1$ , L serijai  $n=2$  ir t.t.).  $\beta$  linijoms šis daugiklis yra  $\frac{1}{n^2} - \frac{1}{(n+2)^2}$ ,  $\gamma$  linijoms  $\frac{1}{n^2} - \frac{1}{(n+3)^2}$  ir t.t.

Lygybėse (3.4.4), (3.4.6) ir (3.4.7) matyti, kad šaknis iš bangos skaičiaus tiesiškai priklauso nuo atominio numerio  $Z$ . Ši sąryšį tarp Rentgeno būdingosios spinduliuotės spektro linijos bangos skaičiaus  $k$  ir atominio numerio (elemento eilės numerio)  $Z$  empiriškai atrado anglų fizikas G. Mozlis 1913 m. Todėl šis dėsnis vadinamas **Mozlio dėsniu**. Mozlio dėsnį  $\alpha$  linijoms galima užrašyti šitaip:



3.7 pav. Mozlio diagramos.

$$Z - \sigma = A \frac{1}{\sqrt{\lambda}} = A \sqrt{k_{\alpha}}; \quad (3.4.8)$$

čia K serijai  $A = \left[ R' \left( \frac{1}{1^2} - \frac{1}{2^2} \right) \right]^{-\frac{1}{2}}$ , L serijai  $A = \left[ R' \left( \frac{1}{2^2} - \frac{1}{3^2} \right) \right]^{-\frac{1}{2}}$  ir t.t.

3.7 pav. pavaizduota empirinė  $K_{\alpha}$ ,  $L_{\alpha}$  ir  $M_{\alpha}$  linijų  $\frac{1}{\sqrt{\lambda}}$  priklausa nuo atominio

numerio  $Z$ . Matome, kad ši priklausa periodinės elementų lentelės pradžioje esantiems elementams ( $Z < 70$ ) yra tiesinė. Buvo nustatyta, kad, didėjant numeriui  $Z$ , nukrypimas nuo šios tiesinės priklausos nėra ryškus ir tampa pastebimas tik M ir N serijoms.

Mozlio dėsnis leido paaiškinti elemento atominio numerio fizikinę prasmę: tai yra elementariųjų krūvių skaičius atomo branduolyje. Mozlio dėsnis parodė, kad ne atomo masė, o jo eilės numeris, kuris lygus branduolio krūviui, lemia elemento chemines savybes.

Mozlio dėsnis leidžia pagal išmatuotąją būdingosios spinduliuotės bangos ilgį nustatyti elemento atominį numerį, t.y., branduolio krūvį.

### 3.5. Būdingosios Rentgeno spinduliuotės spektro smulkioji struktūra

Naudojant didelės skiriamosios gebos prietaisus, buvo pastebėta būdingojo Rentgeno spektro multiptetinė struktūra: kiekviena linija sudaryta iš dviejų arba daugiau artimų linijų. Paaiškėjo, kad K serijos linijos yra dubletai. Kitų serijų linijos yra sudėtingesnės struktūros (multiptetai).

Būdingojo Rentgeno spektro linijų sudėtinga struktūra atsiranda dėl atomo energijos lygmenų multiptetiškumo (žr. 1.17 – 1.20 poskyrius). Elektrono energija atome priklauso ne vien nuo elektronų sluoksnio numerio  $n$ , kuris vadinamas *pagrindiniu kvantiniu skaičiumi*, bet ir nuo dar dviejų kvantinių skaičių:

- 1) *šalutinio kvantinio skaičiaus*  $l$ , kuris nusako elektrono orbitinį judesio kiekio momento absoliutinę vertę (žr. 1.17 poskyrį);
- 2) pilnutinio judesio kiekio momento kvantinio skaičiaus  $j$ , kuris nusako elektrono sukinio (vidinio judesio kiekio momento) orientaciją atžvilgiu orbitinio judesio kiekio momento (žr. 1.18 poskyrį).

Priklausomybė nuo  $l$  atsiranda dėl banginių funkcijų, kurios atitinka skirtingas  $l$  vertes, skirtingo persiklojimo su kitų sluoksnių elektronų banginėmis funkcijomis (žr. 1.17 poskyrį), o priklausomybė nuo  $j$  atsiranda dėl *sukinio ir orbitos sąveikos* (žr. 1.18 poskyrį). Sukinio ir orbitos sąveika pasireiškia tuo, kad elektrono energija priklauso nuo kampo tarp elektrono orbitinio ir sukininio judesio kiekio momentų (žr. 1.22 pav.).

Elektrono orbitinio judesio kiekio momentas lygus  $\sqrt{l(l+1)} \cdot \hbar$ , kur  $l$  gali įgyti tik šias vertes:  $l = 0, 1, \dots, n-1$ . Skaičius  $l$  vadinamas elektrono šalutiniu arba *orbitiniu kvantiniu skaičiumi*. Šis skaičius nusako elektronų *posluoksnių*, kuriam priklauso duotojo sluoksnio elektronas. Elektronai, kurių  $l = 0$ , sudaro  $s$  posluoksnių,  $l = 1 - p$  posluoksnių,  $l = 2 - d$  posluoksnių,  $l = 3 - f$  posluoksnių. Elektrono sukininio judesio kiekio momento absoliutinė vertė lygi  $\sqrt{s(s+1)} \cdot \hbar$ , kur  $s = 1/2$ .  $s$  yra elektrono *sukinio kvantinis skaičius*, kuris dažniausiai vadinamas tiesiog *sukiniu*. Elektrono pilnutinis judesio kiekio momentas lygus elektrono sukininio ir orbitinio momentų vektorių sumai. Elektrono pilnutinio judesio kiekio momento absoliutinė vertė lygi  $\sqrt{j(j+1)} \cdot \hbar$ , kur kvantinis skaičius  $j$ , pagal bendrąją judesio kiekio momentų sumos skaičiavimo taisyklę (1.18.11), gali įgyti tik šias dvi vertes:

$j = l \pm s = l \pm \frac{1}{2}$  (kai  $l > 0$ ). Vadinasi, kampas tarp elektrono sukininio ir orbitinio momentų vektorių gali įgyti tik dvi vertes (žr. 1.22 pav.). Todėl tiek pat verčių gali įgyti ir duotojo posluoksnio elektrono sukinio ir orbitos sąveikos energija.  $s$  elektronų, kurių orbitinis momentas lygus nuliui ( $l = 0$ ), sukinio ir orbitos sąveikos energija taip pat lygi nuliui, o  $j = 1/2$ .

Taigi, elektrono energiją atome pilnai nusako trys kvantiniai skaičiai:  $n$ ,  $l$  ir  $j$ . Iš to, kas aukščiau pasakyta, išplaukia, kad  $n$ -tojo elektronų sluoksnio energijos polygmenų (t.y., galimųjų  $l$  ir  $j$  verčių derinių) skaičius lygus dvigubo posluoksnių skaičiaus ir vieneto skirtumui, t.y.,  $2n - 1$ . Pvz., K

sluoksniu atveju ( $n = 1$ ) šis skaičius lygus vienetui (t.y., lygmuo nėra suskilęs), L sluoksniu atveju  $2n - 1 = 3$  ir t.t.

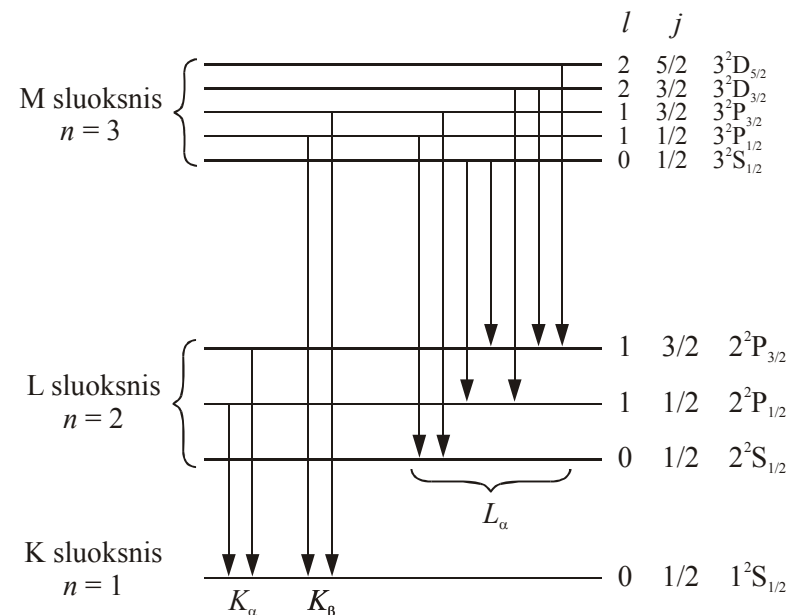
Kalbant apie atomo energijos lygmenis ir apie atomo spinduliuotės spektrą, reikia turėti omenyje, kad atomas yra daugelio elektronų sistema. Atomo energijos lygmenys skyla į polygmenius dėl *atomo* sukininio momento sąveikos su *atomo* orbitiniu momentu. Atomo sukininis momentas lygus atskirų elektronų sukininių vektorių sumai, o atomo orbitinis judesio kiekio momentas – atskirų elektronų orbitinių momentų vektorių sumai (žr. 1.22 poskyrį). Atomo sukininio, orbitinio ir pilnutinio mechaninio momento absoliutines vertes nusako kvantiniai skaičiai  $S, L$  ir  $J$ , kurių prasmė tokia pati, kaip ir atitinkamų vieno elektrono kvantinių skaičių  $s, l$  ir  $j$ .

Didžiausias įmanomas elektronų skaičius kiekviename elektronų sluoksnyje ir kiekviename posluoksnyje gaunamas pagal Paulio draudimo principą (žr. 1.21 poskyrį). Atomo būsenų, kurios dalyvauja Rentgeno spinduliavime, momentų skaičiavimas yra ypač paprastas dėl to, kad vienas iš dviejų dalyvaujančių sluoksnių yra pilnai užpildytas, o kitam iki pilno užpildymo trūksta tik vieno elektrono. Užpildyto posluoksniu (vadinasi, ir užpildyto sluoksniu) sukininis ir orbitinis momentai lygūs nuliui: elektronų momentai kompensuoja vienas kitą. Taip yra todėl, kad pilnai užpildytame sluoksnyje visi elektronai yra “suporuoti”: kiekvienam elektronui galima rasti kitą to paties posluoksniu elektroną, kurio sukinys ir orbitinis momentas tiksliai kompensuoja atitinkamus pirmojo elektrono momentus (žr. 1.21 poskyrį). Sluoksnyje, kuriam trūksta vieno elektrono, yra tik vienas nesuporuotas elektronas. Todėl sukininis ir orbitinis momentai lygūs atitinkamiems šio elektrono momentams:  $S = s = 1/2, L = l, J = j$ .

K sluoksnyje yra du  $s$  elektronai. Jiems  $n = 1, l = 0$ . Jeigu vienas šio sluoksniu elektronas pašalintas, atomo energinė būsena atitinka K sluoksniu vakansiją, t.y., nusakoma kvantiniais skaičiais  $n = 1, l = 0, j = 1/2$ . Šio lygmens žymėjimas yra  $1^2S_{1/2}$  (atomo energijos lygmenų žymėjimai paaiškinti 1.22 poskyryje).

L sluoksnyje yra 8 elektronai, kuriems pagrindinis kvantinis skaičius  $n = 2$ , orbitinis kvantinis skaičius  $l$  lygus 0 arba 1. Iš aštuonių L sluoksniu elektronų du yra  $s$  posluoksnyje, o likusieji šeši –  $p$  posluoksnyje. Jeigu vienas iš šių dviejų  $s$  elektronų pašalintas, atomo būseną lemia  $s$  posluoksnyje esanti vakansija, kuriai  $n = 2, l = 0, j = 1/2$ . Atitinkamo energijos lygmens žymėjimas yra  $2^2S_{1/2}$ . Jeigu L sluoksnyje pašalintas vienas iš šešių  $p$  posluoksniu elektronų, atomo būseną nusako  $n = 2, l = 1, j = 1/2$  (žymėjimas  $2^2P_{1/2}$ ), arba  $n = 2, l = 1, j = 3/2$  ( $2^2P_{3/2}$ ). Vadinasi, vieną kartą jonizuotas L sluoksniu turi tris energijos lygmenis:  $2^2S_{1/2}, 2^2P_{1/2}, 2^2P_{3/2}$ .

Taip pat galima įrodyti, kad vieną kartą jonizuotas M sluoksniu turi penkis energijos lygmenis:  $3^2S_{1/2}, 3^2P_{1/2}, 3^2P_{3/2}, 3^2D_{3/2}, 3^2D_{5/2}$ . Jonizuotas N sluoksniu turi septynis energijos lygmenis ir t.t.



3.8 pav. Būdingojo Rentgeno spektro multiplietinė struktūra.

Vieną kartą jonizuotų atomo K, L ir M sluoksnių energijos lygmenys pavaizduoti 3.8 pav. Rodyklėmis parodyti  $K_\alpha, K_\beta, L_\alpha$  linijas atitinkantys šuoliai. Jeigu šuolis galėtų vykti iš bet kurio pradinio sluoksniu polygmenio į bet kuri galutinio sluoksniu polygmenį, tuomet linijos multiplietiškas būtų lygus abiejų lygmenų multiplietiškas sandaugai. Pvz.,  $K_\alpha$  linijos multiplietiškas būtų lygus 3,  $K_\beta$  – 5,  $L_\alpha$  – 15 ir t.t. Tačiau tikrovėje multiplietiškas yra mažesnis. Taip yra dėl *atrankos taisyklių*, kurios teigia, kad atomo kvantinio šuolio metu kvantinių skaičių  $L$  ir  $J$  pokyčiai gali būti lygūs tik šioms vertėms:  $\Delta L = \pm 1, \Delta J = 0, \pm 1$  (žr. 1.20 ir 1.22 poskyrius). Šias taisykles tenkinantys šuoliai tarp K, L ir M sluoksnių yra parodyti 3.8 pav. Matome, kad K serijos linijos yra dubletai, o L serijos linijų struktūra yra sudėtingesnė. Tokia linijų struktūra gerai atitinka eksperimentinius rezultatus.

Praktikoje lengviausia išskirti  $K_\alpha$  linijų smulkiają struktūrą. Kitos K serijos linijos gali atrodyti singletinės (viengubos), nes atstumas tarp M, N ir aukštesnių sluoksnių energijos polygmenių yra mažesnis už atstumą tarp L sluoksniu energijos polygmenių (žr. 3.8 pav.). Šis atstumo tarp polygmenių mažėjimas, augant kvantiniam skaičiui  $n$ , paaiškintas 1.17 ir 1.18 poskyriuose.

Palaipsniui didinant pirminių elektronų energiją, būdingojo spektro linijų serijos pasirodo ne vienu metu, o paeiliui. Iš pradžių pasirodo ilgabangės serijos, o pačių trumpiausių bangų (su didžiausia energija) K serija pasirodo paskutinė. Pirminis  $eU_0$  energijos elektronas gali išmušti elektroną iš atomo tik

tada, kai jo kinetinė energija yra nemažesnė už atomo jonizacijos energiją, kuri lygi mažiausios laisvojo elektrono energijos ir elektrono energijos atome skirtumui. Kadangi mažiausia laisvojo elektrono kinetinė energija lygi nuliui, tai jonizacijos sąlyga galima užrašyti šitaip:

$$eU_0 \geq -E(nlj);$$

čia  $E(nlj)$  yra elektrono energijos lygmuo, kurį nusako kvantinių skaičių trejetas  $n, l$  ir  $j$  (energija  $E$  yra neigiama).

### 3.6. Tyrimo metodo teorija

Šiame darbe spinduliuotės spektro analizė remiasi Brego lygtimi (žr. 2.3 poskyrį). Rentgeno spinduliai, praeidami pro kristalą, atsispindi nuo kristalografinių plokštumų (kristalografinės plokštumos – tai plokštumos, kuriose išsidėstę kristalo gardelės mazgai). Ši atspindį iliustruoja 2.5 ir 2.6 pav. Iš reikalavimo, kad nuo gretimų lygiagrečių plokštumų atsispindėjusios bangos interferuodamos stiprintų viena kitą, išplaukia Brego lygtis (2.3.1):

$$2d \sin \theta = n\lambda \quad (n = 1, 2, 3, \dots); \quad (3.6.1)$$

čia  $d$  yra atstumas tarp gretimų kristalografinių plokštumų, nuo kurių atsispindi Rentgeno spinduliai,  $\theta$  yra spindesio kampas (žr. 2.6 pav.),  $\lambda$  yra bangos ilgis, o  $n$  yra atspindžio eilė. Spindesio kampas  $\theta$  yra lygus pusei sklaidos kampo:  $\theta = \varphi/2$ . Sklaidos kampas  $\varphi$  – tai kampas tarp pradinio spindulio krypties ir krypties į difrakcinį maksimumą (žr. 2.6 pav.). Vadinasi, išmatavus sklaidos kampą  $\varphi$  ir žinant  $d$  bei  $n$ , pagal Brego lygtį (3.6.1) galima apskaičiuoti bangos ilgį  $\lambda$ :

$$\lambda = 2 \frac{d}{n} \sin \theta = 2 \frac{d}{n} \sin \frac{\varphi}{2}. \quad (3.6.2)$$

Rasime sklaidos kampo pokytį  $\Delta\varphi$ , kuris atitinka bangos ilgio pokytį  $\Delta\lambda$ , laikant, kad  $\Delta\lambda$  yra žymiai mažesnis už  $\lambda$ . Tuo tikslu randame (3.6.2) lygybės abiejų pusių diferencialus:

$$d\lambda = \frac{d}{n} \cos \frac{\varphi}{2} \cdot d\varphi.$$

Vadinasi, jeigu bangos ilgio pokytis  $\Delta\lambda$  yra pakankamai mažas, tuomet

$$\Delta\lambda \approx \frac{d}{n} \cos \frac{\varphi}{2} \cdot \Delta\varphi$$

arba

$$\Delta\varphi \approx \frac{n}{d \cos \frac{\varphi}{2}} \Delta\lambda. \quad (3.6.3)$$

Kuo didesnis sklaidos kampo pokytis  $\Delta\varphi$ , tuo lengviau jį išmatuoti, – tuo tiksliau įvertinamas bangos ilgio pokytis  $\Delta\lambda$ . Vadinasi, norint patikimai išskirti artimas spektro linijas (pvz.,  $K_\alpha$  dubletu linijas) šiuo metodu, daugiklis prieš  $\Delta\lambda$  reiškinyje (3.6.3) turi būti kuo didesnis. Kintant sklaidos kampui  $\varphi$  nuo 0 iki  $180^\circ$ ,  $\cos(\varphi/2)$  kinta nuo 1 iki 0. Taigi, norint padidinti matavimų tikslumą,

reikia didinti  $\varphi$ . Todėl šiame darbe tiriamas difrakcinis vaizdas, kuris susidaro, esant didžiausiems galimiems Rentgeno spinduliuotės sklaidos kampams.

Šiame darbe medžiaga, kurioje sklaidoma Rentgeno spinduliuotė, yra aliuminis. Visi metalai ir jų lydiniai yra polikristalinės struktūros, t.y., jie sudaryti iš daugelio netvarkingai orientuotų  $\sim 0.01$  mm dydžio kristalų (kristalitų). Al kristalo gardelė yra kubinė, centruotojo paviršiaus (žr. 3.10 pav.). Gardelės konstanta  $a = 4.0496$  Å. 3.10 – 3.12 pav. parodytos Al atomų išsidėstymo tvarka Al kristale ir kai kurios kristalografinės plokštumos.

Vykstant Rentgeno spinduliuotės difrakcijai polikristaluose, atsispindėjusios nuo kristalografinių plokštumų bangos palieka apskritus pėdsakus fotografinėje plokštelėje – difrakcinius žiedus (žr. 2.14 pav.). Siekiant padidinti sklaidos kampą  $\varphi$ , fotoplokštelė statoma tarp aliuminio bandinio ir Rentgeno vamzdžio. Kaip matome 3.9 pav., tuomet sklaidos kampas yra didesnis už  $90^\circ$  ir lygus

$$\varphi = 180^\circ - \alpha. \quad (3.6.4)$$

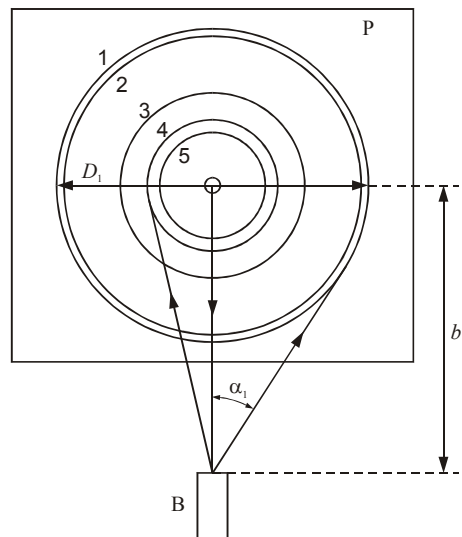
Kampas  $\alpha$  apskaičiuojamas pagal formulę  $\tan \alpha = r/b$ ; čia  $r$  – difrakcinio žiedo spindulys, o  $b$  – atstumas tarp fotoplokštelės ir bandinio. Taigi, bangos ilgio išraišką (3.6.2) galima užrašyti šitaip:

$$\lambda = 2 \frac{d}{n} \sin \left[ \frac{180^\circ - \arctg(r/b)}{2} \right] = 2 \frac{d}{n} \cos \left( \frac{1}{2} \arctg \frac{r}{b} \right). \quad (3.6.5)$$

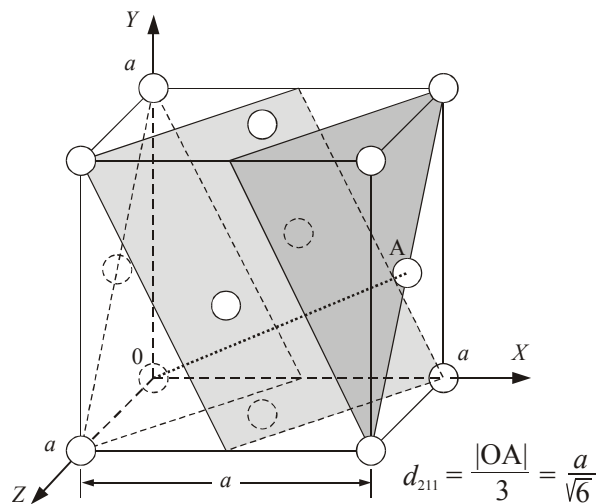
Šiame darbe stebimieji  $K_\alpha$  spinduliuotės difrakciniai maksimumai atsiranda dėl antrosios eilės atspindžių nuo kristalografinių plokštumų su Milerio indeksais (211) ir dėl trečiosios eilės atspindžių nuo kristalografinių plokštumų su Milerio indeksais (111) (Milerio indeksų prasmė paaiškinta 2.5 poskyryje). Pirmuoju atveju Brego lygtyje reikia naudoti  $n = 2$  ir  $d = d_{211} = a / \sqrt{6} = 1.653$  Å (tai yra atstumas tarp gretimų (211) plokštumų: žr.

3.10 pav.), o antruoju atveju reikia naudoti  $n = 3$  ir  $d = d_{111} = a / \sqrt{3} = 2.338$  Å (tai yra atstumas tarp gretimų (111) plokštumų: žr. 3.11 pav.). Turint omenyje, kad  $K_\alpha$  linijos yra dubletai, rentgenogramoje turi matytis du dvigubi difrakciniai žiedai (3.9 pav. jie pažymėti skaičiais 1, 2 ir 4, 5). Kadangi  $2/d_{211} < 3/d_{111}$ , tai, pagal Brego lygtį (3.6.1), antrosios eilės atspindį nuo plokštumų (211) atitinka mažesnis sklaidos kampas, negu trečiosios eilės atspindį nuo plokštumų (111). Tai reiškia, kad pirmuoju atveju difrakcinio žiedo skersmuo yra didesnis (žr. (3.6.4) ir 3.9 pav.).

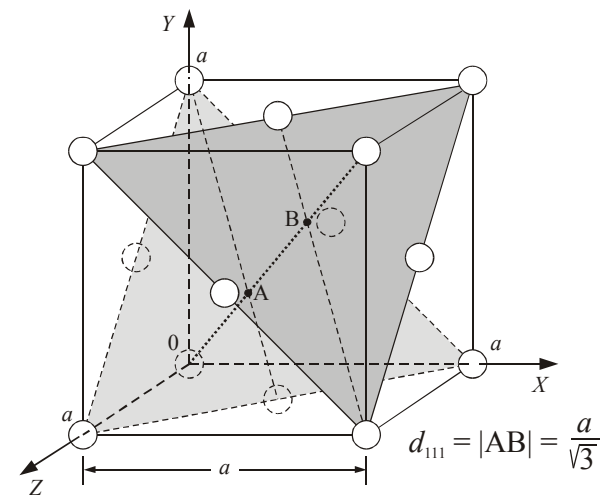
Šiame darbe stebimasis  $K_\beta$  spinduliuotės difrakcinis maksimumas atsiranda dėl ketvirtos eilės atspindžių nuo kristalografinių plokštumų (110). T.y., skaičiuojant  $K_\beta$  linijų bangos ilgį, Brego lygtyje reikia naudoti  $n = 4$  ir  $d = a / \sqrt{2} = 2.863$  Å (tai yra atstumas tarp gretimų (110) plokštumų: žr. 3.12 pav.). 3.9 pav. atitinkamas difrakcinis žiedas pažymėtas skaičiumi 3.



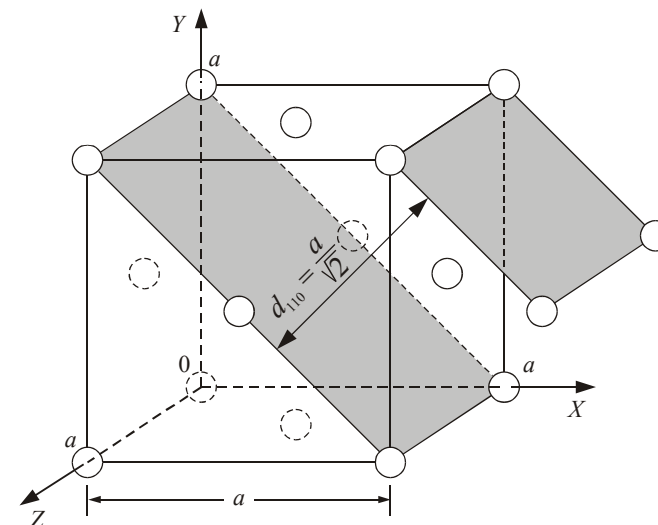
3.9 pav. Rentgeno spindulių sklaida didesniais už  $90^\circ$  kampais. P – fotografinė plokštelė, B – bandinys, 1, 2, 3, 4, 5 – difrakcinių žiedų numeriai.



3.10 pav. Centruotojo paviršiaus kubinės gardelės elementarusis narvelis. Kristalografinių plokštumų (211) išsidėstymas ir atstumas tarp jų  $d_{211}$ . Plokštumos yra statmenos tiesei OA. Parodytos tik tos plokštumos, kurios naudojamos, skaičiuojant atspindžio eilę  $n$  Brego lygtyje (t.y., kurios eina per elementariojo narvelio viršūnes).



3.11 pav. Centruotojo paviršiaus kubinės gardelės elementarusis narvelis. Kristalografinių plokštumų (111) išsidėstymas ir atstumas tarp jų  $d_{111}$ . Plokštumos yra statmenos elementariojo narvelio pagrindinei įstrižainei (taškinė linija), kuri kerta jas taškuose A ir B.



3.12 pav. Centruotojo paviršiaus kubinės gardelės elementarusis narvelis. Kristalografinių plokštumų (110) išsidėstymas ir atstumas tarp jų  $d_{110}$ . Parodytos tik tos plokštumos, kurios naudojamos, skaičiuojant atspindžio eilę  $n$  Brego lygtyje (t.y., kurios eina per elementariojo narvelio viršūnes).



### 3.7. Darbo užduotys

1. Fotoplokštelėje gauti aliuminio polikristalinio bandinio difrakcinį vaizdą, esant didžiausiems galimiems Rentgeno spinduliuotės sklaidos kampams.
2. Išmatuoti difrakcinių žiedų skersmenis.
3. Naudojant žinomus atstumą tarp kristalografinių plokštumų  $d$  ir atstumą tarp bandinio ir fotoplokštelės, pagal Brego lygtį apskaičiuoti Rentgeno spinduliuotės būdingojo spektro bangos ilgį  $\lambda$ , kurie atitinka difrakcinius žiedus.
4. Naudojantis Mozlio dėsniumi, nustatyti Rentgeno vamzdžio anodo elementą.

### 3.8. Matavimų tvarka

1. Fotoplokštelė įdedama į kasetę su anga centre.
2. Kasetė su fotoplokštele pastatoma tarp bandinio (aliuminio vielos) ir Rentgeno vamzdžio.
3. Įjungiamas Rentgeno aparatas, ir bandinys ne trumpiau negu 1 val. švitinamas Rentgeno spinduliuote (kuo ilgesnė švitinimo trukmė, tuo ryškesnis difrakcinis vaizdas).
4. Rentgeno aparatas išjungiamas, fotoplokštelė išryškinama, užfiksuojama ir išdžiovinama.

### 3.9. Rentgenogramos analizė

1. Išmatuojami difrakcinių žiedų spinduliai  $r = D/2$ .
2.  $K_{\alpha 1}$ ,  $K_{\alpha 2}$  ir  $K_{\beta}$  linijų bangų ilgiai apskaičiuojami pagal (3.6.5) formulę.  $K_{\alpha 1}$  linijos bangos ilgis skaičiuojamas pagal žiedus 1 ir 4 (žr. 3.9 pav.),  $K_{\alpha 2}$  linijos bangos ilgis skaičiuojamas pagal žiedus 2 ir 5, o  $K_{\beta}$  linijos bangos ilgis skaičiuojamas pagal žiedą 3.
3. Kiekvienam iš penkių žiedų įvertinama  $\lambda$  matavimo paklaida  $\Delta\lambda$ . Ši paklaida priklauso nuo  $r$  ir  $b$  matavimo paklaidų  $\Delta r$  ir  $\Delta b$  (žr. (3.6.5)):

$$\Delta\lambda = \sqrt{\left(\frac{\partial\lambda}{\partial r}\Delta r\right)^2 + \left(\frac{\partial\lambda}{\partial b}\Delta b\right)^2} = \frac{1}{b} \cdot \frac{\frac{d}{n} \sin\left(\frac{1}{2} \arctg \frac{r}{b}\right)}{1 + \left(\frac{r}{b}\right)^2} \sqrt{(\Delta r)^2 + \left(\frac{r}{b}\right)^2 (\Delta b)^2}.$$

Difrakcinio žiedo spindulio matavimo paklaida  $\Delta r$  priklauso nuo difrakcinio vaizdo kokybės ir gali siekti 1 – 2 mm.

4. Kadangi kiekvieną iš  $K_{\alpha}$  dubleto linijų atitinka po du žiedus (1, 4 ir 2, 5), tai apskaičiuojami vidurkiai ir jų paklaidos:

$$\lambda_{K_{\alpha 1}} = \frac{\lambda_1 + \lambda_4}{2}, \quad \Delta\lambda_{K_{\alpha 1}} = \frac{\sqrt{(\Delta\lambda_1)^2 + (\Delta\lambda_4)^2}}{2};$$

$$\lambda_{K_{\alpha 2}} = \frac{\lambda_2 + \lambda_5}{2}, \quad \Delta\lambda_{K_{\alpha 2}} = \frac{\sqrt{(\Delta\lambda_2)^2 + (\Delta\lambda_5)^2}}{2};$$

$$\lambda_{K_{\beta}} = \lambda_3, \quad \Delta\lambda_{K_{\beta}} = \Delta\lambda_3.$$

5. Nustatomas Rentgeno vamzdžio anodo elementas. Tai galima atlikti dviem būdais: grafiškai, naudojantis Mozlio diagramom (3.13 pav.), arba pagal 3.1 lentelę. Bet kuriuo atveju, nustatant anodo elemento atominį numerį  $Z$ , reikia atsižvelgti į  $\lambda$  matavimo paklaidą  $\Delta\lambda$ . Norint pasinaudoti 3.13 pav., reikia apskaičiuoti kvadratinę šaknį iš fotono dažnio  $\nu$  ir jos paklaidą  $\Delta(\sqrt{\nu})$ . Tuo tikslu naudojamas bangos ilgio ir dažnio sąryšis:  $\nu = c / \lambda$ . Iš šio sąryšio išplaukia šitokia paklaidos išraiška:

$$\Delta(\sqrt{\nu}) = \left| \frac{d(\sqrt{\nu})}{d\lambda} \right| \Delta\lambda = \sqrt{\nu} \frac{\Delta\lambda}{2\lambda}.$$

Norint pasinaudoti 3.1 lentele, reikia apskaičiuoti fotono energiją  $E$  ir jos paklaidą  $\Delta E$ . Energija skaičiuojama pagal (1.1.1) formulę, o jos paklaida – pagal formulę

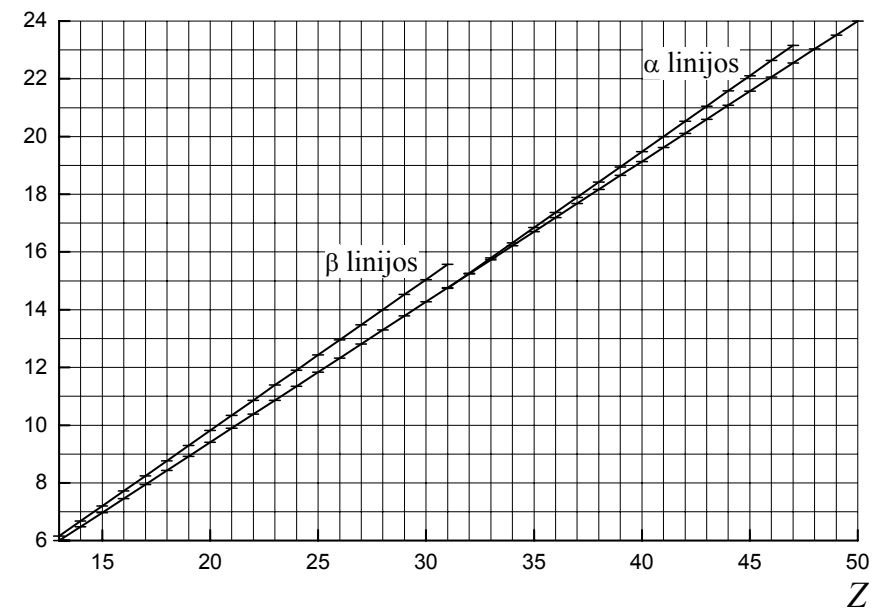
$$\Delta E = \left| \frac{dE}{d\lambda} \right| \Delta\lambda = E \frac{\Delta\lambda}{\lambda}.$$

### 3.10. Kontroliniai klausimai

1. Rentgeno vamzdžio sandara ir veikimo principas.
2. Stabdomosios Rentgeno spinduliuotės atsiradimo priežastys ir spektras.
3. Būdingosios Rentgeno spinduliuotės atsiradimo priežastys ir spektras.
4. Mozlio dėsnis.
5. Sukinio ir orbitos sąveika. Būdingosios Rentgeno spinduliuotės linijų smulkioji struktūra. Atrankos taisyklės.

3.1 lentelė. Įvairių elementų  $K_\alpha$  ir  $K_\beta$  linijų fotonų energijos (keV)

Nr.	Elem.	$K_{\alpha 1}$	$K_{\alpha 2}$	$K_\beta$	Nr.	Elem.	$K_{\alpha 1}$	$K_{\alpha 2}$	$K_\beta$
3	Li	0.0543			48	Cd	23.1736	22.9841	26.0955
4	Be	0.1085			49	In	24.2097	24.0020	27.2759
5	B	0.1833			50	Sn	25.2713	25.0440	28.4860
6	C	0.2770			51	Sb	26.3591	26.1108	29.7256
7	N	0.3924			52	Te	27.4723	27.2017	30.9957
8	O	0.5249			53	I	28.6120	28.3172	32.2947
9	F	0.6768			54	Xe	29.7790	29.4580	33.6240
10	Ne	0.8486	0.8486		55	Cs	30.9728	30.6251	34.9869
11	Na	1.0410	1.0410	1.0711	56	Ba	32.1936	31.8171	36.3782
12	Mg	1.2536	1.2536	1.3022	57	La	33.4418	33.0341	37.8010
13	Al	1.4867	1.4863	1.5575	58	Ce	34.7197	34.2789	39.2573
14	Si	1.7400	1.7394	1.8359	59	Pr	36.0263	35.5502	40.7482
15	P	2.0137	2.0127	2.1391	60	Nd	37.3610	36.8474	42.2713
16	S	2.3078	2.3066	2.4640	61	Pm	38.7247	38.1712	43.8260
17	Cl	2.6224	2.6208	2.8156	62	Sm	40.1181	39.5224	45.4130
18	Ar	2.9577	2.9556	3.1905	63	Eu	41.5422	40.9019	47.0379
19	K	3.3138	3.3111	3.5896	64	Gd	42.9962	42.3089	48.6970
20	Ca	3.6917	3.6881	4.0127	65	Tb	44.4816	43.7441	50.3820
21	Sc	4.0906	4.0861	4.4605	66	Dy	45.9984	45.2078	52.1190
22	Ti	4.5108	4.5049	4.9318	67	Ho	47.5467	46.6997	53.8770
23	V	4.9522	4.9446	5.4273	68	Er	49.1277	48.2211	55.6810
24	Cr	5.4147	5.4055	5.9467	69	Tm	50.7416	49.7726	57.5170
25	Mn	5.8988	5.8877	6.4905	70	Yb	52.3889	51.3540	59.3700
26	Fe	6.4038	6.3908	7.0580	71	Lu	54.0698	52.9650	61.2830
27	Co	6.9303	6.9153	7.6494	72	Hf	55.7902	54.6114	63.2340
28	Ni	7.4782	7.4609	8.2647	73	Ta	57.5320	56.2770	65.2230
29	Cu	8.0478	8.0278	8.9053	74	W	59.3182	57.9817	67.2443
30	Zn	8.6389	8.6158	9.5720	75	Re	61.1403	59.7179	69.3100
31	Ga	9.2517	9.2248	10.2642	76	Os	63.0005	61.4867	71.4130
32	Ge	9.8864	9.8553	10.9821	77	Ir	64.8956	63.2867	73.5608
33	As	10.5437	10.5080	11.7262	78	Pt	66.8320	65.1120	75.7480
34	Se	11.2224	11.1814	12.4959	79	Au	68.8037	66.9895	77.9840
35	Br	11.9242	11.8776	13.2914	80	Hg	70.8190	68.8950	80.2530
36	Kr	12.6490	12.5980	14.1120	81	Tl	72.8715	70.8319	82.5760
37	Rb	13.3953	13.3358	14.9613	82	Pb	74.9694	72.8042	84.9360
38	Sr	14.1650	14.0979	15.8357	83	Bi	77.1079	74.8148	87.3430
39	Y	14.9584	14.8829	16.7378	84	Po	79.2900	76.8620	89.8000
40	Zr	15.7751	15.6909	17.6678	85	At	81.5200	78.9500	92.3000
41	Nb	16.6151	16.5210	18.6225	86	Rn	83.7800	81.0700	94.8700
42	Mo	17.4793	17.3743	19.6083	87	Fr	86.1000	83.2300	97.4700
43	Tc	18.3671	18.2508	20.6190	88	Ra	88.4700	85.4300	100.1300
44	Ru	19.2792	19.1504	21.6568	89	Ac	90.8840	87.6700	102.8500
45	Rh	20.2161	20.0737	22.7236	90	Th	93.3500	89.9530	105.6090
46	Pd	21.1771	21.0201	23.8187	91	Pa	95.8680	92.2870	108.4270
47	Ag	22.1629	21.9903	24.9424	92	U	98.4390	94.6650	111.3000

 $\sqrt{\nu}$ ,  $10^8 \text{ Hz}^{1/2}$ 

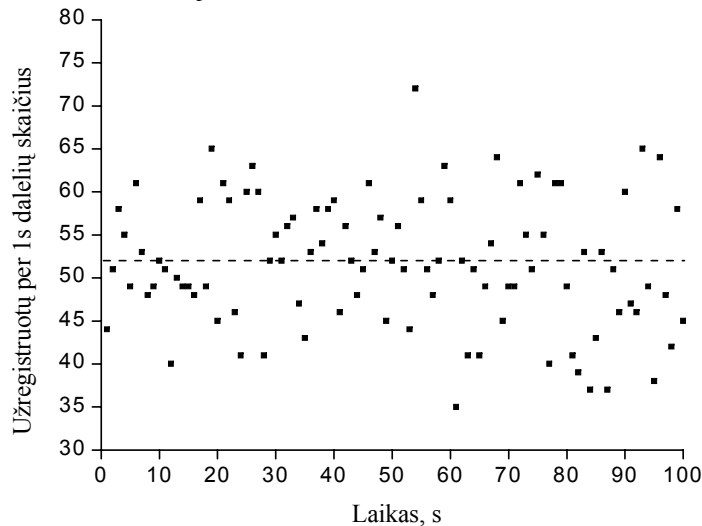
3.13 pav. Būdingosios Rentgeno spindulių dažnio kvadratinės šaknies priklausa nuo atominio numero (Mozlio dėsnis).

#### 4. Darbas Nr. 4. Branduolinės spinduliuotės statistinių dėsningumų tyrimas

##### 4.1. Įvadas

Radioaktyviojo šaltinio aktyvumas matuojamas, naudojant skaitiklius, kurie registruoja į juos pataikančias  $\alpha$  ir  $\beta$  daleles arba  $\gamma$  kvantus. Jeigu šaltinio aktyvumas ir jo padėtis skaitiklio atžvilgiu nekinta laike, tuomet vidutinis skaičius dalelių, kurias skaitiklis užregistruoja per 1 s, taip pat yra pastovus ir turi tiksliai apibrėžtą vertę. Tačiau atskirų matavimų rezultatai yra skirtingi. Pvz., 4.1 pav. pavaizduoti 100 matavimų rezultatai. Šiame pavyzdyje vieno matavimo trukmė lygi 1 s, o šaltinio padėtis atžvilgiu skaitiklio parinkta taip, kad skaitiklis per 1 s užregistruotų vidutiniškai 52 daleles (ši vidurkį vaizduoja punktyrinė linija). Tačiau, kaip matome, atskirų matavimų rezultatai “išsibarstę” gana plačiose ribose: nuo 35 iki 72. Šio intervalo plotis lygus  $72 - 35 = 37$ . Tai sudaro  $37/52 = 71\%$  vidurkio vertės.

Šio užregistruotų dalelių skaičiaus išsibarstymo priežastis yra ta, kad radioaktyvusis skilimas, kurio metu atsiranda minėtosios dalelės, yra atsitiktinis procesas. Tai reiškia, kad neįmanoma iš anksto numatyti, kada skils duotasis radioaktyvus branduolys. Vadinasi, radioaktyviajame šaltinyje per laiko vienetą skylančių branduolių skaičius (taigi, ir skaitiklio užregistruotų dalelių skaičius) yra atsitiktinis dydis. **Atsitiktinis dydis** – tai dydis, kurio vertė, esant pastovioms stebėjimo sąlygoms, nėra tiksliai apibrėžta, t.y., gali įgyti vertę iš tam tikro verčių intervalo.



4.1 pav. Radioaktyviojo šaltinio spinduliuojamų dalelių registravimo rezultatų pavyzdys. Vidurkis lygus  $52 \text{ s}^{-1}$ .

4.2 pav. gautas, sugrupavus 4.1 pav. taškus po 10 ir kiekvienoje grupėje apskaičiavus aritmetinį vidurkį. Akivaizdu, kad išsibarstymas yra mažesnis, negu 4.1 pav. atveju: vertės kinta nuo 46 iki 55.5. Šio intervalo plotis lygus 9.5, t.y.,  $9.5/52 = 18\%$  vidurkio vertės.

4.3 pav. skiriasi nuo 4.1 pav. tik tuo, kad čia panaudotas 10 kartų aktyvesnis šaltinis: skaitiklio per 1 s užregistruotų dalelių skaičiaus vidurkis lygus jau ne 52, o 520. Šiuo atveju matavimų rezultatai svyruoja nuo 473 iki 591. Vadinasi, kitimo intervalo plotis lygus  $591 - 473 = 118$ , o santykinio kitimo intervalo plotis lygus  $118/520 = 23\%$ . Taigi, nors absoliutinis išsibarstymas daugiau kaip tris kartus viršija 1 pav. atvejį ( $118/37 = 3.1$ ), tačiau santykinis išsibarstymas yra maždaug tiek pat kartų mažesnis ( $71\%/23\% = 3.1$ ) ir yra artimas tam, kuris gautas 4.2 pav. atveju.

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

##### 4.2. Dispersija ir standartinis nuokrypis. Aktyvumo matavimo paklaidos

Atsitiktinio dydžio (pvz., per 1 s užregistruotų dalelių skaičiaus) vidurkį žymėsime  $\bar{x}$ :

$$\bar{x} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_i; \quad (4.2.1)$$

čia  $n$  yra matavimų skaičius, o  $x_i$  ( $i = 1, 2, \dots, n$ ) yra atskirų matavimų rezultatai. Atsitiktinio dydžio “išsibarstymo” apie vidurkį laipsnį nusako to dydžio **standartinis nuokrypis**. Standartinis nuokrypis žymimas graikiška raide  $\sigma$  (“sigma”) ir apibrėžiamas tokiu būdu:

$$\sigma = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2}; \quad (4.2.2)$$

Pvz., 4.1 pav. atveju  $\sigma \approx 7.5$ , 4.2 pav. atveju  $\sigma \approx 3.0$ , o 4.3 pav. atveju  $\sigma \approx 22.4$ . Reiškiny, kuris yra po šaknies ženklų, vadinamas **dispersija**:

$$D = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2. \quad (4.2.3)$$

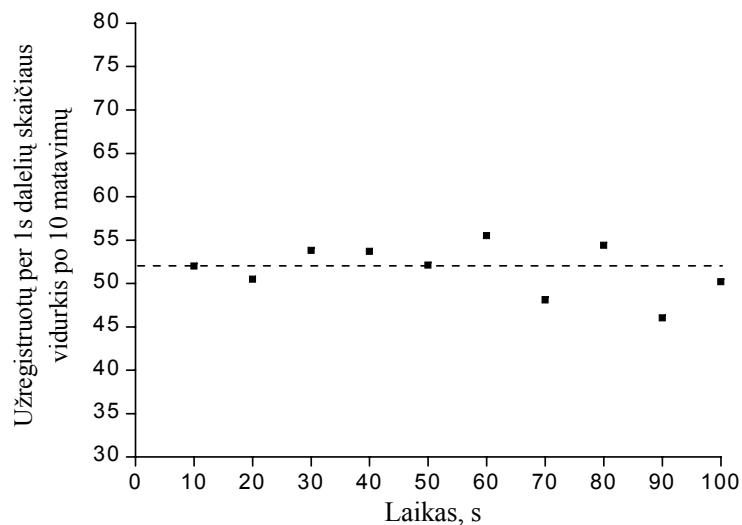
Taigi, dispersija yra lygi matavimų rezultatų nuokrypių nuo vidurkio kvadratų vidurkiui, o standartinis nuokrypis yra lygus kvadratinei šakniai iš dispersijos:

$$\sigma = \sqrt{D}. \quad (4.2.4)$$

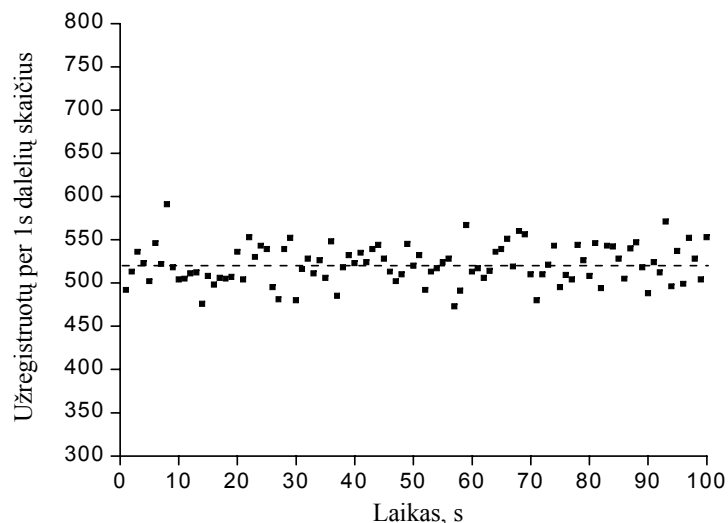
Nesunku įsitikinti, kad reiškiny (4.2.3) yra tapatus šiam reiškiniui:

$$D = \left( \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_i^2 \right) - \bar{x}^2. \quad (4.2.5)$$

T.y., dispersija lygi kvadrato vidurkio ir vidurkio kvadrato skirtumui.



4.2 pav. 10 matavimų po 1 s vidurkiai (panaudoti 4.1 pav. duomenys).



4.3 pav. Radioaktyviojo šaltinio spinduliuojamų dalelių registravimo rezultatų pavyzdys. Vidurkis lygus  $520 \text{ s}^{-1}$ .

Vidurkis  $\bar{x}$ , dispersija  $D$  ir standartinis nuokrypis  $\sigma$  taip pat yra atsitiktiniai dydžiai, nes jie apskaičiuojami, naudojant baigtinį skaičių  $n$  matavimų rezultatų. Tačiau, neribotai augant matavimų skaičiui  $n$ , vidurkis, dispersija ir standartinis nuokrypis artėja prie tam tikrų tiksliai apibrėžtų verčių. Siekiant atskirti šias ribines vertes nuo tų, kurios apskaičiuotos pagal matavimų duomenis, pastarosios vadinamos **empirinėmis** vertėmis, t.y., sakoma: “empirinis vidurkis”, “empirinė dispersija”, “empirinis standartinis nuokrypis”.

Matematinės statistikos metodais įrodoma, kad tuo atveju, kai matavimų skaičius  $n$  bei vieno matavimo metu užregistruotų dalelių skaičiaus vidurkis  $\bar{x}$  yra pakankamai dideli (praktiškai – kai  $n \geq 100$  ir  $\bar{x} > 20$ ), tuomet didžioji dalis (maždaug 68%) visų matavimų rezultatų priklauso intervalui  $\bar{x} - \sigma < x < \bar{x} + \sigma$ , maždaug 95% priklauso intervalui  $\bar{x} - 2\sigma < x < \bar{x} + 2\sigma$ , ir 99.7% visų matavimų rezultatų priklauso intervalui  $\bar{x} - 3\sigma < x < \bar{x} + 3\sigma$ . Pastarasis teiginys vadinamas “**trijų sigma taisykle**”: beveik visų matavimų rezultatų nuokrypiai nuo vidurkio yra mažesni už  $\pm 3\sigma$ .

Jeigu bandinio aktyvumas įvertinamas pagal vieno matavimo rezultatą, tuomet standartinis nuokrypis  $\sigma$  nusako aktyvumo matavimo **absoliutinę paklaidą**, o santykis  $\sigma/\bar{x}$  nusako aktyvumo matavimo **santykinę paklaidą**<sup>1</sup>. Pvz., 4.1 pav. atveju aktyvumo įvertinimo pagal vieną matavimą santykinė paklaida lygi  $7.5/52 \approx 0.14 = 14\%$ , o 4.3 pav. atveju santykinė paklaida lygi  $22.4/520 \approx 0.043 = 4.3\%$ .

Praktikoje svarbiausias radioaktyviosios spinduliuotės statistinis dėsningumas yra tas, kad **užregistruotų dalelių skaičiaus dispersija yra lygi vidurkiui**. Vadinasi, pagal (4.2.4), standartinis nuokrypis yra lygus šakniai iš vidurkio:  $\sigma = \sqrt{\bar{x}}$ . Šis faktas leidžia įvertinti radioaktyviojo bandinio aktyvumo matavimo atsitiktinę paklaidą netgi tuomet, kai buvo atliktas tik vienas matavimas. Ši paklaida apytiksliai lygi šakniai iš to matavimo rezultato:  $\sigma \approx \sqrt{x}$ , o santykinė paklaida yra apytiksliai atvirkštinė šakniai iš matavimo rezultato:  $\sigma/\bar{x} \approx 1/\sqrt{\bar{x}}$ . Pastarosios lygybės yra apytikslės, nes atskiro matavimo rezultatas  $x$  tik apytiksliai sutampa su vidurkiu  $\bar{x}$ .

Taigi, norint sumažinti dalelių vidutinio skaičiaus santykinę matavimo paklaidą, reikia didinti matavimų metu užregistruotą dalelių skaičių. Tai galima pasiekti, naudojant didesnio aktyvumo šaltinį arba didinant matavimų trukmę. Be to, nėra jokio skirtumo, ar bus atliktas vienas 10 s matavimas, ar 10 matavimų po 1 s: abiem atvejais santykinė paklaida bus vienoda, nes pilnutinis užregistruotų dalelių skaičius bus vienodas. Vadinasi, yra svarbi tik

<sup>1</sup> Reikia turėti omenyje, kad vidutinis skaitiklio užregistruotų per 1 s dalelių skaičius  $\bar{x}$  skiriasi nuo bandinio aktyvumo (t.y., nuo vidutinio per 1 s skilusių branduolių skaičiaus) pastoviu daugikliu  $k$ , kuris yra mažesnis už vienetą. Aktyvumas lygus  $\bar{x}/k$ , jo matavimo absoliutinė paklaida lygi  $\sigma/k$ , o santykinė paklaida lygi  $\sigma/\bar{x}$ .

pilnutinė matavimų trukmė: kuo ji didesnė, tuo didesnis matavimų tikslumas. Matavimo paklaida yra atvirkščiai proporcinga kvadratinei šakniai iš pilnutinės matavimų trukmės. Tai galima įrodyti tokiu būdu. Tarkime, kad pilnutinis matavimų metu užregistruotų dalelių skaičius yra  $N$ , o pilnutinė matavimų trukmė lygi  $T$ . Aišku, kad dalelių skaičiaus per laiko vienetą empirinis vidurkis lygus  $\bar{x} = N/T$ , nepriklausomai nuo atliktų matavimų skaičiaus. Tačiau dalelių skaičius per laiką  $T$  įvertintas su paklaida, kuri apytiksliai lygi  $\sqrt{N}$ . Vadinasi, matuojamojo vidurkio empirinė vertė ir matavimo paklaida yra lygios

$$\frac{N \pm \sqrt{N}}{T} = \frac{N}{T} \pm \sqrt{\frac{N}{T^2}} = \frac{N}{T} \pm \sqrt{\frac{N/T}{T}} = \bar{x} \pm \sqrt{\frac{\bar{x}}{T}}. \quad (4.2.6)$$

Taigi, vidurkio matavimo paklaida yra lygi  $\sqrt{\bar{x}/T}$ , t.y., atvirkščiai proporcinga šakniai iš  $T$ .

Aukščiau buvo laikoma, kad visi matavimai atliekami vienodom sąlygom. Jeigu bandinio aktyvumas kinta laike (kaip laboratoriniame darbe Nr. 5), tuomet neįmanoma atlikti dviejų matavimų tiksliai vienodom sąlygom: antrojo matavimo metu bandinio aktyvumas skirsis nuo to, kuris buvo pirmojo matavimo metu. Tokiu atveju vienintelis būdas įvertinti aktyvumo matavimo paklaidą – pasinaudoti aukščiau minėtąja radioaktyviosios spinduliuotės savybe: **atskiro matavimo atsitiktinė paklaida apytiksliai lygi šakniai iš to matavimo rezultato.**

### 4.3. Tikimybės sąvoka. Atsitiktinio dydžio skirstinys. Puasono skirstinys

Duotojo matavimo rezultato „galimumo laipsnį“ nusako jo *dažnis*, t.y., matavimų, kurių rezultatai tenkina duotąją sąlygą, dalis pilnutiniame matavimų skaičiuje. Pvz., jeigu 40 iš 200 matavimų rezultatas lygus 1, tuomet tokio rezultato dažnis lygus  $40/200 = 0.2$ . Esant baigtiniam matavimų skaičiui, atsitiktinio dydžio matavimo rezultato dažnis taip pat yra atsitiktinis dydis. Tačiau patirtis rodo, kad, didinant matavimų skaičių ir nesikeičiant matavimo sąlygoms, duotojo rezultato dažnis stabilizuojasi, artėdamas prie tam tikros vidutinės reikšmės, kuri vadinama to rezultato *tikimybe*. Vadinasi, **duotojo rezultato tikimybė – tai to rezultato dažnio ribinė reikšmė, kai matavimų skaičius neribotai auga.** Eksperimentiškai įvertinant tikimybę, ji laikoma apytiksliai lygia išmatuotam dažniui. Pvz., jeigu, atlikus 200 matavimų, 40 kartų buvo užregistruota 1 dalelė, tuomet tikimybė, kad skaitiklis vieno matavimo metu užregistruos 1 dalelę, yra apytiksliai lygi  $40/200 = 0.2$ .

Kadangi, neribotai didėjant matavimų skaičiui, kiekvieno įmanomo rezultato dažnis stabilizuojasi, tai vidurkis (4.2.1) ir dispersija (4.2.3) taip pat artėja prie tam tikrų tiksliai apibrėžtų verčių. Šias vertes galima išreikšti skirtingų rezultatų tikimybėmis. Pvz., jeigu tiriamasis atsitiktinis dydis yra skaitiklio užregistruotų dalelių skaičius  $k$ , tuomet jo vidurkį  $\bar{k}$  ir dispersiją  $D$  galima išreikšti šitaip:

$$\bar{k} = \sum_{k=0}^N P_k k, \quad (4.3.1)$$

$$D = \sum_{k=0}^N P_k (k - \bar{k})^2 = \left( \sum_{k=0}^N P_k k^2 \right) - \bar{k}^2; \quad (4.3.2)$$

čia  $P_k$  ( $k = 0, 1, 2, \dots, N$ ) yra tikimybė, kad vieno matavimo metu skaitiklis užregistruos  $k$  dalelių, o  $N$  yra nestabiliųjų branduolių skaičius tiriamajame radioaktyviajame bandinyje. Dažniausiai branduolių skaičius  $N$  būna toks didelis, kad teorinėje analizėje jį galima laikyti begaliniu.

Vieno matavimo metu skaitiklis gali užregistruoti 0, 1, 2, ... dalelių. Vadinasi, šiuo atveju galimos atsitiktinio dydžio vertės yra visi natūralieji skaičiai (teigiamieji sveikieji skaičiai ir nulis). Tokie dydžiai, kurių galimų verčių skaičius bet kuriame baigtinio pločio intervale yra baigtinis, yra vadinami *diskrečiaisiais dydžiais*. Taigi, užregistruotų dalelių skaičius yra diskretusis atsitiktinis dydis. Kita atsitiktinių dydžių grupė yra tolydieji atsitiktiniai dydžiai. *Tolydusis dydis* – tai dydis, kurio galimų verčių skaičius bet kuriame baigtinio pločio intervale yra begalinis. Dauguma praktikoje sutinkamų fizikinių dydžių yra tolydieji, pvz., masė, ilgis, temperatūra.

Diskretusis atsitiktinis dydis laikomas pilnai apibrėžtu, jeigu žinomos visų galimų jo verčių tikimybės. Tolydusis atsitiktinis dydis laikomas pilnai apibrėžtu, jeigu žinoma jo tikimybės tankio funkcija (žr. 4.4 poskyrį). Taisyklė (lentelė arba funkcija), kuri nusako šiais tikimybės (arba tikimybės tankį), vadinama atsitiktinio dydžio *skirstiniu*.

Skaitiklio užregistruotų dalelių skaičiaus skirstinį nusako tikimybės  $P_k$ , atitinkančios visas įmanomas dalelių skaičiaus vertes ( $k = 0, 1, 2, \dots$ ). Išvesime šių tikimybų matematinę išraišką. Tarkime, kad turime  $N$  nestabiliųjų branduolių, kurių fizikinė pusėjimo trukmė yra žinoma. Be to, kiekvienam branduoliui yra žinoma tikimybė  $p$ , kad tas branduolys skils per duotąjį laiką ir kad šis skilimas bus užregistruotas (t.y., kad branduolys skils ir jo išspinduliuotoji dalelė pataikys į detektorį). Tuomet tikimybė, kad branduolys per duotąjį laiką arba neskils, arba jo išspinduliuotoji dalelė nepataikys į detektorį, yra lygi  $1 - p$ . Kiekvienam branduoliui priskirkime eilės numerį. Pagal nepriklausomųjų įvykių tikimybų sandaugos taisyklę, tikimybė, kad per tą laiką bus užregistruoti branduolių su numeriais nuo 1 iki  $k$  skilimai, o branduolių su numeriais nuo  $k+1$  iki  $N$  skilimai nebus užregistruoti (arba neįvyks), yra lygi  $p^k(1-p)^{N-k}$ . Norint apskaičiuoti tikimybę, kad skaitiklis užregistruos *bet kurių*  $k$  branduolių skilimus, reikia sudėti tikimybės, atitinkančias visas įmanomas  $k$  branduolių imtis iš  $N$  branduolių (tokios imtys kartais vadinamos kėliniais iš  $N$  po  $k$  elementų). Kėlinių iš  $N$  po  $k$  elementų skaičių nusako binominiai koeficientai

$$C_N^k = \frac{N!}{k!(N-k)!}; \quad (4.3.3)$$

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

$$P_k = C_N^k p^k (1-p)^{N-k} = \frac{N!}{k!(N-k)!} p^k (1-p)^{N-k}. \quad (4.3.4)$$

Ši formulė nusako **binominį skirstinį**. Rasime vidutinį per vieną matavimą užregistruotų dalelių skaičių  $\bar{k}$ . Kadangi laikome, kad vieno skilimo metu išspinduliuojama viena dalelė, tai, pagal (4.3.1) formulę, kiekvieno branduolio indėlis į  $\bar{k}$  yra lygus  $p \cdot 1 + (1-p) \cdot 0 = p$ . Kadangi visi branduoliai yra vienodi, tai

$$\bar{k} = pN.$$

Vadinasi,  $p = \bar{k} / N$ . Įrašę šią  $p$  išraišką į (4.3.4) formulę, gauname

$$P_k = \frac{N!}{k!(N-k)!} \cdot \frac{\bar{k}^k}{N^k} \left(1 - \frac{\bar{k}}{N}\right)^{N-k}.$$

Nestabiliųjų branduolių skaičius  $N$  bet kuriame radioaktyviajame šaltinyje yra labai didelis (dažniausiai viršija  $10^{10}$ ). Todėl pastarojoje formulėje galima pereiti prie ribos  $N \rightarrow \infty$ . Kai  $N \gg k$ ,

$$\frac{N!}{(N-k)!} \approx N^k,$$

o laipsnio rodiklį  $N-k$  galima laikyti lygiu  $N$ , todėl

$$P_k = \frac{(\bar{k})^k}{k!} \lim_{N \rightarrow \infty} \left(1 - \frac{\bar{k}}{N}\right)^N = \frac{(\bar{k})^k}{k!} \lim_{N \rightarrow \infty} \left(1 - \frac{\bar{k}}{N}\right)^{\frac{N}{\bar{k}} \bar{k}} = \frac{(\bar{k})^k}{k!} \left[ \lim_{x \rightarrow \infty} \left(1 - \frac{1}{x}\right)^x \right]^{\bar{k}};$$

čia  $x = N / \bar{k}$ . Matematinės analizės metodais galima įrodyti, kad

$$\lim_{x \rightarrow \infty} \left(1 - \frac{1}{x}\right)^x = \frac{1}{e};$$

čia  $e \approx 2.71828$ . Vadinasi,

$$P_k = \frac{(\bar{k})^k}{k!} e^{-\bar{k}} \quad (k = 0, 1, 2, \dots). \quad (4.3.5)$$

Ši formulė nusako **Puasono skirstinį**. Taigi, Puasono skirstinys – tai binominio skirstinio (4.3.4) ribinis atvejis, kuris atitinka didelius  $N$ . Jeigu  $k > 10$ , tuomet faktorialą  $k!$ , kuris įeina į (4.3.5) išraišką, paprasčiau skaičiuoti pagal apytikslę Stirlingo formulę:  $k! \approx k^k e^{-k} \sqrt{2\pi k}$ .

Per duotąjį laiko tarpą skaitiklio užregistruotų dalelių skaičius yra pasiskirstęs pagal Puasono skirstinį. Aišku, kad tai įmanoma tik tuo atveju, kai branduolių skilimų skaičius radioaktyviajame šaltinyje per fiksuotą laiko tarpą

taip pat pasiskirstęs pagal Puasono skirstinį, nes užregistruotų dalelių skaičius yra proporcingas branduolių skilimų skaičiui.

Apskritai, atsitiktinis dydis būna pasiskirstęs pagal Puasono skirstinį (4.3.5) tais atvejais, kai to dydžio prasmė – kokių nors vienerūšių įvykių skaičius per fiksuotą laiko tarpą (pvz., branduolių skilimų skaičius bandinyje, iškvietimų skaičius telefono stotyje, lankytojų skaičius parduotuvėje ir pan.); be to, šis “įvykių srautas” turi tenkinti šias tris sąlygas:

1. **Stacionarumas**. Ši savybė reiškia, kad vidutinis įvykių skaičius per laiko vienetą yra pastovus.
2. **Ordinarumas**. Ši savybė reiškia, kad, mažinant matavimo trukmę iki nykstamai mažo dydžio, dviejų arba didesnio įvykių skaičiaus tikimybė artėja į nulį greičiau už vieno įvykio tikimybę. Paprasčiau kalbant, įvykiai atsiranda po vieną, o ne grupėmis po du, tris ir t.t.
3. **Poveiksmio nebuvimas**. Ši savybė reiškia, kad duotojo matavimo rezultato tikimybė nepriklauso nuo ankstesnių matavimų rezultatų. T.y., įvykių srauto “ateitis” nepriklauso nuo jo praeities (iš čia – terminas “poveiksmio nebuvimas”). Fizikinė šios savybės prasmė yra tokia: priežastys, dėl kurių atsirado duotasis konkretus įvykis, nėra susijusios su jokio kito įvykio priežastimis.

Laiko intervale, kurio metu radioaktyviojo bandinio aktyvumas beveik nekinta (t.y., kuris žymiai mažesnis už pusėjimo trukmę), branduolių skilimų skaičius radioaktyviajame bandinyje taip pat tenkina išvardintąsias tris sąlygas. Todėl per duotąjį laiko tarpą skilusių branduolių skaičius  $k$  pasiskirstęs (4.3.5) dėsniu.

Puasono skirstiniu aprašomo atsitiktinio dydžio dispersija sutampa su vidurkiu:

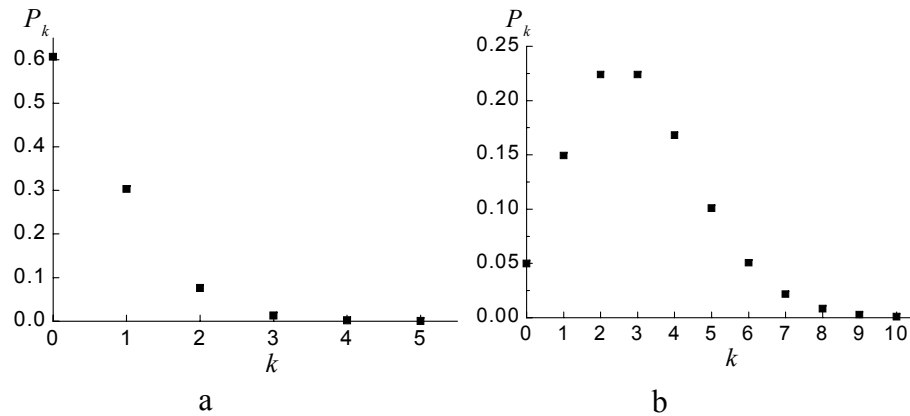
$$D = \bar{k}. \quad (4.3.6)$$

Iš (4.3.5) išplaukia

$$\frac{P_{k+1}}{P_k} = \frac{\bar{k}}{k+1}. \quad (4.3.7)$$

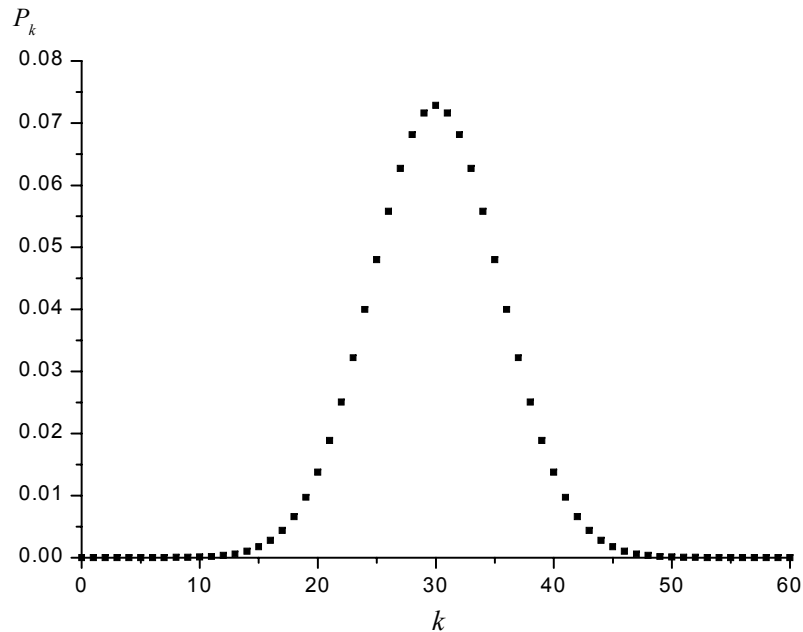
Todėl, kai  $\bar{k} < 1$ ,  $P_k$  monotoniškai mažėja, augant  $k$  (žr. 4.4a pav.). Kai  $\bar{k} > 1$ , tikimybės  $P_k$  prieklausoje nuo  $k$  atsiranda maksimumas, kurio padėtis apytiksliai sutampa su  $\bar{k}$  (žr. 4.4b pav.). Augant  $\bar{k}$ , ši prieklausa tampa vis labiau simetrinė atžvilgiu maksimumo (žr. 4.5 pav.). Kai  $\bar{k}$  yra pakankamai didelis (praktiškai – kai  $\bar{k} > 20$ ), tikimybę (4.3.5) galima skaičiuoti pagal apytikslę formulę

$$P_k \approx \frac{1}{\sqrt{2\pi\bar{k}}} \exp\left[-\frac{(k-\bar{k})^2}{2\bar{k}}\right]. \quad (4.3.8)$$



4.4 pav. Puasono skirstinio pavidalas, esant mažoms vidurkio  $\bar{k}$  vėrtėms.

a)  $\bar{k} = 0.5$ , b)  $\bar{k} = 3$ .



4.5 pav. Puasono skirstinio pavidalas, esant didelėms vidurkio  $\bar{k}$  vėrtėms ( $\bar{k} = 30$ ).

Tikimybę, kad vieno matavimo rezultatas priklausys intervalui  $i \leq k \leq j$ , žymėsime  $P\{i \leq k \leq j\}$ . Žinant skirstinį ir pasinaudojus nesutaikomųjų įvykių tikimybių sudėties taisykle (tikimybė, kad įvyks bet kuris vienas iš kelių nesutaikomųjų įvykių, yra lygi tų įvykių tikimybių sumai), nesunku apskaičiuoti tikimybę, kad matavimo rezultatas pakliūs į intervalą  $i \leq k \leq j$ :

$$P\{i \leq k \leq j\} = \sum_{k=i}^j P_k. \quad (4.3.9)$$

Visų įmanomų rezultatų tikimybių suma lygi vienetui:

$$P\{k \geq 0\} = \sum_{k=0}^{\infty} P_k = 1. \quad (4.3.10)$$

#### 4.4. Tikimybės tankio funkcija. Puasono skirstinio tolydusis artinys

Jeigu atsitiktinis dydis  $X$  yra tolydus, tuomet jo skirstinį nusako *tikimybės tankio* funkcija  $f(x)$ , kuri apibrėžiama šitaip:

$$f(x) = \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{P\{x \leq X < x + \Delta x\}}{\Delta x}; \quad (4.4.1)$$

čia užrašymas " $P\{x \leq X < x + \Delta x\}$ " reiškia tikimybę, kad atsitiktinio dydžio  $X$  vertė priklausys intervalui  $[x; x + \Delta x[$ . T.y., tikimybės tankis taške  $x$  – tai tikimybės aptikti dydį  $X$  intervale nuo  $x$  iki  $x + \Delta x$  ir šio intervalo pločio  $\Delta x$  santykio riba, kai  $\Delta x$  artėja į nulį.

Tikimybė, kad tolydžiojo atsitiktinio dydžio  $X$  matavimo rezultatas pakliūs į duotąjį intervalą  $x_1 \leq X < x_2$ , yra lygi

$$P\{x_1 \leq X < x_2\} = \int_{x_1}^{x_2} f(x) dx. \quad (4.4.2)$$

(plg. su formule (4.3.9) diskretiesiems atsitiktiniams dydžiams). Lygybę (4.4.2) galima vaizdžiai iliustruoti geometriškai: nubraižius priklausą  $f(x)$ , tikimybė, jog dydžio  $X$  matavimo rezultatas bus tarp  $x_1$  ir  $x_2$ , lygi plotui po kreive  $f(x)$  intervale nuo  $x_1$  iki  $x_2$  (žr. 4.6 pav.).

Kaip ir diskrečiųjų atsitiktinių dydžių atveju, visų įmanomų tolydžiojo atsitiktinio dydžio  $X$  vėrtių tikimybių suma lygi vienetui:

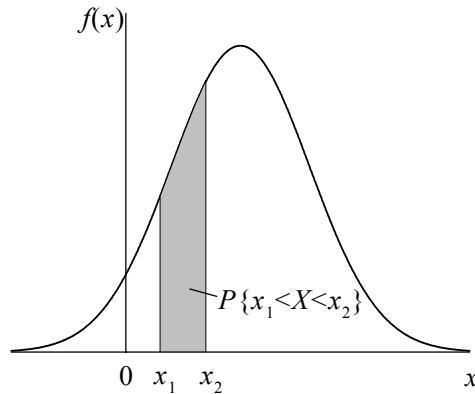
$$P\{-\infty \leq X < \infty\} = \int_{-\infty}^{\infty} f(x) dx = 1. \quad (4.4.3)$$

T.y., pilnasis plotas po tikimybės tankio kreive  $f(x)$  (žr. 4.6 pav.) lygus vienetui (plg. su formule (4.3.10) diskretiesiems atsitiktiniams dydžiams).

Jeigu intervale  $x \leq X < x + \Delta x$  tolydžiojo atsitiktinio dydžio tikimybės tankis beveik nekinta (t.y., jeigu  $\Delta x$  yra pakankamai mažas), tuomet tikimybę  $P\{x \leq X < x + \Delta x\}$  galima apytiksliai skaičiuoti pagal formulę

$$P\{x \leq X < x + \Delta x\} \approx f(x) \Delta x. \quad (4.4.4a)$$





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

Apytikslę lygybę (4.4.4a) tiesiogiai išplaukia iš tikimybės tankio apibrėžimo (4.4.1). Šiek tiek patikslintas lygybės (4.4.4a) variantas:

$$P\{x \leq X < x + \Delta x\} \approx f\left(x + \frac{\Delta x}{2}\right) \Delta x. \quad (4.4.4b)$$

T.y., tikslesnis rezultatas gaunamas, jeigu tikimybės tankis  $f(x)$  skaičiuojamas ne intervalo krašte, o intervalo centre.

Jeigu Puasono skirstiniu aprašomo diskrečiojo atsitiktinio dydžio  $k$  (pvz., branduolių skilimų skaičiaus per duotąjį laiką) vidurkis  $\bar{k}$  yra pakankamai didelis, tuomet to dydžio skirstinį patogiau aprašyti taip, lyg jis būtų tolydus, t.y., naudojant ekvivalenčiąją tikimybės tankio funkciją  $f(x)$ . Tuomet apytikslę sąryšį (4.4.4a) arba (4.4.4b) galima naudoti, ir kalbant apie diskretųjį atsitiktinį dydį. Tačiau tokiu atveju  $\Delta x$  turi būti žymiai didesnis už vienetą (ir kartu pakankamai mažas, kad visų intervale  $x \leq k < x + \Delta x$  esančių diskrečiųjų verčių tikimybės būtų galima laikyti beveik vienodomis). Jeigu diskrečiojo atsitiktinio dydžio galimos vertės yra natūralieji skaičiai, tuomet taškuose, kurie atitinka galimas diskrečiojo atsitiktinio dydžio vertes, ekvivalenčioji tikimybės tankio funkcija lygi

$$f(k) = P_k \quad (k = 0, 1, 2, \dots). \quad (4.4.5)$$

Įrašius į šią formulę Puasono skirstinio išraišką didelių vidurkių atvejui (4.3.8), gaunama Puasono skirstinio tolydžiojo artinio tikimybės tankio funkcija:

$$f(k) \approx \frac{1}{\sqrt{2\pi\bar{k}}} \exp\left[-\frac{(k - \bar{k})^2}{2\bar{k}}\right]. \quad (4.4.6)$$

#### 4.5. Gauso skirstinys

Matuojant tolydžių dydį, matavimo paklaidų skirstinys dažniausiai yra tokio pavidalo:

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi D}} \exp\left[-\frac{(x - \bar{x})^2}{2D}\right] \equiv \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \exp\left[-\frac{(x - \bar{x})^2}{2\sigma^2}\right] \quad (4.5.1)$$

(visi žymėjimai turi tą pačią prasmę, kaip ir 4.2 poskyryje). Tokio pavidalo skirstinys vadinamas **Gauso skirstiniu** arba **normaliuoju skirstiniu**. Gauso skirstinio tikimybės tankio funkcija pavaizduota 4.7 pav. Pasirinkus matuojamojo dydžio  $x$  verčių intervalą, kurio centras sutampa su vidurkiu  $\bar{x}$ , tikimybė, kad atskiro matavimo rezultatas priklausys duotajam intervalui, šitaip susijusi su to intervalo plotiu:

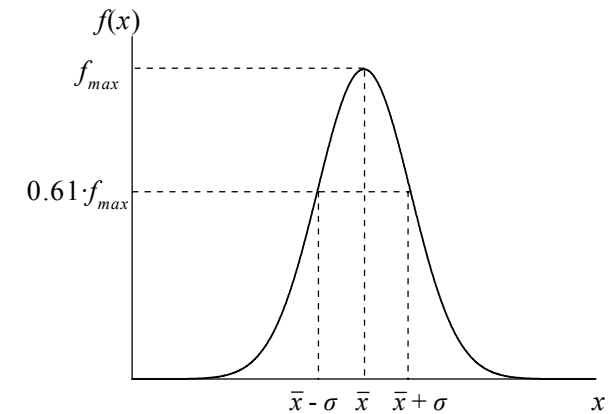
$$P\{\bar{x} - \sigma < x < \bar{x} + \sigma\} = 0.683,$$

$$P\{\bar{x} - 2\sigma < x < \bar{x} + 2\sigma\} = 0.954,$$

$$P\{\bar{x} - 3\sigma < x < \bar{x} + 3\sigma\} = 0.997.$$

Pastaroji lygybė išreiškia “trijų sigma taisyklę” Gauso skirstinio atveju: esant pakankamai dideliui matavimų skaičiui, 99.7 % visų matavimų rezultatai priklauso intervalui  $\bar{x} - 3\sigma < x < \bar{x} + 3\sigma$ .

Gauso skirstinys sutinkamas tais atvejais, kai matavimo atsitiktinė paklaida lygi sumai didelio skaičiaus (praktiškai – didesnio už 5) vienodos didumo eilės paklaidų, kurias sukelia skirtingi nepriklausomi vienas nuo kito veiksniai. Pvz., matuojant kūno svorį jautriomis mechaninėmis svarstyklėmis, matavimo atsitiktinę paklaidą sudaro: 1) paklaida dėl matavimo rezultato priklausomybės nuo kūno padėties ant svarstyklių lėkštelės, 2) paklaida dėl netikslaus svarstyklių rodyklės vizualinio sutapatinimo su skalės padala,



4.7 pav. Gauso skirstinio tikimybės tankio funkcijos pavidalas.  $\sigma$  yra standartinis nuokrypis

3) paklaida dėl stalo vibracijos, ir t.t. Tokiais atvejais, nepriklausomai nuo kiekvienos iš dedamųjų paklaidų skirstinio pavidalo, pilnutinės atsitiktinės paklaidos skirstinys yra (4.5.1) pavidalo. Todėl Gauso skirstinys užima išskirtinę vietą tikimybių teorijoje. Matuojant tolydžiuosius makroskopinius dydžius (pvz., masę arba ilgį), matavimų paklaidų skirstinys beveik visada yra Gauso skirstinio pavidalo.

Palyginus formules (4.4.6) ir (4.5.1), galima teigti, kad **esant didelėms vidurkio  $\bar{k}$  vertėms ( $\bar{k} > 20$ ), Puasono skirstinio tolydusis artinys apytiksliai sutampa su Gauso skirstiniu, kurio dispersija  $D$  lygi vidurkiui  $\bar{k}$ .**

#### 4.6. Atsitiktinio dydžio skirstinio matavimas. Histogramos

Atsitiktinių dydžių matavimo rezultatai dažniausiai vaizduojami histogramomis. **Histograma** – tai stulpelių diagrama, kurioje kiekvieno stulpelio kraštai nusako kažkurį atsitiktinio dydžio verčių intervalą, o stulpelio aukštis lygus matavimų skaičiui, kurių metu išmatuotoji atsitiktinio dydžio vertė pakliuvo į tą intervalą. 4.8 pav. iliustruoja histogramos sudarymą duomenų rinkiniui, kuris pavaizduotas 4.1 pav. Dėl vaizdumo histogramos  $X$  ašis yra vertikali (teigiamoji kryptis – į viršų), o  $Y$  ašis yra horizontali. Šiuo atveju histogramos stulpelių plotis lygus 5, o stulpelio aukštis nusako skaičių taškų, kurie yra tarp gretimų horizontalių linijų kairiajame grafike. Gautoji histograma pavaizduota 4.9 pav. Pirmojo stulpelio aukštis lygus skaičiui matavimų, kurių metu buvo užregistruota nuo 31 iki 35 dalelių (tokių matavimų buvo 1), antrojo stulpelio aukštis lygus skaičiui matavimų, kurių metu buvo užregistruota nuo 36 iki 40 dalelių (tokių matavimų buvo 6), ir t.t.

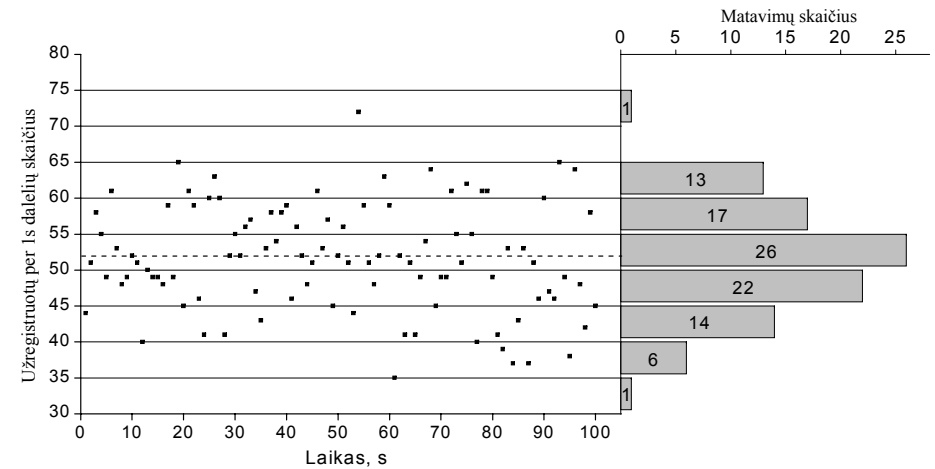
**Histogramos forma apytiksliai nusako matuojamojo atsitiktinio dydžio skirstinio pavidalą.** Pvz., histograma, kuri pavaizduota 4.9 pav., savo pavidalu panaši į Puasono skirstinį, kuris pavaizduotas 4.5 pav. Taip yra todėl, kad atsitiktinio dydžio vertės patekimo į duotąjį intervalą tikimybė yra apytiksliai lygi tokio įvykio dažniui, o pastarasis yra proporcingas to įvykio pasikartojimų skaičiui, kuris ir vaizduojamas histogramoje.

Pagal tikimybės apibrėžimą ir pagal nesutaikomųjų įvykių tikimybių sudėties dėsnį, matavimų skaičius, kurių metu buvo užregistruota nuo  $k$  iki  $k + \Delta k - 1$  dalelių, yra lygus

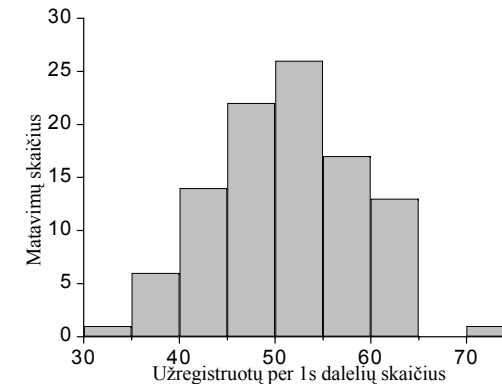
$$n_{k,\Delta k} \approx n(P_k + P_{k+1} + \dots + P_{k+\Delta k-1}); \quad (4.6.1)$$

čia  $n$  yra pilnutinis matavimų skaičius, o  $P_k$  yra tikimybė, kad atskiros matavimo rezultatas bus lygus  $k$  (indeksai  $k, \Delta k$  žymėjime  $n_{k,\Delta k}$  nurodo mažiausią sveikąjį skaičių stulpelio intervale ir stulpelio plotį). Jeigu histogramos stulpelio plotis  $\Delta k$  yra lygus vienetui, tuomet (4.6.1) lygybė supaprastėja:

$$n_k \approx nP_k; \quad (4.6.2)$$



4.8 pav. Histogramos sudarymas



4.9 pav. Histograma, kuri atitinka 4.8 pav. duomenis

čia  $n_k$  yra skaičius matavimų, kurių metų buvo užregistruota  $k$  dalelių. Vadinas, kai  $\Delta k = 1$ , tuomet, padalinus visų stulpelių aukščius iš pilnutinio matavimų skaičiaus  $n$ , iš karto gaunamas skirstinys:

$$P_k \approx \frac{n_k}{n}. \quad (4.6.3)$$

Jeigu  $\Delta k > 1$  (kaip 4.9 pav.) ir  $\Delta k$  yra mažesnis už standartinę nuokrypį  $\sigma$ , tuomet lygybę (4.6.2) galima pakeisti kita apytiksle lygybe

$$n_{k,\Delta k} \approx n\Delta k P_{k+(\Delta k/2)}. \quad (4.6.4)$$

Šis sąryšis išplaukia iš (4.4.4b) ir (4.4.5) formulių. Tuo atveju, kai  $\Delta k$  yra nelyginis, (4.6.4) formulėje vietoj  $\Delta k/2$  reikia naudoti sveikąją dalį  $(\Delta k-1)/2$ .

Taigi, kai  $\Delta k > 1$  ir  $\Delta k < \sigma$ , pagal histogramą galima įvertinti tikimybę, kad atskiromatavimų rezultatas atitiks kurio nors stulpelio centrą:

$$P_{k+(\Delta k/2)} \approx \frac{n_{k,\Delta k}}{n\Delta k}. \quad (4.6.5)$$

Lygybes (4.6.4) ir (4.6.5) su nežymiais pakeitimais galima pritaikyti ir tolydiesiems atsitiktiniams dydžiams (tuo tikslu vietoj tikimybės  $P_k$  reikia naudoti tikimybės tankį  $f(x)$ ).

#### 4.7. Darbo užduotys

1. Atlikti kelis tūkstančius  $\beta$  dalelių arba  $\gamma$  kvantų skaičiaus matavimų, kurių kiekvieno trukmė – kelios dešimtosios sekundės. Šiuos matavimus atlikti, esant trims spinduliuotės intensyvumo vėrtėms.
2. Kiekvienam intensyvumui nubraižyti dalelių skaičiaus histogramą, apskaičiuoti vidurkį, dispersiją ir standartinę nuokrypį.
3. Išmatuotąjį dalelių skaičiaus skirstinį palyginti su Puasono skirstiniu.

#### 4.8. Matavimų tvarka

1. Įjungiami dalelių skaitiklio (detektoriaus) maitinimo blokas, registravimo įrenginys ir kompiuteris, kuris naudojamas registravimo įrenginio valdymui ir histogramos skaičiavimui.
2. Šalia skaitiklio padedamas radioaktyvusis šaltinis. Jeigu radioaktyvusis šaltinis yra apsauginiame konteineryje, tuomet konteinerį reikia atidengti ir nukreipti į skaitiklį.
3. Atstumas tarp radioaktyviojo šaltinio ir skaitiklio parenkamas taip, kad vidutinis dalelių skaičius  $\bar{k}$  per vieną matavimą būtų tarp 30 ir 50.
4. Atliekami 3000 matavimų po 0.2 s.
5. Darbo sąsiuvinyje užrašomi histogramos duomenys, t.y., skirtingų rezultatų pasikartojimo skaičiai.
6. Punktai 4 ir 5 pakartojami, esant didesniai atstumui tarp radioaktyviojo šaltinio ir skaitiklio. Atstumas turi būti toks, kad vidurkis būtų tarp 3 ir 5.
7. Atstumas tarp radioaktyviojo šaltinio ir skaitiklio dar labiau padidinamas, kad vidurkis būtų tarp 0.5 ir 1. Pakartojami punktai 4 ir 5.

#### 4.9. Matavimo duomenų analizė

Pagal (4.2.5) ir (4.2.4) formules kiekvienai vidurkio vėrtėi apskaičiuojami dispersija  $D$  ir standartinis nuokrypis  $\sigma$ . Skaičiuojant dispersiją,

(4.2.5) išraišką patogiau užrašyti taip, kad būtų sumuojama ne atskirų matavimų atžvilgiu, o galimų dalelių skaičiaus vėrtių  $k$  atžvilgiu:

$$D = \left( \frac{1}{n} \sum_{k=k_{\min}}^{k_{\max}} n_k k^2 \right) - \bar{k}^2; \quad (4.9.1)$$

čia  $n$  yra pilnutinis matavimų skaičius, kuris atitinka duotąją  $\bar{k}$  vėrtę,  $k_{\min}$  ir  $k_{\max}$  yra mažiausias ir didžiausias dalelių skaičiai, kurie buvo užregistruoti, esant duotai šaltinio padėčiai atžvilgiu skaitiklio, o  $n_k$  yra skaičius matavimų, kurių metu buvo užregistruota  $k$  dalelių.

Vidurkiai, dispersijos ir standartiniai nuokrypiai surašomi į lentelę. Kiekvienai vidurkio vėrtėi patikrinama lygybė (4.3.6).

Kiekvienai vidurkio vėrtėi nubraižoma dalelių skaičiaus per vieną matavimą histograma. Tame pačiame grafike nubraižoma teorinė kreivė, kuri nusako histogramos stulpelių aukščius, kurie būtų gauti tuo atveju, jeigu visų galimų matavimo rezultatų dažniai tiksliai atitiktų Puasono skirstinį (4.3.5). Jeigu stulpelio plotis lygus 1, teorinę kreivę reikia skaičiuoti pagal (4.6.2) formulę, o jeigu didesnis už 1 – pagal (4.6.4) formulę. Šiose formulėse tikimybė  $P_k$  turi būti skaičiuojama pagal Puasono skirstinio funkciją (4.3.5). Jeigu vidurkis  $\bar{k}$  didesnis už 20, vietoj formulės (4.3.5) galima naudoti apytikslę išraišką (4.3.8).

Įvertinamas atitikimas tarp eksperimento ir teorijos.

#### 4.10. Kontroliniai klausimai

1. Kodėl per tam tikrą laiką užregistruotų  $\alpha$ ,  $\beta$  arba  $\gamma$  dalelių skaičius yra atsitiktinis dydis?
2. Atsitiktinio dydžio skirstinio sąvoka. Tikimybės tankis.
3. Atsitiktinio dydžio vidurkis, dispersija ir standartinis nuokrypis.
4. Trijų sigma taisyklė.
5. Gauso skirstinio funkcija. Gauso skirstinio atsiradimo sąlygos.
6. Puasono skirstinio funkcija. Puasono skirstinio atsiradimo sąlygos.
7. Puasono skirstinio pavidalo prieklausa nuo vidurkio.
8. Kuriuo atveju Puasono skirstinį galima pakeisti Gauso skirstiniu?
9. Tikimybės, kad matuojamojo dydžio vėrtė priklausys duotajam intervalui, skaičiavimas.

## 5. Darbas Nr. 5. Dirbtinio radioaktyvumo tyrimas

### 5.1. Pagrindinis radioaktyviojo skilimo dėsnis. Skilimo kreivės

Nestabiliųjų branduolių skaičiaus bandinyje prieklausą nuo laiko nusako pagrindinis radioaktyviojo skilimo dėsnis (1.28.2):

$$N(t) = N_0 e^{-\lambda t} = N_0 \cdot 2^{-t/T_{1/2}}; \quad (5.1.1)$$

čia  $N_0$  yra radioaktyviojo izotopo branduolių skaičius pradinio laiko momentu  $t = 0$ ,  $\lambda$  yra **skilimo konstanta**, o  $T_{1/2}$  yra pusėjimo trukmė:

$$T_{1/2} = \frac{\ln 2}{\lambda}. \quad (5.1.2)$$

Radioaktyviojo izotopo **fizinė pusėjimo trukmė** arba **skilimo pusamžis** – tai vidutinis laikas, per kurį to izotopo branduolių skaičius sumažėja 2 kartus. Vidutinis per laiko vienetą skylančių branduolių skaičius

$$I \equiv -\frac{dN}{dt}. \quad (5.1.3)$$

vadinamas radioaktyviojo šaltinio **aktyvumu**. Aktyvumas dažniausiai išreiškiamas vidutiniu skilimų skaičiumi per sekundę (skil./s). Šis aktyvumo vienetą vadinamas **bekereliu (Bq)**: 1 Bq = 1 skil./s.

Pagal radioaktyviojo skilimo dėsnio diferencialinę formą (1.28.1), šaltinio aktyvumas  $I$  ir nestabiliųjų branduolių skaičius  $N$  kiekvienu laiko momentu susiję sąryšiu

$$I = \lambda N. \quad (5.1.4)$$

Šaltinio aktyvumo prieklausa nuo laiko vadinama **skilimo kreive**. Iš (5.1.4) išplaukia, kad aktyvumo  $I$  prieklausa nuo laiko yra to paties pavidalo, kaip ir radioaktyviųjų branduolių skaičiaus  $N$  laikinė prieklausa:

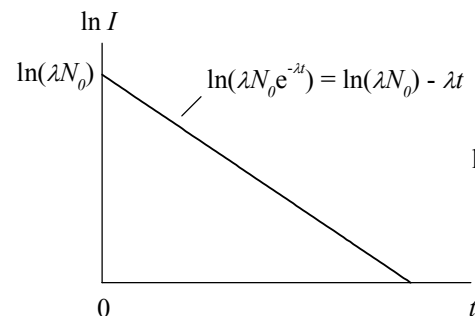
$$I(t) = \lambda N(t) = \lambda N_0 e^{-\lambda t} = I_0 e^{-\lambda t} = I_0 \cdot 2^{-t/T_{1/2}}; \quad (5.1.5)$$

čia  $I_0$  yra pradinis šaltinio aktyvumas:

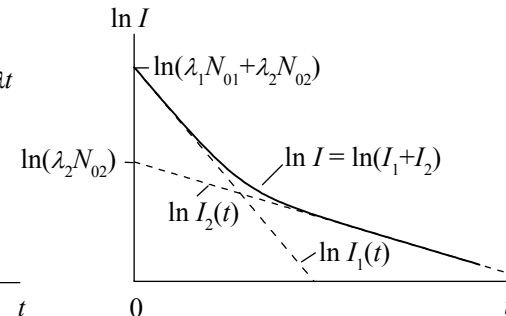
$$I_0 = \lambda N_0. \quad (5.1.6)$$

Eksponentinės funkcijos (5.1.5) logaritmas yra tiesė (žr. 5.1 pav.). Jos susikirtimo su ašimi  $t = 0$  taškas nusako pradinį aktyvumą (5.1.6), o posvyris – skilimo konstantą  $\lambda$  su minuso ženklu (smulkiau apie tiesinių prieklausų analizę rašoma priede B). Skilimo kreivės analizė – tai pagrindinis izotopų pusėjimo trukmės nustatymo būdas, kai pusėjimo trukmė yra nuo kelių sekundžių iki kelių metų. Jeigu pusėjimo trukmė yra žymiai didesnė, tuomet ji įvertinama, matuojant radioaktyviųjų branduolių skaičių  $N$  bandinyje ir šaltinio aktyvumą  $I$  ir naudojantis (5.1.4) formule.

Jeigu radioaktyvusis šaltinis yra sudarytas iš kelių radioaktyviųjų izotopų, tuomet šaltinio aktyvumas yra lygus tų izotopų aktyvumų sumai. Jeigu šie izotopai yra nepriklausomi (t.y., jeigu nė vienas jų nėra kito tame pačiame



5.1 pav. Radioaktyviojo šaltinio aktyvumo natūraliojo logaritmo prieklausa nuo laiko.



5.2 pav. Dviejų nepriklausomų radioaktyviųjų izotopų mišinio aktyvumo natūraliojo logaritmo prieklausa nuo laiko.

šaltinyje esančio izotopo skilimo produktas), skilimo kreivė yra lygi kelių (5.1.5) pavidalo dėmenų sumai. Pvz., dviejų nepriklausomų radioaktyviųjų izotopų atveju

$$I = I_1 + I_2 = I_{01} e^{-\lambda_1 t} + I_{02} e^{-\lambda_2 t} = \lambda_1 N_{01} e^{-\lambda_1 t} + \lambda_2 N_{02} e^{-\lambda_2 t}; \quad (5.1.7)$$

čia  $I_1$  ir  $I_2$  yra komponenčių aktyvumai,  $I_{01}$  ir  $I_{02}$  yra jų pradiniai aktyvumai,  $\lambda_1$  ir  $\lambda_2$  yra komponenčių skilimo konstantos, o  $N_{01}$  ir  $N_{02}$  yra abiejų izotopų pradiniai kiekiai. Šiuo atveju aktyvumo logaritmo prieklausa nuo laiko yra sudaryta iš dviejų tiesinių sričių ir pereinamosios srities tarp jų (žr. 5.2 pav.).

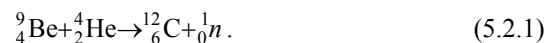
### 5.2. Dirbtinio radioaktyvumo sąvoka. Radiacinė neutronų pagava

Daugumos radioaktyviųjų izotopų pusėjimo trukmės yra žymiai mažesnės už Žemės amžių ( $\approx 5 \cdot 10^9$  metų). Gamtoje tokie trumpaamžiai izotopai gali egzistuoti kaip ilgaaamžių radioaktyviųjų izotopų (pvz.,  $^{232}_{90}\text{Th}$ ,  $^{238}_{92}\text{U}$ ,  $^{235}_{92}\text{U}$ ) skilimo tarpiniai produktai arba gali susidaryti, vykstant branduolinėms reakcijoms, kurias sukelia kosminiai spinduliai. Tačiau natūraliomis sąlygomis egzistuojančių radioaktyviųjų izotopų yra tik maždaug 50. Didžioji dauguma radioaktyviųjų izotopų gali būti gauti tik dirbtiniu būdu, naudojant branduolines reakcijas, kurios vyksta, švitinant stabilūs (neradioaktyvūs) izotopus neutronais, kietaisiais  $\gamma$  spinduliais arba aukštos energijos elektringomis dalelėmis, pvz.,  $\alpha$  dalelėmis, protonais, deuteronais ( $^2\text{H}$  branduoliais) ir kt. Dirbtiniu būdu gautų radioaktyviųjų izotopų savaiminis skilimas vadinamas **dirbtiniu radioaktyvumu**. Iš šiuo metu žinomų radioaktyviųjų izotopų daugiau kaip 2000 buvo gauti dirbtiniu būdu, panaudojant branduolines reakcijas (žr. 1.34 poskyrį).

Kadangi neutronų neveikia Kulono stūmos jėga, tai jie lengviau, negu teigiama įelektrintos dalelės (pvz., protonai arba  $\alpha$  dalelės), priartėja prie branduolio. Todėl neutronai dažnai naudojami radioaktyviems izotopams gauti. Neutronų pagavos dažnis yra atvirkščiai proporcingas neutronų vidutiniam greičiui: mažėjant neutronų greičiui, didėja tikimybė, kad jie bus branduolio pagauti. 1935 m. E. Fermis pastebėjo, kad dirbtinis radioaktyvumas išauga daug kartų, apsupus neutronų šaltinį ir švitinamąjį taikinį daug vandenilio turinčia medžiaga, pvz., vandeniu arba parafinu. Neutronai, tamptai susidurdami su beveik tokios pačios masės protonais (vandenilio atomų branduoliais), greitai netenka energijos (tai išplaukia iš energijos ir judesio kiekio tvermės dėsnių), ir jų vidutinė kinetinė energija sumažėja iki  $3k_B T/2$  ( $k_B$  – Bolcmano konstanta,  $T$  – temperatūra). Tokios energijos neutronai vadinami **šiluminiais neutronais**. Kambario temperatūroje ( $T = 293$  K)  $k_B T \approx 0.025$  eV,

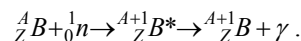
o atitinkamas vidutinis neutronų greitis lygus  $\sqrt{\frac{3k_B T}{m}} \approx 3 \cdot 10^3$  m/s (čia  $m$  yra neutrono masė). Be to, chaotiškai judėdami šioje medžiagoje, neutronai gali praeiti taikinį daug kartų – tai taip pat padidina jų sąveikos su branduoliu tikimybę.

Šiluminių neutronų gavimui dažniausiai naudojama ( $\alpha, n$ ) tipo branduolinė reakcija

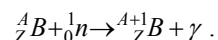


Tipiškas neutronų šaltinis, kuriame vyksta ši branduolinė reakcija – tai mišinys metalinio berilio miltelių ir nedidelio kiekio  $\alpha$  radioaktyvios medžiagos (pvz., plutonio izotopo  ${}^{239}\text{Pu}$ ). (5.2.1) reakcijos metu spinduliuojami neutronai su energijom nuo 0 iki 13 MeV. Neutronų energija sumažinama iki šiluminės energijos aukščiau aprašytu būdu.

Šiluminio neutrono pagava yra dviejų stadijų procesas. Branduoliui pagavus neutroną, visų pirma susidaro sužadintasis branduolys, kurio masės skaičius vienetu didesnis už pradinio branduolio masės skaičių. Po to (dažniausiai – per  $10^{-12}$  s eilės laiką) šis branduolys pereina į pagrindinę būseną, o energijos perteklius išspinduliuojamas  $\gamma$  kvantų pavidalu. Tokia branduolinė reakcija vadinama **radiacine neutronų pagava** ir apibendrintai gali būti užrašyta šitaip:



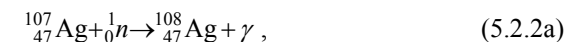
Žvaigždutė po elemento žymėjimo ( $B$ ) reiškia, kad branduolys yra sužadintosios būsenos. Šis tarpinis sužadintasis branduolys kartais vadinamas “kompaund branduoliu” (nuo angliško žodžio *compound* – “sudėtinis”). Užrašant radiacinės neutronų pagavos reakciją, pirmoji jos stadija dažniausiai nerašoma:



Radiacinės neutronų pagavos metu susidaręs izotopas dažniausiai būna  $\beta^-$  aktyvus.

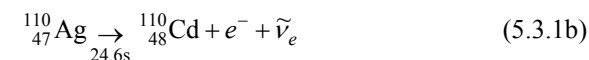
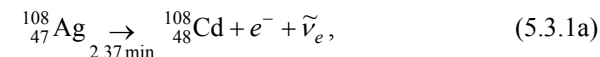
Tarpinio branduolio pilnutinė energija yra lygi pradinio branduolio ir neutrono energijų sumai (turima omenyje reliatyvistinė dalelės energija  $E = mc^2$ , kur  $m$  yra duotosios dalelės masė, o  $c$  – šviesos greitis). Ši energija yra didesnė už susidariusio branduolio pagrindinės būsenos (mažiausią) energiją dydžiu, kuris lygus neutrono ryšio energijai branduolyje. **Nukleono ryšio energija** – tai mažiausias darbas, kurį turi atlikti išorinė jėga, pašalinant nukleoną iš branduolio, ir kartu – energija, kuri išsiskiria  $\gamma$  spinduliuotės pavidalu, kai lėtasis nukleonas yra branduolio pagaunamas.

Radiacinės neutronų pagavos pavyzdžiai – branduolinės reakcijos, kuriose dalyvauja stabilieji sidabro izotopai  ${}^{107}_{47}\text{Ag}$  ir  ${}^{109}_{47}\text{Ag}$ :



### 5.3. Aktyvinimas. Aktyvacijos kreivė. Soties aktyvacija

Branduolinės reakcijos metu susidaręs izotopas dažnai būna radioaktyvus. Pvz., reakcijų (5.2.2a) ir (5.2.2b) metu susidarę izotopai  ${}^{108}_{47}\text{Ag}$  ir  ${}^{110}_{47}\text{Ag}$  yra  $\beta^-$  radioaktyvūs. T.y., vyksta šie virsmai:



(po rodyklėm nurodytos pusėjimo trukmės). Gamtinis sidabras yra stabilųjų izotopų  ${}^{107}_{47}\text{Ag}$  ir  ${}^{109}_{47}\text{Ag}$  mišinys (51.35 %  ${}^{107}_{47}\text{Ag}$  ir 48.65 %  ${}^{109}_{47}\text{Ag}$ ). Todėl, švitinant gamtinį sidabrą neutronais, vyksta abi (5.2.2) branduolinės reakcijos. Šio proceso metu susidaro radioaktyviųjų izotopų  ${}^{108}_{47}\text{Ag}$  ir  ${}^{110}_{47}\text{Ag}$  mišinys, kurio aktyvumo priklauso nuo laiko – tai dviejų eksponentinių funkcijų suma (5.1.7).

Radioaktyviųjų branduolių gavimas, švitinant stabilūs branduolius neutronais, protonais,  $\gamma$  spinduliais ir kitų rūšių spinduliuote, vadinamas **aktyvinimu**. Aktyvinimo priežastis – branduolinės reakcijos, kurios vyksta, sąveikaujant neutronui, aukštos energijos  $\gamma$  kvantui arba greitajam branduoliui su atomo branduoliu (žr. 1.34 ir 5.2 poskyrius). Aktyvinimo metu susidariusių radioaktyviųjų branduolių skaičius vadinamas **aktyvacija**.

Branduolinės reakcijos metu susidariusių branduolių radioaktyvumo tipas priklauso nuo to, kaip pakinta branduolio neutronų ir protonų skaičių

santykis  $\frac{A-Z}{Z}$ . Nustatyta, kad kiekvieno elemento stabilųjų izotopų masės skaičiai  $A$  priklauso palyginti siauram (kelių vienetų pločio) intervalui, kuris vadinamas duotojo elemento **stabilumo sritimi**. Pvz., stabilieji švino izotopai yra  $^{204}_{82}\text{Pb}$ ,  $^{206}_{82}\text{Pb}$ ,  $^{207}_{82}\text{Pb}$  ir  $^{208}_{82}\text{Pb}$ . T.y., švino izotopų stabilumo sritis yra  $A = 204 \div 208$ . Duotojo elemento izotopai, kurių masės skaičius  $A$  yra žemiau arba aukščiau stabilumo srities, yra radioaktyvūs.

Lengvųjų elementų atveju ( $Z < 20$ ,  $A < 40$ ) stabilumo srityje neutronų ir protonų skaičių santykis artimas vienetui. Taip yra todėl, kad branduolyje nukleonams energiškaia naudingiausia jungtis į protono ir neutrono poras (žr. 1.25 poskyrį). Sunkiausiems stabilams izotopams santykis  $\frac{A-Z}{Z}$  išauga iki  $\approx 1.5$ . Taip yra todėl, kad duotam masės skaičiui  $A$  optimalųjį (atitinkantį mažiausią branduolio energiją) santykį  $\frac{A-Z}{Z}$  lemia du konkuruojantys veiksniai: nukleonų jungimasis į poras protonas-neutronas, dėl kurio energiškaia naudingiau, kad  $\frac{A-Z}{Z}$  būtų artimas vienetui, ir protonų Kulono stūma, dėl kurios energiškaia naudingiau turėti mažiau protonų branduolyje. Pastarojo veiksnio vaidmuo didėja, augant branduolio masei, nes protonų Kulono stūmos energija yra proporcinga protonų skaičiaus kvadratui  $Z^2$  (kiekvienas protonas sąveikauja su visais likusiais branduolio protonais), o nukleonų traukos energija proporcinga masės skaičiui  $A$  (stiprioji sąveika pasireiškia tik tarp gretimų nukleonų). T.y., didėjant  $Z$ , protonų Kulono stūmos energija auga greičiau už branduolinės traukos energiją. Todėl, augant  $A$ , optimalusis protonų skaičius  $Z$  auga lėčiau už neutronų skaičių  $A-Z$ . Atitinkamai, optimalioji  $\frac{A-Z}{Z}$  vertė šiek tiek išauga.

Vykstant (d, p), (n, p), (n,  $\alpha$ ) tipo reakcijoms, susidaro izotopas, kurio neutronų ir protonų skaičių santykis  $\frac{A-Z}{Z}$  yra didesnis už pradinio (stabilaus) izotopo  $\frac{A-Z}{Z}$ . Dėl to naujojo izotopo  $\frac{A-Z}{Z}$  gali atsidurti aukščiau stabilumo srities, t.y., susidaręs izotopas gali būti nestabilus. Jis gali tapti stabilium, vienam neutronui virstant protonu ir išspinduliuojant elektroną ir elektroninį antineutriną ( $\beta^-$  skilimas).  $\beta^-$  skilimo metu santykis  $\frac{A-Z}{Z}$  sumažėja.

Vykstant (p, n), (d, n), ( $\alpha$ , n), (n, 2n) tipo reakcijoms, susidaro izotopas, kurio neutronų ir protonų skaičių santykis  $\frac{A-Z}{Z}$  yra mažesnis už pradinio izotopo  $\frac{A-Z}{Z}$ . Dėl to naujojo izotopo neutronų ir protonų skaičių santykis gali atsidurti žemiau stabilumo srities. Susidaręs nestabilusis izotopas gali tapti stabilium, vienam protonui virstant neutronu ir išspinduliuojant pozitroną ir elektroninį neutriną ( $\beta^+$  skilimas).  $\beta^+$  skilimo metu santykis  $\frac{A-Z}{Z}$  išauga. Galimi dar du savaiminiai branduolio virsmai, kurių metu santykis  $\frac{A-Z}{Z}$  išauga:  $\alpha$  skilimas (tik tuo atveju, kai  $\frac{A-Z}{Z} > 1$ ) arba orbitinio elektrono pagava, kurios metu protonas virsta neutronu, atomo elektronų skaičius sumažėja vienetu ir išspinduliuojamas neutrinas. Kadangi branduolys dažniausiai pagauna vieną iš vidinio sluoksnio ( $K$  sluoksnio) elektronų, šis procesas dažnai vadinamas “ $K$  pagava”.

Aktyvinimo metu susidariusių nestabiliųjų branduolių skaičius priklauso nuo atomų skaičiaus taikinyje  $N$ , švitinimo (aktyvinimo) trukmės  $t_a$ , krintančiųjų dalelių srauto tankio  $\nu$  (skaičiaus į švitinamo bandinio ploto vienetą per laiko vienetą) ir duotosios branduolinės reakcijos skerspjūvio  $\sigma$ .

Skerspjūvio sąvoka naudojama, apibūdinant dviejų dalelių (pvz., branduolio ir neutrono) sąveikos su konkrečia pasekme tikimybę (pvz., neutrono pagavos tikimybę). Kiekviena apšaudomoji dalelė (pvz., atomo branduolys) pakeičiama įsivaizduojama plokščia sritimi, kuri statmena krintančiųjų dalelių judėjimo kryptiai ir kurios plotas parinktas taip, kad duotojo įvykio (pvz., neutrono pagavos) tikimybė sutaptų su tikimybe, kad krintančioji dalelė pataikys į šią sritį. Taip apibrėžtas plotas  $\sigma$  vadinamas to įvykio **skerspjūviu**. Žinant skerspjūvį, duotojo įvykio tikimybę galima apskaičiuoti pagal geometrinės tikimybės skaičiavimo taisyklės tokiu būdu. Tarkime, kad apšaudomųjų dalelių koncentracija bandinyje yra  $n$ . Ploto  $S$  ir nykstamai mažo storio  $dx$  medžiagos sluoksnyje yra  $n \cdot S \cdot dx$  apšaudomųjų dalelių. Pilnutinis dalelių “plotas”, kuris uždengia dalį ploto  $S$ , yra lygus jų skerspjūvių plotų sumai:  $dS' = \sigma \cdot n \cdot S \cdot dx$  (žr. 7.1 pav.). Jeigu krintančioji dalelė gali su vienoda tikimybe pataikyti į bet kurį  $S$  ploto paviršiaus tašką, tuomet tikimybė, kad krintančioji dalelė “pataikys” į kurią nors  $x$  storio sluoksnyje esančią dalelę-taikinį, yra lygi

$$P = \frac{S'}{S} = \sigma \cdot n \cdot x. \quad (5.3.2)$$

Reikia turėti omenyje, kad sąveikos skerspjūvis bendruoju atveju skiriasi nuo apšaudomosios dalelės tikrojo geometrinio skerspjūvio ploto. Pvz.,

branduolio skerspjūvio plotas yra  $10^{-24} \div 10^{-25} \text{ cm}^2$ , o įvairių branduolinių reakcijų skerspjūviai svyruoja nuo  $10^{-20} \text{ cm}^2$  (šiluminių neutronų pagava) iki  $10^{-30} \text{ cm}^2$  (branduolių sužadinimas  $\gamma$  kvantais). Naudojant šiluminius neutronus, branduolinės reakcijos (5.3.2a) skerspjūvis yra  $3.1 \cdot 10^{-23} \text{ cm}^2$ , o branduolinės reakcijos (5.3.2b) –  $8.7 \cdot 10^{-23} \text{ cm}^2$ .

Jeigu bandinio storis ir paviršiaus plotas lygūs atitinkamai  $x$  ir  $S$ , tuomet per laiko vienetą aktyvinamų branduolių skaičius lygus  $P \cdot S \cdot v$ , kur  $P$  yra neutrono pagavos tikimybė kelyje  $x$ . Pagal (5.3.2), pastarąjį reiškinių galima užrašyti šitaip:  $\sigma \cdot n \cdot x \cdot S \cdot v$  arba  $\sigma \cdot N_{br} \cdot v$ , kur  $\sigma$  yra neutrono pagavos skerspjūvis, o  $N_{br} = n \cdot x \cdot S$  yra pradinio izotopo branduolių skaičius bandinyje. Kadangi branduolinės reakcijos metu susidaręs izotopas yra radioaktyvus, tai, norint rasti jo branduolių skaičiaus  $N$  priklausą nuo aktyvinimo trukmės, reikia atsižvelgti į izotopo skilimą, kurį nusako pagrindinis radioaktyviojo skilimo dėsnis (5.1.1). Vadinasi, aktyviųjų branduolių skaičiaus pokytis per laiko vienetą aktyvinimo metu lygus

$$\frac{dN}{dt} = \sigma N_{br} v - \lambda N ; \quad (5.3.3)$$

čia  $\lambda$  yra naujojo izotopo skilimo konstanta.

(5.3.3) lygties dešinėsios pusės pirmasis dėmuo yra praktiškai pastovus (pradinio izotopo branduolių skaičius  $N_{br}$  yra žymiai didesnis už jo sumažėjimą dėl virtimo naujuoju izotopu matavimų metu), o antrojo dėmens absoliutinė vertė auga laike. Todėl šis reiškinyss mažėja laike, t.y., aktyviųjų branduolių skaičiaus augimas lėtėja. Tam tikru laiko momentu aktyviųjų branduolių skaičiaus augimo sparta taps tokia maža, kad bus galima teigti, jog šis skaičius įsisotino (nustovėjo). Šis galutinis aktyviųjų branduolių skaičius  $N_s$  vadinamas **soties aktyvacija**. Soties aktyvacija randama iš sąlygos  $dN/dt = 0$ . Įrašę į šią sąlygą  $dN/dt$  išraišką (5.3.3), randame

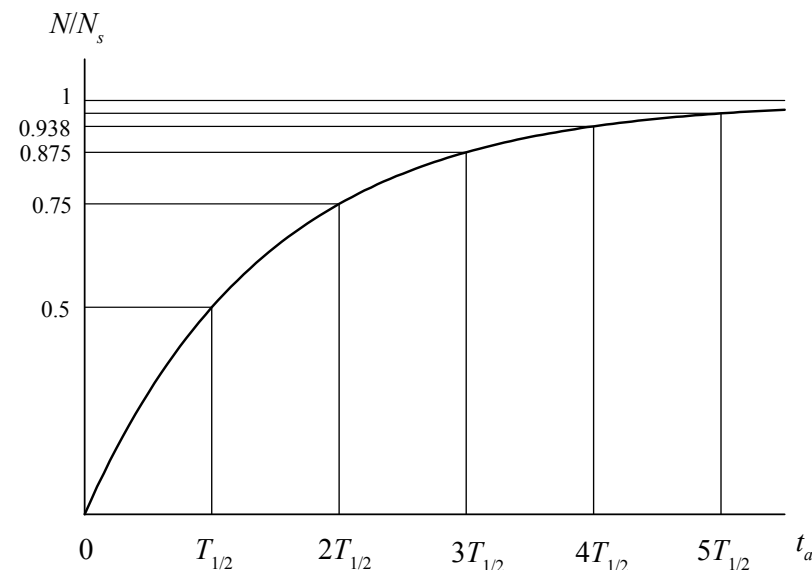
$$N_s = \frac{\sigma N_{br} v}{\lambda} = \sigma N_{br} v \tau = \sigma N_{br} v \frac{T_{1/2}}{\ln 2} . \quad (5.3.4)$$

Čia  $\tau$  ir  $T_{1/2}$  yra aktyviųjų branduolių vidutinė gyvavimo trukmė ir pusėjimo trukmė.

Aktyviųjų branduolių skaičiaus priklausa nuo aktyvinimo trukmės  $N(t_a)$  randama, išsprendus (5.3.3) lygtį su pradine sąlyga  $N(0) = 0$  (aktyvinimo pradžioje bandinys nebuvo radioaktyvus):

$$N(t_a) = N_s (1 - e^{-\lambda t_a}) = N_s (1 - 2^{-t_a/T_{1/2}}) . \quad (5.3.5)$$

Ši priklausa (**aktyvacijos kreivė**) pavaizduota 5.3 pav. Akivaizdu, kad soties aktyvacija praktiškai pasiekama per laiką  $t_a = (4 \div 5) \cdot T_{1/2}$ .



5.3 pav. Aktyvacijos kreivė  $N = N_s (1 - e^{-\lambda t_a})$ .  $t_a$  – aktyvinimo trukmė,  $N$  – aktyviųjų branduolių skaičius,  $N_s$  – soties aktyvacija,  $\lambda$  – skilimo konstanta,  $T_{1/2} = \ln 2 / \lambda$  – pusėjimo pusamžis.

Pačioje aktyvinimo pradžioje (kai  $t_a \ll T_{1/2}$ ) neutronų pagavos įvykių dažnis yra žymiai didesnis už aktyviųjų branduolių skilimų dažnį, t.y., (5.3.3) lygties dešiniojoje pusėje pirmasis dėmuo yra žymiai didesnis už antrąjį. Nepaisydami antrojo dėmens, randame  $N(t_a) = \sigma N_{br} v t$ . Taigi, švitinimo pradžioje aktyviųjų branduolių skaičius tiesiškai auga laike (žr. 5.3 pav.).

#### 5.4. Vieno izotopo ir izotopų mišinio skilimo kreivės

Eksperimentiškai branduolių skilimas tiriama, registruojant jo metu spinduliuojamas  $\alpha$  arba  $\beta$  daleles arba  $\gamma$  kvantus. Pvz., sidabro izotopų  $^{108}\text{Ag}$  ir  $^{110}\text{Ag}$  skilimas tiriama, registruojant jų spinduliuojamas  $\beta$  daleles (žr. (5.3.1a,b) lygtis): viena užregistruota  $\beta$  dalelė – tai vienas užregistruotas skilimo įvykis. Skylant branduoliui, dalelė gali išlėkti bet kuria kryptimi, todėl į skaitiklį pataiko tik maža dalis išspinduliuotų dalelių. Be to, net ir pataikiusi į skaitiklį dalelė nebūtinai yra užregistruojama. Todėl per duotąjį laiko tarpą  $\Delta t$  užregistruotų dalelių skaičius  $\Delta n$  nėra lygus skilusių branduolių skaičiui per tą patį laiką, o yra tik jam proporcingas:

$$\Delta n = -k \Delta N ; \quad (5.4.1)$$



čia  $\Delta N$  yra radioaktyviųjų branduolių skaičiaus pokytis per matavimo trukmę (neigiamas dydis). Proporcingumo koeficientą  $k$  vadinsime **skilimo registravimo efektyvumu**. Registravimo efektyvumas yra lygus daliai skilimo metu spinduliuojamų duotosios rūšies dalelių (pvz., elektronų), kurios pasiekia skaitiklio darbinę sritį ir yra ten sugeriamos arba išsklaidomos. Taigi, visuomet galioja nelygė  $k \leq 1$ . Tuo atveju, kai  $k$  nėra žinomas, pagal skilimo kreivę neįmanoma rasti tikrojo radioaktyviųjų branduolių skaičiaus bandinyje, o galima rasti tik branduolių skaičiaus ir  $k$  sandaugą.

Iš pagrindinio radioaktyviojo skilimo dėsnio (5.1.1) išplaukia, kad radioaktyviųjų branduolių vidutinio skaičiaus sumažėjimas laiko tarpe nuo  $t - \Delta t$  iki  $t$  lygus  $N_0(e^{\lambda \Delta t} - 1)e^{-\lambda t}$ . Vadinas, per tą patį laiką užregistruotų dalelių vidutinis skaičius lygus

$$\Delta n(t) = N'_0(e^{\lambda \Delta t} - 1)e^{-\lambda t}; \quad (5.4.2)$$

čia  $N'_0$  yra pradinio branduolių skaičiaus ir jų skilimo registravimo efektyvumo sandauga:

$$N'_0 \equiv kN_0. \quad (5.4.3)$$

Dydį  $N'_0$  toliau vadinsime “efektiniu pradiniu branduolių skaičiumi”. Kaip matyti iš (5.4.2) lygybės, tuo atveju, kai  $\Delta t \ll 1/\lambda$  (t.y., kai matavimo trukmė žymiai mažesnė už pusėjimo trukmę  $T_{1/2}$ ),

$$\Delta n(t) = N'_0 \lambda \Delta t \cdot e^{-\lambda t} = -\Delta t k \frac{dN}{dt}. \quad (5.4.4)$$

T.y., šiuo atveju vidutinis per laiko vienetą užregistruotų dalelių skaičius  $\Delta n/\Delta t$  yra lygus “efektiniam” bandinio aktyvumui  $kI \equiv -k \cdot (dN/dt)$ . Taip yra todėl, kad tuo atveju, kai  $\Delta t \ll 1/\lambda$ , vieno matavimo metu registruojamas aktyvumas yra pastovus ir nusakomas (5.1.5) formule. Tačiau tuo atveju, kai matavimo trukmė yra tos pačios eilės, kaip pusėjimo trukmė, arba didesnė, sąryšis (5.4.4) jau nėra pakankamai tikslus, nes neįskaito šaltinio aktyvumo mažėjimo vieno matavimo metu. Pvz., kai  $\Delta t = 0.5T_{1/2}$ , lygybė (5.4.4) duoda 16% mažesnę  $\Delta n$  vertę, lyginant su tikslia išraiška (5.4.2).

Kadangi prieklausa  $\Delta n(t)$  skiriasi nuo skilimo kreivės  $I(t) \equiv dN/dt$  tik pastoviu daugikliu  $k(e^{\lambda \Delta t} - 1)/\lambda$ , tai ją taip pat vadinsime “skilimo kreive”. Jeigu ordinačių ašies skalė yra logaritminė, tuomet skilimo kreivė (5.4.2) virsta tiese, pagal kurios posvyrį galima nustatyti skilimo konstantą  $\lambda$ , o pagal sankirtos su ordinačių ašimi ( $t = 0$ ) tašką – dydį  $N'_0(e^{\lambda \Delta t} - 1)$ . Po to, žinant vieno matavimo trukmę  $\Delta t$ , galima apskaičiuoti dydį  $N'_0$ , o žinant skilimo registravimo efektyvumą  $k$ , galima apskaičiuoti ir pradinį radioaktyviųjų branduolių skaičių  $N_0$ .

Tuo atveju, kai tiriamąjį bandinį sudaro du nepriklausomi radioaktyvieji izotopai, skilimo kreivė lygi abiejų izotopų skilimo kreivių sumai, t.y.,

$$\Delta n(t) = N'_{01}(e^{\lambda_1 \Delta t} - 1)e^{-\lambda_1 t} + N'_{02}(e^{\lambda_2 \Delta t} - 1)e^{-\lambda_2 t}. \quad (5.4.5)$$

Čia  $\lambda_1$  ir  $\lambda_2$  yra abiejų izotopų skilimo konstantos, o  $N'_{01}$  ir  $N'_{02}$  yra abiejų izotopų efektingieji pradiniai branduolių skaičiai:

$$N'_{01} \equiv k_1 N_{01}, \quad (5.4.6a)$$

$$N'_{02} \equiv k_2 N_{02}, \quad (5.4.6b)$$

kur  $N_{01}$  ir  $N_{02}$  yra abiejų izotopų tikrieji pradiniai branduolių skaičiai, o  $k_1$  ir  $k_2$  yra abiejų izotopų skilimo registravimo efektyvumai. Skilimo registravimo efektyvumai  $k_1$  ir  $k_2$  bendroju atveju yra skirtingi, nes skirtingų izotopų spinduliuotės sugerties koeficientai yra skirtingi (dėl skirtingos spinduliuojamų dalelių energijos). Pvz.,  $^{108}\text{Ag}$  skilimo metu spinduliuojamų  $\beta$  dalelių didžiausioji energija yra 1.7 MeV, o  $^{110}\text{Ag} - 2.87$  MeV. Mažesnės energijos  $\beta$  dalelės stipriau sugeriamos skaitiklio sienelėse, todėl  $^{108}\text{Ag}$  skilimo registravimo efektyvumas yra mažesnis už  $^{110}\text{Ag}$  skilimo registravimo efektyvumą.

Naudojant logaritminę ordinačių ašies skalę, (5.4.5) prieklausa yra tokio pavidalo, kaip pavaizduota 5.2 pav. Jeigu pavyksta aiškiai atskirti abi tiesines sritis vieną nuo kitos, tuomet kiekvieną iš jų galima analizuoti lygiai taip pat, kaip ir vieno izotopo atveju, t.y., pagal posvyrius nustatyti abiejų izotopų skilimo konstantas  $\lambda_1$  ir  $\lambda_2$ , o pagal sankirtos su ordinačių ašimi taškus – priešeksponentinius daugiklius  $N'_{01}(e^{\lambda_1 \Delta t} - 1)$  ir  $N'_{02}(e^{\lambda_2 \Delta t} - 1)$ . Po to, žinant  $\lambda_1$ ,  $\lambda_2$  ir  $\Delta t$ , galima įvertinti dydžius  $N'_{01}$  ir  $N'_{02}$ .

Dalis užregistruotų dalelių gali būti išspinduliuotos kitų radioaktyviųjų šaltinių (pvz., kosminė spinduliuotė arba aplinkos natūralusis radioaktyvumas). Be to, dalis skaičiuojamų impulsų gali būti dalelių skaitiklyje vykstančių pašalinių elektroninių procesų pasekmė (t.y., neradioaktyvios kilmės). Visi šie pašaliniai impulsai pasireiškia pastoviu **fono** dėmeniu  $\Delta n_f$  išmatuotame dalelių skaičiuje per duotąjį laiko tarpą. Formulės (5.4.2), (5.4.4) ir (5.4.5) galioja tik idealiuoju atveju, kai fonas lygus nuliui. Bendroju atveju šių lygybių dešiniojoje pusėje reikia pridėti fono dėmenį  $\Delta n_f$ . Pvz., vietoj (5.4.5) reikia naudoti formulę

$$\Delta n(t) = N'_{01}(e^{\lambda_1 \Delta t} - 1)e^{-\lambda_1 t} + N'_{02}(e^{\lambda_2 \Delta t} - 1)e^{-\lambda_2 t} + \Delta n_f. \quad (5.4.7)$$

Kitas reiškinių (5.4.7) pavidalas yra

$$\Delta n(t) = N'_{01}(2^{\Delta t/T_1} - 1) \cdot 2^{-t/T_1} + N'_{02}(2^{\Delta t/T_2} - 1) \cdot 2^{-t/T_2} + \Delta n_f; \quad (5.4.8)$$

čia  $T_1$  ir  $T_2$  yra abiejų izotopų pusėjimo trukmės.

Fono dėmuo  $\Delta n_f$  matuojamas, kai dalelių skaitiklio neveikia tiriamojo bandinio spinduliuotė.

### 5.5. Darbo užduotys

1. Išmatuoti apšvitintos neutronais sidabro plokštelės aktyvumo prieklausą nuo laiko. Matavimus atlikti, esant kelioms švitinimo trukmėms.
2. Nubraižyti radioaktyviųjų izotopų  $^{108}\text{Ag}$  ir  $^{110}\text{Ag}$  mišinio skilimo kreives, pagal jas įvertinti švitinimo metu susidariusio radioaktyviojo izotopo  $^{108}\text{Ag}$  pusėjimo trukmę ir šio izotopo efektingus kiekius po kiekvieno švitinimo.
3. Nubraižyti izotopo  $^{108}\text{Ag}$  aktyvacijos kreivę, pagal ją rasti šio izotopo soties aktyvaciją.
4. Naudojant apskaičiuotąsias izotopo  $^{108}\text{Ag}$  pusėjimo trukmę ir soties aktyvaciją, pagal izotopų  $^{108}\text{Ag}$  ir  $^{110}\text{Ag}$  mišinio skilimo kreivės matavimo duomenis nubraižyti izotopo  $^{110}\text{Ag}$  skilimo kreivę. Įvertinti šio izotopo pusėjimo trukmę.

### 5.6. Matavimų tvarka

Matavimų tikslas – penkis kartus išmatuoti sidabro izotopų  $^{108}\text{Ag}$  ir  $^{110}\text{Ag}$  mišinio skilimo kreivę (5.4.8), esant skirtingoms matavimų sąlygoms. Keturių skilimo kreivės matuojamos, esant aktyvinimo trukmėms 10 min, 5 min, 2 min ir 1 min ir naudojant 1 min trukmės registravimus (t.y., (5.4.8) formulėje  $\Delta t = 60$  s). Penktoji skilimo kreivė matuojama, esant 3 min aktyvinimo trukmei ir naudojant  $\Delta t = 15$  s trukmės registravimus.

Matavimų tvarka yra tokia:

1. Įjungiami skaitiklio maitinimo blokas, registravimo įrenginys ir kompiuteris, kuris naudojamas registravimo įrenginio valdymui ir matavimo rezultatų kaupimui.
2. Sidabro bandinys, kurį sudaro stabilųjų izotopų  $^{107}\text{Ag}$  ir  $^{109}\text{Ag}$  mišinys, įkišamas į konteinerį su Pu-Be neutronų šaltiniu.
3. Praėjus reikiamai aktyvinimo trukmei (10 min), bandinys ištraukiamas ir dedamas ant skaitiklio (detektoriaus). 10 min matuojama skilimo kreivė (10 registravimų po 1 min). Matavimo duomenys fiksuojami lentelėje: pirmajame stulpelyje užrašomi registravimų pabaigos momentai ( $t$ ), o antrajame – užregistruoti dalelių skaičiai ( $\Delta n$ ). Laikas  $t$  turi būti atskaitomas nuo bandinio ištraukimo momento.
4. Bandinys nuimamas nuo skaitiklio, ir dar 10 min laukiama, kol bandinys pilnai deaktyvuosis (t.y., taps neradioaktyvus). Tas laikas panaudojamas aplinkos fono matavimui. Kad bandinio spinduliuotė neturėtų įtakos fono matavimams, bandinys turi būti kuo toliau nuo skaitiklio.

5. Punktai 2, 3 ir 4 pakartojami dar trims aktyvinimo trukmėms (5 min, 2 min ir 1 min). Visais atvejais atliekami 10 registravimų po 1 min, o po to dar 10 min laukiama, kol bandinys pilnai deaktyvuosis, išskyrus 1 min aktyvinimo trukmės atvejį: šiuo atveju bandinys beveik pilnai deaktyvuojasi per pirmąsias 10 minučių po ištraukimo iš neutronų šaltinio, todėl papildomas deaktyvavimas nereikalingas.
6. Punktai 2 ir 3 pakartojami, naudojant 3 min trukmės aktyvinimą ir 15 s trukmės registravimus. Šiuo atveju skilimo kreivės matavimo trukmė turėtų būti maždaug 2 min (8 matavimai po 15 s).

### 5.7. Matavimo duomenų analizė

Žemiau pateikti du matavimo duomenų analizės variantai: naudojant netiesinį aproksimavimą ir naudojant tiesinį aproksimavimą. Reikia pasirinkti tą analizės variantą, kuris patogesnis<sup>1</sup>.

#### 5.7.1. Matavimo rezultatų analizė, naudojant netiesinį aproksimavimą

Visų pirma keturių skilimo kreivių, kurios atitinka 1 min trukmės registravimus, antroji (lėtesnioji) dalis aproksimuojama eksponentinės funkcijos ir fono suma. Ši sritis atitinka sidabro izotopą su didesniu skilimo pusamžiu, t.y.,  $^{108}\text{Ag}$ . Kadangi  $^{110}\text{Ag}$  izotopo branduoliai beveik pilnai suskyla per pirmąsias 2 min, tai galima laikyti, kad visi matavimai, pradedant nuo trečiojo, atitinka tik  $^{108}\text{Ag}$  izotopą. Ši skilimo kreivės dalis atitinka antrąjį ir trečiąjį dėmenis (5.4.7) reiškinyje, t.y., jos lygtis yra

$$\Delta n(t) = N'_{02}(e^{\lambda_2 \Delta t} - 1)e^{-\lambda_2 t} + \Delta n_f;$$

čia  $N'_{02}$  yra izotopo  $^{108}\text{Ag}$  „efektingis“ pradinis kiekis (5.4.6b), o  $\lambda_2$  yra  $^{108}\text{Ag}$  skilimo konstanta. Netiesinio aproksimavimo būdu (žr. priedo D poskyrius D.1–D.9) randami dydžiai  $N'_{02}$  ir  $\lambda_2$  bei jų paklaidos kiekvienai iš keturių kreivių, kurios atitinka aktyvinimo trukmes  $t_a = 10$  min, 5 min, 2 min ir 1 min. Kadangi aproksimuoti reikia tik paskutinius aštuonis taškus, tai programos *Microcal Origin* dialogo lango *"Select Dataset"* įvesties laukuose, tarp kurių yra užrašas *"<=Row<="*, reikia įvesti skaičius 3 ir 10 (žr. priedo D poskyrį D.7 ir D-7 pav.). Aproksimavimo metu fono dėmuo  $\Delta n_f$  neturi būti

<sup>1</sup> Netiesiniam aproksimavimui būtinas kompiuteris. Tiesiniam aproksimavimui nėra būtinas kompiuteris, tačiau, norint atlikti tiesinį aproksimavimą, iš matavimo duomenų reikia atimti foną, o po to logaritmuoti. Didelių laikų srityje kai kurių matavimų rezultatai gali būti mažesni už vidutinį foną (nes branduolių skilimas yra atsitiktinis procesas), todėl logaritmvimas tampa neįmanomas (neigiamo skaičiaus logaritmas yra neapibrėžtas). Tokius taškus reikia išmesti, taigi prarandama dalis informacijos. Tuomet tiesinio aproksimavimo būdu gautieji parametrai įverčiai yra mažiau tikslūs, negu netiesinio aproksimavimo būdu gautieji įverčiai. Jeigu išmestų taškų nėra, tuomet abiem būdais gaunami beveik vienodi rezultatai.

vari juojamas (jis turi būti lygus išmatuotajam vidutiniam fono impulsų skaičiui per 1 min). Be to, jeigu aproksimavimo funkcija apibrėžta pagal priedo D formulę (D.3.3), tuomet parametrai **N01** ir **lambda1** taip pat neturi būti vari juojami: parametras **N01** turi būti prilygintas nuliui, o **lambda1** vertė gali būti bet kokia (t.y., D-9 pav. pavaizduoto lango žymimieji laukeliai "Vary?", kurie yra greta viršutinių dviejų įvesties laukų, neturi būti pažymėti, o viršutiniame įvesties lauke turi būti nulis). Taip yra todėl, kad kreivės, kurios išmatuotos, naudojant 1 min intervalus, suteikia nepakankamai informacijos apie  $^{110}\text{Ag}$  (ši izotopą atitinka tik du pirmieji taškai kiekvienoje kreivėje).

Atlikus aproksimavimą, apskaičiuojamas keturių skilimo konstantos  $\lambda_2$  įverčių vidurkis bei jo paklaida  $\Delta\lambda_2$ . Ši paklaida skaičiuojama šitaip. Keturių  $\lambda_2$  paklaidos, kurios atitinka kiekvieną iš keturių aproksimuotų kreivių, pakeliamos kvadratu, po to šie kvadratai sudedami, ištraukiama šaknis ir rezultatas padalinamas iš 4 (tai išplaukia iš tikimybių teorijos teiginio, kad nepriklausomųjų atsitiktinių dydžių sumos standartinis nuokrypis yra lygus šakniai iš tų dydžių standartinių nuokrypių kvadratų sumos).

Keturi aproksimuojamieji matavimo duomenų rinkiniai ir atitinkamos optimaliosios teorinės kreivės pavaizduojami grafiškai. Kiekviena teorinė kreivė turi būti pavaizduota tame pačiame grafike, kaip ir atitinkami matavimų duomenys. Matavimų duomenys vaizduojami atskirais taškais, o teorinės kreivės – ištisinėmis linijom (kaip C-1 pav.).

Izotopo  $^{108}\text{Ag}$  efektinio pradinio kiekio  $N'_{02}$  prieklausa nuo aktyvinimo trukmės  $t_a$  (aktyvacijos kreivė) pavaizduojama grafiškai. Šiuo atveju aktyvacijos kreivę sudaro 4 taškai, nes tiek yra tiriamųjų  $t_a$  verčių ( $t_a = 1 \text{ min}, 2 \text{ min}, 5 \text{ min}$  ir  $10 \text{ min}$ ). Kiekvienai iš šių keturių  $t_a$  verčių pagal (5.3.5) formulę apskaičiuojama  $^{108}\text{Ag}$  soties aktyvacija:

$$N'_{s2} = \frac{N'_{02}}{1 - e^{-\lambda_2 t_a}}.$$

$N'_{s2}$  vertės, kurios atitinka skirtingas  $t_a$  vertes, turėtų apytiksliai sutapti. Randamas  $N'_{s2}$  vidurkis.

Naudojant apskaičiuotuosius  $N'_{s2}$  ir  $\lambda_2$ , pagal (5.3.5) formulę apskaičiuojama  $N'_{02}$  vertė, kuri atitinka  $t_a = 3 \text{ min}$ . Žinant šią  $N'_{02}$  vertę ir  $\lambda_2$ , iš skilimo kreivės, kuri atitinka  $t_a = 3 \text{ min}$  ir  $\Delta t = 15 \text{ s}$ , galima išskirti izotopo  $^{110}\text{Ag}$  indėlį. Tuo tikslu naudojama aproksimavimo funkcija (5.4.7) (t.p. žr. priedą D), kurioje atliekami tokie pakeitimai:

- 1) vietoj  $\Delta t = 60 \text{ s}$  naudojamas  $\Delta t = 15 \text{ s}$ ;
- 2)  $\Delta n_f$  apibrėžiamas kaip vidutinis fono impulsų skaičius per 15 s, t.y., sumažinamas 4 kartus.

Šio aproksimavimo metu turi būti vari juojami tik parametrai  $N'_{01}$  ir  $\lambda_1$  (naudojant priedo D žymėjimus – **N01** ir **lambda1**). Parametrams  $N'_{02}$  ir  $\lambda_2$

(**N02** ir **lambda2**) turi būti priskirtos ankstesniojo aproksimavimo metu gautosios vertės. Aproksimuoti reikia visų 15 s trukmės registravimų rezultatus. Aproksimavimo rezultatas – optimaliosios  $N'_{01}$  ir  $\lambda_1$  vertės bei jų paklaidos  $\Delta N'_{01}$  ir  $\Delta\lambda_1$ . Matavimų duomenys ir optimalioji teorinė kreivė pavaizduojami viename grafike (kaip C-1 pav.).

Pagal (5.1.2) apskaičiuojamos izotopo  $^{110}\text{Ag}$  pusėjimo trukmė  $T_1$  ir izotopo  $^{108}\text{Ag}$  pusėjimo trukmė  $T_2$ . Šių pusėjimo trukmių atsitiktinės paklaidos  $\Delta T_1$  ir  $\Delta T_2$  apskaičiuojamos pagal formulę

$$\Delta T_{1/2} = \frac{\ln 2}{\lambda^2} \Delta \lambda;$$

čia  $\Delta T_{1/2} = \Delta T_1$  arba  $\Delta T_2$ , o  $\Delta \lambda = \Delta\lambda_1$  arba  $\Delta\lambda_2$  (ši formulė išplaukia iš tikimybių teorijos teiginio, kad atsitiktinio dydžio funkcijos standartinis nuokrypis yra lygus funkcijos išvestinės absoliutinės vertės ir to dydžio standartinio nuokrypio sandaugai).

Taigi, matavimų rezultatus sudaro 6 grafikai: 5 skilimo kreivės ir 1 aktyvacijos kreivė. Kiekviename iš 5 grafikų su skilimo kreivėmis turi būti pateikti matavimų duomenys ir optimalioji teorinė kreivė. Be to, matavimų rezultatuose turi būti pateikti kiekvienos skilimo kreivės aproksimavimo rezultatai (t.y., optimaliosios parametrų vertės ir jų paklaidos) bei izotopų  $^{108}\text{Ag}$  ir  $^{110}\text{Ag}$  pusėjimo trukmės ir jų paklaidos. Darbo išvadose šios pusėjimo trukmės turi būti palygintos su tikrosiomis vertėmis (2.37 min ir 24.6 s).

#### 5.7.2. Matavimo rezultatų analizė, naudojant tiesinę aproksimavimą

Iš visų rezultatų, kurie atitinka 60 s trukmės registravimus, atimamas fono dėmuo  $\Delta n_f$  (vidutinis fono impulsų skaičius per 1 min). Gautųjų skaičių natūraliųjų logaritmų prieklausos nuo laiko pavaizduojamos grafiškai (atskirų taškų pavidalu), ir kiekvienoje iš keturių kreivių randama antroji (lėtesnioji) tiesinė dalis (žr. 5.2 pav.). Kadangi  $^{110}\text{Ag}$  izotopo branduoliai beveik pilnai suskyla per pirmąsias 2 min, tai visi matavimai, pradedant nuo trečiojo, atitinka tik  $^{108}\text{Ag}$  izotopą. Taigi, aproksimuoti reikia tik paskutinius aštuonis taškus. Ši tiesė atitinka antrąjį dėmenį (5.4.5) reiškinyje, t.y., jos lygtis yra

$$\ln[N'_{02}(e^{\lambda_2 \Delta t} - 1)e^{-\lambda_2 t}] = \ln[N'_{02}(e^{\lambda_2 \Delta t} - 1)] - \lambda_2 t;$$

čia  $N'_{02}$  yra izotopo  $^{108}\text{Ag}$  "efektinis" pradinis kiekis (5.4.6b), o  $\lambda_2$  yra  $^{108}\text{Ag}$  skilimo konstanta. Tiesinio aproksimavimo būdu (žr. priedą B) randami dydžiai  $N'_{02}$  ir  $\lambda_2$  kiekvienai iš keturių kreivių, kurios atitinka aktyvinimo trukmės  $t_a = 10 \text{ min}, 5 \text{ min}, 2 \text{ min}$  ir  $1 \text{ min}$ , ir jų atsitiktinės paklaidos.

Atlikus aproksimavimą, apskaičiuojamas keturių skilimo konstantos  $\lambda_2$  įverčių vidurkis bei jo paklaida  $\Delta\lambda_2$ . Ši paklaida skaičiuojama šitaip. Keturių  $\lambda_2$  paklaidos, kurios atitinka kiekvieną iš keturių aproksimuotų kreivių, pakeliamos kvadratu, po to šie kvadratai sudedami, ištraukiama šaknis ir rezultatas padalinamas iš 4 (tai išplaukia iš tikimybių teorijos teiginio, kad

nepriklausomųjų atsitiktinių dydžių sumos standartinis nuokrypis yra lygus šakniai iš tų dydžių standartinių nuokrypių kvadratų sumos).

Keturių optimaliosios teorinės tiesės nubraižomos tuose pačiuose grafikuose, kuriuose pateikti matavimų duomenų logaritmai (žr. aukščiau).

Izotopo  $^{108}\text{Ag}$  efektinio pradinio kiekio  $N'_{02}$  prieklausa nuo aktyvinimo trukmės  $t_a$  (aktyvacijos kreivė) pavaizduojama grafiškai. Šiuo atveju aktyvacijos kreivę sudaro 4 taškai, nes tiek yra tiriamųjų  $t_a$  verčių ( $t_a = 1 \text{ min}, 2 \text{ min}, 5 \text{ min}$  ir  $10 \text{ min}$ ). Kiekvienai iš šių keturių  $t_a$  verčių pagal (5.3.5) formulę apskaičiuojama  $^{108}\text{Ag}$  soties aktyvacija:

$$N'_{s2} = \frac{N'_{02}}{1 - e^{-\lambda_2 t_a}}.$$

$N'_{s2}$  vertės, kurios atitinka skirtingas  $t_a$  vertes, turėtų apytiksliai sutapti. Randamas  $N'_{s2}$  vidurkis.

Naudojant apskaičiuotuosius  $N'_{s2}$  ir  $\lambda_2$ , pagal (5.3.5) formulę apskaičiuojama  $N'_{02}$  vertė, kuri atitinka  $t_a = 3 \text{ min}$ . Žinant šią  $N'_{02}$  vertę ir  $\lambda_2$ , iš skilimo kreivės, kuri atitinka  $t_a = 3 \text{ min}$  ir  $\Delta t = 15 \text{ s}$ , galima išskirti izotopo  $^{110}\text{Ag}$  indėlį. Tuo tikslu iš šios kreivės atimamas reiškinio (5.4.5) antrasis dėmuo, kuris atitinka  $^{108}\text{Ag}$  (šis dėmuo taip pat turi būti skaičiuojamas su  $\Delta t = 15 \text{ s}$ ). Be to, atimamas fonas (fono vertė turi būti keturis kartus mažesnė, negu ankstesniuose skaičiavimuose, nes  $\Delta t$  yra keturis kartus mažesnis). Tokiu būdu gaunama izotopo  $^{110}\text{Ag}$  skilimo kreivė. Šios skilimo kreivės natūraliojo logaritmo prieklausa nuo laiko pavaizduojama grafiškai. Tuo pačiu būdu, kaip ir  $^{108}\text{Ag}$  atveju, randami izotopo  $^{110}\text{Ag}$  efektinis pradinis kiekis  $N'_{01}$  ir skilimo konstanta  $\lambda_1$  bei jų paklaidos  $\Delta N'_{01}$  ir  $\Delta \lambda_1$ .

Pagal (5.1.2) apskaičiuojamos izotopo  $^{110}\text{Ag}$  pusėjimo trukmė  $T_1$  ir izotopo  $^{108}\text{Ag}$  pusėjimo trukmė  $T_2$ . Šių pusėjimo trukmių atsitiktinės paklaidos  $\Delta T_1$  ir  $\Delta T_2$  apskaičiuojamos pagal formulę

$$\Delta T_{1/2} = \frac{\ln 2}{\lambda^2} \Delta \lambda;$$

čia  $\Delta T_{1/2} = \Delta T_1$  arba  $\Delta T_2$ , o  $\Delta \lambda = \Delta \lambda_1$  arba  $\Delta \lambda_2$  (ši formulė išplaukia iš tikimybių teorijos teiginio, kad atsitiktinio dydžio funkcijos standartinis nuokrypis yra lygus funkcijos išvestinės absoliutinės vertės ir to dydžio standartinio nuokrypio sandaugai).

Taigi, matavimų rezultatus sudaro 6 grafikai: 5 skilimo kreivių logaritmai ir 1 aktyvacijos kreivė. Kiekviename iš 5 grafikų su skilimo kreivių logaritmais turi būti pateikti matavimų duomenys ir optimalioji teorinė tiesė. Be to, matavimų rezultatuose turi būti pateikti kiekvienos skilimo kreivės aproksimavimo rezultatai (t.y., optimaliosios parametrų vertės ir jų paklaidos) bei izotopų  $^{108}\text{Ag}$  ir  $^{110}\text{Ag}$  pusėjimo trukmės ir jų paklaidos. Darbo išvados

šios pusėjimo trukmės turi būti palygintos su tikrosiomis vertėmis (2.37 min ir 24.6 s).

### 5.8. Kontroliniai klausimai

1. Radioaktyvumo sąvoka. Radioaktyviojo skilimo tipai.
2. Nuklido, izotopo ir izobaro sąvokos; nuklidų žymėjimai.
3. Pagrindinis radioaktyviojo skilimo dėsnis, jo išvedimas.
4. Pusėjimo trukmės, skilimo konstantos ir aktyvumo sąvokos; jų matavimo būdai.
5. Branduolinės reakcijos sąvoka. Radiacinės neutronų pagavos branduolinė reakcija.
6. Aktyvinimo sąvoka. Reakcijos skerspjūvio sąvoka. Aktyvacijos kreivė. Soties aktyvacija.

## 6. Darbas Nr. 6. Beta spindulių sugerties medžiagoje tyrimas

### 6.1. Įvadas

Aukštos energijos elektringosios dalelės (elektronai, pozitronai, protonai,  $\alpha$  dalelės ir kt.), praeidamos pro medžiagą, sąveikauja ("susiduria") su medžiagos elektronais ir atomų branduoliais. Pagrindinė šios sąveikos priežastis – Kulono trauka arba stūma tarp krintančiosios dalelės ir elektringųjų dalelių, kurios įeina į medžiagos sudėtį (t.y., elektronų ir branduolių).

Kiekvieno susidūrimo metu krintančiosios dalelės kinetinė energija sumažėja. Tai išplaukia iš energijos tvermės dėsnio: elektringųjų dalelių, kurias spinduliuoja radioaktyvieji branduoliai, pradinė kinetinė energija ( $10 \text{ keV} \div 10 \text{ MeV}$  elektronų ir pozitronų atveju,  $4 \div 9 \text{ MeV}$   $\alpha$  dalelių atveju) yra žymiai didesnė už atomų elektronų vidutinę kinetinę energiją ( $\sim 1 \text{ keV}$ ) ir už atomų šiluminio judėjimo kinetinę energiją (kambario temperatūroje  $\sim 0.03 \text{ eV}$ ), todėl energija visuomet perduodama nuo krintančiųjų dalelių "apšaudomosioms" dalelėms, o ne atvirkščiai. Be to, dalį krintančiosios dalelės energijos gali nusinešti susidūrimo metu atsiradę fotonai.

Praktikoje svarbiausi du branduolių spinduliuojamų elektringųjų dalelių energijos nuostolių mechanizmai:

- 1) jonizaciniai energijos nuostoliai (energija perduodama medžiagos elektronams),
- 2) radiaciniai energijos nuostoliai (energija prarandama elektromagnetinės spinduliuotės pavidalu).

Radiaciniai energijos nuostoliai gali tapti vyraujančiu nuostolių mechanizmu tik tuomet, kai krintančiosios dalelės yra ypač aukštos energijos ( $\gg 1 \text{ MeV}$ ) elektronai arba pozitronai. Tokiu atveju didžioji energijos dalis išeikvojama stabdomajai spinduliuotei, kuri atsiranda, kai elektronas arba pozitronas įgyja didelį pagreitį atomo branduolio elektriniame lauke (žr. 6.3 ir 3.2 poskyrius). Sunkiųjų dalelių atveju radiaciniai nuostoliai nepasireiškia, nes šių nuostolių dydis yra atvirkščiai proporcingas dalelės masės kvadratui (žr. (3.2.10) formulę).

Taigi, sunkiųjų elektringųjų dalelių ir mažesnės už  $1 \text{ MeV}$  energijos  $\beta$  dalelių energijos nuostoliai medžiagoje yra jonizacinės kilmės. Vykstant kiekvienam susidūrimui su medžiagos elektronu, krintančioji dalelė perduoda jam dalį savo kinetinės energijos, todėl dalelės greitis ir energija sumažėja. Medžiagos elektronas, gavęs energiją iš krintančiosios dalelės, gali pereiti į aukštesnį atomo energijos lygmenį (atomo *sužadėjimas*) arba gali išlėkti iš atomo (atomo *jonizavimas*). Todėl šie krintančiosios dalelės energijos nuostoliai vadinami *jonizaciniais energijos nuostoliais*. Apie jonizacinius nuostolius smulkiau kalbama 6.2 poskyryje.

Kadangi elektrono ir pozitrono masė ( $m_e = 9.1 \cdot 10^{-31} \text{ kg}$ ) yra žymiai mažesnė už sunkiųjų elektringųjų dalelių masę (pvz., protono masė  $m_p = 1.67 \cdot 10^{-27} \text{ kg} = 1839 m_e$ ), tai greitųjų elektronų arba pozitronų ( $\beta$  dalelių) judėjimas medžiagoje skiriasi nuo sunkiųjų elektringųjų dalelių (pvz.,  $\alpha$  dalelių arba protonų) judėjimo. Pagrindinis skirtumas yra tas, kad elektronas arba pozitronas, sąveikaudamas su medžiagos elektronu arba su atomo branduoliu, gali žymiai pakeisti judėjimo kryptį, o sunkioji elektringoji dalelė tik "išstumdo" medžiagos elektronus, tačiau pati savo judėjimo krypties beveik nepakeičia. Todėl elektronų ir pozitronų trajektorija medžiagoje yra laužtės pavidalo (žr. 6.2 pav.), o sunkiųjų dalelių trajektorija yra beveik tiesi.

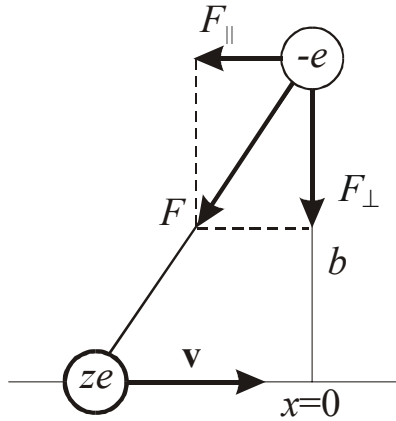
Po daugelio susidūrimų krintančiosios dalelės greitis sumažėja iki nulio. Mažinant pradinę dalelės energiją, didžiausias atstumas, kuriuo dalelė išsiskverbia į medžiagą, mažėja. Visas kelias, kurį dalelė nulekia medžiagoje iki to momento, kai jos greitis sumažėja iki nulio, vadinamas duotosios rūšies dalelių *siekiu* duotojoje medžiagoje (žr. 6.4 poskyrį).

### 6.2. Jonizaciniai energijos nuostoliai

Sąveikaujant sunkiajai elektringajai dalelei su medžiagos elektronu, krintančiosios dalelės greičio pokytis yra nežymus, o sąveikaujant  $\beta$  dalelei su medžiagos elektronu,  $\beta$  dalelės greitis gali pakisti labai stipriai. Todėl sunkiųjų dalelių jonizacinių nuostolių teorinis skaičiavimas yra žymiai paprastesnis, negu  $\beta$  dalelių jonizacinių nuostolių skaičiavimas. Tačiau galutinės formulės abiem atvejais yra labai panašios ir pasižymi beveik vienoda prieklausa nuo dalelės greičio ir nuo medžiagos charakteristikų. Todėl visų pirma išnagrinėsime sunkiųjų elektringųjų dalelių atvejį, o po to gautuosius rezultatus apibendrinsime  $\beta$  dalelėms.

Kiekybinė jonizacinių nuostolių išraiška yra dalelės energijos sumažėjimas kelio vienetu  $-(dE/dx)_{\text{jon}}$  (*jonizacinė ilginė energijos perdava*). Teorinę formulę, kuri susieja jonizacinę ilginę energijos perdavą su krintančiosios elektringosios dalelės mase, krūviu ir energija bei medžiagos tankiu, atominiu numeriu ir vidutine jonizacijos energija, galima gauti, remiantis šiomis trimis prielaidomis:

1. Krintančiosios dalelės ir atomo elektrono sąveiką galima aprašyti klasikiniiais metodais. Sąveikaujančių dalelių sistemos klasikinis aprašymas leistinas tuomet, kai sąveikos metu kiekvienos dalelės koordinatės ir judesio kiekio sandauga (abiejų dalelių masės centro sistemoje) yra žymiai didesnė už redukuotąją Planko konstantą  $\hbar$ . Šis teiginys išplaukia iš Heizenbergo neapibrėžtumų sąryšio (žr. 1.11 poskyrį). Dalelių sąveikos metu atstumas nuo kiekvienos dalelės iki masės centro yra tos pačios eilės,



6.1 pav. Atomo jonizavimo sunkiosios elektringosios dalelės elektriniu lauku klasikinis modelis.  $ze$  – krintančiosios dalelės krūvis,  $-e$  – atomo elektrono krūvis.

kaip atstumas  $b$  nuo apšaudomosios dalelės iki tiesės, kuriai priklauso krintančiosios dalelės pradinio greičio vektorius (žr. 6.1 pav.). Vadinasi, klasikinis aprašymas leistinas tuomet, kai

$$pb \gg \hbar; \quad (6.2.1)$$

čia  $p$  yra dalelės judesio kiekis masės centro sistemoje. Jeigu krintančiosios dalelės masė yra žymiai didesnė už elektrono masę, tuomet masės centro sistemoje krintančioji dalelė beveik nejuda, o elektronas juda link jos greičiu  $v$ , kuris sutampa su krintančiosios dalelės greičiu laboratorinėje atskaitos sistemoje. T.y.,  $p \approx m_e v$ . Jeigu  $v$  yra artimas šviesos greičiui, tuomet judesio kiekio  $p$  išraiškoje reikia naudoti elektrono reliatyvistinę masę  $m_e / \sqrt{1 - \beta^2}$ , kur  $\beta \equiv v/c$  yra krintančiosios dalelės greičio ir šviesos greičio  $c$  santykis. Todėl (6.2.1) nelygybę galima užrašyti tokiu būdu:

$$b > b_{\min} = \frac{\hbar}{p} = \frac{\hbar}{m_e v} \sqrt{1 - \beta^2} \approx 1.16 \cdot 10^{-4} \frac{\sqrt{1 - \beta^2}}{v}, \quad (6.2.2)$$

(6.2.2) formulėje greitis  $v$  išreikštas m/s, o atstumas  $b$  – metrais.

- Medžiagos elektronus galima laikyti laisvais, t.y., galima nepaisyti jų ryšio energijos atome. Ši prielaida reiškia, kad dalelės ir elektrono sąveikos trukmė  $\tau$  turi būti žymiai mažesnė už elektrono apsisukimo aplink atomo branduolį trukmę  $1/\bar{\nu} = \hbar/\bar{I} = 2\pi\hbar/\bar{I}$ , kur  $\bar{\nu}$  yra vidutinis elektrono apsisukimų aplink branduolį dažnis,  $\hbar$  yra Planko konstanta, o  $\bar{I} = \hbar\bar{\nu}$  yra vidutinė elektrono ryšio energija atome (**vidutinė jonizacijos energija**). Žinant atomo branduolio krūvio skaičių  $Z$ , vidutinę jonizacijos energiją galima apskaičiuoti pagal empirinį sąryšį  $\bar{I} \approx 13.6 \cdot Z \text{ eV}$ . Sąveikos trukmė  $\tau$  lygi atstumo  $b$  ir dalelės greičio  $v$  santykiui:  $\tau = b/v$ . Reliatyvistinė pataisa pasireiškia papildomu daugikliu  $\sqrt{1 - \beta^2}$ :

$$\tau = \frac{b}{v} \sqrt{1 - \beta^2} \quad (6.2.3)$$

(t.y., dėl reliatyvistinių efektų sąveikos trukmė sumažėja). Vadinasi, antrąją prielaidą galima užrašyti taip:

$$b < b_{\max} = \frac{\hbar v}{\bar{I} \sqrt{1 - \beta^2}} \approx \frac{\hbar v}{13.5 Z \sqrt{1 - \beta^2}} \approx 4.9 \cdot 10^{-17} \frac{v}{Z \sqrt{1 - \beta^2}}. \quad (6.2.4)$$

(6.2.4) formulėje greitis  $v$  išreikštas m/s, o atstumas  $b$  – metrais.

- Aplinkos atomų elektronai beveik nepasislenka sąveikos metu, t.y., juos galima laikyti nejudančiais. Galima įrodyti, kad ši sąlyga galioja visuomet, kai galioja (6.2.1) arba (6.2.2) nelygybė. T.y., trečioji prielaida išplaukia iš pirmosios.

Iš (6.2.2) ir (6.2.4) formulių išplaukia, kad, mažėjant krintančiosios dalelės greičiui,  $b_{\min}$  auga, o  $b_{\max}$  mažėja. Esant pakankamai mažam dalelės greičiui,  $b_{\max}$  tampa tos pačios eilės kaip  $b_{\min}$ . Tokiu atveju jonizaciniai energijos nuostoliai turi būti skaičiuojami kitais metodais. Pvz., kai  $Z = 27$  (aliuminis), žemiau pateiktąsias formules galima taikyti tik tuomet, kai dalelės greitis didesnis už  $10^7$  m/s. Tai atitinka 300 eV energijos elektronus arba 2 MeV energijos  $\alpha$  daleles.

Kai  $b > b_{\max}$ , sąveikos trukmė yra tokia didelė, kad atomo sužadinimas arba jonizacija tampa neįmanomi, o kai  $b < b_{\min}$ , dėl kvantinių efektų jonizaciniai nuostoliai tampa labai maži, todėl jų galima nepaisyti. T.y., skaičiuojant jonizacinius nuostolius, galima laikyti, kad visos įmanomos atstumo  $b$  vertės priklauso intervalui

$$b_{\min} < b < b_{\max} \quad (6.2.5)$$

(nors iš tikrųjų atstumas  $b$  gali būti bet koks).

Naudojantis aukščiau suformuluotomis prielaidomis, jonizacinė ilginė energijos perdava skaičiuojama tokiu būdu.  $X$  ašį nukreipsime krintančiosios dalelės judėjimo kryptimi, o atskaitos pradžios tašku laikysime tašką, kuriame dalelė labiausiai suartėja su elektronu (žr. 6.1 pav.). Pralėkdama pro nejudantį elektroną 2, dalelė 1 nuolat veikia jį Kulono jėga  $F$ , kuri nukreipta išilgai dalelės jungiančios tiesės (žr. 6.1 pav.). Šios jėgos absoliutinė vertė lygi

$$F = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{ze^2}{x^2 + b^2}; \quad (6.2.6)$$

čia  $z$  yra krintančiosios dalelės krūvis elementariojo krūvio  $e$  vienetais. Sąveikos metu elektronui perduotas pilnutinis judesio kiekis yra lygus

$$\mathbf{p}_e = \int_{-\infty}^{\infty} \mathbf{F} dt. \quad (6.2.7)$$

Jėgos vektorių  $\mathbf{F}$  galima išskaidyti į lygiagrečiąją komponentę  $F_{\parallel}$  ir statmenąją komponentę  $F_{\perp}$  (žr. 6.1 pav.). Kadangi sunkiosios dalelės greitis sąveikos metu beveik nepakinta, o “apšaudomasis” elektronas sąveikos metu beveik nepasislenka iš vietos (žr. 3 priedą), tai lygiagrečiosios komponentės integralas laiko atžvilgiu lygus nuliui:

$$\int_{-\infty}^{\infty} F_{\parallel} dt = 0. \quad (6.2.8)$$

Taip yra todėl, kad šio integralo vertės dalelių suartėjimo metu ( $t < 0$ ) ir dalelių nutolimo metu ( $t > 0$ ) kompensuoja viena kitą. Vadinasi, judesio kiekis, kurį gauna elektronas, yra statmenas krintančiosios dalelės trajektorijai ir lygus

$$p_e = \int_{-\infty}^{\infty} F_{\perp} dt. \quad (6.2.9)$$

Pasinaudojus dalelės greičio  $v$  pastovumu, galima pereiti nuo integravimo laiko  $t$  atžvilgiu prie integravimo koordinatės  $x = vt$  atžvilgiu:

$$p_e = \frac{1}{v} \int_{-\infty}^{\infty} F_{\perp} dx. \quad (6.2.10)$$

Apskaičiavę šį integralą, randame

$$p_e = \frac{1}{2\pi\epsilon_0} \frac{ze^2}{bv}. \quad (6.2.11)$$

Energija, kurią gavo elektronas (t.y., krintančiosios dalelės energijos nuostoliai vieno susidūrimo metu) yra lygi

$$\frac{p_e^2}{2m_e} = \frac{1}{8\pi^2\epsilon_0^2} \frac{z^2 e^4}{m_e v^2 b^2}. \quad (6.2.12)$$

Dalelės energijos nuostoliai dėl sąveikos su medžiagos elektronais, esančiais žiediniame  $b$  spindulio,  $db$  pločio ir  $dx$  storio sluoksnyje aplink dalelės trajektoriją (žr. 6.1 pav.), yra lygūs reiškinių (6.2.12) ir elektronų skaičiaus šiame sluoksnyje sandaugai. Šis elektronų skaičius lygus elektronų tankio  $n$  ir šio sluoksnio tūrio  $2\pi b \cdot db \cdot dx$  sandaugai. Norint apskaičiuoti jonizacinę ilginę energijos perdavą, reikia susumuoti visų tokių “žiedų”, sudarančių  $dx$  storio medžiagos sluoksnį, indėlius ir gautąją sumą padalinti iš sluoksnio storio  $dx$ . T.y., jonizacinę ilginę energijos perdavą yra lygi integralui

$$-\left(\frac{dE}{dx}\right)_{jon} = \int_{b_{\min}}^{b_{\max}} \frac{p_e^2}{2m_e} n 2\pi b db. \quad (6.2.13)$$

Išrašę reiškinių (6.2.12) į integralą (6.2.13), gauname

$$-\left(\frac{dE}{dx}\right)_{jon} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0^2} \frac{z^2 e^4 n}{m_e v^2} \ln \frac{b_{\max}}{b_{\min}}. \quad (6.2.14)$$

Išrašę  $b_{\min}$  ir  $b_{\max}$  išraiškas (6.2.2) ir (6.2.4) į (6.2.14), gauname galutinę jonizacinės ilginės energijos perdavos išraišką:

$$-\left(\frac{dE}{dx}\right)_{jon} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0^2} \frac{z^2 e^4 n}{m_e v^2} \ln \frac{m_e v^2}{\bar{I}(1-\beta^2)}. \quad (6.2.15)$$

Šis sąryšis vadinamas **Boro formulė**. Egzistuoja keletas patikslintų šios formulės variantų, pvz.,

$$-\left(\frac{dE}{dx}\right)_{jon} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0^2} \frac{z^2 e^4 n}{m_e v^2} \left\{ \ln \frac{2m_e v^2}{\bar{I}(1-\beta^2)} - \beta^2 \right\}. \quad (6.2.16)$$

Šiose formulėse matyti, kad jonizacinius nuostolius lemia nedidelis skaičius fizikinių dydžių: krintančiosios dalelės greitis  $v$  ir krūvis  $z$ , elektronų skaičius tūrio vienetu  $n$  ir medžiagos vidutinė jonizacijos energija  $\bar{I}$ . Prieklausa nuo  $\bar{I}$  yra logaritminė, t.y., gana silpna.

Jonizacinės ilginės energijos perdavos (6.2.16) stiprią priklausomybę nuo dalelės greičio  $v$ , krūvio  $z$  ir elektronų tankio  $n$  galima paaiškinti šitaip. Dalelės energijos sumažėjimas sąveikos metu yra proporcingas atomo elektronui perduotojo judesio kiekio kvadratui (tai išplaukia iš elektrono kinetinės energijos išraiškos judesio kiekiu). Šis judesio kiekis yra proporcingas sąveikos trukmei (žr. (6.2.7)), o pastaroji yra atvirkščiai proporcinga dalelės greičiui. Todėl jonizacinė ilginė energijos perdava yra atvirkščiai proporcinga  $v^2$ . Antra vertus, iš (6.2.7) išplaukia, kad elektronui perduotasis judesio kiekis yra proporcingas sąveikos jėgai, kuri, pagal Kulono dėsnį, yra proporcinga krintančiosios dalelės krūviui  $z$ . Todėl jonizaciniai energijos nuostoliai yra tiesiog proporcingi  $z^2$ . Vidutinis susidūrimų skaičius trajektorijos ilgio vienetu yra proporcingas medžiagos elektronų tankiui  $n$ , todėl ir jonizacinė ilginė energijos perdava yra proporcinga  $n$ .

Iki šiol buvo kalbama tik apie sunkiųjų elektringųjų dalelių (pvz.,  $\alpha$  dalelių arba protonų) sąveiką su medžiaga. Elektronų jonizacinių energijos nuostolių mechanizmas yra praktiškai toks pats, kaip ir sunkiųjų elektringųjų dalelių (tačiau reikia turėti omenyje, kad tuo atveju, kai krintančioji dalelė yra elektronas, jėgų kryptys 6.1 pav. yra priešingos). Todėl elektronų jonizacinę ilginę energijos perdavą taip pat galima skaičiuoti pagal (6.2.14) formulę. Tačiau parametrus  $b_{\max}$  ir  $b_{\min}$  šioje formulėje reikia parinkti šiek tiek kitaip, negu sunkiųjų dalelių atveju. Kalbant apie elektronų sąveiką su medžiaga, jau negalima laikyti, kad sąveikos metu krintančioji dalelė juda tiesiai ir tolygiai. Jeigu krintančioji dalelė yra elektronas, tuomet vieno susidūrimo metu jo greitis ir judėjimo kryptis gali stipriai pasikeisti. Dalelės judėjimo krypties pokytis dėl sąveikos su kita dalele vadinamas **sklaida**. Be to, elektronų atveju pasireiškia kvantiniai **pakaitiniai efektai**, kurie atsiranda dėl to, kad sąveikaujantieji elektronai yra iš principo neatskiriami vienas nuo kito (pvz., po susidūrimo, sukėlusio atomo jonizaciją, iš principo neįmanoma nustatyti, kuris iš dviejų išlekiančių elektronų yra krintantysis, o kuris – išmuštasis iš atomo).



Atsižvelgus į šiuos veiksnius, gaunama šitokia elektronų jonizacinės ilginės energijos perdavos išraiška:

$$-\left(\frac{dE}{dx}\right)_{jon} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0^2} \frac{e^4 n}{m_e v^2} \left\{ \frac{1}{2} \ln \frac{m_e v^2 E_e}{2\bar{I}^2(1-\beta^2)} - \left( \sqrt{1-\beta^2} - \frac{1-\beta^2}{2} \right) \ln 2 + \frac{1-\beta^2}{2} + \frac{1}{16} \left( 1 - \sqrt{1-\beta^2} \right)^2 \right\}. \quad (6.2.17)$$

Čia  $E_e$  yra elektrono reliatyvistinė kinetinė energija:

$$E_e = \frac{m_e c^2}{\sqrt{1-\beta^2}} - m_e c^2. \quad (6.2.18)$$

Palyginus jonizacinių nuostolių išraiškas sunkiosioms dalelėms (6.2.16) ir elektronams (6.2.17), akivaizdu, kad jos skiriasi tik daugikliu riestiniuose skliaustuose, kuris silpnai priklauso nuo dalelės greičio  $v$  ir nuo vidutinės jonizacijos energijos  $\bar{I}$ . Daugiklio prieš riestinius skliaustus pavidalas abiejuose reiškiniuose yra vienodas ( $\beta$  dalelių atveju  $z^2 = 1$ ). Todėl pagrindinės išvados apie jonizacinių nuostolių priklausomybę nuo krintančiosios dalelės greičio  $v$  ir nuo medžiagos elektronų tankio  $n$  vienodai galioja ir sunkiosioms dalelėms, ir elektronams.

Formulėse (6.2.16) ir (6.2.17) akivaizdu, kad svarbiausias medžiagos parametras, kuris lemia jonizacinių nuostolių dydį, yra elektronų tankis  $n$ . Elektronų tankis yra lygus medžiagos atomo elektronų skaičiaus  $Z$  ir atomų skaičiaus tūrio vienetą sandaugai. Atomų skaičius viename kubiniame centimetre yra lygus  $\rho N_A / A$ , kur  $\rho$  yra medžiagos tankis ( $\text{g/cm}^3$ ),  $N_A = 6.022 \cdot 10^{23}$  yra Avogadro skaičius, o  $A$  yra medžiagos atomo masės skaičius. Vadinasi,

$$n = \frac{Z}{A} N_A \rho. \quad (6.2.19)$$

Santykis  $Z/A$  kinta nuo 0.5 lengviesiems atomams (išskyrus vandenilį, kuriam  $Z/A = 1$ ) iki 0.4 sunkiesiems atomams. Taigi, jonizaciniai nuostoliai yra proporcingi medžiagos tankiui  $\rho$ , ir šio proporcingumo koeficientas yra beveik vienodas visoms medžiagoms. Dėl to ir dydis  $-dE/d(\rho x)$  yra apytiksliai vienodas visoms medžiagoms. Todėl dalelės nueitą atstumą medžiagoje patogiau išreikšti dydžiu  $\rho x$ , kurio dimensija yra  $\text{g/cm}^2$  (vienetinio ploto ir  $x$  storio sluoksnio masė). Duotosios rūšies ir energijos elektringosios dalelės siekis, išreiškus jį  $\text{g/cm}^2$ , yra vienodas beveik visoms medžiagoms (jeigu energijos nuostoliai yra grynai jonizaciniai).

Iš formulių (6.2.16) ir (6.2.17) išplaukia, kad jonizaciniai nuostoliai stipriai priklauso nuo dalelės greičio  $v$ . Kol greitis nėra artimas šviesos greičiui  $c$  (t.y., kol  $\beta < 0.5$ ), jonizaciniai nuostoliai yra atvirkščiai proporcingi greičiui

kvadratu. Toliau didinant dalelės greitį, jonizacinių nuostolių mažėjimas sulėtėja, o kai greitis tampa labai artimas šviesos greičiui, jonizaciniai energijos nuostoliai pradeda lėtai augti dėl logaritminio dėmens augimo.

Į formules (6.2.16) ir (6.2.17) neįeina krintančiosios dalelės masė. Tai reiškia, kad skirtingų masių dalelių, kurių greičiai ir krūvio absoliutinės vertės sutampa (pvz., vienodo greičio elektrono ir protono), jonizaciniai energijos nuostoliai kelio vienetą yra apytiksliai vienodi. Tačiau vienodos energijos elektrono ir protono jonizacinė ilginė energijos perdava labai skiriasi. Taip yra todėl, kad duotosios energijos dalelės greitis stipriai priklauso nuo jos masės. P.vz., nereliatyvistinės dalelės greitis  $v$  ir kinetinė energija  $E$  susiję sąryšiu

$$v^2 = \frac{2E}{M}; \quad (6.2.20)$$

čia  $M$  yra dalelės masė. Įrašę (6.2.20) į Boro formulę (6.2.16) ir atsižvelgę į tai, kad nereliatyvistiniu atveju  $\beta \ll 1$ , gauname

$$-\left(\frac{dE}{dx}\right)_{jon} = \frac{1}{8\pi\epsilon_0^2} \frac{z^2 e^4 n M}{m_e E} \ln \frac{4m_e E}{\bar{I} M}. \quad (6.2.21)$$

Panašus rezultatas gaunamas ir nereliatyvistiniams elektronams. Kaip matome, nereliatyvistinių dalelių jonizaciniai energijos nuostoliai yra proporcingi dalelės masei. Todėl sunkiųjų nereliatyvistinių elektringųjų dalelių (pvz., protonų) jonizacinė ilginė energijos perdava yra žymiai didesnė už tos pačios energijos elektronų jonizacinę ilginę energijos perdavą. P.vz., 0.5 MeV energijos protono jonizacinė ilginė energijos perdava yra maždaug 2000 kartų didesnė už tos pačios energijos elektrono jonizacinę ilginę energijos perdavą. Vadinasi, sunkioji elektringoji dalelė medžiagoje nueina žymiai mažesnę atstumą, negu tos pačios energijos elektronas.

### 6.3. Radiaciniai energijos nuostoliai

Elektrodinamikoje įrodoma, kad su pagreičiu judanti elektringoji dalelė spinduliuoja elektromagnetines bangas. Todėl, sąveikaujant elektringajai dalelei su medžiagos dalelėmis, spinduliuojamos elektromagnetinės bangos. Ši spinduliuotė vadinama **stabdomąja spinduliuote**. Energija, kuri išeikvojama stabdomajai spinduliuotei, vadinama **radiaciniais energijos nuostoliais**. Su pagreičiu  $a$  judančios  $ze$  krūvio dalelės spinduliuotės intensyvumas (t.y., per sekundę išspinduliuojamas energijos kiekis) yra lygus

$$W = \frac{z^2 e^2}{6\pi\epsilon_0 c^3} a^2. \quad (6.3.1)$$

Kadangi  $a = F/M$ , kur  $F$  yra dalelę veikianti jėga, o  $M$  yra dalelės masė, tai

$$W = \frac{z^2 e^2}{6\pi\epsilon_0 c^3} \left( \frac{F}{M} \right)^2. \quad (6.3.2)$$

Vadinasi, radiaciniai energijos nuostoliai yra atvirkščiai proporcingi krintančiosios dalelės masės kvadratui. Todėl radiaciniai nuostoliai praktiškai nepasireiškia sunkiųjų dalelių atveju. Pvz., protonų radiaciniai energijos nuostoliai yra  $(M_p/m_e)^2 \approx 3 \cdot 10^6$  kartų mažesni, negu elektronų radiaciniai energijos nuostoliai. Kadangi dalelių sąveikos jėgą  $F$  nusako Kulono dėsnis, tai jėga  $F$  yra proporcinga „apšaudomosios“ dalelės krūviui, o radiaciniai nuostoliai – šio krūvio kvadratui. Dėl šios priežasties pagrindinį indėlį į radiacinius nuostolius įneša sąveika su atomų branduoliais, o ne su elektronais: stabdomosios spinduliuotės intensyvumas, sąveikaujant su branduoliu, yra  $Z^2$  kartų didesnis, negu sąveikaujant su elektronu, o branduolių skaičius yra tik  $Z$  kartų mažesnis už elektronų skaičių.

Radiacinių energijos nuostolių kiekybinė išraiška yra **radiacinė ilginė energijos perdava**  $-(dE/dx)_{\text{rad}}$ , t.y., radiaciniai energijos nuostoliai kelio vienetu.  $\beta$  dalelių radiacinę ilginę energijos perdavą galima apskaičiuoti pagal paprastą formulę

$$-\left(\frac{dE}{dx}\right)_{\text{rad}} = \frac{E}{t_r}; \quad (6.3.3)$$

čia  $E$  yra dalelės kinetinė energija, o  $t_r$  yra konstanta, kuri vadinama **radiaciniu ilgiu**. Radiacinis ilgis priklauso nuo medžiagos. Pvz., oro atveju  $t_r = 300.5$  m, o švino atveju  $t_r = 0.5$  cm.

Iš (6.3.3) išplaukia, kad radiaciniai nuostoliai yra proporcingi dalelės kinetinei energijai. Tuo tarpu jonizaciniai nuostoliai (6.2.16) arba (6.2.17) mažėja, augant dalelės energijai. Todėl, pradedant nuo kažkokios krizinės energijos, radiaciniai nuostoliai pradės vyrauti (žinoma, praktiškai tai įmanoma tik elektronų ir pozitronų atveju). Šią krizinę energiją galima įvertinti pagal apytikslį sąryšį

$$\frac{(-dE/dx)_{\text{rad}}}{(-dE/dx)_{\text{jon}}} \approx \frac{ZE \text{ (MeV)}}{800}. \quad (6.3.4)$$

Vadinasi, radiaciniai nuostoliai pradeda viršyti jonizacinius, kai  $E > 800/Z$  MeV. Pvz., Al atveju ( $Z = 27$ ) tai atsitinka, kai krintančiojo elektrono energija viršija 30 MeV (tikslėsi skaičiavimai duoda dar didesnę vertę – 47 MeV).

Kadangi dėl radiacinių energijos nuostolių dalis  $\beta$  dalelės kinetinės energijos išeikvojama elektromagnetinei spinduliuotei, tai toks  $\beta$  dalelės susidūrimas su branduoliu yra netamprusis (**tamprusis susidūrimas** – tai toks susidūrimas, kurio metu nekinta dalelių kinetinių energijų suma). Kaip minėta, sunkiųjų dalelių atveju radiaciniai nuostoliai yra labai maži, todėl sunkiųjų dalelių susidūrimus su medžiagos branduoliais galima laikyti tampriais. Tačiau tampriojo susidūrimo su branduoliu tikimybė yra žymiai mažesnė už susidūrimo su elektronu tikimybę, nes medžiagoje branduolių yra  $Z$  kartų mažiau, negu elektronų. Todėl dalelių judėjimo analizėje tamprųjų susidūrimų

su branduoliais dažniausiai galima nepaisyti. Išimtis – sunkiųjų dalelių sklaidos dideliais kampais tyrimas (pvz., Rezerfordo bandymas).

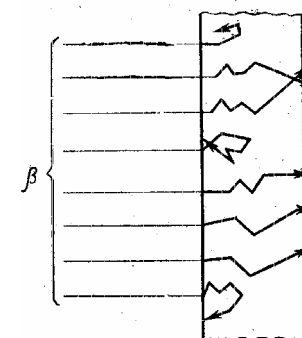
Taigi, jeigu medžiaga švitinama sunkiosiomis elektringomis dalelėmis arba mažesnės už 1 MeV energijos  $\beta$  dalelėmis (elektronais), tuomet daugumos šių dalelių sąveika su medžiaga pasireiškia tik atomų jonizacija ir sužadinimu, t.y., energijos nuostoliai yra grynai jonizaciniai. Švitinant pozitronais, šalia minėtųjų procesų dar vyksta pozitronų ir medžiagos elektronų anihiliacija (žr. 1.31 poskyrį).

#### 6.4. Dalelių siekiai

Dalelės **siekis** – tai dalelės nulėktas kelias medžiagoje, t.y., kelias, kuriame dalelė praranda visą savo kinetinę energiją. Siekį galima išreikšti ilgine energijos perdava  $-(dE/dx)$ :

$$R = \int_0^{E_0} \frac{dE}{-dE/dx}; \quad (6.4.1)$$

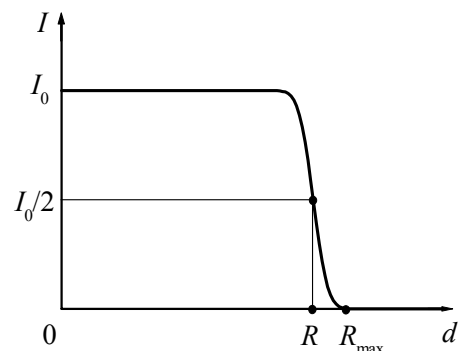
čia  $E_0$  yra dalelės pradinė kinetinė energija. Siekis nusako didžiausią įmanomą įsiskverbimo į medžiagą gylį. Įsiskverbimo į medžiagą gylis priklauso nuo dalelės trajektorijos formos ir yra didžiausias tuomet, kai dalelės trajektorija yra tiesi ir statmena medžiagos paviršiui. Kadangi sunkiųjų dalelių trajektorija yra tiesės pavidalo, tai sunkiųjų dalelių siekis ir įsiskverbimo gylis beveik sutampa. Elektronų trajektorija medžiagoje yra sudėtinga laužtė (žr. 6.2 pav.). Todėl elektronų įsiskverbimo į medžiagą vidutinis gylis yra žymiai mažesnis už siekį (6.4.1).



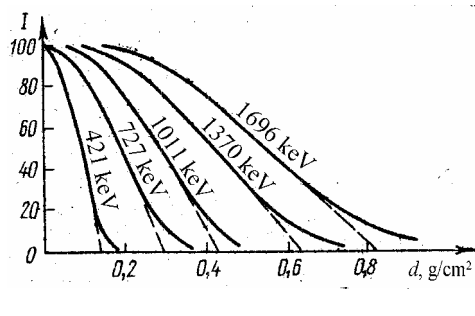
6.2 pav. Lygiagrečius elektronų pluošto sklaidą medžiagoje.

Šis skirtumas tarp sunkiųjų elektringųjų dalelių ir elektronų tampa ypač akivaizdus, palyginus praėjusių pro medžiagos sluoksnį dalelių skaičiaus prieklausas nuo sluoksnio storio sunkiosioms dalelėms (6.3 pav.) ir elektronams (6.4 pav.). Matome, kad sunkiųjų dalelių atveju kreivė iš pradžių yra horizontali (visos dalelės praeina sluoksnį), o kai sluoksnio storis prilgsta siekiui  $R$ , praėjusių dalelių skaičius staigiai sumažėja iki nulio. Elektronų sugerties kreivės yra kitokio pavidalo. Praėjusių pro sluoksnį elektronų skaičius visą laiką mažėja, didėjant sluoksnio storiui (žr. 6.4 pav.). Kai sluoksnio storis viršija siekį  $R$ , pro sluoksnį nepaeina nė vienas elektronas.

6.1 ir 6.2 lentelėse pateikti įvairių energijų  $\alpha$  dalelių ir elektronų siekiai skirtingose medžiagose. Kaip matome, dalelės siekis auga, didėjant jos energijai. Be to, akivaizdu, kad sunkiųjų dalelių (pvz.,  $\alpha$  dalelių) siekiai yra



6.3 pav. Tipiška vienos energijos  $\alpha$  dalelių srauto priklausoma nuo sugėriklio storio  $d$ .  $R$  ir  $R_{\max}$  yra, atitinkamai, vidutinis ir didžiausias siekiai.



6.4 pav. Įvairių energijų monoenergetinių elektronų sugerties kreivės aliuminyje.

žymiai mažesni už  $\beta$  dalelių siekius. Šie dėsningumai išplaukia iš siekio išraiškos (6.4.1) ir iš to, kad sunkiųjų elektringųjų dalelių ilginė energijos perdava  $-(dE/dx)$  yra žymiai didesnė už tos pačios energijos elektronų ilginę energijos perdavą (žr. 6.2 ir 6.3 poskyrius).

### 6.5. Elektronų pereiga pro storas folijas. Silpimo koeficientas

6.4 pav. pavaizduota praėjusių pro aliuminio foliją elektronų skaičiaus priklausoma nuo folijos storio, esant kelioms pradinėms elektronų energijoms. Šios kreivės vadinamos *sugerties kreivėmis*. Aparatūros, kuri buvo panaudota šių kreivių matavimui, struktūrinė schema pavaizduota 6.7 pav. Elektronai, kuriuos spinduliuoja  $\beta$  radioaktyvusis šaltinis 5, praeina pro foliją 4, ir dalis jų patenka į elektronų skaitiklį 3. Didinant folijos storį, skaitiklį pasiekusių elektronų skaičius mažėja. Taip yra todėl, kad, didėjant folijos storiui, didėja krintančiojo elektrono susidūrimų su medžiagos elektronais skaičius. Kadangi kiekvieno susidūrimo metu šiek tiek pakinta elektrono judėjimo kryptis, tai,

6.1 lentelė. Įvairių energijų  $\alpha$  dalelių siekis

Radioaktyvus izotopas	$\alpha$ dalelės energija, MeV	Siekis ore, cm	Siekis biologiniame audinyje arba vandenyje, $\mu\text{m}$
$^{210}\text{Po}$	5.3	3.8	45
$^{212}\text{Po}$	8.8	8.6	105
$^{226}\text{Ra}$	4.8	3.3	40
$^{222}\text{Rn}$	5.5	4.0	49
$^{232}\text{Th}$	4.0	2.5	31
$^{238}\text{U}$	4.2	2.7	34
$^{239}\text{Pu}$	5.15	3.7	43

6.2 lentelė. Įvairių izotopų spinduliuojamų  $\beta$  dalelių didžiausi siekiai

Radioaktyvus izotopas	Didžiausia $\beta$ dalelių energija, MeV	Didžiausias siekis ore, cm	Didžiausias siekis biol. audinyje arba vandenyje, cm	Didžiausias siekis Al, cm
$^{12}\text{C}$	0.155	22	0.02	0.008
$^{24}\text{Na}$	1.390	465	0.72	0.222
$^{32}\text{P}$	1.704	610	0.92	0.285
$^{35}\text{S}$	0.167	28	0.02	0.010
$^{45}\text{Ca}$	0.255	47	0.06	0.022
$^{60}\text{Co}$	0.310	62	0.09	0.029
$^{82}\text{Br}$	0.465	116	0.16	0.056
$^{85}\text{Kr}$	0.670	172	0.28	0.087
$^{89}\text{Sr}$	1.480	510	0.80	0.247
$^{90}\text{Sr}$	0.546	126	0.20	0.064
$^{90}\text{Y}$	2.280	820	1.27	0.406
$^{147}\text{Pm}$	0.220	37	0.06	0.019
$^{185}\text{W}$	0.430	93	0.15	0.044
$^{204}\text{Tl}$	0.783	217	0.35	0.110

didėjant susidūrimų skaičiui, auga vidutinis kampinis nuokrypis nuo pradinės krypties. Jeigu elektronas nukrypsta nuo pradinės krypties tiek, kad nepataiko į skaitiklio langelį, skaitiklis jo neužregistruoja. Tokių elektronų skaičius auga, didėjant folijos storiui. Be to, esant pakankamai dideliui folijos storiui, dalis elektronų neišeina iš folijos, t.y., praranda joje visą savo kinetinę energiją. Šių elektronų dalis taip pat auga, didėjant folijos storiui.

Kuo didesnė elektrono energija, tuo mažesnė sklaidos dideliu kampu tikimybė ir tuo mažesni jonizaciniai energijos nuostoliai (žr. 6.2 poskyrį). Todėl, didinant pradinę elektronų energiją, auga santykinė dalis elektronų, kurie praėjo pro foliją be didelių krypties pokyčių (ir todėl buvo skaitiklio užregistruoti). Tuo aiškinamas skirtumas tarp sugerties kreivių, kurios atitinka skirtingas pradines elektronų energijas (žr. 6.4 pav.).

Sugerties kreivės, kurios pavaizduotos 6.4 pav., atitinka tą atvejį, kai visi į foliją krintantys elektronai yra vienodos energijos. Tačiau bet kuris  $\beta$  radioaktyvus izotopas spinduliuoja įvairių energijų elektronus arba pozitronus. Taip yra todėl, kad branduolio  $\beta$  skilimo metu išspinduliuojamos dvi dalelės – elektronas ir antineutrinas arba pozitronas ir neutrinas (žr. (1.30.1) ir (1.30.2)). Nors pilnutinė energija, kuri išsiskiria duotojo branduolio  $\beta$  skilimo metu, turi tiksliai apibrėžtą vertę, tačiau jos dalys, kurios tenka kiekvienai iš dviejų spinduliuojamų dalelių, yra atsitiktiniai dydžiai. Todėl elektronai arba pozitronai, kuriuos spinduliuoja  $\beta$  radioaktyvus šaltinis, turi visas kinetinės energijos vertes nuo nulio iki didžiausios vertės  $E_{\max}$ . Tipiškas  $\beta$  skilimo spektras pavaizduotas 1.35 pav.

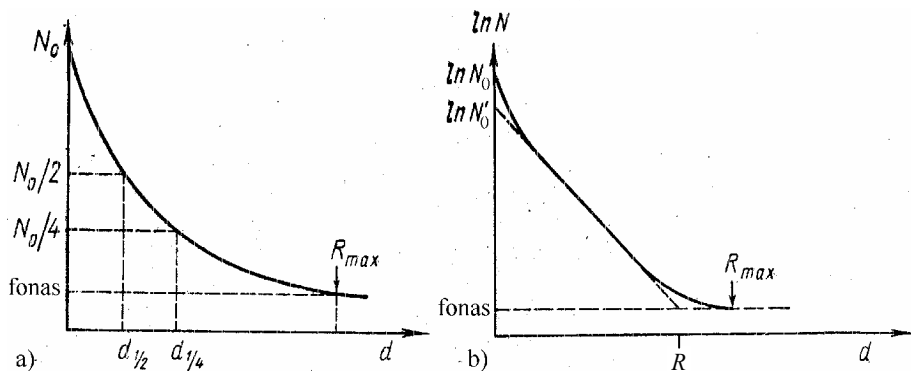
Kadangi branduolių spinduliuojamų elektronų spektras yra tolydus ir prasideda nuo nulio, tai jų sugerties kreivės skiriasi nuo monoenergetinių elektronų sugerties kreivių, kurios pavaizduotos 6.4 pav. Branduolinės  $\beta$  spinduliuotės sugerties kreivės yra apytiksliai eksponentinio pavidalo (žr. 6.5a pav. ir 6.5b pav.). Greitesnis sugerties kreivės mažėjimas pradinėje jos dalyje aiškinamas tuo, kad lėčiausieji elektronai sugeriami stipriausiai, nes jų jonizaciniai nuostoliai yra didžiausi. T.y., pradinė sugerties kreivės dalis atspindi mažiausios energijos elektronų sugertį medžiagoje. Toliau didinant medžiagos sluoksnio storį, lieka tik didžiausių energijų elektronai, kurių sugertis medžiagoje yra silpnesnė. Todėl sugerties kreivės kritimas sulėtėja. Naudojant logaritminę ordinačių ašies skalę, galima išskirti tiesinę sritį (žr. 6.5b pav.), t.y., sluoksnio storio intervalą, kuriame elektronų srauto mažėjimas yra eksponentinis:

$$N = N'_0 \exp(-\mu d). \quad (6.5.1)$$

(6.5.1) formulės parametras  $\mu$  vadinamas **silpimo koeficientu** arba **sugerties koeficientu**. Kaip matyti 6.5b pav., daugiklis  $N'_0$  yra šiek tiek mažesnis už tikrąjį pradinį elektronų srautą  $N_0$ , nes sugerties kreivės pradžioje jos mažėjimas yra greitesnis.

Kaip minėta 6.2 poskyryje, jonizaciniai energijos nuostoliai yra proporcingi medžiagos tankiui  $\rho$ . Todėl ir silpimo koeficientas  $\mu$  yra apytiksliai proporcingas  $\rho$ . Dėl šios priežasties praktikoje dažnai naudojamas **masinis silpimo koeficientas**, kuris gaunamas, padalinus silpimo koeficientą  $\mu$  iš medžiagos tankio  $\rho$ . Masinis silpimo koeficientas  $\mu/\rho$  yra apytiksliai vienodas visoms medžiagoms. Žinant masinį silpimo koeficientą  $\mu/\rho$ , (6.5.1) formulėje galima pereiti nuo kintamojo  $d$  prie kintamojo  $\rho d$ :

$$N = N'_0 \exp\left(-\frac{\mu}{\rho} \rho d\right) \quad (6.5.2)$$



6.5 pav. Tipiška sugerties kreivė ištisinio  $\beta$  spektro atveju. a) – tiesinė ordinačių ašies skalė, b) – logaritminė ordinačių ašies skalė.

Dydis  $\rho d$  – tai storio  $d$  ir vienetinio ploto medžiagos sluoksnio masė (matavimo vienetas –  $\text{g/cm}^2$ ). Medžiagos tankio ir duotos energijos  $\beta$  dalelių siekio toje medžiagoje sandauga  $\rho R$  taip pat yra apytiksliai vienoda visoms medžiagoms. Todėl praktikoje siekis  $R$  dažnai išreiškiamas  $\text{g/cm}^2$ , t.y., “siekiu” vadinama medžiagos tankio ir siekio sandauga.

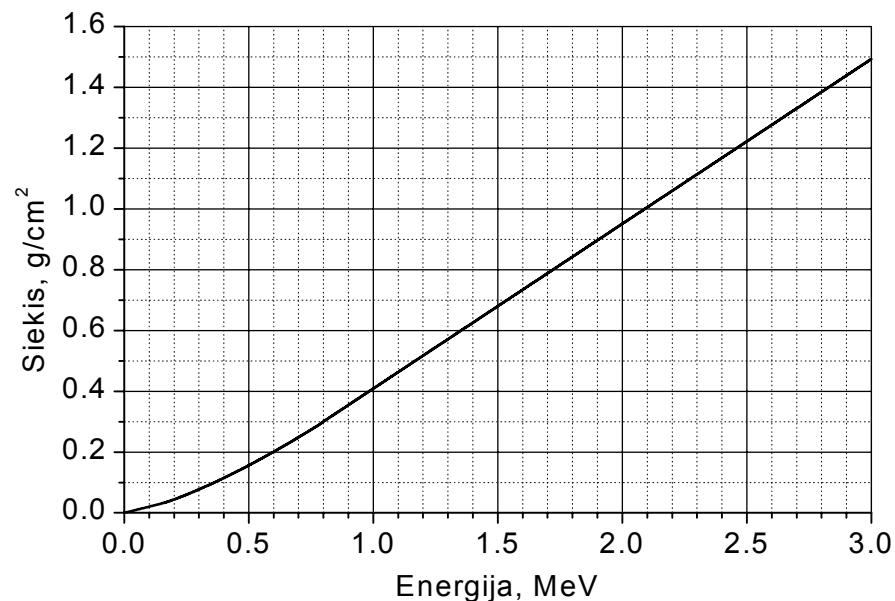
Didėjant didžiausiai elektronų energijai  $E_{\max}$ , silpimo koeficientas mažėja, o siekis auga. T.y., sugerties kreivės pavidalo kitimas, kintant didžiausiai elektronų energijai, yra panašus į tą, kuris stebimas monoenergetinių elektronų atveju (žr. 6.4 pav.). Sugerties koeficiento ir siekio priklausomybė nuo didžiausios elektronų energijos panaudojama praktikoje, matuojant radioaktyviojo izotopo spinduliuojamų elektronų didžiausią energiją.

Pvz.,  $\beta$  dalelių didžiausios energijos  $E_{\max}$  matavimui galima panaudoti empirinį sąryšį tarp siekio  $R$  ir didžiausios energijos  $E_{\max}$ :

$$R \approx 0.11(\sqrt{1 + 22.4 \cdot E_{\max}^2} - 1), \quad 0 < E_{\max} < 3 \text{ MeV}; \quad (6.5.3)$$

čia  $R$  išreikštas  $\text{g/cm}^2$ , o  $E_{\max}$  išreikšta MeV. Ši priklausomybė pavaizduota 6.6 pav.

Praktikoje siekis  $R$  matuojamas, ekstrapoliuojant (pratęsiant) eksponentinę sritį iki susikirtimo su fono lygiu (žr. 6.5b pav.). Taip išmatuotas siekis vadinamas **ekstrapoliuotuoju siekiu**. Kaip matome 6.5b pav., ekstrapoliuotasis siekis visuomet yra šiek tiek mažesnis už tikrąjį siekį, kuris 6.5b pav. pažymėtas  $R_{\max}$ . Taip matuojant siekį, santykinė matavimo paklaida gali siekti -5%.

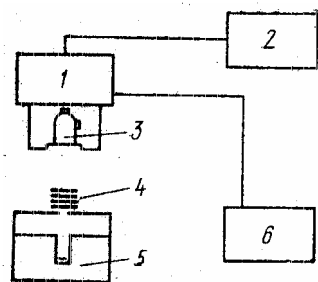


6.6 pav.  $\beta$  dalelių siekio priklausomybė nuo didžiausios energijos.

### 6.6. Darbo užduotys

1. Išmatuoti  $^{90}\text{Sr}$ – $^{90}\text{Y}$  radioaktyvaus šaltinio  $\beta$  spinduliuotės intensyvumo priklausą nuo aliuminio arba organinio stiklo sugėriklio storio.
2. Nubraižyti aliuminio ir organinio stiklo  $\beta$  spindulių sugerties kreives.
3. Rasti  $^{90}\text{Y}$   $\beta$  spinduliuotės sugerties koeficientus  $\mu$ , masinius sugerties koeficientus  $\mu/\rho$  ir siekius  $R$  aliuminio ir organinio stiklo atvejais.

### 6.7. Matavimų tvarka



6.7 pav. Matavimų aparatinės struktūrinė schema.

Laboratorinio darbo aparatūros apibendrintoji struktūrinė schema pavaizduota 6.7 pav. Šioje schemoje 1 – stiprintuvas, 2 – aukštos įtampos šaltinis, 3 –  $\beta$  dalelių (Geigerio ir Miulerio) skaitiklis, 4 – sugėriklio plokštelės, 5 –  $\beta$  dalelių šaltinis, 6 – registravimo įrenginys. Priklausomai nuo skaitiklio tipo, aukštos įtampos šaltinis 2 ir registravimo įtaisas 6 gali būti viename korpuse, arba gali būti atskiri įrenginiai.

Reikiamas sugėriklio storis pasiekiamas, dedant vieną ant kitos kelias įvairaus storio aliuminio arba organinio stiklo plokšteles.

Šiame darbe naudojamas  $^{90}\text{Sr}$ – $^{90}\text{Y}$  (stroncio-itrio) radioaktyvusis šaltinis, kurio skilimo schema pavaizduota priedo A-3 pav.

Matavimų tvarka yra tokia:

1. Įjungiami skaitiklio maitinimo blokas ir registravimo įrenginys.
2. Išmatuojamas aplinkos fonas. Tuo tikslu atliekami 10 matavimų po 1 min ir apskaičiuojamas vidurkis.
3. Prieš skaitiklio langelį padedamas  $^{90}\text{Sr}$ – $^{90}\text{Y}$   $\beta$  radioaktyvusis šaltinis ir išmatuojama  $\beta$  dalelių sugerties kreivė aliuminio folijoje. Aliuminio sluoksnio storis  $d$  didinamas nuo 0 iki 2 mm kas 0.1 mm. Esant kiekvienam storiui, atliekamas vienas matavimas, kurio trukmė – 1 min. Matavimų duomenys fiksuojami lentelėje: pirmajame stulpelyje užrašomos aliuminio storio vertės ( $d$ ), o antrajame – užregistruotų dalelių skaičiai ( $N$ ).

4. Tuo pačiu būdu išmatuojama organinio stiklo sugerties kreivė. Organinio stiklo sluoksnio storis  $d$  didinamas nuo 0 iki 4 mm kas 0.5 mm; vieno matavimo trukmė – 1 min.

### 6.8. Matavimo duomenų analizė

1. Užregistruotų dalelių skaičiai pataisomi, atsižvelgiant į skaitiklio neveikos trukmę (žr. 8.9 poskyrį):

$$N = \frac{N'}{1 - (N'/\Delta t)\tau};$$

čia  $N'$  yra užregistruotas dalelių skaičius,  $\tau$  yra skaitiklio neveikos trukmė (s), o  $\Delta t$  yra vieno registravimo trukmė (s). Ši pataisa būtina tik tuo atveju, kai reiškinys  $(N'/\Delta t)\tau$  yra didesnis už 0.01.

2. Dalelių skaičių natūraliųjų logaritmų priklausos nuo medžiagos storio  $d$  (sugerties kreivės) pavaizduojamos grafiškai. Taip pat grafiškai pavaizduojamos jų priklausos nuo sandaugos  $\rho d$  (čia  $\rho$  – medžiagos tankis). Ši sandauga turi būti išreikšta  $\text{g/cm}^2$ . Fono atimti nereikia, nes siekis bus nustatomas pagal 6.5b pav. metodiką. Sugerties kreivės, atitinkančios aliuminį ir organinį stiklą, turi būti pavaizduotos viename grafike, kad jas būtų lengviau palyginti. Šios kreivės turėtų būti artimos tiesėms.
3. Tiesinės aproksimacijos būdu (žr. priedą B) randami aliuminio ir organinio stiklo sugerties koeficientai  $\mu$  ir jų atsitiktinės paklaidos  $\Delta\mu$ . Apskaičiuojami atitinkami masiniai sugerties koeficientai  $\mu/\rho$  ir jų paklaidos  $\Delta\mu/\rho$  (aliuminio tankis  $\rho = 2.70 \text{ g/cm}^3$ , organinio stiklo tankis  $\rho = (1.0 - 1.5) \text{ g/cm}^3$ , priklausomai nuo organinio stiklo rūšies). Abu masiniai sugerties koeficientai paklaidų ribose turėtų sutapti (žr. 6.5 poskyrį).
4. Sugerties kreivės pratęsiamos iki susikirtimo su fono lygiu (žr. 6.5b pav.). Randamas ekstrapoliuotasis siekis  $R$ . Jeigu sankirtos taško abscisė yra už  $X$  ašies ribų, tuomet  $R$  apskaičiuojamas pagal formulę

$$R = \frac{\ln(N_0) - \ln(N_f)}{\mu};$$

čia  $N_f$  yra vidutinis fono impulsų skaičius per 1 min, o  $N_0$  yra pradinis užregistruotų  $\beta$  dalelių skaičius per 1 min (žr. 6.5b pav.).

5. Ekstrapoliuotasis siekis išreiškiamas  $\text{g/cm}^2$  (t.y., padauginamas iš medžiagos tankio) ir palyginamas su verte, kurią numato empirinė formulė (6.5.3). Šioje formulėje reikia naudoti  $^{90}\text{Y}$  spinduliuojamų  $\beta$  dalelių didžiausią energiją (2.280 MeV), nes  $^{90}\text{Sr}$  spinduliuojamų  $\beta$  dalelių energija yra žymiai mažesnė (0.546 MeV) ir jos pilnai sugeriamos radioaktyviojo šaltinio viduje.

### 6.9. Kontroliniai klausimai

1. Elektringųjų dalelių jonizacinių energijos nuostolių medžiagoje priežastys.
2. Elektringųjų dalelių radiacinių energijos nuostolių medžiagoje priežastys.
3. Ilginės energijos perdavos sąvoka. Jonizacinės ilginės energijos perdavos priklauso nuo dalelių greičio  $v$ , jų krūvio  $z$  ir medžiagos elektronų tankio  $n$ .
4. Sunkiųjų elektringųjų dalelių (pvz.,  $\alpha$  dalelių) ir elektronų sąveikos su medžiaga skirtumai.
5. Sugerties koeficiento sąvoka ir jo matavimas. Masinis sugerties koeficientas. Sugerties koeficiento priklausomybė nuo  $\beta$  dalelių energijos ir nuo medžiagos tankio.
6. Dalelės siekio sąvoka ir jo matavimas.

## 7. Darbas Nr. 7. Gama spindulių sugerties medžiagoje tyrimas

### 7.1. Įvadas

Kaip ir elektringųjų dalelių (pvz., elektronų, protonų,  $\alpha$  dalelių),  $\gamma$  kvantų sąveika su medžiaga yra elektromagnetinės prigimties. Tačiau šios sąveikos mechanizmas yra kitoks, negu elektringųjų dalelių, nes:

- 1)  $\gamma$  kvantai neturi elektrinio krūvio, todėl jie nedalyvauja Kulono sąveikoje.  $\gamma$  kvanto sąveika su elektronu vyksta labai mažoje erdvės srityje, kurios dydis yra  $10^{-11}$  cm eilės, t.y., trim eilėm mažesnis už tarpatominius atstumus. Todėl  $\gamma$  kvantai palyginti retai sąveikauja su elektronais ir branduoliais.
- 2)  $\gamma$  kvantų rimties masė lygi nuliui, todėl jų greitis visuomet lygus šviesos greičiui. Tai reiškia, kad  $\gamma$  kvantai medžiagoje negali būti lėtinami. Jie gali būti tik sugeriami arba išsklaidomi.

Praeinant  $\gamma$  spinduliutei pro medžiagą, spinduliuotės intensyvumas mažėja (*intensyvumas* – tai  $\gamma$  kvantų skaičius per laiko vienetą pro vienetinio ploto paviršių). Šio mažėjimo priežastis –  $\gamma$  kvantų sąveika su medžiaga. Svarbiausi yra trys sąveikos su medžiaga procesai: Komptono sklaida, fotoefektas ir elektrono-pozitrono porų susidarymas.

### 7.2. Komptono sklaida

**Komptono sklaida** arba **nekoherentinė sklaida** – tai tokia  $\gamma$  kvanto sąveika su elektronu, kurios metu  $\gamma$  kvantas perduoda elektronui dalį savo energijos ir pakeičia judėjimo kryptį. Aprašant šią sąveiką, galima laikyti, kad elektronas yra laisvas, net jeigu elektronas yra atome. Taip yra todėl, kad  $\gamma$  kvantų energija žymiai viršija elektrono ryšio energiją atome (**elektrono ryšio energija** arba **atomo jonizacijos energija** – tai darbas, kurį reikia atlikti, pašalinant elektroną iš atomo). Taigi, sąveikaujant  $\gamma$  kvantui su atomo elektronu, pastarasis beveik visuomet išlekia iš atomo. 1.3 pav. pavaizduota  $\gamma$  kvanto Komptono sklaidos schema. Kaip matome, dėl Komptono sklaidos vietoj pirminio  $\gamma$  kvanto, kurio dažnis  $h\nu_0$ , atsiranda išsklaidytasis  $\gamma$  kvantas, kurio energija  $h\nu < h\nu_0$ , o elektronas, kuris išsklaidė  $\gamma$  kvantą, įgyja kinetinę energiją  $E_e = h\nu_0 - h\nu$ .  $\gamma$  kvanto energijos sumažėjimas (ir atitinkamas bangos ilgio padidėjimas) Komptono sklaidos metu vadinamas **Komptono efektu**. Naudojantis energijos ir judesio kiekio tvermės dėsniais, galima įrodyti, kad  $\gamma$  kvanto bangos ilgio padidėjimas Komptono sklaidos metu yra lygus

$$\Delta\lambda = \lambda_K(1 - \cos\theta); \quad (7.2.1)$$

čia  $\theta$  yra sklaidos kampas, o  $\lambda_K$  yra elektrono **Komptono bangos ilgis**:

$$\lambda_K = \frac{h}{m_0c} = 0.024263 \text{ Å}.$$

### 7.3. Fotoefektas

**Fotoefektas** – tai tokia fotono sąveika su atomu, kurios metu atomas sugeria visą fotono energiją (t.y., fotonas nustoja egzistuoti), o vienas iš atomo elektronų išlekia iš atomo. Išmuštasis iš atomo elektronas vadinamas **fotoelektronu**. Taigi, pagrindinis skirtumas tarp fotoefekto ir Komptono sklaidos yra tas, kad Komptono sklaidos metu fotonas praranda tik dalį savo energijos, o fotoefekto metu fotonas yra pilnai sugeriamas. Šis reiškinys kartais vadinamas **vidiniu fotoefektu**, siekiant jį atskirti nuo išorinio fotoefekto, kuris aprašytas 1.2 poskyryje. Naudojantis energijos tvermės dėsniu, galima apskaičiuoti fotoelektrono kinetinę energiją:

$$E_e = h\nu - \varepsilon; \quad (7.3.1)$$

čia  $\varepsilon$  yra atitinkamo elektronų sluoksnio jonizacijos energija.

Naudojantis energijos ir judesio kiekio tvermės dėsniais (9.2.2a,b), galima įrodyti, kad laisvasis elektronas negali sugerti fotono. T.y., laisvieji elektronai negali sukelti fotoefekto. Norint tuo įsitikinti, pakanka (9.2.2a) ir (9.2.2b) lygybių dešiniojoje pusėje pašalinti pirmuosius dėmenis (tai atitinka prielaidą apie  $\gamma$  kvanto sugertį). Gautoji dviejų lygčių sistema (su nežinomaisiais  $v$  ir  $\nu$ ) neturi sprendinio.

### 7.4. Porų kūrimas

Jeigu  $\gamma$  kvanto energija viršija dvigubą elektrono rimties energiją  $2m_0c^2$ , tampa įmanomu elektrono ir pozitrono porų kūrimas. Porų kūrimo esmė ta, kad  $\gamma$  kvantas nustoja egzistuoti, o vietoj jo atsiranda elektrono ir pozitrono pora. Taigi,  $\gamma$  kvanto energija virsta elektrono ir pozitrono pilnutine reliatyvistine energija. Dalelės **pilnutinė reliatyvistinė energija** yra lygi jos reliatyvistinės masės  $m$  (kuri priklauso nuo dalelės greičio) ir šviesos greičio kvadrato sandaugai. Kadangi  $m$  negali būti mažesnė už dalelės rimties masę  $m_0$ , tai pagal energijos tvermės dėsnį porų kūrimas įmanomas tik tuomet, kai  $\gamma$  kvanto energija yra didesnė už elektrono ir pozitrono rimties energijų sumą  $2m_0c^2 \approx 1.02$  MeV. Be to, remiantis energijos ir judesio kiekio tvermės dėsniais, galima įrodyti, kad poros negali atsirasti vakuume. Poros gali atsirasti tik kurios nors dalelės elektriniame lauke. Ši dalelė gauna dalį krintančiojo  $\gamma$  kvanto judesio kiekio ir energijos. Šios dalelės vaidmenį gali atlikti atomo branduolys arba elektronas.

Elektrono ir pozitrono pora branduolio lauke gali atsirasti tik tuomet, kai  $\gamma$  kvanto energija tenkina nelygybę

$$h\nu \geq 2m_0c^2 + E_{br}; \quad (7.4.1)$$

čia pirmasis dėmuo nusako poros rimties energiją, o antrasis yra branduolio atatrunkos energija. Kadangi branduolio atatrunkos energija yra palyginti maža, tai porų kūrimo slenksčiu laikomas pirmasis dėmuo  $2m_0c^2 \approx 1.02$  MeV. Porų kūrimo elektrono lauke slenkstis yra 2 kartus didesnis ( $4m_0c^2$ ). Taip yra todėl, kad elektrono atatrunkos energija yra žymiai didesnė už branduolio atatrunkos energiją (dėl žymiai mažesnės masės), ir jos nepaisyti negalima.

### 7.5. Sąveikos skerspjūvis ir silpimo koeficientas

Dviejų dalelių sąveikos su konkrečia pasekme tikimybė (pvz., krintančiojo  $\gamma$  kvanto Komptono sklaidos tikimybė arba fotoefekto tikimybė) apibūdinama, naudojant skerspjūvio sąvoką: kiekviena apšaudomoji dalelė (pvz., elektronas arba atomas) pakeičiama išvaizduojama plokščia sritimi, kuri statmena krintančiųjų dalelių judėjimo kryptčiai ir kurios plotas parinktas taip, kad duotojo įvykio (pvz., Komptono sklaidos arba fotoefekto) tikimybė sutaptų su tikimybe, kad krintančioji dalelė pataikys į šią sritį. Taip apibrėžtas plotas  $\sigma$  vadinamas to įvykio **skerspjūviu**. Žinant skerspjūvį, duotojo įvykio tikimybę galima apskaičiuoti pagal geometrinės tikimybės skaičiavimo taisyklės žemiau aprašytu būdu.

Tarkime, kad apšaudomųjų dalelių koncentracija bandinyje yra  $N$ . Tuomet ploto  $S$  ir nykstamai mažo storio  $dx$  medžiagos sluoksnyje yra  $N \cdot S \cdot dx$  apšaudomųjų dalelių. Pilnutinis šių dalelių "plotas"  $dS'$ , kuris uždengia dalį ploto  $S$ , yra lygus skerspjūvių plotų sumai, t.y.  $dS' = \sigma \cdot N \cdot S \cdot dx$  (žr. 7.1 pav.). Kadangi krintančioji dalelė gali su vienoda tikimybe pataikyti į bet kurį  $S$  ploto paviršiaus tašką, tai tikimybė  $dP$ , kad krintančioji dalelė "pataikys" į kurią nors  $dx$  storio sluoksnyje esančią dalelę-taikinį, yra lygi plotų santykiui:

$$dP = \frac{dS'}{S} = \sigma \cdot N \cdot dx. \quad (7.5.1)$$

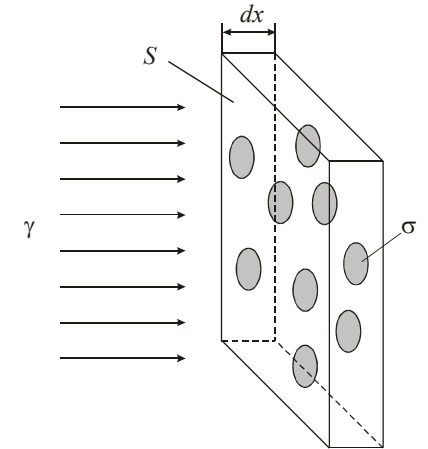
Šį sąryšį galima laikyti sąveikos skerspjūvio  $\sigma$  apibrėžimu: sąveikos skerspjūvis  $\sigma$  yra lygus sąveikos tikimybės  $dP$  ir ploto vienetui tenkančių dalelių skaičiaus  $N \cdot dx$  santykiui.

Kiekvienas procesas, kuris gali vykti, sąveikaujant dviem dalelėms, apibūdinamas savo skerspjūviu. Pagal nesutaikomųjų įvykių tikimybių sumos taisyklę, visų įvykių, kurie gali vykti, sąveikaujant dviem dalelėms, skerspjūvių suma nusako pilnutinį dalelių sąveikos ("susidūrimo") skerspjūvį. Todėl  $\gamma$  kvanto sąveikos su atomu skerspjūvis yra lygus

$$\sigma = \sigma_K + \sigma_F + \sigma_P; \quad (7.5.2)$$

čia  $\sigma_K$ ,  $\sigma_F$  ir  $\sigma_P$  yra, atitinkamai, Komptono sklaidos, fotoefekto ir porų kūrimo skerspjūviai (jeigu  $\gamma$  kvanto energija mažesnė už 1 MeV,  $\sigma_P = 0$ ).

Remiantis (7.5.1), galima apskaičiuoti  $\gamma$  spinduliuotės intensyvumo  $I$  priklausą nuo medžiagos sluoksnio storio  $x$  (čia intensyvumas apibrėžiamas



7.1 pav.  $\gamma$  kvanto sugerties arba sklaidos skerspjūvio ploto  $\sigma$  aiškinimas



kaip  $\gamma$  kvantų srauto tankis, t.y., pro statmeną spinduliuotės kryptį vienietinio ploto paviršių per laiko vienetą praeinančių  $\gamma$  kvantų skaičius). Pasinaudosime tuo, kad bet kuris susidūrimas su medžiagos atomu sumažina pradinės krypties  $\gamma$  kvantų skaičių vienetu: fotoefekto arba poros sukūrimo atveju  $\gamma$  kvantas nustoja egzistuoti (sugeriamas), o Komptono sklaidos atveju pasikeičia  $\gamma$  kvanto judėjimo kryptis, t.y.,  $\gamma$  kvantas “išmušamas” iš pradinio srauto (išsklaidomas). Antra vertus, pagal tikimybės apibrėžimą (žr. 4.3 poskyrį), susidūrimo tikimybė  $dP$  yra lygi susidūrusių su medžiagos atomais  $\gamma$  kvantų ir pilnutinio kritusių į bandinį  $\gamma$  kvantų skaičių santykiui. Kadangi spinduliuotės intensyvumas proporcingas krintančių į bandinį  $\gamma$  kvantų skaičiui per laiko vienetą, o intensyvumo sumažėjimas proporcingas susidūrusių su medžiagos atomais  $\gamma$  kvantų skaičiui, tai, skaičiuodami tikimybę  $dP$ , trupmenos skaitiklyje vietoj susidūrimų skaičiaus galime naudoti intensyvumo sumažėjimą (t.y., pokytį su minuso ženklu)  $-dI$ , o vardiklyje vietoj krintančiųjų  $\gamma$  kvantų skaičiaus galime naudoti krintančios į medžiagos sluoksnį spinduliuotės intensyvumą. Todėl lygybės (7.5.1) kairiojoje pusėje dydį  $dP$  galime pakeisti intensyvumo santykiu sumažėjimu ( $-dI / I$ ), praeinant  $dx$  storio sluoksni:

$$-\frac{dI}{I} = \sigma \cdot N \cdot dx; \quad (7.5.3)$$

čia  $N$  yra atomų skaičius tūrio vienetu. Suintegravę (7.5.3) lygybę, gauname

$$I(x) = I_0 e^{-\sigma \cdot N \cdot x}; \quad (7.5.4)$$

čia  $I_0$  yra pradinis intensyvumas. Ši sąryšį galima užrašyti tokiu pavidalu:

$$I(x) = I_0 e^{-\mu x}, \quad (7.5.5)$$

kur  $\mu$  yra **silpimo koeficientas**:

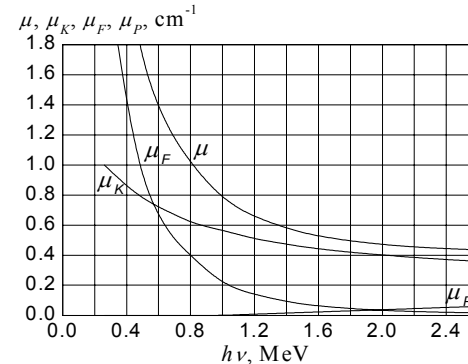
$$\mu = \sigma \cdot N; \quad (7.5.6)$$

Kadangi sąveikos skerspjūvis  $\sigma$  yra lygus trijų skirtingų procesų skerspjūvių sumai (žr. (7.5.2)), tai silpimo koeficientą  $\mu$  taip pat galima išreikšti suma trijų silpimo koeficientų, atitinkančių tris procesus – Komptono sklaidą, fotoefektą ir porų kūrimą:

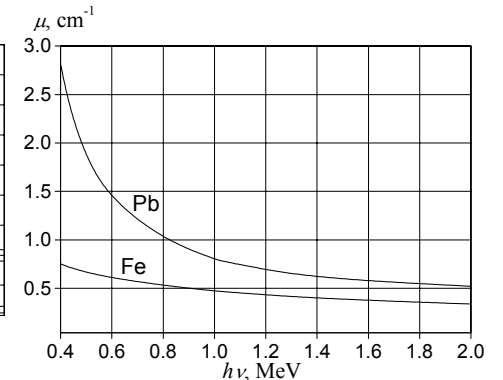
$$\mu = \mu_K + \mu_F + \mu_P. \quad (7.5.7)$$

Koeficientų  $\mu_K$ ,  $\mu_F$  ir  $\mu_P$  išraiškos gaunamos, įrašius atitinkamą skerspjūvį į (7.5.6) vietoj  $\sigma$ .

Visi trys koeficientai  $\mu_K$ ,  $\mu_F$  ir  $\mu_P$  priklauso nuo  $\gamma$  kvantų energijos. Šių koeficientų ir pilnutinio silpimo koeficiento  $\mu$  priklausa nuo  $\gamma$  kvanto energijos švino atveju pavaizduota 7.2 pav. Kaip matome, mažų energijų srityje ( $h\nu < 0.5$  MeV) fotoefektas yra pagrindinis sąveikos procesas. Tačiau, augant energijai, fotoefekto skerspjūvis sparčiai mažėja. Taip yra todėl, kad, augant  $\gamma$  kvanto energijos ir elektrono ryšio energijos skirtumui, didėja  $\gamma$  kvanto energijos dalis, kuri fotoefekto metu virsta elektrono kinetine energija  $E_e$ , ir mažėja jos dalis, kuri išeikvojama elektrono ryšio su atomu nutraukimui (žr. (7.3.1)). T.y., vis tikslėsnė tampa apytikslė lygybė  $E_e \approx h\nu$ . Ši lygybė gali virsti



7.2 pav. Skirtingus procesus atitinkančių silpimo koeficientų priklauso nuo  $\gamma$  kvantų energijos švino atveju.



7.3 pav. Pilnutinio silpimo koeficiento priklauso nuo  $\gamma$  kvantų energijos švino ir geležies atveju.

tikslia tik tuo atveju, kai jonizacijos energija  $\varepsilon$  lygi nuliui, t.y., kai elektronas yra laisvas. Kitais žodžiais, augant  $\gamma$  kvanto energijai, atomo elektronas  $\gamma$  kvanto atžvilgiu tampa vis panašesnis į laisvąjį. Tačiau laisvasis elektronas negali sugerti  $\gamma$  kvanto (žr. 7.3 poskyrį), todėl fotoefekto skerspjūvis mažėja. Todėl aukštų energijų srityje fotoefekto skerspjūvis tampa žymiai mažesnis už Komptono sklaidos skerspjūvį, kuris taip pat mažėja, augant  $\gamma$  kvanto energijai (žr. 7.2 pav.). Fotoefekto ir Komptono sklaidos skerspjūvių priklausomybė nuo  $\gamma$  kvanto energijos matematinį pavidalą galima paaiškinti tik kvantinės elektrodinamikos metodais. Taigi, paprasto aiškinimo nėra.

Kai  $\gamma$  kvanto energija viršija dvigubą elektrono rimties energiją  $2m_0c^2 = 1.02$  MeV, pradeda pasireikšti  $\gamma$  kvantų sugertis dėl porų kūrimo. Šio proceso skerspjūvis auga, didėjant  $h\nu$ . Todėl, kai  $\gamma$  kvanto energija viršija 10 MeV, porų kūrimas tampa pagrindiniu  $\gamma$  kvantų sugerties mechanizmu. Esant ypač aukštoms  $\gamma$  kvantų energijoms ( $1000mc^2$  eilės ir didesnės) porų kūrimo skerspjūvis artėja prie konstantos, kuri apytiksliai lygi  $Z^2 \cdot 10^{-26}$  cm<sup>2</sup>, čia  $Z$  yra branduolio krūvio skaičius.

Silpimo koeficientas  $\mu$  priklauso ne vien nuo  $\gamma$  kvanto energijos, bet ir nuo medžiagos. Pagrindinė šios priklausomybės priežastis yra stipri sąveikos skerspjūvio  $\sigma$  priklausomybė nuo atominio numerio  $Z$  (kuris sutampa su elektronų skaičiumi atome). Atominis Komptono sklaidos skerspjūvis proporcingas  $Z$ , nes Komptono sklaidos atome tikimybė proporcinga elektronų skaičiui jame. Fotoefekto skerspjūvis proporcingas  $Z^5$ . Fotoefekto skerspjūvio augimas, didėjant  $Z$ , aiškinamas tuo, kad, didėjant branduolio krūviui, auga ir elektrono ryšio energija atome, todėl mažėja skirtumas tarp  $\gamma$  kvanto energijos ir jonizacijos energijos (t.y., aiškinimas toks pats, kaip ir priklausomybės nuo  $h\nu$  aiškinimas: žr. aukščiau). Porų kūrimo skerspjūvis proporcingas  $Z^2$ . Taigi, didėjant atominiam numeriui  $Z$ , silpimo koeficientas auga. Todėl, pvz., švino

atveju ( $Z = 82$ ) silpimo koeficientas yra didesnis, negu geležies atveju ( $Z = 26$ ). Šį teiginį iliustruoja 7.3 pav. Be to, švine fotoefekto įvykių dalis pilnutiniame sąveikos įvykių skaičiuje yra žymiai didesnė, negu medžiagose, kurios sudarytos iš lengvųjų elementų, pvz., geležyje arba aliuminyje.

Kadangi silpimo koeficientas  $\mu$  priklauso nuo  $\gamma$  kvantų energijos, tai eksponentinis silpimo dėsnis (7.5.5) gaunamas tik monochromatinės (vienos energijos) spinduliuotės atveju. Jeigu spinduliuotė yra monochromatinė, tuomet, žinant silpimo koeficiento duotojoje medžiagoje priklausą nuo  $\gamma$  kvanto energijos, pagal išmatuotąjį silpimo koeficientą galima įvertinti tiriamojo  $\gamma$  radioaktyviojo izotopo spinduliuojamų  $\gamma$  kvantų energiją.

### 7.6. Darbo užduotys

1. Išmatuoti izotopų  $^{137}\text{Cs}$  ir  $^{60}\text{Co}$   $\gamma$  spinduliuotės intensyvumo priklausą nuo švino arba geležies sugėriklio storio.
2. Nubraižyti švino ir geležies  $\gamma$  spindulių sugerties kreives  $^{137}\text{Cs}$  ir  $^{60}\text{Co}$  atvejais.
3. Pagal sugerties kreives apskaičiuoti  $\gamma$  spindulių silpimo koeficientus ir  $\gamma$  kvantų sąveikos su medžiagos atomais skerspjūvius.

### 7.7. Matavimų tvarka

Laboratorinio darbo aparatūros struktūrinė schema yra tokia pati, kaip ir tiriant  $\beta$  spindulių sugertį (žr. 6.7 pav.), tačiau naudojamas ne  $\beta$  šaltinis, o  $^{137}\text{Cs}$  ir  $^{60}\text{Co}$   $\gamma$  spindulių šaltiniai. Šių izotopų skilimo schemas yra pateiktos priedo A-1 ir A-2 pav. Reikiamas sugėriklio storis pasiekiamas, dedant vieną ant kitos 1 mm ir 2 mm storio švino arba geležies plokšteles. Matavimų tvarka yra tokia:

1. Įjungiami skaitiklio maitinimo blokas ir registravimo įrenginys.
2. Išmatuojamas aplinkos fonas. Tuo tikslu atliekami 10 registravimų ir apskaičiuojamas vidurkis.
3. Prieš skaitiklį padedamas  $^{137}\text{Cs}$  radioaktyvusis šaltinis ir išmatuojamos  $\gamma$  spindulių sugerties kreivės švine. Švino sluoksnio storis  $x$  didinamas nuo 0 iki 2 cm. 0 – 1 cm intervale storis keičiamas kas 1 mm; 1.2 – 2 cm intervale storis keičiamas kas 2 mm. Esant kiekvienam storiui, atliekamas vienas matavimas. Matavimų duomenys fiksuojami lentelėje: pirmajame stulpelyje užrašomos švino storio vertės ( $x$ ), o antrajame – užregistruotų dalelių skaičiai ( $n$ ).
4. 3 punkto matavimai pakartojami, naudojant geležies plokšteles.
5. Matavimai pakartojami, naudojant  $^{60}\text{Co}$  radioaktyvųjį šaltinį ir švino plokšteles. Jeigu vieno matavimo metu skaitiklis užregistruoja mažiau negu 100  $\gamma$  kvantų, tuomet matavimą reikia pakartoti ir apskaičiuoti dviejų matavimų vidurkį.

6. 5 punkto matavimai pakartojami, naudojant geležies plokšteles.

Vieno registravimo trukmė priklauso nuo naudojamo skaitiklio tipo. Jeigu naudojamas Geigerio ir Miulerio skaitiklis, tuomet vieno registravimo trukmė 1 min. Jeigu naudojamas blyksninis skaitiklis (kuris, registruojant  $\gamma$  kvantus, yra žymiai efektyvesnis už Geigerio ir Miulerio skaitiklį), tuomet vieno registravimo trukmę galima sumažinti iki 10 s.

### 7.8. Matavimo duomenų analizė

1. Užregistruotų dalelių skaičiai pataisomi, atsižvelgiant į skaitiklio neveikos trukmę (žr. 8.9 poskyrį):

$$n = \frac{n'}{1 - (n' / \Delta t) \tau};$$

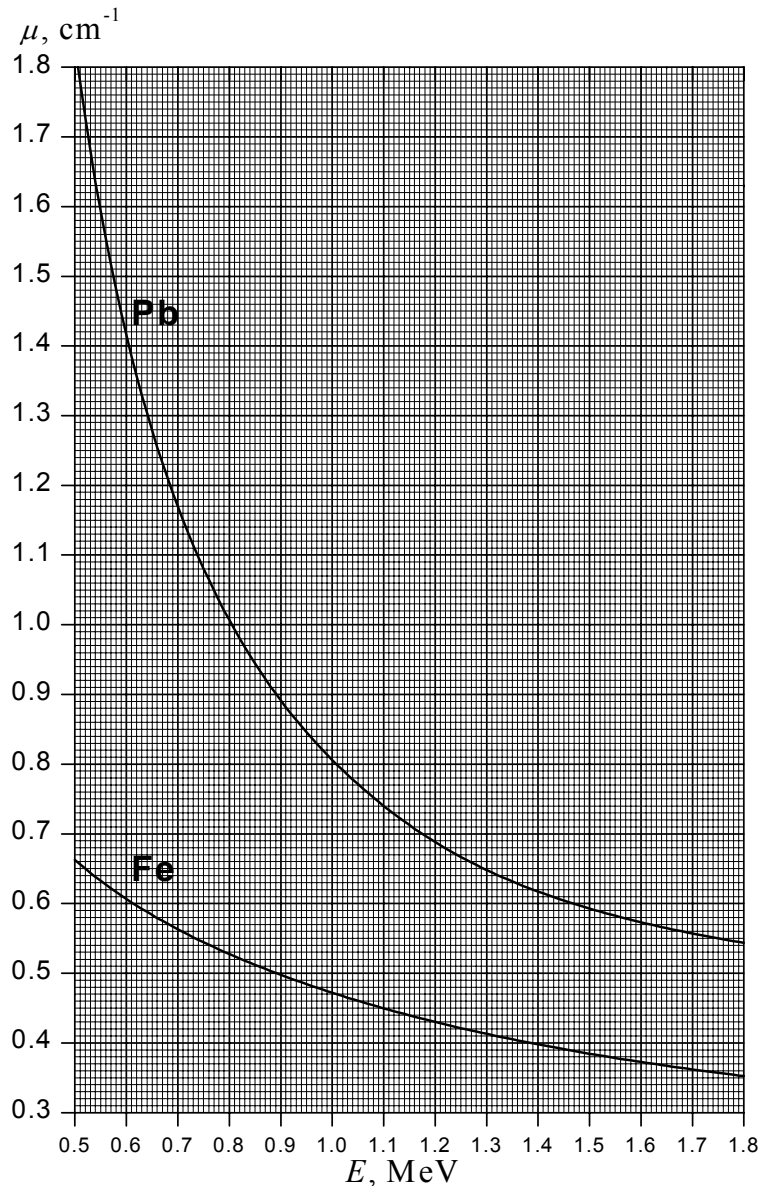
čia  $n'$  yra užregistruotų dalelių skaičius,  $\tau$  yra skaitiklio neveikos trukmė (s), o  $\Delta t$  yra vieno registravimo trukmė (s). Ši pataisa būtina tik tuo atveju, kai reiškinys  $(n' / \Delta t) \tau$  yra didesnis už 0.01.

2. Iš  $n$  verčių atimamas fonas  $n_f$ . Dydžio  $\frac{n - n_f}{n_0 - n_f}$  natūraliojo logaritmo

priklausos nuo švino ir geležies storio pavaizduojamos grafiškai (čia  $n_0$  yra  $n$  vertė, kuri atitinka nulinį storį). Tokiu būdu gaunamos keturios sugerties kreivės, atitinkančios dviejų energijų  $\gamma$  kvantų sugertį švine ir geležyje. Visas sugerties kreives reikia pavaizduoti ant vieno grafiko, kad jas būtų lengviau palyginti. Pagal (7.5.5) formulę, šios kreivės turėtų būti artimos tiesėms<sup>1</sup>.

3. Pagal sugerties kreives tiesinės aproksimacijos metodu (žr. priedą B) randami silpimo koeficientai ( $\mu$ ) švine ir geležyje bei jų atsitiktinės paklaidos. Tuo atveju, kai radioaktyvusis šaltinis yra  $^{137}\text{Cs}$ , o sugėriklis yra švinas, aproksimuoti reikia tik taškus, kurie atitinka storius nuo 0 iki 1 cm<sup>1</sup>. Po to pagal (7.5.6) formulę apskaičiuojami atitinkami sąveikos skerspjūviai ( $\sigma$ ). Skaičiuojant atomų tankį  $N$ , reikia panaudoti geležies ir švino tankius  $\rho$  ir masės skaičius  $A$ . Geležies  $\rho = 7.86 \text{ g/cm}^3$ ,  $A = 55.85$ . Švino  $\rho = 11.29 \text{ g/cm}^3$ ,  $A = 207.2$ . Neutrono arba protono masė  $m_n = 1.674 \cdot 10^{-24} \text{ g}$ .
4. Pagal 7.4 pav. randami teoriniai silpimo koeficientai ir palyginami su išmatuotom vertėm.  $^{137}\text{Cs}$  spinduliuoja 0.662 MeV energijos fotonus (žr. priedo A-1 pav.).  $^{60}\text{Co}$  spinduliuoja dviejų artimų energijų 1.33 MeV ir

<sup>1</sup> Tuo atveju, kai radioaktyvusis šaltinis yra  $^{137}\text{Cs}$ , o sugėriklis yra švinas, gali atsirasti nuokrypis nuo tiesės, kai švino storis didesnis už 1 cm, nes tuomet pernelyg padidėja tikimybė, kad  $^{137}\text{Cs}$  išspinduliuotas  $\gamma$  kvantas bus išsklaidytas švine kelis kartus ir po to pataikys į detektorių (tokiu atveju išmatuotoji silpimo koeficiento vertė yra mažesnė už tikrąją, t.y., sugerties kreivė užlinksta į viršų).



7.4 pav.  $\gamma$  spinduliuotės silpimo koeficiento švine ir geležyje priklauso nuo  $\gamma$  kvantų energijos.

1.17 MeV fotonus (žr. priedo A-2 pav.), todėl  $^{60}\text{Co}$  atveju reikia naudoti teorinę  $\mu$  vertę, kuri atitinka vidutinę fotonų energiją 1.25 MeV.

### 7.9. Kontroliniai klausimai

1.  $\gamma$  spinduliuotės sąveika su medžiaga: Komptono sklaida, fotoefektas, porų kūrimas.
2. Sąveikos skerspjūvio sąvoka.
3. Spinduliuotės intensyvumo priklauso nuo medžiagos sluoksnio storio (išvedimas).
4. Komptono sklaidos ir fotoefekto skerspjūvių priklausomybė nuo  $\gamma$  kvantų energijos ir elemento atominio numerio.

## 8. Darbas Nr. 8. Geigerio ir Miulerio skaitiklio tyrimas

### 8.1. Jonizuojančiosios spinduliuotės detektorių veikimo principas

**Jonizuojančioji spinduliuotė** – tai dalelių, kurių energija pakankama medžiagos atomų ir molekulių jonizavimui, srautas. **Jonizavimo** procese atomas arba molekulė netenka elektrono. Vienas iš jonizuojančiosios spinduliuotės šaltinių yra radioaktyvieji izotopai.  $\beta$  dalelių (elektronų) ir  $\gamma$  kvantų, kurių energija neviršija 1 MeV, ir bet kurios energijos  $\alpha$  dalelių sąveika su medžiaga pasireiškia beveik vien tik atomų jonizavimu (žr. 6.2, 6.3 ir 7.4 poskyrius).

Mažiausias darbas, kurį reikia atlikti, pašalinant elektroną iš atomo, vadinamas elektrono **ryšio energija** arba atomo **jonizacijos energija**. Daugeliui atomų jonizacijos energija yra artima 10 eV. Todėl šį dydį galima laikyti jonizuojančiosios spinduliuotės dalelių energijų apatine riba. Tačiau praktikoje dažniausiai susiduriama su jonizuojančiąja spinduliuote, kurios dalelių energija priklauso intervalui 10 keV ÷ 20 MeV. Praeinant aukštos energijos dalelei pro medžiagą, vidutiniai dalelės energijos nuostoliai, tenkantys vienam jonizuotam atomui, yra artimi 30 eV (iš šių 30 eV, maždaug 10 eV išeikvojama pačiam jonizavimui, o likusioji energija išeikvojama medžiagos atomų sužadimui). Taigi, 1 MeV dalelė, perduodama visą savo energiją medžiagai, jonizuoja maždaug 30000 atomų.

Moksle ir technikoje dažnai tenka matuoti jonizuojančiosios spinduliuotės intensyvumą ir charakteristikas. Neutralių molekulių jonizavimo reiškinys, kurio metu atsiranda laisvasis elektronas ir teigiamasis jonas (šios dvi dalelės vadinamos **jonų pora**), panaudojamas dujiniuose jonizuojančiosios spinduliuotės detektoriuose. Jeigu dujose egzistuoja elektrinis laukas, tuomet dėl dujų molekulių jonizacijos atsiradę teigiamieji jonai ir elektronai juda priešingom kryptim: atsiranda elektros srovė. Laisvieji elektronai patenka į anodą, o teigiamieji jonai pasiekia katodą ir neutralizuojasi (gauna iš katodo elektroną). Šis kryptingas krūvininkų judėjimas ir yra **dujinių jonizuojančiosios spinduliuotės detektorių** veikimo pagrindas. Dujiniai detektoriai dažniausiai užpildomi inertinėmis dujomis, pvz., argonu (žr. 8.3 poskyrį).

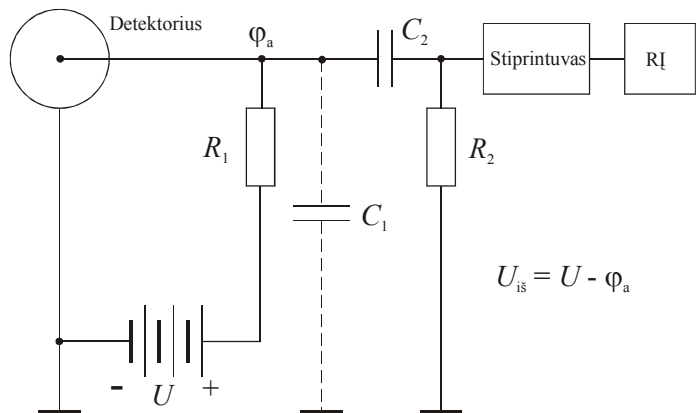
Egzistuoja nuolatinio veikimo dujiniai detektoriai ir impulsiniai detektoriai. **Nuolatinio veikimo** detektorius yra sujungtas su ampermetru, kurio atsako trukmė žymiai didesnė už vidutinį laiko intervalą tarp registruojamų dalelių. Tuomet ampermetras matuoja srovę, kuri nusako vidutinę elektronų (ir teigiamų jonų) krūvio susidarymo spartą detektoriuje. Taip veikia **jonizacijos kameros** – įrenginiai su dviem lygiagrečiais elektrodais, tarp kurių yra dujos. Pvz., jonizacijos kamera – tai daugelio kišeninių dozimetų pagrindinė dalis.

Nuolatinio veikimo detektorius matuoja tik vidutinį jonizuojančiosios spinduliuotės poveikį per tam tikrą laiko tarpą. Tačiau dažnai reikalinga informacija apie atskirų dalelių savybes. Tokiu atveju naudojama **impulsinė veika**, kurioje kiekviena dalelė, kuri sąveikauja su detektoriumi, sukelia atskirą elektros srovės impulsą. Impulsiniai dujiniai detektoriai dažnai vadinami **jonizaciniais skaitikliais**. Taip veikia proporcingieji skaitikliai bei Geigerio ir Miulerio skaitikliai. Šiuose skaitikliuose panaudojamas elektroninės griūtės reiškinys, kuris keliom eilėm padidina įtampos impulso amplitudę ir tuo pačiu palengvina šių impulsų registravimą. Proporcinguosiuose skaitikliuose išlydis yra nesavaiminis, t.y., jis gėsta, nutrūkus pirminei jonizacijai (žr. 8.4 poskyrį). Geigerio ir Miulerio skaitikliuose išlydis yra savaiminis, t.y., prasidėjus išlydžiui, jis egzistuos ir be pirminės jonizacijos, jeigu nebus imtasi specialių priemonių jo slopinimui (žr. 8.5 ir 8.6 poskyrius).

Kadangi dujos silpnai sugeria  $\gamma$  spindulius, dujinių detektorių efektyvumas, registruojant  $\gamma$  kvantus, yra nedidelis (didžioji dalis  $\gamma$  kvantų praeina pro detektoriumi, nesusidūrę nė su vienu atomu).  $\gamma$  spinduliuotei žymiai jautresni **blyksniniai skaitikliai** (dar vadinami **scintiliaciniais skaitikliais**). Blyksninio skaitiklio darbinė medžiaga yra skaidrus kristalas – scintiliatorius. Kaip ir dujiniuose detektoriuose,  $\gamma$  kvantas jonizuoja darbinės medžiagos atomus, t.y., išmuša iš jų elektronus (tačiau, praeinant  $\gamma$  kvantui pro kristalą, tokio įvykio tikimybė yra žymiai didesnė, negu praeinant pro dujas). Šiems elektronams prarandant energiją scintiliatoriaus medžiagoje, atsiranda regimosios šviesos blyksnis – **scintiliacija**. Fotodaugintuvas, kuris įeina į scintiliacinio skaitiklio sudėtį, šiuos blyksnius paverčia įtampos impulsais skaitiklio išėjime. Šiuos impulsus registruoja registravimo įrenginys. Blyksniniame skaitiklyje dažniausiai naudojamas neorganinis scintiliatorius NaI(Tl) (natrio jodido kristalas su talio priemaiša). Kristalo storis parinktas taip, kad į kristalą patekusio  $\gamma$  kvanto sugerties arba sklaidos tikimybė būtų artima vienetui. Todėl blyksninis skaitiklis registruoja beveik visus į jį patenkančius  $\gamma$  kvantus. Kitas blyksninio skaitiklio privalumas – didelis greitaeigiškumas (neveikos trukmė yra  $10^{-7}$  –  $10^{-9}$  s).

### 8.2. Impulsinio dujinio detektoriaus jungimo schema

Impulsinio dujinio detektoriaus jungimo schema pavaizduota 8.1 pav. Skaitiklio apkrovos varža  $R_1$  prijungta tarp anodo ir aukštos įtampos  $U$  šaltinio. Įtampos impulsas, kuris atsiranda apkrovos varžoje dėl kryptingo laisvųjų krūvininkų judėjimo dujose ir dėl krūvininkų surinkimo elektroduose, yra sustiprinamas ir perduodamas į registravimo įrenginį (RI). Įtampos kritimą apkrovos varžoje  $R_1$  žymėsime  $U_{is}$  (detektoriaus "išėjimo įtampa"). Kondensatorius  $C_2$  atskiria stiprintuvo įėjimo grandinę nuo detektoriaus maitinimo grandinės.  $C_1$  yra stiprintuvo įėjimo grandinės ir detektoriaus talpų suma (stiprintuvo įėjimo grandinei priskiriama ir talpa  $C_2$ ).



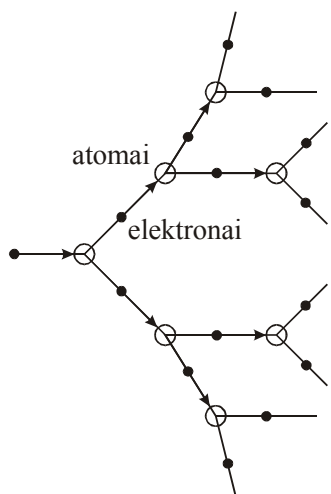
8.1 pav. Impulsinio dujinio detektoriaus jungimo schema.

Kadangi maitinimo įtampos  $U$  šaltinis, skaitiklis ir jo apkrova yra sujungti nuosekliai (žr. 8.1 pav.), tai  $U = \varphi_a + U_{is}$ , kur  $\varphi_a$  yra anodo potencialas (įtampa tarp skaitiklio elektrodų). Taigi,

$$\varphi_a = U - U_{is}. \quad (8.2.1)$$

### 8.3. Elektroninė griūtis dujiniame detektoriuje

Kad dujinis detektorius galėtų užregistruoti dalelę (pvz.,  $\gamma$  kvantą,  $\beta$  dalelę,  $\alpha$  dalelę, protoną ir pan.), ta dalelė turi sukurti bent vieną laisvąjį elektroną dujose, kurios užpildo detektorių. Šie **pirminiai** elektronai atsiranda dėl to, kad registruojamosios dalelės jonizuoja darbinių dujų atomus arba išmuša elektronus iš katodo ( $\gamma$  kvantai registruojami beveik vien tik dėl



8.2 pav. Elektroninė griūtis

pastarojo reiškinio). Jeigu elektrinis laukas dujiniame detektoriuje yra pakankamai stiprus ( $> 10^4$  V/cm), tuomet laisvieji elektronai tarp susidūrimų su dujų atomais gali įgyti energiją, kuri pakankama antrinei jonizacijai. T.y., laisvasis elektronas gali jonizuoti atomą. Įvykus antrinei jonizacijai, vietoj vieno laisvojo elektrono atsiranda du laisvieji elektronai, kurie taip pat gali jonizuoti atomus, ir t.t. Tokiu būdu įvyksta griūtinė antrinė jonizacija (**elektroninė griūtis**). Dėl šio griūtinio proceso vienas (pirminis) elektronas gali sukurti šimtus antrinių laisvųjų elektronų (žr. 8.2 pav.). Atitinkamai, krūvis, kuris surenkamas skaitiklio elektroduose, ir įtampos impulsas skaitiklio apkrovos varžoje taip pat išauga šimtus kartų. Pilnutinis elektronų skaičius, kuris atsirado dėl vienos molekulės jonizacijos, vadinamas **dujinio**

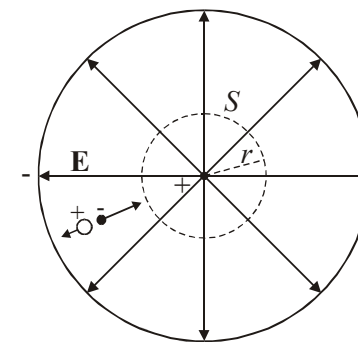
**stiprinimo koeficientu**. Dujinio stiprinimo koeficientas auga, didėjant elektrinio lauko stipriui, ir gali kisti nuo vieno iki  $10^{10}$ . Jeigu dėl vieno jonizacijos įvykio atsiranda tik viena elektroninė griūtis, tuomet dujinio stiprinimo koeficientas sutampa su vidutiniu elektronų skaičiumi vienoje griūtyje. Tai galioja proporcingiesiems skaitikliams (žr. 8.4 poskyrį). Geigerio ir Miulerio skaitikliuose vienas jonizacijos įvykis sukelia daugiau negu vieną griūtį, todėl šių skaitiklių dujinio stiprinimo koeficientas yra didesnis už vidutinį elektronų skaičių vienoje elektroninėje griūtyje (žr. 8.5 poskyrį).

Pakankamai didelis elektrinio lauko stipris, kuris reikalingas elektroninės griūtės atsiradimui, pasiekiamas, atitinkamai parinkus dujinio skaitiklio elektrodų geometriją ir naudojant aukštą įtampą tarp elektrodų ( $400 \div 1000$  V). Daugumos skaitiklių, kuriuose panaudojamas šis reiškinys, katodas yra cilindrinis metalinis vamzdelis, o anodas – plonas ( $\sim 0.1$  mm eilės storio) metalinis siūlas, kuris ištemptas vamzdelio ašyje (žr. 8.4a,b pav.). Šiomis sąlygomis elektrinis laukas skaitiklio viduje priklauso nuo atstumo iki anodo. Lauko stiprio priklausą nuo atstumo iki anodo galima rasti pagal Gauso teoremą. Ši teorema teigia, kad elektrinio lauko srautas pro uždara paviršių yra lygus elektrinio krūvio, kuris yra to paviršiaus viduje, ir elektrinės konstantos  $\epsilon_0 = 8.854 \cdot 10^{-12}$  F/m santykiui:

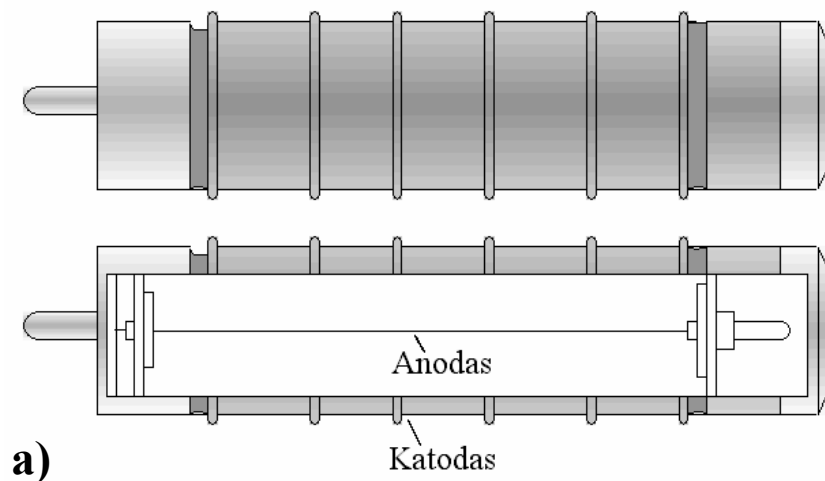
$$\oint_S (\mathbf{E}, d\mathbf{S}) = \frac{Q}{\epsilon_0}; \quad (8.3.1)$$

čia  $\mathbf{E}$  yra elektrinio lauko stiprio vektorius ant integravimo paviršiaus,  $d\mathbf{S}$  yra to paviršiaus ploto elemento vektorius (jo absoliutinė vertė lygi ploto elementui  $dS$ , o kryptis sutampa su paviršiaus normalės kryptimi), o  $(\mathbf{E}, d\mathbf{S}) = E \cdot dS \cdot \cos(\mathbf{E}, d\mathbf{S})$  yra vektorių  $\mathbf{E}$  ir  $d\mathbf{S}$  skaliarinė sandauga. Šiuo atveju integravimo paviršių patogiausia pasirinkti taip, kad jis būtų cilindro formos ir kad jo simetrijos ašis sutaptų su skaitiklio anodu. Tuomet elektrinio lauko stipris ant to paviršiaus yra pastovus, o elektrinio lauko kryptis visuose paviršiaus taškuose yra statmena tam paviršiui, t.y., sutampa su normalės kryptimi (žr. 8.3 pav.). Todėl (8.3.1) lygybės kairiojoje pusėje esantis integralas yra lygus elektrinio lauko stiprio  $E$  ir integravimo paviršiaus ploto  $S$  sandaugai. Cilindro paviršiaus plotas yra lygus  $S = 2\pi rh$ ; čia  $r$  yra cilindro spindulys, o  $h$  – cilindro ilgis (t.y., skaitiklio ilgis). Todėl (8.3.1) sąryšį galima užrašyti šitaip:

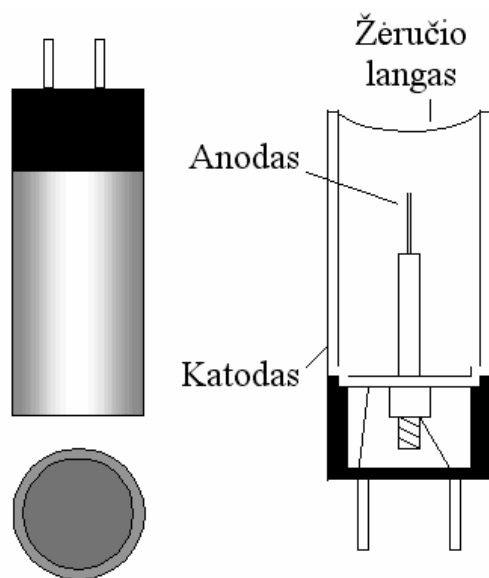
$$E(r) = \frac{Q}{\epsilon_0 S} = \frac{Q}{2\pi \epsilon_0 r h} = \frac{q}{2\pi \epsilon_0 r}; \quad (8.3.2)$$



8.3 pav. Cilindrinio dujinio skaitiklio skerspjūvis ir elektrinio lauko linijos



a)



b)

8.4 pav. Dujinių skaitiklių konstrukcijos. **a** – spinduliuotė patenka į skaitiklį pro katodą (tokie skaitikliai naudojami, registruojant  $\beta$  ir  $\gamma$  spinduliuotę); **b** – spinduliuotė patenka į skaitiklį pro žėručio langą (tokie skaitikliai naudojami, registruojant  $\alpha$ ,  $\beta$  ir  $\gamma$  spinduliuotę).

čia  $q = Q/h$  yra krūvio ilginis tankis (t.y., skaitiklio ilgio vienetui tenkantis krūvis). Krūvį  $q$  galima išskaidyti į dvi dalis – anodo krūvis ir erdvinis krūvis (pastarojo krūvio šaltiniai yra dujų jonai ir laisvieji elektronai). Erdvinis krūvis egzistuoja tik trumpą laiko tarpą po kiekvienos dalelės užregistravimo (žr. 8.4 – 8.6 poskyrius). Didžiąją laiko dalį skaitiklio tūryje nėra erdvinio elektrinio krūvio, t.y., krūviai egzistuoja tik anode ir katode. Tuomet dydis  $Q$  formulėje (8.3.2) yra anodo krūvis, o  $q$  yra anodo krūvio ilginis tankis.

Taigi, elektrinio lauko stipris Geigerio ir Miulerio skaitiklyje yra atvirkščiai proporcingas atstumui iki anodo  $r$  (žr. (8.3.2) formulę). Elektrinio potencialo  $\phi$  priklausa nuo  $r$  gaunama, pasinaudojus tuo, kad elektrinio lauko stipris yra priešingas potencialo gradientui, t.y.,

$$E = -\frac{d\phi}{dr}. \quad (8.3.3)$$

Vadinasi, potencialas lygus elektrinio lauko stiprio integralui su minuso ženklu. Integruoti reikia nuo nulinio potencialo taško iki duotojo taško  $r$ . Kadangi katodas yra įžemintas, jo potencialas lygus nuliui. Taigi,

$$\phi(r) = -\int_{r_k}^r E \cdot dr = \int_r^{r_k} E \cdot dr = \frac{q}{2\pi\epsilon_0} \int_r^{r_k} \frac{dr}{r} = \frac{q}{2\pi\epsilon_0} \ln \frac{r_k}{r}; \quad (8.3.4)$$

čia  $r_k$  yra katodo spindulys. Įtampa tarp anodo ir katodo  $U$  – tai anodo potencialas:

$$U = \phi(r_a) = \frac{q}{2\pi\epsilon_0} \ln \frac{r_k}{r_a}; \quad (8.3.5)$$

čia  $r_a$  yra anodo spindulys. Iš (8.3.2) ir (8.3.5) išplaukia elektrinio lauko stiprio  $E$ , įtamos  $U$  ir atstumo  $r$  sąryšis:

$$E = \frac{U}{r \ln \frac{r_k}{r_a}}. \quad (8.3.6)$$

Didžiausias elektrinio lauko stipris atitinka mažiausią  $r$  vertę, t.y.,  $r = r_a$ . Todėl anodą stengiamasi daryti kuo plonesnį: kuo mažesnis anodo storis, tuo stipresnį elektrinį lauką galima pasiekti, esant tai pačiai įtampai.

Elektrinio lauko stipris, kuris pakankamas griūtinei jonizacijai, egzistuoja tik kelių dešimtųjų milimetro dalių atstumu nuo anodo. Kadangi šios srities tūris yra žymiai mažesnis už skaitiklio tūrį, didžioji dauguma pirminių elektronų atsiranda toliau nuo anodo. Veikiami elektrinio lauko, šie elektronai juda link anodo, nesukurdami antrinių elektronų. Kai elektronas pasiekia sritį, kurioje elektrinis laukas yra pakankamai stiprus, prasideda elektroninė griūtis, kuri plečiasi tol, kol visi jos elektronai pasiekia anodą.

Kad elektroninė griūtis galėtų išsivystyti, jonizacijos metu susidare neigiamieji krūvininkai turi likti laisvųjų elektronų pavidalo. Kai kurių dujų neutralios molekulės lengvai prisijungia elektroną. Tokiu būdu susidaro

neigiamas jonas. Kadangi neigiamąjį jono masė yra tūkstančius kartų didesnė už elektrono masę, jo pagreitis elektriniame lauke yra tiek pat kartų mažesnis. Atitinkamai, energija, kurią neigiamajam jonui perduoda elektrinis laukas tarp susidūrimų su dujų molekulėmis, yra tūkstančius kartų mažesnė, negu elektrono atveju, ir nėra pakankama antrinei jonizacijai. Siekiant išvengti neigiamųjų jonų susidarymo, dujiniuose skaitikliuose panaudojamos dujos, kurių molekulės sunkiai prisijungia elektroną. Šia savybe pasižymi inertinės dujos (pvz., argonas), nes jų atomų elektronų sluoksniai yra pilnai užpildyti. Kitas inertinių dujų privalumas yra tas, kad jos yra vienos atomės, todėl jų jonizacija gali vykti, esant silpnesniam elektriniam laukui, negu daugiaatomių dujų atveju (mažiau konkuruojančių elektrono energijos nuostolių mechanizmų). Pvz., susidūrus elektronui su daugiaatome molekule, dalis jo energijos galėtų virsti molekulės virpesių energija, ir likusi energija būtų nepakankama jonizacijai.

Jonizacinio skaitiklio anodas dažniausiai gaminamas iš volframo. Katodas dažniausiai yra skaitiklio išorinio apvalkalo dalis. Katodo vaidmenį gali atlikti plonas laidus sluoksnis (varis, volframas, plienas ir kt.), nusodintas ant stiklinio vamzdelio vidinio paviršiaus. Į skaitiklio vidų jonizuojančioji spinduliuotė gali patekti pro katodą (žr. 8.4a pav.) arba pro specialų langelį skaitiklio gale (žr. 8.4b pav.). Pastarosios konstrukcijos skaitikliai naudojami, registruojant stipriai sugeriamas daleles (pvz.,  $\alpha$  daleles). Siekiant sumažinti dalelių sugertį langelio medžiagoje, langelis gaminamas iš plonos organinės plėvelės arba žėručio plokštelės.

#### 8.4. Proporcingieji skaitikliai

Visos elektroninės griūtys susidaro vienodom sąlygom (t.y., vienodu atstumu nuo anodo ir esant vienodam elektrinio lauko stipriui), nepriklausomai nuo to, kuriame skaitiklio taške atsirado griūtis pradininkas – pirminis elektronas. Todėl visų griūčių intensyvumai (antrinių elektronų skaičiai) yra apytiksliai vienodi. Atitinkamai, pilnutinis anode surinktas krūvis po kiekvienos jonizuojančiosios dalelės patekimo į skaitiklį yra proporcingas tos dalelės sukurtų jonų porų skaičiui (šis proporcingumas dingsta, tik kai įtampa tarp skaitiklio elektrodų viršija tam tikrą ribinę vertę: žr. 8.5 ir 8.7 poskyrius). T.y., jeigu dalelė sukūrė  $n$  jonų porų, o vieną elektroninę griūtį sudaro  $m$  elektronų, tuomet pilnutinis į anodą patekusių elektronų skaičius lygus

$$N = nm. \quad (8.4.1)$$

**Proporcingasis skaitiklis** – tai dujinis impulsinis detektorius, kurio srovės (ir įtampos) impulso amplitudė yra proporcinga pirminei jonizacijai  $n$  (žr. (8.4.1)). Kadangi pirminė jonizacija yra proporcinga krantinčiosios dalelės energijos nuostoliams, tai tuo atveju, kai dalelė dujose praranda visą savo energiją, impulso amplitudė yra proporcinga dalelės energijai. Todėl proporcinguoju skaitikliu galima tirti dalelių energijos spektrą. Tačiau tipiškame proporcingajame skaitiklyje visą savo kinetinę energiją gali prarasti tik sunkiosios elektringosios dalelės (pvz.,  $\alpha$  dalelės) arba mažų ir vidutinių

energijų  $\beta$  dalelės. Aukštų energijų  $\beta$  dalelės ir  $\gamma$  kvantai skaitiklyje praranda tik dalį savo energijos, todėl proporcingieji skaitikliai tinka tik šių dalelių registravimui, bet ne energijos matavimui.

Kad proporcinguoju skaitikliu būtų galima tirti krantinčiųjų dalelių energijos nuostolius skaitiklio tūryje, dujinio stiprinimo koeficientas turi būti pastovus. Tačiau dujinio stiprinimo koeficientas sparčiai auga, didėjant įtampai tarp skaitiklio elektrodų, nes, augant įtampai, stiprėja elektrinis laukas ir didėja tikimybė, kad elektrono įgytoji energija bus pakankama antrinei jonizacijai. Todėl proporcingųjų skaitiklių maitinimo įtampa turi būti ypač stabili. Tai yra vienas iš proporcingųjų skaitiklių trūkumų. Be to, proporcingųjų skaitiklių įtampos impulsų amplitudė yra gana maža (milivoltų eilės arba mažesnė), todėl jų registravimui reikalinga sudėtinga elektroninė aparatūra.

#### 8.5. Geigerio ir Miulerio skaitikliai

Esant pakankamai aukštai įtampai tarp anodo ir katodo, kiekviena elektroninė griūtis sukuria vieną arba daugiau antrinių griūčių. Tokiu būdu elektroninės griūtys išplinta po visą skaitiklio tūrį. Toks nevaldomas elektroninių griūčių išplitimas po visą skaitiklį vadinamas **Geigerio išlydžiu**. Dujiniame detektoriuje, kuris naudojamas tik dalelių registravimui (bet ne jų energijų matavimui), Geigerio išlydis yra naudingas, nes labai padidina dujinio stiprinimo koeficientą (jis gali siekti  $10^{10}$ ). Dujinis detektorius, kuriame kiekvienas jonizacijos įvykis sukelia Geigerio išlydį, vadinamas **Geigerio ir Miulerio skaitikliu**. Geigerio ir Miulerio skaitiklio įtampos impulsų amplitudė nepriklauso nuo pirminės jonizacijos.

Geigerio išlydžio pagrindinės priežastys yra fotojonizacija ir fotoefektas. Greitai laisvieji elektronai, sąveikaudami su dujų molekulėmis, ne tik jonizuoja, bet ir sužadina jas. Grįžtant sužadintoms molekulėms į pagrindinę būseną, jos išspinduliuoja fotoną. Be to, fotonai gali atsirasti, teigiamiems jonams rekombinuojant su laisvaisiais elektronais. Šių procesų metu atsiradusių fotonų energija priklauso ultravioletinės šviesos diapazonui (keli elektronvoltai). Pvz., argono jonui rekombinuojant su laisvu elektronu, išspinduliuojamas 15.7 eV energijos fotonas. Fotonų laisvasis kelias dujose (t.y., vidutinis kelias, kurį nueina fotonas nuo jo išspinduliavimo taško iki susidūrimo su kita dujų molekule) yra žymiai didesnis už elektrono laisvąjį kelią ir gali siekti kelis centimetrus. Sąveikaujant šiam fotonui su dujų molekule, gali įvykti molekulės **fotojonizacija**: iš jos atomo gali būti išmuštas elektronas. Šis elektronas taip pat gali tapti naujos griūtis pradininku. Be to, fotonas gali išmušti elektroną ir iš katodo (šis procesas vadinamas **fotoefektu**). Tam reikia, kad fotono energija  $h\nu$  būtų didesnė už elektrono išlaisvinimo darbą  $A$  (žr. Einšteino lygtį fotoefektui (1.2.2)). Daugumai metalų  $A = (4 - 5)$  eV, todėl fotonai, kurie atsiranda, pvz., rekombinuojant argono jonams ir elektronams, gali sukelti fotoefektą.

Elektronai, kurie atsiranda dėl fotojonizacijos ir dėl fotoefekto, vadinami **fotoelektronais**. Fotoelektronai sukelia naujas griūtis. Jeigu kiekviena griūtis tokiu būdu sukelia vidutiniškai daugiau negu vieną naują griūtį, šios griūtys išplinta po visą skaitiklį. Taigi, įvyksta Geigerio išlydis. Geigerio išlydžio atsiradimo procesą galima aprašyti šitaip. Tarkime, kad krintančioji dalelė sukūrė  $n$  jonų porų ( $n$  griūčių). Be to, tarkime, kad kiekviena griūtį sudaro  $m$  elektronų. Tuomet pilnutinis elektronų, kurie pasiekia anodą, skaičius lygus  $nm$ . Tarkime, kad elektronai, kurie sudaro vieną griūtį, sužadina vidutiniškai  $\mu$  dujų molekulių. Dalis  $\eta < 1$  fotonų, kuriuos išspinduliuoja šios molekulės, išmuš elektronus iš kitų molekulių arba iš katodo (kiti fotonai paliks skaitiklį arba bus sugerti be fotoelektronų emisijos). Vadinasi, vidutinis fotoelektronų skaičius, kuriuos sukuria viena griūtis, yra lygus

$$\alpha = \mu \cdot \eta. \quad (8.5.1)$$

Kadangi griūčių skaičius yra  $n$ , tai pilnutinis atsiradusių fotoelektronų skaičius lygus  $\alpha n$ . Šie elektronai patys tampa naujų griūčių pradininkais. Kitais žodžiais, kiekviena griūtis dėl fotojonizacijos ir fotoefekto sukuria  $\alpha$  naujų griūčių. Tokiu būdu tarp katodo ir anodo praeina elektroninių griūčių seka, kurioje pilnutinis elektronų skaičius lygus

$$N = nm + \alpha nm + \alpha^2 nm \dots = nm(1 + \alpha + \alpha^2 + \dots). \quad (8.5.2)$$

Reiškinys skliaustuose – tai geometrinės progresijos suma. Kai  $\alpha < 1$ , ši suma lygi  $1/(1-\alpha)$ , o kai  $\alpha \geq 1$ , ši suma lygi begalybei. Geigerio išlydžio atveju  $\alpha > 1$ , todėl griūtys per  $10^{-7}$  s eilės laiką išplinta po visą skaitiklį.

Proporcingajame skaitiklyje antrinės griūtys yra nepageidautinos, nes skaitiklio impulso amplitudė nustoja būti proporcinga pirminei jonizacijai. Taigi, proporcingojo skaitiklio atveju koeficientas  $\alpha$  (8.5.2) reiškinyje turi būti žymiai mažesnis už 1. Antrinių griūčių proporcingajame skaitiklyje išvengiama, papildžius skaitiklio dujas nedideliu kiekiu kitos rūšies dujų, kurios intensyviai sugeria ultravioletinę šviesą, tačiau šio proceso metu neemituoja elektronų. Šia savybe pasižymi, pvz., metanas ( $\text{CH}_4$ ). Tačiau, net ir naudojant dujas, kurios slopina Geigerio išlydį, bet kuris proporcingasis skaitiklis pradeda veikti kaip Geigerio ir Miulerio skaitiklis, kai anodo potencialas viršija tam tikrą vertę (žr. 8.7 poskyrį).

## 8.6. Antrinių Geigerio išlydžių slopinimas

Aukščiau minėtasis antrinių griūčių išplitimas po skaitiklio tūrį yra labai greitas procesas, nes jis susijęs su greitųjų dalelių (elektronų ir fotonų) judėjimu. Tačiau egzistuoja reiškinys, dėl kurio antrinės griūtys gali atsirasti, netgi praėjus palyginti ilgam laiko tarpui ( $> 10^{-3}$  s) nuo pirminio elektrono atsiradimo. Tas reiškinys – tai teigiamųjų jonų neutralizavimasis ant katodo. Kadangi teigiamųjų jonų judėjimo greitis yra tūkstančius kartų mažesnis už elektronų judėjimo greitį, tai per laiką, kurio metu elektronai pasiekia anodą, teigiamieji jonai beveik nepasislenka iš vietos. Todėl skaitiklio tūryje atsiranda teigiamas erdvinis krūvis. Teigiamas erdvinis krūvis dalinai ekranuoja katodą,

todėl elektrinio lauko stipris prie anodo susilpnėja ir tampa nepakankamas Geigerio išlydžiui atsirasti, t.y., skaitiklis tampa nejautrus jonizuojančiosioms dalelėms. Tolstant teigiamųjų jonų debesėliui nuo anodo ir vykstant jų neutralizacijai ant katodo, elektrinio lauko stipris prie anodo auga ir per  $10^{-4} \div 10^{-2}$  s vėl pasiekia vertę, kuri pakankama Geigerio išlydžiui atsirasti. Tuo momentu teigiamųjų jonų dalis jau neutralizavosi, tačiau skaitiklio tūryje dar yra teigiamųjų jonų. Tolimesnieji procesai priklauso nuo to, ar, neutralizuojantis paskutiniams teigiamiems jonams ant katodo, atsiranda laisvieji elektronai. Kai teigiamasis dujų jonas priima elektroną iš katodo, išsiskiria energija, kuri lygi dujų jonizacijos energijos ir elektrono išlaisvinimo darbo skirtumui (pvz., argono atveju išsiskiria energijos kiekis  $15.7 - 4 = 11.7$  eV). Ši energija dažnai išspinduliuojama fotono pavidalu. Šis fotonas gali jonizuoti dujų atomus arba išmušti elektronus iš katodo. Jeigu atsiranda bent vienas laisvasis elektronas, tuomet, jam pasiekus stipraus elektrinio lauko sritį, vėl įvyksta Geigerio išlydis (jį vadinsime antriniu Geigerio išlydžiu) ir visas procesas kartojasi iš naujo. Tokiu atveju skaitiklyje nuolat vyksta Geigerio išlydžiai ir skaitikliu tekanti srovė nusistovi.

Aišku, kad toks skaitiklis, į kurį patekusi dalelė sukelia nuolatinę srovę, netinka atskirų dalelių registravimui. Kiekviena dalelė turi sukelti vieną trumpą srovės impulsą, t.y., vieną Geigerio išlydį. Todėl antriniai Geigerio išlydžiai yra slopinami. Norint išvengti antrinių Geigerio išlydžių, reikia pasiekti, kad, pradėdant nuo to momento, kai elektrinio lauko stipris prie anodo vėl tampa pakankamas Geigerio išlydžio atsiradimui, dėl teigiamųjų jonų neutralizacijos negalėtų atsirasti laisvieji elektronai. T.y., arba tuo laiko momentu skaitiklio tūryje jau neturi būti teigiamųjų jonų, arba tie jonai neutralizuodamiesi neturi emituoti fotonų. Priklausomai nuo antrinių Geigerio išlydžių slopinimo būdo, Geigerio ir Miulerio skaitikliai skirstomi į nesavislopius ir savislopius.

**Nesavislopiuose skaitikliuose** elektrinio lauko atsistatymas po Geigerio išlydžio sulėtinamas tiek, kad, jam atsistačius, skaitiklio tūryje jau nebūtų teigiamųjų jonų. Tuo tikslu naudojama didelė apkrovos varža  $R_1$  (žr. 8.1 pav.):  $R_1 = 10^8 \div 10^9 \Omega$ . Didinant varžą  $R_1$ , didėja laiko konstanta  $R_1 C_1$ , kuri nusako talpos  $C_1$  įsikrovimo per varžą  $R_1$  trukmę. Nesavislopiuose skaitikliuose ši laiko konstanta yra didesnė už laiką, per kurį visi teigiamieji jonai pasiekia katodą. Todėl, kai elektrinio lauko stipris atsistato, skaitiklio tūryje jau nėra teigiamųjų jonų ir Geigerio išlydis negali atsinaujinti. Nesavislopio skaitiklio srovės impulso trukmę nusako laiko konstanta  $R_1 C_1$ . Šiuo metu nesavislopiu skaitikliu beveik nenaudojami dėl jų mažo greitaeigiškumo.

**Savislopiuose skaitikliuose** dujų sudėtis pakeičiama taip, kad, neutralizuojantis daugumai teigiamųjų jonų, fotonai neatsirastų. Tuo tikslu skaitiklis papildomas nedideliu kiekiu kitų dujų, kurios tenkina šias sąlygas:



- 1) papildomųjų dujų molekulių jonizacijos energija turi būti mažesnė už pagrindinių dujų jonizacijos energiją;
- 2) neutralizuojantis papildomųjų dujų teigiamiesiems jonams ant katodo, neturi atsirasti fotonai;
- 3) papildomųjų dujų molekulės turi sugerti ultravioletinę spinduliuotę žymiai intensyviau, negu pagrindinių dujų molekulės; be to, ši sugertis turi vykti be fotojonizacijos.

Pirmoji savybė reiškia, kad, suartėjus pagrindinių dujų teigiamajam jonui ir papildomųjų dujų neutraliai molekulei, energiškaudingas yra elektrono perėjimas iš papildomųjų jonų molekulės į pagrindinių dujų joną (energijos perteklius sužadina papildomųjų dujų molekulės virpesius ir sukimaši). Taigi, susidaro papildomųjų dujų teigiamas jonas ir neutrali pagrindinių dujų molekulė. Todėl ant katodo neutralizuojasi ne pagrindinių dujų teigiamieji jonai, o papildomųjų dujų teigiamieji jonai.

Antroji savybė pasireiškia tuo, kad energija, kuri išsiskiria papildomųjų dujų teigiamos jono neutralizavimosi metu, išeikvojama molekulės disociacijai, o ne išspinduliuojama fotono pavidalu.

Trečioji savybė pasireiškia tuo, kad papildomųjų dujų molekulės sugeria daugumą fotonų, kurie atsiranda dėl teigiamųjų jonų ir elektronų rekombinacijos arba dėl dujų molekulių sužadinimo, ir šios sugerties metu neatsiranda fotoelektronai, kurie galėtų sukelti antrinį Geigerio išlydį.

Šios savybės būdingos kai kurioms daugiaatomėms dujoms, pvz., spirito, etileno garams ir halogenams ( $\text{Cl}_2$ ,  $\text{Br}_2$ ,  $\text{J}_2$ ). Šių dujų molekulių jonizacijos energijos yra mažesnės už inertinių dujų jonizacijos energiją (pvz., spirito jonizacijos energija yra 11.7 eV, o argono – 15.7 eV). Organinės molekulės (pvz., spirito molekulės) po disociacijos neatsistato, todėl organinių Geigerio ir Miulerio skaitiklių veikimo trukmė yra ribota (maždaug  $10^9$  užregistruotų dalelių). Šio trūkumo neturi halogeniniai skaitikliai: halogenų molekulės po disociacijos atsistato.

Savislopio skaitiklio srovės impulso trukmė apytiksliai lygi laikui, per kurį teigiamieji jonai pasiekia katodą.

### 8.7. Dujinio detektoriaus signalo didumo prieklausa nuo įtampos

Dujinio detektoriaus signalo didumą nusako katode surinktų jonų skaičius arba įtampos impulso amplitudė. Šio signalo prieklausa nuo įtampos tarp anodo ir katodo pavaizduota 8.5 pav. Laikoma, kad pirminė jonizacija (pradinis jonų porų skaičius, kurį sukūrė į skaitiklį patekusi dalelė) yra pastovi. Esant mažoms įtampoms, signalas yra proporcingas pirminei jonizacijai. T.y., 8.5 pav. viršutinė kreivė atitinka didesnę pirminę jonizaciją. Pvz., viršutinė kreivė galėtų atitikti  $\alpha$  dalelės sukeltą impulsą, o apatinė – impulsą, kurį sukelia  $\beta$  dalelė ( $\alpha$  dalelė jonizuoja žymiai daugiau atomų, negu  $\beta$  dalelė).

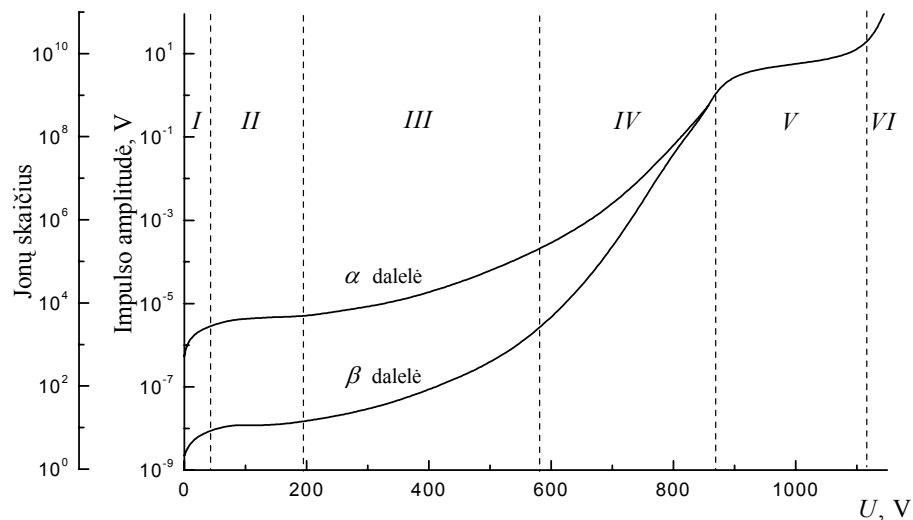
Esant ypač mažoms įtampoms, vyksta du konkuruojantys procesai – elektronų ir teigiamųjų jonų dreifas elektriniame lauke ir jų rekombinacija (susijungimas). Didėjant įtampai, rekombinacijos tikimybė mažėja, todėl vis didesnė elektronų ir teigiamųjų jonų dalis pasiekia elektrodus. Atitinkamai, impulso amplitudė auga (žr. 8.5 pav.). Tai yra pirmasis įtampų intervalas.

Kai įtampa viršija tam tikrą vertę, rekombinacija nevyksta, t.y., visi jonizacijos metu atsiradę elektronai ir teigiamieji jonai pasiekia skaitiklio elektrodus. Atitinkamai, impulso amplitudė išsotina. Tai yra antrasis įtampų intervalas (*soties sritis*). Šioje srityje veikia jonizacijos kameros. Soties srityje dujinio stiprinimo koeficientas lygus vienetui (žr. 8.3 poskyrį), t.y., detektoriaus elektrodoose surinktas krūvis lygus pirminių jonų krūviui.

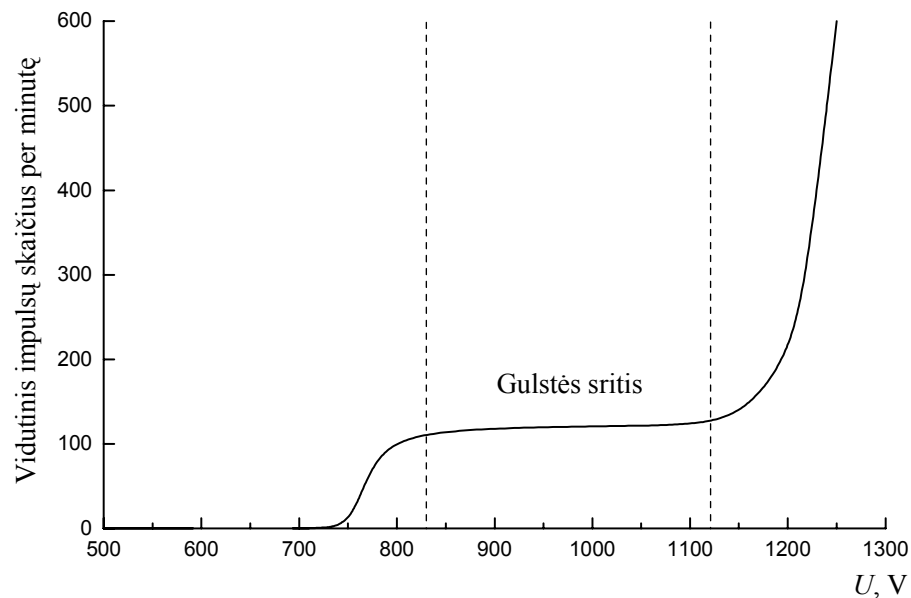
Dar labiau padidėjus įtampai, kiekvienas pirminis elektronas sukuria elektrinę griūtį (žr. 8.3 poskyrį), t.y., dujinio stiprinimo koeficientas viršija vienetą. Kadangi, didėjant įtampai, dujinio stiprinimo koeficientas auga, tai impulso amplitudė taip pat didėja. Tačiau, kaip ir soties srityje, dujinio stiprinimo koeficientas nepriklauso nuo pradinio jonų porų (pirminių elektronų) skaičiaus. Todėl impulso amplitudė lieka proporcinga pradiniam jonų porų skaičiui. Tai yra trečioji sritis (*proporcingumo sritis*). Šioje srityje veikia proporcingieji skaitikliai (žr. 8.4 poskyrį).

Toliau didėjant įtampai, dėl dujų molekulių fotojonizacijos ir dėl fotoefekto pradeda atsirasti antrinės elektroninės griūtys (žr. 8.5 poskyrį). Šiame įtampų intervale impulso amplitudė jau nėra proporcinga jonų porų skaičiui: dujinio stiprinimo koeficientas mažėja, didėjant pirminei jonizacijai, ir šis sumažėjimas yra tuo ryškesnis, kuo aukštesnė įtampa. Todėl, kylant įtampai, abi 8.5 pav. kreivės artėja viena prie kitos. Tai yra ketvirtasis įtampų intervalas (*riboto proporcingumo sritis*).

Esant dar aukštesnei įtampai, skaitiklio elektrodus pasiekiančių jonų ir elektronų krūvis pradeda nepriklausyti nuo pradinio jonų porų skaičiaus: net ir viena jonų pora sukelia Geigerio išlydį, kuris išplinta po visą skaitiklį (žr. 8.5 poskyrį). Tai yra penktasis įtampų intervalas (*Geigerio ir Miulerio sritis*). Šioje srityje veikia Geigerio ir Miulerio skaitikliai. Augant įtampai, Geigerio ir Miulerio sritis pereina į nuolatinio išlydžio sritį (šeštasis įtampų intervalas). Šioje srityje Geigerio išlydžio slopinimo mechanizmai (žr. 8.6 poskyrį) jau neveikia, todėl ši įtampų sritis nėra tinkama dalelių registravimui.



8.5 pav. Tipiško jonizacinio skaitiklio signalo didumo prieklausa nuo įtamos.



8.6 pav. Tipiško Geigerio ir Miulero skaitiklio charakteristika. Gulstės posvyris – 0.02 %/V.

### 8.8. Geigerio ir Miulero skaitiklio charakteristika

Geigerio ir Miulero skaitikliai yra labai jautrūs jonizuojančiajai spinduliutei. Tačiau jie negali atskirti skirtingas spinduliuotės rūšis arba skirtingų energijų daleles. Todėl Geigerio ir Miulero skaitikliai naudojami tik kaip spinduliuotės intensyvumo detektoriai (spinduliuotės intensyvumą nusako dalelių skaičius, kuris per laiko vienetą kerta statmeną spinduliuotės kryptį vienetinio ploto paviršių).

Užregistruotų dalelių skaičiaus prieklausa nuo maitinimo įtamos vadinama **skaitiklio charakteristika** (žr. 8.6 pav.). Kaip matome 8.6 pav., soties ir proporcingumo srityse (8.6 pav. atveju – kai  $U < 700$  V) skaitiklio impulsų amplitudė yra per maža, kad tuos impulsus galėtų užregistruoti aparata, kuri pritaikyta darbui Geigerio ir Miulero srityje (soties srityje skaitiklio impulsų amplitudė yra mikrovoltų eilės, o Geigerio ir Miulero srityje – voltų eilės). Geigerio ir Miulero srityje (8.6 pav. atveju – kai  $830 \text{ V} < U < 1120 \text{ V}$ ) skaitiklio impulsų vidutinio skaičiaus priklausomybė nuo įtamos yra silpna, nes kiekviena dalelė sukuria impulsą, kurio amplitudė yra pakankama registravimui. Ši skaitiklio charakteristikos dalis vadinama **gulste** arba **plato**. Pasirinkus skaitiklio darbo įtampą arti gulstės vidurio, maitinimo įtamos svyravimai beveik neturi įtakos vidutiniam užregistruotų dalelių skaičiui. Todėl gulstės ilgis ir polinkis yra skaitiklio kokybės rodikliai: kuo didesnis gulstės ilgis ir mažesnis jos polinkis, tuo aukštesnė skaitiklio kokybė. Daugumos Geigerio ir Miulero skaitiklių charakteristikų gulstės ilgis yra keli šimtai voltų, gulstės polinkis yra  $\sim(0.01 \div 0.1)\% / \text{V}$ , o darbo įtampa kinta nuo  $300 \div 500$  V (halogeniniams skaitikliams) iki 1 kV ir aukštesnių įtampų (kitų rūšių Geigerio ir Miulero skaitikliams).

### 8.9. Skaitiklio neveikos trukmė

Skaitiklio sugebėjimas atskirti skirtingas daleles laike (greitaeigiškumas) apibūdinamas neveikos trukme. **Neveikos trukmė** – tai laiko tarpas po kiekvienos užregistruotos dalelės, kurio metu skaitiklis negali registruoti kitų dalelių, kurios patenka į jo tūrį. Didžiausias dalelių skaičius, kurį skaitiklis gali užregistruoti per laiko vienetą, vadinamas skaitiklio **skiriamąja geba**. Skiriamoji geba  $N_s$  yra atvirkštinis dydis neveikos trukmei  $\tau$ :

$$N_s = \frac{1}{\tau}. \quad (8.9.1)$$

Dėl Geigerio išlydžio atsiradę elektronai patenka į anodą greičiau negu per  $10^{-7}$  s. Teigiamieji jonai, kurių judrumas žymiai mažesnis už elektronų judrumą, per tą laiką praktiškai nepasislenka iš savo pradinių padėčių. Todėl, pasibaigus Geigerio išlydžiui Geigerio ir Miulero skaitiklyje, aplink anodą lieka teigiamųjų jonų debesėlis. Kadangi šių jonų krūvis dalinai ekranuoja katodą, lauko stipris prie anodo yra sumažėjęs (žr. 8.7a pav.). Lauko stipris skaitiklyje sumažėja dar ir dėl to, kad sumažėja anodo potencialas dėl

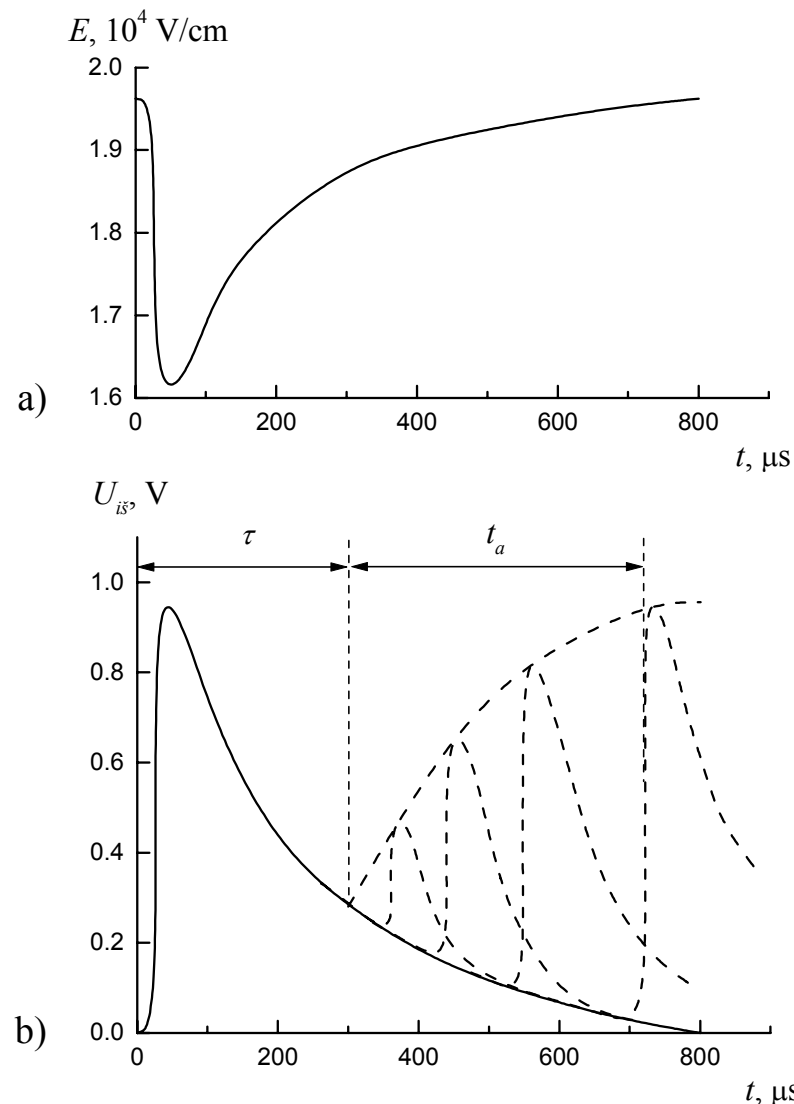
įtampos kritimo apkrovos varžoje  $R_1$  (žr. 8.1 pav. ir (8.2.1) formulę). Šis įtampos kritimas atsiranda dėl elektros srovės, kurią išorinėje grandinėje sukelia teigiamųjų jonų judėjimas ir jų neutralizacija ant katodo. Tolstant teigiamiesiems jonams nuo anodo ir jiems neutralizuojantis ant katodo (ir mažėjant įtampos kritimui varžoje  $R_1$ ), elektrinio lauko stipris prie anodo auga, artėdamas prie savo pusiausvrosios (didžiausios) vertės (žr. 8.7a pav). Tačiau pradinėje šio augimo stadijoje lauko stipris dar yra nepakankamas, kad skaitiklyje galėtų atsirasti Geigerio išlydis, todėl tuo laikotarpiu skaitiklis negali registruoti dalelių. Laikas, per kurį lauko stipris prie anodo išauga iki vertės, kuri yra pakankama Geigerio išlydžio atsiradimui, nusako Geigerio ir Miulero skaitiklio neveikos trukmę  $\tau$  (žr. 8.7b pav.). Praėjus laikui  $\tau$  nuo Geigerio išlydžio pradžios, skaitiklis jau gali registruoti daleles, tačiau lauko stipris prie anodo dar yra mažesnis už savo didžiausią vertę, todėl elektroninių griūčių metu susidaro mažiau antrinių elektronų (t.y., dujinio stiprinimo koeficientas yra sumažėjęs). Dėl šios priežasties, patekus į skaitiklį dalelei, skaitiklio apkrovoje  $R_1$  prateka mažesnė srovė ir įtampos impulso amplitudė yra mažesnė (žr. 8.7b pav., punktyrinės kreivės). Laikas, per kurį impulso amplitudė pilnai atsistato, vadinamas *atsistatymo trukme*  $t_a$  (žr. 8.7b pav.).

Veiksniai, kurie lemia Geigerio ir Miulero skaitiklio neveikos trukmę  $\tau$ , yra skirtingi savislopiams ir nesavislopiams skaitikliams (žr. 8.6 poskyrį). Savislopio skaitiklio neveikos trukmę lemia laikas, per kurį teigiamieji jonai pasiekia katodą ir neutralizuojasi ant jo. Šį laiką žymėsime  $t_j$ . Nesavislopio skaitiklio neveikos trukmę lemia talpos  $C_1$  įsikrovimo per varžą  $R_1$  trukmė  $R_1 C_1$  (žr. 8.1 pav.). Ši trukmė visuomet didesnė už  $t_j$  (priešingu atveju išlydis nebūtų slopinamas). Todėl nesavislopių skaitiklių neveikos trukmė ( $10^{-3} \div 10^{-2}$  s) yra didesnė už savislopių ( $10^{-4} \div 10^{-3}$  s).

Taigi, norint sumažinti Geigerio ir Miulero skaitiklio neveikos trukmę, reikia mažinti laiką, per kurį teigiamieji jonai pasiekia katodą. Šis laikas priklauso nuo skaitiklio skersmens, dujų slėgio, teigiamųjų jonų masės ir juos veikiančio elektrinio lauko stiprio.

Net ir tuo atveju, kai kiekvieną dalelę, kuri patenka į skaitiklį, atitinka atskiras įtampos impulsas skaitiklio apkrovos varžoje, gali atsirasti, kad registravimo įrenginys užregistruos ne visus šiuos impulsus. Taip yra dėl to, kad registravimo įrenginio neveikos trukmė taip pat nelygi nuliui.

Kadangi visų skaitiklių greitaeigiškumas yra ribotas, dalelių registravimo vidutinė sparta visuomet yra mažesnė už tą, kuri atitiktų nulinę neveikos trukmę. Taigi, dėl neveikos trukmės atsiranda neigiama sisteminė matavimų paklaida. Šią paklaidą galima apskaičiuoti tokiu būdu. Jeigu sistemos (skaitiklio) neveikos trukmė yra  $\tau$ , o sistema užregistravo  $n$  dalelių, tai matavimų metu sistema buvo nejautri  $n \cdot \tau$  laiką. Per tą laiką praleistų dalelių skaičius lygus  $\dot{n}_0 n \cdot \tau$ , kur  $\dot{n}_0$  yra skaičiavimo sparta (užregistruotų dalelių skaičius per 1 s), kai neveikos trukmė lygi nuliui. T.y.,



8.7 pav. a) Elektrinio lauko stiprio prie anodo laikinė priklausomybė po Geigerio išlydžio tipiška Geigerio ir Miulero skaitiklyje.

b) Tipiško Geigerio ir Miulero skaitiklio neveikos trukmė  $\tau$  ir atsistatymo trukmė  $t_a$ .  $U_{is}$  – įtampos kritimas skaitiklio apkrovos varžoje. Ištinė linija – įtampos impulsas, kai skaitiklis užregistruoja dalelę. Punktyrinės linijos – impulsai, kurie registruojami atsistatymo metu, ir jų gaubtinė.

$$n_0 - n = \dot{n}_0 n \tau ; \quad (8.9.2)$$

čia  $n_0$  yra dalelių skaičius, kuris būtų užregistruotas per visą matavimų laiką, jeigu neveiktų trukmė būtų lygi nuliui. Pasinaudoję sąryšiu  $\dot{n}_0 = n_0/t$ , randame

$$n_0 = \frac{n}{1 - \frac{n}{t} \tau} = \frac{n}{1 - \dot{n} \tau} ; \quad (8.9.3)$$

čia  $\dot{n} = n/t$  yra stebimoji skaičiavimo sparta. Matavimų tikslas – rasti  $n_0$ . Jeigu sistemos neveiktų trukmė  $\tau$  yra žinoma, tuomet matavimų rezultatus reikia pataisyti pagal (8.9.3) formulę. Aišku, kad ši pataisa reikalinga tik tuomet, kai sandauga  $\dot{n} \tau$  yra pakankamai didelė (praktiškai – kai  $\dot{n} \tau > 0.01$ ).

### 8.10. Skaitiklio efektyvumas

**Skaitiklio efektyvumas**  $\varepsilon$  – tai skaitiklio užregistruotų dalelių skaičiaus  $n$  ir pilnutinio pataikusių į skaitiklį dalelių skaičiaus  $N$  santykis:

$$\varepsilon = \frac{n}{N} . \quad (8.10.1)$$

Geigerio ir Miulerio skaitiklio efektyvumas yra mažesnis už 100%, nes dalelė, praeidama pro skaitiklį, gali nejonizuoti nė vieno atomo. Tačiau  $\alpha$  ir  $\beta$  dalelių atveju tokio įvykio tikimybė yra maža, todėl skaitiklio efektyvumas, registruojant  $\alpha$  ir  $\beta$  daleles, gali siekti 99.9%.  $\gamma$  kvanto sąveikos su medžiaga tikimybė žymiai mažesnė, negu  $\alpha$  arba  $\beta$  dalelės, todėl Geigerio ir Miulerio skaitiklių efektyvumas, registruojant  $\gamma$  spinduliuotę, yra tik 2 – 4 %.

Geigerio ir Miulerio skaitiklio efektyvumas auga, mažėjant  $\gamma$  kvanto energijai. Taip yra todėl, kad, mažėjant  $\gamma$  kvanto energijai, auga jo sąveikos su medžiagos atomu tikimybė, tenkanti nueito kelio vienetui. Jeigu duotasis radioaktyvusis šaltinis spinduliuoja kelių energijų  $\gamma$  kvantus, tuomet pilnutinis per duotąjį laiko tarpą skaitiklio užregistruotų  $\gamma$  kvantų skaičius  $n$  yra lygus

$$n = \varepsilon_1 N_1 + \varepsilon_2 N_2 + \varepsilon_3 N_3 + \dots ; \quad (8.10.2)$$

čia  $\varepsilon_i$  ( $i = 1, 2, 3, \dots$ ) yra skaitiklio efektyvumas, registruojant  $i$ -tosios energijos  $\gamma$  kvantus, o  $N_i$  ( $i = 1, 2, 3, \dots$ ) yra į skaitiklį pataikusių  $i$ -tosios energijos  $\gamma$  kvantų skaičius.

### 8.11. Skaitiklio neveikos trukmės matavimas dviejų šaltinių metodu

Eksperimentiškai skaitiklio neveikos trukmę galima išmatuoti dviejų šaltinių metodu. Taikant šį metodą, išmatuojamos keturios skaičiavimo spartos: 1) skaičiavimo sparta  $\dot{n}_f$ , kai detektorius veikia tik aplinkos natūralioji spinduliuotė (fonas), 2) skaičiavimo sparta  $\dot{n}_{1f}$ , kai detektorius registruoja tik pirmojo šaltinio spinduliuotę ir foną, 3) skaičiavimo sparta  $\dot{n}_{2f}$ , kai detektorius registruoja tik antrojo šaltinio spinduliuotę ir foną, 4) skaičiavimo

sparta  $\dot{n}_{12f}$ , kai detektorius vienu metu registruoja abiejų šaltinių ir fono spinduliuotę.

2) ir 3) matavimų metu kiekvieno šaltinio padėtis atžvilgiu detektoriaus turi būti tiksliai tokia pati, kaip ir 4) matavimo metu. Tai pasiekama, sukeitus 3) ir 4) matavimų tvarką: atlikus 2) matavimą, šalia pirmojo šaltinio pastatomas antrasis šaltinis, išmatuojama pilnutinė skaičiavimo sparta  $\dot{n}_{12f}$ , o po to pirmasis šaltinis pašalinamas ir išmatuojama  $\dot{n}_{2f}$ .

Išreikšime neveikos trukmę  $\tau$  dydžiais  $\dot{n}_1$ ,  $\dot{n}_2$ ,  $\dot{n}_{12}$  ir  $\dot{n}_f$ . Pagal (8.9.3) formulę

$$\dot{n}_{0f} = \frac{\dot{n}_f}{1 - \dot{n}_f \tau}, \quad \dot{n}_{01f} = \frac{\dot{n}_{1f}}{1 - \dot{n}_{1f} \tau}, \quad \dot{n}_{02f} = \frac{\dot{n}_{2f}}{1 - \dot{n}_{2f} \tau}, \quad \dot{n}_{012f} = \frac{\dot{n}_{12f}}{1 - \dot{n}_{12f} \tau}; \quad (8.11.1)$$

čia  $\dot{n}_{0f}$ ,  $\dot{n}_{01f}$ ,  $\dot{n}_{02f}$  ir  $\dot{n}_{012f}$  yra atitinkamos skaičiavimo spartos, kai  $\tau = 0$ . Laikant, kad  $\dot{n}_f \tau \ll 1$ ,  $\dot{n}_{1f} \tau \ll 1$ ,  $\dot{n}_{2f} \tau \ll 1$  ir  $\dot{n}_{12f} \tau \ll 1$  ir naudojantis apytiksle tapatybe  $\frac{1}{1-x} \approx 1+x$  (ji galioja, kai  $x \ll 1$ ), vietoj (8.11.1) galima užrašyti

$$\begin{aligned} \dot{n}_{0f} &\approx \dot{n}_f(1 + \dot{n}_f \tau), \quad \dot{n}_{01f} \approx \dot{n}_{1f}(1 + \dot{n}_{1f} \tau), \\ \dot{n}_{02f} &\approx \dot{n}_{2f}(1 + \dot{n}_{2f} \tau), \quad \dot{n}_{012f} \approx \dot{n}_{12f}(1 + \dot{n}_{12f} \tau). \end{aligned} \quad (8.11.2)$$

Antra vertus, galioja akivaizdžios lygybės

$$\dot{n}_{01f} = \dot{n}_{01} + \dot{n}_{0f}, \quad (8.11.3a)$$

$$\dot{n}_{02f} = \dot{n}_{02} + \dot{n}_{0f}, \quad (8.11.3b)$$

$$\dot{n}_{012f} = \dot{n}_{01} + \dot{n}_{02} + \dot{n}_{0f}; \quad (8.11.3c)$$

čia  $\dot{n}_{01}$  ir  $\dot{n}_{02}$  yra skaičiavimo spartos, kai detektorius veikia tik pirmojo arba tik antrojo šaltinio spinduliuotė, esant nulinei neveikos trukmei. Išreikšus  $\dot{n}_{01}$  ir  $\dot{n}_{02}$  iš (8.11.3a) ir (8.11.3b), lygybę (8.11.3c) galima užrašyti šitaip:

$$\dot{n}_{012f} = \dot{n}_{01f} + \dot{n}_{02f} - \dot{n}_{0f}. \quad (8.11.3d)$$

Išrašę  $\dot{n}_{0f}$ ,  $\dot{n}_{01f}$ ,  $\dot{n}_{02f}$  ir  $\dot{n}_{012f}$  išraiškas (8.11.2) į (8.11.3d), gauname lygtį  $\tau$  atžvilgiu:  $\dot{n}_{1f}(1 + \dot{n}_{1f} \tau) + \dot{n}_{2f}(1 + \dot{n}_{2f} \tau) - \dot{n}_f(1 + \dot{n}_f \tau) \approx \dot{n}_{12f}(1 + \dot{n}_{12f} \tau)$ . Šios lygties sprendinys yra

$$\tau = \frac{\dot{n}_{1f} + \dot{n}_{2f} - \dot{n}_f - \dot{n}_{12f}}{\dot{n}_{12f}^2 - \dot{n}_{1f}^2 - \dot{n}_{2f}^2 + \dot{n}_f^2}. \quad (8.11.4)$$

Praktikoje skaičiavimo spartos  $\dot{n}_f$ ,  $\dot{n}_{1f}$ ,  $\dot{n}_{2f}$  ir  $\dot{n}_{12f}$  randamos pagal formules  $\dot{n}_f = n_f / t$ ,  $\dot{n}_{1f} = n_{1f} / t$ ,  $\dot{n}_{2f} = n_{2f} / t$  ir  $\dot{n}_{12f} = n_{12f} / t$ ; čia  $n_f$ ,  $n_{1f}$ ,  $n_{2f}$  ir  $n_{12f}$  yra atitinkami vidutiniai užregistruotų dalelių skaičiai per laiko tarpą  $t$ . Taigi, neveikos trukmės išraišką (8.11.4) galima užrašyti šitaip:

$$\tau = \frac{n_{1f} + n_{2f} - n_f - n_{12f}}{n_{12f}^2 - n_{1f}^2 - n_{2f}^2 + n_f^2} \cdot t. \quad (8.11.5)$$

Kiekvienas iš vidurkių  $n_f$ ,  $n_{1f}$ ,  $n_{2f}$  ir  $n_{12f}$ , kurie įeina į neveikos trukmės išraišką (8.11.5), yra išmatuotas su tam tikra paklaida. Taip yra dėl to, kad per duotąjį laiko tarpą užregistruotų dalelių skaičius yra atsitiktinis dydis. Šio atsitiktinio dydžio statistinės savybės nusako Puasono skirstinys (žr. 4.2 ir 4.3 poskyrius). Tai reiškia, kad vidurkių  $n_f$ ,  $n_{1f}$ ,  $n_{2f}$  ir  $n_{12f}$  atsitiktinės matavimo paklaidos lygios atitinkamai

$$\Delta n_f = \sqrt{\frac{n_f}{k_f}}, \Delta n_{1f} = \sqrt{\frac{n_{1f}}{k_{1f}}}, \Delta n_{2f} = \sqrt{\frac{n_{2f}}{k_{2f}}} \text{ ir } \Delta n_{12f} = \sqrt{\frac{n_{12f}}{k_{12f}}}; \quad (8.11.6)$$

čia  $k_f$ ,  $k_{1f}$ ,  $k_{2f}$  ir  $k_{12f}$  yra atitinkamai dydžių  $n_f$ ,  $n_{1f}$ ,  $n_{2f}$  ir  $n_{12f}$  matavimų skaičiai (laikoma, kad visi matavimai yra vienodos trukmės  $t$ ). Dydžiai (8.11.6) – tai standartiniai nuokrypiai (standartinio nuokrypio sąvoka apibrėžta 4.2 poskyryje).

Kadangi  $n_f$ ,  $n_{1f}$ ,  $n_{2f}$  ir  $n_{12f}$  yra įvertinti apytiksliai, tai ir neveikos trukmės įvertinimas pagal (8.11.5) formulę yra apytikslis. Šio įvertinimo atsitiktinę paklaidą  $\Delta\tau$  galima apskaičiuoti pagal bendrąją atsitiktinių dydžių funkcijos standartinio nuokrypio skaičiavimo formulę:

$$\Delta\tau(n_f, n_{1f}, n_{2f}, n_{12f}) = \sqrt{\left(\frac{\partial\tau}{\partial n_f} \Delta n_f\right)^2 + \left(\frac{\partial\tau}{\partial n_{1f}} \Delta n_{1f}\right)^2 + \left(\frac{\partial\tau}{\partial n_{2f}} \Delta n_{2f}\right)^2 + \left(\frac{\partial\tau}{\partial n_{12f}} \Delta n_{12f}\right)^2}$$

Praktikoje paklaidos  $\Delta n_f$ ,  $\Delta n_{1f}$ ,  $\Delta n_{2f}$  ir  $\Delta n_{12f}$  bei (8.11.5) trupmenos skaitiklis ( $n_{1f} + n_{2f} - n_f - n_{12f}$ ) ir fonas  $n_f$  dažniausiai būna žymiai mažesni už  $n_{1f}$  ir  $n_{2f}$ , todėl minėtosios paklaidos turi žymiai didesnę įtaką trupmenos (8.11.5) skaitikliui, negu vardikliui, kuris apytiksliai lygus  $2(n_{1f} - n_f)(n_{2f} - n_f)$ . Todėl, skaičiuojant dalines išvestines, galima laikyti, kad trupmenos (8.11.5) vardiklis yra konstanta. Atitinkama neveikos trukmės įvertimo paklaidos formulė yra

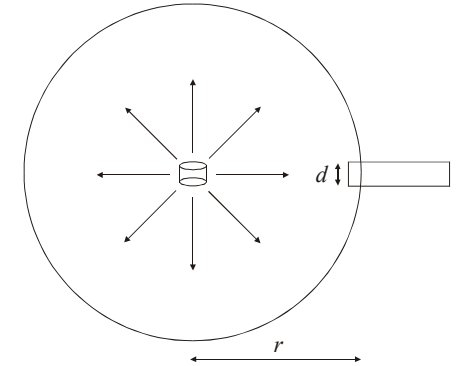
$$\Delta\tau = \frac{\sqrt{(\Delta n_{1f})^2 + (\Delta n_{2f})^2 + (\Delta n_f)^2 + (\Delta n_{12f})^2}}{n_{12f}^2 - n_{1f}^2 - n_{2f}^2 + n_f^2} \cdot t. \quad (8.11.7)$$

Pagal tikimybių teoriją, tikroji  $\tau$  vertė priklauso pasikliautinajam intervalui  $[\tau - \Delta\tau, \tau + \Delta\tau]$  su 68% tikimybe (žr. 4.5 poskyrį). Tačiau gali atsitikti, kad paklaida  $\Delta\tau$  yra didesnė už neveikos trukmės  $\tau$  įvertį. Kadangi tikroji  $\tau$  vertė

negali būti neigiama, tai tokiu atveju galima spręsti tik apie neveikos trukmės viršutinę ribą  $\tau + \Delta\tau$ .

## 8.12. Skaitiklio efektyvumo matavimas

Norint išmatuoti skaitiklio efektyvumą (8.10.1), reikia turėti žinomo aktyvumo radioaktyvųjų šaltinį. Tačiau į skaitiklį pataikančių dalelių skaičius  $N$  priklauso ne vien nuo radioaktyviojo šaltinio aktyvumo, bet ir nuo skaitiklio didumo bei nuo atstumo tarp skaitiklio ir šaltinio. Tai akivaizdu 8.8 pav., kuris iliustruoja skaitiklio efektyvumo matavimą, kai skaitiklio konstrukcija yra tokia, kaip 8.4b pav. Kaip matyti 8.8 pav., tik maža dalis šaltinio išspinduliuotų dalelių pataiko į skaitiklio langelį, kurio skersmuo lygus  $d$ . Ši dalis lygi skaitiklio langelio ploto ir sferos, kurios centre yra šaltinis ir kuri liečia detektorį, paviršiaus ploto santykiui:



8.8 pav. Atstumai, kuriuos reikia žinoti, matuojant skaitiklio efektyvumą.

$$\frac{\frac{1}{4}\pi d^2}{4\pi r^2} = \frac{d^2}{16r^2};$$

čia  $r$  yra sferos spindulys. Vadinasi, jeigu šaltinis visom kryptim išspinduliuoja  $I$  dalelių per 1 s, tai į skaitiklį per  $t$  sekundžių pataikančių dalelių vidutinis skaičius yra lygus

$$N = \frac{d^2}{16r^2} I t. \quad (8.12.1)$$

## 8.13. Darbo užduotys

1. Išmatuoti Geigerio ir Miulerio skaitiklio charakteristiką.
2. Įvertinti skaitiklio charakteristikos gultės srities ilgį ir posvyrį.
3. Dviejų šaltinių metodu išmatuoti skaitiklio neveikos trukmę.
4. Naudojant žinomo aktyvumo radioaktyvųjų šaltinį, išmatuoti skaitiklio efektyvumą.

### 8.14. Matavimų tvarka

1. Įjungiami Geigerio ir Miulerio skaitiklio įtampos šaltinis ir registravimo įrenginys. Skaitiklio įtampa sumažinama iki mažiausios vertės.
2.  $^{137}\text{Cs}$   $\gamma$  šaltinis padedamas arti Geigerio ir Miulerio skaitiklio. Skaitiklio įtampa didinama, kol skaitiklis pradeda skaičiuoti (ši įtampa turėtų būti maždaug 360 V). Pradedant nuo šios įtampos, įtampa didinama maždaug iki 600 V kas 10 – 20 V; esant kiekvienai įtampai, atliekamas vienas 1 min trukmės matavimas. Esant žemoms įtampoms (iki 400 V), geriau naudoti 10 V arba mažesnius intervalus tarp įtampos verčių, nes šioje srityje skaičiavimo sparta stipriai priklauso nuo įtampos. Esant aukštesnėms įtampoms, galima naudoti 20 V intervalus. Matavimų duomenys fiksuojami lentelės pavidalu: pirmajame stulpelyje užrašoma įtampa, o antrajame – užregistruotas  $\gamma$  kvantų skaičius.
3. Nustatoma  $(500 \pm 10)$  V įtampa. Visų pirma išmatuojamas aplinkos fonas. Tuo tikslu radioaktyviuosius šaltinius reikia padėti kuo toliau nuo skaitiklio (bent 2 metrų atstumu), kad jie neturėtų įtakos fono matavimo rezultatams. Atliekami 10 fono matavimų, kurių kiekvieno trukmė 1 min. Po to arti skaitiklio padedamas pirmasis  $^{137}\text{Cs}$  šaltinis ir vėl atliekami 10 matavimų po 1 min. Nejudinant pirmojo šaltinio, arti skaitiklio padedamas antrasis  $^{137}\text{Cs}$  šaltinis ir atliekami 10 matavimų po 1. Nejudinant antrojo šaltinio, pirmasis šaltinis pašalinamas (t.y., padedamas toliau negu 2 m atstumu nuo skaitiklio), ir atliekami 10 matavimų po 1 min.
4. Žinomo aktyvumo  $^{137}\text{Cs}$  šaltinis padedamas prieš skaitiklio langelį, maždaug 20 cm atstumu nuo skaitiklio. Atliekami 5 matavimai po 1 min.

### 8.15. Matavimo duomenų analizė

1. Skaitiklio charakteristika pavaizduojama grafiškai. Šioje charakteristikoje randama gultės sritis (pvz., žr. 8.6 pav.). Tiesinės aproksimacijos  $n = A + B \cdot U$  būdu (žr. priedo B poskyrius B.3 ir B.4) randami gultės posvyris  $B$  ir jo paklaida  $\Delta B$  (aproksimuojant, reikia naudoti tik tuos taškus, kurie priklauso gultės sričiai). Šiuo atveju  $B$  reiškia vidutinį per 1 min užregistruotų dalelių skaičiaus padidėjimą, kai skaitiklio įtampa padidėja 1 V. Gultės posvyris išreiškiamas tokiu pavidalu, kad jis nepriklausytų nuo skaitiklio ir radioaktyviojo šaltinio tarpusavio išsidėstymo bei šaltinio aktyvumo, o priklausytų tik nuo skaitiklio savybių. Tuo tikslu  $B$  padalinamas iš impulsų skaičiaus vidurkio gultės srityje. Gautasis dydis – tai per 1 min užregistruotų dalelių skaičiaus vidutinis santykinis padidėjimas, kai skaitiklio įtampa padidėja 1 V. Šis santykis išreiškiamas procentais į voltą (%/V).

2. Apskaičiuojami vidurkiai  $n_f$ ,  $n_{1f}$ ,  $n_{2f}$  ir  $n_{12f}$ , kurie įeina į neveikos trukmės skaičiavimo formulę (8.11.5). Apskaičiuojama neveikos trukmė. Pagal (8.11.6) formules apskaičiuojamos atsitiktinės paklaidos  $\Delta n_f$ ,  $\Delta n_{1f}$ ,  $\Delta n_{2f}$  ir  $\Delta n_{12f}$ . Pagal (8.11.7) formulę apskaičiuojama neveikos trukmės įvertinimo atsitiktinė paklaida.
3. Apskaičiuojamas vidurkis  $n$ , kuris įeina į efektyvumo skaičiavimo formulę (8.10.1). Pagal pagrindinį radioaktyviojo skilimo dėsnį (1.28.3) apskaičiuojamas  $^{137}\text{Cs}$  šaltinio aktyvumas ( $^{137}\text{Cs}$  pusėjimo trukmė lygi 30.04 m.). Šiems skaičiavimams reikia žinoti, kiek metų praėjo nuo radioaktyviojo šaltinio pagaminimo ir koks buvo jo pradinis aktyvumas. Be to, reikia žinoti, kokia dalis branduolių skyla, išspinduliuodami  $\gamma$  kvantą. Kadangi tik 94.6%  $^{137}\text{Cs}$  branduolių skyla, vykstant šuoliui į antrąjį sužadintąjį  $^{137}\text{Ba}$  lygmenį (žr. priedo A-1 pav.), o iš šių branduolių tik 90% išspinduliuoja  $\gamma$  kvantą (likusieji skyla vidinės konversijos būdu), tai per 1 s visom kryptim išspinduliuotų  $\gamma$  kvantų skaičius  $I$  lygus aktyvumui, padaugintam iš daugiklio  $0.946 \cdot 0.9 \approx 0.85$ . T.y., tik 85% visų  $^{137}\text{Cs}$  branduolių skyla, išspinduliuodami  $\gamma$  kvantą. Kadangi  $\beta$  dalelės sugeriamos radioaktyviojo šaltinio viduje, tai skaitiklis registruoja tik  $\gamma$  kvantus. Pagal (8.12.1) formulę apskaičiuojamas vidutinis skaičius  $\gamma$  kvantų, kurie per 1 min pataiko į skaitiklį. Pagal (8.10.1) formulę apskaičiuojamas skaitiklio efektyvumas.

### 8.16. Kontroliniai klausimai

1. Dujinių jonizuojančiosios spinduliuotės detektorių veikimo principai. Impulsinio dujinio detektoriaus jungimo schema.
2. Fizikiniai procesai, kurie vyksta jonizacijos kameroje, proporcinguosiuose skaitikliuose, Geigerio ir Miulerio skaitikliuose. Elektroninė griūtis ir Geigerio išlydis.
3. Jonizuojančiosios spinduliuotės dujinio detektoriaus signalo didumo prieklausa nuo įtampos.
4. Antrinių Geigerio išlydžių slopinimas. Savislopijai ir nesavislopijai Geigerio ir Miulerio skaitikliai.
5. Geigerio ir Miulerio skaitiklio charakteristika. Gultės sąvoka.
6. Skaitiklio neveikos trukmės sąvoka. Neveikos trukmės matavimas dviejų šaltinių metodu.
7. Skaitiklio efektyvumo sąvoka. Efektyvumo matavimas.

## 9. Darbas Nr. 9. Komptono efekto tyrimas

### 9.1. Įvadas

Praeinant  $\gamma$  spinduliuotei pro medžiagą, vyksta jos sugertis ir sklaida. Fotono ( $\gamma$  kvanto) **sugertis** – tai tokia fotono sąveika su medžiaga, kurios metu visa jo energija perduodama medžiagos atomams bei virsta antrinių dalelių – elektronų ir pozitronų – energija. Egzistuoja du  $\gamma$  spinduliuotės sugerties mechanizmai – fotoefektas ir elektrono-pozitrono porų kūrimas (žr. 7.3 ir 7.4 poskyrius). **Skaidos** metu fotonas perduoda medžiagos atomui arba laisvajam elektronui tik dalį savo energijos ir pakeičia judėjimo kryptį. Jeigu bandinys apšviečiamas lygiagrečiu spinduliuotės pluoštu, tuomet, matuojant praėjusio pro bandinį *tos pačios krypties* spinduliuotės intensyvumą, sklaida ir sugertis pasireiškia vienodai: dėl abiejų šių reiškinų *pradinės krypties* fotonų srautas sumažėja. Būtent tokiu būdu matuojamas spinduliuotės silpimo koeficientas  $\mu$ . **Silpimo koeficientas** yra atvirkštinis medžiagos storiui, kurį praėjusios spinduliuotės intensyvumas yra  $e = 2.7183$  kartų mažesnis už pradinį tos pačios krypties spinduliuotės intensyvumą (žr. (7.5.5)). Taigi, silpimo koeficientą lemia ir sugertis, ir sklaida. Todėl praktikoje sklaida dažnai nėra skiriama nuo sugerties, o silpimo koeficientas vadinamas **sugerties koeficientu**. Tačiau sklaida skiriasi nuo sugerties tuo, kad nekeičia *pilnutinio* fotonų srauto (visomis kryptimis). Sklaida tirama, matuojant spinduliuotės intensyvumą kryptimis, kurios skiriasi nuo pradinės spinduliuotės krypties.

Klasikinė elektrodinamika elektromagnetinių bangų sklaidą aiškina šitaip. Medžiagos elektronai, veikiami elektromagnetinės bangos elektrinio lauko, virpa dažniu, kuris lygus bangos dažniui. Su pagreičiu judantis krūvininkas (šiuo atveju – elektronas) spinduliuoja elektromagnetines bangas. Tuo atveju, kai krūvininko judėjimo pagreitis yra harmoninė laiko funkcija, krūvininkas spinduliuoja to paties dažnio antrines monochromatines bangas. Tai ir yra išsklaidytos bangos. Taigi, klasikinė elektrodinamika teigia, kad sklaidos metu spinduliuotės dažnis nepakinta. Elektromagnetinės spinduliuotės sklaida, kurios metu nepakinta jos dažnis, vadinama **koherentine sklaida**. Be to, jeigu elektromagnetines bangas sklaido laisvieji elektronai, tuomet koherentinė sklaida vadinama **Tomsono sklaida**, o jeigu jas sklaido atomų elektronai, tuomet koherentinė sklaida vadinama **Reilėjaus sklaida**.

Kvantinės mechanikos požiūriu, sklaidos įvykis – tai dviejų dalelių – fotono ir elektrono – tamprusis susidūrimas (t.y., sąveika, kurios metu nekinta dalelių kinetinių energijų suma). Dalelių energijas ir judesio kiekius po susidūrimo nusako energijos ir judesio kiekio tvermės dėsniai (žr. 1.3 pav.). Iš šių dėsnių išplaukia, kad dėl atitransacijos sklaidos metu fotonas dalį savo energijos ir judesio kiekio perduoda elektronui. Dėl to fotono energija sumažėja. Šis reiškinys, kurį 1922 m. aprašė amerikiečių fizikas A. Komptonas, tapo vienu iš kvantinės mechanikos kertinių akmenų, nes jis

parodė, jog elektromagnetinė spinduliuotė turi korpuskulinių savybių. Tokia sklaida, kurios metu sumažėja spinduliuotės dažnis, vadinama **Komptono sklaida**, o dažnio sumažėjimas (ir atitinkamas bangos ilgio padidėjimas) vadinamas **Komptono efektu**. Komptono efektas yra pagrindinis veiksnys, dėl kurio vyksta kietosios Rentgeno spinduliuotės ir vidutinių energijų gama spinduliuotės (t.y., elektromagnetinės spinduliuotės, kurios kvanto energija yra  $0.1 \div 1$  MeV) energijos perdavimas medžiagoms, kurios sudarytos iš lengvųjų elementų atomų (pvz., vanduo ir organiniai junginiai). Praktikoje Komptono efektas panaudojamas, įrengiant apsaugą nuo  $\gamma$  spinduliuotės iš mažo tankio medžiagų (betono, plytų, geležies ir kt.), kuriose, esant pradinei fotonų energijai, sugertis yra silpna. Mat, mažėjant fotono energijai dėl daugkartinių susidūrimų su elektronais, auga jo sugerties (fotoefekto) tikimybė.

Fotonus gali sklaidyti ir laisvieji elektronai, ir atomų elektronai. Jeigu fotono energija yra žymiai didesnė už atomo elektrono ryšio energiją, tuomet sklaidos metu fotonas dažniausiai išmuša elektroną iš atomo ir sklaida vyksta taip pat, lyg elektronas būtų laisvas. **Elektrono ryšio energija** arba **atomo jonizacijos energija** – tai darbas, kurį reikia atlikti, pašalinant elektroną iš atomo. Vidutinę atomo jonizacijos energiją  $\bar{I}$  galima apytiksliai įvertinti pagal empirinę formulę  $\bar{I} \approx 13.5 \cdot Z$  eV, kur  $Z$  yra elemento atominis numeris. Vadinasi, lengvųjų elementų (pvz., H, C, O ir N) atomų vidutinės jonizacijos energijos yra mažesnės už 1 keV. Todėl, kai šių elementų atomų elektronai sklaido fotonus, kurių energija didesnė už 100 keV, galima naudoti laisvųjų elektronų artinį. Be to, kai jonizacijos energija labai skiriasi nuo krantinčiojo fotono energijos, fotoefekto tikimybė yra maža, todėl tokiu atveju galima laikyti, kad  $\gamma$  kvantai, kurių energija mažesnė už 1 MeV, sąveikauja su medžiaga tik dėl sklaidos.

Jeigu fotono energija yra mažesnė už elektrono ryšio energiją, tuomet fotonas perduoda energiją visam atomui, o ne atskiram elektronui. Dėl atomo didelės masės fotono energijos nuostoliai, tamptai susiduriant su atomu, yra žymiai mažesni, negu susiduriant su laisvuju elektronu (tai išplaukia iš energijos ir judesio kiekio tvermės dėsnių). Todėl šiuo atveju stebima koherentinė (Reilėjaus) sklaida, kurią galima aprašyti klasikiniiais metodais. Pvz., vykstant  $0.5 - 2.5$  Å bangos ilgio ( $5 - 25$  keV fotono energijos) Rentgeno spindulių sklaidai kristaluose, vyrauja Reilėjaus sklaida. Būtent dėl to stebima tokio bangos ilgio Rentgeno spindulių difrakcija kristaluose (žr. 2 skyrių). Kitas ribinis atvejis, kai tinka klasikinis aprašymas – tai regimosios šviesos arba žemesnių dažnių elektromagnetinės spinduliuotės sklaida laisvaisiais elektronais. Kaip bus parodyta žemiau, spinduliuotės bangos ilgio padidėjimas, kurį sukelia Komptono efektas, nepriklauso nuo spinduliuotės dažnio ir yra mažesnis už  $0.05$  Å. Vadinasi, kai spinduliuotės bangos ilgis viršija  $1000$  Å, Komptono efekto sukeltas *santykinis* bangos ilgio padidėjimas tampa beveik nepastebimas, todėl sklaidą galima laikyti koherentine (Tomsono) sklaida.

Net tuo atveju, kai  $\gamma$  kvanto energija yra žymiai didesnė už elektronų ryšio energiją atome, egzistuoja tam tikra maža tikimybė, kad  $\gamma$  kvanto sklaida bus koherentinė, t.y., kad  $\gamma$  kvantas nesužadins ir nejonizuos atomo, o tik pakeis savo sklaidimo kryptį (Reilėjaus sklaida). Todėl išsklaidytoje spinduliuotėje yra ir pradinio bangos ilgio komponentė. Mažėjant  $\gamma$  kvanto energijai arba augant sklaidančiosios medžiagos atominiam numeriui, Reilėjaus sklaidos tikimybė auga. Tačiau, vykstant vidutinės ir aukštos energijos ( $> 500$  keV)  $\gamma$  kvantų sklaidai mažo atominio numerio medžiagose (pvz., aliuminyje), Reilėjaus sklaida praktiškai nepasireiškia ir galima laikyti, kad vyksta tik Komptono sklaida.

## 9.2. Komptono formulė

Pagrindinė Komptono sklaidos ypatybė yra spinduliuotės bangos ilgio padidėjimas sklaidos metu. Šio pokyčio dydį galima rasti, remiantis energijos ir judesio kiekio tvermės dėsniais. Kadangi elektronas dėl sąveikos su fotonu gali įgyti reliatyvistinį greitį, tai energijos tvermės dėsnyje reikia naudoti reliatyvistinę elektrono kinetinės energijos išraišką  $(m-m_0)c^2$ , kur  $m$  yra elektrono reliatyvistinė masė:

$$m = \frac{m_0}{\sqrt{1-(v/c)^2}}. \quad (9.2.1)$$

Čia  $v$  yra elektrono greitis, o  $m_0 = 9.10939 \cdot 10^{-31}$  kg yra elektrono rimties masė. Tą pačią masės  $m$  išraišką (9.2.1) reikia naudoti ir elektrono judesio kiekio išraiškoje  $mv$ . Reliatyvistiniai energijos ir judesio kiekio tvermės dėsniai, kai fotonas tampriai susiduria su nejudančiu elektronu, yra tokio pavidalo:

$$\begin{cases} h\nu_0 = h\nu + (m - m_0)c^2, \end{cases} \quad (9.2.2a)$$

$$\begin{cases} \mathbf{p}_0 = \mathbf{p} + m\mathbf{v} \end{cases} \quad (9.2.2b)$$

(žr. 1.3 pav.). Čia  $h\nu_0$  ir  $h\nu$  yra fotono energija iki ir po susidūrimo,  $m$  ir  $\mathbf{v}$  yra elektrono masė ir greičio vektorius po susidūrimo, o  $\mathbf{p}_0$  ir  $\mathbf{p}$  yra fotono judesio kiekio vektoriai iki ir po susidūrimo (šių vektorių absoliutinės vertės yra  $p_0 = h\nu_0/c$  ir  $p = h\nu/c$ ). (9.2.2b) lygtį perkėlus  $\mathbf{p}$  į kairiąją pusę ir pakėlus kvadratu abi šios lygties puses,

$$\begin{cases} h\nu_0 = h\nu + (m - m_0)c^2, \end{cases} \quad (9.2.3a)$$

$$\begin{cases} (mv)^2 = \left(\frac{h\nu_0}{c}\right)^2 + \left(\frac{h\nu}{c}\right)^2 - 2\frac{h\nu_0}{c} \cdot \frac{h\nu}{c} \cos\theta. \end{cases} \quad (9.2.3b)$$

Čia  $\theta$  yra kampas tarp vektorių  $\mathbf{p}$  ir  $\mathbf{p}_0$ , t.y., sklaidos kampas (žr. 1.3 pav.). Įrašę (9.2.1) į (9.2.3a,b), gauname dviejų lygčių sistemą atžvilgiu dviejų nežinomųjų  $v$  ir  $\nu$ . Ją išsprendę ir pasinaudoję sąryšiu tarp bangos ilgio  $\lambda$  ir dažnio  $\nu = c/\lambda$ , randame tokią fotono bangos ilgio pokyčio išraišką:

$$\Delta\lambda \equiv \lambda - \lambda_0 = c \left( \frac{1}{\nu} - \frac{1}{\nu_0} \right) = \frac{h}{m_0 c} (1 - \cos\theta). \quad (9.2.4)$$

Taigi,

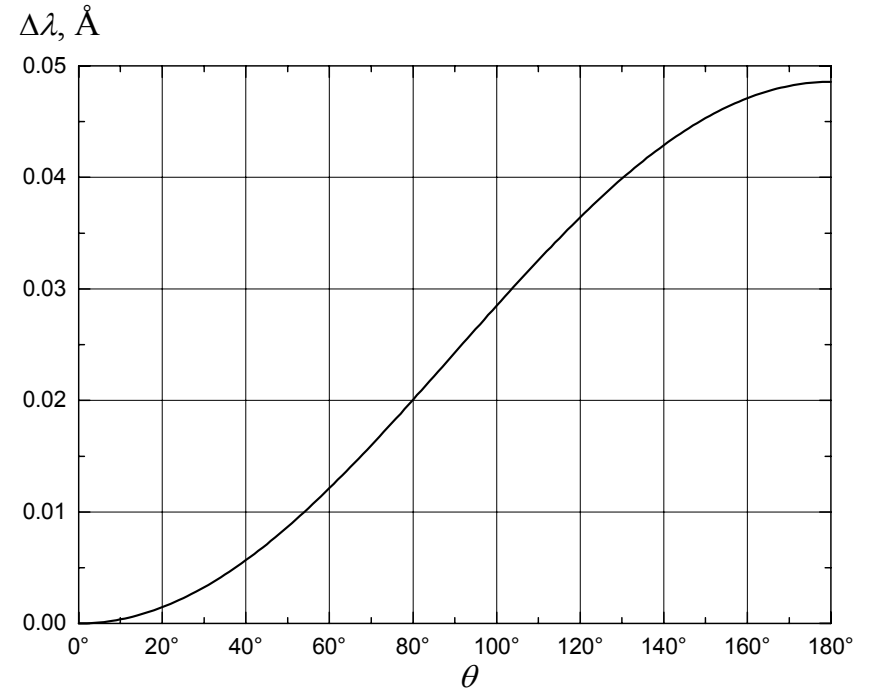
$$\Delta\lambda = \lambda_K (1 - \cos\theta), \quad (9.2.5)$$

kur

$$\lambda_K = \frac{h}{m_0 c} = 0.024263 \text{ Å}. \quad (9.2.6)$$

(9.2.5) formulė vadinama **Komptono formule**, o dydis  $\lambda_K$  vadinamas **Komptono bangos ilgiu**.

Iš (9.2.5) išplaukia, kad Komptono efektas stiprėja, didėjant sklaidos kampui  $\theta$  (žr. 9.1 pav.). Kitais žodžiais, didėjant sklaidos kampui, didėja energija, kurią fotonas perduoda elektronui (atatrunkos energija). Didžiausias įmanomas bangos ilgio padidėjimas atitinka sklaidą kampu  $\theta = \pi$  (kai fotono judėjimo kryptis pasikeičia į priešingą): tuomet  $\Delta\lambda = 2\lambda_K = 0.048526 \text{ Å}$ . Statmena kryptimi (kai  $\theta = \pi/2$ )  $\Delta\lambda$  sutampa su  $\lambda_K$ .



9.1 pav. Bangos ilgio pokyčio dėl Komptono efekto prieklausa nuo sklaidos kampo.



### 9.3. Sklaidos skerspjūvio sąvoka

Dviejų dalelių sąveikos su konkrečia pasekme tikimybė (pvz., krintančiojo fotono sklaidos tikimybė arba sugerties tikimybė) apibūdinama, naudojant skerspjūvio sąvoką: kiekviena apšaudomoji dalelė (pvz., elektronas) pakeičiama įsivaizduojama plokščia sritimi, kuri statmena krintančiųjų dalelių judėjimo kryptčiai ir kurios plotas parinktas taip, kad duotojo įvykio (pvz., sklaidos) tikimybė sutaptų su tikimybe, kad krintančioji dalelė pataikys į šią sritį. Taip apibrėžtas plotas  $\sigma$  vadinamas to įvykio **skerspjūviu**. Žinant skerspjūvį, duotojo įvykio tikimybę galima apskaičiuoti pagal geometrinės tikimybės skaičiavimo taisykles. Tarkime, kad apšaudomųjų dalelių koncentracija bandinyje yra  $n$ . Ploto  $S$  ir nykstamai mažo storio  $dx$  medžiagos sluoksnyje yra  $n \cdot S \cdot dx$  apšaudomųjų dalelių. Kadangi sluoksnio storis yra nykstamai mažas, tai šie dalelių "skerspjūvio plotai"  $\sigma$  nepersikloja, ir pilnutinis "dalelių plotas", kuris uždengia dalį ploto  $S$ , yra lygus skerspjūvių plotų sumai:  $dS' = \sigma \cdot n \cdot S \cdot dx$  (žr. 7.1 pav.). Jeigu krintančioji dalelė gali su vienoda tikimybe pataikyti į bet kurį  $S$  ploto paviršiaus tašką, tuomet tikimybė, kad krintančioji dalelė "pataikys" į kurią nors  $l$  storio sluoksnyje esančią dalelę-taikinį, yra lygi

$$P = \frac{S'}{S} = \sigma \cdot n \cdot l. \quad (9.3.1)$$

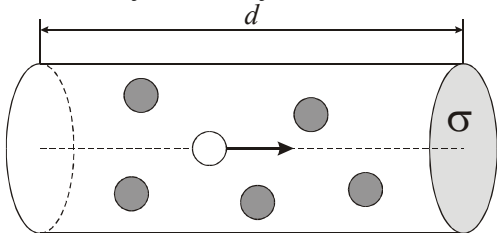
Šį sąryšį galima laikyti duotojo įvykio skerspjūvio  $\sigma$  apibrėžimu: sąveikos skerspjūvis  $\sigma$  yra lygus sąveikos tikimybės  $P$  ir ploto vienetui tenkančių dalelių skaičiaus  $nl$  santykiui.

Iš (9.3.1) išplaukia, kad sąveikos su duotąja pasekme tikimybė  $P$  yra proporcinga dalelės nueitam keliui  $l$ . Vidutinis atstumas  $\langle l \rangle$ , kurį nulėkus dalelei, tikimybė  $P$  tampa lygi vienetui, vadinamas dalelės vidutiniu **laisvojo keliu** duotojoje medžiagoje. Šio dydžio prasmė – tai vidutinis atstumas, kurį nulekia dalelė tarp dviejų duotosios rūšies sąveikos įvykių. Pagal (9.3.1) vidutinis laisvasis kelias lygus

$$\langle l \rangle = \frac{1}{\sigma n}. \quad (9.3.2)$$

Šią laisvojo lėkio išraišką galima gauti šiek tiek vaizdesniu būdu. Judant dalelei, ji sąveikauja tik su tom medžiagos dalelėmis, kurios priklauso "vamzdeliui", kuris gaubia dalelės trajektoriją ir kurio skerspjūvio plotas lygus sąveikos skerspjūviui  $\sigma$  (žr. 9.2 pav.). Medžiagos dalelių skaičius  $N$  šiame vamzdyje lygus jo tūrio  $\sigma d$  ir dalelių tankio  $n$  sandaugai:

$$N = \sigma d n; \quad (9.3.3)$$



9.2 pav. Laisvojo lėkio skaičiavimui.

čia  $d$  yra dalelės trajektorijos ilgis. Aišku, kad vidutinis atstumas, kurį nulekia dalelė tarp dviejų sąveikos įvykių, yra lygus pilnutinio nulėktojo atstumo  $d$  ir sąveikos įvykių santykiui. Kadangi sąveikos įvykių skaičius lygus dalelių skaičiui  $N$  minėtame "vamzdyje", tai vidutinis laisvasis lėkis lygus

$$\langle l \rangle = \frac{d}{N} = \frac{d}{\sigma d n} = \frac{1}{\sigma n}. \quad (9.3.4)$$

Vidutiniam laisvajam keliui atvirkštinis dydis sutampa su silpimo koeficientu (žr. 7.5 poskyrį).

Kiekvienas procesas, kuris gali vykti, sąveikaujant dviem dalelėms, apibūdinamas savo skerspjūviu. Pvz., fotono sklaidos skerspjūvis bendruoju atveju skiriasi nuo fotono sugerties skerspjūvio. Pagal nesutaikomųjų įvykių tikimybių sumos taisyklę, visų įvykių, kurie gali vykti, sąveikaujant dviem dalelėms, skerspjūvių suma nusako dalelių sąveikos pilnutinį skerspjūvį. Todėl, pvz.,  $\gamma$  kvanto sąveikos su atomu skerspjūvis yra lygus

$$\sigma_{\Sigma} = \sigma_F + \sigma_K + \sigma_P, \quad (9.3.5)$$

kur  $\sigma_F$  yra fotoefekto skerspjūvis,  $\sigma_K$  yra Komptono sklaidos skerspjūvis, o  $\sigma_P$  yra porų susidarymo skerspjūvis. Sklaidos skerspjūvio išraiškos ir skaitinės vertės klasikinės ir Komptono sklaidos atvejais pateiktos 9.4 ir 9.5 poskyriuose.

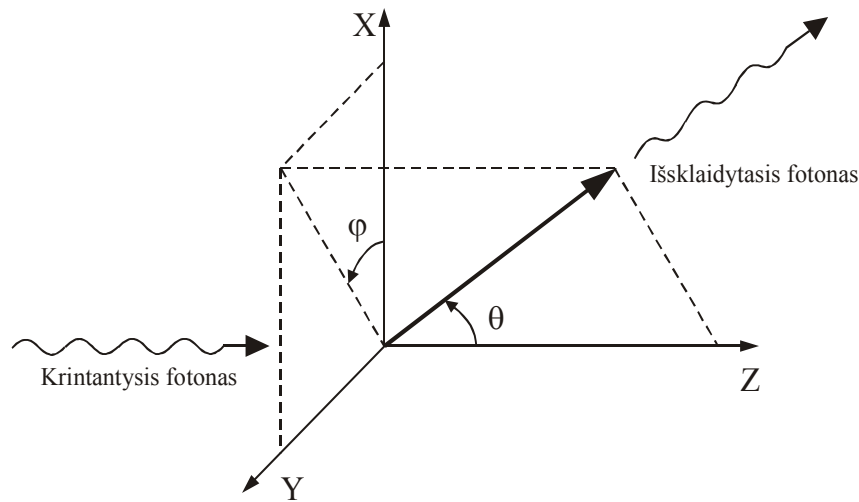
Kadangi fotonai gali būti sklaidomi įvairiom kryptim, tai dažnai naudojama sklaidos *į duotąjį erdvinį kampą*  $\Delta\Omega$  skerspjūvio sąvoka. Sklaidos į vienetinį erdvinį kampą duotąja kryptimi skerspjūvis  $d\sigma/d\Omega$  vadinamas **diferencialiniu sklaidos skerspjūviu**. Pilnutinis sklaidos skerspjūvis lygus diferencialinio skerspjūvio integralui visų kryptčių atžvilgiu:

$$\sigma = \int \frac{d\sigma}{d\Omega} d\Omega \equiv \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi} \frac{d\sigma}{d\Omega} \sin\theta d\theta. \quad (9.3.6)$$

Čia kampai  $\varphi$  ir  $\theta$  nusako sklaidos kryptį:  $\theta$  yra kampas tarp pradinio spindulio krypties ir sklaidos krypties, o  $\varphi$  nusako sklaidos krypties projekciją į statmeną pradiniam spinduliui plokštumą (žr. 9.3 pav.). Bendruoju atveju diferencialinis sklaidos skerspjūvis priklauso nuo abiejų šių kampų. Tačiau tuo atveju, kai sklaidoma natūralioji (nepolarizuotoji) elektromagnetinė spinduliuotė,  $d\sigma/d\Omega$  priklauso tik nuo  $\theta$  (žr. 9.4 poskyrį). Tuomet (9.3.6) formulė supaprastėja:

$$\sigma = 2\pi \int_0^{\pi} \frac{d\sigma}{d\Omega} \sin\theta d\theta. \quad (9.3.7)$$

Remiantis (9.3.1), diferencialinį sklaidos skerspjūvį galima išmatuoti šitaip. Tiriamosios medžiagos sluoksnis apšviečiamas fotonų srautu  $W_0$  (čia  $W_0$  yra krintančiųjų fotonų skaičius per laiko vienetą). Išmatuojamas išsklaidytų fotonų srautas  $\Delta W$  į duotąjį erdvinį kampą  $\Delta\Omega$ . Santykis  $\Delta W/W_0$  nusako sklaidos į erdvinį kampą  $\Delta\Omega$  tikimybę  $\Delta P$ :



9.3 pav. Sklaidos kryptį nusakantys kampai  $\theta$  ir  $\varphi$ .

$$\Delta P = \frac{\Delta W}{W_0} . \quad (9.3.8)$$

Antra vertus, pagal (9.3.1) ši tikimybė lygi

$$\Delta P = \Delta \sigma \cdot n \cdot l , \quad (9.3.9)$$

kur  $\Delta \sigma$  yra sklaidos į erdvinį kampą  $\Delta \Omega$  skerspjūvis. Įrašę (9.3.9) į (9.3.8), randame

$$\Delta \sigma = \frac{\Delta W}{W_0 n l} . \quad (9.3.10)$$

Jeigu  $\Delta \Omega$  yra pakankamai mažas, tuomet diferencialinį sklaidos skerspjūvį duotąja kryptimi galima įvertinti pagal apytikslę lygybę

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} \approx \frac{\Delta \sigma}{\Delta \Omega} . \quad (9.3.11)$$

Klasikinėje sklaidos analizėje vietoj fotonų srauto  $W$  naudojamas spinduliuotės energijos srautas  $A$  (energijos kiekis per laiko vienetą), kuris susijęs su  $W$  sąryšiu

$$A = Wh\nu , \quad (9.3.12)$$

kur  $h = 6.626176 \cdot 10^{-34}$  J·s yra Planko konstanta, o  $\nu$  yra spinduliuotės dažnis. Iš (9.3.12) lygybės išplaukia, kad tuo atveju, kai dažnis  $\nu$  sklaidos metu nekinta, išsklaidytos į erdvinį kampą  $\Delta \Omega$  energijos srauto  $\Delta A$  ir pradinio energijos srauto  $A_0$  santykis sutampa su atitinkamų fotonų srautų santykiu:

$$\frac{\Delta A}{A_0} = \frac{\Delta W}{W_0} . \quad (9.3.13)$$

Vadinasi, šiuo atveju sklaidos į erdvinį kampą  $\Delta \Omega$  skerspjūvio išraišką (9.3.10) galima užrašyti taip:

$$\Delta \sigma = \frac{\Delta A}{A_0 n l} . \quad (9.3.14)$$

Išvedant diferencialinio sklaidos skerspjūvio teorinę išraišką, ji patogiau išreikšti fotonų arba spinduliuotės energijos srauto *tankiu*. Srauto tankis – tai srautas pro vienietinio ploto paviršių. Fotonų srautas į nykštamai mažą erdvinį kampą  $d\Omega$  šitaip susijęs su vieno elektrono duotąja kryptimi išsklaidytų fotonų srauto tankiu  $w$ :

$$dW = N w r^2 d\Omega = S \cdot l \cdot n \cdot w r^2 d\Omega ; \quad (9.3.15)$$

čia  $r$  yra atstumas nuo sklaidos srities iki stebėjimo taško (laikoma, kad šis atstumas žymiai didesnis už sklaidos srities matmenis),  $N = S \cdot l \cdot n$  yra sklaidoje dalyvaujančių elektronų skaičius, o žymėjimai  $S$ ,  $l$  ir  $n$  turi tą pačią prasmę, kaip ir (9.3.1) formulėje. Krintančiųjų fotonų srautas lygus

$$W_0 = S w_0 , \quad (9.3.16)$$

kur  $w_0$  yra krintančiųjų fotonų srauto tankis. Įrašę (9.3.15) ir (9.3.16) į (9.3.10), randame

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{w}{w_0} r^2 \quad (9.3.17)$$

(kadangi  $w \sim 1/r^2$ , tai diferencialinis sklaidos skerspjūvis nepriklauso nuo  $r$ ). Analogiškai, klasikinio sklaidos modelio atveju

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{I}{I_0} r^2 , \quad (9.3.18)$$

kur  $I$  yra vieno elektrono išsklaidytos spinduliuotės intensyvumas (energijos srauto tankis) atstumu  $r$  duotąja kryptimi, o  $I_0$  yra pradinės spinduliuotės intensyvumas:

$$I_0 = \frac{1}{2} c \varepsilon_0 E_0^2 . \quad (9.3.19)$$

Čia  $E_0$  yra pradinės bangos elektrinio lauko stiprio amplitudė,  $c$  yra šviesos greitis, o  $\varepsilon_0$  yra elektrinė konstanta. Įrašę (9.3.19) į (9.3.18), randame

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{2I}{c \varepsilon_0 E_0^2} r^2 . \quad (9.3.20)$$

#### 9.4. Elektromagnetinės spinduliuotės sklaidos klasikinis aprašymas

Jeigu krintančioji spinduliuotė yra poliarizuota (t.y., jeigu jos elektrinio lauko kryptis visą laiką lygiagreti vienai tiesei), tuomet, klasikiniu požiūriu, vykstant sklaidai, vieno elektrono išsklaidytos spinduliuotės

intensyvumo prieklausa nuo sklaidos krypties yra tokia pati, kaip ir harmoniniu dėsniu išilgai vienos tiesės judančio krūvininko spinduliuotės intensyvumo kampinė prieklausa:

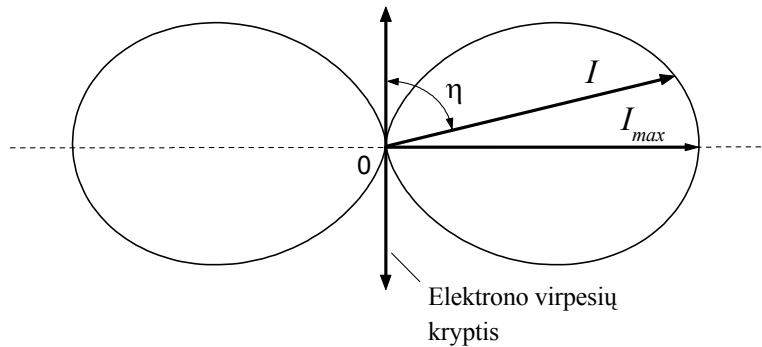
$$I = I_{max} \sin^2 \eta. \quad (9.4.1)$$

Čia  $\eta$  yra kampas tarp elektronų virpesių krypties ir stebėjimo krypties (žr. 9.4 pav.), o daugiklis  $I_{max}$  išreiškiamas formule

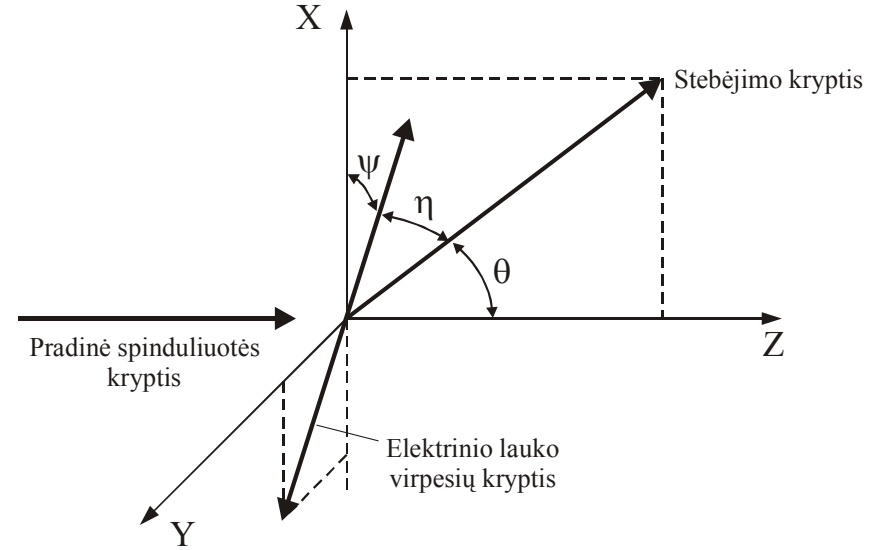
$$I_{max} = \frac{e^2 \omega^4 x_{max}^2}{32 \pi^2 \epsilon_0 c^3 r^2}, \quad (9.4.2)$$

kur  $e$  yra elektrono krūvis,  $\omega$  yra spinduliuotės (elektrono virpesių) ciklinis dažnis,  $x_{max}$  yra elektrono priverstinių virpesių amplitudė, o  $r$  yra atstumas nuo sklaidos taško iki stebėjimo taško.

Iš (9.4.1) formulės išplaukia, kad, vykstant poliarizuotos spinduliuotės sklaidai, išsklaidytosios spinduliuotės intensyvumo kampinis pasiskirstymas yra simetriškas atžvilgiu poliarizacijos krypties (žr. 9.4 pav.). Fiksavus sklaidos (stebėjimo) kryptį (t.y., kampus  $\theta$  ir  $\varphi$ ), kampas  $\eta$  tarp elektronų virpesių krypties ir sklaidos krypties priklauso nuo kampo  $\psi$ , kuris nusako elektrinio lauko kryptį statmenoje pradinės spinduliuotės krypties plokštumoje XY (žr. 9.5 pav.). Pasirinkus X ašies kryptį taip, kad sklaidos kryptis priklausytų plokštumai XZ, galioja lygybė  $\cos \eta = \sin \theta \cdot \cos \psi$ . Kai sklaidoma natūralioji (nepoliarizuotoji) spinduliuotė, sklaidos metu kampas  $\psi$  gali būti bet koks. Tuomet sklaidos intensyvumas duotąja kryptimi yra lygus (9.4.1) reiškinio vidurkiui atžvilgiu  $\psi$ . Kadangi kampas  $\psi$  gali su vienoda tikimybe įgyti visas vertes nuo 0 iki  $\pi$ , šis vidurkis lygus



9.4 pav. Harmoniniu dėsniu virpančio elektrono spinduliuotės intensyvumo ( $I$ ) prieklausa nuo spinduliuotės krypties ( $\eta$ ) polinėse koordinatėse. Intensyvumą nusako ilgis atkarpos, kuri jungia koordinatžių centrą su kreive duotąja kryptimi. Erdvinė prieklausa gaunama, apsukus kreivę aplink virpesių kryptį. Maksimalus intensyvumas  $I_{max}$  išreiškiamas (9.4.2) formule.



9.5 pav. Kampų  $\theta$ ,  $\psi$  ir  $\eta$  ryšys.

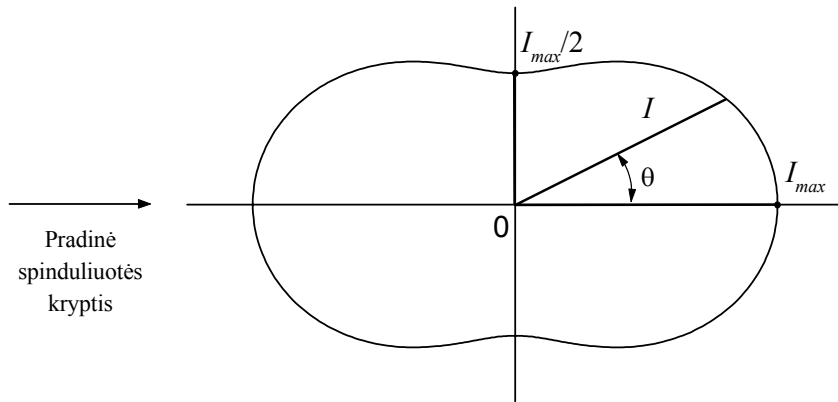
$$\begin{aligned} I &= \frac{I_{max}}{\pi} \int_0^\pi \sin^2 \eta \cdot d\psi = \frac{I_{max}}{\pi} \int_0^\pi (1 - \cos^2 \eta) d\psi = \\ &= \frac{I_{max}}{\pi} \int_0^\pi (1 - \sin^2 \theta \cdot \cos^2 \psi) d\psi = \frac{1}{2} I_{max} (1 + \cos^2 \theta) = I_{\pi/2} (1 + \cos^2 \theta). \end{aligned} \quad (9.4.3)$$

Čia  $I_{\pi/2} = I_{max}/2$  yra išsklaidytos spinduliuotės intensyvumas kryptimi  $\theta = \pi/2$  (t.y., kryptimi, kuri statmena pradinės spinduliuotės krypties). Taigi, nepoliarizuotos spinduliuotės sklaidos intensyvumo kampinis pasiskirstymas yra simetriškas atžvilgiu pradinės spinduliuotės krypties (žr. 9.6 pav.). Šis teiginys galioja ne tik koherentinei, bet ir Komptono sklaidai. Tačiau, pagal klasikinį modelį, intensyvumo kampinis pasiskirstymas yra simetriškas dar ir atžvilgiu plokštumos  $\theta = \pi/2$  (žr. 9.6 pav.). T.y., priešingom kryptim išsklaidytos spinduliuotės intensyvumai sutampa. Komptono sklaidai šis teiginys negalioja (žr. 9.5 poskyrį).

Išrašę  $I_{max}$  išraišką (9.4.2) į (9.4.3) ir pasinaudoję (9.3.20) formule, randame sklaidos diferencialinio skerspjuvio klasikinę išraišką:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{e^2 \omega^4 x_{max}^2}{32 \pi^2 \epsilon_0^2 c^4 E_0^2} (1 + \cos^2 \theta). \quad (9.4.4)$$

Galutinę šio dydžio išraišką lemia virpesių amplitudės  $x_{max}$  priklausos nuo  $\omega$  ir  $E_0$  pavidalas.



9.6 pav. Išsklaidytos nepoliarizuotos spinduliuotės intensyvumo ( $I$ ) prieklausa nuo sklaidos kampo ( $\theta$ ) polinėse koordinatėse klasikinės sklaidos atveju. Erdvinė prieklausa gaunama, apsukus kreivę aplink pradinės spinduliuotės kryptį.

Visų pirma tarkime, kad elektromagnetines bangas sklaido atomų elektronai (Reilėjaus sklaida). Pagal klasikinį elektrono judėjimo atome modelį, esant išoriniam harmoniniam elektriniam laukui, elektrono judėjimas – tai vienmačio harmoninio osciliatoriaus priverstiniai virpesiai. Tokio judėjimo lygtis yra šitokia:

$$m \frac{d^2 x}{dt^2} + a \frac{dx}{dt} + kx = -eE(t); \quad (9.4.5)$$

čia  $m$  yra elektrono masė,  $x$  yra elektronų sluoksnio centro nuokrypis nuo pusiausvyros padėties,  $e$  yra elektrono krūvio absoliutinė vertė,  $E$  yra elektromagnetinės spinduliuotės elektrinio lauko stipris:

$$E(t) = E_0 \cos(\omega t), \quad (9.4.6)$$

$a$  yra slopinimo koeficientas, kuris nusako savaiminių virpesių amplitudės mažėjimą laike dėl antrinės (išsklaidytos) spinduliuotės, o konstanta  $k$  nusako jėgą  $-kx$ , kuri stengiasi grąžinti elektroną į pusiausvyros padėtį. Koeficiento  $k$  vaidmuo yra toks pats, kaip spyruoklės tamprumo koeficiento, o koeficiento  $a$

vaidmuo yra toks pats, kaip trinties koeficiento (t.y., dydžio  $-a \frac{dx}{dt}$  vaidmuo

yra toks pats, kaip trinties jėgos, kuri veikia greičiu  $\frac{dx}{dt}$  judantį kūną). Lygties

(9.4.5) dešinioji pusė – tai jėga, kuria elektrinis laukas veikia elektroną. Kai šio lauko stiprio laikinė prieklausa yra (9.4.6) pavidalo, (9.4.5) lygties sprendinys yra

$$x(t) = \frac{eE_0 / m}{\sqrt{(\omega_0^2 - \omega^2)^2 + 4\beta^2 \omega^2}} \cos(\omega t - \delta). \quad (9.4.7)$$

Čia  $\omega_0$  yra elektrono savųjų virpesių dažnis:

$$\omega_0 = \sqrt{\frac{k}{m}}, \quad (9.4.8)$$

o konstantos  $\beta$  ir  $\delta$  apibrėžiamos sąryšiais  $\beta = \frac{a}{2m}$  ir  $\tan \delta = \frac{2\beta\omega}{\omega_0^2 - \omega^2}$ .

Daugiklis prieš kosinusą (9.4.7) reiškinyje – tai elektrono priverstinių virpesių amplitudė  $x_{max}$ :

$$x_{max} = \frac{eE_0 / m}{\sqrt{(\omega_0^2 - \omega^2)^2 + 4\beta^2 \omega^2}}. \quad (9.4.9)$$

Jeigu spinduliuotės ciklinis dažnis  $\omega$  žymiai mažesnis už elektrono savųjų virpesių ciklinį dažnį  $\omega_0$  ( $\omega_0$  yra  $10^{16} \div 10^{18} \text{ s}^{-1}$  eilės), o virpesių slopinimas yra

pakankamai silpnas (tiksliau,  $\beta^2 \ll \frac{\omega_0^4}{4\omega^2}$ ), tuomet iš (9.4.9) išplaukia, kad

elektronų priverstinių virpesių amplitudė  $x_{max}$  beveik nepriklauso nuo spinduliuotės dažnio ir yra apytiksliai lygi

$$x_{max} \approx \frac{eE_0}{m\omega_0^2}. \quad (9.4.10)$$

Todėl, kaip akivaizdu (9.4.4) formulėje, išsklaidytos spinduliuotės sklaidos skerspjūvis (ir intensyvumas) yra proporcingas spinduliuotės dažnio ketvirtam laipsniui. T.y., trumpabangė spinduliuotė sklaidoma stipriau už ilgabangę. Būtent tuo aiškinama dangaus žydra spalva: žiūrint kryptimi, kuri skiriasi nuo krypties į Saulę, matoma tik išsklaidyta šviesa, kurioje vyrauja trumpabangės dedamosios.

Dabar tarkime, kad spinduliuotę sklaido laisvieji elektronai (Tomsono sklaida). Tuomet lygties (9.4.5) kairiojoje pusėje nėra trečiojo dėmens, kuris atspindi elektrono ryšį su branduoliu. Jeigu elektrono virpesių slopinimas yra silpnas, tuomet galima nepaisyti ir antrojo dėmens. Gauname tokią laisvųjų elektronų judėjimo lygtį:

$$m \frac{d^2 x}{dt^2} = -eE(t). \quad (9.4.11)$$

Iš (9.4.11) išplaukia, kad tuo atveju, kai  $E$  yra (9.4.6) pavidalo,  $x$  kinta dėsniu

$$x = x_{max} \cos(\omega t), \quad (9.4.12)$$

kur

$$x_{max} = \frac{eE_0}{m\omega^2}. \quad (9.4.13)$$

Žaigi, šiuo atveju elektrono virpesių amplitudė atvirkščiai proporcinga spinduliuotės dažnio kvadratui. Įrašę (9.4.13) į diferencialinio sklaidos skerspjūvio išraišką (9.4.4), randame Tomsono sklaidos diferencialinį skerspjūvį:

$$\frac{d\sigma_T}{d\Omega} = \frac{e^4}{32\pi^2 \varepsilon_0^2 c^4 m^2} (1 + \cos^2 \theta) \approx 4.0 \cdot 10^{-26} (1 + \cos^2 \theta) \text{ (cm}^2\text{)}. \quad (9.4.14)$$

Vadinasi, Tomsono sklaidos skerspjūvis nepriklauso nuo spinduliuotės dažnio.

Pilnutinis Tomsono sklaidos skerspjūvis randamas, suintegravus (9.4.14) reiškinį erdvinio kampo atžvilgiu pagal (9.3.7) formulę:

$$\sigma_T = \frac{e^4}{6\pi \varepsilon_0^2 c^4 m^2} \approx 6.6 \cdot 10^{-25} \text{ cm}^2. \quad (9.4.15)$$

Žinant sklaidos skerspjūvį ir laikant, kad sklaida yra pagrindinis sąveikos su medžiaga mechanizmas, pagal (9.3.2) formulę galima įvertinti fotono laisvąjį lėkį duotoje medžiagoje. Pvz., vandenyje arba biologiniame audinyje vidutinis elektronų tankis  $n \approx 3 \cdot 10^{23} \text{ cm}^{-3}$ . Įrašę šią vertę kartu su sklaidos skerspjūvio verte (9.4.15) į laisvojo lėkio išraišką (9.3.2), gauname, kad fotono “klasikinis” laisvasis lėkis tokioje aplinkoje yra  $\langle l \rangle \approx 5 \text{ cm}$ , t.y., fotonas tarp susidūrimų su elektronais vidutiniškai nueina 5 cm.

### 9.5. Komptono sklaidos skerspjūvis

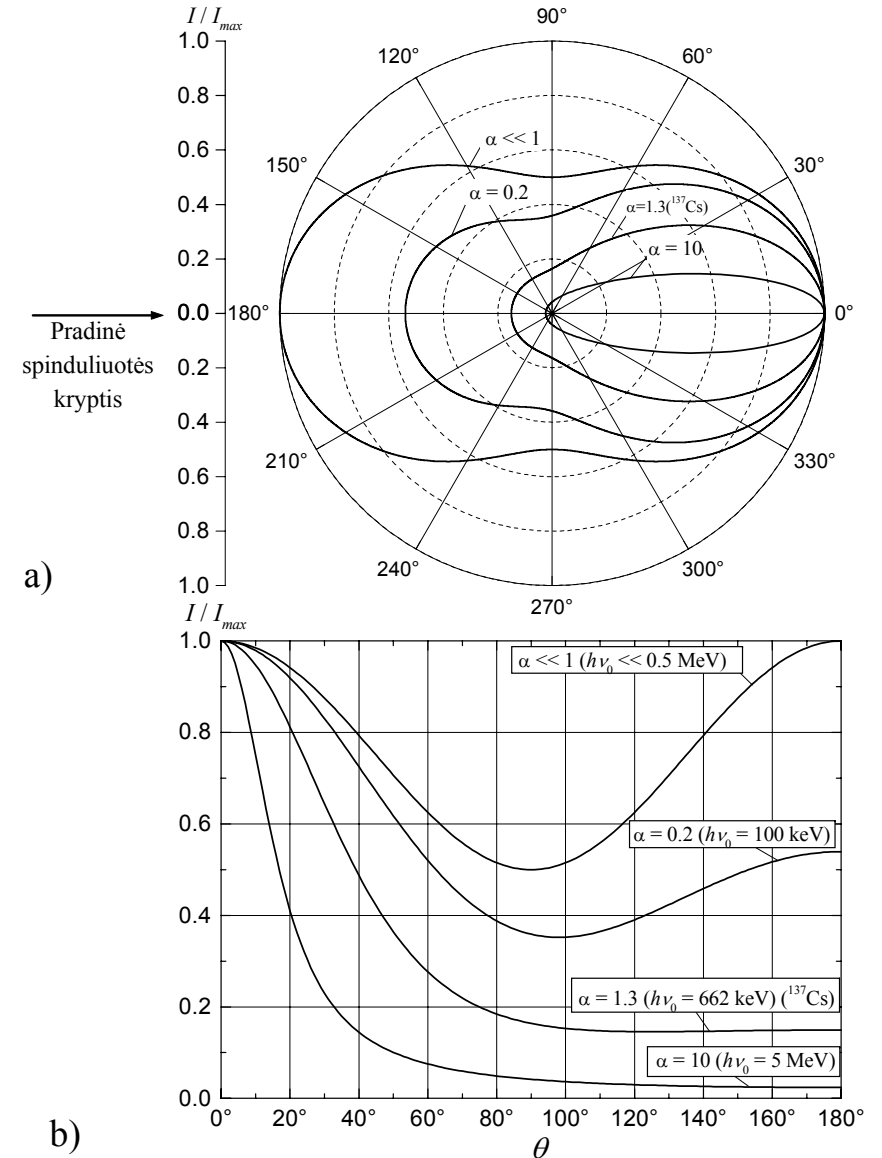
Komptono sklaidos skerspjūvis priklauso nuo fotonų energijos, o sklaidos intensyvumo kampinis pasiskirstymas nėra simetriškas atžvilgiu plokštumos  $\theta = \pi/2$  (sklaida mažais kampais yra labiau tikėtina, negu sklaida dideliais kampais). Tuo Komptono sklaida skiriasi nuo klasikinės sklaidos (žr. 9.4 poskyrį). Pagal Komptono sklaidos teoriją, kurią išvystė švedų fizikas O. Kleinas ir japonų fizikas J. Nišina, sklaidos diferencialinio skerspjūvio prieklausą nuo sklaidos kampo  $\theta$  ir nuo fotono energijos nusako formulė

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{e^4}{32\pi^2 \varepsilon_0^2 c^4 m_0^2} \cdot \frac{1 + \cos^2 \theta}{[1 + \alpha(1 - \cos \theta)]^2} \left\{ 1 + \frac{\alpha^2 (1 - \cos \theta)^2}{(1 + \cos^2 \theta)[1 + \alpha(1 - \cos \theta)]} \right\}, \quad (9.5.1)$$

kur  $\alpha$  yra fotono pradinės energijos  $h\nu_0$  ir elektrono rimties energijos  $m_0 c^2 = 511 \text{ keV}$  santykis:

$$\alpha = \frac{h\nu_0}{m_0 c^2}. \quad (9.5.2)$$

Kai  $\alpha \ll 1$ , Komptono sklaidos diferencialinis skerspjūvis (9.5.1) sutampa su Tomsono sklaidos diferencialiniu skerspjūviu (9.4.14). Komptono sklaidos diferencialinio skerspjūvio (9.5.1) prieklausa nuo sklaidos kampo  $\theta$ , esant kelioms  $\alpha$  vertėms, pavaizduota 9.7 pav. Kaip matome, didėjant fotono energijai, išsklaidytos spinduliuotės intensyvumo kampinis pasiskirstymas siaurėja ir darosi vis labiau ištemptas pradinės spinduliuotės kryptimi, o pilnutinė sklaidos tikimybė mažėja. Pilnutinę Komptono sklaidos tikimybę



9.7 pav. Komptono sklaidos santykinio intensyvumo (arba santykinio diferencialinio skerspjūvio) prieklausa nuo sklaidos kampo, esant kelioms pradinės fotonų energijos vertėms, polinėse (a) ir stačiakampėse (b) koordinatėse. Prieklausa apskaičiuota pagal (9.5.1) formulę.  $\alpha$  yra fotono pradinės energijos  $h\nu_0$  ir elektrono rimties energijos ( $511 \text{ keV}$ ) santykis:  $\alpha = h\nu_0/(m_0 c^2)$ .  $\alpha = 1.3$  atitinka izotopo  $^{137}\text{Cs}$  spinduliuojamų fotonų energiją ( $662 \text{ keV}$ ).

galima apskaičiuoti pagal (9.3.1) formulę, jeigu yra žinomas Komptono sklaidos skerspjūvis  $\sigma$ , kuris randamas, suintegravus (9.5.1) pagal (9.3.7) :

$$\sigma = \frac{3}{4} \sigma_T \left\{ \frac{1+\alpha}{\alpha^2} \left[ \frac{2(1+\alpha)}{1+2\alpha} - \frac{1}{\alpha} \ln(1+2\alpha) \right] + \frac{1}{2\alpha} \ln(1+2\alpha) - \frac{1+3\alpha}{(1+2\alpha)^2} \right\}. \quad (9.5.3)$$

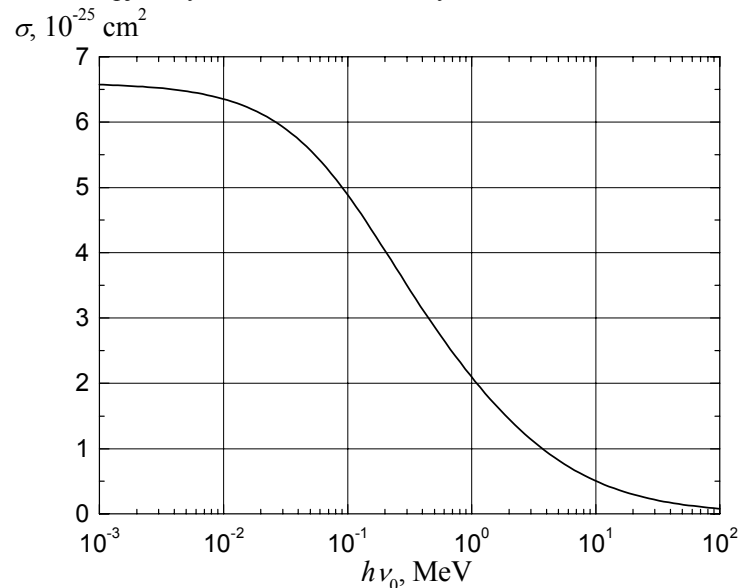
Čia  $\sigma_T$  yra Tomsono sklaidos skerspjūvis (9.4.15). Mažėjant  $\alpha$ ,  $\sigma$  auga, artėdamas į  $\sigma_T$  (žr. 9.8 pav.).

Ribiniai atvejai:

- 1) Kai  $\alpha \ll 1$ ,  $\sigma \approx \sigma_T (1-2\alpha)$ . T.y., kai fotono energija žymiai mažesnė už 0.5 MeV, sklaidos skerspjūvis tiesiškai mažėja, augant fotono energijai.
- 2) Kai  $\alpha \gg 1$ ,  $\sigma \approx \frac{3}{8} \sigma_T \frac{1}{\alpha} \left( \frac{1}{2} + \ln 2\alpha \right)$ . Vadinasi, kai fotono energija žymiai

didesnė už 0.5 MeV, sklaidos skerspjūvis atvirkščiai proporcingas fotono energijai.

(9.5.1) formulė išvesta, naudojant reliatyvistinės kvantinės mechanikos metodus ir atsižvelgiant į elektrono sukinio bei magnetinio momento sąveiką su elektromagnetiniu lauku (t.y.,  $\gamma$  kvantais). Taigi, neįmanoma paprastai paaiškinti tokią prieklausą nuo energijos. Pagal (9.5.3) formulę (9.8 pav.), cezio izotopo  $^{137}\text{Cs}$  spinduliuojamų fotonų ( $h\nu = 662 \text{ keV}$ ) sklaidos skerspjūvis yra  $\sigma \approx 2.5 \cdot 10^{-25} \text{ cm}^2$ , t.y., 2.6 karto mažesnis už Tomsono



9.8 pav. Komptono sklaidos skerspjūvio priklausą nuo fotono pradinės energijos ((9.5.3) formulė).

sklaidos skerspjūvi  $\sigma_T$  (9.4.15). Atitinkamai, šios energijos fotonų laisvasis kelias medžiagoje yra 2.6 karto didesnis už tą, kurį numato klasikinė teorija. Pvz., vandenyje arba biologiniame audinyje jis lygus  $\langle l \rangle \approx 13 \text{ cm}$ , t.y., 0.66 MeV energijos fotonas tarp susidūrimų su elektronais tokioje aplinkoje vidutiniškai nueina 13 cm.

Komptono sklaidos teorija taip pat leidžia apskaičiuoti ir Komptono elektronų (atatrunkos elektronų) energijos pasiskirstymą. Skaičiavimų rezultatai rodo, kad Komptono elektronų energijos spektras yra ištisinis: fotonas gali perduoti elektronui bet kokio didumo savo energijos dalį – nuo nulio iki didžiausios energijos, kuri lygi

$$E_{e \max}^K = \frac{h\nu}{1 + \frac{mc^2}{2h\nu}}, \quad (9.5.4)$$

Kai fotono energija didesnė už 1 MeV, galima laikyti, kad

$$E_{e \max}^K \approx h\nu - \frac{mc^2}{2} \approx h\nu - 0.25 \text{ MeV}, \quad (9.5.5)$$

o vidutinė atatrunkos elektrono energija apytiksliai lygi pusei krintančiojo fotono energijos.

## 9.6. Darbo užduotys

1. Išmatuoti kampais  $45^\circ$ ,  $60^\circ$ ,  $75^\circ$ ,  $90^\circ$ ,  $105^\circ$  ir  $120^\circ$  išsklaidytos  $\gamma$  spinduliuotės silpimo koeficientą geležyje.
2. Pagal žinomus pradinį spinduliuotės bangos ilgį ir silpimo koeficiento prieklausą nuo bangos ilgio grafiškai rasti  $\gamma$  spinduliuotės bangos ilgio pokytį, esant kiekvienam sklaidos kampui.
3. Bangos ilgio pokyčio matavimų rezultatus palyginti su teorinių skaičiavimų rezultatais (Komptono formulė).

## 9.7. Tyrimo metodo teorija

Komptono sklaidos tyrimo schema pavaizduota 9.9 pav. Fotonų ( $\gamma$  kvantų) šaltinio (1) vaidmenį atlieka  $\gamma$  radioaktyvus cezio izotopas  $^{137}\text{Cs}$ . Kolimatorius (2) – tai siauras kanalas, kuris suformuoja siaurą spinduliuotės pluoštelį. Šis pluoštelis pataiko į aliuminio strypą (3). Dalis fotonų aliuminyje yra išsklaidomi. Išsklaidytus fotonus detektuoja blyksninis skaitiklis (4). Skaitiklį galima pastatyti įvairiais kampais  $\theta$  atžvilgiu pradinės spinduliuotės krypties ir tokiu būdu “atrinkti” tik duotąją kryptimi išsklaidytus  $\gamma$  kvantus.

Šiame darbe tiriamas išsklaidytos spinduliuotės bangos ilgio padidėjimas (Komptono efektas), esant įvairiems sklaidos kampams. Bangos ilgis matuojamas *sugerties metodu*. Šis metodas pagrįstas tuo, kad  $\gamma$  spinduliuotės silpimo koeficientas medžiagoje priklauso nuo  $\gamma$  kvanto

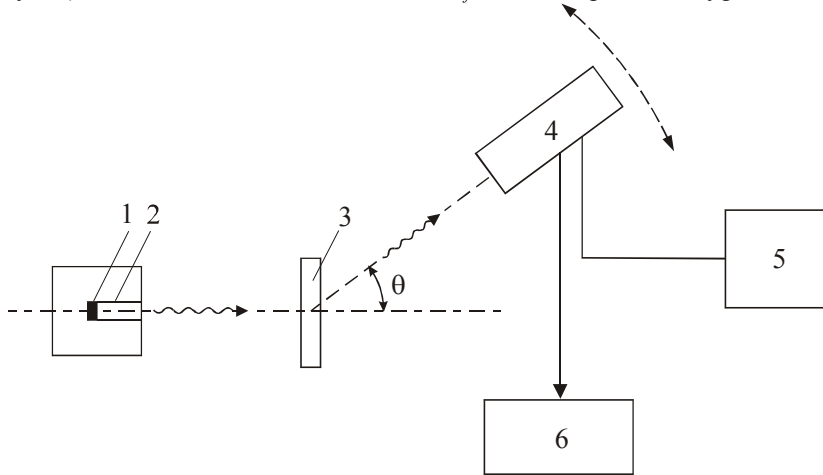
energijos. Žinant šią priklausą, pagal išmatuotą silpimo koeficiento vertę galima nustatyti spinduliuotės bangos ilgį (taigi, ir bangos ilgio pokytį).

Tarkime, kad į medžiagos (sugėriklio) sluoksnį, kurio storis  $d$ , krinta lygiagrečius  $\gamma$  spinduliuotės pluoštas, kurio kryptis statmena sugėriklio paviršiui, o intensyvumas lygus  $I_0$ . Tuomet praėjusios tos pačios krypties spinduliuotės intensyvumą  $I$  nusako (7.5.5) formulė. Iš šios formulės išplaukia tokia silpimo koeficiento išraiška:

$$\mu = \frac{1}{d} \ln \frac{N_0 - N_f}{N - N_f}; \quad (9.7.1)$$

čia  $N_0$  yra vidutinis užregistruotų per duotąjį laiką  $\gamma$  kvantų skaičius, kai tiriamosios spinduliuotės kelyje nėra sugėriklio,  $N$  yra vidutinis užregistruotų  $\gamma$  kvantų skaičius, kai tiriamoji spinduliuotė praeina pro sugėriklio sluoksnį, kurio storis  $d$ , o  $N_f$  yra vidutinis fono impulsų skaičius per tą patį laiką. Kadangi šiame darbe tirama išsklaidytoji spinduliuotė, tai sugėrikli reikia statyti tarp aluminio strypo 3 ir skaitiklio 4 (žr. 9.9 pav.).

Dydžius  $N_0$ ,  $N$  ir  $N_f$ , kurie įeina į silpimo koeficiento išraišką (9.7.1), galima išmatuoti tik su tam tikra atsitiktine paklaida. Taip yra dėl to, kad per duotąjį laiko tarpą užregistruotų  $\gamma$  kvantų skaičius yra atsitiktinis dydis. Šio atsitiktinio dydžio statistines savybes nusako Puasono skirstinys (žr. 4.2 ir 4.3 poskyrius). Tai reiškia, kad vidurkių  $N_0$ ,  $N$  ir  $N_f$  matavimo paklaidos lygios



9.9 pav. Komptono sklaidos registravimo aparatinės struktūros schema. 1 –  $\gamma$  radioaktyvusis šaltinis, 2 – kolimatorius, 3 – medžiaga, kurioje vyksta Komptono sklaida, 4 – išsklaidytų  $\gamma$  kvantų detektorius, 5 – detektoriaus maitinimo blokas, 6 – registravimo įrenginys.

$$\Delta N_0 = \sqrt{\frac{N_0}{k_0}}, \Delta N = \sqrt{\frac{N}{k}} \text{ ir } \Delta N_f = \sqrt{\frac{N_f}{k_f}}; \quad (9.7.2)$$

čia  $k_0$ ,  $k$  ir  $k_f$  yra atitinkamai dydžių  $N_0$ ,  $N$  ir  $N_f$  matavimų skaičiai. Dydžiai (9.7.2) – tai standartiniai nuokrypiai. T.y., laikant, kad  $N$  yra išmatuotoji (apytikslė) vidurkio vertė, egzistuoja  $\approx 68\%$  tikimybė, kad tikroji šio vidurkio vertė priklauso intervalui  $N - \Delta N \div N + \Delta N$  (tas pats teiginys galioja ir vidurkiams  $N_0$  bei  $N_f$ ).

Kadangi dydžiai  $N_0$ ,  $N$  ir  $N_f$  yra išmatuoti su paklaidom, tai ir silpimo koeficientą (9.7.1) galima įvertinti tik su tam tikra atsitiktine paklaida. Šios paklaidos vertę  $\Delta\mu$  galima apskaičiuoti pagal bendrąją atsitiktinių dydžių funkcijos standartinio nuokrypio skaičiavimo formulę:

$$\Delta\mu(N_0, N, N_f) = \sqrt{\left(\frac{\partial\mu}{\partial N_0} \Delta N_0\right)^2 + \left(\frac{\partial\mu}{\partial N} \Delta N\right)^2 + \left(\frac{\partial\mu}{\partial N_f} \Delta N_f\right)^2}. \quad (9.7.3)$$

Įrašę  $\mu$  išraišką (9.7.1) ir paklaidų išraiškas (9.7.2) į (9.7.3), randame galutinę silpimo koeficiento matavimo paklaidos (standartinio nuokrypio) išraišką:

$$\Delta\mu = \frac{1}{d} \sqrt{\frac{N_0}{k_0(N_0 - N_f)^2} + \frac{N}{k(N - N_f)^2} + \frac{N_f \cdot (N_0 - N)^2}{k_f(N_0 - N_f)^2(N - N_f)^2}}. \quad (9.7.4)$$

Šis dydis – tai pusplotis intervalo, kuriam su  $\approx 68\%$  tikimybe priklauso tikroji silpimo koeficiento  $\mu$  vertė.

## 9.8. Matavimų tvarka

1. Įjungiami registravimo įrenginys ir blyksninio skaitiklio fotodaugintuvo maitinimo šaltinis. Po 1 min įjungiamas aukšta įtampa.
2. Atidengiamas radioaktyvusis šaltinis. 20 min palaukiama, kol nusistovės skaitiklio fotodaugintuvo elektrinių parametrų ir maitinimo įtamos vertės.
3. Skaitiklis pastatomas į padėtį, kuri atitinka sklaidos kampą  $\theta = 45^\circ$ . Aluminio strypas, kuriame vyksta  $\gamma$  spinduliuotės sklaida, pašalinamas iš spinduliuotės pluošto. Išmatuojamas fono impulsų skaičius (matuojant foną, radioaktyviojo šaltinio uždegti nereikia). Matavimo trukmė – 1 min. Atliekami 3 matavimai ir apskaičiuojamas vidurkis  $N_f$ .
4. 3 punkto matavimai pakartojami, kai spinduliuotės kelyje yra aluminio strypas. Aluminio strypas turi būti tiksliai prieš skaitiklį (žr. 9.9 pav.). Apskaičiuojamas vidurkis  $N_0$ .
5. Matavimai pakartojami, kai maždaug pusiaukelėje tarp skaitiklio ir aluminio strypo yra žinomo storio geležies plokštelė. Apskaičiuojamas vidurkis  $N$ .
6. Punktai 3 ÷ 5 pakartojami dar penkiems sklaidos kampams:  $\theta = 60^\circ, 75^\circ, 90^\circ, 105^\circ$  ir  $120^\circ$ .

7. Baigus matavimus, radioaktyviojo šaltinio kolimatoriaus anga uždengiama švino plytom. Išjungiamo aukšta įtampa, po to skaitiklio aukštos įtampos šaltinis ir registravimo įrenginys išjungiami iš elektros tinklo.

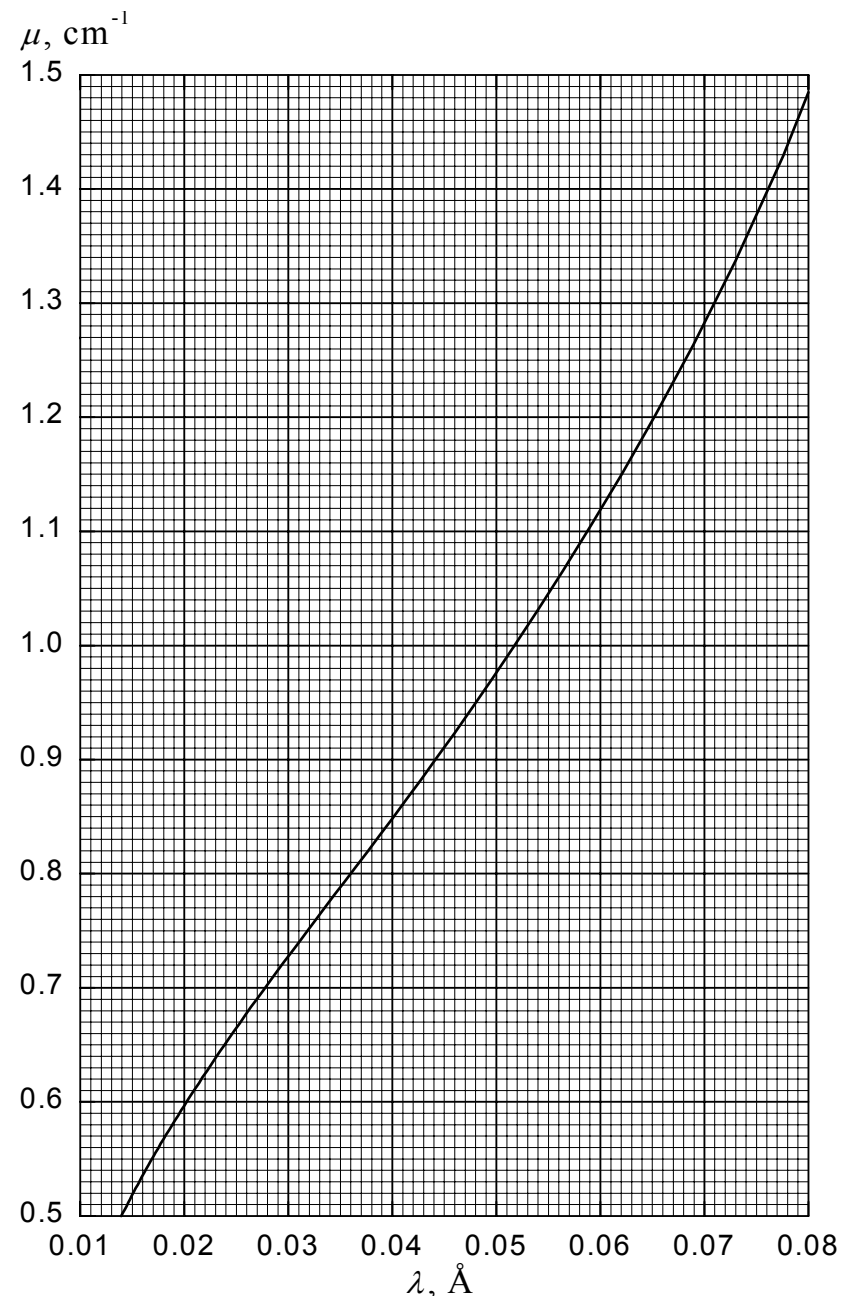
### 9.9. Matavimo duomenų analizė

Pagal (9.7.1) formulę apskaičiuojamas įvairiais kampais išsklaidytos  $\gamma$  spinduliuotės silpimo koeficientas  $\mu$ . Žinant šį koeficientą, pagal 9.10 pav. kiekvienam kampui randamas išsklaidytos  $\gamma$  spinduliuotės bangos ilgis  $\lambda$  ir bangos ilgio pokytis dėl Komptono efekto  $\Delta\lambda = \lambda - \lambda_0$ . Izotopo  $^{137}\text{Cs}$   $\gamma$  spinduliuotės bangos ilgis  $\lambda_0$  apskaičiuojamas pagal (1.1.1) formulę. Fotono energija lygi  $h\nu_0 = 661.7 \text{ keV}$  (žr. priedo A-1 pav.).

Pagal (9.7.4) formulę kiekvienam kampui apskaičiuojama silpimo koeficiento matavimo paklaida  $\Delta\mu$ . Žinant  $\Delta\mu$ , pagal 9.10 pav. randama bangos ilgio matavimo paklaida (žr. 9.11 pav.). Išmatuoti  $\Delta\lambda$  priklauso nuo  $\theta$ , bangos ilgio matavimo paklaidos ir teorinė priklauso (9.2.5) pavaizduojamos grafiškai (žr. 9.12 pav.). Įvertinamas atitikimas tarp teorijos ir eksperimento.

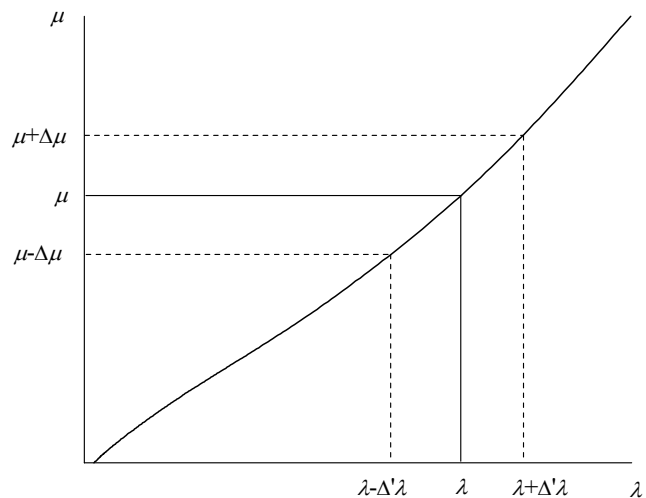
### 9.10. Kontroliniai klausimai

1. Elektromagnetinės spinduliuotės sklaidos sąvoka. Klasikinė ir Komptono sklaida.
2. Energijos ir judesio kiekio tvermės dėsniai Komptono sklaidos atveju. Komptono efektas. Komptono formulė.
3. Sklaidos skerspjūvio sąvoka. Sklaidos skerspjūvio ir laisvojo kelio ryšys.
4. Klasikinės sklaidos skerspjūvio ir Komptono sklaidos skerspjūvio priklausymų nuo spinduliuotės dažnio ir sklaidos kampo bendrasis pavidalas.



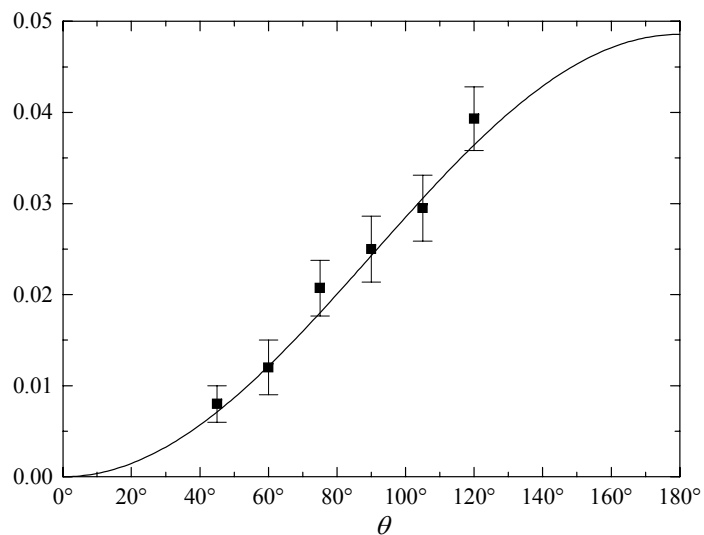
9.10 pav.  $\gamma$  spinduliuotės silpimo koeficiento geležyje priklauso nuo bangos ilgio.





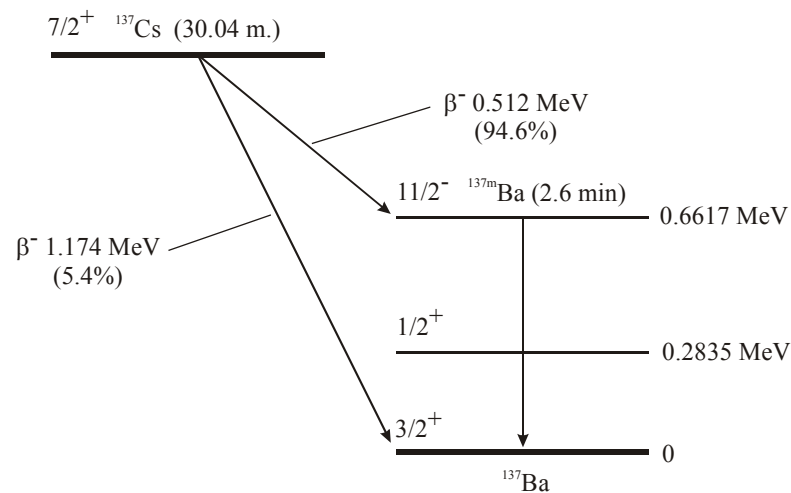
9.11 pav. Bangos ilgio matavimo paklaidos  $\Delta\lambda$  radimas, žinant silpimo koeficiento matavimo paklaidą  $\Delta\mu$  ir naudojantis 9.10 pav. (štrichas žymėjime  $\Delta\lambda$  naudojamas tam, kad bangos ilgio matavimo paklaida nebūtų painiojama su bangos ilgio pokyčiu dėl Komptono efekto  $\Delta\lambda$ ).

$\Delta\lambda, \text{\AA}$

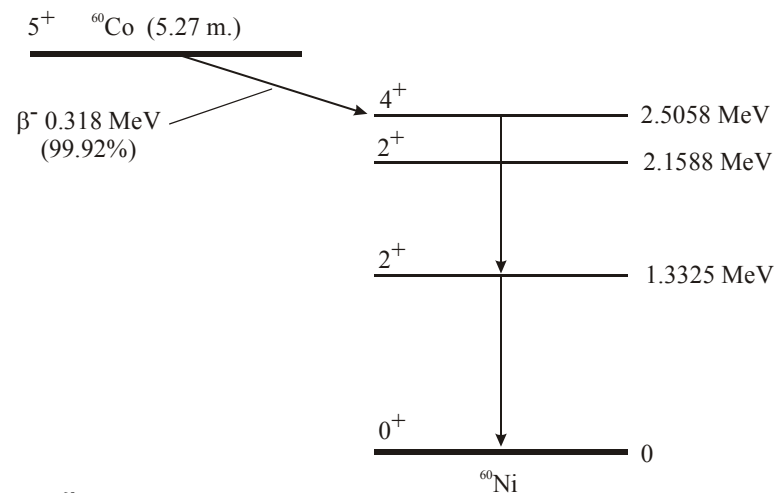


9.12 pav. Komptono efekto tyrimo rezultatų pavyzdys. Ištinė kreivė – tiksioji teorinė bangos ilgio pokyčio priklausoma nuo sklaidos kampo (formulė (9.2.5), kurioje  $\lambda_K = 0.024263 \text{ \AA}$ ). Vertikalūs brūkšneliai prie eksperimentinių taškų žymi bangos ilgio matavimo paklaidų intervalus (žr. 9.11 pav.).

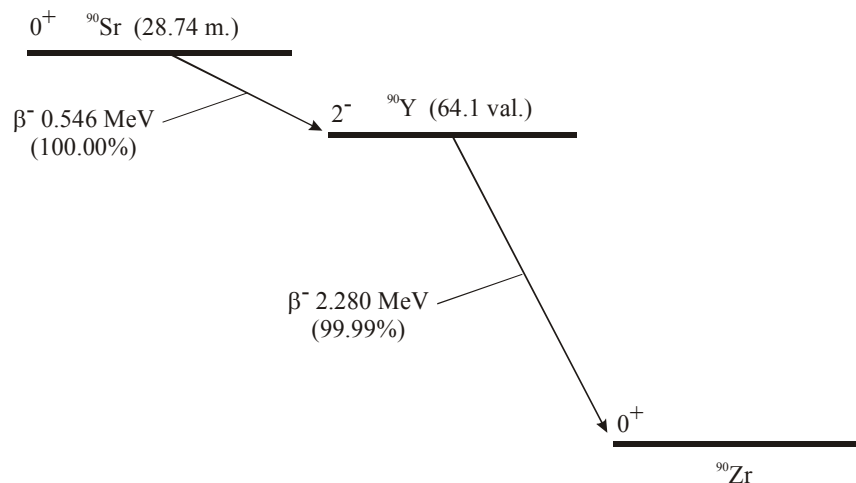
### Priedas A. Radioaktyviųjų nuklidų skilimo schemos



A-1 pav.  $^{137}\text{Cs}$  skilimo schema. Schemoje pateiktos pusėjimo trukmės, didžiausios  $\beta$  dalelių energijos,  $\beta$  skilimo kanalų tikimybės,  $^{137}\text{Ba}$  branduolio mažiausios energijos vertės ir intensyviausias kvantinis šuolis tarp  $^{137}\text{Ba}$  energijos lygmenų.



A-2 pav.  $^{60}\text{Co}$  skilimo schema. Schemoje parodyti pusėjimo trukmė, didžiausia  $\beta$  dalelių energija, šio  $\beta$  skilimo tikimybė,  $^{60}\text{Ni}$  branduolio mažiausios energijos vertės ir intensyviausi kvantiniai šuoliai tarp  $^{60}\text{Ni}$  energijos lygmenų.



A-3 pav.  $^{90}\text{Sr}$  ir  $^{90}\text{Y}$  skilimo schema. Schemoje pateiktos pusėjimo trukmė, didžiausios  $\beta$  dalelių energijos ir šių  $\beta$  skilimų tikimybės.

## Priedas B. Matavimo duomenų tiesinis aproksimavimas

### B.1. Uždavinio formuluotė

Tiriant įvairius fizikinius reiškinius, dažnai sutinkamos tiesinės ir eksponentinės priklausos. Pvz., radioaktyviojo bandinio branduolių skilimų skaičius per tam tikrą fiksuotą laiko intervalą  $\Delta t$  mažėja eksponentiškai (pagrindinis radioaktyviojo skilimo dėsnis):

$$\Delta N(t) = \Delta N_0 e^{-\lambda t}; \quad (\text{B.1.1})$$

čia  $t$  yra laikas,  $\Delta N(t)$  yra skilusių branduolių skaičius laiko intervale nuo  $t - \Delta t$  iki  $t$ ,  $\Delta N_0$  yra skilusių branduolių skaičius laiko intervale nuo  $t = -\Delta t$  iki  $t = 0$ ,  $\lambda$  yra skilimo konstanta. Kitas pavyzdys: jonizuojančiosios spinduliuotės intensyvumas ( $I$ ), kai spinduliuotė praeina kažkokią medžiagą (sugėrikli), dažnai yra eksponentinė sugėriklio storio funkcija:

$$I(x) = I_0 e^{-\mu x}; \quad (\text{B.1.2})$$

čia  $I_0$  yra pradinis intensyvumas (t.y., intensyvumas, kai tarp šaltinio ir detektoriaus nėra sugėriklio),  $\mu$  yra silpimo koeficientas,  $x$  yra medžiagos storis. Tiesinės priklausos pavyzdys yra Geigerio ir Miulerio skaitiklio registruojamų dalelių skaičiavimo spartos priklausoma nuo įtampos gulstės srityje (žr. 8.6 pav.).

Laboratoriniame darbe Nr. 5 reikia rasti (B.1.1) formulės koeficientus  $\Delta N_0$  ir  $\lambda$ , o darbuose Nr. 6 ir 7 reikia rasti (B.1.2) formulės koeficientus  $I_0$  ir  $\mu$ . Priklausomai nuo matavimų paklaidų didumo, šį uždavinį galima išspręsti grafiškai arba analiziškai (aproksimuojant mažiausiųjų kvadratų metodu). Tačiau, nepriklausomai nuo matavimo paklaidų didumo, tiksliausi rezultatai gaunami mažiausiųjų kvadratų metodu. Žemiau pateiktas šio metodo aprašymas. Šis aproksimavimo metodas yra standartinis; jis yra realizuotas daugelyje duomenų analizės programų (pvz., *Microcal Origin*).

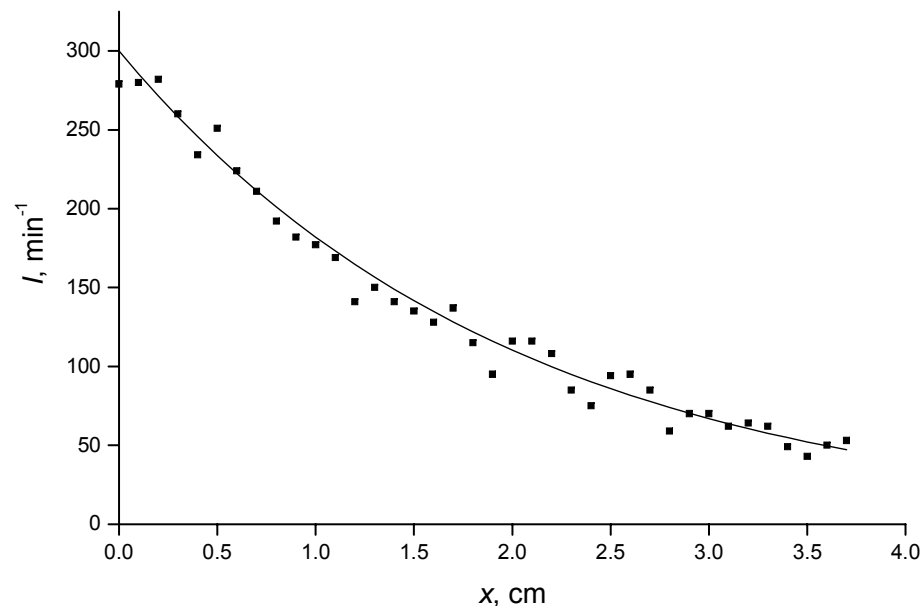
B-1 pav. pavaizduotas eksponentinės funkcijos (B.1.2) ir atitinkamų matavimų rezultatų pavyzdys. Šiuo atveju intensyvumas  $I$  – tai  $\gamma$  kvantų skaičius, kurį užregistravo skaitiklis per 1 min. Tikrasis dydžių  $I$  ir  $x$  sąryšis (B.1.2) pavaizduotas ištisine linija, o matavimų duomenys – atskirais taškais. Šiame pavyzdyje tikroji silpimo koeficiento vertė yra  $\mu = 0.5 \text{ cm}^{-1}$ , o tikroji pradinio intensyvumo vertė yra  $I_0 = 300 \text{ min}^{-1}$ . Tikslas – rasti parametrus  $\mu$  ir  $I_0$  ir jų pasikliautinuosius intervalus, kai turime tik matavimų duomenis. Visų pirma logaritmuojame funkciją (B.1.2):

$$\ln I = \ln I_0 - \mu x. \quad (\text{B.1.3})$$

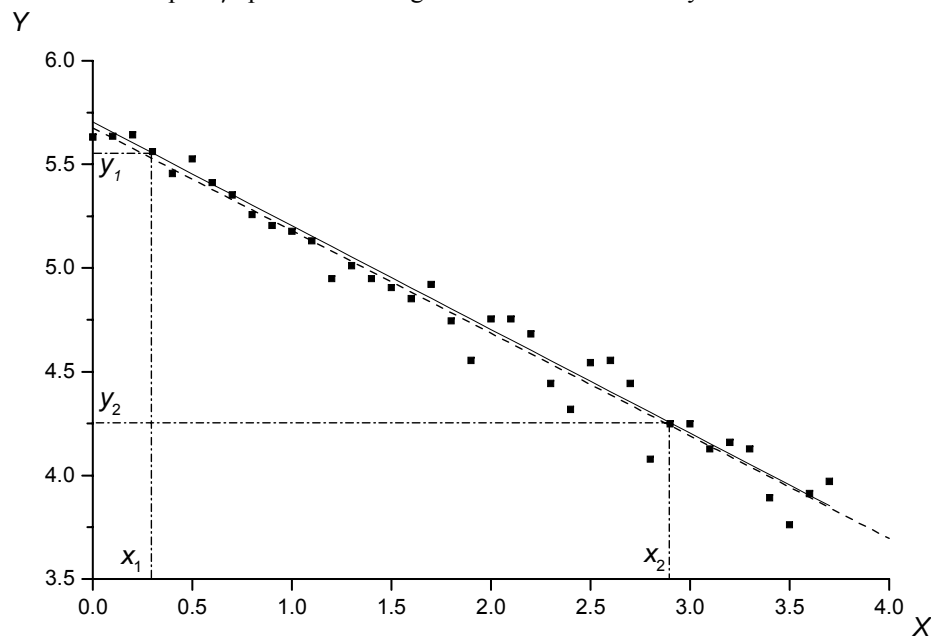
(B.1.3) yra tiesės lygtis, kurią apibendrintu pavidalu galima užrašyti šitaip:

$$y = A + B \cdot x \quad (\text{B.1.4})$$

(šiuo atveju  $y = \ln I$ ,  $A = \ln I_0$ ,  $B = -\mu$ ). Koeficientas  $B$  vadinamas tiesės **posvyriu** arba **polinkiu** arba **krypties koeficientu**. Šios funkcijos pavyzdys bei atitinkami matavimo duomenų natūralieji logaritmai pavaizduoti B-2 pav. Kaip



B-1 pav.  $\gamma$  spinduliuotės sugerties matavimo duomenys ir teorinė kreivė.



B-2 pav. Duomenų, kurie pavaizduoti B-1 pav., natūralieji logaritmai

matome, logaritnavimas “ištiesino” kreivę. Netiesinį uždavinį pavyko suformuluoti kaip tiesinį uždavinį, kurio sprendimas yra paprastesnis.

Kadangi tiesės koeficientus reikia skaičiuoti keliuose laboratoriniuose darbuose, kuriuose tiesės koeficientų prasmė yra skirtinga, toliau bus naudojama bendroji formulė (B.1.4). Norint pritaikyti pateiktąsias formules konkrečiam atvejui,  $y$  ir  $x$  reikia pakeisti matuojamųjų dydžių žymėjimais (pvz.,  $\ln \Delta N$  ir  $t$ ), o koeficientus  $A$  ir  $B$  – skaičiuojamųjų parametrų žymėjimais (pvz.,  $\ln \Delta N_0$  ir  $-\lambda$ ).

## B.2. Tiesės koeficientų grafinis radimas

Jeigu visi matavimai būtų idealiai tikslūs, tuomet visi taškai B-2 pav. priklausytų tiesei, kuri pavaizduota ištisine linija. Tokiu atveju koeficientus  $A$  ir  $B$  galima būtų rasti, naudojant bet kuriuos du matavimus. Taip yra todėl, kad tiesei nubrėžti pakanka turėti bet kuriuos du jos taškus. Pvz., galima pasirinkti taškus, kurių abscisės B-2 pav. pažymėtos  $x_1$  ir  $x_2$ , o ordinatės  $y_1$  ir  $y_2$ . Pagal (B.1.4) formulę, šie keturi dydžiai susiję dviem lygtim

$$\begin{cases} y_1 = A + Bx_1, \\ y_2 = A + Bx_2. \end{cases} \quad (\text{B.2.1})$$

Tai yra dviejų pirmosios eilės tiesinių algebrinių lygčių sistema su dviem nežinomaisiais  $A$  ir  $B$ . Pagal pirmąją šios sistemos lygtį,

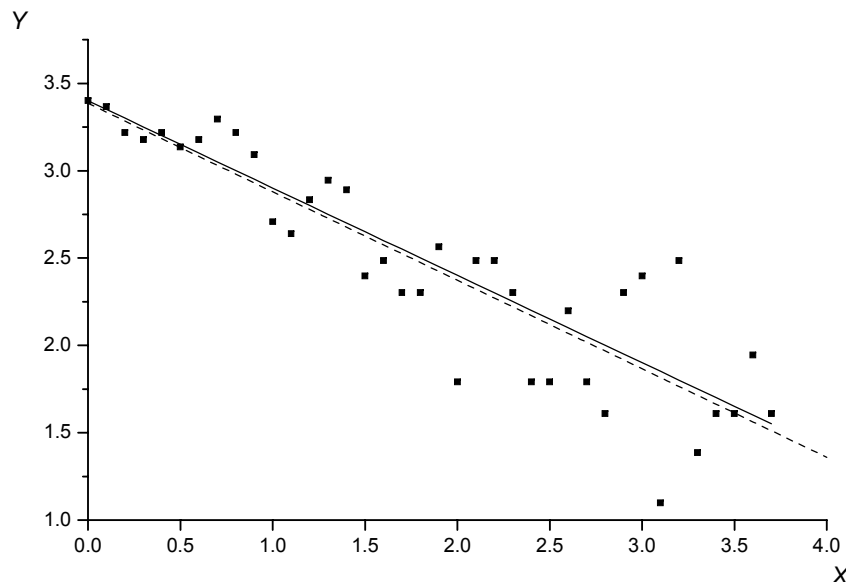
$$A = y_1 - Bx_1. \quad (\text{B.2.2a})$$

Įrašę šią koeficiento  $A$  išraišką į lygčių sistemos (B.2.1) antrąją lygtį ir išreiškę  $B$ , randame

$$B = \frac{y_2 - y_1}{x_2 - x_1}. \quad (\text{B.2.2b})$$

T.y., norint rasti tiesės posvirį  $B$ , pakanka išmatuoti atstumus  $|y_2 - y_1|$  ir  $|x_2 - x_1|$  (žr. B-2 pav.), padalinti juos vieną iš kito ir atsižvelgti į tiesės polinkio kryptį (jeigu  $y$  mažėja, didėjant  $x$ , tuomet posvyris yra neigiamas; priešingu atveju – teigiamas). Žinoma, grafiškai matuojant šiuos atstumus, reikia atsižvelgti į vienetus, kurie naudojami  $X$  ir  $Y$  ašyse. Pvz., jeigu 1 cm ant  $X$  ašies atitinka 10 s laiko intervalą, o su liniuote išmatuotas atstumas lygus 5 cm, tuomet (B.2.2b) formulėje vietoj  $x_2 - x_1$  reikia rašyti 50 s (o ne 5 cm). Žinant koeficientą  $B$ , pagal (B.2.2a) formulę galima apskaičiuoti ir koeficientą  $A$ . Tačiau koeficientą  $A$  galima rasti dar paprasčiau: jis lygus  $y$  vertei, kai  $x = 0$  (žr. (B.1.4) lygtį). T.y., koeficiento  $A$  vertė – tai atkarpa, kurią tiesė atkerta  $Y$  ašyje (pvz., B-2 pav. atveju  $A \approx 5.7$ ).

Praktikoje fizikinių dydžių matavimai niekada nebūna idealiai tikslūs. Todėl net ir tuo atveju, kad tiriamųjų dydžių tikrasis sąryšis yra tiesinis, išmatuotieji taškai niekada neguli ant vienos tiesės. Tačiau, jeigu taškų “išsibarstymas” nėra didelis ir yra akivaizdu, kad jie pasiskirstę arti kažkokios tiesės (kaip B-2 pav.), tuomet koeficientus  $A$  ir  $B$  galima apytiksliai įvertinti



B-3 pav. Užregistruotų per laiko vienetą dalelių skaičiaus natūraliojo logaritmo prieklausia nuo sugėriklio sluoksnio storio, esant mažam spindulių intensyvumui

grafiniu metodu. Tokiu atveju tiesė brėžiama iš akies, o po to koeficientai  $A$  ir  $B$  apskaičiuojami aukščiau aprašytu būdu (pagal (B.2.2b) ir (B.2.2a) formules). Tokio analizės metodo trūkumas yra tas, kad jis neleidžia įvertinti gautųjų  $A$  ir  $B$  verčių paklaidų. T.y., mes galime tik spėti, kad tikrosios  $A$  ir  $B$  vertės yra arti rastųjų verčių, tačiau negalime kiekybiškai nusakyti tą „artumą“. Be to, toks metodas taikytinas tik tuomet, kai matavimo duomenų „išsibarstymas“ yra mažas. Pvz., B-3 pav. atveju matavimo paklaidos yra žymiai didesnės, negu B-2 pav., todėl neįmanoma iš akies nubrėžti tiesę. Tokiu atveju matavimų duomenis reikia aproksimuoti analiziškai, naudojant mažiausiųjų kvadratų metodą, kuris aprašytas žemiau.

### B.3. Mažiausiųjų kvadratų principas

Tarkime, turime matavimo duomenų rinkinį, kurį sudaro argumento  $x$  vertės  $x_1, x_2, \dots, x_{n-1}, x_n$  ir atitinkamos išmatuotosios funkcijos  $y(x)$  vertės;  $n$  yra matavimų skaičius. Išmatuotąsias  $y$  vertes žymėsime  $y_1, y_2, \dots, y_n$ . Teorinė  $y$  vertė, kuri atitinka duotąjį argumento vertę  $x_k$ , yra nežinomųjų koeficientų  $A$  ir  $B$  funkcija (žr. (B.1.4)), todėl galima užrašyti  $y(x_k) = y(x_k; A, B)$  ( $k = 1, 2, \dots, n$ ). Koeficientų  $A$  ir  $B$  radimo uždavinys formuluojamas tokiu būdu. Labiausiai tikėtinos yra tos nežinomųjų koeficientų  $A$  ir  $B$  vertės, kurios atitinka reiškinio

$$F(A, B) \equiv \sum_{k=1}^n [y(x_k; A, B) - y_k]^2 \quad (\text{B.3.1})$$

absoliutųjį minimumą. Reiškiny (B.3.1) – tai teorinių verčių nuokrypių nuo išmatuotųjų verčių kvadratų suma (iš čia – pavadinimas „mažiausiųjų kvadratų metodas“).

Reiškiny (B.3.1) visuomet turi minimumą, esant tam tikroms tiksliai apibrėžtomis  $A$  ir  $B$  vertėms. Tačiau, net jeigu teorinės funkcijos  $y(x)$  pavidalas tiksliai atitinka tikrąjį matuojamųjų dydžių  $y$  ir  $x$  sąryšį, šios optimalios  $A$  ir  $B$  vertės, kurios atitinka kvadratų sumos  $F$  minimumą, nebūtinai sutampa su tikrosiomis  $A$  ir  $B$  vertėmis. Taip yra dėl matavimų paklaidų. Mažiausiųjų kvadratų metodu galima rasti tik koeficientų  $A$  ir  $B$  labiausiai tikėtinas vertes. Kad būtų aišku, jog turimos omenyje mažiausiųjų kvadratų metodu rastosios  $A$  ir  $B$  vertės, o ne tikrosios vertės, naudojama koeficiento **įvertis** sąvoka. Teorinio modelio koeficiento **įvertis** – tai pagal matavimų duomenis apskaičiuotoji to koeficiento vertė.

Viskas, kas aukščiau pasakyta apie mažiausiųjų kvadratų metodą, tinka ne vien tuo atveju, kai teorinė funkcija  $y(x)$  yra tiesė. Nepriklausomai nuo šios funkcijos pavidalo ir nuo nežinomųjų koeficientų skaičiaus, reikia minimizuoti (B.3.1) pavidalo reiškinį. Tačiau tuo atveju, kai  $y(x)$  yra tiesė, šį uždavinį galima išspręsti analiziškai (t.y.,  $A$  ir  $B$  įverčius galima išreikšti elementariomis formulėmis), o netiesinės funkcijos atveju šį uždavinį galima išspręsti tik skaitmeniškai (nuosekliųjų artinių metodu, panaudojant kompiuterį). Netiesinis aproksimavimas aprašytas prieduose C ir D.

Jeigu  $y(x)$  yra tiesinė funkcija (B.1.4), tuomet kvadratų suma (B.3.1) yra tokio pavidalo:

$$\begin{aligned} F(A, B) &\equiv \sum_{k=1}^n (A + Bx_k - y_k)^2 = \\ &= nA^2 + B^2 \sum_{k=1}^n x_k^2 + \sum_{k=1}^n y_k^2 + 2AB \sum_{k=1}^n x_k - 2A \sum_{k=1}^n y_k - 2B \sum_{k=1}^n x_k y_k. \end{aligned} \quad (\text{B.3.2})$$

Kaip žinoma iš matematinės analizės kurso, kelių kintamųjų funkcijos minimumo taške jos dalinės išvestinės visų kintamųjų atžvilgiu yra lygios nuliui. Prilyginus nuliui reiškinio (B.3.2) dalines išvestines  $A$  ir  $B$  atžvilgiu, gaunama dviejų tiesinių algebrinių lygčių sistema, kurios nežinomieji yra koeficientai  $A$  ir  $B$ . Išsprendus šią sistemą, gaunami šie  $A$  ir  $B$  įverčiai:

$$A = \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n y_k - \frac{B}{n} \sum_{k=1}^n x_k; \quad (\text{B.3.3a})$$

$$B = \frac{n \sum_{k=1}^n x_k y_k - \left( \sum_{k=1}^n x_k \right) \left( \sum_{k=1}^n y_k \right)}{n \sum_{k=1}^n x_k^2 - \left( \sum_{k=1}^n x_k \right)^2}. \quad (\text{B.3.3b})$$

B-2 ir B-3 pav. punktyrinės linijos atitinka tieses, kurių koeficientai apskaičiuoti pagal (B.3.3a,b) formules. B-3 pav. atveju apskaičiuotoji tiesė šiek tiek labiau skiriasi nuo tikrosios priklausos (išsitiesinė linija), negu B-2 pav. atveju, nes B-3 pav. atveju matavimų santykinės paklaidos yra didesnės, negu B-2 pav.

#### B.4. Koeficientų pasikliautinieji intervalai

Matematinės statistikos metodais įrodoma, kad tuo atveju, kai atskirų matavimų paklaidos yra pasiskirsčiusios pagal Gauso (normalųjį) skirstinį ir yra apytiksliai vienodo didumo visiems matavimams, o teorinio modelio matematinis pavidalas pakankamai tiksliai aprašo tiriamąjį reiškinį, tuomet mažiausiųjų kvadratų metodu apskaičiuotos koeficientų vertės yra labiausiai tikėtinos<sup>1</sup>. Tačiau šis teiginys nieko nesako apie šių verčių patikimumo laipsnį. Tai galima suprasti, pasinaudojus tokiu pavyzdžiu. Tarkime, kad atlikti du matavimų rinkiniai, kurių metu buvo tiriamas tas pats reiškinys (pvz.,  $\gamma$  spinduliuotės sugertis medžiagoje) tomis pačiomis sąlygomis (t.y., naudojant tą patį radioaktyvųjį šaltinį, tuos pačius sugėriklius, tą patį skaitiklį ir tą pačią matavimo geometriją), tačiau pirmuoju atveju vieno matavimo trukmė buvo 1 min, o kitu atveju ji buvo 10 kartų trumpesnė (6 s). Todėl pirmuoju atveju vidutinis užregistruotų  $\gamma$  kvantų skaičius per vieną matavimą yra 10 kartų didesnis. Abiem atvejais spinduliuotės intensyvumo  $I$  teorinę priklausą nuo medžiagos sluoksnio storio  $x$  nusako (B.1.2) formulė, o intensyvumo logaritmo priklausą nuo  $x$  nusako tiesinė funkcija (B.1.3), tačiau pirmuoju atveju  $I_0$  vertė yra 10 kartų didesnė. Pvz., pirmąjį matavimų rinkinį galėtų atitikti B-2 pav., o antrąjį – B-3 pav. Aišku, kad antruoju atveju modelio koeficientų ( $A = \ln I_0$  ir  $B = -\mu$ ) įverčių tikslumas turėtų būti mažesnis. Tai nereiškia, kad antruoju atveju  $A$  ir  $B$  įverčiai būtinai labiau skiriasi nuo tikrųjų verčių, negu pirmuoju atveju (gali atsitikti ir atvirkščiai), tačiau tai reiškia, kad, pakartojus abu matavimo rinkinius pakankamai daug kartų (pvz., išmatavus 100 kreivių naudojant 1 min intervalus ir 100 kreivių naudojant 6 s intervalus) ir kiekvieną duomenų rinkinį išanalizavus mažiausiųjų kvadratų metodu, koeficientų įverčiai, kurie gauti pagal 1 min matavimų duomenis, būtų “susitelkę” arčiau

tikrųjų verčių, negu įverčiai, kurie gauti pagal 6 s matavimų duomenis. Pvz., jeigu tikroji posvyrio  $B$  vertė lygi  $-0.5 \text{ cm}^{-1}$ , tuomet 1 min matavimo trukmės atveju (B-2 pav.) maždaug 70% visų posvyrio  $B$  įverčių priklausytų intervalui  $-0.486 < B < -0.514$ , o 6 s matavimo trukmės atveju (B-3 pav.) tam pačiam intervalui priklausytų tik maždaug 25% koeficiento  $B$  įverčių. T.y., antruoju atveju įverčių standartiniai nuokrypiai yra didesni (standartinio nuokrypio apibrėžimas pateiktas 4.2 poskyryje).

Kadangi koeficiento (pvz.,  $A$  arba  $B$ ) įverčio skirstinys yra artimas Gauso skirstiniui, tai jo standartinis nuokrypis nusako to koeficiento **68.3% pasikliautinąjį intervalą** pusplotį (žr. 4.5 poskyrį). T.y., pažymėjus koeficientų  $A$  ir  $B$  įverčių standartinius nuokrypius  $\Delta A$  ir  $\Delta B$ , egzistuoja 68.3% tikimybė, kad tikrosios tų koeficientų vertės priklauso intervalams  $[A - \Delta A; A + \Delta A]$  ir  $[B - \Delta B; B + \Delta B]$ . Vadinas, egzistuoja  $1 - 0.683 = 0.317 = 31.7\%$  tikimybė, kad tikroji koeficiento vertė yra už šio intervalo ribų. Praktiniams pritaikymams tokia klaidos tikimybė dažniausiai yra pakankamai maža, todėl įverčio standartinis nuokrypis vadinamas to **įverčio paklaida** ir skaičiavimo rezultatai pateikiami tokiu būdu:  $A \pm \Delta A$  ir  $B \pm \Delta B$ . Kaip išplaukia iš Gauso skirstinio savybių (žr. 4.5 poskyrį), 95% pasikliautinis intervalas yra dvigubai platesnis:  $[B - 2\Delta B; B + 2\Delta B]$  (klaidos tikimybė yra  $100\% - 95.4\% = 4.6\%$ ), o 99.7% pasikliautinis intervalas yra trigubai platesnis:  $[B - 3\Delta B; B + 3\Delta B]$  (“trijų sigma taisyklė”; klaidos tikimybė lygi tik 0.3%).

Norint praktikoje pritaikyti aukščiau pateiktus teiginius, reikia turėti būdą rasti koeficiento įverčio standartinį nuokrypį. Tiesiogiai įvertinti šį nuokrypį (išmatuoti tą patį duomenų rinkinį tomis pačiomis sąlygomis daug kartų, kiekvieną kartą mažiausiųjų kvadratų metodu apskaičiuoti koeficientų įverčius, o paskui pritaikyti dispersijos ir standartinio nuokrypio apibrėžimus (4.2.5) ir (4.2.4)) dažniausiai yra praktiškai neįmanoma. Jeigu matavimų skaičius yra pakankamai didelis, tuomet matematinės statistikos metodai leidžia apytiksliai įvertinti koeficientų įverčių standartinius nuokrypius pagal vienintelį matavimų rinkinį. Tuo atveju, kai teorinis modelis yra tiesinė funkcija (B.1.4), koeficientų  $A$  ir  $B$  standartiniai nuokrypiai yra apytiksliai lygūs

$$\Delta A = \sqrt{\frac{F_{\min}}{n(n-2)} \left( 1 + \frac{\bar{x}^2}{D_x} \right)}, \quad (\text{B.4.1a})$$

$$\Delta B = \sqrt{\frac{F_{\min}}{n(n-2)D_x}}; \quad (\text{B.4.1b})$$

čia  $F_{\min}$  yra mažiausioji kvadratų sumos (B.3.2) reikšmė (t.y., kvadratų suma, kai koeficientai  $A$  ir  $B$  yra lygūs savo optimaliosioms vertėms (B.3.3a,b)),  $\bar{x}$  yra argumento verčių vidurkis:

<sup>1</sup> Jeigu matuojamasis dydis yra branduolių skilimų skaičius arba skilimo metu išspinduliuotų dalelių skaičius, tuomet paklaidos pasiskirsčiusios ne pagal Gauso, o pagal Puasono skirstinį, o jų didumas priklauso nuo spinduliuotės intensyvumo (žr. 4.2 ir 4.3 poskyrius), tačiau praktikoje tai dažniausiai neturi didelės reikšmės.

$$\bar{x} = \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n x_k, \quad (\text{B.4.2})$$

o  $D_x$  yra argumento verčių dispersija:

$$D_x = \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n (x_k - \bar{x})^2 = \frac{\sum_{k=1}^m x_k^2}{n} - \bar{x}^2. \quad (\text{B.4.3})$$

Formulėse (B.4.1a) ir (B.4.1b) akivaizdu, kad, kuo tikslesni matavimai (t.y., kuo mažesnė kvadratų suma  $F_{\min}$ ), tuo siauresni koeficientų  $A$  ir  $B$  pasikliautiniai intervalai. Žemiau pateikti kvadratų sumos vertės ir tiesės koeficientų 68.3% pasikliautiniai intervalai B-2 pav. ir B-3 pav. atvejais:

B-2 pav.:  $F_{\min} = 0.3174$ ;  $A = 5.676 \pm 0.0299$ ,  $B = -0.495 \pm 0.0139$ ;

B-3 pav.:  $F_{\min} = 3.086$ ;  $A = 3.386 \pm 0.0931$ ,  $B = -0.507 \pm 0.0433$ .

Jeigu B-2 ir B-3 pav. atitinka sugerties tyrimo duomenis, o medžiagos storis išreikštas centimetrais, tuomet B-2 pav. atveju sugerties koeficientas lygus  $\mu = (0.495 \pm 0.0139) \text{ cm}^{-1}$ , o B-3 pav. atveju  $\mu = (0.507 \pm 0.0433) \text{ cm}^{-1}$ .

Tiesės koeficientų standartinių nuokrypių įverčiai (B.4.1a,b) yra tuo patikimesni, kuo didesnis matavimų skaičius. Matavimų rezultatai gali atsitiktinai atsidurti arti tiesės, kuri žymiai skiriasi nuo tikrosios. Tuomet kvadratų suma  $F_{\min}$  yra maža, ir standartinių nuokrypių įverčiai (B.4.1a,b) gali būti žymiai mažesni už koeficientų  $A$  ir  $B$  įverčių tikruosius nuokrypius nuo teisingųjų verčių. Mažėjant matavimų skaičiui, tokio įvykio tikimybė auga. Todėl aproksimuojamų taškų skaičius turi būti nemažesnis už 10.

## Priedas C. Matavimo duomenų netiesinis aproksimavimas

### C.1. Naudojamoji terminologija ir uždavinio formuluotė

Žemiau aprašytas tik dviejų kintamųjų atvejis – vieno nepriklausomojo ( $x$ ) ir vieno priklausomojo ( $y$ ). Eksperimentiškai kontroliuojamas kintamasis  $x$  (pvz., iš anksto žinomas metalo plokštelės storis) bus vadinamas **nepriklausomuoju kintamuoju**, o išmatuotasis dydis (pvz., pro plokštelę praėjusios radioaktyviosios spinduliuotės intensyvumas) bus vadinamas sistemos **atsaku**. **Modelis** – tai funkcija  $y(x)$ , kuri leidžia teoriškai numatyti kiekvieno atsako vertę  $y_k = y(x_k)$  ( $k = 1, 2, \dots, n$ ), kai žinomos visų modelio parametrų vertės  $p_i$  ( $i = 1, 2, \dots, m$ ); čia  $n$  žymi matavimų skaičių, o  $m$  – modelio parametrų skaičių. Matavimo duomenys – tai nepriklausomojo kintamojo verčių  $x_k$  ir atitinkamų išmatuotųjų atsakų  $v_k$  rinkinys.  $k$ -tojo teorinio atsako ir atitinkamo išmatuotojo atsako skirtumas  $y_k - v_k$  vadinamas  $k$ -tuoju **nuokrypiu**. Kalbant apie netiesinį aproksimavimą, modelio parametrų rinkinį patogiau įsivaizduoti kaip vieno stulpelio ir  $m$  eilučių matricą, kurią sudaro parametrų vertės  $p_i$  ( $i = 1, 2, \dots, m$ ). Šis skaičių stulpelis vadinamas **parametrų vektoriumi** ir žymimas **p** (toliau vektorių žymėjimai bus rašomi storu šriftu ir mažosiomis raidėmis). Teoriniai atsakai (vadinasi, ir nuokrypiai) yra parametrų verčių funkcijos:  $y_k = y_k(\mathbf{p})$ . Aproksimavimo tikslas – rasti toki **optimalųjį** parametrų vektorių  $\mathbf{p}_{opt}$ , kuris atitinka mažiausią skirtumą tarp išmatuotųjų atsakų ir numatytųjų (teorinių, apskaičiuotųjų) atsakų. Atitinkami nuokrypiai  $y_k(\mathbf{p}_{opt}) - v_k$  vadinami **liekamaisiais nuokrypiais**.

Prieš kalbant apie aproksimavimo metodus, reikia matematiškai apibrėžti sąvoką “skirtumas tarp duomenų ir teorinės kreivės”. Tai galima atlikti, naudojant geometrinę analogiją. Jeigu mes įsivaizduotume išmatuotų atsakų rinkinį kaip  $n$ -matį vektorių  $\mathbf{v}$ , kurio komponentės yra  $v_k$  ( $k = 1, 2, \dots, n$ ), o teorinių atsakų rinkinį – kaip  $n$ -matį vektorių  $\mathbf{y}$ , kurio komponentės yra  $y_k$  ( $k = 1, 2, \dots, n$ ), tuomet atstumas tarp šių vektorių lygus  $\sqrt{F}$ , kur

$$F \equiv \sum_{k=1}^n [y_k(\mathbf{p}) - v_k]^2. \quad (\text{C.1.1})$$

Dydis  $F$  vadinamas nuokrypių kvadratų suma arba tiesiog **kvadratų suma** ir naudojamas kaip aproksimacijos gerumo kriterijus. Aproksimacija yra tuo geresnė, kuo mažesnis  $F$ , t.y., kuo mažesnis “atstumas”  $\sqrt{F}$ . Aproksimacija yra **optimali**, jeigu  $F$  pasiekė savo mažiausią įmanomą reikšmę  $F_{opt} \equiv F(\mathbf{p}_{opt})$ .

Aukščiau suformuluotasis optimaliosios aproksimacijos principas yra vadinamas **mažiausiųjų kvadratų principu**.

Vietoj kvadratų sumos  $F$  aproksimavimo kokybės įvertinimui dažnai naudojamas kitas dydis, kuris žymimas  $\chi^2$  (“ $\chi$ ” yra graikų abėcėlės raidė “chi”):

$$\chi^2 \equiv \frac{F}{n - m}. \quad (\text{C.1.2})$$

Šio dydžio prasmė paaiškinta C.4 poskyryje.

### C.2. Svorinių daugiklių pasirinkimas

Aproximacijos gerumo kriterijaus vaidmenį gali atlikti ir *santykinių* nuokrypių kvadratų suma. T.y., kvadratų sumą  $F$  galima apibrėžti ir šitaip:

$$F \equiv \sum_{k=1}^n \left[ \frac{y_k(\mathbf{p}) - v_k}{v_k} \right]^2. \quad (\text{C.2.1})$$

Bendriausiu atveju kvadratų suma  $F$  išreiškiama taip:

$$F \equiv \sum_{k=1}^n w_k [y_k(\mathbf{p}) - v_k]^2, \quad (\text{C.2.2})$$

kur  $w_k$  ( $k = 1, 2, \dots, n$ ) yra *svoriniai daugikliai*, atitinkantys kiekvieną atsaką. Reiškiny (C.1.1) atitinka  $w_k = 1$ , o reiškiny (C.2.1) –  $w_k = 1/v_k^2$ .

Siekiant kuo pilniau išnaudoti matavimo duomenis, svorinius daugiklius reikia parinkti taip, kad visų eksperimentinių taškų indėlis į  $F_{opt}$  reikšmę būtų apytiksliai vienodas. Kadangi, tinkamai parinkus aproksimavimo modelį, eksperimentinio taško vidutinis kvadratinis nuokrypis nuo optimaliosios teorinės kreivės apytiksliai nusako jo matavimo paklaidą, tai svorinius daugiklius geriausia parinkti taip, kad jie būtų atvirkščiai proporcingi taškų paklaidų kvadratams. Pvz., tarkime, kad, kintant nepriklausomajam kintamajam nuo minimalios iki maksimalios vertės, matuojamasis dydis sumažėja 100 kartų, o jo *santykinė* paklaida beveik nekinta (t.y., kiekvieno taško absoliutinė paklaida vidutiniškai proporcinga matavimo rezultatui). Pasirinkus svorinio daugiklio reikšmę  $w_k = 1$ , pagrindinį indėlį į  $F$  reikšmę įneš tie taškai, kurių *absoliutinė* paklaida yra didžiausia, t.y., šiame pavyzdyje – tie, kurie atitinka mažas nepriklausomojo kintamojo vertes. Taškai, kurių absoliutinė paklaida yra žymiai mažesnė (šiame pavyzdyje – tie, kurie atitinka dideles nepriklausomojo kintamojo vertes) turės silpną įtaką  $F$  reikšmei, t.y., netgi dideli šių taškų pokyčiai, kurie eile arba daugiau viršija jų matavimo paklaidą, neturės žymios įtakos optimaliosioms parametrų vertėms. Tuo pačiu šie taškai praktiškai “išmetami” iš aproksimuojamųjų duomenų. Vadinasi, šiame pavyzdyje geriausia naudoti  $w_k = 1/v_k^2$ , nes tuomet kvadratų sumos dėmenų reikšmės yra apytiksliai vienodos. Taigi optimalus  $F$  skaičiavimo būdas priklauso nuo to, kaip matuojamojo dydžio paklaida susijusi su matavimo rezultatu. Jeigu eksperimentinio taško absoliutinė paklaida nepriklauso nuo jo vertės, tuomet kvadratų sumą geriausia skaičiuoti pagal (C.1.1) formulę, o jeigu ši paklaida apytiksliai proporcinga matavimo rezultatui, tuomet – pagal (C.2.1) formulę.

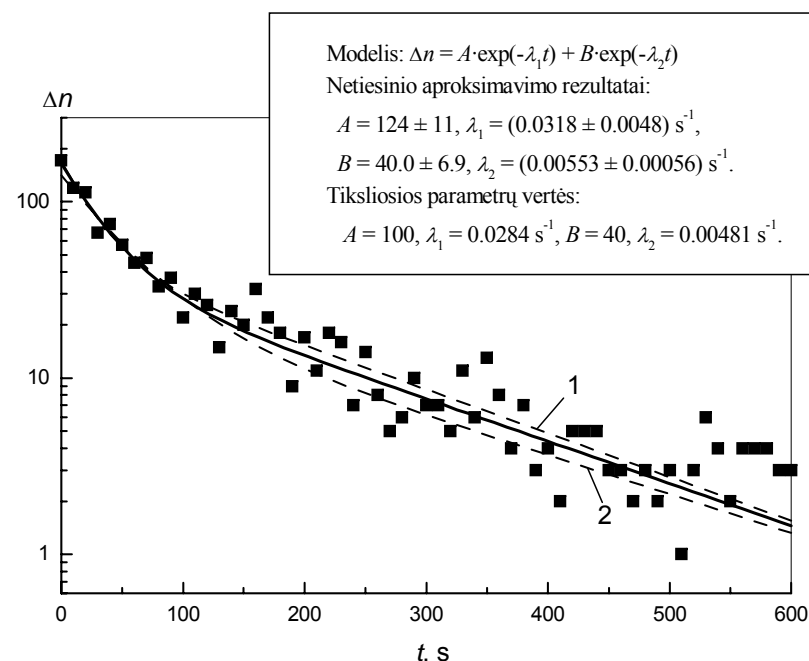
Jeigu matuojamasis dydis yra pasiskirstęs pagal Puasono skirstinį (pvz., radioaktyviojo skilimo metu išspinduliuotų dalelių skaičius), tuomet optimalioji svorinio daugiklio vertė yra  $1/v_k$ . Taip yra todėl, kad Puasono pasiskirstymo atveju kiekvieno taško standartinis nuokrypis nuo atitinkamo

statistinio vidurkio lygus šakniai iš pastarojo vidurkio (žr. (4.3.6) ir standartinio nuokrypio apibrėžimą (4.2.4)). Tokie svoriniai daugikliai toliau bus vadinami *statistiniais svoriniais daugikliais*. Šiuo atveju kvadratų suma lygi

$$F \equiv \sum_{k=1}^n \frac{[y_k(\mathbf{p}) - v_k]^2}{v_k}. \quad (\text{C.2.3})$$

Akiivaizdu, kad mažo registruojamo aktyvumo atveju, kai dalis eksperimentinių atsakų  $v_k$  yra lygūs nuliui, toks  $F$  skaičiavimo būdas yra netinkamas, nes tuomet kai kurie sumos (C.2.3) dėmenys turi nulį vardiklyje. Tokiu atveju reikia naudoti kvadratų sumos išraišką (C.1.1). Kvadratų sumos išraiška (C.2.3) toliau bus vadinama *statistine kvadratų suma*.

C-1 pav. iliustruoja svorinių daugiklių pasirinkimo įtaką aproksimavimo rezultatams, esant didelėms statistinėms matavimo duomenų fluktuacijoms. Kaip matyti šiame pavyzdyje, tinkamai parinkus svorinius daugiklius, galima padidinti aproksimavimo tikslumą.



C-1 pav. Sidabro izotopų  $^{108}\text{Ag}$  ir  $^{110}\text{Ag}$  mišinio radioaktyviojo skilimo kreivė. Ištinė linija – tai optimalioji teorinė kreivė (modelio formulė kartu su optimaliosiomis parametrų vertėmis ir jų paklaidomis pateiktos grafiko viršuje). Ši kreivė gauta, minimizuojant statistinę kvadratų sumą (C.2.3). Punktyrinės linijos nusako optimaliausias teorines kreives, kurios gautos, naudojant kitokias kvadratų sumos išraiškas:

1 – absoliutinio nuokrypio minimizavimas (kvadratų suma (C.1.1)). Parametrų vertės:

$$A = 121 \pm 8, \lambda_1 = (0.0365 \pm 0.0040) \text{ s}^{-1}, B = 47.9 \pm 7.4, \lambda_2 = (0.00572 \pm 0.00073) \text{ s}^{-1},$$

2 – santykinio nuokrypio minimizavimas (kvadratų suma (C.2.1)). Parametrų vertės:

$$A = 114 \pm 32, \lambda_1 = (0.0228 \pm 0.0067) \text{ s}^{-1}, B = 27.9 \pm 9.5, \lambda_2 = (0.00508 \pm 0.00080) \text{ s}^{-1}.$$

### C.3. Mažiausiųjų kvadratų principo matematinė formuluotė

Nesunku sudaryti lygčių sistemą atžvilgiu optimaliojo parametrų vektoriaus  $\mathbf{p}_{opt}$ . Kadangi funkcijos minimumo taške jos dalinės išvestinės visų argumentų atžvilgiu lygios nuliui, tai kvadratų sumos  $F(\mathbf{p}_{opt})$  minimumo sąlyga galima užrašyti šitaip:

$$\frac{\partial F}{\partial p_i} = 0 \quad (i = 1, 2, \dots, m). \quad (C.3.1)$$

Išrašę  $F$  išraišką (C.2.2) į (C.3.1), randame **normaliąją lygčių sistemą**:

$$\sum_{k=1}^n w_k [y_k(\mathbf{p}) - v_k] \frac{\partial y_k}{\partial p_i} = 0 \quad (i = 1, 2, \dots, m). \quad (C.3.2)$$

Tai yra  $m$  lygčių sistema atžvilgiu  $m$  optimaliųjų parametrų verčių. Ši lygčių sistema – tai mažiausiųjų kvadratų principo matematinė formuluotė.

Jeigu teoriniai atsakai  $y_k(\mathbf{p})$  netiesiškai priklauso nuo  $\mathbf{p}$ , tuomet ir lygtys (C.3.2) nėra tiesinės. Tuomet dažniausiai būna neįmanoma išspręsti jas analiziškai ir naudojamas iteracinis sprendimo metodas: pasirenkamas pradinis parametrų vektoriaus artinys, o po to žingsnis po žingsnio artėjama prie optimaliojo parametrų vektoriaus. Vienas toks žingsnis vadinamas **iteracija**. Įvairūs aproksimavimo metodai skiriasi tuo, koku būdu kiekvienoje iteracijoje skaičiuojamas sekantis parametrų vektoriaus artinys. Pasirinktas metodas gali turėti įtakos skaičiavimo greičiui ir bendram iteracijų skaičiui. Tačiau galutinis rezultatas ( $\mathbf{p}_{opt}$ ) nuo to nepriklauso (išskyrus tą atvejį, kai funkcija  $F(\mathbf{p})$  turi daugiau negu vieną minimumą).

### C.4. Modelio parametrų pasikliautinieji intervalai

Bendrosios pastabos apie tiesinio modelio parametrų pasikliautinuosius intervalus (žr. B.4 poskyrio pradžią) lieka galioti ir netiesinio modelio atveju. Tačiau netiesinio modelio atveju šių intervalų skaičiavimas yra sudėtingesnis. Modelio parametrų paklaidų skaičiavimas netiesinio aproksimavimo atveju aprašytas žemiau.

Tarkime, turime vieną eksperimentinių taškų rinkinį ir labai didelį skaičių optimaliųjų teorinių kreivių, kurios buvo gautos, daug kartų pakartojus tuos pačius matavimus tomis pačiomis sąlygomis ir kiekvieną rezultatų rinkinį aproksimavus duotoju modeliu. Jeigu kiekvienai kreivei apskaičiuotume kvadratų sumą, naudodami duotąjį eksperimentinių taškų rinkinį, tuomet rastume, kad didžioji dalis gautųjų kvadratų sumos reikšmių priklauso  $\chi_{opt}^2$  pločio intervalui

$$F_{opt} \leq F(\mathbf{p}) \leq F_{opt} + \chi_{opt}^2; \quad (C.4.1)$$

čia  $F_{opt}$  ir  $\chi_{opt}^2$  yra kvadratų sumos  $F$  ir dydžio  $\chi^2$  optimalios reikšmės, atitinkančios duotąjį matavimo duomenų rinkinį. Pasinaudojus  $\chi^2$  išraiška (C.1.2), galima užrašyti:

$$\chi_{opt}^2 \equiv \frac{F_{opt}}{n - m}, \quad (C.4.2)$$

Kaip bus parodyta toliau, (C.4.1) nelygybė aprašo  $m$ -mačio elipsoido formos sritį, kurios centras yra taške  $\mathbf{p} = \mathbf{p}_{opt}$  (šis taškas nusako duotojo duomenų rinkinio aproksimavimo rezultatus). Šio elipsoido projekcija į kiekvieno parametro verčių ašį nusako to parametro 68.3% pasikliautinąjį intervalą. Žinant dydį  $\chi_{opt}^2$ , šio intervalo plotį galima apskaičiuoti šitaip:

Funkcija  $F(\mathbf{p})$  išskleidžiama Teiloro eilute taško  $\mathbf{p}_{opt}$  aplinkoje ir atmetami visi aukštesnės negu antros eilės dėmenys. Matriciniame užrašyme šis skleidinys yra

$$F(\mathbf{p}_{opt} + \mathbf{s}) = F_{opt} + \mathbf{s}^T \cdot \mathbf{G} \cdot \mathbf{s}, \quad (C.4.3)$$

$$\mathbf{s} \equiv \mathbf{p} - \mathbf{p}_{opt}, \quad (C.4.4)$$

$\mathbf{s}^T$  yra transponuotas vektorius  $\mathbf{s}$  (t.y., skaičių eilutė, kurią sudaro tie patys skaičiai, kaip ir skaičių stulpelį  $\mathbf{s}$ ), o  $\mathbf{G}$  yra funkcijos  $F(\mathbf{p})$  antrųjų išvestinių taške  $\mathbf{p}_{opt}$  matrica. Ši matrica yra simetrinė, o jos elementai lygūs

$$G_{ij} = \left. \frac{\partial^2 F}{\partial p_i \partial p_j} \right|_{\mathbf{p} = \mathbf{p}_{opt}} \quad (i, j = 1, 2, \dots, m). \quad (C.4.5)$$

Išrašę  $F(\mathbf{p}_{opt} + \mathbf{s})$  išraišką (C.4.3) į nelygybę (C.4.1) (vietoj  $F(\mathbf{p})$ ), randame nelygybę, kurią tenkina vektorius  $\mathbf{s} = \mathbf{p} - \mathbf{p}_{opt}$ :

$$\mathbf{s}^T \cdot \mathbf{G} \cdot \mathbf{s} \leq \chi_{opt}^2. \quad (C.4.6)$$

Vektoriai  $\mathbf{p}$ , kurie tenkina šią sąlygą, yra viduje  $m$ -mačio elipsoido, kurio centras yra taške  $\mathbf{p} = \mathbf{p}_{opt}$  ir kurio projekcija į  $i$ -tojo parametro ašį yra atkarpa

$$p_{opt, i} - s_i \leq p_i \leq p_{opt, i} + s_i \quad (i = 1, 2, \dots, m), \quad (C.4.7)$$

kur  $p_{opt, i}$  yra  $i$ -tojo parametro optimalioji vertė (t.y., vektoriaus  $\mathbf{p}_{opt}$  projekcija į  $p_i$  ašį), o

$$s_i = \sqrt{G_{ii}^{-1} \chi_{opt}^2} = \sqrt{G_{ii}^{-1} F_{opt} / (n - m)} \quad (i = 1, 2, \dots, m). \quad (C.4.8)$$

Čia  $G_{ii}^{-1}$  ( $i = 1, 2, \dots, m$ ) yra atvirkštinės matricos  $\mathbf{G}^{-1}$  diagonaliniai elementai (matrica  $\mathbf{G}^{-1}$  vadinama **dispersijų ir kovariacijų matrica**). Dydis  $s_i$  ( $i = 1, 2, \dots, m$ ) nusako  $i$ -tojo parametro optimaliosios vertės standartinį nuokrypį, t.y., parametro įverčio paklaidą. Kadangi praktikoje dažniausiai galima laikyti, kad kiekvieno parametro statistinis skirstinys aprašomas Gauso tikimybės tankio funkcija (4.5.1), tai galima teigti, kad egzistuoja 68.3% tikimybė, jog duotojo parametro tikslioji vertė (statistinis vidurkis) priklauso intervalui (C.4.7), 95.4% tikimybė, kad ši vertė priklauso intervalui  $p_{opt, i} - 2s_i \leq p_i \leq p_{opt, i} + 2s_i$ , ir 99.7%, kad tikslioji vertė priklauso intervalui  $p_{opt, i} - 3s_i \leq p_i \leq p_{opt, i} + 3s_i$  (žr. 4.5 poskyrį).



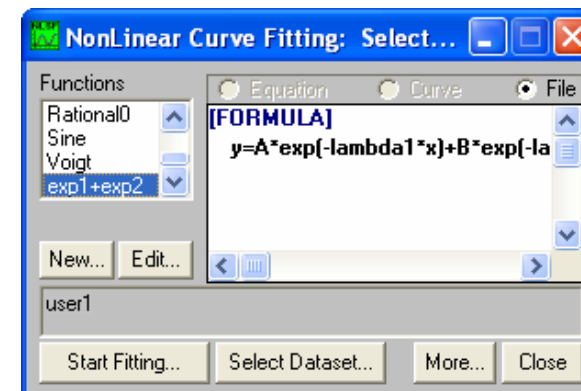
#### Priedas D. Netiesinis aproksimavimas, dirbant su programa Microcal Origin

Žemiau pateiktasis aprašymas yra skirtas tiems, kurie jau yra susipažinę su *Microcal Origin*. Šis aprašymas nėra pilnas: jame aptartas tik pats paprasčiausias – vieno priklausomojo ir vieno nepriklausomojo kintamojo – atvejis ir aprašyti tik pagrindiniai veiksmai, kuriuos gali tekti atlikti vartotojui. Šiame aprašyme remtasi *Origin* versija 7.0, tačiau jis tinka ir versijoms 4 – 6.

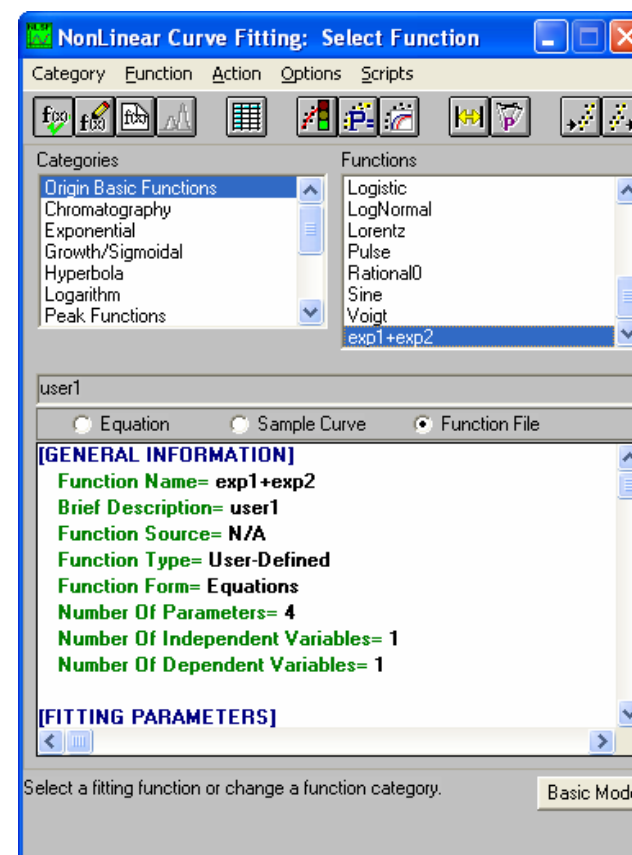
##### D.1. Aproksimavimo dialogo langas

Dirbant programos *Microcal Origin* vartotojo aplinkoje, netiesinio aproksimavimo dialogo langas atidaromas, pasirinkus meniu komandą **Analysis/Non-linear Curve Fit/Advanced Fitting Tool**. Egzistuoja du šio lango variantai. Jeigu minėtoji meniu komanda įvykdyta pirmą kartą nuo programos *Microcal Origin* instaliavimo, tuomet atidaromas supaprastintas šio lango variantas ("Basic Mode"), kuris pavaizduotas D-1 pav. Lankstesniam aproksimavimo proceso valdymui patogiau naudoti išplėstinį šio lango variantą (D-2 pav.). Jis išskviečiamas, spragtelėjus pele ant mygtuko "More..." (žr. D-1 pav.). Norint atstatyti pradinį lango pavidalą, reikia spragtelėti mygtuką "Basic Mode" (žr. D-2 pav.). Toliau bus kalbama apie išplėstinį aproksimavimo lango variantą.

Aproksimavimo dialogo lango viršuje yra meniu juosta su keturiais meniu (veiksmų grupėm): "Function", "Action", "Options" ir "Scripts" (žr. D-2 pav.). Šiuose meniu vartotojas pasirenka veiksmą (komandą), kurį ketina atlikti. Meniu "Function" pasirenkamas tais atvejais, kai ketinama atlikti veiksmus su aproksimuojančiom funkcijomis (modeliais), t.y., pasirinkti modelį, sukurti naują arba modifikuoti egzistuojančią funkciją, išmesti funkciją iš funkcijų sąrašo arba įtraukti į ją funkciją, kurios apibrėžimas yra faile. Meniu "Action" pasirenkamas tais atvejais, kai ketinama nurodyti, kuris duomenų rinkinys turi būti aproksimuojamas, pradėti aproksimavimo arba modeliavimo procesą arba atvaizduoti papildomą informaciją apie jau pasibaigusį aproksimavimo procesą. Meniu "Options" pasirenkamas tuomet, kai ketinama modifikuoti skaičiavimo parametrus, kurie valdo aproksimavimo procesą (pvz., parametrų kitimo ribas ir svorinių daugiklių skaičiavimo būdą). Meniu "Scripts" pasirenkamas tais atvejais, kai ketinama nurodyti parametrų pradines vertes arba apibrėžti komandas, kurios turi būti įvykdytos prieš pat aproksimavimo pradžią arba jam pasibaigus (šios komandos rašomos, naudojant *Origin*'o programavimo kalbą *Labtalk*).



D-1 pav. Netiesinio aproksimavimo dialogo lango pradinis variantas.



D-2 pav. Netiesinio aproksimavimo dialogo lango išplėstinis variantas.

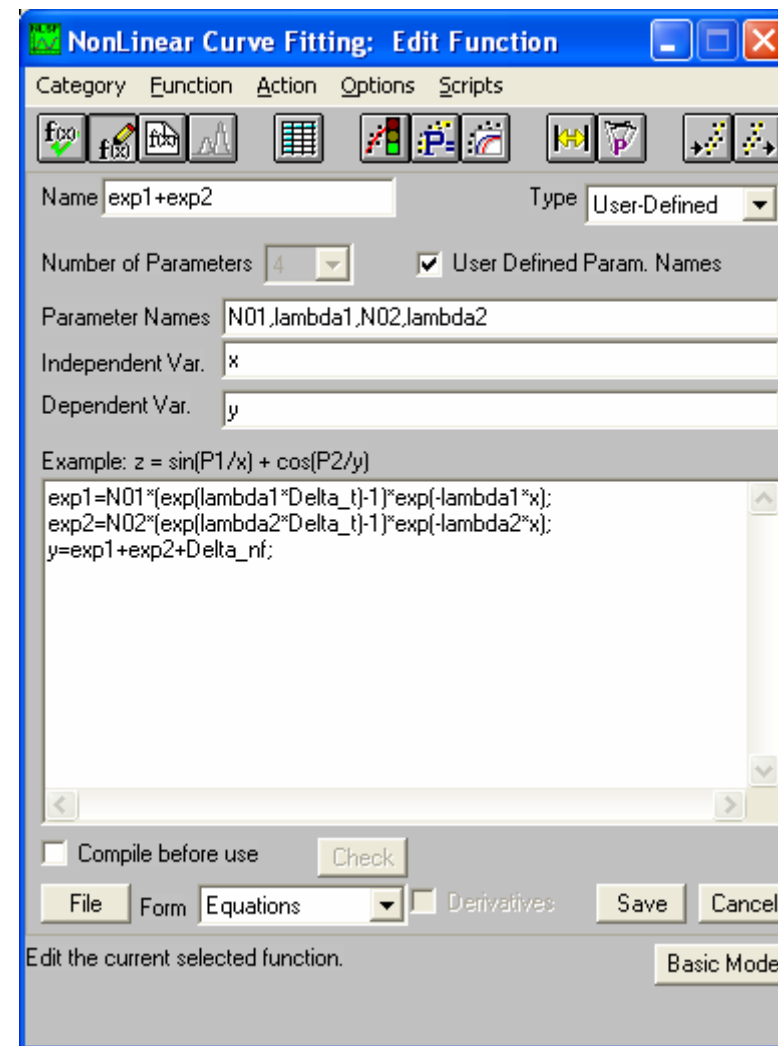
## D.2. Modelio pasirinkimas

Norint pasirinkti modelį, pasirenkamas veiksmas **Function/Select**. Tuomet aproksimavimo langas įgyja pavidalą, kuris pavaizduotas D-2 pav. Šio lango viršuje yra du sąrašo laukai – funkcijų rūšių sąrašas “*Categories*” ir funkcijų sąrašas “*Functions*”. Pasirinkus funkcijų rūšį, funkcijų sąrašas atvaizduojamos visos tos rūšies funkcijos. Kiekviena funkcija apibrėžia kuri nors teorinį modelį. Pasirinkus modelį (t.y., spragtelėjus funkcijos vardą), aproksimavimo lango apatinėje pusėje atvaizduojama papildoma informacija apie pasirinktą funkciją. Šios informacijos pavidalas priklauso nuo to, kuris iš trijų žymimųjų laukelių – “*Equation*”, “*Sample Curve*” ar “*Function File*” – yra pažymėtas (žr. D-2 pav.). Jeigu pažymėtas laukelis “*Equation*”, tuomet atvaizduojama funkcijos matematinė išraiška (lygtis). Jeigu pažymėtas laukelis “*Sample Curve*”, tuomet atvaizduojama kreivė, kurią aprašo pasirinktoji funkcija. Jeigu pažymėtas laukelis “*Function File*”, tuomet atvaizduojamas funkcijos apibrėžimo failo turinys (žr. D.6 poskyrį). Laukeliai “*Equation*” ir “*Sample Curve*” gali būti pažymėti tik tuomet, kai pasirinktoji funkcija yra viena iš standartinių *Origin*’o funkcijų.

Pasirinkus modelį, galima pradėti aproksimavimą (atitinkami veiksmai aprašyti D.7 ÷ D.9 poskyriuose). Tačiau gali būti, kad reikalingos funkcijos sąrašas “*Functions*” nėra arba pasirinktą funkciją reikia modifikuoti. Apie tai kalbama sekančiame poskyryje.

## D.3. Naujos funkcijos apibrėžimas arba pasirinktosios funkcijos modifikavimas

Norint apibrėžti naują funkciją, pasirenkama meniu komanda **Function/New**, o norint modifikuoti pasirinktą funkciją – meniu komanda **Function/Edit**. Abiem atvejais atidaromas funkcijos redagavimo langas (D-3 pav.). Šio lango įvesties lauke “*Name*” surenkamas unikalus funkcijos vardas, o išplečiamo sąrašo lauke “*Type*” pasirenkamas funkcijos tipas (turi būti “*User-Defined*”). Sekantys trys valdymo elementai – išplečiamo sąrašo laukas “*Number of Parameters*”, žymimasis laukelis “*User Defined Param. Names*” ir įvesties laukas “*Parameter Names*” kontroliuoja, kaip nustatomas parametrų skaičius ir kaip formuojami jų vardai. Jeigu žymimasis laukelis “*User Defined Param. Names*” nėra pažymėtas, tuomet vartotojas turi pasirinkti parametrų skaičių sąrašas “*Number of Parameters*”, o jų vardus suformuoja pati programa (šie vardai yra pavidalo “P1”, “P2”, “P3” ir t.t.). Jeigu žymimasis laukelis “*User Defined Param. Names*” yra pažymėtas, tuomet vartotojas turi surinkti parametrų vardus įvesties lauke “*Parameter Names*”, atskirdamas juos kableliais, o parametrų skaičių programa nustatys pati. Įvesties lauke “*Independent Var.*” surenkamas nepriklausomojo kintamojo vardas, o įvesties lauke “*Dependent Var.*” – priklausomojo kintamojo vardas. Įvesties lauke “*Definition*” surenkamas funkcijos apibrėžimas.



D-3 pav. Funkcijos redagavimo arba naujos funkcijos apibrėžimo dialogo langas.

Funkcija apibrėžiama pagal *Origin* programavimo kalbos *Labtalk* taisykles. Pradedant nuo *Origin 7.0*, vietoj *Labtalk* galima naudoti kitą programavimo kalbą, kuri vadinama *Origin C*. Toliau bus kalbama tik apie *Labtalk*. Šios kalbos sintaksė panaši į programavimo kalbos *C* sintaksę. Funkcijos apibrėžimas sudaromas iš kintamųjų ir parametrų vardų, skaitmeninių konstantų, aritmetinių operatorių

+ (sudėtis),  
 - (atimtis),  
 \* (daugyba),  
 / (dalyba),  
 ^ (kėlimas laipsniu);

specialiųjų matematinių funkcijų ir jų argumentų vardų, pvz.,

exp(x) (eksponentinė funkcija),  
 ln(x) (natūrinis logaritmas),  
 log(x) (dešimtainis logaritmas),  
 sqrt(x) (kvadratinė šaknis),  
 sin(x), cos(x), tan(x) (trigonometrinės funkcijos),  
 asin(x), acos(x), atan(x) (atvirkštinės trigonometrinės funkcijos),  
 sinh(x), cosh(x), tanh(x) (hiperbolinės funkcijos),  
 erf(x) (paklaidų funkcija),  
 gamma ln(x) (gama funkcijos natūralusis logaritmas),  
 Jn(x,n) (n-tosios eilės Beselio funkcija),  
 Yn(x,n) (n-tosios eilės antrosios rūšies Beselio funkcija);

skliaustų (“(“ ir “)”, kurie naudojami aritmetinių operacijų operandų grupavimui ir funkcijų argumentų pažymėjimui, riestinių skliaustų “{“ ir “}”, kurie naudojami sakinių (operacijų arba komandų) bloko pradžios ir pabaigos žymėjimui, bei kabliataškio “;”, kuris naudojamas sakinių atskyrimui;

reikšmės priskyrimo operatorių (dažniausiai – lygybės ženklas “=”);

santykio operatorių  
 > (“daugiau”),  
 >= (“daugiau arba lygu”),  
 < (“mažiau”),  
 <= (“mažiau arba lygu”),  
 == (“lygu”),  
 != (“nelygu”);

loginių operatorių  
 && (“IR”),  
 || (“ARBA”);

programavimo kalbos *Labtalk* komandų, pvz.,  
 if...else (sąlygos tikrinimo komanda),  
 for (ciklo komanda).

Funkcijos apibrėžime negalima naudoti šių konstantų ir kintamųjų vardų: X1, X2, X3, X4, Y1, ..., Y4, Z1, ..., Z4, Z, T, I, J, E, COUNT, nes šie vardai naudojami įvairiose vidinėse *Origin*’o procedūrose. Be to, vardą X galima priskirti tik nepriklausomam kintamajam, vardą Y – tik priklausomam kintamajam, vardą P1 – tik pirmajam parametrui, P2 – tik antrajam parametrui ir t.t.

*Labtalk* programavimo kalbos elementai, kuriuos galima naudoti funkcijos apibrėžime, priklauso nuo to, kuri funkcijos forma pasirinkta išplečiamo sąrašo lauke “Form”, esančiame po įvesties lauku “Definition” (žr. D-3 pav.). Lauke “Form” pasirinkus “Expression”, funkcijos apibrėžime galima nurodyti tik vieną reiškinių, pvz.,

$$A * \exp(-\lambda_1 * x) + B * \exp(-\lambda_2 * x) + \Delta_{nf} \quad (D.3.1)$$

T.y., šiuo atveju funkcijos apibrėžimas turi būti sudarytas iš vienos eilutės; be to, jame negalima naudoti priklausomojo kintamojo vardo, nearitmetinių operatorių ir *Labtalk* komandų. Lauke “Form” pasirinkus “Equations”, funkcijos apibrėžimas turi būti sudarytas iš vienos arba kelių priskyrimo operacijų (lygčių), pvz.,

$$y = A * \exp(-\lambda_1 * x) + B * \exp(-\lambda_2 * x) + \Delta_{nf} \quad (D.3.2)$$

Bent vienos lygties kairėje turi būti priklausomojo kintamojo vardas (kaip D-3 pav.). Lygtys turi būti atskirtos kabliataškiu. Skirtingos lygtys dažniausiai rašomos skirtingose eilutėse (nors tai nėra būtina), pvz.,

$$\begin{aligned} \text{exp1} &= N01 * (\exp(\lambda_1 * \Delta_t) - 1) * \exp(-\lambda_1 * x); \\ \text{exp2} &= N02 * (\exp(\lambda_2 * \Delta_t) - 1) * \exp(-\lambda_2 * x); \end{aligned} \quad (D.3.3)$$

$$y = \text{exp1} + \text{exp2} + \Delta_{nf};$$

Laikant, kad priklausomasis kintamasis yra y, funkcijų apibrėžimai (D.3.1) – (D.3.3) atitinka dviejų nepriklausomų radioaktyviųjų izotopų mišinio skilimo kreivės teorinį modelį, kurį nusako lygybė (5.4.7). Dydis “Delta\_t” reiškia vieno registravimo trukmę  $\Delta t$ , o dydis “Delta\_nf” reiškia vidutinį fono impulsų skaičių  $\Delta n_f$  per laiką  $\Delta t$ . Šie du dydžiai yra konstantos, kurias galima apibrėžti konstantų apibrėžimo lange (žr. poskyrį D.4) arba pačios funkcijos apibrėžime (pvz., apibrėžimo pradžioje įterpiant eilutę “Delta\_t=60; Delta\_nf=20;”).

Lauke “Form” pasirinkus “Y-Script”, funkcijos apibrėžime galima naudoti visus *Labtalk* operatorius ir komandas.

Žymimasis laukelis “Compile Before Use”, kuris yra po funkcijos apibrėžimo lauku (žr. D-3 pav.), nurodo, kad funkcija turi būti sukompiliuota (t.y., išreikšta mikroprocesoriaus instrukcijomis). Tai gali šiek tiek pagreitinti skaičiavimus (ypač jeigu funkcijos apibrėžime naudojama ciklo komanda “for”). Tačiau tai įmanoma tik tuo atveju, kai funkcija užrašyta *Origin C* kalba, kuri čia neaprašyta. *Origin C* kalbą galima naudoti tik tuomet, kai lauke “Form” pasirinktas “Expression” arba “Y-Script”.

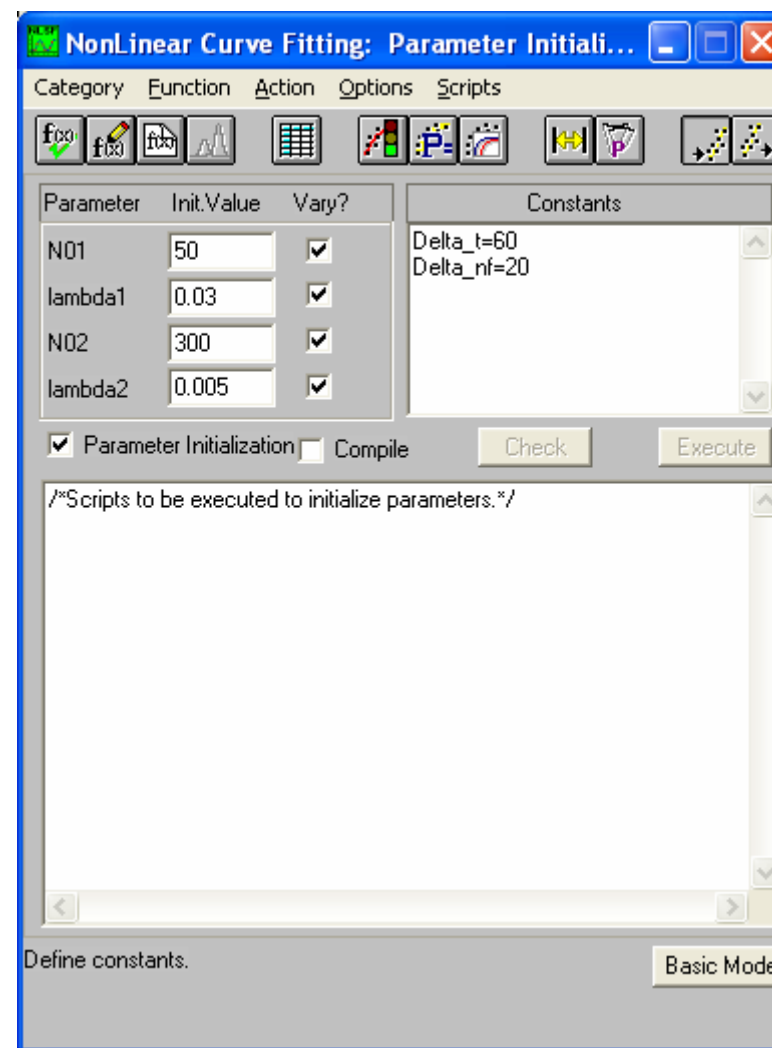
#### D.4. Modelio parametrų pradinė verčių ir konstantų apibrėžimas

Į modelio apibrėžimą įeina ne vien funkcijos išraiška, bet ir pradinės parametrų vertės (pradiniai artiniai), t.y., tos vertės, kurias programa priskiria modelio parametrams, kai vartotojas pasirenka funkciją sąrašo lauke “*Functions*” (žr. poskyrį D.2). Pradinės vertės turi įtakos aproksimavimo proceso trukmei. Pasirinkus pradines vertes, kurios labai skiriasi nuo optimaliųjų verčių, iteracinis procesas gali diverguoti, t.y., programai gali nepavykti apskaičiuoti optimaliųjų verčių (tokie atvejai aprašyti D.10 poskyryje).

Norint apibrėžti parametrų pradines vertes, reikia pasirinkti meniu komandą **Scripts/Parameter Initialization**. Tuo pačiu atidaromas parametrų pradinė verčių ir konstantų apibrėžimo dialogo langas (D-4 pav.). Šio lango viršutinės dalies kairiojoje pusėje yra įvesties laukai, kuriuose įvedamos pradinės parametrų vertės. Šalia kiekvieno įvesties lauko yra žymimasis laukelis, kuris turi būti pažymėtas, jeigu šio parametro tiksloji vertė dažniausiai nebūna iš anksto žinoma ir turi būti nustatyta aproksimavimo būdu, naudojant duotąjį pradinį artinį.

Lango dešinėje yra įvesties laukas “*Constants*”, kuriame galima apibrėžti konstantas, kurių vardai naudojami funkcijos apibrėžime. Tai gali būti, pvz., pagrindinės fizikinės konstantos (pvz., elektrono krūvis arba elektrinė konstanta  $\epsilon_0$ ) arba tiriamosios sistemos parametrai, kurių vertės yra žinomos (pvz., modelio (5.4.7) atveju – vieno registravimo trukmė  $\Delta t$  ir fono dėmuo  $\Delta n_f$ ). Konstantos apibrėžiamos pagal programavimo kalbos *Labtalk* lygčių užrašymo taisykles (žr. pavyzdį (D.3.3)), pvz.,

Delta\_t = 60;  
Delta\_nf = 20;



D-4 pav. Modelio parametrų pradinė verčių ir konstantų apibrėžimo dialogo langas.

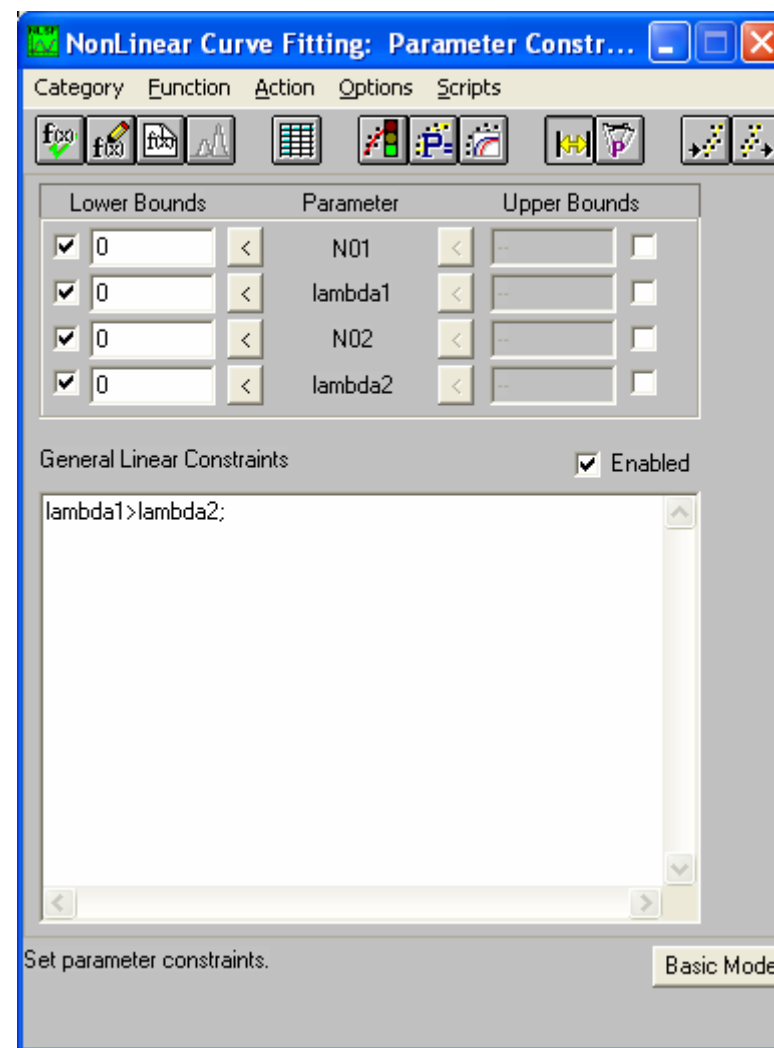
### D.5. Parametrų kitimo ribų apibrėžimas

Siekiant sutrumpinti aproksimavimo procesą ir sumažinti skaičiavimo klaidų tikimybę, programai reikia pateikti kuo daugiau informacijos apie aproksimavimo modelio ypatybes. Pvz., aproksimuojant radioaktyviųjų izotopų mišinio skilimo tyrimo duomenis eksponentinių funkcijų suma (5.4.7), iš anksto yra žinoma, kad visi modelio parametrai turi būti teigiami, nes neigiamos vertės neturi fizikinės prasmės. Be to, kai kurių parametrų vertės gali būti apytiksliai žinomos iš anksto. Tokiais atvejais patartina apriboti optimaliųjų verčių ieškojimo sritį. Norint nurodyti parametrų kitimo ribas, reikia pasirinkti meniu komandą **Options/Constraints**. Tuomet aproksimavimo dialogo langas įgyja pavidalą, kuris pavaizduotas D-5 pav. Šio lango viršutinėje pusėje kiekvieną parametras atitinka du įvesties laukai: kairiajame surenkama apatinė kitimo riba ("Lower Bound"), o dešiniajame – viršutinė riba ("Upper Bound"). Šalia kiekvieno įvesties lauko yra žymimasis laukelis. Norint įvesti kitimo ribą, šį laukelį reikia pažymėti. Jeigu jis nėra pažymėtas, tuomet atitinkamas įvesties laukas negali būti aktyvuotas (yra papilkėjęs). Tai reiškia, kad atitinkamas apribojimas negalioja.

Šio lango apatinėje pusėje yra įvesties laukas "General Linear Constraints". Šiame lauke galima suformuluoti vieną arba kelis bendresnio pobūdžio tiesinius apribojimus, kuriuose parametrų ribinių verčių vaidmenį atlieka ne konstantos, o parametrų tiesiniai dariniai. Tiesinių apribojimų pavyzdžiai keturių parametrų  $a$ ,  $b$ ,  $c$  ir  $d$  atveju:

$$a < b < c; 2 * b + 3 * a > c - d$$

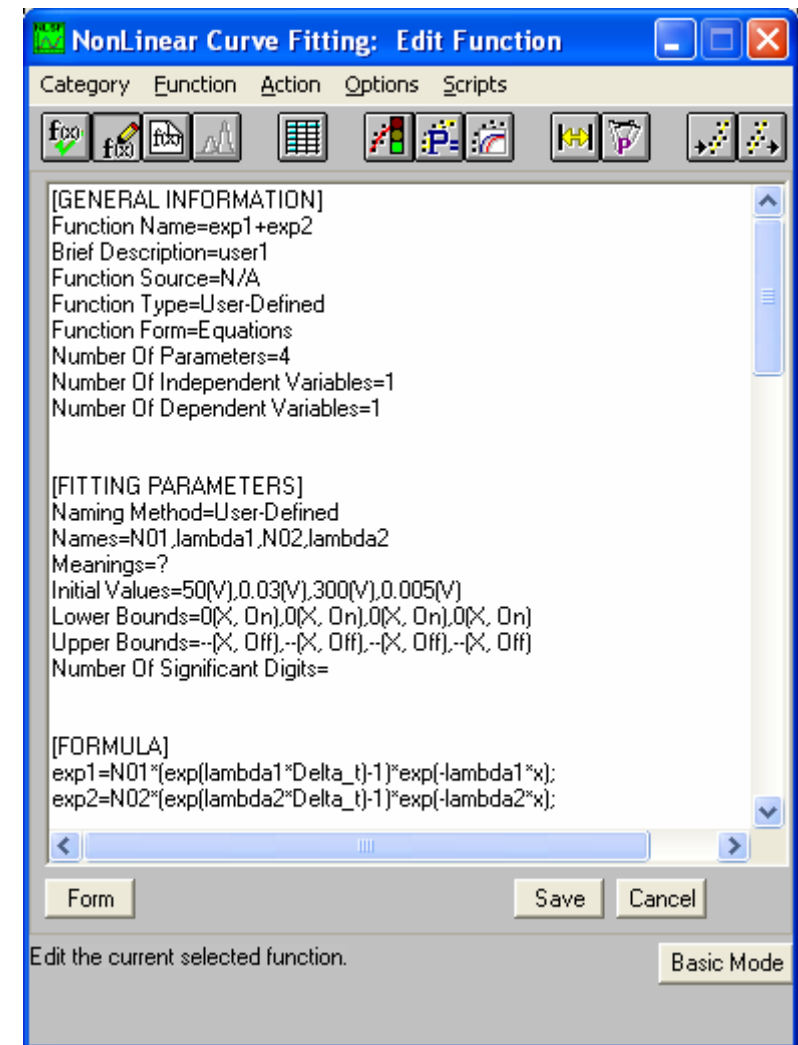
(skirtingi apribojimai turi būti atskirti kabliataškiais). Modelio (5.4.7) atveju galima nurodyti, kuri iš dviejų skilimo konstantų yra didesnė (kaip D-5 pav.). Tuomet aproksimavimo būdu rastoji  $\lambda_1$  vertė visuomet atitiks izotopą  $^{110}\text{Ag}$ , o  $\lambda_2$  vertė – izotopą  $^{108}\text{Ag}$ . Jeigu šio apribojimo nėra, tuomet, priklausomai nuo pradinių artinių, skilimo konstantos gali "susikeisti vietomis", nes abu eksponentiniai dėmenys reiškinyje (5.4.7) yra matematiškai lygiaverčiai. Tiesiniai apribojimai galioja tik tuomet, kai yra pažymėtas žymimasis laukelis "Enabled", kuris yra virš įvesties lauko "General Linear Constraints" (žr. D-5 pav.).



D-5 pav. Parametrų kitimo ribų apibrėžimo dialogo langas.

### D.6. Funkcijų apibrėžimo failai

Apibrėžus funkciją, parametrų pradines vertes, konstantas ir parametrų kitimo ribas, šią informaciją reikia įrašyti į failą. Funkcijų apibrėžimai saugomi specialiuose tekstiniuose (ASCII) failuose, kurie yra programos *Microcal Origin* pagrindinio katalogo pakatalogyje FITFUNC. Šių failų vardų plėtiniai yra „FDF“ (*Function Definition File*). Norint įrašyti funkcijos apibrėžimą į „FDF“ failą, reikia iškviešti funkcijos redagavimo dialogo langą (menu komanda **Function/Edit**) ir spragtelėti mygtuką „Save“, kuris yra šio lango apačioje (žr. D-3 pav.). Failams, kuriuose saugomos vartotojo sudarytos funkcijos, *Origin*’as priskiria vardus USER1.FDF, USER2.FDF ir t.t. Šių failų turinį galima redaguoti tekstiniame režime. Tuo tikslu reikia nuspausti mygtuką „File“ (žr. D-3 pav.). Tuomet dialogo lango darbinė sritis užpildoma failo turiniu, o mygtuką „File“ pakeičia mygtukas „Form“ (žr. D-6 pav.). Norint grįžti į funkcijos formulės redagavimo režimą (t.y., į dialogo langą, kuris pavaizduotas D-3 pav.), reikia spragtelėti mygtuką „Form“.

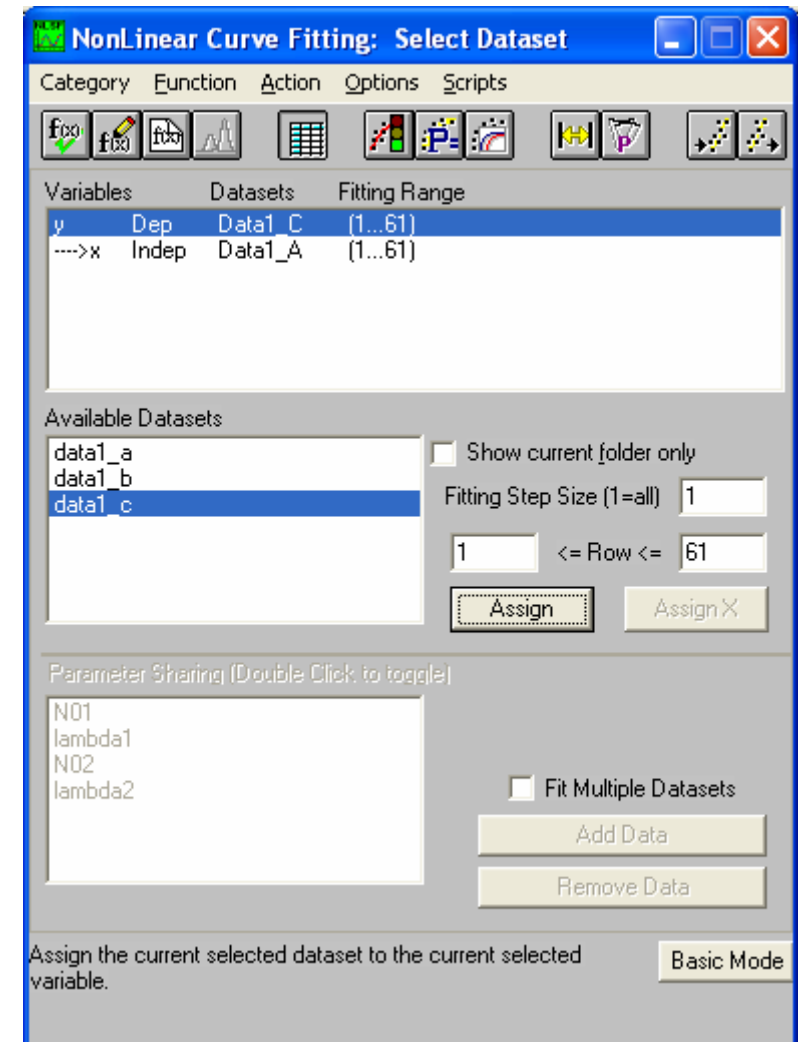


D-6 pav. Funkcijos apibrėžimo failo redagavimo dialogo langas.

### D.7. Aproximuojamų duomenų pasirinkimas

Prieš pradėdant netiesinį aproksimavimą, reikia nurodyti eksperimentinių taškų rinkinį, kuris turi būti aproksimuotas duotąja teorine funkcija. Tuo tikslu atidaromas *Origin*'o grafikas, kuriame atidėti eksperimentiniai taškai, o po to aproksimavimo dialogo lange pasirenkama meniu komanda **Action/Dataset**. Tuomet šis langas įgyja pavidalą, kuris pavaizduotas D-7 pav. Paprasčiausiu atveju viršutinis sąrašo laukas yra sudarytas iš dviejų eilučių: viena atitinka priklausomąjį kintamąjį, o kita – nepriklausomąjį kintamąjį. Kiekviena eilutė sudaryta iš keturių laukų: pirmajame lauke (*“Variables”*) yra kintamojo vardas, antrajame lauke – santrumpa *“Dep”* arba *“Indep”*, kuri nurodo, ar duotasis kintamasis yra priklausomasis, ar nepriklausomasis, trečiajame lauke (*“Datasets”*) – šio kintamojo verčių rinkinio vardas, kuris sudarytas iš *Origin*'o lentelės (*“worksheet”*) vardo ir šios lentelės stulpelio vardo (pvz., užrašas *“data1\_c”* reiškia, kad duotojo kintamojo vertės yra lentelės *Data1* stulpelyje C), o ketvirtajame lauke (*“Fitting Range”*) nurodyti pradinio ir galutinio aproksimuojamų taškų numeriai (t.y., *Origin*'o lentelės eilučių numerių intervalas). Jeigu duotasis kintamasis yra nepriklausomasis, tuomet ketvirtajame lauke vietoj taškų numerių gali būti nurodytos ir to kintamojo ribinės vertės (žr. žemiau).

Kol vartotojas nenurodė kurio nors kintamojo verčių, viršutinio sąrašo atitinkamos eilutės stulpelyje *“Datasets”* yra klausukai. Kiekvieną tokį kintamąjį reikia apibrėžti tokiu būdu: **1)** pasirinkti (spragtelėti) kintamąjį viršutiniame sąrašo lange, **2)** sąrašo lange *“Available Datasets”* (žr. D-7 pav.) pasirinkti duomenų stulpelį, kuriame yra to kintamojo vertės, **3)** nurodyti aproksimuojamųjų taškų pradinį ir galutinį numerius įvesties laukuose, tarp kurių yra užrašas *“<= Row <=”*<sup>1</sup>; **4)** spragtelėti mygtuką *“Assign”*.



D-7 pav. Aproximuojamųjų duomenų pasirinkimo dialogo langas.

<sup>1</sup> Jeigu duotasis kintamasis yra nepriklausomasis, tuomet užrašas *“<= Row <=”* virsta mygtuku, kurį spragtelėjus, šiuose dviejuose laukuose vietoj taškų numerių galima įvesti to kintamojo ribines vertes.

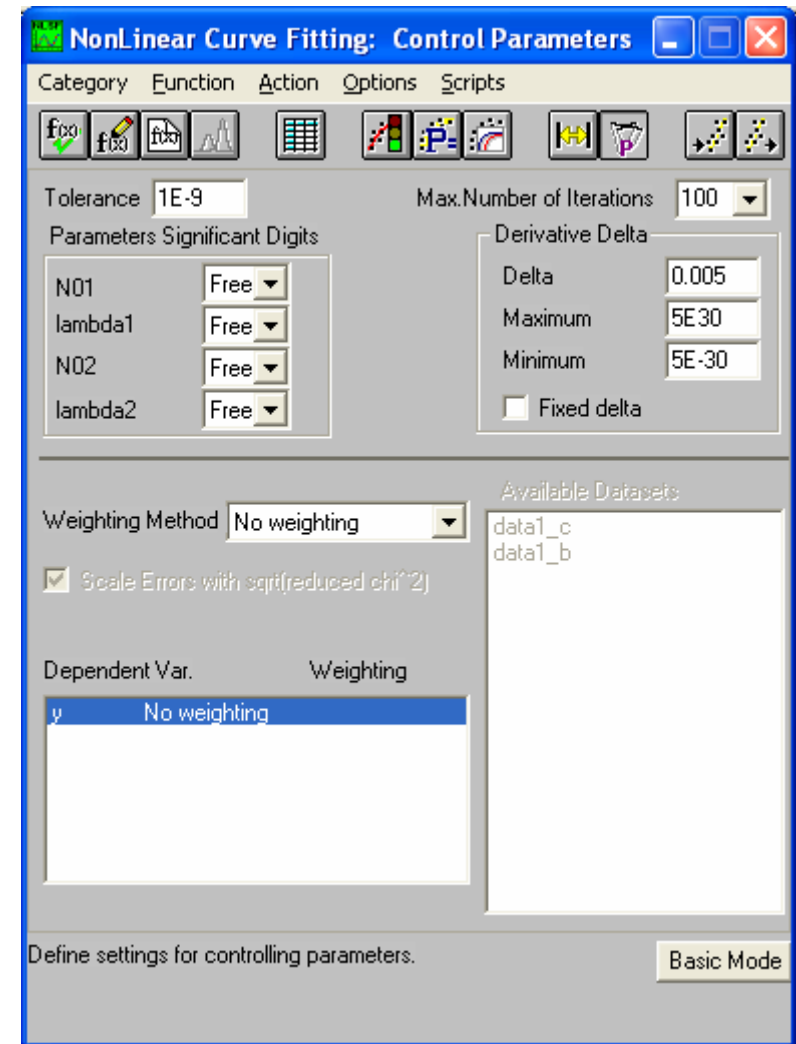


### D.8. Svorinių daugiklių skaičiavimo būdo pasirinkimas

C.2 poskyryje buvo minėtas vienas iš aproksimavimo tikslumo padidinimo būdų – optimalusis svorinių daugiklių pasirinkimas. Dialogo langas, kuriame apibrėžiami šie daugikliai, atidaromas, pasirinkus meniu komandą **Options/Control** (D-8 pav.). Svorinių daugiklių skaičiavimo būdas apibrėžiamas išplečiamo sąrašo lauke “*Weighting Method*” (žr. D-8 pav.). Šiame lauke galimi penki pasirinkimai:

- 1) “*No Weighting*” – minimizuojami absoliutiniai nuokrypiai (svoriniai daugikliai  $w_k = 1$ , kvadratų sumos išraiška (C.1.1));
- 2) “*Instrumental*” – jeigu su aproksimuojamais duomenimis yra susieti paklaidų intervalai (“*error bars*”), tuomet kiekvieno taško svorinis daugiklis yra atvirkštinis atitinkamo paklaidų intervalo pločio kvadratai;
- 3) “*Statistical*” – statistiniai svoriniai daugikliai  $w_k = 1/v_k$  (kvadratų sumos išraiška (C.2.3));
- 4) “*Arbitrary Dataset*” – svoriniai daugikliai yra atvirkštiniai vartotojo nurodyto duomenų rinkinio verčių kvadratams. Šio duomenų rinkinio vardas pasirenkamas sąrašo lauke “*Available Datasets*” (žr. D-8 pav.). Norint minimizuoti santykinus nuokrypius (svoriniai daugikliai  $w_k = 1/v_k^2$ , kvadratų sumos išraiška (C.2.1)), šiame sąraše reikia pasirinkti aproksimuojamo priklausomo kintamojo verčių rinkinio vardą;
- 5) “*Direct Weighting*” – šis pasirinkimas skiriasi nuo “*Arbitrary Dataset*” tuo, kad svoriniai daugikliai yra lygūs vartotojo nurodytoms reikšmėms (o ne jų atvirkštiniais kvadratams).

Visų kitų šiame lange esančių valdymo elementų būsenų dažniausiai nereikia keisti (jų standartinės būsenos pavaizduotos D-8 pav). Laukų “*Tolerance*” ir “*Max. Number of Iterations*” vaidmuo paaiškintas D.9 poskyryje.



D-8 pav. Aproksimavimo eigą valdančių parametrų apibrėžimo dialogo langas.



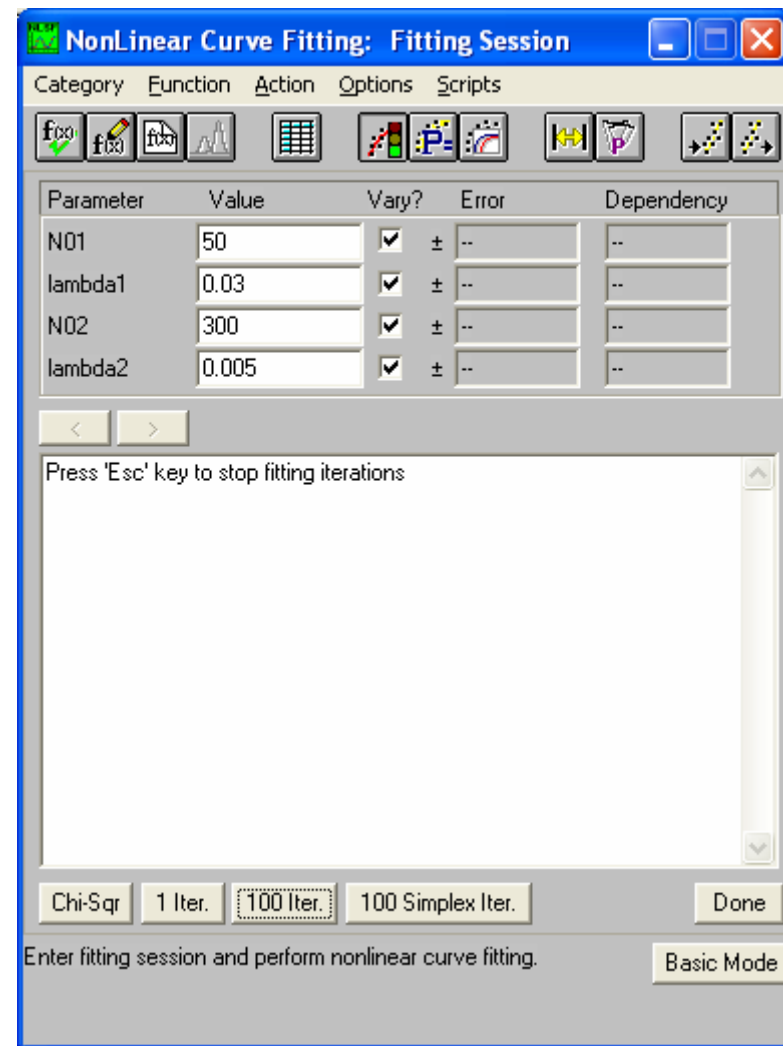
### D.9. Aproximavimo seansas

Aproximavimo seansas pradamas (arba pratęsiamas), pasirenkant meniu komandą **Action/Fit**. Tuomet grafike su matavimo duomenimis atsiranda teorinė kreivė, atitinkanti einamąsias modelio parametrų vertes, o aproximavimo dialogo langas įgyja pavidalą, kuris pavaizduotas D-9 pav. Šio lango viršutinėje dalyje yra įvesties laukų grupė „Value“. Šiuose laukuose yra einamosios parametrų vertės. Aproximavimo seanso metu parametrų vertės galima modifikuoti. Dešinėje yra žymimųjų laukelių grupė „Vary?“. Jeigu duotasis parametras yra nežinomas, tuomet atitinkamas žymimasis laukelis turi būti pažymėtas. Tačiau aproximavimo seanso metu galima laikinai fiksuoti kurio nors parametro vertę.

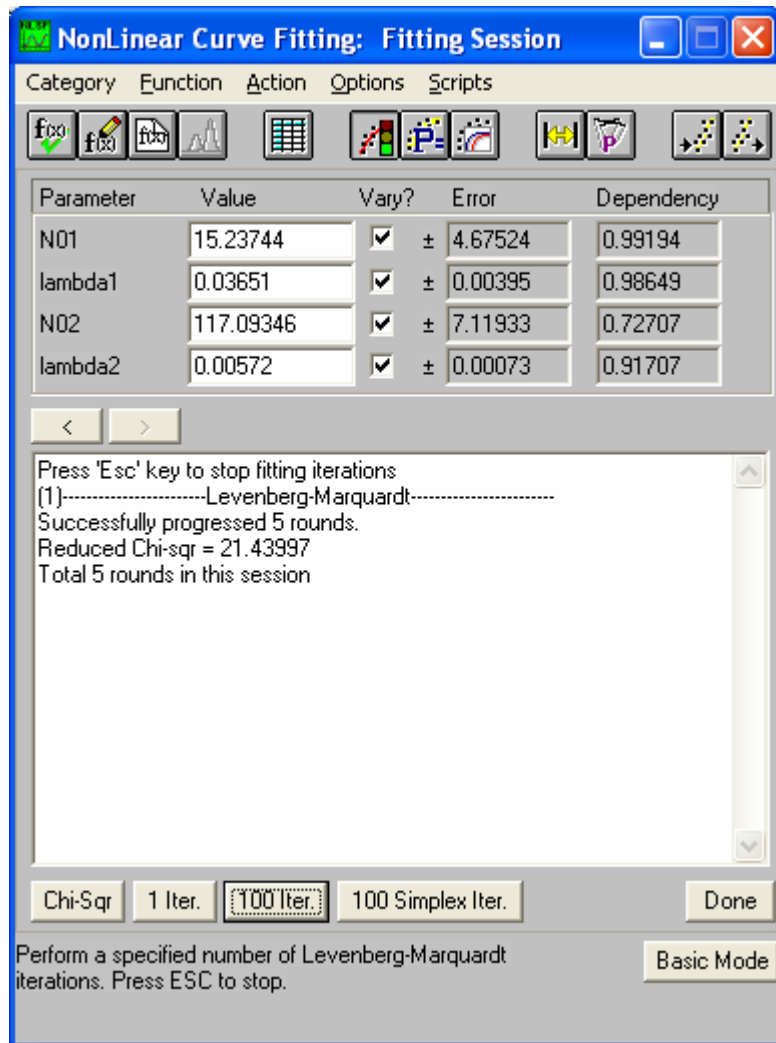
Iteracijos pradamos skaičiuoti, spragtelėjus kurį nors iš mygtukų „1 Iter.“, „100 Iter.“ arba „100 Simplex Iter.“, kurie yra lango apačioje (žr. D-9 pav.). Pasirinkus „1 Iter.“, apskaičiuojama viena iteracija (t.y., atliekamas vienas elementarusis aproximavimo proceso žingsnis), o pasirinkus „100 Iter.“ arba „100 Simplex Iter.“ apskaičiuojama ne daugiau 10 iteracijų. Žodis „Simplex“ yra vieno iš iteracijų skaičiavimo algoritmų pavadinimas. Patartina rinktis „1 Iter.“ arba „100 Iter.“, nes tuomet naudojamas Levenbergo ir Marquardt'o algoritmas, kuris yra vienas iš efektyviausių. Apskaičiavus pasirinktą skaičių iteracijų, parametrų vertės laukuose „Value“ pasikeičia, o likusius šio lango laukus užpildo informacija apie aproximavimo proceso eigą (žr. D-10 pav.). Teorinė kreivė pasikeičia taip, kad atspindėtų naująsias parametrų vertes.

Ant mygtukų „100 Iter.“ ir „100 Simplex Iter.“ gali būti nurodytas ir kitas maksimalus iteracijų skaičius (pvz., 10, 50 arba 200). Šis skaičius pasirenkamas valdančiųjų parametrų pasirinkimo dialogo lange, išplečiamo sąrašo lauke „Max. Number of Iterations“ (žr. D-8 pav.). Po kiekvieno „spragtelėjimo“ iteracijos skaičiuojamos tol, kol dydžio  $\chi^2$  (žr. (C.1.2)) santykinis pokytis tarp dviejų iteracijų yra didesnis už skaičių, kuris nurodytas valdančiųjų parametrų pasirinkimo dialogo lange, įvesties lauke „Tolerance“ (žr. D-8 pav.). Norint, kad visa aproximavimo procedūra būtų atlikta „vienu spragtelėjimu“, šiame lauke reikia įvesti nulį, o lauke „Max. Number of Iterations“ pasirinkti didžiausią įmanomą skaičių (200).

Po kiekvieno aproximavimo žingsnio einamoji dydžio  $\chi^2$  reikšmė ir pilnutinis iteracijų skaičius parodomi apatiniame informaciniame lauke (žr. D-10 pav.). Laukų grupėje „Error“ yra einamosios parametrų paklaidų reikšmės (jų skaičiavimo metodika aprašyta C.4 poskyryje). Skaičiai, kurie yra laukų grupėje „Dependency“, parodo, kaip stipriai  $\chi^2$  reikšmė priklauso nuo kiekvieno parametro vertės, lyginant su kitų parametrų įtaka. T.y., šiuos skaičius galima pavadinti parametrų „priklausomumo rodikliais“. Jų reikšmės priklauso intervalui [0, 1]. Kuo šis rodiklis artimesnis vienetui, tuo silpniau  $\chi^2$  reikšmė priklauso nuo duotojo parametro.



D-9 pav. Aproximavimo seanso dialogo lango pradinis pavidalas.



D-10 pav. Aproximavimo seanso dialogo lango pavidalas po kelių iteracijų.

Aproximavimas baigiamas tuomet, kai, spragtelėjus mygtuką “Iter.” arba “100 Iter.”, aproximavimo procedūrai nepavyksta sumažinti  $\chi^2$  reikšmės. Apie tai praneša užrašas “Chi-sqr is not reduced”, kuris atsiranda apatiniame lauke. Spragtelėjus mygtuką “Done” (žr. D-10 pav.), aproximavimo langas uždaromas, o grafike šalia aproksimuojamų duomenų ir optimaliosios teorinės kreivės atsiranda tekstinis laukas, kuriame pateiktos optimaliosios parametrų vertės ir jų paklaidos bei galutinė  $\chi^2$  reikšmė (optimaliosios teorinės kreivės arba optimaliųjų parametrų verčių atvaizdavimą galima “uždrausti” dialogo lange **Scripts/After Fit**).

Papildomą informaciją apie aproximavimo rezultatus (pvz., parametrų verčių intervalus, kuriems su 95 % tikimybe priklauso tiksliosios parametrų vertės, dvi ribines teorines kreives, tarp kurių su 95 % tikimybe yra tikslioji teorinė kreivė, dispersijų ir kovariacijų matricą ir kt.) galima sužinoti, pasirinkus meniu komandą **Action/Results**.

#### D.10. Atvejai, kai aproximavimo procedūra neranda kvadratų sumos minimumo

##### a) Pasiektas lokalusis minimumas

Aproximavimo tikslas – rasti dydžio  $\chi^2$  (žr. (C.1.2)), kaip nežinomųjų parametrų funkcijos, *absoliutųjį* minimumą. Jeigu  $\chi^2$  turi lokaliuosius minimumus ir jeigu aproximavimo metu parametrų vektorius **p** atsiduria arti tokio minimumo, tuomet iteracinis procesas gali konverguoti ne į absoliutųjį minimumą, o į šį lokalųjį minimumą. Norint įsitikinti, kad aproximavimo rezultatai atitinka absoliutųjį, o ne lokalųjį minimumą, reikia pabandyti pakeisti parametrų vertes ir pakartoti aproximavimo procesą. Jeigu visais atvejais gaunamas tas pats galutinis rezultatas, tuomet mažai tikėtina, kad jis atitinka lokalųjį minimumą.

##### b) Minimumą atitinkančios parametrų vertės yra per didelės skaitmeniniam apdorojimui

Jeigu pasirinktas netinkamas aproximavimo modelis arba netinkami duomenys, tuomet gali atsitikti, kad, nepriklausomai nuo pradinių artinių, aproximavimo eigoje kai kurių parametrų vertės labai sparčiai auga arba mažėja, kol galų gale įvyksta aritmetinis perpildymas. Tokiais atvejais reikia keisti aproksimuojančią funkciją arba duomenis.

##### c) Per didelis skaičius nežinomųjų parametrų

Jeigu dviejų radioaktyviųjų izotopų mišinio skilimo modelyje, kurį nusako lygtis (5.4.7), vietoj nežinomojo parametro  $N'_{01}$  būtų naudojami du nežinomieji parametrai  $k_1$  ir  $N_{01}$ , kurių sandauga lygi  $N'_{01}$  (žr. (5.4.6a)), tuomet, nepriklausomai nuo naudojamų duomenų, programa negalėtų surasti optimaliųjų parametrų verčių. Šiame pavyzdyje taip atsitinka dėl to, kad

pirmojo izotopo skilimo registravimo efektyvumas  $k_1$  ir pradinis to izotopo branduolių skaičius  $N_{01}$  įeina į modelio lygtį sandaugos  $k_1 N_{01}$  pavidalu. T.y., dydžio  $\chi^2$  absoliutųjį minimumą nusako ne vienas parametru erdvės taškas, o kreivė  $k_1 N_{01} = \text{const}$ . Yra du požymiai, pagal kuriuos galima atpažinti tokią situaciją:

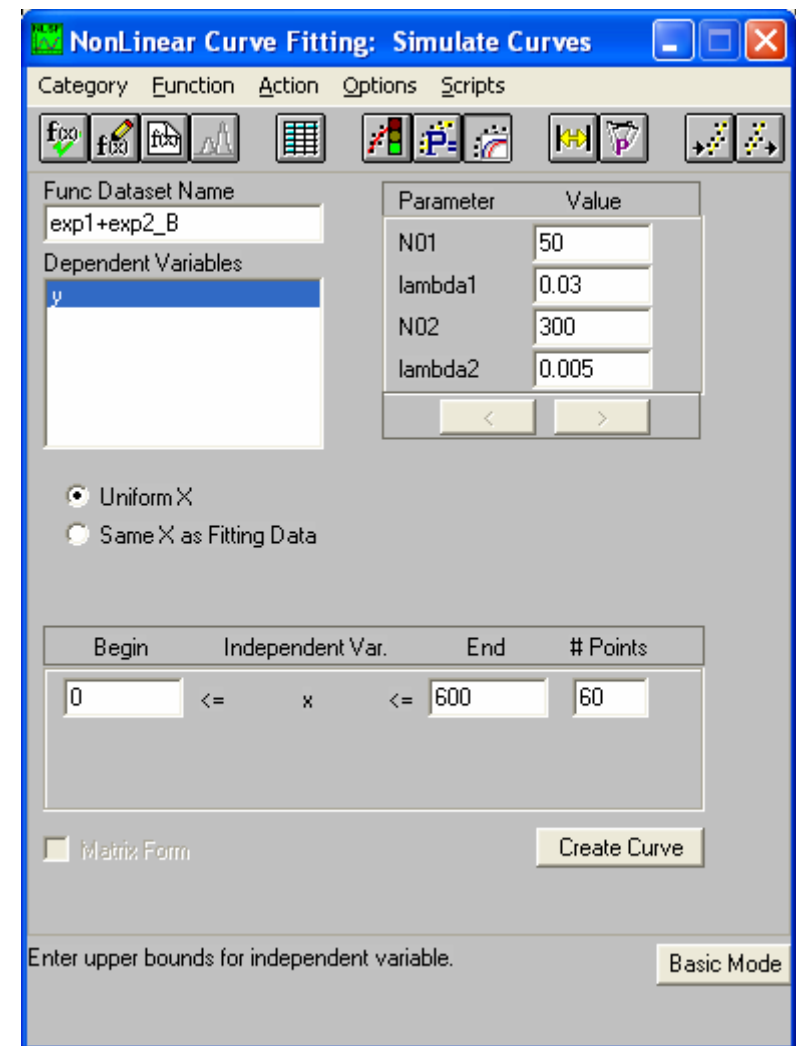
- 1) vieno arba kelių parametru paklaidos, kurios pateiktos aproksimavimo seanso lango laukuose “Error” (žr. D-10 pav.), yra keliom eilėm didesnės už atitinkamų parametru vertes;
- 2) vieno arba kelių parametru priklausomumo rodikliai, kurie pateikti aproksimavimo seanso lango laukuose “Dependency” (žr. D-10 pav.), yra lygūs vienetui (t.y., dydis  $\chi^2$  nepriklauso nuo šių parametru).

#### d) Nepakankami duomenys

Gali būti, kad duomenys suteikia nepakankamai informacijos vienam arba keliems parametrams apskaičiuoti. Pvz., jeigu pavyzdyje, kuris pavaizduotas C-1 pav., matavimai būtų pradėti ne laiko momentu  $t = 0$ , o laiko momentu  $t = 100$  s, tuomet aproksimavimo procedūrai būtų sunku nustatyti parametrus  $N'_{01}$  ir  $\lambda_1$ , nes laiko intervale  $t > 100$  s pirmasis izotopas ( $\text{Ag}^{110}$ ) jau yra beveik pilnai suskilęs.

### D.11. Kreivių modeliavimas

Kuo mažiau skiriasi pradinės parametru vertės nuo optimaliųjų, tuo trumpesnis aproksimavimo procesas ir tuo mažesnė klaidingų rezultatų tikimybė. Tinkamas pradinės vertės galima parinkti, bandant įvairius parametru verčių derinius ir vizualiai tikrinant, kurį iš jų atitinkanti teorinė kreivė yra “panašiausia” į matavimo duomenis. Norint sumodeliuoti teorinę kreivę, kuri atitinka duotąsias pasirinktojo modelio parametru vertes, reikia pasirinkti meniu komandą **Action/Simulate**. Tuomet aproksimavimo langas tampa tokio pavidalo, kuris pavaizduotas D-11 pav. Įvesties laukuose “Value” surenkamos parametru vertės (atidarius langą, šiuose laukuose yra einamosios duotojo modelio parametru vertės). Žymimieji laukeliai “Uniform X” ir “Same X as Fitting Data” kontroliuoja nepriklausomojo kintamojo verčių skaičiavimo būdą. Jeigu pažymėtas laukelis “Uniform X”, tuomet šios vertės apskaičiuojamos, remiantis skaičiais, kurie surinkti trijuose įvesties laukuose “Begin”, “End” ir “#Points” (žr. D-11 pav.). Lauke “Begin” įvedama nepriklausomojo kintamojo apatinė kitimo riba, lauke “End” – viršutinė kitimo riba, o lauke “#Points” – taškų skaičius (atstumai tarp taškų yra vienodi). Jeigu pažymėtas laukelis “Same X as Fitting Data”, tuomet modeliavimui bus naudojamas aproksimuojamų duomenų nepriklausomojo kintamojo verčių rinkinys. Spragtelėjus mygtuką “Create Curve”, grafike atvaizduojama atitinkama teorinė kreivė.



D-11 pav. Kreivių modeliavimo dialogo langas.

### D.12. Sudėtingų skaitmeninių modelių panaudojimas

D.3 poskyryje aprašytu būdu galima apibrėžti tik palyginti paprastus teorinius modelius, kurie gali būti išreikšti analiziškai ir nereikalauja sudėtingų matematinių apskaičiavimų. Tačiau fizikoje naudojama daug modelių, kuriuose, skaičiuojant kiekvieną teorinės kreivės tašką, reikia atlikti skaitmeninio diferencijavimo arba integravimo operacijas, skaitmeniškai spręsti netiesinių lygčių sistemas ir pan. Tokios funkcijos sudaromos, naudojant labiau išvystytas programavimo kalbas, negu *Labtalk* – pvz., *FORTRAN*, *C* arba *PASCAL*. Skirtingai nuo *Labtalk*, kuri yra interpretuojama programavimo kalba, šios kalbos yra kompiliuojamos programavimo kalbos. Tai lemia tokių funkcijų panaudojimo ypatybes. Šios sąvokos paaiškintos žemiau.

Vykdam interpretuojama programavimo kalba užrašytą programą, jos sakiniai paeiliui perduodami specialiai procedūrai – *interpretatoriui*, kuris “išverčia” kiekvieną sakinį į mikroprocesoriaus instrukcijų kodus ir perduoda juos mikroprocesoriui. Kompiliuojama kalba užrašyta programa negali būti iš karto pradėta vykdyti. Visų pirma ją turi apdoroti *kompiliatorius*, kuris “išverčia” visą programą į mikroprocesoriaus instrukcijų rinkinį. Kiekvienai kompiliuojamai programavimo kalbai yra sukurti tos kalbos kompiliatoriai. Tai yra savarankiškos programos su savo grafiniu vartotojo interfeisu. Galutinis programos kompiliavimo rezultatas yra vykdomasis failas, kurio vardo plėtinys yra “EXE” arba “DLL” ir kuris, prieš vykdant programą, yra nukopijuojamas į kompiuterio atmintį. Kadangi šis failas jau yra sudarytas iš mikroprocesoriaus instrukcijų, tai, vykdant sukompiliuotą programą, nereikia kreiptis į interpretatorių. Dėl to sukompiliuotos programos vykdomos greičiau už interpretuojamas programas. DLL failai skiriasi nuo EXE failų tuo, kad juose saugomos ne savarankiškos programos, o funkcijos, kurias iškviečia kitos programos. Viena DLL faile dažniausiai saugoma kelios funkcijos. DLL failas, kuriame yra reikalinga funkcija, nukopijuojamas į kompiuterio atmintį tik tuomet, kai tą funkciją iškviečia kuri nors vykdoma programa. Iš čia – pavadinimas “*Dynamic Link Library*” (“dinaminio ryšio biblioteka”).

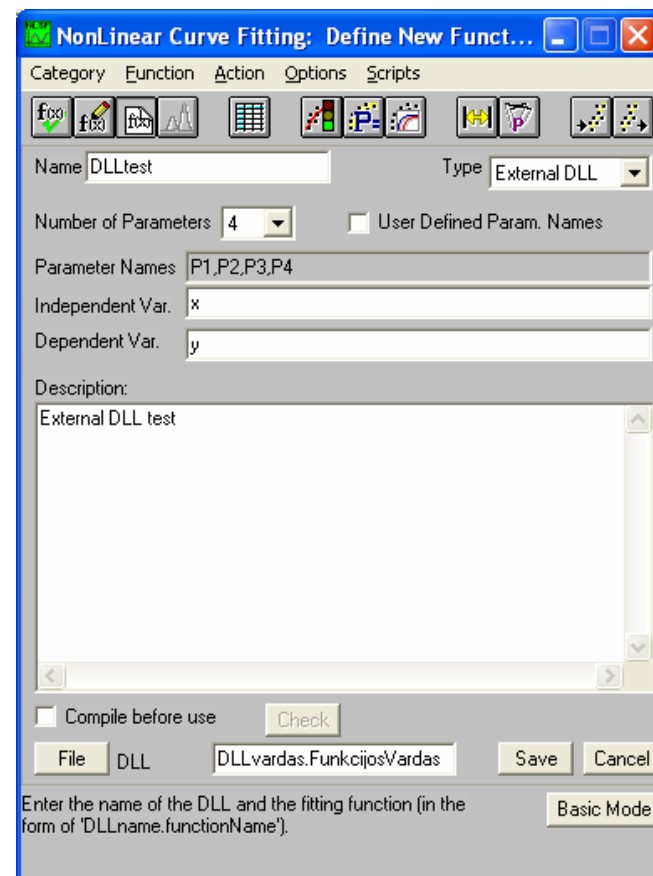
*Microcal Origin* suteikia galimybę aproksimavimui naudoti funkcijas, kurios apibrėžtos DLL failuose. Šie failai turi būti *Origin*’o pagrindiniame kataloge. Norint panaudoti tokį failą, funkcijos apibrėžimo lango lauke “*Type*” (žr. D-3 pav.) reikia pasirinkti “*External DLL*”. Tuomet funkcijos apibrėžimo dialogo lango pavidalas tampa toks, kaip D-12 pav. Kaip matome, išplečiamo sąrašo lauką “*Form*” pakeičia įvesties laukas “*DLL*”, kuriame reikia įvesti DLL failo vardą ir funkcijos vardą (failo ir funkcijos vardai turi būti atskirti tašku). Vietoj funkcijos vardo galima įvesti funkcijos numerį. Laukas “*Definition*” virsta lauku “*Description*”, kuriame galima įvesti komentarus.

Jeigu DLL biblioteka rašoma C kalba, tuomet aproksimavimo funkcijos antraštė gali būti, pvz., tokio pavidalo:

int FAR PASCAL FunkcijosVardas(HWND hWnd, double FAR \*lpValue, short nParam, double FAR \*lpParam, DWORD FAR \*lpfn)

Čia *hWnd* yra *Origin*’o pagrindinio lango deskriptorius, *lpValue* yra rodyklė į nepriklausomojo kintamojo reikšmę, *nParam* yra parametrų skaičius, *lpParam* yra rodyklė į parametrų masivą. Prieš grįžtant iš funkcijos, kintamajam *\*lpValue* reikia priskirti apskaičiuotąją priklausomojo kintamojo reikšmę. Jeigu ši reikšmė apskaičiuota sėkmingai, funkcija turi grąžinti nulį.

Aukščiau pateiktoji funkcijos antraštė tinka tik tuo atveju, kai funkcija nenaudoja *Origin*’o duomenų (tuomet argumentai *hWnd* ir *lpfn* nėra naudojami). Priežimui prie šių duomenų vartotojo funkcija turi iškviešti specialią funkciją (“*callback function*”), į kurią yra nukreipta rodyklė *lpfn*. T.y., šiuo atveju ši rodyklė turi būti apibrėžta kaip rodyklė į funkciją. Vienas iš funkcijos *lpfn* argumentų turi būti *hWnd*.



D-12 pav. Funkcijos apibrėžimo dialogo langas, kai funkcija yra DLL faile

### Literatūra

1. Матвеев А.Н. Атомная физика. – М.: Высшая школа, 1989.
2. Horodničius H. Branduolio fizika. – Vilnius: Vilniaus universiteto leidykla, 1997.
3. Kukšas B., Vičas S. Fizika, II t. – Vilnius: "Mokslas", 1988.
4. Широков Ю. М., Юдин Н. П. Ядерная физика. – М.: Наука, 1980.
5. Савельев И. В.. Курс общей физики. Т. 3. – М.: Наука, 1987.
6. Шпольский Э. В.. Атомная физика. Т. 1. – М.: Наука, 1974.
7. Нерсесов Э. А. Основные законы атомной и ядерной физики. – М.: Высшая школа, 1988.
8. Širvaitis A. Rentgeno struktūrinė analizė ir branduolio fizika. – Vilnius, 1978.
9. Антонова И. А., Бояркина А. Н., Гончарова Н. Г. Практикум по ядерной физике. – М.: Изд.-во Моск. ун-та, 1988.
10. Жуковский Ю. Г., Сергеев В. О., Антоньева Н. М. Практикум по ядерной физике. – М.: Высшая школа, 1975.
11. Ефграфова Н. Н., Каган В. Л.. Руководство к лабораторным работам по физике. – М.: Высшая школа, 1970.
12. Fizikos praktikos darbai, I dalis, red. P. Brazdžiūnas. – Vilnius: Mintis, 1972.
13. Райский С. М., Смирнов В. Ф. Физические основы метода радиоактивных индикаторов. – М.: Гос. изд.-во техн.-теор. литер., 1956.
14. Миркин Л. И. Справочник по рентгеноструктурному анализу поликристаллов. – М.: Гос. изд.-во физ.-мат. литер., 1961.
15. Вентцель Е. С., Овчаров Л. А. Теория вероятностей и ее инженерные приложения. – Москва: Наука, 1988.
16. Павинский П. П. Введение в теорию твердого тела. – Л.: Изд.-во Ленинградского ун.-та, 1979.
17. Reich J. G., C Curve Fitting and Modeling for Scientists and Engineers. – New York: McGraw-Hill, Inc., 1993.

### Interneto tinklalapiai:

1. HyperPhysics. – <http://hyperphysics.phy-astr.gsu.edu/hbase/hph.html>
2. Applied Nuclear Science Data collected by AIC SOFTWARE, Inc. – <http://www.photcoef.com/23.html>
3. National Nuclear Data Center, Brookhaven National Laboratory, Upton, NY. – <http://www.nndc.bnl.gov/>
4. Table Of Gamma Rays. – <http://atom.kaeri.re.kr/gamrays.html>
5. X-Ray Emission Lines. – [http://www.esrf.fr/exp\\_facilities/ID29/XREmission.htm](http://www.esrf.fr/exp_facilities/ID29/XREmission.htm)