POSTĘPY FIZYKI

DWUMIESIĘCZNIK POSWIĘCONY UPOWSZECHNIANIU WIEDZY FIZYCZNEJ



TOM VIII ZESZYT 4

1957

RADA REDAKCYJNA

Przewodniczący — Szczepan Szczeniowski (Poznań), Członkowie — Władysław Kapuściński (Warszawa), Henryk Niewodniczański, czł. koresp. PAN (Kraków), Wojciech Rubinowicz, czł. rzecz. PAN (Warszawa), Leonard Sosnowski (Warszawa)

KOMITET REDAKCYJNY

Redaktor Naczelny — Ludwik Natanson (Warszawa) Zastępca Redaktora Naczelnego — Karol Majewski (Warszawa) Red. Działu Fizyki Teoretycznej — Przemysław Zieliński (Warszawa) Red. Działu Fizyki Doświadczalnej — Kazimierz Rosiński (Warszawa) Sekretarz Redakcji — Ryszard Gajewski (Warszawa)

Adres Redakcji: Warszawa, Hoża 69

Maszynopisy prac należy nadsylać w 2 egzemplarzach pod adresem redakcji. O przyjęciu do druku decyduje Rada Redakcyjna. Autorzy otrzymują 25 odbitek bezpłatnie.

POSTĘPY FIZYKI

DWUMIESIĘCZNIK POŚWIĘCONY UPOWSZECHNIANIU WIEDZY FIZYCZNEJ

TOM VIII. ZESZYT 4

PAŃSTWOWE WYDAWNICTWO NAUKOWE

1957

						and the second se		_
WA	RSZAW	A, KF	RAKOW	SKIE	PRZ	EDMIEŚ	CIE	7
\mathbf{P}	ANSTWO	OWE	WYDA	WNICT	wo	NAUKO	WE	

Nakład 1882 (1757+125)	Oddano do składania 27.V.57			
Ark. wyd. 7; ark. druk. 7,75	Podpisano do druku 9 X.57			
Druk sat. V kl. 70 g. 70×100	Druk ukończono w październiku 1957			
Cena zł 15.—	Zamówienie nr 1132 B-27			

Drukarnia im. Rewolucji Październikowej, Warszawa

L. Rosenfeld Uniwersytet w Manchester

Rozkład ładunku w jądrach

1. Wstęp

Określenie rozkładu średniej gęstości materii jądrowej w stanach podstawowych jąder jest jednym z głównych zagadnień eksperymentalnych i teoretycznych związanych ze strukturą jądra. W najgrubszym przybliżeniu zagadnienie to dotyczy wielkości jąder; bardziej szczegółowe badania oparte na założeniu kulistego kształtu jądra prowadza do określenia grubości warstwy powierzchniowej, wewnątrz której gęstość spada do zera; wreszcie odchylenia od symetrii kulistej charakteryzują kształt jądra. Te ważne własności jądra dostarczają pośrednich informacji o istotnych cechach sił, które określają strukturę jądra. Najbardziej stabilne są układy złożone z równej liczby protonów i neutronów. Z tej własności sił jądrowych wnioskujemy, że rozkłady gestości protonów i neutronów są takie same, jeśli pominąć drobne odchylenia wywołane coulombowskim odpychaniem się protonów i kompensującym wpływem nadmiaru neutronów. W związku z tym ograniczymy dyskusję do gestości protonów, która jest łatwiej dostępna badaniom eksperymentalnym. Wpływ rozkładu protonów w procesach o niezbyt wielkich energiach jest głównie natury elektromagnetycznej, brak dokładnej znajomości oddziaływań jądrowych nie wpływa więc na analizę tych procesów.

Najbardziej bezpośrednia i najbardziej skuteczna metoda doświadczalna badania rozkładu ładunku w jądrze polega na sondowaniu elektrostatycznego pola jądra dostatecznie szybkimi cząstkami naładowanymi. Rozkład kątowy rozpraszanych elastycznie cząstek dostarcza informacji o przestrzennym rozkładzie ładunku jądra. Tego typu były historyczne doświadczenia R u t h e r f o r d a z rozpraszaniem cząstek a. Doprowadziły one do wykrycia koncentracji dodatniego ładunku atomu w jądrze o bardzo małych rozmiarach, których granicę górną można było określić z obliczeń. Cząstki jądrowe nie nadają się jednak do naszych celów, ponieważ wnikając do wnętrza jądra powodują jego rozpad. Najlepsze wyniki dają elektrony, było także szeroko badane rozpraszanie mezonów μ . Rozpraszanie mezonów komplikują jednak pewne zjawiska wtórne powodując nieprzydatność mezonów do badania rozkładu ładunku jądra [1], [2].

Istnieją inne zjawiska, poza rozpraszaniem prędkich elektronów, dostarczające informacji o rozmiarach jąder. Należy do nich przede wszystkim różnica energii między jądrami lustrzanymi czyli lekkimi izobarami o nieparzystych liczbach masowych, z których jeden ma więcej protonów, a drugi neutronów: O wielkości tej różnicy energii można wnioskować z górnej granicy widma pozytonów emitowanych przy przejściu jednego izobaru w drugi. Z drugiej strony, różnica energii między takimi izobarami jest dokładnie równa różnicy ich energii coulombowskich, można ją więc wyliczyć dla dowolnego rozkładu protonów, a wtedy porównanie z wartościami doświadczalnymi ustala jeden z parametrów rozkładu. Okazuje się, że uzyskane w ten sposób informacje potwierdzają wyniki otrzymane drogą rozpraszania elektronów.

Niektóre zjawiska związane z promieniowaniem są wrażliwe na rozkład ładunku jądra:

a) z powodu małości orbit mezonowych poziomy energetyczne mezoatomów (to znaczy atomów, w których jeden z elektronów jest zastąpiony mezonem μ) są znacznie przesunięte w stosunku do odpowiednich poziomów dla jądra punktowego. Badając częstości promieniowania X, wywołanego przejściami mezonów do stanów o większych energiach wiązania, można określić wielkość jądra [3].

b) rozpraszanie promieni X przez jądra jest efektem bardzo słabym, mimo to zostało ono oddzielone od znacznie silniejszego rozpraszania przez elektrony atomu. Można pokazać, że wielkość tego efektu jest zgodna z wynikami, jakie dla rozmiarów jąder uzyskuje się innymi sposobami [4].

c) wykazano zarówno teoretycznie jak i doświadczalnie, że współczynniki konwersji wewnętrznej jądrowych przejść multipolowych zależą w różnych stopniach od rozmiarów rozkładu ładunku jądra [5].

d) przesunięcie izotopowe nadsubtelnej struktury widm optycznych jest w sposób istotny związane z różnicami w rozkładach ładunku rozpatrywanych izotopów, ponieważ rozkład ładunku decyduje o energiach najniższych stanów stacjonarnych elektronów. (Patrz [6], § 34).

Wymienione wyżej zjawiska, poza ostatnim, są za małe, aby dostarczyć więcej niż uzupełniających informacji o rozmiarach jąder. Istnieją jednak pewne anomalnie duże przesunięcia izotopowe, które, jak pokażemy, stanowią interesujące potwierdzenie silnych odchyleń pewnych izotopów od symetrii kulistej. Odchylenia te ujawniają się przede wszystkim w dużych momentach kwadrupolowych tych izotopów.

2. Rozpraszanie elektronów

Zgodnie z oczekiwaniem, różniczkowy przekrój czynny na elastyczne rozpraszanie elektronów przez ładunek jądra zajmującego skończony obszar wykazuje w stosunku do "rutherfordowskiego rozpraszania" przez jadro punktowe spadek przy dużych katach. Spadek ten potęguje się przy wzroście energii elektronów i ilości protonów w jadrze. Ponadto przy wysokich energiach pojawia się dyfrakcyjny "guz" w rozkładzie katowym. Szeroko zakrojone pomiary dla elektronów o energiach siegajacych rzędu 200 MeV i jąder od najprostszych — protonu i deuteronu, przy których powstają dodatkowe zagadnienia, do najbardziej złożonych, były przeprowadzone i analizowane przez Hofstadtera i współpracowników w Stanford [7]. Metoda analizy polegała po prostu na porównywaniu doświadczalnych rozkładów kątowych z rozkładami wyliczonymi teoretycznie przy różnych założeniach o gęstości protonów. W ten sposób można było dla każdego jądra określić dwa parametry charakteryzujące rozkład gęstości ładunku, a mianowicie wymiary liniowe i grubość warstwy powierzchniowej.

Są to oczywiście informacje bardzo cenne, nie wystarczają jednak do wydobycia wszystkich cech rozkładu ładunku interesujących z teoretycznego punktu widzenia. Na przykład nie uzyskano żadnych informacji o spadku gęstości protonów w środku jądra. Spadku takiego należy oczekiwać w związku z coulombowskim odpychaniem. Wygodne jest, jak zwykle, analizować proces rozpraszania za pośrednictwem fal cząstkowych o określonym momencie pędu. Liczba fal cząstkowych biorących udział w zderzeniu wzrasta z energią elektronów i z rozmiarem jądra i jest na przykład dla ołowiu rzędu 10 przy energiach około 200 MeV. W związku z tym fakt uzyskania z analizy tylko dwóch parametrów jest na pierwszy rzut oka zaskakujący. W celu uzyskania lepszego obrazu tej sytuacji, a w szczególności ustalenia, jakie informacje w ogóle można otrzymać z danych o rozpraszaniu, konieczne jest oczywiście uzyskanie sposobu na analityczne wyrażenie różniczkowego przekroju czynnego poprzez założony rozkład ładunku. Z powodu konieczności relatywistycznego traktowania elektronu problem ten jest daleki od prostoty. Jednak dzięki metodzie zapoczątkowanej przez Bodmera i rozszerzonej przez Fowlera i Reigniera, rozwiazanie okazało się stosunkowo proste [8].

Podstawowa idea Bodmera polega na stwierdzeniu, że przyczynek do przekroju czynnego na rozpraszanie pochodzący od fali cząstkowej o liczbie kwantowej k (k=- (l + 1) dla $j = l + \frac{1}{2}$, k = l dla $j = l - \frac{1}{2}$) zależy wyłącznie od wartości stosunku

$$K_k(r) = \frac{f_k(r)}{g_k(r)} \tag{1}$$

"małej" i dużej" składowej radialnej diracowskiej funkcji falowej, wziętej w pewnej odległości $r = r_1$, dużej w porównaniu z promieniem gęstości ładunku. Okazuje się, że dla danego kulisto-symetrycznego potencjału elektrycznego V(r) i danej energii elektronu E, funkcja $K_k(r)$ spełnia równanie różniczkowe* typu Riccatiego

$$\frac{dK_{k}}{dr} = \frac{2k}{r} K_{k} - \frac{1}{\hbar c} (E - V) (1 + K_{k}^{2}), \qquad (2)$$

z odpowiednimi warunkami brzegowymi. Rozwiązanie tego równania dla niezbyt dużych E można uzyskać przy pomocy szybko zbieżnej metody przybliżeń. Uzyskujemy w ten sposób wyrażenia zależne od potencjału V(r) lub gęstości ładunku $\varrho(r)$ bez rozwiązywania równania Diraca.

Widać teraz, że dla energii mniejszych niż 50 MeV (powyżej których metody Bodmera nie można już stosować) przyczynki od poszczególnych fal cząstkowych zależą tylko od odpowiednich "momentów" rozkładu ładunku:

$$\int_{0}^{\infty} \varrho(r) r^{2|k|+2} dr.$$
(3)

W szczególności fala s (|k| = 1), która daje główny przyczynek, określa tylko "kwadratowy moment" gęstości ładunku. Wygodnie jest posługiwać się promieniem R jednorodnej kuli o takim samym momencie kwadratowym. Ten równoważny promień jądra jest określony równaniem:

$$\frac{3}{5} \frac{Ze}{4\pi} R^2 = \int_{0}^{\infty} \varrho r^4 \, dr \,. \tag{4}$$

Doświadczenia przy takich stosunkowo niskich energiach nie dostarczają żadnych informacji o rozkładzie ładunku poza promieniem równoważnym.

Metoda Bodmera zawodzi, gdy składowa radialna $g_k(r)$ ma zero wewnątrz obszaru zajmowanego przez ładunek. Jak wykazał Fowler, można obejść tę trudność stosując po prostu dobrze znane podstawienie $K_k = \operatorname{tg} \varphi_k$. Równanie na φ_k otrzymane z równania (2) rozwiązuje się

410

^{*} Równanie (2) jest ścisłe poza pominięciem mc^2 jako wielkości małej w stosunku do E.

równie łatwo jak to ostatnie. W innej metodzie, podanej przez Reigniera, przyjmuje się za punkt wyjścia wartość $K_k(r)$ dla rozkładu "powłokowego" (to znaczy równomiernego rozkładu ładunku na powierzchni kuli otaczającej właściwe jądro) i oblicza się poprawki drogą kolejnych przybliżeń. Można pokazać, że odpowiedni dobór promienia kuli do danej energii powoduje bardzo szybką zbieżność tej metody. Uzyskuje się w ten sposób szereg parametrów zawierających, podobnie jak parametry Bodmera, informacje o rozkładzie ładunku uzyskane z rozpraszania elektronów o danej energii. Są to:

$$\int_{0}^{r_{1}} V(r) \left[J_{j}^{2} \left(\frac{Er}{\hbar c} \right) + J_{j+1}^{2} \left(\frac{Er}{\hbar c} \right) \right] r \, dr \,, \tag{5}$$

gdzie J oznacza funkcje Bessela. Można wyrazić te parametry także przez samą gęstość ładunku:

gdzie

$$\mathcal{G}_{j}(x) \equiv \int_{0}^{x} \left[J_{j}^{2}(x) + J_{j+1}^{2}(x) - \frac{2j+1}{x} J_{j}(x) J_{j+1}(x) \right] dx.$$

Wyrażenia (6) redukują się przy małych wartościach E do parametrów Bodmera (3). Dla bardzo dużych E, a dokładniej dla

$$rac{ER}{\hbar c} \gg j$$
,

gdzie R jest rzędu promienia jądra, wszystkie one dążą do wspólnej granicy

$$\int_{0}^{\infty} \varrho(r) r^{2} \log r dr , \qquad (7)$$

która nie zależy od j.

Dwa rozkłady ładunku, dla których parametry (5) są takie same, są więc z punktu widzenia rozpraszania elektronów równoważne. W miarę wzrostu energii elektronów coraz więcej fal cząstkowych bierze udział w zderzeniu, jednak tylko wyższe dostarczają różnych parametrów charakteryzujących rozkład ładunku, podczas gdy niższe dają wszystkie ten sam parametr (7). Wygodnie jest wprowadzić "równoważny promień logarytmiczny" R_{log} określony wartością (7) dla jednorodnego rozkładu kulistego:

$$\log R_{\log} = \frac{1}{3} + \langle \log r \rangle. \tag{8}$$

Wrażliwość różnych fal cząstkowych na rozkład ładunku obrazują krzywe na rys. 1 wyliczone przez Reigniera. Krzywe te podają w funkcji energii stosunek promieni dwóch rozkładów jednorodnych, sferycznego i kulistego, spełniających warunek równoważności dla różnych fal cząstkowych. Wartości liczbowe odpowiadają jądru Pb o promieniu równoważnym R (zdefiniowanym równaniem (4)) równym 1,18 sp.* Wzór (6)



Rys. 1

wskazuje na niewrażliwość procesu rozpraszania na spadek gęstości ładunku w części środkowej jądra i wyjaśnia omówione poprzednio cechy wyników doświadczalnych. Wzór ten może być także pomocny w ocenie możliwości uzyskania przez podwyższenie energii elektronów trzeciego parametru, dokładniej charakteryzującego kształt obszaru granicznego.

Jak już mówiliśmy, dotychczasowe wyniki pozwalają ustalić wielkość jądra i grubość warstwy powierzchniowej. Wielkość jest określona odległością R_1 punktu przegięcia funkcji $\varrho(r)$ od środka. Grubość warstwy powierzchniowej mierzymy umownie od punktu, w którym $\varrho(r)$ wynosi 9/10 wartości maksymalnej, do punktu, w którym spada do 1/10 tej wartości. Grubość ta jest w przybliżeniu stała dla wszystkich jąder i raczej duża, rzędu 2,4 sp. Porównując bezpośrednio rozpraszanie elektronów przez sąsiednie jądra [9], można sprawdzić stałość grubości

^{*} Będziemy używali jednostki długości równej 10^{-13} cm nazywając ją "spanem" (skrót sp).

warstwy powierzchniowej w granicach 5%. Promień R_1 , podobnie jak promień równoważny R, jest z grubsza proporcjonalny do $A^{\frac{1}{3}}$. Jednak jeśli napiszemy

$$R = r_0 A^{\frac{1}{3}}$$
, $R_1 = r_1 A^{\frac{1}{3}}$

to zarówno r_0 jak i r_1 są zależne od A. Zależność r_0 od A podaje rys. 2, podobnie wygląda zależność r_1 . Obydwa parametry maleją ze wzrostem A do około 88, a następnie ustalają się. Graniczne wartości wynoszą $r_0 \approx 1,2$ sp, $r_1 \approx 1,08$ sp.

3. Jądra lustrzane

Szczególnie interesujące jest porównanie wartości parametru r_0 otrzymanej z analizy rozpraszania z wartością uzyskaną z danych dotyczących jąder lustrzanych. Przy analizie jąder lustrzanych przypisuje się



badanym jądrom strukturę wynikającą z modelu powłokowego w jego najprostszej postaci. Gęstość ładunku wylicza się następnie z funkcji falowych poszczególnych protonów. Można by sądzić, że zaburzenia wywołane oddziaływaniem między nukleonami mogą mieć widoczny wpływ na względnie małą różnicę między coulombowskimi energiami

L. ROSENFELD

izobarów. Obliczenia wykazują jednak, że różnica ta jest niezależna od kształtu funkcji falowych określonego przez przyjęty w modelu powłokowym potencjał, a więc przypuszczalnie także od oddziaływania między nukleonami. Z drugiej strony Kofoed-Hansen [10], który ostatnio rozpatrzył na nowo ten problem, zdołał ulepszyć metodę określania r_0 dzięki sensownej eliminacji odchyleń związanych z modelem powłokowym. Linia ciągła na rys. 2 łącząca uzyskane przez Kofoed-Hansen a wartości r_0 wykazuje dużą zgodność z wynikami otrzymanymi z rozpraszania elektronów.

Łączne wyniki rozpraszania i analizy jąder lustrzanych wskazują na wzrost gęstości jądra ze wzrostem liczby składowych nukleonów. Wzrost ten występuje dla lekkich jąder do A równego około 70—80, przy wyższych A gęstość pozostaje stała. W związku z interpretacją tego zjawiska należy przypomnieć, że oddziaływania coulombowskie, a także część oddziaływań jądrowych zależna od nadmiaru neutronów, powinny dać zmniejszenie gęstości ze wzrostem liczby nukleonów. Oddziaływania powierzchniowe mają tendencję przeciwną, nie wystarczającą jednak do skompensowania poprzednio omówionej tendencji [12]. Stwierdzona doświadczalnie stałość masy nasuwa przypuszczenie, że oddziaływania wewnątrz jądra mają tendencję do zwiększania gęstości ze wzrostem liczby nukleonów, wbrew wymaganiom ścisłego wysycania.

4. Odchylenia od kształtu kulistego

Występowanie dużych elektrycznych momentów kwadrupolowych w przypadku jąder, dla których $A \approx 100-200$, wskazuje na możliwość znacznych odchyleń od kulistej symetrii rozkładu ładunku tych jąder. Anomalnie duże przesunięcia izotopowe obserwowane u jąder z otoczenia ziem rzadkich są pośrednim dowodem występowania takich deformacji także dla jąder o parzystych liczbach masowych, których moment kwadrupolowy nie może być bezpośrednio zmierzony (patrz [6] § 37, 73 oraz [13]).

Wpływ sferoidalnego rozkładu ładunku na rozpraszanie elektronów jest bardzo interesujący [14]. Występujące dla jąder o zamkniętych powłokach dyfrakcyjne zagłębienia w rozkładzie kątowym znikają dla jąder zdeformowanych, co powoduje większą równomierność rozkładu kątowego. W celu zrozumienia tego zjawiska wystarczy zauważyć, że w wyniku różnorodnych orientacji jąder zdeformowanych rozpraszanie przez te jądra pokrywa się w pewnym przybliżeniu z rozpraszaniem przez pewien równoważny rozkład kulisty. Oznaczmy przez $\varrho(r)$ rozkład ładunku jądra kulistego o tym samym ładunku całkowitym co jądro zdeformowane. Współczynnik zniekształcenia sferoidalnego wyrazimy przez

 $1 - aP_2$ (cos γ), gdzie γ jest kątem mierzonym od osi symetrii. Widać teraz, że w pierwszym rzędzie przybliżenia względem *a* rozpraszanie przez rozkład $\varrho[r(1 - aP_2(\cos \gamma))]$ uśrednione względem γ jest po prostu superpozycją bez interferencji rozpraszań przez kuliste rozkłady $\varrho(r)$ i $- \alpha r \ \varrho'(r)$. Drugi z tych rozkładów ma tendencję do wypełniania minimów dyfrakcyjnych pierwszego.

Widzimy, że badanie rozpraszania elektronów przez jądra zniekształcone pozwala na niezależne wyznaczenie parametru deformacji a. W przypadkach zbadanych znaleziono dobrą zgodność z wynikami ustalonymi przez pomiar momentu kwadrupolowego. Rozpraszanie elektronów dostarcza więc nie tylko dokładnych informacji o wielkości i grubości warstwy powierzchniowej jąder, przy założeniu kulistej symetrii, lecz także wykrywa cechy wskazujące na odchylenia od symetrii kulistej. Należy podkreślić, że przy dalszym powiększaniu energii elektronów opis rozkładu ładunku jądra przy pomocy ciągłej gęstości przestaje być słuszny. Trzeba wtedy uwzględniać "ziarnistość" rozkładu ładunku, czyli fluktuację gęstości. Wpływ ziarnistości daje się wyznaczyć*, osłabia on jednak wrażliwość rozpraszania na szczegóły rozkładu ładunku.

Tłumaczyli B. i W. Tulczyjew

Literatura

- 1. L. Rosenfeld, Usp. Fiz. Nauk 60, 565 (1956).
- 2. G. N. Fowler, Nuc. Physics 3, 121 (1957); G. N. Fowler i A. W. Wolfendale, Nuc. Physics 3, 299 (1957).
- 3. V. L. Fitch i J. Rainwater, Phys. Rev. 92, 789 (1953).
- 4. D. Frisch et al., Phys. Rev.
- L. A. Sliv, J. Exper. Theoret. Phys. 21, 770 (1951); L. A. Sliv i J. M. Band, *Tables* (Akad. Sc. USSR 1956); A. H. Wapstra i G. J. Nijgh, Nuc. Physics 1, (1956); U. Nordling, et al., Nuc Physics 1, 326 (1956); K. O. Nielsen, O. B. Nielsen i M. A. Waggoner, Nuc. Physics 2, 476 (1956/57).
- 6. H. Kopfermann, Kernmomente, 2. Aufl. (Akad. Verlagsges. Frankfurt 1956).
- 7. R. Hofstadter, Rev. Mod. Phys. 28, 214 (1956).
- A. R. Bodmer, Proc. Phys. Soc. A66, 1041 (1953); G. N. Fowler, Proc. Phys. Soc. A66, 559 (1955); J. Reignier, Bull. Acad. Roy. Belg., Cl. des Sc. 41, 151 (1955); 42, 173 (1956); J. Reignier, Nuc. Physics 3, 340 (1957).
- 9. B. Hahn, R. Hofstadter i D. G. Ravenhall, Phys. Rev. (w druku).
- 10. O. Kofoed-Hansen, Nuc. Physics 2, 441 (1956/57).
- 11. L. Rosenfeld, Nuc. Physics 2, 450 (1956/57).
- 12. E. Feenberg, Rev. Mod. Phys. 19, 239 (1947).
- 13. A. R. Bodmer, Proc. Phys. Soc. A67, 622 (1954).
- 14. B. W. Downs, D. G. Ravenhall i D. R. Yennie, Phys. Rev. (w druku).

^{*} Nie publikowane wyniki badań Squiresa nad tym problemem są zebrane w [1].

A. M. Lane Atomic Energy Research Establishment Harwell, Anglia

Reakcje jądrowe*

1. Wstęp

Bogactwo zjawisk zawartych w nauce o reakcjach jądrowych najlepiej oddaje barwna terminologia: model półprzezroczystej kuli krystalicznej (*Cloudy Crystal Ball Model*), procesy wybijania (*Knock-out*), procesy parownia, reakcje zdarcia i wyrwania (*Stripping i Pick-up*) i inne. Omówienie wszystkich zjawisk w krótkim przeglądzie nie pretendującym do systematycznego wykładu jest niemożliwe. W rezultacie ograniczymy nasz przegląd do centralnych zagadnień reakcji jądrowych. Nie będziemy omawiali wzbudzenia coulombowskiego, reakcji z ciężkimi jonami, rozszczepienia i innych podobnych zagadnień szczególnych. Niewiele także powiemy o starszych i dobrze znanych zagadnieniach, takich jak wzór Breita-Wignera i statystyczna teoria jądra złożonego. Położymy nacisk raczej na postęp osiągnięty w ciągu ostatnich lat ze szczególnym uwzględnieniem modelu półprzezroczystej kuli krystalicznej (potencjałów zespolonych)** i reakcji wprost.

Zadaniem pełnej teorii reakcji jądrowych byłoby podanie przekrojów czynnych wszystkich indywidualnych, dopuszczalnych energetycznie procesów, które można wzbudzić bombardując dane jądro określoną cząstką. Dążąc do takiej teorii wygodnie jest ograniczyć się na początek do bardziej skromnego zadania, mianowicie do podania przekrojów czynnych na dyfrakcje i absorpcję.

W wyniku wzajemnego oddziaływania jądra z cząstką bombardującą podczas zderzenia mogą nastąpić dwa przypadki. Albo jądra zostaną nawzajem rozproszone bez zmiany energii względnej lub struktury wewnętrznej (przypadek dyfrakcji), albo też nastąpi wymiana energii i zmia-

^{*} Referat wygłoszony na Konferencji Fizyki Teoretycznej w Seattle (17—22.IX.1956 — por. Postępy Fizyki zesz. 3, Kronika).

^{**} Model ten zwykle jest nazywany modelem optycznym na równi z modelem stosowanym przy wyższych energiach. Autor używa terminu "model optyczny" raczej dla tego drugiego przypadku (patrz 2b) (przyp. tłum.).

na ich struktury wewnętrznej (przypadek absorpcji)*. W tym drugim przypadku powstaje najpierw "układ złożony" [1] zawierający wszystkie cząstki, który następnie może rozpaść się szybko (proces wprost) lub po dłuższym czasie (proces poprzez jądro złożone). Każdy z indywidualnych przekrojów czynnych jest oczywiście określony przez względne prawdopodobieństwo rozpadu układu 'złożonego na właściwe jądra końcowe. Teorię dostarczającą wszystkich takich względnych prawdopodobieństw można nazwać teorią "indywidualnych przekrojów czynnych", w przeciwieństwie do teorii, która podaje tylko dwa podstawowe przekroje czynne — na dyfrakcję i absorpcję. Rozdział 2 jest poświęcony omówieniu przekrojów czynnych na dyfrakcję i absorpcję, po czym następuje, w rozdziale 3, przegląd współczesnej teorii indywidualnych przekrojów czynnych. W końcu, w rozdziale 4, zamieszczamy pewne uwagi dotyczące obecnej sytuacji w nauce o reakcjach jądrowych.

2. Przekroje czynne na dyfrakcję i absorpcję

Suma przekrojów czynnych na dyfrakcję i absorpcję zdefiniowanych we wstepie musi oczywiście dawać to, co zwykle nazywamy "całkowitym" przekrojem czynnym. Nie można jednak utożsamiać ściśle tych dwóch przekrojów czynnych odpowiednio z przekrojami czynnymi "elastycznym" i "nieelastycznym" ("na reakcję") [2]. Przyczyna tego leży w możliwości wytworzenia w wyniku niektórych przypadków absorpcji początkowej pary zderzających się jąder. Przy zwykłym podziale całkowitego przekroju czynnego na elastyczny i nieelastyczny takie przypadki zaliczylibyśmy do pierwszego, a nie do drugiego. Mówimy o tych szczególnych przypadkach, że tworzą część pochodzącą od "rozpraszania elastycznego poprzez jądro złożone" (compound-elastic) elastycznego przekroju czynnego, co odróżnia je od przypadków "dyfrakcyjno-elastycznych" lub "rozpraszania elastycznego kształtu" (shape-elastic), które tworza pozostała część elastycznego przekroju czynnego. Na szczęście, z wyjątkiem energii niższych od kilku MeV, przekrój czynny na rozpraszanie elastyczne poprzez jądro złożone jest do pominięcia. W dalszym ciągu będziemy utożsamiali pod względem ilościowym elastyczny i nieelastyczny przekrój czynny z przekrojem czynnym odpowiednio na dy-

^{*} Ściśle mówiąc istnieje jeszcze trzecia ewentualność: zmiana energii względnej bez zmian w strukturze wewnętrznej. Sytuacja taka zaistniałaby w przypadku możliwości zmagazynowania energii w ruchu jądra jako całości, zachowującym strukturę wewnętrzną. Na przykład, gdyby jądro bombardowane miało kształt niekulisty, mogłoby być wprowadzone w zwykły ruch obrotowy. Pominiemy tę możliwość do czasu rozpatrzenia jej w paragrafie 4b.

frakcję i absorpcję. Szczególną sytuację pojawiającą się przy niskich energiach opiszemy później.

W^{*}tym miejscu wprowadzimy ważne ograniczenie w dyskusji, będziemy mianowicie zakładali, że cząstką bombardującą jest nukleon. Zrozumienie reakcji wzbudzanych przez pojedyncze cząstki jest oczywiście koniecznym wstępem do zasadniczego zrozumienia reakcji wzbudzanych przez deuterony, cząstki alfa i inne cząstki złóżone.

2a. Parametryczna analiza przekrojów czynnych

Zaniedbajmy, dla prostoty, istnienie spinu nukleonu. Przekroje czynne na dyfrakcję i absorpcję mają teraz dobrze znane postacie:

$$egin{aligned} \sigma_{dyfr}(v)\,\mathrm{d}arOmega&=\sigma_{el}(arOmega)\,\mathrm{d}arOmega&=rac{\pi}{k^2}\left|\sum\limits_l(2l+1)(1-S_l)rac{P_l\,(\cos\,arOmega)}{(4\pi)^{1/a}}
ight|^2\mathrm{d}arOmega\ \sigma_{abs}&=\sigma_{nleel}=rac{\pi}{k^2}\sum\limits_l(2l+1)(1-|S_l|^2), \end{aligned}$$

gdzie k jest liczbą falową ruchu względnego zderzających się jąder, l odnosi się do orbitalnego momentu pędu w ruchu względnym, $a S_l$ jest amplitudą rozpraszania dla l-tej fali cząstkowej, zdefiniowaną poprzez następującą asymptotyczną postać funkcji falowej ruchu względnego przy dużych odległościach wzajemnych:

$$\frac{1}{r}\left\{e^{-i\left(kr-\frac{l_{\pi}}{2}\right)}-S_{l}e^{+i\left(kr-\frac{l_{\pi}}{2}\right)}\right\}P_{l}(\cos \Theta).$$

W przypadku bardziej zbliżonym do rzeczywistości, kiedy uwzględniamy spin nukleonu, wzory te stają się nieco bardziej skomplikowane. Na przykład dla jądra bombardowanego o spinie zero każdą S_l należy zastąpić dwoma amplitudami rozpraszania $S_{J=l+\frac{1}{2}}$ i $S_{J=l-\frac{1}{2}}$. W dodatku trzeba rozpatrywać nowy, polaryzacyjny przekrój czynny, zależny od różnic $S_{I=l+\frac{1}{2}} - S_{I=l-\frac{1}{2}}$. Oczywiście obecność spinu nukleonu ma znaczenie tylko wtedy, gdy istnieje jakaś siła sprzęgająca spin z ruchem orbitalnym, tak że $S_{I=l+\frac{1}{2}}$ i $S_{J=l-\frac{1}{2}}$ nie są równe. Doświadczalnie okazuje się, że to sprzężenie nie jest zbyt duże, pomimo to należy je uwzględnić, jeśli chcemy uzyskać więcej niż jakościową zgodność z doświadczeniem. (Oczywiście, trzeba je także brać pod uwagę, jeśli chcemy uzyskać obserwowany w doświadczeniu polaryzacyjny przekrój czynny.) Dla celów obecnej dyskusji ogólnych jakościowych cech reakcji jądrowych zaniedbanie sprzężenia spin-orbita jest możliwe i wygodne.

Zauważmy, że dla danej energii układ zespolonych liczb S_l tworzy podwójnie nieskończoną liczbę parametrów, które można w zasadzie wyznaczyć doświadczalnie i które są ograniczone tylko warunkiem $|S_1| \leq 1$. Możemy się spodziewać, że wyniki dowolnej teorii reakcji jadrowych zawierającej taką samą ilość parametrów można zawsze dopasować do wyników doświadczalnych [3]. Wiemy, że w sytuacjach fizycznych wskutek skończonych rozmiarów jąder tylko ograniczona liczba fal cząstkowych bierze udział w zderzeniach jądrowych. W danym zderzeniu wystarczy rozpatrywać tylko ~ $2l_{max}$ parametrów, gdzie l_{max} jest najwieksza wartościa l dla fal cząstkowych biorących udział w zderzeniu. Jeśli teoria zawiera właśnie taką ilość parametrów, to jej wyniki zawsze można dopasować do wyników eksperymentalnych. Oczywiście taka teoria nie daje żadnego fizycznego wglądu w mechanizm reakcji, tylko w pewien sposób reprezentuje wyniki doświadczenia, nie dostarczając argumentów za ani przeciw danemu modelowi, pomimo że może być oparta na jakimś modelu. Poniżej przedyskutujemy w świetle tych uwag dwie szczególne teorie.

2b. Model potencjału zespolonego

Dokonano wielu udanych prób uzyskania zgodnych z doświadczeniem przekrojów czynnych, zakładając potencjał oddziaływania nukleonów z bombardowanym jądrem w postaci kulistej jamy V(r) + i W(r), gdzie V(r) jest częścią rzeczywistą, załamującą, a i W(r) — urojoną, absorbującą. Przy takim potencjale rozwiązuje się równanie Schrödingera dla każdej fali cząstkowej, określając w ten sposób amplitudy S_l . Zauważmy, że dla wysokich energii, kiedy w zderzeniu bierze udział duża liczba fal cząstkowych, podane wzory na $\sigma_{el}(\Theta)$ i σ_{abs} oczywiście przyjmują postać charakterystyczną dla "modelu optycznego" właściwego w tym przypadku. [4]. S_l oblicza się jako $\exp(ik \int nds)$, przy czym całkuje się wzdłuż drogi optycznej odpowiadającej parametrowi zderzenia b = l/k, a n jest zespolonym współczynnikiem załamania określonym wzorem:

$$n^2-1=rac{V+iW}{E}$$
,

gdzie E jest względną energią zderzenia. Zwykle zapisuje się n w postaci:

$$n=1+rac{1}{k}ig(k_1+rac{iK}{2}ig),$$

gdzie k_1 i K są wielkościami rzeczywistymi, przy tym K jest współczynnikiem absorpcji równym odwrotności średniej drogi swobodnej na zderzenie. Należy zauważyć, że jeśli W jest małe w stosunku do V + E, to zachodzi:

$$\frac{\frac{k_1}{k} \approx \left(1 + \frac{V}{E}\right)^{\frac{1}{2}} - 1 \quad \text{oraz}}{\frac{K}{k} \approx \frac{W}{E^{\frac{1}{2}} \left(1 + \frac{V}{E}\right)^{\frac{1}{2}}}}.$$

Okazuje się, że związki te są dostatecznie dokładne w interesujących przypadkach fizycznych.

Aby uzyskać przy pomocy modelu potencjału zespolonego wyniki zgodne z doświadczeniem, trzeba przede wszystkim ograniczyć jamę potencjalną do przybliżonych rozmiarów jądra bombardowanego, jeśli teoretyczna wartość l_{max} ma pokrywać się z doświadczalną. Pozostaje jeszcze swoboda w doborze kształtu V(r) i W(r), która oznacza, że z pewnością można dopasować wyniki przy dowolnie danej energii do wyników doświadczalnych przez odpowiedni dobór potencjału zespolonego*.

Interesujący jest fakt, że przy bardzo dużych energiach, kiedy rozpraszanie elastyczne odbywa się wyłącznie w przednim kierunku, istnieje praktycznie tylko jedna wielkość doświadczalna, mianowicie σ_{abs} , a odpowiadającym jej parametrem teoretycznym jest całka z K(r). Wydaje się więc, że przy dowolnej energii model daje dostatecznie dużą swobodę gwarantującą możliwość uzgodnienia wyników z doświadczeniem.

2c. Argumenty za optycznymi własnościami materii jądrowej

Narzuca się obecnie bardzo ważne pytanie: w jaki sposób można ustalić, czy potencjał zespolony odpowiada fizycznej rzeczywistości, czy też nie? Innymi słowami, chcemy wiedzieć, czy materia jądrowa istotnie posiada własności optyczne tak, że potencjał zespolony jest rzeczywiście fizycznym modelem, czy też potencjał zespolony należy traktować jedynie jako pewien sposób reprezentacji danych doświadczalnych. Widzie-

2 Postępy Fizyki Nr 4

^{*} Na przykład łatwo pokazać, że wielkość $|S_l|$ określająca absorpcję *l*-tej fali cząstkowej jest proporcjonalna do $\int W(r) |\psi_l(r)|^2 dr$, czyli objętościowej całki z W(r) z wagą równą kwadratowi modułu funkcji falowej $\psi(r)$ *l*-tej fali. Można więc nadać $|S_l|$ każdą pożądaną wartość przez dopasowanie wartości W(r) w pobliżu odległości odpowiadającej parametrowi zderzenia dla *l*-tej fali, gdzie $|\psi_l(r)|^2$ osiąga maksimum. Należy jednak podkreślić, że przypuszczenie o możliwości uzyskania dowolnych wartości na S_l przez odpowiedni dobór potencjału V(r) + i W(r) nie zostało ś c i śle udowodnione. Dowód taki został podany tylko dla szczególnego przypadku W(r) = 0, czyli bez absorpcji (patrz [3]).

liśmy, że samo uzyskanie zgodnych z doświadczeniem wyników poprzez dopasowanie potencjału zespolonego niczego nie dowodzi. Aby upewnić się, że model ma fizyczne podstawy, trzeba pójść dalej i porównać doświadczalne wartości V i W, jako funkcji odległości r i energii, z wartościami obliczonymi teoretycznie w oparciu o założenia modelu optycznego. Ogólnie mówiąc, założenia te umożliwiają wyrażenie V i W poprzez amplitudy rozpraszania dla poszczególnych procesów zderzeniowych między nukleonem bombardującym a nukleonami jądra bombardowanego. Wstępnym warunkiem fizycznej realności potencjału zespolonego jest regularność V i W jako funkcji energii, gdyż obserwowane amplitudy dla rozpraszania nukleon-nukleon są funkcjami regularnymi. Ponadto, ponieważ spodziewamy się, że radialne zależności V i W są w prosty sposób związane z gęstością jądra, oraz wiemy, że gęstość jest funkcją regularna, musimy żądać regularności V i W jako funkcji odległości r.

Przekroje czynne elastyczny i absorpcyjny zostały doświadczalnie zmierzone dla wielu jąder bombardowanych neutronami i protonami o energiach do 1,4 GeV. Analiza tych przekrojów czynnych przy pomocy potencjałów zespolonych prowadzi do wyników podanych poniżej.

Obserwowana zależność radialną V i W. Jeśli chodzi o radialną zależność V i W, to okazuje się, że można otrzymać zgodne z doświadczeniem wyniki przyjmując kształt potencjału bardzo zbliżony do rozkładu gęstości z płaską częścią środkową i spadkiem na odległości odpowiadającej mniej więcej powierzchni jądra. Te dwie jakościowe cechy są nawet konieczne, przynajmniej w przypadku V(r). Radialny rozkład W jest mniej dokładnie określony. Stosowano z pewnym powodzeniem rozkłady W skupione w pobliżu powierzchni jądra [5]. Zarówno dla V jak i W doświadczenie dopuszcza pewną dowolność w szczegółach kształtu. Częściowo jest to związane z pomijaniem w większości prób sprzężenia spin-orbita. Przeprowadzenie przy pomocy modelu potencjału zespolonego, uzupełnionego członem spinowo-orbitalnym U(r) l s, pełnej analizy przekrojów czynnych polaryzacyjnego, dyfrakcyjnego i absorpcyjnego byłoby bardzo uciążliwe. Niestety wydaje się, że taka analiza musi być przeprowadzona, jeśli model potencjału zespolonego ma być wyczerpująco zbadany.

Zależność energetyczna głębokości środkowych części V i W. Stwierdzamy, że wywnioskowane z danych doświadczalnych głębokości środkowych części V i W zależą od zasięgów rozkładów radialnych V i W. (W zasadzie zasięgi te powinny dać się wyznaczyć jednoznacznie ze szczegółowej analizy danych doświadczalnych, tak że V i W można by przypisać jednoznaczne wartości. W rzeczywistości większość przeprowadzanych analiz nie osiągnęła tego idealnego stanu). W pierwszym przybliżeniu przekroje czynne są określone przez wyrażenie ($k + k_1 + iK/2$) R, gdzie R jest średnim promieniem, a k_1 i K są bliskie wartości wielkości zdefiniowanych poprzednio. Stąd wynika, że V i W zależą od wyboru R w następujący sposób: $(V + E) \sim R^{-2}$, W ~ R^{-2} . Podane poniżej wartości V i W otrzymano po sprowadzeniu R do 1,33 $A^{\frac{1}{3}} \times 10^{-13}$ cm.

Dla protonów [6] głębokość środkowej części |V|, po uzupełnieniu średnim potencjałem coulombowskim, opada z 55 MeV przy zerowej energii bombardowania z grubsza zgodnie z prawem |V| = -55 - 0,5 E. Powyżej E = 40 MeV wykres spłaszcza się, osiągając $|V| \sim 20$ MeV przy E = 100 MeV i pozostaje przy tej wartości aż do $E \leq 400$ MeV [7]. Dla wyższych energii nie uzyskano z danych doświadczalnych dokładnych wartości V.

Do neutronów [2], [7] stosują się te same uwagi z tą różnicą, że głębokość V przy zerowej energii bombardowania [2] jest o około 10 MeV mniejsza niż dla protonów. Takiej różnicy należy się ogólnie spodziewać z zależności V od prędkości. Łatwo zauważyć*, że jeśli średnie potencjały działające na neutron i proton przyjmiemy, pomijając potencjał coulombowski V_c , jako takie same funkcje kinetycznej energii, to te potencjały jako funkcje całkowitej energi albo energii bombard o wania różnią się nie tylko o V_c , lecz także o pewien wyraz proporcjonalny do V_c , ale o przeciwnym znaku.

Dla protonów i neutronów głębokość środkowej części W wzrasta od $W \sim 3$ MeV przy zerowej energii bombardowania do $W \sim 15$ MeV przy E = 32 MeV [6]. W okolicy energii $E \sim 70$ MeV pojawia się szerokie maksimum o wartości $W \sim 20$ MeV, a następnie przy energii $E \sim 200$ MeV płytkie minimum o wartości $W \sim 12$ MeV. Dalej W wzrasta monotonicznie przechodząc przez $W \sim 17$ MeV przy E = 350 MeV [7] i $W \sim 70$ MeV przy $E \sim 1400$ MeV [8].

Aby ocenić fizyczne konsekwencje przyjmowanych przez W wartości, wygodnie jest rozpatrywać stosunek odpowiadającej im średniej drogi swobodnej 1/K do typowego promienia jądra, który przyjmiemy jako

* Jeśli dla neutronu $V = -\alpha + \beta T$, gdzie T jest energią kinetyczną, to odpowiedni wzór dla V w funkcji całkowitej energii E = T + V ma postać: $V = \frac{1}{1+\beta} (-\alpha + \beta E)$. Dla protonu wzór $V = -\alpha + \beta T + V_c$ prówadzi do: $V = \frac{1}{1+\beta} (-\alpha + \beta T + V_c) = \frac{1}{1+\beta} (-\alpha + \beta E) + V_c - \frac{\beta}{1+\beta} V_c$.

Różni się więc od potencjału neutronu nie tylko o V_c , ale także o człon $-\frac{\beta}{1+\beta}V_c$, który dąży do zniesienia V_c .

 7×10^{-13} cm. Ten stosunek przewyższa jedność tylko poniżej kilku MeV. Powyżej tych energii opada do około 0,25 w pobliżu E = 40 MeV, następnie wzrasta do wartości maksymalnej 0,7 przy $E \sim 350$ MeV i znowu spada do 0,3 przy 1,4 GeV. Przeto średnia droga swobodna nukleonu na zderzenie z materią jądrową jest zawsze rzędu promienia jądra i przewyższa go tylko przy niskich energiach.

W najprostszym klasycznym obrazie cząstkowym spodziewamy się, że średnia droga swobodna 1/K wynosi po prostu ($\rho < \sigma >$)⁻¹, gdzie ρ jest gęstością nukleonów w materii jądrowej, a $< \sigma >$ jest całkowitym przekrojem czynnym na zderzenie nukleon-nukleon uśrednionym po wszelkich prędkościach protonów i neutronów w materii jądrowej. Związek ten wynika z bardziej ogólnego związku klasycznego optycznego modelu falowego [9]:

$$n-1=rac{2\piarrho}{k^2}ig< \mathrm{f}(0)ig>$$
 ,

gdzie f(0) jest amplitudą rozpraszania do przodu przy zderzeniu nukleonnukleon. Poprzednie wyrażenie na K otrzymujemy biorąc urojoną część powyższego równania. Niestety, nie można wyliczyć k_1 bezpośrednio z danych dotyczących zderzeń nukleon-nukleon. Przyczyną jest fakt, że obecne metody* analizy danych doświadczalnych nie pozwalają na oddzielne określenie singletowych i tripletowych amplitud rozpraszania. Nie ma takich trudności w przypadku K, które można wyliczyć bezpośrednio. Znalezione wartości K powyżej $E \sim 100$ MeV są zgodne z wyliczonymi. Z prostego wzoru na K wynika, że jego zależność energetyczna dla E > 100 MeV jest taka sama, jak przekroju czynnego na zderzenie nukleon-nukleon. Spadek przekroju czynnego na zderzenie n-p w przedziale od 100 do 300 MeV, a następnie wzrost (w związku z procesami mezonowymi) znajdują odbicie w obserwowanych wartościach K.

Spadek'K poniżej E = 100 MeV można przypisać działaniu zasady Pauliego, która zabrania pewnych zderzeń. Wyniki prostych obliczeń [10] dla zdegenerowanego gazu Fermiego w zerowej temperaturze dość dobrze odtwarzają wielkości obserwowane, jeśli pominąć zależność potencjału nukleonu od prędkości i położyć — $V = T_F + 8$ MeV, czyli E = $T - (T_F + 8 \text{ MeV})$, gdzie T jest energią kinetyczną cząstki bombardującej, a T_F jest energią maksymalną rozkładu Fermiego. Dokładniejsze obliczenie uwzględniające zależność od prędkości redukuje wyniki niemal o rząd wielkości psując zgodność z doświadczeniem. Można jednak odzyskać tę zgodność zakładając odpowiednią temperaturę gazu Fer-

^{*} Czyniono pewne próby wyznaczenia k_1 przez zapostulowanie potencjału oddziaływania nukleon-nukleon i wyliczenie amplitudy rozpraszania w przód w przybliżeniu Borna. Np. A. Kind i L. Jess — w przygotowaniu. Zobacz także [15]

miego [11]. Wynikiem tego założenia jest właśnie skompensowanie efektów związanych z zależnością od prędkości.

Wydaje się, że zgodność między doświadczeniem i teorią optyczną uzyskana w przypadku W jest wystarczającym argumentem za fizyczną realnością potencjału zespolonego, pomimo braku optycznych obliczeń V. Końcowym zadaniem jest teraz wyjaśnienie, dlaczego materia jądrowa ma jawne własności optyczne. Problem ten jest właściwie związany raczej ze strukturą jądra niż z reakcjami jądrowymi, nie będziemy więc tutaj omawiać tego trudnego zagadnienia. Wydaje się jednak właściwym zwrócenie uwagi na fakt, że powodzenie modelu jest nieco zaskakujące. Model jest zasadniczo klasyczny, oparty na zderzeniach dwóch cząstek z zachowaniem energii w każdym zderzeniu. Z drugiej strony jądro jest kwantowym układem skupionych cząstek i najczęściej w strefie falowej danego zderzenia znajdują się inne cząstki, co zwykle prowadzi do niezachowania energii. Obecną sytuację można by podsumować optymistycznie stwierdzeniem, że model optyczny jest przynajmniej niesprzeczny wewnetrznie w sensie następującym. Stosowalność modelu niezaprzeczalnie wymaga jako warunku koniecznego, aby długość fali cząstki bombardującej była dużo mniejsza od odległości między zderzeniami. Zakładając słuszność modelu otrzymuje się na tę ostatnią odległość (czyli na średnią drogę swobodną 1/K) dużą wartość spełniającą warunek konieczny.

2d. Szczególna sytuacja przy niskich energiach

Na początku tego rozdziału wspomnieliśmy, że przekroje czynne absorpcyjny i dyfrakcyjny różnią się od nieelastycznego i elastycznego wielkością równą przekrojowi czynnemu na rozpraszanie elastyczne poprzez jądro złożone, czyli [2]:

$$\begin{split} \sigma_{el} &= \sigma_{dyfr} + \sigma_{comp.\ el} \\ \sigma_{nieel} &= \sigma_{abs} - \sigma_{comp.\ el} \,. \end{split}$$

Przy energiach wyższych od kilku MeV $\sigma_{comp.\ el}$ staje się wielkością pomijalnie małą, ponieważ ten proces konkuruje z wieloma innymi możliwymi sposobami rozpadu układu złożonego. Omówimy teraz przypadek niskich energii, w którym zjawisko to nie występuje. Zauważmy na początek, że model potencjału zespolonego należy wiązać z wielkościami σ_{dyfr} i σ_{abs} , a nie z σ_{el} i σ_{nieel}^{δ} .* (Wynika to z fizycznego sensu modelu potencjału zespolonego, w którym "absorpcja" oznacza zderzenie z wy-

^{*} Rzeczywiście model potencjału zespolonego nie wyróżnia w żaden sposób $\sigma_{comp.el}$, a więc nie dostarcza σ_{el} i σ_{nieel} . Aby określić $\sigma_{comp.el}$, trzeba wprowadzić pełną teorię reakcji, jak w rozdziale 3 (patrz [13]).

mianą energii między bombardującym nukleonem i jądrem.) Przeto można by pomyśleć, że aby porównać obserwowane σ_{el} i σ_{nieel} z modelem potencjału zespolonego, trzeba odjąć i dodać do tych wielkości ocom el (lub można porównać wprost obserwowany całkowity przekrój czynny). Jest to słuszne, ale to nie jest jedyna modyfikacja pojawiająca się przy niskich energiach. Istnieje druga, wydająca się na pierwszy rzut oka czymś całkiem innym, ale w rzeczywistości powstająca także na skutek niepomijalnej wartości $\sigma_{comp. el}$. Ta druga modyfikacja polega na tym, że przekrój czynny musi być zawsze uśredniony po rezonansach struktury subtelnej przed porównaniem z wynikami modelu potencjału zespolonego. Istotnie, model potencjału zespolonego nie może zachować swojego zwykłego fizycznego znaczenia, jeśli jest zastosowany do ostro określonych energii, choćby tylko dlatego, że wartości V i W musiałyby wtedy wykazywać fluktuacje odpowiadające rezonansom. Istnieje także poważny argument fizyczny przemawiający za tym, że potencjał zespolony nie może być stosowany do nieskończenie małych przedziałów energii, ale do przedziałów zawierających wiele poziomów. Jeśli podział całkowitego przekroju czynnego na σ_{dyfr} i σ_{abs} , podawany przeż model potencjału zespolonego, ma być słuszny fizycznie, to nie może występować interferencja między rozpraszaniem elastycznym poprzez jądro złożone i dyfrakcyjno-elastycznym. To znaczy, te dwa rodzaje rozpraszania muszą być całkowicie niespójne. W skali czasowej oznacza to, że paczka falowa odpowiadająca cząstce bombardującej musi być dostatecznie krótka w czasie, tak aby fala rozproszona dyfrakcyjnie zdołała całkowicie opuścić jadro, zanim fala rozproszona elastycznie poprzez jądro złożone pojawi się na jego powierzchni. Ten okres czasu wynosi $2\pi\hbar/D$, gdzie D jest średnim odstępem między poziomami struktury subtelnej. Zastosowanie relacji nieoznaczoności $\Delta t \Delta E \ge h$ wykazuje bezpośrednio, że energia cząstki bombardującej musi obejmować wiele poziomów rezonansowych, jeśli interferencja ma nie występować.

2e. Teoria funkcji mocy (Strength Function)

Od kilku lat istnieje ogólna teoria reakcji sformułowana przy pomocy poziomów rezonansowych struktury subtelnej [12]. Teoria ta jest od podstaw teorią kwantową i jej użycie pozwala na uniknięcie kłopotliwych zagadnień interpretacyjnych, które pojawiają się przy stosowaniu modelu potencjału zespolonego (patrz paragraf 2c). Oczywiście należałoby oczekiwać, że ta teoria będzie bardziej formalna i niewygodna. Możliwe jest jednak użycie teorii struktury subtelnej do zdefiniowania przekrojów czynnych absorpcyjnego i dyfrakcyjnego o takim samym sensie fizycznym, jak wprowadzone poprzednio [2], [13]. (Istotnym punktem przy porównywaniu jest to, że absorpcyjny przekrój czynny zawiera część elastycznego przekroju czynnego niespójną z przekrojem czynnym dyfrakcyjno-elastycznym). Te przekroje czynne podaje wzór z paragrafu 2a po zastąpieniu S_l wielkością $\langle S_l \rangle$ uśrednianą po wielu rezonansach. Dobrze wiadomo, że S_l jest w prosty sposób związane z logarytmiczną pochodną f funkcji falowej wzieta na powierzchni jądra, to znaczy dla promienia r = a. Można pokazać [13], [15], że $\langle S_l \rangle$ spełnia ten sam związek po zastąpieniu f_l wielkością $(R_{\infty}^{l} + i\pi S_{n}^{l})^{-1}$, gdzie R_{∞}^{i} i S_{R}^{i} są parametrami określonymi statystycznie poprzez szerokości i energie rezonansów struktury subtelnej*. S_R jest "funkcją mocy" (Strength Function) zdefiniowaną jako $<\gamma_2>^2/D$, czyli jako średnia zredukowana szerokość γ_2^2 poziomu rezonansowego λ podzielona przez średni odstęp między poziomami. $R_{\scriptscriptstyle\infty}$ jest oczywiście różnicą faz dla rozpraszania potencjalnego i dla sztywnej kuli o wielkości jądra bombardowanego (o promieniu a).

Ponieważ teorie potencjału zespolonego i funkcji mocy dotyczą tych samych przekrojów czynnych, warunek, aby dawały te same wartości przekrojów czynnych, dostarcza związków* między parametrami tych dwóch teorii. Skoro więc wiemy, że przy pewnych wartościach V i W wyniki modelu potencjału zespolonego są zgodne z doświadczeniem, stosując te 'związki możemy sobie oszczędzić ponownej analizy przy pomocy teorii funkcji mocy. Warunek zgodności przekrojów czynnych otrzymanych z obu teorii jest równoważny warunkowi, aby te teorie dawały tę samą wartość f_l . Wiemy już, że tę wielkość w przypadku teorii funkcji mocy zastępuje $(R_{\infty} + i\pi S_R)^{-1}$. W przypadku prostokątnego potencjału V + iW i przy energiach pojedynczej cząstki E_p , można napisać f_l jako [13] [15]•

$$rac{1}{{{f f}_l}}\!=\!\sum\limits_p\,rac{{{{\hbar ^2}}/{M{a^2}}}}{{{E_p} - E - iW}}$$
 ,

a więc biorąc część urojoną mamy:

$${S}_{\scriptscriptstyle R} = rac{1}{\pi} \sum_{\scriptscriptstyle p} rac{W \hbar^2 / M a^2}{(E_{\scriptscriptstyle p} - E)^2 + W^2} \; .$$

Podsumowując, jakościowo stwierdzamy, że aby uzyskać wyniki zgodne z doświadczeniem, trzeba wziąć S_R jako sumę wyrażeń Cauchy'ego

^{*} Ponieważ teoria struktury subtelnej jest teorią ogólną, musi ona zawierać tyle parametrów, ile zawiera układ S_l . Każdemu (zespolonemu) S_l odpowiadają dwa parametry $R_{l}^{(l)}$ i $S_{l}^{(l)}$. Będziemy odtąd pomijali wskaźnik l.

A. M. LANE

o maksimach dla energii równych E_p (czyli energii pojedynczej cząstki). Bardzo interesujące są próby otrzymania tej postaci S_R z teorii budowy jądra. (W szczególności wyjątkowo ważne jest uzyskanie wartości liczbowych na szerokości maksimów [14]). Punktem wyjściowym tych prób jest związek [13]:

$$R_{\infty}+i\pi S_{R}=R(E+i\delta)$$
 ,

gdzie $R(E) = \sum_{\lambda} \frac{\gamma_{\lambda}^2}{E_{\lambda} - E}$ jest "*R*-funkcją" teorii struktury subtelnej, a δ jest energią o wiele większą od średniego odstępu między poziomami. Obecność δ usuwa osobliwości funkcji *R*, która staje się regularna. Ewentualnie można z δ przejść do zera. Możemy teraz napisać [15]:

$$\gamma^2_\lambda igg({\hbar^2\over Ma^2}igg)^{\!-\!1} = igg(\sum_p ig<\lambda\,|\,p0\,ig>ig)^2 pprox \sum_p |ig<\lambda\,|\,p0\,ig>\,|^2$$
 ,

gdzie $< \lambda$ | jest rezonansowym stanem λ , a $|p0\rangle$ jest złożeniem stanu $|p\rangle$ pojedynczej cząstki i podstawowego stanu $|0\rangle$ jądra bombardowanego. Ostatnia równość przybliżona wynika z założenia równomiernego rozłożenia różnych znaków przy amplitudach. Mamy więc:

$$egin{aligned} R(E+i\delta) &= \left(rac{\hbar^2}{Ma^2}
ight)\sum_p\sum_\lambdarac{<\lambda\mid p0>^2}{E\lambda-E-i\delta} \ &= \left(rac{\hbar^2}{Ma^2}
ight)\sum_p< p0\midrac{1}{H-E-i\delta}\mid p0>. \end{aligned}$$

Elementy macierzowe można teraz rozwijać na szereg perturbacyjny [16] względem $H - H_0$, gdzie H_0 jest hamiltonianem stanu $\langle p0 |$. Każdy człon szeregu będzie sumą po wszystkich procesach przeprowadzających cząstkę bombardującą poprzez różne stany, zanim wróci do pierwotnego stanu $|p\rangle$. Można twierdzić, że jeśli elementy macierzowe $H - H_0$ wiążą stany o energiach odległych nie więcej niż o ε , to przy sensownych warunkach na ε jeden z procesów daje większy przyczynek od wszystkich pozostałych razem [16]. Jest to proces, w którym cząstka bombardująca powraca na przemian z innymi stanami do stanu początkowego. Przyczynki takich procesów ze wszystkich wyrazów rozwinięcia perturbacyjnego można zsumować otrzymując właśnie żądane wyrażenie Cauchy'ego. W tym wyrażeniu jako W występuje:

$$W(E) = \pi rac{(|\langle p0 | (H - H_0) | p' t \rangle|^2)_{
m sr}}{D(E)}$$
 ,

gdzie $|p't\rangle$ oznacza stany złożone o energiach bliskich E i średniowanie jest przeprowadzone względem tych stanów. D(E) jest średnim odstępem między poziomami w otoczeniu energii E.

Wydaje się, że obliczenie to jest dokładniejszym wyprowadzeniem wyniku otrzymanego z bardziej intuicyjnych rozważań [17], w których wylicza się przesunięcie energii stanu |p 0 > związane z oddziaływaniem $(H - H_0)$. Nasze przybliżenie, w którym cząstka bombardująca powraca na przemian z innymi stanami do stanu początkowego, odpowiada stosowanej w teorii promieniowania metodzie Tamma-Dancoffa, w której pojedyncze fotony na przemian powstają i znikają. Uzyskane tą metodą przesunięcie energii zawiera część urojoną podobną do W danego powyższym wzorem. Pomimo że ilościowe wyniki nie są godne zaufania, wzór na W zgadza się jakościcwo z doświadczeniem. W szczególności, zasada Pauliego ma decydujący wpływ na spadek wartości W przy niskich energiach.

Teoria funkcji mocy w żaden sposób nie jest związana z modelem potencjału zespolonego i opisane właśnie obliczenia można traktować jako bezpośredni sposób otrzymywania przekrojów czynnych bez odwoływania się do modelu potencjału zespolonego. Jednak ten ostatni jest bardzo prostym modelem fizycznym dającym zgodne z doświadczeniem wyniki. Lepiej więc scharakteryzujemy teorię funkcji mocy mówiąc, że stanowi ona właściwą kwantową podstawę modelu potencjału zespolonego. W związku z tym zauważmy, że podane wyrażenie na W(E) można zredukować do postaci

$$W(E) = (\hbar^2/2M) \, arrho < \sigma_{Borno} > (k+k_1) \, ,$$

która jest zbliżona do wynikającej z teorii optycznej w paragrafie 2c. Jedyną różnicą między tymi dwoma wyrażeniami jest to, że w miejscu, gdzie wyrażenie optyczne zawiera całkowite przekroje czynne na rozpraszanie nukleon-nukleon, w drugim pojawiają się te wielkości w przybliżeniu Borna. Nie wiadomo w tej chwili, czy ta różnica jest wynikiem przybliżenia użytego w teorii funkcji mocy (wybór głównych członów), czy też aby ją usunąć, należy zmodyfikować klasyczny model optyczny. Oczywiście przy wysokich energiach przybliżenie Borna daje faktyczny całkowity przekrój czynny i te dwa wyrażenia pokrywają się.

3. Indywidualne przekroje czynne

Naszkicowaliśmy dotąd w obecnym przeglądzie otrzymywanie przekrojów czynnych na rozpraszanie dyfrakcyjne i absorpcję cząstek bombardujących. Obecnie omówimy próby rozłożenia absorpcyjnego przekroju czynnego na części składowe (indywidualne przekroje czynne).

3a. Indywidualne przekroje czynne

W ogólności, w wyniku danego bombardowania może powstać bardzo wiele różnych produktów. W trakcie ich powstawania następuje bardzo duża liczba zderzeń miedzy nukleonami i trzeba posłużyć się pewna metodą statystyczną. Przed kilkoma laty przyjmowano, że dla wszystkich energii z wyjątkiem wyższych (powiedzmy 50 MeV) nukleon bombardujący jest absorbowany przez jądro z chwilą przekroczenia jego powierzchni i tworzy długotrwały stan złożony. Jakościowe cechy tego stanu były wielokrotnie opisywane [14], tak że nie ma potrzeby powtarzać ich tutaj. Zauważymy tylko, że dowolny indywidualny przekrój czynny dostarczany przez ten model ma postać iloczynu prawdopodobieństwa utworzenia jądra złożonego (a zatem, przy dostatecznie dużych energiach, geometrycznego przekroju czynnego πa^2) i prawdopodobieństwa rozpadu na określone produkty końcowe, do których odnosi się ten przekrój czynny. Prawdopodobieństwo to jest wyliczone metoda statystyczna przy założeniu, że prawdopodobieństwo rozpadu na wszystkie pojedyncze produkty końcowe jest takie samo. Według wyników tej teorii widmo emitowanych cząstek danego typu (powiedzmy protonów) powinno być maxwellowskie $(e^{-E/T})$ z wyjątkiem obcięcia przy niskich energiach związanego z przechodzeniem przez barierę.

Jasne jest, że warunkiem koniecznym słuszności tego obrazu "silnej absorpcji" jest dużo mniejsza długość średniej drogi swobodnej nukleonu bombardującego w stosunku do wymiarów jądra. Jak już widzieliśmy, użycie modelu potencjału zespolonego do analizy doświadczalnych przekrojów czynnych wykazuje, że ten warunek nie jest spełniony. Uzyskana w ten sposób empiryczna średnia droga swobodna jest rzedu promienia jądra, w wyniku czego cząstka bombardująca posiada pewne prawdopodobieństwo opuszczenia jądra po pierwszym zderzeniu. Szczęśliwie się złożyło, że ten wynik modelu potencjału zespolonego zjawił się w momencie gromadzenia się doświadczalnych argumentów przeciwko niektórym aspektom obrazu "silnej absorpcji" i kiedy nie wiadomo było, w którym miejscu tej teorii tkwi błąd. Można zmodyfikować model "silnej absorpcji" dopuszczając po prostu długą średnią drogę swobodną. Trakujac zderzenia miedzy czastkami klasycznie, wyobrażamy sobie, że nukleon bombardujący zderza się z nukleonem jądra, następnie te dwa nukleony zderzają się z następnymi i tak dalej. W ten sposób rozwija się kaskada. Po każdym zderzeniu istnieje pewne małe prawdopodobieństwo, że któryś z nukleonów bezpośrednio opuści jądro. Dla sensownie wysokich energii, powiedzmy 50 MeV, liczba zderzeń jest bardzo duża i bezpośrednia ucieczka jednego lub dwóch nukleonów jest niemal pewna. Koniec etapu reakcji, który można by nazwać "stadium kaskadowym", następuje wtedy, gdy wszystkie poszczególne nukleony mają energię niższą od koniecznej do wydostnia się z ich średniego dołu potencjalnego. Możemy sobie wyobrazić, że w tym momencie powstaje właściwe jądro złożone*, którego czas życia przed ewentualnym rozpadem jest względnie długi.**

Metoda obliczeń stosowana w "stadium kaskadowym" reakcji zależy od tego, co chcemy otrzymać. Jasne jest, na przykład, że produkty pierwszego zderzenia zachowają silną "pamięć" początkowego kierunku i energii. Produkty drugich zderzeń bedą miały mniejszą pamięć, to znaczy będą emitowane w szerszych kątach i z mniejszymi energiami. Z każdym zderzeniem pamieć progresywnie zanika i począwszy od szóstego czy siódmego zderzenia cząstki są emitowane niemal izotropowo z niskimi energiami. Jeśli badać wysokoenergetyczne cząstki emitowane w przód, to okazuje się, że pochodzą w wiekszości z pierwszego zderzenia. Analityczne wyliczenie [19] energii i rozkładu kątowego tych nukleonów jest całkiem łatwe (przy użyciu "przybliżenia pędowego" (impulse approximation). Można to samo zastosować do drugich zderzeń [19], ale dla zderzeń wyższych rzędów metoda staje się uciążliwa. Oznacza to, w szczególności, że metoda ta jest nieprzydatna do wyznaczania pozostającej energii wzbudzenia jądra złożonego. Aby objąć zderzenia wyższego rzędu, uciekamy się zwykle do procedury matematycznej znanej pod nazwą metody Monte Carlo, w której tworzy się wyniki statystyczne z analizy wielu kaskad [18]. Przy pomocy tej metody wykonano obliczenia dla energii bombardujących neutronów równej 100 MeV i jądra o masie 64. Dodatkowo założono, że nukleon nie może opuścić jądra, jeśli jego energia spadnie poniżej powiększonej o 8 MeV [20] maksymalnej energii kinetycznej gazu Fermiego w jądrze. Z 200 cząstek 30 przechodzi przez jądro bez zderzeń, 4 powodują emisję 4 cząstek, 42 emisję 3 cząstek, 82 — emisję 2 cząstek, 43 — emisję jednej cząstki i 1 jest schwytana bez emisji cząstek. We wszystkich przypadkach emisji pozostające jądro złożone ma średnią energię wzbudzenia około 25-40 MeV.

Obliczenia przy niższych energiach bombardowania [21] wykazują przejście, między 30 MeV i 20 MeV, od sytuacji, w której każde schwy-

^{*} Może się zdarzyć, że w ograniczonym obszarze jądra złożonego pozostanie tak duża energia, że będą mogły wystąpić anomalne efekty, takie jak "wrzenie lokalne" (spot boiling). Teoretyczna analiza tego zjawiska wykazuje, że powinno ono mieć znaczenie przy lokalnych temperaturach jądra przekraczających 7 MeV (zobacz A Kind i G Pattergnani, Nuovo Cim. 11, 106 (1954).

kaine (spor boung). Tebretyczna analyz tego zjawiska wykazuje, że powinio ono mieć znaczenie przy lokalnych temperaturach jądra przekraczających 7 MeV (zobacz A. Kind i G. Pattergnani, Nuovo Cim. 11, 106 (1954). ** Spodziewamy się, że rozpad jądra złożonego jest taki, jak podawała dawna teoria "silnej absorpcji" — z maxwellowskim widmem cząstek. Fakt, że średnia droga swobodna nukleonu jest dłuższa od wymaganej przez tę teorię, niewiele wpływa na widmo, wprowadzając w nim tylko pewne łagodne odchylenia. Odchylenia te spowodowane są wpływem ruchu nukleonu w średnim potencjale jądra na prawdopodobieństwo przejścia przez powierzchnię przy ucieczce.

tanie prowadzi zwykle do bezpośredniej emisji, do sytuacji, w której schwytanie zwykle nie powoduje bezpośredniej emisji. Spodziewamy się takiego przejścia na podstawie następujących rozważań. Przy niskich energiach występują trzy tendencje. Jedną z nich jest wzrost średniej drogi swobodnej nukleonu, dążący do wzmocnienia procesu bezpośredniej emisji. Z drugiej strony ilość zderzeń, w wyniku których bezpośrednia emisja jest energetycznie możliwa, ostro spada ze wzrostem energii. W końcu, wzrasta znaczenie efektu odbicia powierzchniowego [21], [22] i jeśli nawet cząstka dosięga powierzchni z energią wystarczającą do ucieczki, istnieje prawdopodobieństwo odbicia jej z powrotem do wnętrza jądra. Te dwa ostatnie efekty z łatwością kompensują pierwszy, tak że dla jąder średnich rozmiarów przy energiach bombardowania poniżej około 20 MeV proces bezpośredniej emisji jest bardzo słaby.

3b. Reakcje powierzchniowe przy energiach \leq 20 MeV

Istnieją pewne niskoenergetyczne (E < 25 MeV) reakcje, na które zwrócono nieproporcjonalną do ich małych przekrojów czynnych uwagę. Reakcje te można ogólnie nazwać "reakcjami powierzchniowymi", ponieważ zachodzą tylko w momencie przechodzenia cząstek bombardujących przez skraj jądra. Widzieliśmy właśnie, że przekrój czynny na bezpośrednią emisję maleje do wartości pomijalnych przy niskich energiach bombardowania. Następuje to głównie z powodu odbicia powierzchniowego. Jeśli cząstka bombardująca oddziałuje z cząstką jądra znajdującą się na powierzchni, wtedy ten efekt odbicia nie jest tak ważny. Z drugiej strony, prawdopodobieństwo znalezienia cząstki na powierzchni jest małe w porównaniu do prawdopodobieństwa znalezienia jej we wnętrzu, a więc przekroje czynne na procesy powierzchniowe są małe. W pewnych warunkach doświadczalnych procesy te występują bardzo jaskrawo i to jest powodem dużego zainteresowania, jakie wzbudzają. Procesy powierzchniowe, ze względu na ich bezpośredni charakter, mają tendencję do wytwarzania cząstek o wysokich energiach* i o kierunkach zawartych w przedniej półkuli, w przeciwieństwie do procesów poprzez jądro złożone, których tendencją jest emisja cząstek o niskich energiach i we wszystkich kierunkach.

^{*} Właściwie, poza czynnikiem kinematycznym związanym z zachowaniem pędu, który wyróżnia wyższe energie, widmo energetyczne zależy jeszcze od innego czynnika. Pochodzi on od nałożenia (*parentage overlap*) funkcji falowych początkowego i końcowego stanu jądra. Z modelu powłokowego wynika w ogólności spadek tego nałożenia ze wzrostem różnicy energii stanu początkowego i końcowego. (Patrz A. M. Lane i D. H. Wilkinson, Phys. Rev. 97, 1199). Dla stanów bardziej wzbudzonych opadające eksponencjalnie części funkcji falowej rozciągają się szerzej, co powoduje częściową kompensację omawianego czynnika. Jednak w ostatecznym efekcie okazuje się, że czynnik ten także wyróżnia wysokie energie.

Dwoma głównymi typami reakcji powierzchniowych sa: powierzchniowe wybicie [23] (w którym zostaje wyrzucony pojedynczy nukleon) i powierzchniowe wyrwanie, (w którym pojawia sie deuteron). Tak zwane procesy zdarcia są po prostu czasowym odwróceniem procesów wyrwania. Należy oczekiwać, że jedyne znaczące przyczynki do reakcji powierzchniowych pochodzą z pierwszych zderzeń. W obliczeniach nie trzeba więc rozpatrywać kaskad przy pomocy klasycznych metod statystycznych. Przeprowadza się w zamian proste obliczenia kwantowe, w których traktuje się oddziaływający nukleon jądra bombardowanego jako będący w stanie własnym momentu pędu. Wstępnej orientacji dostarcza przybliżenie Borna, w którym stan początkowy i końcowy cząstki są reprezentowane przez fale płaskie. Prowadzi to jednak do niepożądanych i fałszywych przyczynków [24] z wnętrza jądra, chyba że pominie się w bornowskim elemencie macierzowym część pochodzącą z wnętrza. Bardziej konselkwentne podejście polega na przedstawianiu początkowego i końcowego stanu cząstki przy pomocy zaburzonych fal odpowiadających pewnemu zespolonemu potencjałowi [25]*. W ten sposób przyczynki z wnętrza jądra są oczywiście zmniejszone w wyniku odbicia powierzchniowego i absorpcji wewnątrz obszaru zajmowanego przez potencjał.

Głównymi cechami jakościowymi reakcji powierzchniowych są: duża wrażliwość rozkładu kątowego na wielkość wymienianego w czasie reakcji momentu pędu oraz zależność całkowitego przekroju czynnego od prawdopdobieństwa znalezienia nukleonu na powierzchni jądra bombardowanego. W konsekwencji, właściwa analiza wyników doświadczalnych umożliwia uzyskanie użytecznych informacji o spinach stanów oraz o ich zredukowanych szerokościach [26] rozpadu na nukleon i część pozostałą.

W ogólności, przekrój czynny na wytworzenie określonych stanów końcowych zawiera dwie części — jedną pochodzącą z (opóźnionego) procesu poprzez jądro złożone i drugą z (bezpośredniej) reakcji powierzchniowej. Można twierdzić, że te dwie części są niespójne, jeśli zakres energi bombardowania jest większy od szerokości rezonansu; dla energi określonych bardziej ostro części te mogą interferować. Nie sformułowano dotąd zadawalającej teorii, która by w naturalny sposób obejmowała obydwa procesy, pomimo, że został osiągnięty pewien postęp w tym kierunku.

^{*} Procedura taka jest właściwa oczywiście tylko wtedy, gdy energia bombardowania obejmuje szereg stanów jądra złożonego. W przeciwnym przypadku potencjał zespolony traci sens (zobacz dyskusję w paragrafie 2d).

4. Uogólnienie dyskusji i uwagi końcowe

Stosowaliśmy dotąd dwa ograniczenia podane w początkowych paragrafach. Przyjmowaliśmy mianowicie, że cząstką bombardującą jest nukleon i że jądro bombardowane jest kuliste. Na zakończenie częściowo usuwamy te ograniczenia.

4a. Bombardowanie cząstkami złożonymi

Większość przekrojów czynnych na bombardowanie deutronami, cząstkami alfa i ciężkimi jonami była analizowana przy pomocy potencjału zespolonego, podobnie jak w przypadku bombardowania nukleonami [23]. Zgodnie z oczekiwaniami można znaleźć potencjały zespolone dość dobrze reprezentujące dane doświadczalne. Fizyczna interpretacja tych potencjałów nie jest jednak oczywista. Można spodziewać się, że współczynnik absorpcji K powinien być znacznie większy niż w przypadku bombardowania nukleonami o tej samej energii, ponieważ oddziaływanie poszczególnych nukleonów jądra bombardującego z jądrem bombardowanym jest wystarczające do spowodowania utraty energii. Doświadczenie potwierdza to rozumowanie. Eksperymentalne wartości średnich dróg swobodnych cząstek a i deuteronów [28] są o wiele mniejsze od promienia jądra. Średnia droga swobodna jonu azotu wynosi zaledwie kilka procent promienia jądra [29].

4b. Niekuliste jądro bombardowane

Dobrze wiadomo, że kształt wielu jąder jest sferoidalny. Deformacja zwykle nie jest na tyle duża, aby obalić słuszność dotychczasowych rozważań z jądrem kulistym, powoduje jednak występowanie pewnych ważnych procesów nowego typu. Tych interesujących procesów nie można zaliczyć ani do dyfrakcyjnych, ani do absorpcyjnych w dotychczasowym znaczeniu tych terminów. Polegają one na wprowadzaniu jądra bombardowanego w ruch obrotowy w wyniku oddziaływania nukleonu bombardującego ze zniekształconym polem potencjału jądra. Pociąga to wzbudzenie stanów rotacyjnych i w efekcie utratę energii przez nukleon. W zasadzie można ten problem rozwiązać ilościowo przy pomocy równania Schrödingera dla nukleonu oddziaływającego ze zniekształconym potencjałem związanym z ciałem o pewnym momencie bezwładności. W praktyce istnieją jednak pewne trudności rachunkowe. W publikowanych pracach [30] stosowano różne przybliżenia w celu określenia przekroju czynnego tego procesu.

4c. Uwagi końcowe

W ciągu ostatnich dziesięciu lat wykryto doświadczalnie szereg nowych i ważnych zjawisk z dziedziny reakcji jądrowych. Należą do nich rezonanse struktury makroskopowej całkowitego przekroju czynnego dla nukleonu, reakcje powierzchniowe i procesy wybijania. W obecnym przeglądzie omówiliśmy sposób, w jaki starsze modele reakcji jądrowych zostały dostosowane do opisu także i tych zjawisk. Podstawową modyfikacją było dopuszczenie porównywalnej z rozmiarami jądra średniej drogi swobodnej nukleonu, w przeciwieństwie do bardzo małej drogi swobodnej zakładanej w modelu "silnej absorpcji". Wynikiem tej modyfikacji jest bardzo zadowalająca synteza borowskiego modelu jądra złożonego i modelu powłokowego. Należy zwrócić uwagę na fakt zachowania przez poprawiony model wielu wygodnych cech modelu "silnej absorpcji". Tak na przykład teoria jądra złożonego, która była częścią starego obrazu, znajduje nadal szerokie zastosowanie w ramach modelu poprawionego.

Zgodność obecnego modelu z doświadczeniem jest tak duża, że konieczność wprowadzenia w przyszłości dalszych istotnych zmian wydaje się mało prawdopodobna. W tych okolicznościach należałoby zwrócić szczególną uwagę na problem teoretycznego wyjaśnienia słuszności modelu. Opisaliśmy w związku z tym ostatnie próby [16], [17] właściwego wyprowadzenia modelu potencjału zespolonego. Z próbami tymi wiąże się wiele interesujących ale trudnych zagadnień. Większość z nich należy jednak raczej do nauki o budowie jądra niż o reakcjach jądrowych.

Tłumaczyli B. i W. Tulczyjew

Literatura

- 1. V. F. Weisskopf, "Adress at the Amsterdam Conference on Nuclear Reactions", July 1956.
- 2. Feshbach, Porter i Weisskopf, Phys. Rev. 96, 448 (1954).
- 3. J. A. Wheeler, Phys. Rev. 99, 630(A) (1955).
- 4. Fernbach, Serber i Taylor, Phys. Rev. 75, 1352 (1949).
- 5. Bjorklund, Fernbach i Sherman, Phys. Rev. 101, 183 (1956).
- 6. Melkanoff, Moszkowski, Nodvik i Saxon, Phys. Rev. 101, 507 (1956).
- 7. T. B. Taylor, Phys. Rev. 92, 831 (1953); R. Jastrow i R. M. Sternheimer, w druku; F. Mandl i T. H. R. Skyrme, Phil. Mag. 44, 1028 (1953).
- 8. R. W. Williams, Phys. Rev. 98, 1387 (1955).
- 9. R. Jastrow, Phys. Rev. 82, 261 (1951); N. C. Francis i K. M. Watson, Phys. Rev. 92, 291 (1953).

- A. M. Lane i C. F. Wandel, Phys. Rev. 98, 1524 (1955); E. Clementel i C. Villi, Nuovo Cim X, 176 (1955).
- 11. K. A. Brueckner, Phys. Rev. 103, 172 (1956).
- E. P. Wigner i L. Eisenbud, Phys. Rev. 72, 29 (1947); P. L. Kapur i R. E. Peierls, Proc. Roy. Soc. (London) A 166, 277 (1937); G. Breit, Phys. Rev. 69, 472 (1946).
- E. P. Wigner, Proc. Cambridge Phil. Soc. 47, 790 (1951); Ann. Math. 53, 36 (1951); 55, 7 (1952); R. G. Thomas, Phys. Rev. 97, 224 (1955).
- 14. J. M. Blatt i V. F. Weisskopf, "Theoretical Nuclear Physics", New York 1952.
- 15. Lane, Thomas i Wigner, Phys. Rev. 98, 693 (1955).
- 16. C. Bloch, w druku.
- 17. M. Cini i B. Fubini, Nuovo Cim. X, 75 (1955).
- R. Serber, Phys. Rev. 72, 1114 (1947); M. L. Goldberger, Phys, Rev. 74, 1269 (1948).
- 19. F. Mandli T. H. R. Skyrme, Proc. Phys. Soc. (London) 65 A, 107 (1952).
- 20. J. W. Meadows, Phys. Rev. 98, 744 (1955).
- 21. Hayakawa, Kawai i Kikuchi, Progr. Theor. Phys. 13, 415 (1955).
- 22. L. B. Elton, w druku; H. Muirhead, informacja prywatna.
- 23. Austern, Butler i McManus, Phys. Rev. 92, 350 (1953).
- 24. S. T. Butler, Proc. Boy. Soc. A 208, 559 (1951); P. B. Daitch i J. B. French, Phys. Rev. 87, 900 (1951); Bhatia, Huang, Huby i Newns, Phil. Mag. 43, 485 (1952).
- 25. J. Horowitz i A. M. L. Messiah, J. Phys. et Radium 14, 695 (1953); W. Tobocman i M. M. Kalos, Phys. Rev. 97, 132 (1955).
- 26. J. E. Bowcock, Proc. Phys. Soc. (London) 68 A, 512 (1955).
- 27. R. G. Thomas, Phys. Rev. 100, 25 (1955).
- 28. C. E. Porter, Phys. Rev. 99, 1400 (1955).
- 29. C. E. Porter, Phys. Rev. 103, 674 (1056).
- C. F. Wandel, *Thesis*, Copenhagen (1953), nie publikowane; D. M. Brink, Proc. Phys. Soc. (London) 68 A, 994 (1955).
 S. Hayahawa i S. Yoshida, Proc. Phys. Soc. (London) 68 A, 656 (1955); Progr. Theor. Phys. 14, 1 (1955).

Zdzisław Szymański Instytut Fizyki P.A.N.

Kolektywne ruchy nukleonów w jądrze atomowym

1. Wstęp

Jądro atomowe stanowi układ wielu ciał. Nie umiemy jeszcze podać rozwiązania zagadnienia ruchu nukleonów w jądrze nawet przy założeniu pełnej znajomości oddziaływań pomiędzy nimi. W tej sytuacji pożyteczną rolę odgrywają uproszczone schematy budowy jądra, modele jądrowe. Rezygnując z pełnego wyjaśnienia wszystkich znanych nam właściwości jądra, modele jądrowe dostarczają jednak wielu wyczerpujących informacji o jądrze przeważnie w zakresie ograniczonej grupy faktów doświadczalnych.

Modelem, który w ciągu ostatnich pięciu lat pozwolił na pomyślne wyjaśnienie wielu własności jąder, jest model kolektywny (collective model), zwany też niekiedy zunifikowanym (unified model). Grupę faktów doświadczalnych, nadających się zwłaszcza do zanalizowania przy pomocy tego modelu, stanowią niektóre własności stanów podstawowych jąder (np. spiny, momenty statyczne elektromagnetyczne) oraz zakres najniższych wzbudzeń energetycznych.

Trudności rozwiązywania zagadnienia wielu ciał występują ostro już w fizyce klasycznej, np. przy klasycznym badaniu ruchu cieczy lub gazu. Stosuje się wówczas metodę statystyczną, która pozwala na wprowadzenie nowych wielkości fizycznych (takich jak np. temperatura) i wykrycie nowych własności układu nie związanych z jedną molekułą, lecz z całym ich zespołem. Przy przejściu do fizyki kwantowej istnieją zasadniczo dwie możliwości badania ruchu zespołu cząstek. Jedna z nich polega na formalnej kwantyzacji odpowiedniego schematu klasycznego opisującego np. ośrodek ciągły (tu należy wymienić hydrodynamikę kwantową). Druga droga polega na bezpośrednim wyjściu z kwantowego równania ruchu układu wielu ciał i poszukiwaniu takich cech tego układu, które związane są z całym zespołem, nie zaś z poszczególnymi jego elementami. W teorii ciała stałego metoda ta pozwoliła na wykrycie nowych cech fizycznych układów wieloelektronowych (związanych z tzw. plazmą elektronową), w zastosowaniu zaś do jądra atomu stała się podstawą modelu kolektywnego.

Model kolektywny powstał jako próba połączenia z sobą dwóch znanych poprzednio modeli: kroplowego i powłokowego, stanowiacych dwa skrajne punkty widzenia na strukturę jądra. Model kroplowy, uzasadniony istnieniem stosunkowo wyraźnej granicy jądra oraz silnym oddziaływaniem nukleonów, odniósł, jak wiadomo, szereg sukcesów, wyjaśniając np. cześciowo zjawisko rozszczepienia ciężkich jąder lub podając półempiryczne wzory dla energii wiazania nukleonów. Powstały znacznie później model powłokowy oparty jest na założeniu, że rzeczywiste oddziaływanie nukleonów w jądrze można zastąpić średnim polem sił, w którym nukleony poruszają się niezależnie o siebie. Dobrze znane liczne sukcesy tego modelu polegają głównie na wyjaśnieniu tych własności jader, które zależą w sposób okresowy od ilości nukleonów w jądrze. Jednakże szereg doświadczeń wykonanych w ciągu ostatnich 10 lat wykazał, że w wielu wypadkach model powłokowy dostarcza nam jedynie jakościowego opisu jądra. Istnieją też wyniki doświadczeń, których model powłokowy nie był w stanie w ogóle wyjaśnić.

Pierwsza dziedziną faktów doświadczalnych, które wywołały konieczność wyjścia poza zakres założeń modelu powłokowego, były pomiary momentów kwadrupolowych jąder. Pomiary te wykazały, że w wielu wypadkach rozkład ładunku w jądrze (a więc i kształt jądra) odbiega znacznie od rozkładu sferycznego. Fakt ten był niewytłumaczalny na gruncie modelu powłokowego określonego poprzez średnie, kulisto--symetryczne pole sił. Również i model kroplowy nie pozwala na istnienie znacznych odstępstw od symetrii kulistej w stanie równowagi, co wynika natychmiast z prostego stwierdzenia, że energia napięcia powierzchniowego kropli osiąga minimum przy kulistym jej kształcie. Dla wyjaśnienia wielkich wartości momentów kwadrupolowych jąder Rainwater [1] przyjął, że pole sił jądrowych nie ma kształtu kuli, lecz charakteryzuje się symetrią elipsoidy obrotowej. Kształt tej elipsoidy byłby wyznaczony przez oddziaływanie jednego nukleonu (np. ostatniego nieparzystego) z całą resztą jądra, którą rozważa się jako krople "cieczy jądrowej". Niesferyczne pole średnie sił jądrowych jest jednak u Rainwatera stałym parametrem określającym ruch indywidualnych nukleonów. Główną cechę modelu kolektywnego stanowi jednak nie tyle przyjęcie niesferyczności pola sił jądrowych, co założenie, że kształt tego pola zmienia się w czasie. Tę szczególną właściwość pola sił jądrowych dostrzegł pierwszy Aage Bohr [2], który potraktował jako zmienne dynamiczne nie tylko wielkości związane z indy-

439

widualnymi nukleonami, lecz także i samo pole średnie sił jądrowych. W ten sposób przypisane zostały jądru atomowemu jak gdyby nowe stopnie swobody związane z ruchem i wzbudzeniami samego pola jądrowego. Uwzględnienie ruchu tego typu obok ruchu indywidualnych nukleonów oraz wzięcie pod uwagę oddziaływać wzajemnych obu typów stopni swobody stanowi podstawę modelu kolektywnego.

W niniejszym artykule ograniczymy się do przeglądu prac obrazujących rozwój teoretyczny modelu kolektywnego. Zastosowanie modelu do objaśnienia różnych własności jądra w porównaniu z doświadczeniem i modelem powłokowym będzie treścią następnego artykułu.

Artykuł niniejszy zawiera przegląd prac dostępnych w Polsce mniej więcej do maja br., co odpowiada w przybliżeniu pracom opublikowanym mniej więcej do lutego br. włącznie.

2. Hydrodynamiczny model Bohra-Mottelsona

Pierwszą pracą, w której zrealizowana została próba jednoczesnego uwzględnienia kolektywnych i indywidualnych stopni swobody jądra, była cytowana praca A. Bohra [2]. Sformułowano w niej podstawowe założenia i rozwinięto teorię modelu kolektywnego. W następnej pracy [3] A. Bohr i B. Mottelson rozbudowują w dalszym ciągu metody rachunkowe i na podstawie analizy znacznej ilości faktów doświadczalnych przeprowadzają szczegółową ocenę wyników rozważań teoretycznych.

Wyjściowym założeniem Bohra było przyjęcie, że część jądra odpowiadająca zamkniętym powłokom (a więc określona magicznymi liczbami neutronów i protonów) tworzy rdzeń, który może być opisany przy pomocy pojęć modelu kroplowego. Pozostałe nukleony, znajdujące się w niezapełnionych powłokach zewnętrznych, poruszają się — w myśl założenia Bohra — niezależnie od siebie w średnim polu sił jądrowych, którego rozmiary i kształt pokrywają się z rozmiarami i kształtem rdzenia. Pole sił jądrowych nie jest więc stałe w czasie, a jego zmienność określona jest własnościami fizycznymi kropli "cieczy jądrowej" oddziaływającej z nukleonami zewnętrznymi. Jeśli oznaczyć przez a zespół współrzędnych kolektywnych, charakteryzujących kształt pola jądrowego (czyli kształt rdzenia), przez x — zaś zespół zmiennych dynamicznych charakteryzujących nukleony zewnętrzne (np x może oznaczać współrzędne i spiny wszystkich tych nukleonów), to jądro stanowi związany układ w przestrzeni (a, x) o hamiltonianie:

$$H(x, a) = H_{coll}(a) + H_{p}(x) + H_{int}(x, a), \qquad (1)$$

3*
gdzie $H_{coll}(a)$, $H_p(x)$, $H_{inf}(a, x)$ oznaczają odpowiednie hamiltoniany rdzenia, nukleonów zewnętrznych oraz oddziaływania tych nukleonów z rdzeniem.

Rozpatrzymy kolejno wszystkie składniki hamiltonianu (1). Ograniczenie się do $H_{coll}(a)$ oznacza przyjęcie jądra magicznego bez nukleonów izewnętrznych. Postać $H_{coll}(a)$ wyznaczyć można przy pomocy modelu kroplowego. Ograniczając się do bezwirowego ruchu cieczy nieściśliwej tworzącej kroplę sprowadzamy $H_{coll}(a)$ do energii powierzchni tej kropli. Pisząc równanie tej powierzchni w postaci:

$$R(\vartheta,\varphi) = R_0 \left\{ 1 + \sum_{\lambda=1}^{\infty} \sum_{\mu=-\lambda}^{\lambda} a_{\lambda\mu} Y_{\lambda\mu}(\vartheta,\varphi) \right\}$$
(2)

(gdzie R_0 oznacza promień jądra niezdeformowanego, $Y_{\lambda\mu}$ (ϑ, φ) — znormalizowane funkcje kuliste) i ograniczając się do niewielkich deformacji jądra (co oznacza założenie małości $a_{\lambda\mu}$). możemy H_{coll} napisać w postaci:

$$H_{coll}(a) = T + V = \frac{1}{2} \sum_{\lambda \mu} \left\{ B_{\lambda} | \dot{a}_{\lambda \mu} |^2 + C_{\lambda} | a_{\lambda \mu} |^2 \right\}.$$
(3)

Parametry bezwładności B_{λ} oraz parametry sztywności C_{λ} powierzchni jądrowej wyznaczyć można przy pomocy modelu kroplowego. W rezultacie otrzymujemy

$$B_{\lambda} = \frac{1}{\lambda} \varrho_0 R_0^5 \tag{4}$$

$$C_{\lambda} = (\lambda - 1) (\lambda + 2) R_0^2 S - \frac{3}{2} \pi^{-1} \frac{\lambda - 1}{2\lambda + 1} \frac{Z^2 e^2}{R_0}, \qquad (5)$$

gdzie ϱ_0 oznacza gęstość cieczy jądrowej, zaś S napięcie powierzchniowe określone fenomenologicznie wzorem

$$4\pi R_0^2 S = 15.4 \cdot A^{\frac{2}{3}}$$
 MeV.

Pierwszy wyraz wzoru (5) odpowiada energii potencjalnej zdeformowanej powierzchni, drugi zaś określa zmniejszenie tej energii wskutek oddziaływań kulombowskich.

Z postaci wzoru (3) wynika, że powierzchnia jądrowa podlega drganiom o częstości

$$\omega_{\lambda} = (C_{\lambda} / B_{\lambda})^{\frac{1}{2}}.$$
 (3)

Okazuje się, że w praktycznych rachunkach można pominąć w hamiltonianie (3) człony odpowiadające wartościom $\lambda \ge 3$. Przesuwając odpowiednio układ współrzędnych eliminujemy również człony dipolowe ($\lambda = 1$). Dzięki temu w praktyce wystarczy ograniczyć się do kwadrupolowych (a więc w przybliżeniu elipsoidalnych) deformacji powierzchni jądra ($\lambda = 2$).*

W obrazie drugiej kwantyzacji otrzymujemy równoważność drgań powierzchni z pewną ilością kwantów, które nazwiemy fononami. Wielkości $a_{\mu}(a_{\mu} \equiv a_{\lambda\mu})$ dla $\lambda = 2$) wyrażają się wówczas w prosty sposób poprzez operatory kreacji i anihilacji fononu w odpowiednim stanie kwantowym o całkowitym momencie pędu $\hbar \lambda = 2 \hbar$ i jego rzucie na oś kwantyzacji $\mu \hbar$. Energia drgań wyraża się zależnością:

$$E_N = \hbar \omega \left(\frac{5}{2} + N \right),$$

gdzie N jest ilością fononów.

Dla całkowitego momentu pędu powierzchni R otrzymuje się następujące wartości własne (w jednostkach \hbar):

przy	N =	0	R = 0
przy	N =	1	R = 2
przy	N =	2	R = 0, 2, 4
przy	N =	3	R = 0, 2, 3, 4, 6.

Zamiast pięciu współrzędnych α_{μ} ($\mu = -2, -1, 0, 1, 2$) wygodnie jest niekiedy używać trzech kątów Eulera Θ, φ, ψ charakteryzujących położenie osi jądra (tj. głównych osi elipsoidy jądrowej) względem osi nieruchomego układu oraz dwóch parametrów β, γ określonych związkami:

 $\left. \begin{array}{c} a_0 = \beta \cos \gamma \\ a_2 = a_{-2} = 2^{-\frac{1}{2}} \beta \sin \gamma \end{array} \right\},$ (8)

gdzie a_{μ} oznaczają współrzędne kolektywne a_{μ} określone w układzie osi jądra (z definicji a_{μ} wynika, że $a_2 = a_{-2}$, $a_1 = a_{-1} = 0$). Używając tych współrzędnych możemy przedstawić energię potencjalną prostym wzorem

$$V = \frac{1}{2} C \beta^2, \qquad (9)$$

gdzie ($C = C_{\lambda=2}$), energię kinetyczną zaś przy pomocy sumy:

(7)

^{*} Rozpatrzeniem pewnych szczególnych przypadków drgań oktupolowych ($\lambda = 3$) zajmiemy się w następnym artykule.

Z. SZYMAŃSKI

$$T = T_v + T_r, \qquad (10)$$

gdzie T_v oznacza energię kinetyczną drgań powierzchni jądrowej w układzie jądra zależną od $\dot{\beta}^2$ oraz γ^2 , zaś T_r — energię kinetyczną obrotową. Przy przejściu do teorii kwantowej możemy T_v wyrazić przez operatory różniczkowania wzgl. γ oraz β

$$T_v = -rac{1}{2}\hbar^2 B^{-1} \Big\{ eta^{-4} rac{\partial}{\partialeta} eta^4 rac{\partial}{\partialeta} + eta^{-2} \sin^{-1} 3\gamma rac{\partial}{\partial\gamma} \sin 3\gamma rac{\partial}{\partial\gamma} \Big\},$$

zaś dla T_r otrzymujemy wyrażenie:

$$T_{\tau} = \frac{1}{2} \sum_{\varkappa=1}^{3} \frac{R_{\varkappa}^2}{\Im_{\varkappa}}, \qquad (11)$$

gdzie R_* ($\varkappa = 1, 2, 3$) oznacza składowe operatora momentu pędu cieczy na osi własne jądra, zaś \Im_{\varkappa} — momenty bezwładności względem osi jądra odpowiadające ruchowi kolektywnemu. Rachunki oparte o model kroplowy dają dla \Im_{\varkappa} :

$$\mathcal{G}_{\mathbf{x}} = 4B\beta^2 \sin^2\left(\gamma - \frac{2}{3}\varkappa\pi\right) \tag{13}$$

(gdzie $B = B_{\lambda=2}$).

Charakterystyczną cechą zależności (12) jest proporcjonalność momentu bezwładności do kwadratu parametru deformacji β . Wynika stąd, że tylko nieznaczna część cieczy bierze udział w kolektywnym ruchu obrotowym. Ruch ten przypominałby więc raczej falę powierzchniową obiegającą powierzchnię jądra, aniżeli rotację ciała sztywnego. Doświadczenie nie potwierdziło jednak tego wniosku, co stało się jednym z głównych argumentów na niekorzyść hydrodynamicznego przedstawienia rdzenia jądra przy pomocy modelu kroplowego. Omówimy to bardziej szczegółowo w następnym artykule.

Przejdziemy z kolei do ruchu nukleonów w jądrze, którego powierzchnia podlega deformacjom. Przy niobecności deformacji hamiltonian nukleonu określony jest przez człon H_p (wzór 1), który można napisać podobnie jak dla modelu powłokowego w postaci

$$H_p = T_p + V_p(r) + D(\vec{l} \cdot \vec{s}), \qquad (13)$$

gdzie T_p oznacza energię kinetyczną nukleonu, V_p (r) — natomiast — jego energię potencjalną (w jądrze sferycznym). Ostatni wyraz we wzorze (13) odpowiada sprzężeniu spinu — orbita. Przyjmując, że energia nukleonu w jądrze zdeformowanym wyraża się sumą KOLEKTYWNE RUCHY NUKLEONÓW W JĄDRZE ATOMOWYM

$$H_p(x) + H_{int}(x,a) \tag{14}$$

otrzymujemy dla hamiltonianu oddziaływania H_{int} wyrażenie postaci

$$H_{int}(x,a) = V'(r,\vartheta,\varphi;a) - V_p(r), \qquad (15)$$

gdzie $V'(r, \vartheta, \varphi; \alpha)$ oznacza energię potencjalną jądra zdeformowanego. Jesli pole sił jądrowych przyjąć w postaci prostokątnej studni potencjału o głębokości V_0 , to przy małych α otrzymamy z (15):

$$H_{int} = -k(\mathbf{r}) \cdot \sum_{\mu} a_{\mu} Y_{2\mu}(\vartheta, \varphi), \qquad (16)$$

gdzie

 $k(r) = V_0 R_0 \delta(r - R_0).$

W założeniu, że radialne elementy macieczowe czynnika k (r) ze wchodzącymi w grę funkcjami falowymi słabo zależą od tych funkcji, można operować uśrednioną po promieniu wartością \overline{k} , którą można traktować jako parametr modelu (przyjmuje się $\overline{k} \approx 40$ MeV).

Ruch nukleonu w jądrze zdeformowanym, tj. ruch określony hamiltonianem (14), nie został ostatecznie zbadany w pierwszych pracach Bohra-Mottelsona, którzy efektywnie posługują się funkcjami falowymi χ_j^{Ω} (j — całkowity moment pędu nukleonu, Ω — jego rzut na oś jądra) — modelu powłokowego. W ogólnym przypadku jądra zdeformowanego ani j, ani Ω nie są dobrymi liczbami kwantowymi. O ile przyjąć założenie osiowej symetrii deformacji, otrzymuje się jedynie stałość Ω . Do bardzo istotnego zagadnienia ruchu nukleonu w jądrze zdeformowanym wrócimy jeszcze w następnym rozdziale.

Przejdziemy w końcu do omówienia układu z pełnym hamiltonianem (1) odpowiadającego sprzężonym z sobą ruchom kolektywnym i indywidualno-nukleonowym. Ponieważ dokładne rozwiązanie odpowiedniego równania ruchu jest w tym przypadku niezwykle trudne, należy zastosować metody przybliżone.

Dla jąder nieznacznie zdeformowanych narzuca się możliwość traktowania członu H_{int} w hamiltonianie (1) jako małego zaburzenia. Perturbacyjną metodę rozwiązywania odpowiednich równań ruchu nazwał Bohr przybliżeniem słabego sprzężenia. W pierwszym przybliżeniu ruchy powierzchni jądra i indywidualnych nukleonów można uznać za niezależne od siebie. Funkcje falowe nukleonów będą wówczas indentyczne z odpowiednimi funkcjami modelu powłokowego, dla powierzchni zaś można przyjąć reprezentację ilości obsadzeń fononowych w stanach $\lambda = 2$ oraz $\mu = -2, \ldots + 2$. Przy małej ilości fononów ($N \leq 3$) można jednak stan powierzchni jądra scharakteryzować tylko trzema liczbami kwantowymi:

- pełną ilością fononów N

- pełnym momentem pędu powierzchni R

— jego rzutem na oś kwantyzacji m_R .

Dodając geometrycznie momenty pędu powierzchni i dodatkowego nukleonu j otrzymamy całkowity moment pędu I jądra. Stany jądra można więc w pierwszym przybliżeniu przedstawić wektorami:

$$|j; NR; IM > , \qquad (17)$$

gdzie M oznacza rzut na oś kwantyzacji całkowitego momentu pędu jądra I. Przejście do dalszych przybliżeń teorii zaburzeń otrzymuje się standardową metodą przez obliczenie elementów macierzowych członu H_{int} w przedstawieniu (17) i wyrażenie przy ich pomocy poprawek do wektora stanu oraz różnych wielkości fizycznych (np. moment magnetyczny, moment kwadrupolowy).

Metoda ta pod wieloma względami przypomina elektrodynamikę kwantową, w której ładunek *e* stanowi analogon stałej sprzężenia \overline{k} z wzoru na H_{int} . W szczególności dla dwóch nukleonów (1,2) znajdujących się na zewnątrz powierzchni obliczyć można energię ich wzajemnego oddziaływania poprzez tę powierzchnię:

$$V(1,2) = -\frac{1}{2}k^{2}C^{-1}\sum_{\mu}\left\{Y_{2\mu}(1)Y_{2\mu}^{*}+Y_{2\mu}^{*}(1)Y_{2\mu}(2)\right\}$$
(18)

Przedstawione tu zwięźle przybliżenie słabego sprzężenia odnosi się jednak głównie od jąder bardzo nieznacznie zdeformowanych. Przekonamy się w dalszym ciągu, że założenie to spełnione jest tylko dla jąder znajdujących się w pobliżu jąder magicznych. Przy znacznej ilości nukleonów znajdujących się w ostatniej nie zapełnionej powłoce oddziaływania ich z rdzeniem są silniejsze i następują większe deformacje jądra. W tym przypadku B o h r zastosował inną metodę, tzw. przybliżenie silnego sprzężenia. Ograniczymy się tu do przedstawienia tej metody w uproszczonym schemacie: — rdzeń + jeden nukleon zewnętrzny. Uogólnienia na przypadek większej ilości nukleonów zewnętrznych podane są w pracach [3] i [4].

Przybliżenie silnego sprzężenia polega na założeniu, że częstość odpowiadająca ruchowi nukleonu zewnętrznego przewyższa znacznie częstość drgań kolektywnych i obrotu powierzchni. W pierwszym przybliżeniu można więc rozpatrywać ruch nukleonu w polu sił jądrowych określonych stałą deformacją (przybliżenie adiabatyczne). Zmienność tego pola wpływać będzie jedynie na ruch nukleonu w postaci poprawek o charakterze nieadiabatycznych efektów. Stała deformacja jądra wywołana poruszającym się szybko nukleonem odznaczać się będzie symetrią względem osi jądra (np. osi 3). W tym przypadku moment pędu j nukleonu nie jest całką równań ruchu, natomiast jego rzut j_3 (odpowiednią liczba kwantowa oznaczamy przez Ω) na oś jądra posiada tę własność.

Całkami równań ruchu są również: kwadrat całkowitego spinu jądra I

(który jest sumą geometryczną wektora \vec{j} oraz wektora \vec{R} momentu powierzchni), jego rzuty na stałą oś kwantyzacji I_z (odpowiednią liczbę kwantową oznaczamy przez M) oraz oś i jądra — I_3 (odp. l. kwant. — K).

Schemat sprzężenia podany jest na rys. 1.

Wektor stanu w przedstawieniu określonym liczbami kwantowymi I, K, M, Ω może być utworzony z funkcji falowej nukleonu χ_o , funkcji

falowej opisującej obrót rdzenia D_{MK}^{I} (Θ , φ , ψ) oraz fuńkcji $\varphi_{OK}^{I_{n\beta}n_{\gamma}}(\beta,\gamma)$ odpowiadającej drganiom zdeformowanej powierzchni względem jej sferoidalnego kształtu równowagi. Funkcje D_{MK}^{I} są to funkcje baka symetrycznego, czyli wspólne funkcje własne operatorów I^2 , I_z , I_3 (stanowią one 2I + 1 — wymiarowa reprezentację grupy obrotów). n_{β} , n_{γ} oznaczają liczby kwantowe określające drgania sferoidalnej powierzchni. Przy przejściu od układu xyz — nieruchomego, do układu (1) (2) (3) osi głównych jądra istnieje dowolność wyboru zwrotu na każdej z tych osi oraz do-



Rys. 1. Schemat wektorowy silnego sprzężenia

wolność ponumerowania tych osi. Wynikają stąd określone własności symetrii funkcji falowej, która musi być niezmiennicza wobec transformacji układu współrzędnych odpowiadających zmianom znaku wzgl. ponumerowania osi (1) (2) (3). Korzystając z tych własności symetrii, wektor stanu w przybliżeniu silnego sprzężenia przedstawić można w postaci

$$|\Omega; n_{\beta}, n_{\gamma}; I, K, M > = \left(\frac{2I+1}{16\pi^{2}}\right)^{\frac{1}{2}} \varphi_{\Omega K}^{In_{\beta}n_{\gamma}}(\beta, \gamma) \left\{ \chi_{\Omega} D_{MK}^{I} + (-1)^{I-j} \chi_{-\Omega} D_{M-K}^{I} \right\}.$$

$$(19)$$

Hamiltonian (1) układu możemy przedstawić w postaci sumy

$$H = H_0 + U, \qquad (20)$$

gdzie do hamiltonianu H_0 pierwszego przybliżenia w sprzężeniu silnym włączymy wszystkie wyrazy hamiltonianu (1) komutujące z operatorami I_3 oraz j_3 , zaś do zaburzenia U — wszystkie pozostałe wyrazy. Uprzednio należy skorzystać z wzorów (9), (10) i (11) kładąc w tym ostatnim

$$R_{\varkappa} = I_{\varkappa} - j_{\varkappa}$$
 ($\varkappa = 1, 2, 3$).

Zakładając, że funkcje nukleonu zewnętrznego χ_{Ω} są funkcjami własnymi hamiltonianu H_p i korzystając z własności funkcji D_{MK}^{I} (Θ, φ, ψ) możemy napisać równanie falowe dla funkcji $\varphi_{\Omega K}^{In\beta n\gamma}$ (β, γ) i szukać stanów własnych drgań powierzchni jądrowej. Każdemu takiemu stanowi określonemu zespołem liczb (n_{β}, n_{γ}) odpowiada widmo energii ruchu obrotowego określone wzorem

$$W_{r} = \frac{1}{2}\hbar^{2}\mathcal{G}_{3}^{-1}(K-\Omega)^{2} = \left(\frac{1}{2}\hbar^{-}\mathcal{G}_{1}^{-1} + \frac{1}{2}\hbar^{2}\mathcal{G}_{1}^{-1}\right)\left\{I(I+1) - K^{2} + j(j+1) - \Omega^{2} - (-1)^{I-j}\left(j+\frac{1}{2}\right)\left(I+\frac{1}{2}\right)\delta_{\Omega}\frac{1}{2}\cdot\delta_{K}\frac{1}{2}\right\}.$$
(22)

Przybliżenie silnego sprzężenia pozwala też na określenie deformacji $\beta = \beta_1, \gamma = \gamma_1$ jądra odpowiadającej równowadze. W skrajnym przypadku silnego sprzężenia otrzymuje się

$$\beta_1 = \left(\frac{5}{4\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \cdot \frac{k}{c} \frac{2j-1}{4(j+1)}$$
(23)

$$\gamma_1 = 0 \text{ lub } \pi, \qquad (24)$$

co odpowiada elipsoidzie obrotowej wydłużonej lub spłaszczonej.

Dla obliczenia dalszych poprawek w przybliżeniu silnego sprzężenia należałoby obliczyć elementy macierzowe zaburzenia U. Zaburzenia te oddziałują w kierunku naruszenia sprzężenia momentu pędu nukleonu z osią jądra oraz wywołują odchylenie od symetrii osiowej pola jądrowego. Obliczenie elementów macierzowych U pozwala na oszacowanie stopnia dokładności przybliżenia silnego sprzężenia.

Przybliżenia słabego i silnego sprzężenia stanowią dwie krańcowe możliwości traktowania modelu kolektywnego. Można się spodziewać, że w większości jąder rzeczywistych realizuje się przypadek sprzężenia pośredniego, tj. sprzężenia leżącego pomiędzy obu opisanymi powyżej. Dokładne rozwiązanie zagadnienia oddziaływania kolektywnych i indywidualnych stopni w przypadku sprzężenia pośredniego nastręcza jednak wielkie trudności rachunkowe. Nieliczne próby rachunków w tym przypadku znajdują się w prącach $[3] \div [8]$.

3. Dalszy rozwój teorii

Podany przez Bohra i Mottelsona model kolektywny okazał się bardzo wygodnym narzędziem badań wielu własności jąder atomowych*. W związku z tym powstała potrzeba głębszego fizycznego i matematycznego uzasadnienia podstawowych założeń, na których oparta została teoria.

1. Po opublikowaniu pierwszych prac A. Bohra ukazał się obszerny artykuł Hilla i Wheelera [9], w pierwszej części którego zostały poddane szczegółowej analizie fizyczne podstawy modelu kolektywnego (por. także [10]). Autorzy formułują systematycznie założenia leżące u podstaw modelu i przeprowadzają wnikliwą dyskusję różnych aspektów zagadnienia, takich jak: stosowalność przybliżenia silnego sprzężenia, mechanizm oddziaływania nukleonów z powierzchnią jądra, sens fizyczny kolektywnej części energii kinetycznej, potencjał deformacji, wymiana energii pomiędzy wzbudzeniami indywidualnych nukleonów i wzbudzeniami powierzchni jądra.

Dla uzyskania kwantowomechanicznego opisu ruchów kolektywnych i wyjaśnienia ich związku z ruchami indywidualnych nukleonów autorzy proponują wprowadzenie funkcji falowej postaci

$$\Phi(x_1\cdots x_N) = \int \Psi(x_1\cdots x_N, a) \exp\left\{-\frac{iM}{\hbar}\sum_j \varphi(x_j)\right\} \cdot h_{\mu}(a) da \quad (25)$$

w której Ψ ($x_1 \dots x_N$, a) oznacza wyznacznik Slatera funkcji falowych N niezależnych nukleonów w potencjale o określonej deformacji a, człon wykładniczy uwzględnia wpływ powolnej zmiany deformacji na funkcję Ψ w czasie, a quasi-oscylatorowe funkcje h_n (a) określają ruch powierzchni jądrowej. Takie kwantowomechaniczne ujęcie modelu kolektywnego różni się na pozór bardzo znacznie od ujęcia Bohra-Mottelsona. Okazało się jednak [11], że obydwa ujęcia są równoważne (z pominięciem nieistotnych szczegółów), a różnice sformułowań polegają jedynie na odmiennych wyborach reprezentacji.

2. Jeżeli jądro atomu uważać za kwantowy układ N oddziaływających ze sobą ciał, to wszystkie jego własności powinny wynikać z rozwiązań odpowiedniego równania falowego dla N — ciał. W związku z tym powstaje problem, w jaki sposób uzyskać można charakterystyczne dla modelu kolektywnego własności jądra z rozwiązań tego równania. Temu teoretycznemu zagadnieniu poświęcono wiele prac [12] — [33]. Prace te analizują, jakie dodatkowe założenia należy uczynić, aby z równania Schrödingera wydzielić kolektywne stopnie

^{*} Zagadnienie to omówione będzie szerzej w następnym artykule.

swobody powierzchni jądrowej. Jeśli rdzeń złożony jest z N nukleonów, to możemy określić w pewien sposób p współrzędnych kolektywnych w funkcji współrzędnych nukleonów rdzenia. Pozostałe 3N - pstopni swobody odpowiadałoby wewnętrznym ruchom nukleonów w rdzeniu, które nie objawiałyby się na zewnątrz przy ruchach kolektywnych rdzenia. Bohr i Mottelson [3] zaproponowali przyjęcie następujących zależności współrzędnych kolektywnych od współrzędnych nukleonów rdzenia

$$a_{\lambda\mu} = \frac{4}{3} \pi N^{-1} \sum_{j=1}^{N} (r_j/R_0)^{\lambda} Y^*_{\lambda\mu}(\vartheta_j, \varphi_j), \qquad (26)$$

gdzie (r_i , ϑ_i , φ_i) oznaczają współrzędne kuliste *j*-tego nukleonu.

Cytowane powyżej prace zawierają próby uzyskania z równania Schrödingera hamiltonianiu w postaci (1) wraz z odpowiednimi wyrażeniami dla H_{coll} i H_{int}. Korzysta się przy tym z zależności postaci (26) lub nieco zmodyfikowanej postaci zależności $a_{\lambda\mu}$ od współrzędnych nukleonów rdzenia. Zależność tę traktuje się jako warunek na funkcję stanu lub też związek pomiedzy operatorami x i α . Niektórzy autorzy (zob. np. [13] lub [23]) otrzymują w hamiltonianie dodatkowe niewielkie poprawki nie występujące u Bohra-Mottelsona. Są też próby poszukiwania zależności $a_{\lambda\mu}$ od współrzędnych nukleonów w postaci zupełnie odbiegającej od postaci (26) (por. [27] także i Bohr-Molttelson zapowiedzieli opublikowanie pracy na ten temat). Jeden z autorów [28] [29] kwestionuje nawet możliwość istnienia zależności $\alpha_{\lambda\mu}$ od samych tylko współrzędnych nukleonów. Większość cytowanych tu prac przynosi wprawdzie formalne rozwiązanie postawionego zagadnienia, tj. wydzielenie różnymi sposobami ruchów kolektywnych z równania falowego dla N ciał, jednakże głębszy wgląd w istotę ruchów kolektywnych a w szczególności bliższe określenie wartości parametrów B i C występujących w (3) względnie zweryfikowanie wzorów (4) i (5) możliwe jest jedynie pod warunkiem określenia wewnętrznych funkcji falowych rdzenia, tj. funkcji określających ruch nukleonów w rdzeniu.

3. Tak więc rozwój modelu kolektywnego postawił przed mechaniką kwantową jądra nowy problem rachunkowy: znalezienie poziomów energetycznych i funkcji falowych układu nukleonów w potencjale nie posiadającym symetrii kulistej. Realizacja tego zadania możliwa była oczywiście jedynie przy założeniu pominięcia oddziaływań pomiędzy nukleonami i ograniczenia się do średniego pola jądrowego. To ostatnie założenie stanowi, jak wiadomo, podstawę modelu powłokowego. Postawione zadanie oznacza więc modyfikację tego modelu na przypadek braku symetrii kulistej pola sił jądrowych. Rozwiązaniu tego zagadnienia

poświęcono szereg prac [34] ÷ [40]. Już Rainwater [1] poszukiwał przesunięcia poziomów energetycznych wywołanych sferoidalnym charakterem jamy potencjalnej. Dla znalezienia stałych deformacji jąder o dużych momentach kwadrupolowych. Rainwater rozwiązywał to zagadnienie przy użyciu współrzędnych sferoidalnych (por. także [39]). Rachunki Rainwatera poddali analizie Feenberg i Hammack [34]. Metoda separacji równania falowego we współrzędnych sferoidalnych jest jednak żmudna rachunkowo i nie daje nadziei na możliwość uwzględnienia oddziaływań między nukleonami. Zakładając potencjał jądra jako określony anizotropowym polem oscylatora harmonicznego można zagadnienie rozwiązać przez bezpośrednią separację równania falowego we współrzędnych prostokątnych [35]. Aby jednak uzyskać rozwiązania odpowiadające bardziej zbliżonym do rzeczywistości polom jądrowym (np. z uwzględnieniem sprzężenia spin-orbita lub przy innych kształtach jamy potencjalnej), należy uciec się do metod przybliżonych. Dotychczas zastosowano z powodzeniem dwie takie metody polegające na:

a) transformacji układu współrzędnych, przy której sferoida przechodzi w kulę,

b) rozwinięcie funkcji falowej na funkcje własne hamiltonianu z potencjałem sferycznym.

Pierwsze z tych metod zastosowane zostały przez Moszkowski ego [99], który znalazł poziomy energetyczne nukleonu w funkcji deformacji w potencjale sferoidalnym mającym kształt nieskończonej jamy prostokątnej. Moszkowski poświęca też nieco miejsca uwzględnieniu wpływu sprzężenia spin-orbita oraz innych kształtów potencjału.

Druga metoda — rozwinięcie funkcji falowej w reprezentacji hamiltonianu jądra sferycznego znalazła zastosowanie w dwóch podstawowych pracach Nilssona [37] i Gottfrieda [38]. Nilsson przyjmuje pole jądrowe w postaci osiowo-symetrycznego oscylatora harmonicznego wraz z członem sprzężenia spin-orbita oraz dodatkową poprawką proporcjonalną do kwadratu orbitalnego momentu pędu nukleonu, Gottfried natomiast zakłada pole sił jądrowych w postaci sferoidalnej jamy prostokątnej. Obydwaj wymienieni autorzy otrzymują w rezultacie sumarycznych rachunków dokładne wykresy poziomów energetycznych w funkcji deformacji jądra* oraz funkcje falowe nukleonów poruszających się niezależnie w polu sferoidalnym. Okazuje się, że istotnie deformacja pola sił jądrowych powoduje zupełne rozbicie schematu modelu powłokowego. Moment pędu nukleonu j przestaje być stałą ruchu, a zachowuje się jedynie jego rzut na oś symetrii jądra. Każdy poziom ener-

^{*} Na rys. 2 podajemy otrzymany przez Gottfrieda wykres poziomów energetycznych w funkcji deformacji.



Rys. 2. Poziomy energetyczne nukleonów w funkcji deformacji jądra. Punkty na osi rzędnych ($\beta = 0$) odpowiadają poziomom modelu powłokowego

getyczny jest więc zdegenerowany jedynie dwukrotnie (zależnie od kierunku spinu nukleonu). Okazuje się, że przy wydłużonym kształcie sferoidu poziomy energetyczne odpowiadające niższym wartościom Ω leżą niżej, przy spłaszczonym kształcie pola — na odwrót, najniżej leżą poziomy o dużych wartościach Ω . Ponadto prace G ottfrieda [38] zawiera dyskusję możliwości odstępstw od symetrii osiowej pola. Okazuje się, że potencjałom odznaczającym się symetrią osiową odpowiada najniższa energia.

Prace dotyczące ruchu nukleonów w potencjale niesferycznym, a zwłaszcza cytowane prace Gottfrieda, Nilssona i Moszkowskiego, wypełniają lukę w dotychczasowej w teorii Bohra-Mottelsona. Pozwalają one na znacznie bardziej poprawne sformułowanie schematu obliczeń wszystkich prawie zagadnień atakowanych przy pomocy modelu kolektywnego (można tu wymienić przykładowo obliczanie momentów kwadrupolowych i magnetycznych, deformacji jąder, spinów, prawdopodobieństw przejść elektromagnetycznych itd. — omówimy to szerzej w następnym artykule).

4. Już na podstawie pobieżnej konfrontacji istniejącego materiału doświadczalnego, Bohr i Mottelson [3] wykazali trafność opisu budowy jądra dostarczonego przez model kolektywny. Te niewątpliwe sukcesy hydrodynamicznego ujęcia ruchów kolektywnych zwróciły na siebie uwagę wielu fizyków. W krótkim stosunkowo czasie zgromadzono olbrzymi materiał doświadczalny, który pozwolił na przeprowadzenie szczegółowej analizy stosowalności modelu.* Okazało się wówczas, że istotnie model ten tłumaczy jakościowo cały szereg faktów doświadczalnych, które poprzednio pozostawały niewyjaśnione. Jednakże przy bliższej ilościowej konfrontacji wyników doświadczeń z teorią wyszły również na jaw bardzo poważne braki modelu. Wyliczymy tu najważniejsze z nich. Hydrodynamiczne ujęcie modelu pozwala na wyrażenie momentu kwadrupolowego jądra przez parametr deformacji β_1 . Przyjmując zależność (23) dla wyznaczenia β_1 otrzymujemy jednak wartości momentów kwadrupolowych znacznie większe od wartości zaobserwowanych z danych spektroskopowych. Z drugiej strony teoria hydrodynamiczna pozwala na wyznaczenie momentów kwadrupolowych inną metodą, przy pomocy prawdopodobieństw przejść γ typu E2. Otrzymane na tej drodze wartości momentów różnią się od poprzednich.

Drugą dziedziną rażącej niezgodności modelu hydrodynamicznego z doświadczeniem są poziomy wzbudzone. Pomimo że sam fakt doświadczalnego potwierdzenia istnienia poziomów rotacyjnych jąder należy

^{*} Ze względu na obszerność materiału, analizie stosowalności modelu poświęcimy następny artykuł, ograniczając się tu jedynie do pobieżnego omówienia kilku zasadniczych punktów.

uważać jeden z najważniejszych sukcesów modelu, jednakże przy ilościowym porównaniu doświadczalnych wartości poziomów wzbudzonych z obliczonymi (na podstawie wzoru (11)) występują znaczne niezgodności. Przyjmując wzór (11) za podstawę rozważań, można z doświadczalnych wartości energii wzbudzeń rotacyjnych wyznaczyć momenty bezwładności jąder. Otrzymane w ten sposób wartości są znacznie większe od hydrodynamicznych momentów bezwładności (danych wzorem (12) i są one rzędu 0,6 momentów bezwładności wyliczonych na zasadzie traktowania jądra jako ciało sztywne. Przy analizie wibracyjnych poziomów wzbudzonych również zaobserwowano niezgodności teorii z doświadczeniem. W tym zakresie rzuca się w oczy zależność współczynników sztywności jądra C_2 od konfiguracji nukleonów.

Te i inne niepowodzenia modelu przy jednoczesnym stwierdzeniu szeregu sukcesów nasunęły przypuszczenie, że przedstawienie rdzenia jądra przy pomocy kropli cieczy jądrowej nie wyjaśnia w dostateczny sposób kolektywnych własności jądra. Wniosek ten sformułowali pierwsi Bohr i Mottelson [3], którzy już w początkowym stadium rozwoju modelu kolektywnego traktowali ujęcie hydrodynamiczne jako metodę jakościowego szacowania efektów fizycznych. Wyraźna zależność własności jąder od konfiguracji nukleonów narzucała możliwość traktowania efektów kolektywnych jako poprawki do modelu powłokowego. Pogląd ten rozwinął szerzej w swych pracach [41], [42] Inglis (zob. także [47] oraz [44], [43]. Jeśli przyjąć, że pole sił jądrowych (które Inglis przyjmował w postaci oscylatora harmonicznego) jest zmienną dynamiczną, to stany kwantowe nukleonów nie są stanami stacjonarnymi. Przyjmując przybliżenie adiabatyczne dla uwzględnienia wpływu zmienności pola na stany nukleonów, Inglis otrzymał w drugim przybliżeniu teorii zaburzeń energię kinetyczną ruchów kolektywnych (określonych parametrem a) w postaci

$$T_{coll} = \frac{1}{2} \dot{a}^{2} \left\{ 2\hbar^{2} \sum_{K} | < K | \frac{\partial}{\partial x} | L > |^{2} (E_{K} - E_{2})^{-1} \right\}, \qquad (27)$$

gdzie L oznacza stan podstawowy jądra, zaś K — dowolny stan wzbudzony. Wyrażenie stojące w nawiasie po prawej stronie wzoru (27) stanowi parametr bezwładności jądra, który np. jest momentem bezwładności, o ile α oznacza współrzędną określającą obrót jądra dookoła odpowiedniej osi. Metoda Inglisa pozwala również na obliczanie innych parametrów kolektywnych jądra, np. współczynnika giromagnetycznego g_R powierzchni jądrowej.

Ograniczając się do jąder z zamkniętymi powłokami Inglis otrzymał wprawdzie momenty bezwładności pokrywające się z ujęciem hydro-

dvnamicznym, jednakże Bohr i Mottelson [45] wykazali, że dla jader z cześciowo wypełnionymi powłokami wartości momentów bezwładności sa znacznie wieksze i zbliżają się do wartości odpowiadających ciału sztywnemu. Przyjmując, że deformacja jądra wyznaczona jest dla danej konfiguracji przez warunek najmniejszej energii, Bohr i Mottelson wykazali, że w przypadku potencjału oscylatora harmonicznego momenty bezwładności jąder z częściowo wypełnionymi powłokami sa ściśle równe momentom ciała sztywnego, przekraczają więc nawet wartości doświadczalne. Niezgodność te Bohr i Mottelson próbują wyjaśnić uwzględniając wpływ odziaływania bezpośredniego nukleonów. Być może również, że niezgodność ta wynika ze specyficznych własności pola oscylatorowego [46]. Moszkowski [48] zwrócił uwagę na to, że przy deformacji pola jądrowego nie zachowany jest warunek samouzgodnienia (selfconsistency). Wyliczona gęstość nukleonów przy zadanej deformacji potencjału zmienia się wolniej aniżeli pole sił jądrowych. Warunek samouzgodnienia wymaga więc, by przy deformacji potencjału nukleonów zachodziły dodatkowe, nie ujęte dotychczasowymi rachunkami procesy. Ponieważ odległości poziomów energetycznych nukleonów w polu zdeformowanym (obliczone np. przez Nilssona [37]) są tego samego rzędu, co i wzbudzenia rotacyjne, Moszkowski przypuszcza, że podczas deformacji potencjału następuje zmieszanie różnych konfiguracji nukleonowych. Wynika stąd, że udział nukleonów znajdujących się w zewnętrznych, nie wypełnionych powłokach ma znacznie większy wpływ na kolektywne własności jądra, aniżeli spodziewano się tego poprzednio. Pewną modyfikację metody Inglisa podali Lipkin, de-Shalit i Talmi [49].

5. Spośród innych sposobów uogólnienia teorii modelu kolektywnego należy wymienić uwzględnienie ściśliwości cieczy jądrowej tworzącej rdzeń [50], [51]. Otrzymuje się wówczas dodatkowe kolektywne stopnie swobody związane ze zmianą gęstości nukleonów w jądrze. W ujęciu rachunkowym prowadzi to do istnienia wielu wartości własnych częstości ω_{λ} odpowiadających danemu λ . Przy pomocy tej teorii można tłumaczyć istnienie wibracyjnych poziomów wzbudzonych (0 +) w niektórych jądrach o bardzo sztywnej powierzchni (np. ¹⁶O). Dla jąder o mniej sztywnej powierzchni uwzględnienie ściśliwości prowadzi do niewielkiej poprawki we wzorach (4), (5), (6) na częstość drgań powierzchni jądrowej.

Literatura

- 1. J. Rainwater, Phys. Rev. 79, 432 (1950).
- 2. 'A. Bohr, Kgl. Danske Videnskab. Selskab, Mat.-fys. Medd. 26, No 14 (1952).*
- 3. A. Bohr. B. Mottelson, ibid. 27, No 16 (1953).*
- 4. K. Ford, Phys. Rev. 90, 29 (1953).*
- 5. D. C. Cheudhury, Kgl Danske Videnskab. Selskab, Mat.-fys. Medd. 28, No 4 (1954).
- 6. G. Scharf-Goldhaber, J. Weneser Phys. Rev. 98, 212 (1955).
- 7. B. J. Raz, Thesis, University of Rochester.
- 8. A. K. Kerman Phys. Rev. 92, 1176 (1953).
- 9. D. L. Hill, J. A. Wheeler, Phys. Rev. 89, 1102 (1953).
- 10. J. A. Wheeler, Nuovo Cim. Supl. 2, 909 (1955).
- 11. T. Marunori, Progr. Theor. Phys. 14, 608 (1955).
- 12. H. Tolhoek, Physica 21, 1, (1955).**
- F. Coester, Phys. Rev. 99, 170 (1955)**, Bull. Am. Phys. Soc. Ser. II, 1, 194 (1956).
- 14. S. Tomonaga, Progr. Theor. Phys. 13, 467 (1955).
- 15. S. Tomonaga, ibid. 13, 482 (1955).
- 16. T. Marumori, J. Yukawa, R. Tanaka, ibid. 13, 442 (1955).
- 17. T. Marumori, E. Yamada, ibid. 13, 557 (1955).
- 18. H. J. Lipkin, A, de-Shalit, I Falmi, Nuovo Cim. 11, 773 (1955).
- 19. M. Trocheris, Cah. de Phys. No 61, 1 (1955).
- 20. R. S. Nataf, Compt. Rend., 240, 2510 (1955); 241, 31 (1955).
- 21. R. Skinner, Canad. Journ. of Phys. 34, 901 (1956).
- 22. T. Tamura, Nuovo. Cim. IV, 713 (1956).
- 23. T. Miyazima, T. Tamura, Progr. Theor. Phys. 15, 255 (1956).
- 24. T. Marumori, S. Suekane, A. Y. Yamamoto, ibid. 16, 320 (1956).
- 25. D. N. Zubariew, Dokł. Ak. Nauk. SSSR 109, 489 (1956).
- 26. Y. Watanabe, Progr. Theor. Phys. 16, 1 (1956).
- 27. F. Coester, Nuovo Cim. 4, 1307 (1956).
- 28. R. S. Nataf, J. Phys. 17, 516 (1956).
- 29. R. S Nataf, Nucl. Phys. 2, 497 (1956/57).
- 30. Asanaga streszczenie zob. Referatiwnyj Żurnał No 8, str. 58 (1956).
- 31. R. J. Blin Stoyle, Nucl. Phys. 2, 169 (1956/57).
- 32. J. Yoccoz, J. Phys. Rad. 17, 517 (1956).
- 33. T. H. R. Skyrme, Proc. Roy. Soc. A239, 399 (1957).
- 34. E. Feenberg, K. C. Hammack, Phys. Rev. 81, 285 (1951).
- 35. M. Gursky, Phys. Rev. 98, 1205 (1955).
- 36. S. Moszkowski, Phys. Rev. 99, 803 (1955).
- S. G. Nilsson, KgL Danske Videnskap. Selskab, Mat.-fys. Medd. 29, No 16 (1955). (1955).
- 38. K. Gottfried, Phys. Rew. 103, 1017 (1956).
- 39. S. Granger, R. D. Spence, Phys. Rev. 83, 460 (1951).
- 40. Soriano, ibid. 4, 657 (1956).
- 41. D. R. Inglis, Phys. Rev. 96, 1059 (1954).**
- 42. D. R. Inglis, Phys. Rev. 97, 701 (1955).**
- 43. Valantin, Proc. Roy. Soc. A238, 132 (1956).
- 44. A. Mouhasseb, Compot. Rend. 242, 2111 (1956).

- A. Bohr, B. Mottelson, Kgl Danske Videnskab. Selskab, Mat.-fys. Medd. 30, No 1 (1955).**
- 46. D. R. Inglis Phys. Rew. 103, 1786 (1956).
- 47. S. Gallone, C. Salvetti, Nuovo Cim. 10, 145 (1953).
- 48. S. Moszkowski, Phys. Rev. 103, 1328 (1956).
- 49. H. J. Lipkin, A. de-Shalit, I. Talmi, Phys. Rev. 103, 1773 (1956).
- 50. S. Flügge, K. Woeste, Z. f. Phys. 132, 384 (1952).
- 51. K. Woeste, ibid. 133, 370 (1953).

4*

*Zob. także Problemy sowremiennoj fiziki, Nr 9 (1955). ** Zob. także Problemy sowremiennoj fiziki, Nr 1 (1956). Andrzej Tramer Instytut Fizyki PAN

Widma oscylacyjne i stałe siłowe drobin wieloatomowych

Wstęp

Kiedy pod koniec lat dwudziestych rozpoczynano systematyczne badania widm oscylacyjnych (tj. widm absorpcji w podczerwieni i rozproszenia ramanowskiego), wyniki tych badań stanowiły jedno z najważniejszych źródeł informacji o budowie drobin. Tym tłumaczy się szczególnie duże zainteresowanie spektroskopią widm oscylacyjnych zarówno wśród chemików jak i wśród fizyków, zainteresowanie, które osiągnęło szczyt na przełomie lat trzydziestych i czterdziestych. Również i dzisiaj, mimo rozwoju innych metod badań strukturalnych (rentgenoi elektronografia, spektroskopia mikrofalowa, rezonans paramagnetyczny), badania widm ramanowskich i absorpcyjnych w podczerwieni nie utraciły znaczenia.

Można wskazać cały szereg problemów, w których metodyka ta pozwala na osiągnięcie szczególnie cennych wyników. Wystarczy wymienić:

1) wykrywanie obecności charakterystycznych grup atomów (grup funkcyjnych, układów wiązań podwójnych) w złożonych drobinach (np. makromolekuły, wysokopolimery),

2) wyznaczanie funkcji termodynamicznych,

3) badanie działania sił międzydrobinowych i struktury nietrwałych kompleksów międzydrobinowych,

4) badanie struktury kryształów molekularnych i

5) wyznaczanie wewnętrznych parametrów drobiny jak jej pola siłowe, rozkład ładunku elektrycznego i polaryzowalność.

W niniejszym przeglądzie ograniczam się do zagadnienia mechaniki drgań drobin, tj. zależności położenia (częstości) linii w widmie oscylacyjnym od takich parametrów jej budowy, jak geometria (symetria, długości wiązań i wielkość kątów walencyjnych) i wielkość sił działających między atomami w drobinie. Próby ilościowej interpretacji częstości oscylacji drobin zostały podjęte już w latach dwudziestych [1,2]. Do analizy drgań drobin zastosowano z powodzeniem metody mechaniki klasycznej używane w badaniu małych drgań układów punktów materialnych.

W latach trzydziestych dokonano dużej pracy doskonalenia metodyki opracowując dla poszczególnych typów drobin najbardziej dogodne drogi analizy widma (szczegółowe omówienie tych prac p. [3, 4, 5]). Na podstawie wyników tych prac stworzona została w latach 1939—43 niemal równocześnie i niezależnie przez Wilsona i współpracowników [6, 7] w Stanach Zjednoczonych i Eliaszewicza i Stepanowa [8,9] w ZSRR ogólna teoria i metodyka interpretacji mechaniki drgań drobin. Monografie Wilsona [10] i Wolkensztejna, Eliaszewicza, Stepanowa [11] sumują wyniki aż do roku 1950. Niniejsze omówienie oparte jest więc z konieczności na obu tych monografiach i wykracza poza ich materiał jedynie w przypadku nielicznych, szczególnie interesujących prac publikowanych w ostatnich latach.

Szczegółowa, ilościowa interpretacja widma oscylacyjnego jest praktycznie wykonalna jedynie dla drobin stosunkowo prostych, których parametry geometryczne zostały wyznaczone innymi metodami (rentgenoi elektronografia, widma rotacyjne).

W tych warunkach wynikiem analizy widma jest:

1) wyznaczenie polasiłowego drobiny, tj. zależności energii potencjalnej od zmian położeń atomów,

2) określenie formy drgań, to znaczy amplitud drgań wykonywanych przez poszczególne atomy, co z kolei stanowi podstawę wyznaczania m o m e n t ó w e l e k t r y c z n y c h i polaryzowalności poszczególnych wiązań z natężeń i stanu polaryzacji linii w widmie rozproszenia ramanowskiego i absorpcji w podczerwieni,

3) potwierdzenie, jeżeli inne metody nie dają jednoznacznej odpowiedzi, typu symetrii drobiny,

4) wyznaczenie ogólnych prawidłowości określających zależność widma danej grupy drobin od ich struktury. Przeprowadzenie szczegółowych rachunków dla najprostszych drobin danej grupy np. szeregu homologicznego umożliwia jednoznaczną interpretację widm drobin bardziej złożonych bez uciążliwych wyliczeń.

Największe znaczenie dla poznania elektronowej budowy drobiny posiada wyznaczenie stałych siłowych (stałych siły quasi-sprężystej), które występują jako współczynniki zależności energii potencjalnej od zmiany parametrów geometrycznych drobiny:

$$\mathbf{f}_{ij} = \frac{\partial^2 \mathbf{V}}{\partial q_i \, \partial q_j}$$

Widmo oscylacyjne

Materiałem doświadczalnym stanowiącym punkt wyjścia dla analizy drgań drobiny są częstości linii lub pasm w jej widmie oscylacyjnym. Widmo oscylacyjne drobiny *N*-atomowej składa się w ogólnym przypadku z 3*N* — 6 linii, w których na częstość przejścia oscylacyjnego nakłada się struktura rotacyjna. Dokładność wyznaczenia częstości jest na ogół silnie ograniczona przez warunki eksperymentalne. Dla szeregu drobin możliwe jest jedynie badanie widma faz skondensowanych, gdzie częstości własne drobin są zaburzone (na ogół obniżone) wskutek oddziaływań międzydrobinowych, a znaczna szerokość i rozmycie subtelnej struktury pasm w podczerwieni uniemożliwia dokładne wyznaczenie częstości przejścia zerowego.

Czynnikiem bodaj poważniejszym jest wpływ anharmoniczności drgań drobiny. Częstość stanu wzbudzonego¹ dana jest równaniem:

$$\frac{E}{hc} = \sum_{i} v_{io}(v_i+1/2) + \sum_{i,j} x_{ij}(v_i+1/2)(v_j+1/2) + \sum_{i,j} y_{ij}(v_i+1/2)(v_j+1/2)^2 \dots \quad (1)$$

Obserwowana częstość drgania podstawowego v_i różni się więc od częstości własnej drobiny o:

$$v_{io} - v_i = 1/2 \sum_{j=1}^{3N-6} x_{ij},$$
 (2)

przy pominięciu wyrazów stopnia trzeciego i wyższych. Współczynniki anharmoniczności x_{ij} można wyznaczyć w sposób przybliżony w oparciu o znajomość częstości przejść harmonicznych ($\Delta v_i = 2,3...$). Jest to w pełni wykonalne dla drobin o niewielkiej ilości atomów, jednakże ilość współczynników szybko wzrasta ze wzrostem ilości drgań własnych. Dla drobiny o n częstościach własnych konieczne jest wyznaczenie n(n + 1/2) współczynników (np. dla drobiny 5-atomowej — 9 drgań własnych — 45 współczynników). Dokładne wyznaczenie częstości tak wielu przejść harmonicznych nie jest na ogół możliwe.

Sytuacja ta zmusza w większości przypadków, do pominięcia anharmoniczności, tj. przyjęcia założeń upraszczających:

$$x_{ij} \cong 0 \qquad \nu_{i0} \cong \nu_i \tag{3}$$

Wynikające stąd błędy nie są zbyt duże z wyjątkiem przypadku częstości drgań wiązań zawierających wodór (X — H), których anharmoniczność jest szczególnie silna. W tym przypadku trzeba się uciec do metod przybliżonych, pozwalających uwzględnić z grubsza wpływ anharmonicz-

¹ Częstość drgań w spektroskopii widm oscylacyjnych wyraża się z reguły w liczbach falowych: $v = 1/\lambda$.

ności wiązania X — H na częstość drgań. Dość szerokie rozpowszechnienie zdobyła metoda H e m p t i n n e – M a n n e b a c k a [12]: wprowadzenie empirycznej poprawki na masę atomu wodoru lub deuteru (tak zwana masa spektroskopowa wodoru $m_{\rm H} = 1,088, m_D = 2,126$).

Pełne przyporządkowanie poszczególnych częstości różnym typom drgań lub częściom składowym drobiny możliwe jest jedynie na podstawie wykonanych obliczeń. Jednakże pewna wstępna interpretacja widma może poważnie uprościć dalszą pracę.

Z pomocą przychodzą tu w pierwszym rzędzie reguły wyboru dla przejść oscylacyjnych i rotacyjnych. W absorpcji w podczerwieni wystąpić mogą jedynie częstości tych drgań drobiny, w trakcie których zmianie ulega jej moment elektryczny; w rozproszeniu ramanowskim czynne są wyłącznie drgania, którym towarzyszy zmiana polaryzowalności drobiny. W związku z tym częstości należące do niektórych typów symetrii są wzbronione bądź to w widmie ramanowskim, bądź podczerwonym. Dotyczy to zwłaszcza drobin o wyższej symetrii. W szczególności dla drobin posiadających środek symetrii działa tak zwany zakaz alternatywny: częstości dozwolone w widmie ramanowskim (drgania symetryczne względem środka symetrii) są wzbronione w podczerwieni i na odwrót, częstości drgań antysymetrycznych względem środka, wzbronione w widmie ramanowskim, występują w absorpcji w podczerwieni. Te same reguły określają zależność stopnia depolaryzacji promieniowania w widmie ramanowskim od typu symetrii drgań: im wyższa jest symetria drgania, tym silniej spolaryzowana jest odpowiadająca mu linia. Pewnych jakościowych wskazówek może dostarczyć wyznaczenie natężeń i połówkowych szerokości linii.

Kontur pasm w widmie w podczerwieni zależny jest od struktury rotacyjnej. Reguły wyboru dla przejść rotacyjnych zależą od położenia momentu elektrycznego przejścia względem głównych osi drobiny. Na przykład w drobinach liniowych dla drgań równoległych do osi wzbronione są przejścia rotacyjne z J = 0 (pasmo typu PR z minimum w środku), przejściom prostopadłym do osi, dla których zakaz ten nie działa odpowiadają pasma PQR z silnym maksimum w centrum.

Wreszcie wiązania wyróżniające się od pozostałych bądź to wysoką siłą wiązania, bądź to szczególnie małą lub dużą masą uczestniczących w nich atomów posiadają tak zwane częstości charakterystyczne, mało zależne od struktury pozostałej części drobiny. Drgania o charakterystycznych częstościach można więc z góry przypisać odpowiednim wiązaniom. Można zresztą wyznaczyć także, chociaż ze znacznie mniejszą precyzją, zakres częstości odpowiadających innym grupom atomów (tabela 1).

Wiązanie (kąt)	Typ drobiny	Częstość drgań
≡С-н	pochodne acetylenu	3250 - 3350
=C-H	", etylenu	3000 - 3100
-C-H	węglowodory nasycone i po-	
	chodne	2850 - 3000
-O-H	woda, alkohole, fenole	3400 - 3650
_C≡N	nitryle	2200 - 2250
_C=0	aldehydy, ketony, kwasy	1650 — 1750
C≡C	pochodne acetylenu	1900 — 2100
C=C	,, etylenu	1600 - 1650
$\langle \rangle$		
-c-c-	", etanu	750 — 1250
$\langle \rangle$		-
C-CI	chloroalkany	400 - 700
с≝с–н	pochodne acetylenu	~ 700
		900 - 1100
с-с-н	,, etanu	
H		
H		1400 - 1500
)c()	23 23	
		1

Tabela 1

W niektórych prostych przypadkach udaje się osiągnąć na tej drodze pełną interpretację widma. Jako przykład może służyć liniowa, symetryczna drobina CO₂. Czterem oscylacyjnym stopniom swobody drobiny

odpowiadają dwa drgania walencyjne wiązań C — O symetryczne σ_{g} i antysymetryczne σ_u względem środka oraz drganie deformacyjne kąta 0 0 zdegenerowane π_u (rys. 1). W widmie ramanowskim obserwujemy tylko jedną częstość ok. 1300 cm⁻¹ (pomija się rozszczepienie związane



z rezonansem Fermiego), która na mocy zakazu alternatywnego musi być przypisana drganiu σ_g ; dwie pozostałe częstości ok. 650 i 2340 cm⁻¹ obserwujemy w podczerwieni. Niższa częstość pósiada kontur typu PQR, wyższa — PR, a więc zarówno z tego względu, jak i na podstawie porównania z typowymi częstościami drgań deformacyjnych i walencyjnych można jednoznacznie określić pierwszą jako π_u , drugą jako σ_u .

Współrzędne wewnętrzne i równanie drgań

Jak już wspomniano na wstępie, wobec stosunkowo dużych mas atomów i niewielkich energii możliwe jest rozwiązanie podstawowych problemów mechaniki drgań drobin na gruncie mechaniki klasycznej².

W ogromnej większości przypadków przyjęcie drgań harmonicznych o nieskończenie małych amplitudach prowadzi do zadowalających wyników. Założenie bardziej ogólnego pola sił uwzględniającego anharmoniczność drgań ogromnie komplikuje obliczenia. Rachunki takie zostały wykonane dla kilku drobin 3- i 4-atomowych (p. np. [13]). Poza trudnościami praktycznymi, wątpliwa jest celowość badań tego rodzaju: obecny stan rozwoju teorii budowy drobin nie daje możliwości interpretacji ich wyników.

Rozwiązanie równania drgań drobiny dwuatomowej w przybliżeniu harmonicznym jest oczywiście natychmiastowe:

$$m\ddot{q} = -kq \qquad q = q_0 e^{i\omega t} \tag{4}$$

$$\omega^2 = \frac{k}{m} \tag{5}$$

Niekiedy usiłuje się korzystać z tej prostoty również dla przybliżonego wyznaczenia niektórych parametrów drobin wieloatomowych. Tak np. próbowano traktować pewne wyróżnione wiązania np. C=Olub — $C\equiv N$ jako niezależny od reszty drobiny oscylator harmoniczny i z porównania częstości drgań w różnych drobinach wnioskować o zmianach siły wiązania. Przybliżenie to jest niezmiernie grube i prowadzi do wniosków dowolnych, a czasem wręcz niesłusznych.

W każdym drganiu drobiny wieloatomowej uczestniczą w większym lub mniejszym stopniu wszystkie jej atomy. Drobinę trzeba więc rozpatrywać jako układ oscylatorów związanych. Rozwiązanie problemu drgań sprowadza się zatem do ułożenia i rozwiązania układu równań różniczkowych typu:

² Efekty typowo kwantowe, jak np. inwersja, dochodzą do głosu szczególnie silnie w drobinach zawierających lekkie atomy, głównie H.

$$\ddot{q_i} = \sum_j a_{ij} q_j. \tag{6}$$

Gdyby możliwe było uzyskanie ścisłego rozwiązania, wyniki nie zależałyby, rzecz jasna, od przyjętego układu współrzędnych. Jednakże zarówno wspomniane wyżej założenia upraszczające, jak i stosowane w dalszej pracy przybliżone metody rozwiązania układu równań pozwalają jedynie na uzyskanie rozwiązań przybliżonych. Jakość uzyskanego przybliżenia zależy już od właściwego doboru współrzędnych. Drugim czynnikiem określającym taki wybór jest dążenie do przedstawienia równania ruchu w możliwie prostej postaci.



Rys. 2. Współrzędne kartezjanskie drgań drobiny XYZ

Tak np. energia drobiny wyraża się w sposób prosty przez zmiany kartezjańskich współrzędnych położeń atomów i ich pochodne względem czasu:

$$\mathbf{q}_1 = \Delta \mathbf{x}_1, \ \mathbf{q}_2 = \Delta \mathbf{y}_1, \ \mathbf{q}_3 = \Delta \mathbf{z}_1 \cdots \mathbf{q}_{3N-1} = \Delta \mathbf{q}_N, \ \mathbf{q}_{3N} = \Delta \mathbf{z}_N$$
(7)

Energia kinetyczna wyraża się przez:

$$2T = \sum_{i=1}^{3N} m_i \ddot{q}_i^2.$$
 (8)

Energię potencjalną można przedstawić w postaci:

$$V = V_0 + \sum_{i=1}^{3N} \left(\frac{\partial V}{\partial q_i} \right)_0 q_i + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{3N} \left(\frac{\partial^2 V}{\partial q_i \, \partial q_j} \right)_0 q_i q_j + \dots$$
(9)

a zakładając $V_0 = 0$ i biorąc pod uwagę, że drobina w stanie równowagi znajduje się w minimum energii, tj. że wszystkie

$$\left(\frac{\partial V}{\partial q_i}\right)_0 = 0,$$

otrzymujemy wyrażenie:

$$2V = \sum_{i=1}^{3N} \left(\frac{\partial^2 V}{\partial q_i \, \partial q_j} \right)_0 q_i q_j = \sum_{i=1}^{3N} f_{ij} q_i q_j \tag{10}$$

Wstawiając wartości T i V z (8) i (10) do równania ruchu w postaci:

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\frac{\partial T}{\partial \dot{q}_{j}}+\frac{\partial V}{\partial q_{j}}=0,$$

uzyskujemy układ 3N równań:

$$\ddot{q}_{j} + \sum_{i=1}^{3N} f_{ji} q_{i} = 0, \qquad (j = 1, 2, \cdots, 3N)$$
 (11)

Zakładając rozwiązanie w postaci:

$$q_j = q_{j0} e^{i \omega t}$$

otrzymujemy układ równań jednorodnych:

$$\sum_{i=1}^{3N} (f_{ij} - \delta_{ij} \omega^2) q_{j0} = 0, \qquad (12)$$

dla którego warunkiem rozwiązalności jest równość zeru wyznacznika:

$$|f_{ij} - \delta_{ij} \omega^2| = 0.$$
⁽¹³⁾

Równanie wiekowe (13) pozwala wyrazić częstości drgań ω przez współczynniki energii potencjalnej f_{ij} .

We współrzędnych kartezjańskich równanie wiekowe jest dla drobiny N-atomowej równaniem 3N-go stopnia. Rozwiązaniami jego są oprócz częstości drgań również częstości odpowiadające rotacyjnym i translacyjnym stopniom swobody drobiny. Rozwiązanie wymaga sześciu dodatkowych warunków eliminujących translację środka masy i zmianę kątów Eulera.

W układzie kartezjańskim abstrahujemy od symetrii własnej drobiny i rezygnujemy z możliwości uproszczenia równania na jej podstawie.

Na koniec wreszcie sens fizyczny współczynników energii potencjalnej f_{ij} jest przy takim doborze współrzędnych niejasny.

Dlatego też w praktyce znacznie dogodniejsze od współrzędnych kartezjańskich są współrzędne uogólnione, tak zwane współrzędne wewnętrzne lub naturalne bezpośrednio związane ze strukturą drobiny. Układ 3N-6 współrzędnych wewnętrznych jest z góry ograniczony 6 równaniami wykluczającymi przesunięcie i obrót drobiny jako całości. Każda współrzędna wyraża się liniowo (dla nieskończenie małych amplitud) przez współrzędne kartezjańskie. Rolę współrzędnych grają zmiany parametrów geometrycznych drobiny. Pomijając drobne modyfikacje wprowadzane przez poszczególnych autorów szersze rozpowszechnienie uzyskały dwa typy współrzędnych. Przyjęcie jednego z tych układów łączy się z pewnymi wstępnymi założeniami dotyczącymi charakteru sił działających między atomami w drobinie.

W tzw. modelu sił centralnych [1] zakłada się, że siły działają jedynie wzdłuż prostych łączących ze sobą atomy. Energia potencjalna wyraża się przez zmiany odległości między atomami zarówno połączonymi, jak i nie połączonymi bezpośrednim wiązaniem chemicznym. Tak np. dla drobiny wody (p. rys. 3):

$$egin{aligned} Q_1 &= dR_{
m O-H(1)}, & Q_2 &= dR_{
m O-H(2)} & q &= dr_{
m H-H} \ 2V &= K_{arphi} \left(Q_1^2 + Q_2^2\right) + K_{arphi} \, q^2 + H_{arphi arphi} Q_1 Q_2 + h_{arphi arphi} (Q_1 + Q_2) \, q \,. \end{aligned}$$

W modelu sił walencyjnych [1] energia potencjalna wyrażona jest przez zmiany długości wiązań i kątów walencyjnych. Dla H₂O równanie przyjmuje postać:

$$Q = dR_{o-H}, \ a = d\vartheta_{H-O-H}$$

$$2V = K_{Q}(Q_{1}^{2} + Q_{2}^{2}) + K_{a}a^{2} + H_{QQ}Q_{1}Q_{2} + A_{Qa}(Q_{1} + Q_{2})a.$$
(15)

Model sił centralnych opisuje dość wiernie pole siłowe drobiny o charakterze czysto jonowym, gdzie o wzajemnych pozycjach atomów decy-

duja silv coulombowskie działające wzdłuż linii łączących. Model sił walencyjnych jest natomiast lepszym przybliżeniem dla drobin o wiązaniach w zasadzie kowalentnych, w których o wielkości kąta pomiędzy wiązaniami rozstrzyga nie tyle siła odpychania, ile charakter hybrydyzacji orbitali elektrono- H wych atomu centralnego. Olbrzymia wię- Rys. 3. Współrzędne wewnętrzne kszość drobin należy do tej drugiej grupy.



dla drobiny H₂O

Jeżeli uwzględnia się wszystkie współczynniki energii potencjalnej, oba modele prowadzą do wyników zbliżonych. Różnice występują jednak wyraźnie, jeżeli zaniedba się część współczynników. W granicznym przypadku tak zwanych prostych modeli siłowych, gdzie pominięte są wszystkie współczynniki przy wyrazach mieszanych ($f_{ij} = 0$ dla $i \neq j$), model sił walencyjnych jest znacznie lepszym przybliżeniem. Dlatego też w dalszych rozważaniach posługiwać się będę wyłącznie tym modelem.

Przy użyciu współrzędnych wewnętrznych współczynniki energii potencjalnej uzyskują w pełni jasny sens fizyczny. Współczynniki przy wyrazach kwadratowych grają rolę stałych siłowych (stałych siły quasi-sprężystej) poszczególnych wiązań czy kątów. Współczynniki przy wyrazach mieszanych, tzw. współczynniki oddziaływania dynamicznego różnych współrzędnych, wyrażają zmianę stałej siłowej jednej współ-

A. TRAMER

rzędnej pod wpływem zmiany innej. Tak np. stała $A_{Q\alpha}$ w drobinie H₂O H H określa zmianę stałej kąta \checkmark_{O} w wyniku zmiany długości wiązania O—H³.

Energia drobiny traktowanej jako układ N punktów materialnych wykonujących małe drgania wokół położeń równowagi wyraża się we współrzędnych uogólnionych następująco:

$$2T = \sum_{i, j=1}^{3N-6} g_{ij}^{-1} \dot{q}_i \dot{q}_j$$
(16)

$$2\mathbf{V} = \sum_{i,j} f_{ij} q_i q_j, \qquad (17)$$

gdzie współczynniki energii kinetycznej g_{ij}^{-1} zależą jedynie od geometrii (długości wiązań i wielkości kątów) oraz mas atomów, a współczynniki energii potencjalnej f_{ij} są od tych parametrów niezależne.

Wprowadzając jak poprzedno wyrażenia (16) i (17) do równania ruchu:

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\frac{\partial T}{\partial \dot{q}_i} + \frac{\partial V}{\partial q_i} = 0, \qquad i = 1, 2 \cdots, 3N - 6$$

otrzymujemy po analogicznych jak i w(11—12) przekształceniach układ równań:

$$\sum_{j} (f_{ij} - g_{ij}^{-1} \omega^2) q_{j0} = 0 \qquad i = 1, 2, \cdots, 3N - 6$$
(18)

Równanie wiekowe przyjmuje postać:

 $\begin{vmatrix} f_{11} - g_{11}^{-1} \ \omega^2, \ f_{12} - g_{12}^{-1} \ \omega^2, \dots \\ f_{13N-6} - g_{13N-6}^{-1} \ \omega^2 \\ \vdots \\ f_{3N-6,1} - g_{N-6,1}^{-1} \ \omega^2 \ \cdots \\ f_{3N-6,3N-6} - g_{3N-6,3N-6}^{-1} \ \omega^2 \end{vmatrix} = 0$

lub w zapisie skróconym:

$$(F - G^{-1} \omega^2) = 0 \tag{19}$$

gdzie F oznacza macierz współczynników energii potencjalnej, G^{-1} — macierz współczynników energii kinetycznej.

Wyższość równania wiekowego w postaci (19) nad równaniem (13) polega na obniżeniu stopnia przez wstępne oddzielenie oscylacyjnych

³ Oznaczenia współczynników energii potencjalnej przyjęto z [11]; K oznacza stałe siłowe wiązań i kątów, H, h -oddziaływania wiązań ze sobą, A, a -oddziaływania kątów z wiązaniami, l -oddziaływania kątów przyległych, m, n -kątów posiadających wspólne wiązanie.

stopni swobody od translacji i rotacji. Natomiast występowanie wyrażeń ω^2 również w wyrazach pozadiagonalnych (jako rezultat nieortogonalności układu współrzędnych wewnętrznych) znacznie utrudnia rozwiązanie.

Trudność tę można ominąć przez przemnożenie równania (19) przez macierz G odwrotną do macierzy G^{-1} , tzw macierz odwrotnych współczynników energii kinetycznej lub macierz współczynników oddziaływania kinematycznego. Równanie przyjmuje wtedy postać:

$$(\mathbf{GF} - \omega^2 \mathbf{E}) = \mathbf{0}, \qquad (20)$$

czyli

$$(D_{ij} - \omega^2 \,\delta_{ij}) = 0\,, \qquad (20a)$$

gdzie $D_{ij} = \sum_{k} g_{ij} f_{kj}$.

Rozwiązanie równania (20) polega na sprowadzeniu macierzy GF do postaći diagonalnej:

$\left \begin{array}{c}\omega_1^2-\\0\end{array}\right $	$\omega^2 0$ $\omega_2^2 - \omega$	$\begin{array}{c} 0 \cdots \cdots 0 \\ ^{2} 0 \cdots \cdots 0 \end{array}$	= 0 .	(21)
0		$0 \cdots \cdots \omega_{3N-6}^2 - \omega^2$		

Równanie wiekowe zostaje rozbite na 3N - 6 równań wyrażających częstości drgań własnych drobiny przez współczynniki energii.

Diagonalizacja macierzy GF oznacza przejście do układu współrzędnych normalnych Q — liniowych kombinacji współrzędnych wewnętrznych — w którym energia układu wyrażona jest przez kwadraty poszczególnych współrzędnych i ich pochodne względem czasu:

$$2T = M_0 \sum_{s=1}^{3N-6} \dot{Q}_s^2$$
 (22)

$$2\mathbf{V} = M_0 \sum_{s=1}^{3N-6} \omega_s^2 \, \mathbf{Q}_s^2. \tag{23}$$

Energia oscylacyjna drobiny wyrażona jest jako suma energii 3N-6 oscylatorów harmonicznych wykonujących drgania z częstością ω_s .

Każdej częstości własnej drobiny odpowiada więc określone drganie normalne (drganie harmoniczne odpowiedniej współrzędnej normalnej), tj. drganie w którym uczestniczą w stałym stosunku amplitud i faz wszystkie, w zasadzie, współrzędne wewnętrzne (wiązania i kąty) drobiny. Formę tego drgania możemy znaleźć przy pomocy układu równań:

$$\sum_{j=1}^{3N-6} (D_{ij} - \delta_{ij} \omega^2) q_{j_0} = 0, \qquad i = 1, 2, \cdots, 3N - 6$$
 (24)

Równanie to (przekształcone równanie (18)) posiada rozwiązania nie zerowe dla każdego pierwiastka równania wiekowego (20) $\omega = \omega_s$. Podstawiając $\omega = \omega_s$ otrzymujemy tożsamościowy układ równań pozwalający wyznaczyć wzajemny stosunek amplitud dla różnych q_j uczestniczących w drganiu s. Przez wprowadzenie czynnika normalizującego uzyskujemy jednoznaczne wyrażenie współrzędnej normalnej poprzez współrzędne wewnętrzne:

$$Q_s = \sum_j R_{sj} q_j. \tag{25}$$

Ułożenie i rozwiązanie równania wiekowego

Jak wynika z dotychczasowych rozważań, rozwiązanie problemu drgań drobin sprowadza się do trzech kolejnych operacji:

1) ułożenia tablic współczynników oddziaływania kinematycznego (odwrotnych współczynników energii kinetycznej) g_{ij} i współczynników oddziaływania dynamicznego f_{ij} i obliczenia macierzy **GF**,

- 2) maksymalnego uproszczenia macierzy GF,
- 3) rozwiązania równania wiekowego $|GF \omega^2 E| = 0$.

1. Tablice współczynników oddziaływania

Ułożenie macierzy współczynników oddziaływania kinematycznego G poprzez wyliczenie elementów macierzy współczynników energii kinetycznej G^{-1} i obliczenie elementów macierzy odwrotnej jest niezmiernie uciążliwe.

Dlatego też korzysta się z metody Borna-Karmana [14] bezpośredniego wyliczania odwrotnych współczynników energii kinetycznej w krysztale, uogólnionej przez Eliaszewicza [8] dla drobin wieloatomowych.

Jeżeli współrzędne wewnętrzne q_i wyrazimy przez przesunięcia poszczególnych atomów r_{α} :

$$q_i = \sum_{\alpha} E_{i\alpha} r_{\alpha} , \qquad (26)$$

to współczynnik oddziaływania kinematycznego współrzędnych i oraz j przyjmuje postać:

$$g_{ij} = \sum_{\alpha} \frac{E_{i\alpha} E_{j\alpha}}{m_{\alpha}} \,. \tag{27}$$

Sumowanie prowadzi się w zasadzie po wszystkich atomach a w drobinie, różne od zera są jednak tylko wyrazy odpowiadające atomom wspólnym dla obu współrzędnych.

Tak np. (rys. 4) współrzędna wewnętrzna q_{xy} — zmiana długości wiązania x - y wyraża się poprzez przesunięcia atomów x i y jako

$$q_{xy} = \vec{e}_{xy}(\vec{r}_y - \vec{r}_x) = -\vec{e}_{xy}\vec{r}_x + \vec{e}_{xy}\vec{r}_y,$$

gdzie e_{xy} jest wektorem kierunkowym wiązania x - y. Wtedy współczynnik kinematycznego oddziaływania wiązania x - y z samym sobą ma, zgodnie z (27), postać

$$g_{xy,xy} = \frac{\left(-\vec{e}_{xy}\right)^2}{m_x} + \frac{\left(\vec{e}_{xy}\right)^2}{m_y} = \frac{1}{m_x} + \frac{1}{m_y} \cdot$$



Macierz współczynników oddziaływania dynamicznego zestawiamy na razie w wyrazach ogólnych.



Wymnażając przez siebie obie macierze otrzymujemy macierz współczynników pełnego oddziaływania GF:

$$D_{ij} = (GF)_{ij} = \sum_{k} G_{ik} F_{kj}.$$
 (28)

Wyrazy diagonalne D_{ij} są w przybliżeniu zerowym, gdzie pomijamy sprzężenie różnych drgań (tzw. przybliżenie częstości cząstkowych, por. [16] [17]) równe kwadratom częstości. Wyrazy pozadiagonalne wyrażają sprzężenie drgań odpowiednich par współrzędnych.

Jeżeli w wyniku odpowiednich operacji macierz GF przyjmuje postać diagonalną:

ω_{11}^2	0	0 · ·	•••	• 0
0 	ω ₂₂ • • •		 	•
		• •		
0	0	0.		$\cdot \omega_{3N-6,3N-6}^2$

to wyrazy diagonalne (kwadraty częstości drgań) wyrażają się w przybliżeniu przez elementy macierzy GF jako

$$\omega_{ii}^2 = (GF)_{ii} + \sum_{i\neq j} \Delta_{ij}, \qquad (29)$$

5 Postępy Fizyki Nr 4

gdzie

$$\Delta_{ij} = \frac{(GF)_{ij} (GF)_{ji}}{(GF)_{ii} - (GF)_{jj}}.$$
(29a)

Jak widać, wzajemne sprzężenie drgań zależy nie tylko od wartości współczynników oddziaływania $(GF)_{ij}$, ale również od różnicy częstości cząstkowych. Drgania silnie różniące się częstością oddziałują na siebie słabo, z czego można korzystać przy przybliżonym rozwiązywaniu równań.

2. Uproszczenie równania wiekowego

polega przede wszystkim na wykorzystaniu symetrii drobiny. Dla drobin posiadających jakiekolwiek elementy symetrii macierz współczynników może zostać sprowadzona do postaci quasi-diagonalnej przez zastosowanie tzw. współrzędnych symetrii będących liniowymi kombinacjami współ-



Rys. 5. Symetria drobin H_2O i $CO(CN)_2$

rzędnych wewnętrznych.

Postępowanie takie zilustrujemy na przykładzie drgań nieliniowej drobiny trójatomowej XY₂, np. drobiny wody.

Drobina H₂O posiada symetrię C_{2v} , tj. podwójną oś symetrii C_2 i dwie płaszczyzny σ przecinające się na tej osi. Trzem oscylacyjnym stopniom swobody odpowiadają zmiany współrzędnej α (zmiany wielkości kąta H H)

 \vec{O} i dwu współrzędnych q

(zmiany długości wiązań O—H). Współrzędne q są wzajemnie równoważne, tj. przechodzą w siebie przy operacjach symetrii:

$$q_1' = q_2$$
 $q_2' = q_1$.

Zmiana wartości kąta nie narusza symetrii drobiny, oscylacje deformacyjne współrzędnej α charakteryzują się pełną symetrią A_1 .

Przy dowolnych zmianach długości wiązań symetria drobiny zostaje zakłócona, można jednak każde drganie walencyjne przedstawić jako superpozycję drgań typu A (oznaczenia typów symetrii drgań, p. tabela 2), w którym odchylenia obu współrzędnych od położenia równowagi są symetryczne względem osi symetrii i drgania typu B, które są antysymetryczne, tj.

5	Г	а	b	е	1	а	2	

Symetria argan arobiny H ₂ O 1 CO(CIN	Symetria	drgań	drobiny	H_2O	i	$CO(CN)_2$
--	----------	-------	---------	--------	---	------------

Typ drgań	Elem I	enty C,	syn ø1	netrii σ,	Współrzędne danego typu H ₂ O CO(CN) ₂
A_1	+	+	+	+	$Q_{,a}$ q_{0} , Q, q_{N}, γ, ω
A_2	+	+			— <i>q</i>
	+		+		$Q Q, q_N, \delta, \omega$
$\cdot B_2$	+		-	+	— φ, φ

 $q_2 = q'_1 = q_1$ $q_1 = q'_2 = q_2$ (A)

oraz

$$q_{2}^{}=q_{1}^{\prime}=-q_{1}^{}$$
 , $q_{1}^{}=q_{2}^{\prime}=-q_{2}^{}$. (B)

Wprowadzamy współrzędne odpowiadające tym dwu typom drgań (rys. 6) (A) (B)



malizacyjnym). Zastępując w wyrażeniu na energię potencjalną drobiny wody (15) współrzędne wewnętrzne przez współrzędne symetrii otrzymujemy:

$$2V = [(K_{Q} + H_{QQ})Q^{(A)^{2}} + K_{\alpha}a^{(A)^{2}} + 2A_{Q\alpha}a^{(A)}Q^{(A)}] + [(K_{Q} - H_{QQ})Q^{(B)^{2}}] = 2(V^{(A)} + V^{(B)}).$$
(31)

Energia potencjalna drobiny daje się więc przedstawić jako suma składowych, z których jedna zależy tylko od współrzędnych symetrycznych (A), druga — tylko od współrzędnych antysymetrycznych (B).

5*

To samo dotyczy energii kinetycznej i całkowitej energii drobiny H.

$$T = \sum_{\chi} T^{(\chi)} , \qquad H = \sum_{\chi} H^{(\chi)} , \qquad (32)$$

gdzie przez χ oznaczamy typy symetrii drgań.

Tak więc współczynniki oddziaływania tak kinetycznego jak i dynamicznego pary współrzędnych należących do różnych typów symetrii równe są zeru. Obie macierze, a wobec tego i macierz współczynników pełnego oddziaływania przyjmują w wyniku zmiany współrzędnych jednakową postać quasi-diagonalną.

Równanie wiekowe dla drobiny wody, które jest równaniem trzeciego stopnia we współrzędnych wewnętrznych, rozpada się w wyniku operacji symetrii na dwa niezależne równania drugiego i pierwszego stopnia.

Dla wysoko symetrycznych drobin wieloatomowych zastosowanie współrzędnych symetrii może zasadniczo uprościć rozwiązanie. Tak np. dla benzenu C₆H₆ (symetria D_{6h}, tj. oś sześciokrotna C₆, sześć prostopadłych do niej osi podwójnych C₂, prostopadła płaszczyzna symetrii σ_h i elementy pochodne) równanie wiekowe we współrzędnych wewnętrznych jest równaniem 30 stopnia. Współrzędne symetrii dzielą się na dziesięć różnych typów:

 $\varGamma = 2A_{1g} + A_{2g} + A_{2u} + B_{1u} + 2B_{2u} + 2B_{2g} + E_{1g} + 4E_{2g} + 3E_{1u} + 2E_{2u} \,.$

Liczby poprzedzające oznaczenie typu symetrii określają ilość współrzędnych danego typu. Równanie wiekowe rozpada się zatem na dziesięć równań od pierwszego do czwartego stopnia.

Podział współrzędnych na typy symetrii i współczynniki przekształceń uzyskuje się metodami teorii grup.

Operacje symetrii można stosować również w sposób przybliżony do poszczególnych części drobiny posiadających symetrię własną wyższą niż symetria całości np. do grup — CH_3 w drobinie acetonu (CH_3)₂CO [17].

Inną metodą przybliżonego uproszczenia równań wiekowych, dającą niekiedy dobre wyniki, jest rozdzielenie współrzędnych drgań znacznie różniących się częstościami. Jak widać z wyrażenia (29a), sprzężenie takich drgań jest na ogół słabe. Metodą podaną przez W i l s o n a [6] rozdziela się macierz współczynników oddziaływania kinematycznego na część odpowiadającą drganiom o wysokiej częstości (np. drgania walencyjne wiązań zawierających wodór — w zakresie 2800—3600 cm⁻¹) i pozostałym drganiom (częstości niższe na ogół od 1700 cm⁻¹). Uzyskane wyniki można poprawić przez zastosowanie metod perturbacyjnych [16], [18].

3. Metody rozwiązywania równań wiekowych

Ogólnie rzecz biorąc, zadanie wyznaczenia związku pomiędzy stałymi siłowymi i częstościami drgań może być postawione dwojako:

albo znając częstości drgań usiłujemy obliczyć stałe siłowe,

albo też zakładając określone wartości stałych siłowych obliczamy odpowiadające im częstości i porównujemy wynik z wartościami doświadczalnymi.

Pierwsza droga wydaje się bardziej naturalna, prowadzi ona jednak poza wyjątkowo prostymi przypadkami do bardzo złożonych i uciążliwych wyliczeń. Układając i przeprowadzając diagonalizację macierzy **GF** na liczbach ogólnych otrzymujemy skomplikowany układ równań z wielu niewiadomymi.

Znacznie dogodniejsze jest więc przypisanie współczynnikom energii potencjalnej pewnych wstępnych wartości i rozwiązanie równania wiekowego w postaci numerycznej. Jako punkt wyjścia służą bądź to stałe siłowe podobnych drobin (prostszych), bądź też stałe siłowe wyliczone w przybliżeniu zerowym np. częstości cząstkowych [15].

Przez kolejną wariację stałych dążymy do osiągnięcia optymalnej zgodności częstości wyliczonych i obserwowanych. Pomocne są tu metody iteracyjne pozwalające wyznaczyć równolegle z częstościami drgań ω_i ich pochodne względem zmian poszczególnych współczynników energii potencjalnej $\partial \omega_i / \partial f_{ij}$.

Nie wydaje się celowe omawianie tutaj różnych, stosowanych w praktyce metod przybliżonego rozwiązywania równań wiekowych (omówienie szczegółowe p. [10] i [11]). Dobór najbardziej dogodnej metody uzależniony jest od końcowej postaci równania i wymaganej dokładności obliczeń.

Warto natomiast wspomnieć o metodach rožwiązywania problemu drgań przy pomocy modeli mechanicznych i elektrycznych.

Już w r. 1930 Kettering, Shutts i Andrews [19] zastosowali fotografowanie drgań modeli drobin wieloatomowych złożonych z układów kul i sprężyn. Mac Dougall i Wilson zwiększyli później dokładność tej metody, rezygnując z wizualnego podobieństwa modelu i drobiny i zastępując ciężarki i sprężyny układami prętów metalowych. Układy takie pozwoliły łatwiej i w szerszych granicach zmieniać współczynniki oddziaływania kinematycznego i dynamicznego [20].

Badania przy pomocy analogów mechanicznych posiadają jednak w chwili obecnej jedynie znaczenie historyczne.

Znacznie większą rolę odegrać mogą metody poszukiwania rozwiązań przy pomocy analogowych układów elektrycznych [21]. Obwód zamknięty z określoną pojemnością i samoindukcją, o znikomo małym oporze, którego częstość rezonansowa wynosi:

$$\omega^2 = \frac{1}{LC} \tag{33}$$

jest analogiem oscylatora harmonicznego:

$$\omega^2 = F_{11} G_{11}, \qquad (33a)$$

jeżeli

$$\frac{1}{C} \equiv F_{11}, \qquad \frac{1}{L} \equiv G_{11}.$$
 (34)



Rys. 7a. Model elektryczny oscylatora harmonicznego Rys. 7b. Segment układu analogicznego Many i Meibooma [21]

Można więc łatwo łącząc obwód ze źródłem o znanej częstości, ustalając wartość samoindukcji tak, aby odpowiadała współczynnikowi kinematycznemu i zmieniając pojemność kondensatora, uzyskać zgodność częstości rezonansu z wyznaczoną eksperymentalnie częstością drgań drobiny dwuatomowej. Pomiar taki można uprościć przez zastosowanie generatora stałej częstości i zmiennej samoindukcji obwodu.

Układy oparte na tej zasadzie budowano dla drobin wieloatomowych. Na rys. 7b przedstawiony jest przykładowo schemat jednego z segmentów układu Many i Meibooma.

Zastosowanie układów analogowych ogranicza wyliczenia do ułożenia i uproszczenia na zasadzie symetrii macierzy F i G eliminując potrzebę wymnażania ich i diagonalizacji macierzy GF.

Poza układami analogowymi w coraz szerszym stopniu stosuje się maszynowe rozwiązywanie gotowych równań wiekowych w postaci:

$$(\boldsymbol{G}\boldsymbol{F}-\boldsymbol{\omega}^{2}\boldsymbol{E})=\boldsymbol{0}\,.$$

Poważną trudnością przy wyznaczaniu stałych siłowych jest niejednoznaczność wyników obliczeń wynikająca z faktu, że ilość stałych siłowych (niewiadomych) jest zawsze większa od ilości częstości własnych (równań). W ogólnym przypadku drobina o N częstościach (N współrzędnych wewnętrznych) posiada $\frac{1}{2} N(N+1)$ różnych stałych siłowych. W drobinach zawierających jednakowe wiązania lub kąty ilość różniących się od siebie współczynników jest wprawdzie mniejsza, zawsze jednak większa od ilości drgań normalnych. Tak np. dla CH₄ mamy 5 stałych i 4 częstości, dla CH₃CN — 13 stałych i 8 częstości itd.

Stałe oddziaływania dynamicznego odizolowanych od siebie części drobiny są niewątpliwie znikomo małe i pominięcie ich nie prowadzi do poważniejszych błędów. Pozostałe współczynniki pozadiagonalne przyjmować mogą jednak wysokie wartości, tego samego nieraz rzędu, co i wyrazy diagonalne (stałe siłowe). Nie można nigdy przewidzieć z góry, jak duży wpływ na wartość częstości mogą mieć niewielkie nawet liczbowo współczynniki oddziaływania pomiędzy współrzędnymi nieznacznie różniącymi się częstością. Dlatego też stosowane jeszcze niekiedy przybliżenie tzw. prostego modelu sił walencyjnych (równość zeru wszystkich współczynników pozadiagonalnych) prowadzić może do zupełnie fałszywych wyników. Model ten pozwala jedynie na przybliżone przyporządkowanie częstości różnym współrzędnym.

Jedyną rzeczywistą drogą usunięcia nieoznaczoności rozwiazania jest znalezienie dodatkowych równań. Metodą najprostszą i najszerzej stosowaną jest jednoczesne rozwiązanie równań drgań dla kilku drobin o jednakowych stałych siłowych a różniących się wartościami współczynników kinematycznych, a więc i częstościami drgań. Najlepiej nadają się do tego celu drobiny izotopowe. W obliczaniu stałych siłowych drobin związków organicznych szerokie zastosowanie znalazły deuteropochodne. Zmiana deuteru na wodór i odwrotnie w minimalnym stopniu wpływa na stałe siłowe zależne jedynie od struktury elektronowej, natomiast poważnym zmianom ulegaja współczynniki kinematyczne $g_{ii} \thicksim m^{-1}$ i częstości $\omega \sim m^{-\frac{1}{2}}$. Dotyczy to w szczególności drgań, w których poważny udział biorą wiązania C-H(D). Wpływ na częstości drgań łańcucha węglowego może być jednak niewielki (niekiedy w granicach dokładności obliczenia częstości).

Dlatego też celowe jest wykonanie obliczeń dla całej grupy drobin podobnych np. w szeregu homologicznym związków organicznych przy dopuszczalnym założeniu upraszczającym, że zmiany stałych siłowych przy przejściu z jednej drobiny do drugiej są do pominięcia. Obliczenia takie wykonano dla węglowodorów nasyconych [22], pochodnych etylenu np. [23], pochodnych benzenu (benzen, toluen, ksyleny) [24], nitryli [25] itd. Rezygnując z ujęcia drobnych różnic stałych uzyskuje się w zamian obraz ogólnych prawidłowości budowy tych drobin i charakteru widm dla całej grupy związków.

Warto również wspomnieć o metodzie K i velsona [26]. Metoda ta ma szczególnie dużą wartość przy badaniu widm drobin nieorganicznych, gdzie pozostałe metody zawodzą wobec braku homologów i małych różnic mas między atomami izotopowymi.

Z widma rotacyjnego drobiny wyznacza się współczynniki D:

$$v(\mathbf{J}) = BJ(J+1) + DJ^2(J+1)^2 + \dots$$
(35)

wyrażające zmianę momentu bezwładności, tj. długości wiązania pod wpływem siły odśrodkowej. Wielkość zmiany zależy oczywiście od wartości stałej siłowej i równania wyrażające współczynniki D przez stałe siłowe odgrywają rolę dodatkowych równań. Metoda ta poza ominięciem wspomnianych trudności umożliwia osiągnięcie b. wysokiej dokładności w oznaczeniu stałych siłowych.

Współczynniki energii potencjonalnej

Współczynniki energii potencjalnej podobnie jak wartości energii i długości wiązań należą do najważniejszych parametrów charakteryzujących drobinę. Jednakże wykorzystanie tych danych w teorii budowy drobin jest w chwili obecnej wyraźnie nie wystarczające.

Składają się na to dwie przyczyny. Z jednej strony metody chemii kwantowej nie pozwalają na ogół na obliczenie funkcji potencjalnej drobiny z taką dokładnością, która pozwoliłaby na porównanie teoretycznych i znalezionych wartości stałych siłowych. Nieliczne prace teoretyczne, celem których było wyznaczenie współczynników energii potencjalnej, wskazują, że badania takie są możliwe i celowe [28].

Z drugiej strony, mimo że stałe siłowe zostały wyliczone dla wielu drobin z ich widm oscylacyjnych, wyniki różnych autorów nie są ze sobą ściśle porównywalne. Wynika to ze stosowania różnego rodzaju przybliżeń, a często w różnych pracach i różnych modeli. Różnice wartości stałych siłowych wyliczonych przez różnych autorów dla tych samych drobin i w oparciu o ten sam zestaw obserwowanych częstości drgań przekraczają kilkanaście procent, np. dla wiązania C—Cl w pochodnych metanu podawane były wartości stałej siłowej w zakresie od 3,37 do 4,42 \cdot 10⁵ dyn/cm.

Stosunkowo najłatwiej dają się zinterpretować diagonalne współczynniki energii potencjalnej (stałe siłowe) wiązań.

Stała siłowa, podobnie jak energia wiązania i odległość międzyatomowa, jest funkcją rzędu wiązania. Już grubo przybliżona wartość stałej siłowej pozwala ocenić krotność wiązania. Dla wiązań pojedynczych war-
tości stałej zawarte są w granicach 2,5 do 8,0⁴, dla podwójnych 8,0 do 15,0, dla potrójnych — 15,0 do 19,0.

W tablicy 3 zestawione są średnie wartości stałych siłowych dla szeregu wiązań. Jak widać, dla wiązań o jednakowej krotności stała siłowa zależy od rodzaju uczestniczących w nich atomów. Zmiany długości wiązania są, jak widać, na ogół równoległe do zmian stałej siłowej, jakkolwiek nie dają się tu zastosować proste zależności proponowane dla drobin dwuatomowych. Trudniej doszukać się regularności w wartościach stałej siłowej i energii wiązania.

Tabela 3

Srednie wartości stałych siłowych, energii i długości wiązań według [11]

Wiązanie	Stała siłowa	Odległość między-	Energia wiązania
	K milidyn/A	atomowa K A	L KCal/moi
С—н	5,15	1,09	87,3
N-H	6,8	1,01	83,7
O—H	8,05	0,97	110,2
C-C	4,5	1,54	58,6
C-N	4,8	1,47	48,6
С—о	5,1	1,43	7 0 ,0
C—F	6,25	1,41	107,0
C-Cl	3,7	1,76	6 6, 5
C—Br	3,0	1,91	54,0
C=C	9,05	1,34	100
C=O	10,8	1,22	155
C=C	17,2	1.20	123
C=N	17,8	1,18	160
	1		

Szczególnie duże znaczenie dla wyjaśnienia charakteru oddziaływań wewnątrzdrobinowych ma porównanie stałych siłowych tych samych wiązań wchodzących w skład różnych drobin. Tak np. stała siłowa wiązania C—H wykazuje silną zależność od typu hybrydyzacji atomu węgla (tabl. 4). Grać tu mogą rolę dwa czynniki:

⁴ Stałe siłowe wyrażone są w 10⁵ dyn. cm⁻¹ (= milidyn/Å). Ażeby wszystkie stałe przedstawić w jednakowych jednostkach, stałe siłowe kątów mają postać $K/r_1 r_2$, a współczynniki oddziaływań kątów z wiązaniami A_q/r , gdzie przez r oznaczamy długość w położeniu równowagi wiązania tworzącego ramię kąta. W pracach szkoły radzieckiej wartości stałych podaje się w 10⁶ cm⁻² (1 cm⁻² = 0,06365 dyn/cm).

Tabela 4

Stała siłowa	wiązania	Сн	w	różnych	drobinach
	we	dług [3	32]		

Typ drobiny -	Stała siłowa milidyn/Å	Typ drobiny	Stała siłowa milidyn/Å
a) H ₃ C—CH ₂ —H	4,80	b) $C = CH - H$	5,07
$R-CH_2-H$	4,75	c) (benzen) C–H	5,10
R_2CH —H	4,56	d) —C≡C — H	5,98
$R_{3}C-H$	4,56	$N \equiv C - H$	5,7

zmiana charakteru orbitali atomu węgla uczestniczących w wiązaniu $z (sp^3)$ w a) na (sp^2) w b) i c) oraz (sp) w d),

zwiększenie gęstości elektronowej w wiązaniu C—H wskutek delokalizacji elektronów π w przypadkach b-d).

Tabela 5

Typ drobiny	Stała siłowa milidyn/Å	Źródło
	4,45	[22]
$\mathbf{C} = \mathbf{C} - \mathbf{C}$	4,7)
N = C - C	5,1	[25]
$\mathbf{N} \equiv \mathbf{C} - \mathbf{C} = \mathbf{C}$	5,4	
$\mathbf{N} = \mathbf{C} - \mathbf{C} = \mathbf{O}$	5,5	
N = C - C = N	6,35	J
C = C = C = C (benzen)	7,45	[24]
C = C	9,05	[11]
, · · · ·	1	

Stała siłowa wiązania pojedynczego C—C w różnych drobinach Podobnym zmianom ulega stała siłowa wiązania C—C w drobinach o pojedynczych lub sprzężonych wiązaniach wielokrotnych. Sprzężenie wiązań prowadzi w sposób zupełnie wyraźny do wyrównania gęstości elektronowej w całym łańcuchu i podniesienia wartości stałej wiązania C—C. W benzenie przy całkowitej równocenności wiązań stałe siłowe są jednakowe i zbliżają się do wartości stałych wiązania p o d w ó j n e g o. Dla chlorowcopochodnych metanu stałe siłowe wiązań C—X, gdzie

X = F, Cl, Br zmieniają się również w sposób regularny (p. tabela 6) [27].

Ze wzrostem liczby atomów chlorowca w drobinie stała siłowa wiązania C—X wzrasta. Możliwa jest tu następująca interpretacja: silnie elektroujemny atom chlorowca w drobinie CH_3X odciąga elektrony od pozostałej części drobiny, co powoduje silnie polarny charakter i spadek składowej kowalentnej wiązania C—X. Kiedy liczba atomów chlorowca w drobinie wzrasta, rozkład gęstości elektronowej staje się bardziej równomierny, czemu towarzyszy spadek jonowego charakteru wiązania. Efekt ten występuje szczególnie wyraźnie w przypadku fluoropochodnych skutkiem szczególnie wysokiej elektroujemności atomu F.

Tabela 6

Stałe siłowe wiązań C—X w drobinach CX_nH_{4-n} [27]

X = drobina	F	Cl	Br
CH_3X	6,2	3,7	3,0
CH_2X_2	6,8	3,75	3,05
CHX ₃	6,95	3,8	3,1
CX_4	7,8	3.85	3,15

Innym, bardzo charakterystycznym, przykładem jest zależność stałej siłowej i częstości drgania wiązania C=0 od własności podstawników. Budowa elektronowa grupy karbonylowej posiada charakter pośredni między klasycznymi wzorami:



Ketonom np. acetonowi (X, Y = CH₃) odpowiada stała siłowa wiązania C = O równa K₀ = 10,8 i częstość drgań ok. 1720 cm⁻¹. Silnie

elektroujemne podstawniki (F, Cl) wywołują przesunięcie gęstości elektronowej w kierunku postaci III, wzrost stałej siłowej i częstości drgań. Dla $COCl_2$, COFCl i COF_2 stała siłowa przyjmuje odpowiednio wartości: 14,2 14,8 i 15,5, a częstość drgań wynosi: 1827, 1868 i 1928 cm⁻¹ [37]. Na odwrót podstawniki typu —NH₂ powodują przesunięcie elektronów w kierunku postaci I, spadek stałej siłowej i częstości (do ok. 1600 cm⁻¹).

Współczynniki pozadiagonalne typu H wyrażają wzajemne oddziaływania różnych wiązań. Współczynniki te posiadają w większości wartość dodatnią, a ich sens fizyczny można wyjaśnić na przykładzie drgań grupy

. Jeżeli wiązanie podwójne C=O w trakcie oscylacji wydłuża O-H

się, parametry jego upodabniają się do parametrów wiązania pojedynczego. Zmniejsza się przy tym siła wiązania π elektronów, co z kolei wpływa na gęstość elektronową w wiązaniach sąsiednich. Przesunięcie gęstości π -elektronowej do wiązania pojedynczego C—O prowadzi do zwiększenia jego stałej siłowej. Współczynniki H można więc uważać za miarę sprzężenia elektronów różnych wiązań.

Niestety w bardzo wielu pracach zaniedbywanie niektórych współczynników pozadiagonalnych (co odbija się także na wiarygodności wyznaczenia pozostałych) uniemożliwia ich porównanie. Ograniczając się do prac wykonywanych jednakową metodyką można stwierdzić jedynie pewne wyrywkowe prawidłowości.

Współczynniki oddziaływania dla pojedynczych wiązań homeopolarnych są liczbowo bardzo niewielkie. Wartość współczynnika silnie wzrasta ze wzrostem polarności wiązania.

Tabela 7

Drobina	Wiązania	Współ. oddz. H milidyn/Å	Źródło
CH_4, C_2H_6	С-H, С-H С-С, С-С	0 0,03	[11] [11]
$CH_2 = C(CH_3)_2$ $N = C - CH_2$	$C = C, C - C$ $C \equiv N, C - C$	0, 065 0,32	[34] [25]
HCOOH	C = 0, C = 0 C = 0, C = 0	0,765 1,3	[33] [35]
C_6H_6	C C, C C	orto 0,66 meta — 0,55	[24]

Współczynniki oddziaływania dynamicznego różnych wiązań

Silny wzrost oddziaływań towarzyszy również wzrostowi krotności wiązania (p. tabl. 7). Dotyczy to zwłaszcza układów wiązań sprzężonych. O ile w drobinach nie zawierających układów π -elektronowych można w praktyce zaniedbać oddziaływania nie sąsiadujących ze sobą wiązań, to w drobinach z wiązaniami sprzężonymi przestaje to być dopuszczalne. Już dla dokładnego wyznaczenia częstości drgań wiązań w drobinie $N \equiv C - C \equiv N$, konieczne jest wprowadzenie, niewielkiego wprawdzie, współczynnika oddziaływania wiązań $C \equiv N$ [25]. W benzenie, jak wykazał K o w n e r, występuje znaczne sprzężenie wszystkich wiązań C....C, zarówno w położeniu orto, jak meta i para [24].

Znacznie trudniejsza jest ściślejsza interpretacja stałych siłowych i współczynników oddziaływania dla kątów. Model sił walencyjnych milcząco zakłada, że stała siłowa kąta $\frac{Y}{X}$ powinna zależeć wyłącznie od struktury elektronowej (typu hybrydyzacji) atomu centralnego X.

Niewątpliwie typ hybrydyzacji centralnego atomu posiada decydujący wpływ na wielkość stałej. Wystarczy tylko porównać stałe siłowe kątów C C C H w zależności od rzędu wiązania C—C. We wszystkich tych przypadkach stała siłowa silnie wzrasta przy przejściu od hybrydzacji digonalnej przez trigonalną do tetraedrycznej (tabela 8).

Z drugiej jednak strony doświadczenie wykazuje wyraźną zależność stałej od własności atomów peryferyjnych Y i Z. Tak np. stała siłowa kąta H_{C} H_{P} przy węglu tetraedrycznym bliższa jest stałej siłowej dla kąta H_{N} $H_{niż}$ stałym kątów tworzonych przez atom C o tej samej hybrydyzacji połączony z ciężkimi atomami. Niewątpliwie nie można pomijać oddziaływań atomów Y i Z nie powiązanych bezpośrednio wiązaniem chemicznym (oddziaływanie elektrostatyczne, van der Waalsowskie, efekt steryczny).

Już w latach trzydziestych Urey i Bradley zaproponowali funkcję potencjalną uwzględniającą te oddziaływania przez wprowadzenie do modelu sił walencyjnych współczynników wyrażających wpływ zmian odległości między atomami Y i Z (połączenie modeli sił walencyjnych i centralnych) [29]. Bardzo interesującą próbą uwzględnienia oddziaływań powodujących odchylenie kątów walencyjnych od wartości teoretycznych i bardziej złożony przebieg zależności energii potencjalnej od wielkości kąta jest układ współrzędnych dla kątów proponowany przez Słowinskiego [30].

Kat	Stała sił	owa $\frac{K}{r_1r_2}$	Kat	Stała sił	owa $\frac{K}{r_1 r_2}$
	wg [11]	wg [36]		wg [11]	wg [36]
С≡С−н	-	0,21	Н		
H C=C	0.48	0.51	=C	0,30	0,46
,н	0,10		H H	-	
O=C	-	1,5		0,45	_
н	-		H H		
CC	0,59	0,55	—N	0,50	-
н 0С	0,675		H F C	1,45	·
N-C H	0,675	0,76	F Cl		· · ·
F-C	-	0,58		. 1,02	_
н	1.4	-	Br		
cl-c	-	0,52		0,85	
H Br—C	-	0,45	Br		
J-C H		0.30			

Tabela	8
--------	---

Stałe siłowe niektórych kątów

Próbą półilościowej interpretacji stałych siłowych kątów i ich zależności od budowy drobiny są prace Linnetta [31]. Zmiany energii potencjalnej drobiny w wyniku zmiany wielkości kąta przedstawia on jako skutek spadku nakrywania się (*overlapping*) orbitali wiążących obu atomów.

Model taki tłumaczy jednocześnie wysokie wartości współczynników typu A wyrażających wpływ zmiany długości wiązania na stałą siłową przyległego kąta i odwrotnie. Zmiana nakrywania się orbitali wiążących w trakcie oscylacji deformacyjnych prowadzi oczywiście do zmiany energii wiązania. Przykładem może tu służyć drobina H₂O, gdzie wiązania O—H tworzą w stanie równowagi kąt ok. 105°. Wzrost wielkości kąta odpowiada upodobnieniu się struktury elektronowej atomu tlenu do stanu hybrydyzacji (sp³), gdzie wiązania są mocniejsze, oscylacji towarzyszy więc wzrost stałej siłowej wiązania. Tym też należy tłumaczyć wysoką i dodatnią wartość współczynnika A_Q . Podobne rozważania przeprowadzono również dla drobin typu XY₃ i XY₄.

To fragmentaryczne zestawienie wyników wskazuje z jednej strony na duże znaczenie tych badań, z drugiej zaś — na słabe ich zaawansowanie.

Teoria budowy związków organicznych na podstawie badania reaktywności i własności fizykochemicznych drobin wykryła szereg jakościowych prawidłowości dotyczących wpływu podstawników, wiązań wielokrotnych itp. na strukturę elektronową i własności drobin. Znajomość tych prawidłowości wywarła olbrzymi wpływ na dalszy rozwój badań chemicznych. Systematyczne wyznaczenie stałych siłowych szczególnie interesujących układów winno umożliwić znacznie ściślejsze, nawet półilościowe sformułowanie tych reguł.

Obliczenie dotyczące stałych siłowych i formy drgań można rozszerzyć, w oparciu o pomiary natężeń w widmie rozproszenia ramanowskiego i absorpcji w podczerwieni, na jednoczesne wyznaczenie dalszych podstawowych parametrów budowy drobiny: momentów elektrycznych i polaryzowalności poszczególnych wiązań oraz ich zależności od długości wiązania $\partial \mu / \partial q \, i \, \partial \omega / \partial q$. Badania takie nie zdążyły się jeszcze poważniej rozwinąć.

Wydaje się, że koniecznym warunkiem poważnego postępu tych prac jest standaryzacja metodyki (tabularyzacja współczynników kinematycznych, ustalenie dopuszczalnych przybliżeń itp.) i właściwe formy współpracy między zainteresowanymi pracowniami.

Literatura

- 1. N. Bjerrum, Verhandl. Deutsch. physik. Ges. 16, 737 (1914).
- 2. D. M. Dennison, Phil. Mag. 1, 195 (1926); Rev. Mod. Phys. 3, 280 (1931).
- 3. G. Herzberg, Molecular Spectra and Molecular Structure II. Infra-red and Raman Spectra of Polyatomic Molecules, N. York (1945).
- 4. K. W. F. Kohlrausch, Ramanspektren, Leipzig (1943).
- 5. T. Y. Wu, Vibrational Spectra and Structure of Polyatomic Molecules, Ann-Arbor (1946).
- 6. E B. Wilson, J. Chem. Phys. 7, 1047 (1939), 9, 76 (1941).
- 7. E. B. Wilson, B. L. Crawford, J. Chem. Phys. 9, 329 (1941).
- M. A. Eliaszewicz, DAN SSSR 28, 605 (1940), Ż. fiz. Chim. 14, 1381 (1940); 15, 831, 847, (1941); Żur. Eksp. Teor. Fiz. 13, 65 (1943).

A. TRAMER

- M. A. Eliaszewicz, B. I. Stepanow, DAN SSSR 32, 48 (1941); Zur. Fiz. Chim. 17, 145 (1943).
- 10. E. B. Wilson, J. C. Decius, C. P. Cross, Molecular Vibrations, N. York (1955).
- M. W. Wolkensztejn, M. A. Eliaszewicz, B. I. Stepanow, Kolebanija molekuł, Moskwa (1948).
- 12. M. Hemptinne, C. Manneback, Proc. Ind. Acad. Sci. 9, 286 (1939).
- 13. G. Itaru, Compt. rend. 241, 871 (1955).
- 14. M. Born, T. Karman, Phys. Zs. 13, 297 (1912).
- 15. A. S. Swierdlin, I. N. Godniew, Zur. Fiz. Chim. 29, 1807 (1955)
- 16. S. Bratoz, J. Chem. Phys. 23, 159, (1955).
- 17 B. I. Stepanow, Izw. AN SSSR ser. fiz. 11, 357 (1947).
- 18. P. W. Higgs, J. Chem. Phys. 21, 1131 (1953); 23, 1448 (1955).
- C. F. Kettering, L. W. Shutts, D. H. Andrews, Phys. Rev. 36, 531 (1930); D. H. Andrews, J. W. Murray, J. Chem. Phys. 2, 634 (1934).
- 20. D. P. Mac. Dougall, E. B Wilson, J. Chem. Phys. 5, 940 (1937).
- G. K. Carter, C. Kron, J. Chem. Phys. 14, 32 (1946); R. H. Hughes, E. B. Wilson, Rev. Sci. Instr. 18, 103 (1947); A. Many, S. Meiboom, ibid. 18, 831 (1947).
- 22. B. I. Stepanow, Zur. Fiz. Chim. 15, 865 (1941).
- C. Manneback, A. Rahman, Ann. Soc. Scient., Bruxelles 67, 140 (1953);
 J. M. Dowling, J. Chem. Phys. 25, 284 (1956).
- 24 M. A. Kowner, Żur. Eksp. Teor. Fiz. 26, 598, 704 (1954).
- A. Tramer, K. L. Wierzchowski, Bull. Acad. Sci. Pol. Cl. III 5, (1957).
- 26. D. Kivelson, J. Chem. Phys. 22, 904 (1954).
- 27. B. I. Stepanow, Żur. Eksp. Teor. Fiz. 15, 43 (1945).
- P. C. Cross, J. H. van Vleck, J. Chem. Phys. 1, 350, 357 (1933); W. Penny, Trans. Far. Soc. 31, 734 (1935); R. G. Parr, B. L. Crawford, J. Chem. Phys. 16, 526 (1948); P. J. Wheatley, J. W. Linnett, Trans. Far. Soc. 45, 897 (1949); M. A. Kowner, S. E. Cimring, Zur. Fiz. Chim. 25, 438 (1951).
- 29. H. C. Urey, C. A. Bradley, Phys. Rev. 38, 1969 (1931); T. Shimanouchi, J. Chem. Soc. Jap. 74, 266 (1953).
- 30. E. J. Slowinski, J. Chem. Phys. 23, 1933 (1955).
- D. F. Heath, J. W. Linnett, Trans. Far. Soc. 44, 556, 873, 878, 884, (1948);
 J. W. Linnett, P. J. Wheatley, ibid. 45, 33, 38 (1949);
 J. W. Linnett, M. F. Hoare, ibid. 45, 832, 844 (1949);
 D. F. Heath, J. W. Linnett, P. J. Wheatley, ibid. 46, 137 (1950);
 J. Chem. Phys. 18, 147 (1950);
 J. W. Linnett, D. F. Heath, Trans. Far. Soc. 48, 592 (1952).
- 32. T. L. Cottrell, Strength of Chemical Bonds, London (1954).
- 33. L. M. Swierdłow, DAN SSSR 91, 503 (1953).
- 34. L. M. Swierdłow, ibid. 1008, 45 (1953).
- 35. H. W. Thompson, J. W. Linnett, J. Chem. Soc. 1384 (1937).
- 36. B. L Crawford, S. R. Brinkley, J. Chem. Phys. 15, 43 (1945).
- 37. J. Maly, L. Kuča, Czechosl. J. Phys. 5, 30 (1955).

Oznaczenia i jednostki*

Międzynarodowa Unia Fizyki Czystej i Stosowanej

Komisja Oznaczeń, Jednostek i Terminów

Dokument UIP - 6

Komisja Oznaczeń, Jednostek i Terminów Międzynarodowej Unii Fizyki Czystej i Stosowanej zmierza w swojej pracy do osiągnięcia pewnego międzynarodowego uzgodnienia oznaczeń używanych dla różnych fizycznych wielkości i pojęć, uzgodnienia nazw i definicji jednostek, w jakich mierzone są wielkości fizyczne, oraz rozpatruje pewne kwestie terminologiczne. Uzgodnienie używanych oznaczeń, jednostek i terminów jest zadaniem trudnym z wielu względów i całkowita zgodność w tych kwestiach jest prawdopodobnie nieosiągalna w najbliższej przyszłości. Jednakże pewne porozumienie jest możliwe już obecnie i przytoczony tutaj Dokument UIP-6 (1955) stanowi najnowszą publikację Międzynarodowej Unii Fizyki Czystej i Stosowanej na ten temat. Komisja ma nadzieję rozszerzyć swą pracę w najbliższych latach. Komisja powita z wdzięcznością uwagi dotyczące zarówno niniejszej pracy, którą uznaje za niedoskonałą, jak i w ogóle sposobu i zakresu prac Komisji. Uwagi takie można kierować do członka Komisji Profesora Haralda. H. Nielsena, Departament of Physics and Astronomy, The Ohio State University, Columbus, Ohio, USA.

I. OGÓLNE ZASADY I ZALECENIA

1. Wielkości fizyczne

(1) Symbole wielkości fizycznych należy drukować kursywą. Symbol wielkości fizycznej ("physical quantity" *ang.*; "grandeur physique" *fr.*; "physical magnitude" *amer.*; physikalische Grösse" *niem.*) jest równoważny iloczynowi wartości liczbowej (lub miary) będącej czystą liczbą przez jednostkę:

wielkość fizyczna = wartość liczbowa \times jednostka

* Dokument ten, opracowany przez Komisję Orzeczeń, Jednostek i Terminów Międzynarodowej Unii, został przyjęty przez Zgromadzenia Ogólne Unii w latach 1948, 1951 i 1954. Zawarte w tym dokumencie zalecenia co do użycia oznaczeń dla jednostek i wielkości fizycznych, dla stałych matematycznych oraz dla działań sa na ogół zgodne z zaleceniami innych organizacji, mianowicie:

1) International Standardising Organisation (ISO) - Projekt ISO, TC 12,

2) Conférence Générale des Poids et Mesures (9-ème. C. G. 1948; 10-ème C. G. 1954).

3) Union Internationale de Chimie Pure et Appliquée (1947, 1949, 1951),

4) International Electrotechnical Committee (Int. Letter Symbols Publ. 27, 1953).

(2) Nie należy w równaniach fizycznych używać skrótów, czyli napisanych w skróconej postaci nazw lub wyrażeń. W tekście natomiast skróty mogą być drukowane zwykłą antykwą (np. SEM dla siły elektromotorycznej).

2. Jednostki

(1) Symbole jednostek wielkości fizycznych należy drukować antykwą (prostymi literami).

(2) Po symbolach jednostek nie należy używać kropek.

(3) Symbole jednostek, których nazwy pochodzą od nazwisk, należy pisać z wielkiej litery, antykwą. Wszystkie inne jednostki należy drukować małymi literami, antykwą.

(4) Symbole przedrostków drukować małymi literami, antykwą: jedyny wyjątek stanowią przedrostki: M = mega, G = giga i T = tera.

(5) Nie należy pisać symboli jednostek w liczbie mnogiej (np. nie pisać: 7 watów, lecz 7 wat lub 7 W).

3. Znaki i działania matematyczne

(1) Symbole działań matematycznych drukować antykwą (np. sin kx exp at, log A).

(2) Po symbolach działań matematycznych nie należy używać kropek.
(3) Liczby drukować antykwa. Używać przecinka albo kropki jedynie

dla oddzielenia liczb całkowitych od ułamków dziesiętnych.

(4) Dla ułatwienia odczytywania dużych liczb można rozdzielać je na grupy po trzy cyfry, nie używając przy tym kropek ani przecinków (np. 2 573 421 736).

4. Pierwiastki chemiczne

(1) Symbole pierwiastków chemicznych należy drukować antykwą (prostymi literami) nie stawiając po nich kropek (np. Ca, C, H, D, He).

(2) Towarzyszące tym symbolom wskaźniki mają następujące znaczenie:

liczba masowa 14 N_2 liczba atomów w drobinie

Miejsce z prawej strony u góry pozostawia się dla wskazania, w razie potrzeby, stanu jonizacji lub wzbudzenia jądra (np. Ca^{2+} , PO_4^{3-}). W wypadku gdy nie ma specjalnej potrzeby wskazywania liczby atomowej — można ją opuścić.

(3) Rodzaj atomów identyczny pod względem liczby atomowej i masowej należy nazywać słowem *nukild*. Nazwę *izotopy* należy zachować dla atomów o tej samej liczbie atomowej, nazwę *izobary* — dla atomów o tej samej liczbie masowej.

II. SYMBOLE WIELKOŚCI FIZYCZNYCH

Uwaga:

(1) Gdy dla jednej wielkości podanych jest kilka oznaczeń, przy czym brak wskazówek specjalnych — wówczas wszystkie te oznaczenia są równouprawnione.

(2) Na ogół nie przywiązuje się w niniejszej publikcji specjalnej uwagi do nazwy wielkości.

1. Przestrzeń, czas

długość	1
szerokość	Ъ
wysokość	h
promień	r
średnica: $d = 2r$	d
droga: $L = \int ds$	<i>L</i> , s
pole powierzchni	A, S
objętość	V, v
kąt (płaski)	$a, \beta, \gamma, \Theta, \vartheta, \varphi$
kąt bryłowy	ω, Ω
długość fali	λ
liczba falowa: $\sigma = 1/\lambda$	σ, ν
$(ilde{ u}$ używa się wyłącznie w spektroskopii mo	lekularnej)
liczba falowa kątowa: $k=2\pi/\lambda$	k
czas	t
okres	· T
częstość: $\nu = 1/T$	v , f
(w fizyce: ν)	1
częstość kątowa: $\omega=2~\pi v$	ω
prędkość: $v = ds/dt$	· v
prędkość kątowa: $\omega=darphi/dt$	ω
przyśpieszenie: $a = dv/dt$	α
przyśpieszenie kątowe: $a = d\omega/dt$	· α
przyśpieszenie grawitacyjne	g
normalne przyśpieszenie grawitacyjne	g_n
v/c	ß

2. Mechanika

masa	、 m
gęstość: $\varrho = m/v$	Q
masa zredukowana	μ
pęd: $p = m \cdot v$	p, p
moment bezwładności: $I = \int r^2 dm$	I, J
siła	$oldsymbol{F}$, F
ciężar	G , (W)
(lepiej używać symbolu: G)	
moment siły	М, М
ciśnienie	Р
ciągnienie (ciśnienie ujemne)	σ
naprężenie styczne	τ
stała grawitacji:	G
$F~(r) = G~m_1~m_2/r^2$	
moduł sprężystości, moduł Younga: $\sigma = E \Delta l/l$	E
moduł sprężystości postaciowej: $ au = G \ tg \ \gamma$	G
ściśliwość: $\varkappa = - (1/v) \ dv/dp$	z
moduł ściśliwości: $K = 1/\varkappa$	K
współczynnik lepkości	η
kinematyczny współczynnik lepkości: $\nu = \eta/\varrho$	ν
współczynnik tarcia	f
napięcie powierzchniowe	γ, σ
energia	E, Ų
energia potencjalna	V, E_p
energia kinetyczna	T, E_k
praca	W, A
moc	Р
sprawność	η
funkcja Hamiltona	H
funkcja Lagrange'a	L
gęstość względna	d
J .	
3. Kinetyczna teoria gazów	
liczba drobin	N

 N_0 , N

liczba drobin w molu

liczba drobin w jednostce objętości, (gęstość liczby drobin)	n
wektor prędkości drobiny, że składowymi: $\begin{cases} c \\ u \end{cases}$	(c_x, c_y, c_z) (u_x, u_y, u_z)
wektor położenia drobiny ze składowymi:	r, (x, y, z)
wektor pędu drobiny ze składowymi	$p_{z}, (p_{x}, p_{y}, p_{z})$
prędkość średnia	$c_o, u_o, \overline{c, u}$
prędkość najbardziej prawdopodobna	ĉ, û
średnia droga swobodna	ı
funkcja rozkładu prędkości: $n = \int f du_x du_y du_z$	f (c)
funkcja Boltzmanna	H
współrzędna uogólniona	q
pęd uogólniony	p
objętość w y-przestrzeni fazowej	Ω
temperatura termodynamiczna	T, (Θ)
(lepiej używać symbolu: T)	
stała Boltzmanna	k
1/kT w funkcjach wykładniczych	β
stała gazowa w odniesieniu do jednego mola	R
temperatura charakterystyczna	Θ
Debye'a temperatura charakterystyczna: $\Theta_{ m D}=hv_{ m p}/k$	$\varTheta_{ m D}$
Einsteina temperatura charakterystyczna: $\Theta_{\rm E} = h v_{\rm E}/k$	$\Theta_{ extsf{E}}$
rotacyjna temperatura charakterystyczna: $\Theta_{ m r} = h^2\!/8\pi^2Ik$	Θ,
oscylacyjna temperatura charakterystyczna: $\Theta_{\mathbf{v}}=h u/k$	Θ_{v}
4. Termodynamika	
ilość ciepła	Q
praca	W, A
temperatura	t, (9)
(lepiej używać symbolu: t)	
temperatura b ezwzględ na	$T, (\Theta)$
(lepiej używać symbolu: T)	
entropia	\boldsymbol{S}
energia wewnętrzna	U
energia swobodna, funkcja Helmholtza: $F = U - TS$	· F
entalpia: $H = U + pV$.	H
entalpia swohodna funkcia Gibbsa: $G = U + nV - TS$	C

współczynnik rozszerzalności liniowej		α
współczynnik rozszerzalności objętościowej		γ
przewodnictwo cieplne		λ
ciepło właściwe		c_p, c_v
ciepło drobinowe		C_p, C_v
współczynnik Joule'a — Thomsona		μ
stosunek c_p/c_v		κ, γ
	1.1	
5. Elektryczność		
		0
ilość elektryczności, ładunek		Q
gęstość ładunku		ę
gęstość powierzchniowa ładunku		0
potencjał elektryczny		V E F
natężenie pola elektrycznego		Е, Е П П
indukcja elektryczna		D , D
pojemność elektryczna		C
przenikalność elektryczna* ośrodka $\varepsilon = D/E$:		3
przenikalność elektryczna próżni		ε ₀
przenikalność elektryczna względna: $\varepsilon_{\rm r} = \varepsilon/\varepsilon_0$		
polaryzacja dielektryczna: $D = \varepsilon_0 E + P^{**}$		P, P
podatność dielektryczna		χ
elektryczny moment dipolowy		p , p
natężenie prądu elektrycznego		1
gęstość prądu		J , J
natężenie pola magnetycznego		', 11
indukcja magnetyczna		', B
strumień indukcji magnetycznej		${\it \Phi}$
przenikalność magnetyczna: $\mu = B/H$		μ
przenikalność magnetyczna próżni		μ_0
przenikalność magnetyczna		ir.
względna: $\mu_{\mathbf{r}} = \mu/\mu_{0}$		$\mu_{ extbf{r}}$
namagnesowanie: $B = \mu_0 (H + M)^{**}$		М, М
podatność magnetyczna	÷	χm
moment magnetyczny	•	μ, μ
	·.	

* Stała dielektryczna (przyp. tłum.). ** Zapis w postaci zracjonalizowanej, p. s. 496.

- 4

polaryzacja magnetyczna: $\mu_{0}~oldsymbol{M}$			
(brak zaleceń co do symbolu)			
magnetyczny moment dipolowy			m , m
opór elektryczny*			R
opór bierny*			X
opór pozorny:* $Z = R + iX$			
przewodność czynna:* $G = R/Z^2$			G
przewodność bierna:* $B = -X/Z^2$			В
przewodność pozorna: * Y = 1/Z = G + iB	I		Y
opór właściwy			Q
przewodnictwo elektryczne: 1/ę		4	γ, σ
indukcyjność własna			L
indukcyjność wzajemna			M, L_{12}
liczba faz	1		m
kąt strat dielektrycznych			8
liczba obrotów			N
moc			Р
wektor Poyntinga			· S , S
potencjał wektorowy			Á
6 Świątła			
ilość światła			0
strumień świetlny			لم م
światłość**: $d\Phi/d\omega$			Ψ
nateżenie oświetlenia: $d\Phi/dS$			1
iasność: $dI/dS \cos \vartheta$			
promienność: $d\Phi/dS$	1		<i>L</i> , В
zdolność absorneji (nochłaniania) Φ / Φ			п
zdolność odbijania Φ/Φ_0			a
zdolność przepuszczania (przeznoczustość)	ส่ไส		Q
współczymnik absornaji	$\Psi_{\rm tr}/\Psi_0$		τ
współczynnik osłabionia okstunkcji			a
predkość światła w próżni			×
współczynnik zatomonia m — a/a			С
\sim			n

* Używa się również terminów: R – rezystancja, X – reaktancja, Z – impedancja, G – konduktancja, B – susceptancja, Y – admitancja (przyp. tłum.).
 ** Inaczej – natężenie źródła światła w danym kierunku (przyp. tłum.).

7.	Fizyk	ra at	tomow	a i	jąd	rowa
----	-------	-------	-------	-----	-----	------

liczba atomowa			Z
liczba masowa			A
liczba protonów $P = Z$	-		Р
liczba neutronów $N = A - Z$			N
ładunek elektronu			—е
masa elektronu			m
masa protonu	Ť		$M_{ m p}$
masa neutronu			${M}_{ m n}$
masa mezonu			m_{π}, m_{μ}
masa jądra			M
masa atomowa			M_a
moment magnetyczny cząstki			μ
moment magnetyczny protonu			$\mu_{\mathfrak{p}}$
moment magnetyczny neutronu			μ_{n}
moment magnetyczny elektronu		÷ .	μ_{e}
magneton Bohra	8		$\mu_{\rm B}, \beta$
główna liczba kwantowa			n, n_i
liczba kwantowa orbitalnego momentu pędu	÷ .		L , l_i
spinowa liczba kwantowa			S, s _i
liczba kwantowa całkowitego momentu pędu			J, j _i
magnetyczna liczba kwantowa			M, m_i
spinowa liczba kwantowa jądra			I
liczba kwantowa struktury nadsubtelnej		÷	F
rotacyjna liczba kwantowa			J, K
oscylacyjna liczba kwantowa			v
moment kwadrupolowy			Q
stała Rydberga			R

III. MATEMATYCZNE DZIAŁANIA I SYMBOLE

1. Analiza

 \approx

 ∞

równa się równa się w przybliżeniu proporcjonalne do dąży do

	OZNACZENIA I JEDNOSTKI	493
	- 2	
asymptotycznie równa sie	2	\sim
odpowiada (czemukolwiel	s)	<u>^</u>
plus lub minus		±
suma		Σ
iloczyn		п
nieskończoność		∞
pi		π
podstawa logarytmu natu	iralnego	e
n silnia		n!
współczynnik dwumianu	n!/ p! (n-p)!	$\binom{n}{p}$
wariacja <i>x</i>		δx
przyrost x		Δx
funkcja wykładnicza od a	r ·	$\exp x$, e^x
logarytm dziesiętny z x		$\log x$
(w wypadku niejednoz	naczności ¹⁰ log x lub log ₁₀ x)	
logarytm naturalny z x		$\ln x$
część rzeczywista z		Re z
część urojona z		· Im z
moduł z		z
zespolona sprzężona wzgl	ędem <i>z</i>	z*
zespolona sprzężona wzgl	edem macierzy $A: (A^*)_{jk} = (A_{jk})^*$	- A*
macierz stowarzyszona (A	$A\dagger)_{jk} = A_{ki}^*$	A^{\dagger}
macierz transponowana A	$A_{jk} = A_{kj}$	\hat{A}

2. Wektory i tensory

Aby uniknąć używania wskaźników, częstokroć zaleca się używać specjalnych liter do oznaczania wektorów oraz tensorów drugiego rzędu. Propozycja jest następująca:

(1) Wektory należy drukować tłustym drukiem kursywą.

(2) Tensory drugiego rzędu należy drukować czcionkami bez szeryfów. (3) W rękopisach wektory mogą być oznaczone jedną, zaś tensory -

dwiema strzałkami u góry. A, a wektor |A|, |a|wartość bezwzględna A · B iloczyn skalarny $A \wedge B, A \times B$ iloczyn wektorowy

operator nabla		∇
gradient		grad $\varphi, \nabla \varphi$
dywerge ncja		div A
rotacja		$\operatorname{curl} \boldsymbol{A}$, $\operatorname{rot} \boldsymbol{A}$
laplasjan	+5	 $\Delta arphi$, $ abla^2 arphi$
iloczyn dyadyczny		AB
tensor		Т
iloczyn tensorowy: $\Sigma_k S_{ik} T_{kl}$		S - T
iloczyn tensorowy: $\Sigma_k S_{ik} T_{ki}$		S : T
iloczyn wektora przez tensor		
$\Sigma_k A_k T_{ki}; \Sigma_j T_{ki} A_i$		$A \cdot T; T \cdot A$

IV. OZNACZENIA JEDNOSTEK

1. Symbole dla przedrostków

decy	$(=10^{-1})$			d
centy	$(=10^{-2})$	1		с
mili	$(=10^{-3})$			m
mikro	$(=10^{-6})$			μ
nano	$(=10^{-9})$			n
piko	$(=10^{-12})$			р
kilo	$(=10^3)$			k
mega	$(= 10^{6})$	·		\mathbf{M}
giga	$(=10^9)$			G
tera	$(=10^{12})$	+	. 1	Т

2. Jednostki CGS

symbol	1	+	•	j edn ostka		
cm				centymetr		, b, h
s				sekunda		
g				gram	÷.,	n
Hz				herc (= s^{-1}	N	,ν
dyn				dyna		7
erg				erg		5
baria			1 ²)	bar (= dyna)		0
Р			$/cm^2$)	puaz (= dy)		,
°K			a	stopień Kel		Г
°C			za	stopień Cel		
Oe				ersted		H

OZNACZENIA	I	JEDNOSTKI
------------	---	-----------

В	gai	us			G
${\Phi}$	ma	kswel	Ser a -		Mx
F _M	gil	bert			Gi
I	ka	ndela			cd
Φ_{\cdot}	lur	men (= $cd \cdot sr$)			lm
L, B	stil	b (= cd/cm^2)			sb
E	fot	$(= lm/cm^2)$			fot
a	rad	ian			rad
ω	ste	radian		1	sr

l

3. Jednostki MKSA

	jednostka	symbol
l, b, h	metr	m
t.	sekunda	S
m	kilogram	kg
ν , f, ω	hertc	Hz
F	niuton	N
E	dżul	J
Р	wat	w
I	amper	А
Q	kulomb	С
V	wolt	v
С	farad	F
R	om	Ω
L	henr	Н
Φ	weber	Wb
I	kandela	cd
Φ	lumen	lm
L, B	nit (= cd/m^2)	nt
E	luks (= lm/m^2)	lx

4. Jednostki nie należące do układu spójnego

jednostka angstrem symbol

496	0.000	OZNACZENIA I JEDNOS		
V		litr		- 1
t		minuta	· ·	min
t		godzina		h
p		atmosfera		atm
Р		kilowatogodzina		kWh
Q		kaloria		cal
Q		kilokalori a		kcal
m		tona (= 1000 kg)		t
p		bar ($=10^5$ barii)		bar

Uwaga:

(1) W roku 1951 IUPAP przyjęła następującą *uchwałę:* "Zgromadzenie Ogólne Unii Fizycznej uważa, że w przypadku, gdy równania są zracjonalizowane, racjonalizacja powinna być wykonana poprzez wprowadzenie nowych wielkości".

(2) Gdy możliwe jest pomieszanie wielkości zracjonalizowanych z niezracjonalizowanymi, wówczas zaleca się dodawać do nazwy wielkości przymiotnik *zracjonalizowany* lub *niezracjonalizowany* zaopatrując symbol tej wielkości z lewej strony we wskaźnik n lub r, odpowiednio, np.

niezracjonalizowane pole magnetyczne = $_{n}H$ zracjonalizowane pole magnetyczne = $_{r}H$

> ${}_{\mathbf{r}}D = {}_{\mathbf{n}}D/4\pi$, ale ${}_{\mathbf{n}}E = {}_{\mathbf{r}}E = E$ ${}_{\mathbf{r}}H = {}_{\mathbf{n}}H/4\pi$, ale ${}_{\mathbf{n}}B = {}_{\mathbf{r}}B = B$

(3) Do przejścia od równania między wielkościami niezracjonalizowanymi do równania między wielkościami zracjonalizowanymi służy następująca tablica, która podaje wielkości zracjonalizowane oraz równoważne im wyrażenia poprzez wielkości niezracjonalizowane:

racjonaliz.		niezracjonaliz.		zracjonaliz.		niezracjonaliz	
	Q	Q		Ι		I	
	Q	Q		J		J	
	${oldsymbol E}$	$oldsymbol{E}$		B		B	
	D	$D/4\pi$		H		$H/4\pi$	
•	P	Р	.	M		M	
	3	$ \le \varepsilon/4\pi$	1	μ		$4\pi/\mu$	
	ε0	$\varepsilon_0/4\pi$		μ_0		$4\pi/\mu_0$	
	ε _r	$\varepsilon_r/4\pi$		$\mu_{\mathbf{r}}$		μ_{r}	1

(4) Przykład:

Składowa pozioma indukcji magnetycznej pola magnetycznego Ziemi wynosi w Europie w przybliżeniu

$$B = 0.2 \text{ G} = 0.2 \times 10^{-4} \text{ Wb/m}^2$$

Ta wartość nie zostaje zmieniona przez racjonalizację. Odpowiednie niezracjonalizowane pole magnetyczne wynosi

$$_{
m a}H=0,2$$
 Oe $=0,2 imes10^{3}$ A/m,

zaś odpowiednie zracjonalizowane pole wynosi

$$H = (0,2/4\pi)$$
 Oe = $(0,2 \times 10^{3}/4\pi)$ A/m = 15,9 A/m.

Ponieważ wartość liczbowa pola magnetycznego zmienia się przy racjonalizacji, lepiej jest, gdy tylko to jest możliwe, używać indukcji magnetycznej, wyrażonej w gaussach lub w Wb/m².

Tłumaczył W. Majewski

Е

Я

n

¥

С

S

Ο

N

⁵¹ Stwierdzenie istnienia eząstki 2⁰

Istnienie hiperonu Σ^0 — obojętnego elektrycznie odpowiednika znanych wcześniej hiperonów Σ^+ i Σ^- — zasugerowoli M. Gell-Mann i A. Pais opierając się na rozwiniętej przez nich systematyzacji cząstek elementarnych^{*} (por. Postępy Fizyki, zesz. 4, r. 1956, str. 331).

Argument ich można streścić następująco: ładunek Q, składowa spinu izotopowego J₃, liczba barionów N (czyli jedność dla nukleonów i hiperonów a zero dla mezonów), oraz strangeness S określonego rodzaju cząstek elementarnych związane są zależnością:

$$\mathbf{Q} = \mathbf{I}^3 + \frac{\mathbf{Z}}{N} + \frac{\mathbf{Z}}{\mathbf{Z}} \cdot$$

Hiperonom naładowanym Σ^+ i Σ^- przypisano — na podstawie znajomości reskcji, w których występują — strangeness równą —1, wobec czego napisany wyżej związek przyjmuje dla hiperonów Σ postać

 $0 = 1^3$

Jeżeli nie chcemy przyjąć istnienia ładunków połówkowych, to z ostatniej zależności otrzymujemy wniosek, że spin izotopowy J jest całkowity. Cząstki Σ^+ i $\Sigma^$ odpowiadają wartościom J₃ równym +1 i —1, wartości J₃ = 0 odpowiada zatem neutralna cząstka Σ^0 .

Schemat Gell-Manna i Paisa sugeruje nie tylko istnienie cząstki 2°, lecz przewiduje także kilka jej własności: schemat produkcji, rozpadu i ocenę czasu życia.

Cząstka Σ^0 ma tę samą strangeness, co Λ^0 , i należy spodziewać się analogicznego schematu produkcji — w szczególności, dla zderzeń π — p, schematu:

$$(0 = SV'I + = {}^{\Theta}S'I - = {}^{Z}S'0 = {}^{\omega}S'I = {}^{\Theta}S'$$

Ponieważ wartości strangenes
s Σ^0 i Λ^0 są równe, można oczekiwać, ż
e Σ^0 roz-padnie się w procesie

·1 + 0V ← 03

(przejście to nie może nastąpić z emisją mezonu x^0 , gdyż nie wystarcza energil). Czas życia można grubo ocenić: rozpad jest procesem szybkim (bo nie zmienia się strangeness), z tym, że wystany jest foton. Zatem można oczekiwać czasu życia równego, co do rzędu wielkości, "czasowi jądrowemu" \times 137, a zatem $\sim 10^{-20}$ sek.

* Systematyzacja Gell-Manna i Paisa przedstawiona została niedawno pięknie w artykule: M. Gell-Mann, Suppl N. Cim. 4, 848 (1956). Powyższe przewidywania znalazły ostatnio piękne potwierdzenie eksperymentalne.

Już od paru lat obserwowano* "anomalne przypadki produkcji Λ^{0} ", które dawały się dobrze wytłumaczyć według schematu:

$$\pi^{-} + p \rightarrow \Sigma^{0} + \Theta^{0}$$

$$\downarrow (10^{-20} \text{ sek})$$

$$\Lambda^{0} + \gamma$$

W szczególności statystyczna analiza Alvareza et al.** dostarczyła silnego argumentu za istnieniem Σ^{0} . We wszystkich wskazanych pracach brak było jednak identyfikacji fotonu. W ostatnim czasie Plano, Samios, Schwartz i Steinberger*** dokonali w Brookhaven National Laboratory trzech pięknych obserwacji w komorze pęcherzykowej, demonstrujących istnienie cząstki Σ^{0} .

Komora pęcherzykowa propanowa o wymiarach 12 (średnica) na 8 (głębokość) cali, w polu magnetycznym 13 400 erstedów, naświetlona była mezonami π z kosmotronu. Jedną z trzech obserwacji Σ^0 przedstawia rysunek. Padający mezon π zderza się z protonem w komorze, przy czym powstają cząstki Σ^0 i Θ^0 . Mezon ciężki Θ^0 przebiega pewien mierzalny odcinek w komorze i rozpada się na widoczne na rysunku widełki π^+ , π^- . Cząstka Σ^0 rozpada się w nader krótkim czasie na Λ^0 i foton. Z kolei Λ^0 na widoczne widełki — proton i π . Na rysunku punkt zderzenia mezonu π i protonu, tor cząstki Σ^0 i cząstki Λ^0 przed rozpadem sprowadzają się praktycznie do punktu (wskutek późniejszego zderzenia tor mezonu π załamuje się). Powstały wraz z Λ^0 foton daje początek parze elektronowej, która — to jest decydujące — została również zarejestrowana w komorze (por. fotografię i rysunek na stronie następnej).

Rozmaite możliwe w tych obserwacjach pomiary są zgodne z interpretacją, spójne i pozwalają określić masę Σ^0 :

 $M_{\Sigma^0} = 2327 \pm 7$ $(M_{\Sigma^+} = 2327 \pm 3, M_{\Sigma^-} = 2341 \pm 5).$

P. Zieliński

*W. B. Folwer, R. P. Shutt, A. M. Thorndike, W. L. Whittemore, Phys. Rev. 98, 121 (1954); W. Walker, W. Shepard, Phys. Rev. 101, 1810 (1955); R. Budde, M. Chretien, J. Leitner, N. Samios, M. Schwartz, J. Steinberger, Phys. Rev. 103, 1827 (1956).

** L. W. Alvarez et al., K-Interactions in Hydrogen, Berkeley, 1956 (preprint). *** R. Plano, N. Samios, M. Schwartz, J. Steinberger, N. Cimento 5, 216 (1957).



Objaśnienie do fotografii obok



Grupa uczestników VII konferencji fizyki jądrowej w Rochester



Obserwacja \varSigma^0 w komorze pęcherzykowej w Brookhaven

VII konferencja fizyki jądrowej w Rochester

Siódma konferencja fizyki jądrowej wysokich energii zgromadziła ponad 300 fizyków z całego świata. Obrady nie były podzielone na równoległe sekcje, jak to zwykle bywa na tego typu konferencjach, tak że każdy z uczestników mógł wysłuchać w zasadzie wszystkich referatów. Mimo wypadnięcia szeregu referatów wskutek nieobecności referentów konferencja była bardzo stłoczona i mimo obcięcia limitów czasu przeznaczonych referentom wielu z nich nie zdołało w ogóle wygłosić swych komunikatów.

W centrum zainteresowań była oczywiście sprawa zachowania parzystości. Prof. T. D. Lee wygłosił interesujący referat przeglądowy, w którym przedstawił w sposób raczej dosyć ostrożny stanowisko swoje i C. N. Yanga na zagadnienie parzystości. Obaj ci teoretycy, którzy pierwsi postawili zagadnienie parzystości jako problem do zbadania, zajmują teraz raczej ostrożne stanowisko unikając dalej idących spekulacji i przewidywań teoretycznych. Wiele osób, z którymi rozmawiałem, wyraziło ubolewanie, że na konferencję nie przyjechali fizycy radzieccy, którzy mogliby wnieść do dyskusji trochę odmienny i raczej dużo śmielszy punkt widzenia na sprawę parzystości. Nie można jednak odmówić słuszności stanowisku Lee i Yanga, którzy uważają, że postawili dostateczną ilość pytań pod adresem fizyków doświadczalnych i czekają na ich ilościowe, a nie tylko jakościowe sprawdzenie. W każdym razie tzw. zasada zachowania parzystości kombinowanej jest ciągle jeszcze teoretyczną hipotezą, którą jedynie doświadczenie może potwierdzić lub obalić. Podobnie przedstawia się sprawa naruszenia zasady zachowania parzystości w rozpadach ciężkich mezonów i hiperonów. Proponowane przez Lee i Yanga doświadczenia nie zostały jeszcze wykonane i o problemie cząstek (r. O) mówiono bardzo niewiele. Lee i wielu innych fizyków przypuszcza, że mamy tu do czynienia z jedną cząstką rozpadającą się według różnych schematów z naruszeniem zachowania parzystości.

Wielu fizyków doświadczalnych pracuje obecnie nad problemami postawionymi przez Lee i Yanga. Najdalej posunięte z tych prac były referowane na konferencji. Najciekawszy i najtrudniejszy eksperyment wykonała uczona chińska W u na uniwersytecie Columbia (St. Zj.), która stwierdziła doświadczalnie występowanie bardzo dużej asymetrii w rozkładzie kątowym elektronów beta emitowanych ze spolaryzowanych jąder Co⁶⁰. Inne bardzo piękne doświadczenie referował Lederman. Znalazł on mianowicie podobną asymetrię rozkładu elektronów w rozpadzie mezonów μ . W swym bardzo zręcznie ustawionym doświadczeniu zmierzył on ponadto współczynnik żyromagnetyczny mezonu μ . Na razie jednak dokładność wszystkich tych pomiarów nie jest jeszcze wystarczająca, by móc wyciągnąć ilościowe wnioski. Polaryzację elektronów beta emitowanych z niespolaryzowanych jąder mierzy już wiele laboratoriów. Frauenfelder opisywał swoje doświadczenia i podał pierwsze wyniki, które jakościowo zgadzają się bardzo dobrze

[503]

7*

z przewidywaniami teorii, ale na ilościowe wnioski trzeba będzie jeszcze poczekać. Frauenfelder zmieniał kierunek polaryzacji elektronu za pomocą zakrzywionego kondensatora a następnie rozpraszał spolaryzowane poprzecznie elektrony na złocie.

Wszystkie niemal omawiane na konferencji efekty związane z naruszeniem parzystości dotyczyły reakcji, w których występują neutrina i były konsekwencją dwuskładnikowej teorii neutrina zaproponowanej niezależnie przez Landaua oraz Lee i Yanga. Kilku referentów (m. in. Case oraz Feynman) wskazało na inne teoretycznie dopuszczalne powiązania problemu parzystości ze znikającą masą neutrina. Wśród prac o charakterze koncepcyjnym należy wymienić pracę Taylora, który postuluje, że pole elektromagnetyczne odgrywa podobną rolę w odniesieniu do inwersji czasu (Schwingera), jak pole neutrinowe w odniesieniu do inwersji przestrzennej. Postulat Taylora wymaga wprowadzenia ośmioskładnikowej reprezentacji spinorowej grupy Lorentza, którą Taylor identyfikuje z funkcją falową nukleonów. Chociaż z interpretacyjnego punktu widzenia praca jest bardzo ciekawa, to jednak na razie nie daje nic nowego z doświadczalnego punktu widzenia.

Z nowości nie związanych z zagadnieniem parzystości należy wymienić hipotezę Gell-Manna, który twierdzi, że oddziaływanie cząstki Λ^0 z nukleonami (np. w hiperfragmentach) poprzez wymianę dwóch mezonów π jest dużo silniejsze od proponowanego przez Wentzla oddziaływania poprzez wymianę mezonu K.

Z innych zagadek, które domagają się wyjaśnienia, należy wymienić problem struktury nukleonu (referowany przez Chew). Doświadczenia Hoffstadtera wykazują dziwne asymetrie między neutronem a protonem, które nie zostały jeszcze zinterpretowane teoretycznie.

Chamberlain mówił o innej zaskakującej asymetrii, a mianowicie między protonem i antyprotonem. Okazuje się bowiem, że przekrój czynny na rozpraszanie antyprotonów jest dwa razy większy od przekroju czynnego na rozpraszanie protonów. Podobnie nie ma jeszcze wyjaśnienia, dlaczego przy anihilacji antyprotonów tworzy się przeważnie większa liczba mezonów π .

Serber podał bardzo wiele danych liczbowych dotyczących produkcji hypercnów i ciężkich mezonów przy różnych energiach. Liczba danych doświadczalnych z tej dziedziny rośnie niezwykle szybko. Cały szereg autorów: m. in. Orear, Glaser Walker, Schwartz i in., referowało swoje prace dotyczące różnych reakcji tworzenia hiperonów i ciężkich mezonów. Jak dotychczas nie ma żadnych wskazówek, by spiny hiperonów Λ^0 lub Σ były wyższe niż ½.

Marshak referował zagadnienie potencjału oddziaływania między dwoma nukleonami. Po raczej negatywnych wynikach grupy w Los Alamos, której nie udało się znaleźć niezależnego od pędów potencjału oddziaływania, okazuje się, że dodanie członu ze sprzężeniem spin-orbita znacznie poprawia sytuację. Chwilowo jednak nie wiadomo, czy poprawa dotyczy wszystkich energii, ponieważ nie ma ani dostatecznie dokładnych danych doświadczalnych, ani rachunków teoretycznych dla całego szeregu przedziałów energii.

Do konferencji w Rochester wrócimy jeszcze później przy omawianiu szczegółowym niektórych ciekawszych referatów.

Na zokończenie chciałbym dodać, że delegaci polscy wygłosili trzy referaty. Prof. Mięsowicz mówił o niedawno znalezionym pęku promieni kosmicznych wysokiej energii. Prof Rayski przedstawił swoje próby teoretycznego obliczenia mas hiperonów. Doc. Werle referował pracę o polaryzacji mezonów μ pochodzących z rozpadów ciężkich mezonów. O

R

T

А

Uruchomienie synchrofazotronu Zjednoczonego Instytutu Badań Jądrowych

W kwietniu br. dokonano wstępnego uruchomienia synchrofazotronu Zjednoczonego Instytutu Badań Jądrowych w Dubnie (ZSRR). Osiągnięto zaplanowaną maksymalną energię protonów — 10 GeV, tj. najwyższą energię cząstek elementarnych uzyskaną dotychczas laboratoryjnie.

Samolotowy silnik jądrowy

W USA dokonano szeregu prób działania na ziemi jądrowego silnika samolotowego, w wyniku których można oczekiwać, że za parę lat możliwe będą próby powietrzne samolotu o napedzie atomowym. Prawdopodobnie będzie nim hydroplan typu Martin Seamaster, który zostanie zaopatrzony w jądrowe silniki. W silniku takim rolę komory spalania, przeznaczonej dla rozgrzewania powietrza, spełniać będzie reaktor jądrowy. W wymiennikach ciepło przekazywane będzie sprężonemu powietrzu, poruszającemu łopatki turbiny. Wybór padł na hydroplan z tego względu, że silnik i osłona posiadają duży ciężar a przy tym w wypadku katastrofy szczątki samolotu na lądzie byłyby bardzo groźne dla otoczenia.

Reaktory w USA

W Stanach Zjednoczonych czynnych jest obecnie 13 reaktorów przemysłowych (przeznaczonych wyłącznie do produkowania plutonu), przy czym 8 z nich znajduje się w Hanford, a 5 w Savannah River. Ponadto czynne są 24 reaktory do celów badawczych oraz 4 reaktory doświadczalne. Oprócz tych 41 czynnych reaktorów, 61 znajduje się w stadium projektowania albo budowy.

Wizyta prof. L. Rosenfelda

W kwietniu br. przebywał w Polsce z dwutygodniową wizytą prof. L. Rosenfeld. W czasie swego pobytu prof. Rosenfeld wygłosił cykl odczytów na tematy budowy jądra oraz odczyt o zasadzie komplementarności. Odczyty te drukujemy na łamach Postępów Fizyki.

Badania jądrowe w Czechosłowacji

Czechosłowacja, jako kraj uprzemysłowiony, zainteresowana jest szerokim rozwojem wykorzystania energii jądrowej.

Plan rozwoju wykorzystania energii jądrowej w ČSR, opracowany w r. 1955, przewiduje 3000 MW zainstalowanej mocy w r. 1970, ale może on ulec opóźnieniu ze względu na brak fachowego personelu. Plan oparty jest na krajowej produkcji uranu i ciężkiej wody.

Czechosłowackie badania jadrowe rozpoczęły się w r. 1945, lecz szeroko rozwijają się od r. 1955. W tym roku utworzony został Instytut Badań Jądrowych, który prowadzi obecnie badania podstawowe i stosowane w dziedzinie fizyki jądrowej, chemii i inżynierii jadrowej oraz szkolenie. W trakcie montażu znajduje sie reaktor który wkrótce podobny do tego, otrzymamy. ZSRR dostarcza Czechosłowacji również cyklotron dla energii 25 MeV.

W Słowacji specjalny komitet Słowackiej Akademij Nauk zajmuje sie badaniami jądrowymi, przy czym zakłada sie instytut badawczy. Najwieksłowackim zakładem fizyki szym jadrowej jest obecnie laboratorium promieniowania kosmicznego budowane w Tatrach na szczycie Łomnicy. w którym prace badawcze prowadzone są obecnie łącznie z fizykami polskimi.

Zgodnie z planem energia jądrowa ma przejąć całkowicie w z r o s t zużycia energii elektrycznej między 1965 a 1975 r., a nawet częściowo, ze względu na wyczerpanie się niektórych pokładów węgla, ma zastąpić elektrownie dotąd opalane węglem. Warto dla porównania zauważyć, że wielki program angielski (a Wielka Brytania ma czterokrotnie większą ludność) jest tylko dwukrotnie większy od czechosłowackiego.

W b. r. rozpocznie się w okolicy Bańskiej Bystrzycy budowa pierwszej doświadczalnej elektrowni atomowej, która ma być uruchomiona w r. 1960. W tym okresie rozpocznie się budowa zakładu do oczyszczania uranu i otrzymywania ciężkiej wody. Reaktor dla pierwszej elektrowni zostanie zakupiony w ZSRR, wyposażenie następnych elektrowni wyprodukowane zostanie w ČSR.

Kopalnie w Jachim wie są bardzo bogatym źródłem urazu. Na przeszkodzie należytemu ich wykorzystaniu stoi obecnie brak ludzi. Jest to w ogóle bardzo poważna trudność dla bardzo ambitnego planu, który niełatwo będzie realizować w zaplanowanym czasie bez nadwyrężenia gospodarki krajowej.

Badania jądrowe w Finlandii

Plan wykorzystania energii jądrowej w Finlandii nie przewiduje w najbliższej przyszłości wielkiego rozwoju energetyki jądrowej. Aczkolwiek przy braku węgla i ropy naftowej Finlandia jest zainteresowana w szybkim rozwoju energetyki jądrowej, to jednak wskutek ograniczonej siły roboczej i trudności ekonomicznych Finowie przyjęli plan bardzo ostrożny. W szczególności Finowie zamierzają rozwinąć w szerszym zakresie energię wodną. Położono duży nacisk na kształcenie w pierwszym okresie fachowców w dziedzinie fizyki i energetyki jądrowej.

Badania w dziedzinie fizyki jądrowej prowadzone są w Instytucie Technicznym w Helsinkach oraz na uniwersytetach.

W Instytucie Technicznym nie prowadzi się badań doświadczalnych, natomiast wykonywane są prace z teorii modeli jądrowych. Prawdopodobnie jednak zostanie tu zainstalowany reaktor doświadczalny. Na uniwersytecie Helsinkach rozpoczał niedawno akcelerator Van de Graaffa. prace Badania jądrowe prowadzone są również na drugim uniwersytecie fińskim Turku. w Natomiast uniwersytet szwedzki w Turku koncentruje sie głównie na humanistyce.

Finowie starają się opierać na własnych siłach i nie uzależniać się od innych państw.

Złoża uranowe w NRD

W Turyngii, w NRD, odkryto złoża uranowe, opisywane jako "największe w Europie". Eksploatacja złóż trwać będzie około 15—20 lat.

Reaktory jądrowe na świecie

Pismo "Die Atomwirtschaft" podaje zestawienie reaktorów, które czynne będą na świecie do roku 1965. Z zestawienia wynika, że do tego roku czynnych będzie na świecie 340 reaktorów, w tym 170 reaktorów energetycznych. Reaktory energetyczne posiadać będą m. in. następujące państwa: Argentyna, Republika Dominikańska, Finlandia, Izrael, Pakistan, Filipiny, Portugalia, Czechosłowacja, Węgry oraz wszystkie uprzemysłowione kraje — oprócz Polski.

Reaktor w Republice Dominikańskiej

Republika Dominikańska zakupiła w ub. r. reaktor, który zwiększy produkowaną moc w kraju z 45 do 57 megawatów.

Uruchomienie akceleratora liniowego w Berkeley

W laboratorium Uniwersytetu Kalifornijskiego w Berkeley uruchomiono akcelerator kiniowy ciężkich jonów — HILAC.

G. Seaborg oświadczył, że za pomocą HILAC'a będzie można prawdopodobnie otrzymać w ciągu najbliższych pięciu lat około sześciu dalszych pierwiastków transuranowych.

Perspektywy środków komunikacji o napędzie atomowym w ZSRR

Według oświadczenia profesora A. Chaczaturowa, dyrektora Instytutu Kompleksowych Problemów Komunikaciji. lokomotywy kolejowe moga być zasilane paliwem jadrowym. Lokomotywa taka ważyłaby znacznie wiecej - około 300 ton i miałaby długość około 50 m. Reaktor pracowałby z roztworem soli uranowej w wodzie. Do napedu użyta byłaby turbina parowa lub gazowa o mocy 8000 KM, która obracałaby 4 generatory pradu stałego, przy czym pracowałoby 12 elektrycznych silników trakcyjnych. Lokomotywa o napędzie atomowym zużywałaby tylko około 45-60 gramów paliwa na 1000 km, a wiec milion razy mniej niż zwykłe lokomotywy.

Omawiając perspektywy użycia energii jądrowej do napędu statków, prof. Chaczaturow oświadczył, że szybkość komunikacji morskiej wzrośnie półtorakrotnie przy niezwiększonych kosztach podróży.

Mówiac o lotnictwie prof. Chaczaturow wymienił dwa możliwe typy silników: typ śmigłowy, ze śmigłem obracanym przez wał turbiny gazowej, zasilanej goracymi gazami z reaktora, oraz typ odrzutowy, z pyuranowym wprowadzanym do łem sprężarki powietrznej i wtłaczanym przez grafit do reaktora. Chłodzi się powietrzem. Odrzut gorącego powietrza pozwoliłby na osiągnięcie szybkości od 1500 do 2000 km na godzinę. Na okrażenie kuli ziemskiej potrzeba by było kilkunastu kilogramów ²³⁵U, przy czym podróż trwałaby ok. 20 godzin.

Uczony radziecki oświadczył, że zasoby uranu i toru w ZSRR przeszło dwudziestokrotnie przewyższają wszystkie znane zasoby węgla, paliw płynnych i olejów bitumicznych.

Pobyt doc. J. Werlego w Anglii

Po przeszło rocznym pobycie w Anglii powrócił do kraju doc. J. Werle. W czasie swego pobytu Werle wykonał pracę teoretyczną w Laboratorium Fizycznym Uniwersytetu w Manchester, kierowanym przez prof. L. Rosenfelda, dotyczącą zagadnień ciężkich mezonów. Wyniki pracy, referowane na konferencji w Rochester, wzbudziły zainteresowanie i będą badane doświadczalnie.

Statki o napędzie atomowym w Japonii

Japonia opracowała plany ukończenia dwóch statków o napędzie atomowym do roku 1966. Statki posiadać będą silniki o mocy 20—30 tys. KM. Jeden z silników zostanie wykonany w Japonii.

Konferencja poświęcona promieniom kosmicznym w Tyflisie

W listopadzie ub. r. odbyła się w Tyflisie konferencja poświęcona promieniom kosmicznym, zorganizowana przez Instytut Fizyki Akademii Nauk Gruzińskiej SRR. W konferencji udział wzięło przeszło 70 fizyków radzieckich. Obrady poświęcone były głównie trzem działom fizyki promieni kosmicznych: cząstkom elementarnym, oddziaływaniu promieni kosmicznych z substancją oraz wielkim pękom.

W konferencji wziął udział prof. M. Danysz.

W Gruzji zostanie wkrótce otwarte nowe wysokogórskie laboratorium promieni kosmicznych w Cchra-Ckaro.

Milion stopni Celsjusza

W USA osiągnięto temperaturę przeszło miliona stopni Celsjusza w trakcie eksperymentów mających na celu zbadanie możliwości wykorzystania reakcji termojądrowych.

Konferencja Komitetu Międzynarodowego Roku Geofizycznego w Barcelonie



We wrześniu ub.r. odbyła się w Barcelonie konferencja Międzynarodowego Roku Geofizycznego. Przedmiotem konferencji było zebranie wyników wielkiej

pracy przygotowawczej, dokonanej przez komitety narodowe oraz sprawy organizacyjne.

Na konferencji prof. J. Kaplan podał szczegóły dotyczące pierwszego amerykańskiego sztucznego satelity, który zostanie wystrzelony na wchodnim wybrzeżu Florydy za pomoca trzystopniowej rakiety. Predkość satelity na orbicie wyniesie 29 000 km/godz. Orbita będzie eliptyczna z ekstremalnymi odległościami od Ziemi równymi 350 km i 2700 km. Satelita okrążać będzie Ziemię w ciągu półtorej godziny. Będzie mieć kształt kuli o promieniu 51 cm, masę około 10 kg, z czego połowę stanowić będzie masa przyrządów. Wykonywane będą pomiary

gęstości powietrza, natężenia promieni słonecznych i kosmicznych, promieniowania pozafiołkowego i in. Ruch satelity będzie śledzony za pomocą aparatury radiolokacyjnej z dokładnością do dwóch sekund kątowych. Satelitę można będzie dostrzec za pomocą silnej lornety polowej.

Nowi kandydaci w zakresie fizyki

W dniu 4 marca br. odbyła się obrona prac kandydackich Jerzego Sawickiego i Przemysława Zielińskiego.

Promotorem pracy J. Sawickiego pt. Polaryzacja neutronów i rozkłady kątowe w reakcjach (p, n) a model optyczny jądra był prof. L. Infeld, referentami — doc. J. Dąbrowski i doc. M. Suffczyński.

Streszczenie pracy:

Praca ma na celu wskazanie i przeanalizowanie nowej metody badania sił jądrowych działających w dwunukleonowych reakcjach typu powierzchniowego dla średnich energii padających cząstek (tzn. ~ 10 MeV). Podana jest dyskusja różnych znanych dotychczas typów tego rodzaju reakcji jądrowych. Z analizy tej wynika, że istnieja pewne przykłady reakcii szczególnie dogodne do badania sił jądrowych, w których dominującym mechanizmem jest oddziaływanie wprost, polegające na wbijaniu jednego z nukleonów jądra tarczy przez nukleon padajacy.

Powstaje zagadnienie, jakie efekty fizyczne towarzyszące tym reakcjom nadają się najbardziej do badania działających w tych reakcjach sił jądrowych. Jeśli rozważać reakcję typu (p, n), mamy wtedy do czynienia z potencjałem oddziaływania neutrom-proton stanowiącym o "wybijaniu" — V_{np} , potencjałem interakcji V_p padającego protonu z jądrem tarczy składającego się z oddziaływania coulom-

bowskiego i jądrowego, potencjału interakcji Vn końcowego swobodnego neutronu z jądrem końcowym. Z analogii do reakcji deuteronowego strippingu oraz z innych danych wynika, że należy się spodziewać słabej stosunkowo zależności rozkładów kątowych od potencjałów V_{np} i V_p oraz zapewne również Vp. Jednakże polaryzacja spinowa neutronów powinna być czuła na detale jądrowego oddziaływania końcowego neutronu z jądrem końcowym — V_n . Potencjał rozproszeniowy neutronu Vn zawiera w sposób naturalny sprzężenie spin-orbita. To sprzeżenie musi głównie decydować o wielkości polaryzacji. W pracy pokazano, że polaryzacja zwykle różna od zera nawet dla niezależnego od spinu potencjału V_n — jest różna od zera tylko dla Vn zależnego od spinu, jeżeli moment pędu końcowego zwiazanego protonu jest $l_f = 0$. Polaryzacja w takim przypadku jest najczystszym analizatorem potencjału V_n , a szczególnie jego cześci zależnej od spinu. Naikorzystniejszym do badań przykładem jest, jak pokazano, reakcja 29 Si(p, n) 29 P. Przyjęto V_n w postaci potencjału modelu optycznego zmodyfikowanego przez sprzężenie spin-orbita. Potencjał taki dał najlepszy opis doświadczeń z rozpraszaniem neutronów. Uwzględniono efekty coulombowskie i efekty jądrowego rozpraszania protonu W reakcji. Przeanalizowano wpływ wszystkich tych efektów na rozkłady kątowe i polaryzację spinową neutronów.

Znaczenie uzyskanych w pracy wyników idzie w kilku kierunkach. Odnośnie polaryzacji neutronów pokazano, że: 1) rozważane reakcje mogą być źródłami wiązek bardzo silnie spolaryzowanych neutronów, 2) polaryzacja ma dla rozważanego typu potencjału V charakterystyczny rozkład kątowy: jest ona czułym analizatorem potencjału V_n i pozwoli uzyskać szczególnie dokładne informacje odnośnie członu sprzężenia spin-orbita.

Odnośnie rozkładów katowych. Rozkłady kątowe neutronów w reakcji (p, n) zbadano w pracy głównie dla kontroli przyjętego mechanizmu reakcji przez konfrontację z przyszłym doświadczeniem. Pokazano, że w odróżnieniu od polaryzacji rozkłady katowe są względnie słabo czułe na wybór potencjału V_n , natomast wiadomo, że są czułym wskaźnikiem mechanizmu reakcji (w pewnych wypadkach również polaryzacja może być czułym wskaźnikiem mechanizmu reakcji). Pokazano, jak dalece efekt coulombowski spłaszcza krzywe rozkładów kątowych oraz jak wpływają na te rozkłady potencjały V_p i V_n . Pokazano, że niesłuszne jest wyciąganie wniosków odnośnie udziału mechanizmu oddziaływania wprost w reakcji, z porównywania z doświadczeniem dotychczas stosowanej bornowskiej teorii zaniedbujacej wszystkie rozproszeniowe efekty. W zakończeniu wskazano szereg dalszych ważnych do zbadania kwestii i wysunięto program dalszych badań.

Promotorem pracy P. Zielińskiego pt. Wpływ pola mezonowego na przejście $J = 0 \rightarrow 0 t a k$, w izomerii jądrowej, był prof. W. Rubinowicz, referentami — prof. J. Rayski i doc. J. Dąbrowski.

Streszczenie pracy:

W przypadku przejścia $J = 0 \rightarrow 0$ w izomerii jądrowej reguły wyboru wzbraniają emisji jednokwantowej i do głosu dochodzą — na co zwrócił uwagę Sachs — procesy drugiego rzędu, w szczególności emisja dwukwantowa.

Celem pracy było rozpatrzenie wpływu pola mezonowego na przejście $J = 0 \rightarrow 0$ ze zmianą parzystości. Chodzi o proces alternatywny w stosunku do rozważanego przez Sachsa: nukleon jądra emituje wirtualny mezon π^0 , który poprzez tworzenie się i anihilację pary proton-antyproton rozpada się na dwa fotony. Wyliczenia przeprowadzone są rachunkiem zaburzeń, metodą Feynmana. Pole mezonowe PS(PS). Wynik wskazuje na to, że rozważany proces jest o kilka rzędu mniej prawdopdobny od procesu alternatywnego. Porównanie prawdopodobieństw jest jednak niepewne. Jeżeli izomer typu $J = 0 \rightarrow 0$ tak zostanie znaleziony, to doświadczalnie można by rozstrzygnąć, czy istnieje odstępstwo od procesu rozważanego przez S a c h s a przez zbadanie korelacji kątowych i rozkładu energetycznego fotonów. E

Z

N

J

E

Engelbert Broda — Energia jądrowa, groza czy nadzieja? tłum. Maria Nowakowska-Hurwic, Wiedza Powszechna, Warszawa 1956, str. 256, nakł. 5000 egz., cena zł 15.—

Czytelnik polski miał możność zaznajomienia się z zagadnieniami pokojowego i wojennego zastosowania energii jądrowej dzięki licznym artykułom w prasie i książkom, które na ten temat ukazały się w ciągu kilku ostatnich lat. Niemniej jednak książka Brody zawiera wiele takich wiadomości, z którymi zetknie się on po raz pierwszy. Są to wiadomości nader pożyteczne i ciekawe, i dlatego dobrze się stało, że pracę dra Brody przetłumaczono.

Rekojmia poziomu ksiażki jest samo nazwisko autora – znanego badacza promieniotwórczości, jednego z pionierów badań w tej dziedzinie. Treść książki odpowiada współczesnemu stanowi naszej wiedzy w tej dziedzinie. Oczywiście, nie mogły zostać uwzględnione najnowsze osiągnięcia, gdyż dr Broda wydał swą Energię jądrową przed mniej więcej dwoma laty, a wydanie polskie ukazało się w roku ubiegłym. Niemniej jednak znaleźć można w tej książce dużo materiału. Co więcej, fakty i zjawiska zostały opisane w ich rozwoju historycznym, co znakomicie ułatwia ich zrozumienie i zapamiętanie. W treści są podane liczne, dobrze dobrane cytaty z klasyków atomistyki. Jest to rzecz na ogół nie spotykana w innych książkach poświęconych nie tylko fizyce jądrowej, ale i naukom przyrodniczym. A szkoda. Wiedza i technika są bowiem owocem działalności człowieka, z nim są nierozerwalnie związane i przez okruchy materii, przez ogromne energie wyzwalane i giganty współczesnego przemysłu jadrowego winny wyraźnie przezierać twarze twórców. Dlatego też zawsze aktualny pozostanie pierwszy rozdział książki, zatytułowany: Nieco wiadomości z dziejów teorii atomowej, dając ciekawe naświetlenie rozwoju naszej wiedzy o materii. Następne rozdziały:

Atomy w ruchu, Wewnętrzna budowa atomu i Jądra atomowe wprowadzają nas głębiej w ten mikroświat, którego siły mają tak wielki wpływ na kształtujące się obecnie dzieje ludzkości. Szkoda jednak, że autor tak mało uwagi poświęcił metodom doświadczalnym, opisując je jedynie w skrócie i nie ożywiając tekstu tak zawsze użytecznymi ilustracjami.

W rozdziałach Energia jądra atomowego i Rozszczepienie jądrowe uranu dr Broda omawia zasadnicze fakty, związane z praktycznym wyzwalaniem energii jądrowej. Wydaje mi się, że autor za dużo uwagi poświęcił stronie teoretycznej zagadnienia, sprawie współczynnika uwielokrotnienia itp., a za mało nacisku położył na stronę praktyczną. Można odczuć brak poglądowych ilustracji. Brak ten szczególnie daje się we znaki w rozdziale następnym, zatytułowanym Budowa reaktorów jądrowych. Można od razu poznać, że rozdział ten został napisany przez człowieka ściśle związanego z pracownią, który mało stykał się z techniką i przemysłem. Wielka szkoda, iż dr Broda tak pobieżnie omówił rozmaite typy reaktorów i perspektywy ich rozwoju. Autor mógł przecież wykorzystać liczne materiały, które ukazują się od kilku lat w prasie fachowej i pod postacią książkową. Reaktory jednorodne i powielające (w tekście "rozmnażające") zostały W paragrafie, poświęconym silnikom jądrowym, oprócz uwag natury ogólnej nie znajdziemy żadnych bliższych informacji. A przecież pierwsza jądrowa łódź podwodna *Nautilus* ma poza sobą 100 tysięcy kilometrów drogi, z czego prawie połowę pod wodą. Budowa lodołamacza jądrowego *Lenin* w stoczni leningradzkiej szybko postępuje naprzód. Dr Broda podaje wprawdzie kilka jeszcze informacji o komunikacji jądrowej w krótkim paragrafie *Pojazdy o napędzie jądrowym*?, wchodzącym w skład następnego rozdziału książki pt. *Aspekt gospodarczy energii jądrowej*. Informacje te jednak nie dotyczą istoty zagadnienia. Nie ma tu mowy o zaawansowanych pracach amerykańskich nad napędem jądrowym samolotów (badania w Oak Ridge i w laboratorium General Electric w Schenectady) ani o napędzie jądrowym rakiet (liczne publikacje, m. in. dra H. S. Tsiena, dra L. Shepherda i in.). A trzeba pamiętać, że napęd jądrowy to zagadnienie, którym interesują się nie tylko wielkie mocarstwa. Nawet polski plan prespektywiczny rozwoju pokojowych zastosowań energii jądrowej przewiduje budowę statku o napędzie jądrowym do roku 1970.

Nie jestem ekonomistą, ale odnoszę wrażenie, że aspekty gospodarcze energii jądrowej nie zostały naświetlone przez autora wszchstronnie. Zagadnienia, związane z broniami jądrowymi, omówione w rozdziale *Bomba jądrowa*, są natomiast, moim zdaniem, omówione dostatecznie wyczerpująco.

Bardzo interesujący jest rozdział Zastosowania pierwiastków promieniotwórczych w nauce i technice. Czytelnik może się z niego dowiedzieć o metodzie znaczonych atomów i o wykorzystaniu jej do badania budowy organizmów żywych i przemiany materii, w nich zachodzącej. Dr Broda podaje też wiele ciekawych przykładów zastosowania wspomnianej metody w górnictwie i przemyśle. Osobny paragraf zaznajamia czytelnika ze sprawami bliskimi każdemu — z wykorzystaniem energii jądrowej w diagnostyce i w lecznictwie.

Ostatni wreszcie rozdział książki porusza zagadnienia idealizmu i materializmu. Autor zdecydowanie wypowiada się za materializmem, popierając swe poglądy wypowiedziami znanych uczonych.

Książkę uzupełniają trzy bardzo cenne dodatki, których z zasady brak w wydawnictwach tego typu. Pierwszy to słowniczek nazwisk, spotykanych w tekście, który zaopatrzono w krótkie wyjaśnienia biograficzne. Dowiemy z niego, kto to był Boltzmann, Amaldi i Kapica, i wielu innych uczonych, z których cały szereg żyje jeszcze i pracuje owocnie. Tablica chronologiczna podaje najważniejsze daty "atomowe". Wreszcie skorowidz rzeczowy ułatwia odnajdywanie rozmaitych zagadnień w 250-stronicowym tekście.

Tłumaczenie książki jest bardzo dobre. Maria Nowakowska-Hurwic znana jest zresztą ze swych przekładów i dobrze się stało, że to ona właśnie przetłumaczyła książkę dra Brody, tym bardziej że sama swego czasu pracowała nad zagadnieniami, związanymi z rozpadem promieniotwórczym.

Do swych uwag natury ogólnej dorzucę jeszcze garść spostrzeżeń szczegółowych. Nie mogę zgodzić się z poglądem autora, wypowiedzianym na str. 70/1 odnośnie różnic we właściwościach chemicznych między izotopami tego samego pierwiastka. Otóż różnice te nie są głównie wynikiem różnicy prędkości atomów poszczególnych izotopów. Spowodowane one są przede wszystkim odmienną budową poziomów energetycznych i związanymi z nią różnicami energii wzbudzenia.
Moc poszczególnych pomp w instalacji do rozdzielania izotopów uranu metodą efuzji (nie dyfuzji) gazu (str. 74) nie musi być duża. Różnica ciśnień po obu stronach przegrody porowatej wynosi przecież zaledwie 0,9-atm. Ponieważ jednak cała instalacja zawiera wiele tysięcy członów, więc łączna moc pomp jest tak ogromna. Co więcej, płynący gaz nie natrafia na swej drodze w istocie na 5 tysięcy przegród, ale na znacznie, znacznie więcej. Jest on bowiem wielokrotnie przepompowywany przez ten sam stopień kaskady ze względu na bardzo mały współczynnik rozdzielczy pojedynczej przegrody.

Synchrofazotron na 10 GeV (str. 76) mylnie został nazwany fazotronem. W fazotronie zmienia się jedynie częstość pola elektrycznego, w synchrofazotronie — i częstość pola elektrycznego, i częstość pola magnetycznego.

W czasie rozszczepienia całkowitego 1 kilograma uranu otrzyma się nie 400 mln., lecz 1,3·10¹⁰ kcal. 1 kilogram uranu jest zatem równoważny 1880 tonom dobrego węgla, a nie 50 tonom, jak wynika z tekstu (str. 87).

Wbrew twierdzeniu dra Brody (str. 100) reakcja termojądrowa nie mogła zajść w czasie doświadczeń, opisanych swego czasu w referacie Kurczatowa. Tak też uważają uczeni radzieccy. Temperatura, panująca w rurce do wyładowań, a wynosząca tylko około 1 miliona stopni, jest bowiem za niska, żeby reakcja termojądrowa mogła zachodzić z dostrzegalną wydajnością. Wyzwalane w czasie doświadczeń neutrony emitowane były na skutek innych procesów.

Termin rozszczepienie jądrowe zastąpiłbym chętnie wyrażeniem rozszczepienie jąder (str. 101 i nast.). Termin szybkie neutrony (str. 114 i nast.) nie jest poprawny — w języku polskim przyjęto termin neutrony prędkie. Nieco dziwnie dla ucha brzmi wyrażenie reaktor zbudowany sieciowo (str. 115 i nast.) — wydaje się, że bardziej naturalnie brzmi termin reaktor pod postacią siatki trójwymiarowej. Na tej samej stronie 115 zakradł się chyba błąd drukarski, na skutek którego powstało dziwne zdanie: Urządzenia służące do kontrolowania wywoływania reakcji łańcuchowych z pomocą neutronów nazywamy ogólnie reaktorami. Podobna uwaga odnosi się do zdania (str. 117): Wodoru można użyć jako moderatora tylko wtedy, gdy jednocześnie wzbogacamy uran w łatwo rozszczepialny izotop U 235... (wzbogacanie odbywa się nie jednocześnie, lecz przed budową reaktora, w specjalnej instalacji).

Specjalnie czysty grafit wytwarza się obecnie nie tylko z koksu naftowego (str. 117). Zamiast słowa regulatory (str. 126) lepiej stosować termin powszechnie używany pręty sterujące. Neptun został odkryty przez McMillana a nie przez Seaborga (str. 135). Neutrony prędkie w reaktorze prędkim (str. 139) są również bardzo słabo pochłaniane przez materiały konstrukcyjne. Takie pochłanianie pasożytnicze zwiększa się w miarę zmniejszania prędkości neutronów. Elektrownia w Dounreay nie "ma być wybudowana" (str. 140), lecz jest intensywnie budowana. Jej uruchomienie przewidziane jest już w roku 1959. Moc reaktora Nautilusa, oceniania przez dra Brodę na 18 MW (str. 143), jest moim zdaniem zbyt niska. Bliższą prawdy wydaje się liczba 50 MW. Wreszcie autor zbyt lakonicznie stwierdził, że dr Slotin w czasie pamiętnego wypadku w Los Alamos nic nie czuł (str. 173). Trudno nawet sobie wyobrazić, żeby nagły rozwój reakcji łańcuchowej w bryle plutonowej, którą rozpaloną dr Slotin rozdzielił własnymi rękami, mógł nie spowodować żadnych wrażeń u tragicznej ofiary katastrofy. Wystarczy przerzucić znany raport lekarski dra Hempelmanna i towarzyszy (Ann. Int. Med., 1952).

Wszystkie te uwagi w niczym oczywiście nie umniejszają zasługi dra Brody, który napisał książkę potrzebną, interesującą i godną polecenia.

O. Wołczek

TREŚĆ

L. Rosenfeld — Rozkład ładunku w jądrach	407
A. M. Lane — Reakcje jądrowe	417
Z. Szymański — Kolektywne ruchy nukleonów w jądrze atomowym	437
A. Tramer — Widma oscylacyjne i stałe siłowe drobin wie-	455
loatomowych	457
Oznaczenia i jednostki (tłum. W. Majewski)	485
NOWOŚCI NAUKOWE	
Stwierdzenie istnienia cząstki \varSigma° (P. Zieliński)	499
ZE ZJAZDÓW I KONFERENCJI	
VII konferencja fizyki jądrowej w Rochester (J. Werle)	503
KRONIKA	505
RECENZJE	
E. Broda — Energia jądrowa, groza czy nadzieja? (O. Wołczek)	511

ZARZĄD

Przewodniczący Prof. dr LEOPOLD INFELD, czł. rzecz. PAN Wiceprzewodniczący Prof. dr ANDRZEJ SOŁTAN, czł koresp. PAN

> Sekretarz Doc. JANUSZ DABROWSKI

Skarbnik Prof. dr JERZY PNIEWSKI

Członek Zarządu Prof. dr LEONARD SOSNOWSKI

PRZEWODNICZĄCY ODDZIAŁÓW TOWARZYSTWA

Gdańsk	- Prof. dr WŁODZIMIERZ MOŚCICKI
Gliwice	- Prof. mgr JÓZEF SZPILECKI
Kraków	- Doc. dr JERZY JANIK
Lublin	- Doc. dr ARMIN TESKE
Łódz	- Prof. dr FELIKS J. WIŚNIEWSKI
Poznań	- Prof. dr MAREK KWIEK
Szczecin	- Prof. mgr inż. ZBIGNIEW OGRZEWALSKI
Toruń	- Prof. dr ALEKSANDER JABŁOŃSKI
Warszawa	- Prof. kand. n. ZDZISŁAW WILHELMI
Wrocław	- Prof. kand. n. JAN ŁOPUSZAŃSKI

ADRES ZARZĄDU: WARSZAWA, ul. HOŻA 69