· решение экологических проблем мясоперерабатывающих предприятий;
· создание системы переподготовки кадров отрасли.

Реализация комплексных мер данного направления позволит отрасли сохранить набранные темпы роста, повысить эффективность производства, ускорить развитие инфраструктуры мясного рынка и перерабатывающей промышленности, обеспечить население качественной и доступной по цене продукцией, а также выполнить поставленные задачи по достижению продовольственной безопасности Республики Беларусь.

МЕТОД РАСЧЕТА ХАРАКТЕРИСТИК ОГРАНИЧЕННЫХ АТОМОВ

В.В. Полегенький, *к.ф.-м.н., доцент*

Эффекты ограниченности атома рассматриваются в литературе достаточно давно, однако интерес к изучению таких атомных систем не убывает в связи, например, с проблемами горячей плазмы. Обычно модели, описывающие такие системы, базируются на решении (в основном численными методами) уравнения Шредингера с некоторым потенциалом при соответствующем выборе граничных условий. В настоящей работе рассмотрен нерелятивистский водородоподобный атом, заключенный в сферу радиуса R_0 (ограниченный водородоподобный атом). Для расчета его характеристик разработан метод, основанный на использовании радиальных волновых функций свободного водородоподобного атома, зависящих, однако, не от заряда ядра Z, а от некоторого эффективного заряда $Z_{эфф} = Z^*$ и нормированных на единицу в рассматриваемой области.

Состояние ограниченного нерелятивистского водородоподобного атома описывается волновой функцией (ВФ)

$$\psi(\vec{r}) = R^*_{nl}(r)Y_{lm}(\theta,\varphi), \tag{1}$$

где $Y_{lm}(\theta,\varphi)$ — сферическая функция, $R^*_{nl}(r)$ — радиальная ВФ, удовлетворяющая в зависимости от конкретной интерпретации модели ограниченного атома граничному условию:

$$R^*_{nl}(r_0) = 0 \tag{2}$$

или условию

$$\left.\frac{dR^*_{nl}}{dr}\frac{dR^*_{nl}}{dr}\right|_{r=R_0} = 0 \tag{3}$$

В качестве радиальных ВФ $R^*_{nl}(r)$ мы используем ВФ нерелятивистского водородоподобного атома, зависящие, однако, не от заряда ядра свободного атома Z, а от некоторого параметра Z^*_{nl}, который будем называть эффективным зарядом, и нормированные на единицу на заданном отрезке $[0;R_0]$. Таким образом, в атомной системе единиц для $R^*_{nl}(r)$ имеем:

$$R^*_{nl}(r) = N^*_{nl}(b^*r)^l \exp(-b^*r/2)\Phi(-n+l+1;2b+2;b^*r), \tag{4}$$

где N^*_{nl} — нормировочный множитель, $b^* = 2Z^*_{nl}/n$, $\Phi(a;c;x)$ — вырожденная гипергеометрическая функция.

Значения Z^*_{nl} определяются следующим образом. Пусть E_n — энергия свободного, а E^*_{nl} - энергия ограниченного атома с радиусом R_0. Представив E^*_{nl} как

$$E^*_{nl} = E_n + \Delta E_{nl}$$

и введя в рассмотрение Z^*_{nl} такое, что

$$E^*_{nl} = -Z^*_{nl}/2n^2,$$

находим

$$Z^*_{nl} = \sqrt{-2n^2(E_n + \Delta E_{nl})}. \tag{5}$$

В случае больших R_0 (малых сжатий) в были получены аналитические выражения для поправок ΔE_{nl} к энергии водородоподобных атомов для граничных условий (2) и (3), из которых следует, что в ограниченном атоме вырождение по орбитальному квантовому числу l снимается. Используя эти выражения, описанная процедура ввода эффективного заряда позволяет легко учесть при расчетах значение энергии ограниченного атома и применять обычные водородоподобные ВФ $R_{nl}(r)$, если в последних осуществить замену:

$$Z \to Z^*_{nl} \ , \tag{6}$$

что избавляет от необходимости численного интегрирования уравнения Шредингера с соответствующими потенциалом и граничными условиями. Нормировочный множитель N^*_{nl}, однако, не совпадает по форме с водородоподобным и в общем случае не может быть определен из него преобразованием (6), поэтому он находится непосредственно из требования нормировки:

$$\int_0^{R_0} [R^*_{nl}(r)]^2 r^2 dr = 1 . \tag{7}$$

Очевидно, что при $R_0 \to \infty$ $Z^*_{nl} \to Z$ и ВФ (4) совпадают с ВФ свободного атома.

Описанный выше алгоритм использовался для определения значений Z^*_{nl} ряда состояний $1s..4f$ водородоподобных ограниченных атомов с $Z = 1..10$ как для граничного условия (2), так и для условия (3). В обоих случаях были проведены численные исследования по определению таких $R^H_0(n,l)$, начиная с которых предлагаемый алгоритм дает устойчивые результаты, проявляющиеся в требовании действительных значений получаемых Z^*_{nl}, монотонности функции $Z^*_{nl} = Z^*_{nl}(R_0)$ и, как показали вычисления нормировочного множителя, в требовании $\delta n = \left|1 - N^*_{nl} / N\right| < 1$. Обобщая результаты этих исследований, следует отметить, что для ns - состояний при любом граничном условии с достаточной точностью выбор $R^H_0(n,l)$ определяется соотношением:

$$R^H_0(n, l = 0) \approx 2n^2 / Z . \tag{8}$$

При условии (2) значения $R^H_0(n,l)$ уменьшаются с ростом l, причем

$$R^H_0(n, l = n-1) \approx R^H_0(n, l = 0)/2 . \tag{9}$$

Самое большое значение $R^H_0(n,l)$ для s — состояний в значительной степени можно объяснить тем, что зависимость функций $R_{nl}(r)$ носит достаточно сильный осциллирующий характер. В случае условия (3) зависимость данных величин от l в первом приближении отсутствует. Отметим, что значения $R^H_0(n,l)$ при использовании любого граничного условия согласуются с результатами расчетов ионизационных радиусов.

Как и следовало ожидать, с ростом R_0 значение $Z^*_{nl} \to Z$, поэтому имеет смысл определить $R^k_0(n,l)$ такие, что при $R_0 > R^k_0(n,l)$ эффектом конечных размеров атома можно пренебречь. Анализ полученных данных показывает, что при данном n значения $R^k_0(n,l)$ практически не зависят от квантового числа l. Однако значения $R^k_0(n-1,l)$ фактически совпадают с $R^H_0(n,l)$. Поэтому, например, для ns -состояний на основании (8) имеем

$$R^k_0(n, l = 0) \approx 2(n+1)^2 / Z \tag{10}$$

и, как сказано выше, это значение определяет порядок $R^k_0(n,l)$ для любого l при заданном n и рассматриваемом граничном условии.

Анализ расчетных данных показал, имеет место обратно пропорциональная зависимость величин $R^H_0(n,l)$, $R^k_0(n,l)$ от Z, что, в первую очередь, объясняется такой же зависимостью радиусов боровских орбит свободного атома. Кроме того, полученные значения величин Z^*_{nl}/Z практически совпадают при разных Z в точках R_0/Z, что позволяет легко определить Z^*_{nl} при любом Z и R_0 с помощью выражения

$$Z^*_{nl} = Z \cdot f_{nl}(R_0 / Z) , \tag{11}$$

если для данного состояния известна зависимость $f_{nl}(R_0)$.

Для определения вида функций $f_{nl}(R_0)$ при $Z = 1$ использовалась аппроксимация данных Z^*_{nl}/Z методом наименьших квадратов функциями вида

$$f_{nl}(R_0) = 1 \mp a_0 \exp(a_1 R_0 + a_2 R_0^{\,2}), \tag{12}$$

где верхний знак соответствует условию (2), а нижний — условию (3). Вид функций (12) из очевидных требований: $Z^*_{nl}/Z \to 1$ при $R_0 \to \infty$. Отметим также, что аппроксимация многочленами дает громоздкие формулы, которые менее наглядны, чем предложенные выше.

Найденные значения $Z^*_{nl} = Z^*_{nl}(R_0)$ совместно с ВФ (1), (4) были использованы для вычисления квантовомеханических средних $<r^p>$, $p = -2,-1,0,1,2$, определенных по аналогии со свободным атомом как

$$<r^p> = \int_0^{R_0} [R^*_{nl}(r)]^2 r^{p+2} dr,$$

как функций радиуса R_0, включая, первоначально, и определение нормировочного множителя N^*_{nl} из (7) и связанной с ним величины δn. Анализ полученных данных для водородоподобного ограниченного атома с $Z = 1 \div 10$ для состояний $1s \div 4f$ показал следующее.

Для любого граничного условия интервалы значений $[R_0^H(n,l); R_0^k(n,l)]$ для данного состояния и данного значения Z совпадают с определенными по формулам (8)–(12). Однако величины $<r^p>$ (включая $p = 0$) при R_0 близких к $R_0^H(n,l)$ могут изменяться немонотонно, а их значения отличаются от значений $<r^p>_H$ для свободного водородоподобного атома в несколько раз. Причем при $R_0 \to R_0^k(n,l)$ величина δn стремится к нулю, а величина $<r^p>$ стремится к $<r^p>_H$ в целом медленнее, чем величина Z^*_{nl} к Z.

Отметим также, что в большинстве случаев $<r^2>$, $<r>$ стремятся к своим предельным значениям снизу, а величины $<r^{-2}>$, $<r^{-1}>$ - сверху, при этом $\delta n \to 0-$ для условия (2), тогда как $\delta n \to 0+$ для условия (3).

Отмеченное согласуется с другими результатами и объясняется тем, что при уменьшении R_0 происходит сдвиг радиальных орбиталей к ядру и, следовательно, значения $\left(R^*_{nl}(r)\right)^2$ в области малых r увеличивается, что приводит к увеличению значений $<r^{-2}>$, $<r^{-1}>$ и уменьшению значений $<r^2>$, $<r>$. Отметим, что, исключая $4s$-состояние, для ns-состояний имеется хорошее согласование значений $<r^p>$ с соответствующими значениями $<r^p>_H$, тогда как прямой численный расчет функций, используемых для вычисления средних в, дает в этом случае значительные расхождения уже начиная с $2s$-состояний. Однако данные для других состояний, приведенные в указанной работе, достаточно хорошо согласуются с нашими результатами.

Таким образом, предложенный метод позволяет без больших затрат машинного времени достаточно просто, быстро и вполне надежно оценить значения различных характеристик для различных состояний ограниченноговодородоподобного атома с произвольным зарядом ядра Z.

ЖИЗНЕСТОЙКОСТЬ МОЛОДИ СЕМЕЙСТВ ESOSIDAE, SILURIDAE В ЗАВИСИМОСТИ ОТ СПОСОБА ИХ ПОДРАЩИВАНИЯ

М.М. Радько, *к.э.н., доцент,* **П.Н. Котуранов,** *к.б.н., профессор,* **М.М. Усов,** *аспирант*

Государственной программой развития рыбохозяйственной деятельности Беларуси на 2011–2015 годы предусмотрено увеличение объемов производства товарной рыбы до 22,7 тыс. тонн. Такого увеличения планируется достигнуть, в том числе и за счет совер-