



Универзитет у Београду
ФИЗИЧКИ ФАКУЛТЕТ

Универзитет у Београду – Физички факултет

Основи физике атомских сударних процеса

Горан Б. Попарић

Београд, 2019.

Основи физике атомских сударних процеса

Аутор:
Проф. Др Горан Б. Попарић

Универзитет у Београду,
Физички факултет
Студентски трг 12-16
11000 Београд

<http://www.ff.bg.ac.rs>

Рецензенти:

Проф. др Драгољуб Белић, Физички факултет, Универзитет у Београду,
Др Братислав Маринковић, Научни саветник, Институт за Физику, Универзитет у
Београду.

Рецензија је усвојена на седници VI Наставно-научног већа Физичког факултета,
Универзитета у Београду одржаној 27.3.2019. године и донета је одлука да се рукопис
прихвати као уџбеник за студенте мастер студија физике.

ISBN: 978-86-84539-24-5

Предговор аутора

Уџбеник Основи физике атомских сударних процеса намењен је студентима мастер студија Физичког факултета, Универзитета у Београду. Садржај предмета припада ужој научној области Физика атома и молекула. Поред велике важности коју има само разумевање физичких закона који се испољавају у овој области, атомски сударни процеси, као елементарни, су такође веома битни за истраживања и разумевања физичких феномена у разним другим областима физике, поготово у физици плазме, физици горњих слојева атмосфере, физици ласера, биофизици, и другим. Достигнута знања из ове области физике своју примену увелико налазе у развоју нових технологија у електроници, у енергетици, у медицини, у екологији и многим другим областима.

Уџбеник је делом настао на основу предавања које је аутор држао на мастер студијама у протеклом периоду. Аутор се нада да ће уџбеник помоћи студентима у савладавању основних знања из области физике атомских судара, и да ће их заинтересовати за даљи научно-истраживачки рад и у овој области.

У Београду, фебруар 2019.

Горан Попарић

Садржај

1. УВОД	1
2. КЛАСИФИКАЦИЈА АТОМСКИХ СУДАРНИХ ПРОЦЕСА	5
2.1. Подела атомских честица по врстама	5
2.2. Појам атомских судара	7
2.3. Класификација судара електрона са атомима и молекулима	11
2.3.1. Судари електрона са атомима	11
2.3.2. Судари електрона са молекулима	13
2.3.3. Судари електрона са кластерима	15
2.3.4. Судари електрона са макромолекулима	17
2.3.5. Судари електрона са полимерима	18
2.4. Резонанти процеси у сударима електрона са атомима и молекулима	20
2.4.1. Класификација резонанци	21
2.4.2. Фешбах резонанце	22
2.4.3. Резонанце облика	25
2.4.4. Резонанце облика са побуђеним омотачем	28
3. ЕФЕКТИВНИ ПРЕСЕЦИ ЗА СУДАРНЕ ПРОЦЕСЕ	29
3.1. Физичке величине које карактеришу сударне процесе	29
3.2. Ефективни пресек за судар	36
3.3. Диференцијални ефективни пресеци за судар	40
3.4. Парцијални и тотални ефективни пресеци за судар	43
3.5. Коефицијенти брзине сударних процеса	45

4. ЕКСПЕРИМЕНТАЛНЕ МЕТОДЕ АТОМСКЕ СУДАРНЕ СПЕКТРОМЕТРИЈЕ	49
4.1. Дисперзиони елементи за селекцију атомских честица по маси и енергијама	50
4.1.1. Равно електростатичко огледало	52
4.1.2. Цилиндрични кондензатор Хјуза-Ројанског	54
4.1.3. Сферни кондензатор	55
4.1.4. Моноенергизација попречним хомогеним магнетним пољем	57
4.1.5. Винов филтер	60
4.1.6. Трохоидни електронски монохроматор	62
4.2. Електронски спектрометри	65
4.3. Врсте спектра и модови рада електроских спектрометара	69
5. ЕЛЕМЕНТИ ТЕОРИЈЕ АТОМСКИХ СУДАРНИХ ПРОЦЕСА	72
5.1. Класични модели теорије атомских судара	72
5.1.1. Класични опис еластичног расејања	
5.1.1.1. Аналитичко рачунање трајекторија	74
5.1.1.2. Нумеричко рачунање трајекторија	77
5.1.2. Класични модели процеса ексцитације и јонизације	78
5.2. Семи-класични модели теорије атомских судара	81
5.3. Квантни модели теорије атомских сударна	86
5.3.1. Диференцијални пресек и амплитуда расејања	87
5.3.2. Раздвајање променљивих у Шредингеровој једначини	91

5.3.3. Повезивање диференцијалних пресека из референтних система центра масе и лабораторијског	93
5.3.4. Борнова апроксимација	96
5.3.5. Метод парцијалних таласа	101
5.3.5.1. Еластично расејање	105
5.3.5.2. Нееластично расејање	108
5.3.6. Резонантно расејање	110
5.3.6.1. Облици ефективних пресека у случају резонантног расејања	113
5.3.6.2. Облици диференцијалних пресека у случају резонантног расејања	117
Литература	123

1. УВОД

Проучавање процеса судара електрона са атомским честицама, као и судара атомских честица међусобно, је од великог значаја из више разлога. На првом месту је свакако научни аспект проучавања ових процеса, где се на основу експерименталног изучавања добијају информације неопходне за упознавање структуре проучаваних атомских честица, као и физичке природе интеракција која се испољава приликом судара. Теоријско проучавање, базирано на развоју теоријских модела, заснованих на апроксимативном класичном или егзактном квантно-механичком приступу, даје даљи допринос развоју конзистентне теорије интеракција електрона са атомским честицама, као и атомских честица међусобно. Развијени теоријски модели се верификују кроз упоређивање и слагање резултата добијених из прорачуна базираних на њиховој примени са експерименталним резултатима. Ово затим омогућава њихову примену и израчунавање физичких величина које карактеришу сударе електрона са атомским честицама, као и сударе два или више атомских честица, када је директно експериментално мерење ових физичких величина тешко изводљиво.

Други разлог проучавања судара електрона са атомским честицама, и судара атомских честица међусобно, је потреба за дубљим познавањем

макроскопских физичких система који се састоје од атомских честица и у којима ови судари представљају елементарне процесе. Процеси судара електрона са атомима, молекулима, полимерима и макромолекулима, као и кластерима, су елементарни процеси у многим макроскопским физичким појавама, и то су процеси који су стално присутни и који се спонтано одигравају у природи, као на пример у плазми, у Земљиној атмосфери, у атмосферама планета Сунчевог система и њихових природних сателита, као секундарни процеси приликом апсорпције Сунчевог зрачења и другим. Познавање атомских сударних процеса је неопходно за моделирање свих макроскопских физичких појава, у којима ови процеси учествују као елементарни.

Макроскопско моделирање физичких и хемијских процеса у горњим слојевима атмосфере Земље може бити адекватно засновано искључиво на познавању елементарних процеса судара електрона са молекулима као конституентима атмосфере, али и на познавању судара молекула и молекулских јона међусобно. Овакво моделирање се заснива на израчунавању релевантних макроскопских физичких величина које се могу добити статистички усредњавањем по ансамблима електрона и молекула конституената. За то је неопходно познавати физичке величине које карактеришу појединачне представнике ових ансамбала, а оне првенствено зависе од елементарних процеса судара који се дешавају између ових атомских честица. Успешно моделирање атмосфере омогућава предвиђање динамике макроскопских процеса који се у њој дешавају, што је од нарочитог интереса, како у метеорологији, тако и у физици екологије. Процеси у атмосферама планета Сунчевог система и њихових природних сателита такође су засновани на елементарним процесима судара електрона са атомима и молекулима конституентима ових атмосфера, у присуству постојећих електричних и магнетних поља. На тај начин, проучавање физике атомских судара омогућава и

моделирања макроскопског понашања одговарајућих процеса у атмосферама ових планета (и њихових природних сателита) и од великог је значаја и за астрофизику.

Разни технолошки поступци у индустрији засновани су на елементарним процесима судара електрона са атомима и молекулима. Поменућемо технологије засноване на пражњењу у плазми, као што су на пример третирање и модификација површина материјала у плазми, наношење танких слојева других материјала применом плазмених пражњења (плазма депозиција), а такође и плазма гравирање и заваривање. Такође ћемо поменути и пројектовање и производњу дифузионих гасних прекидача струја и пражњења великих снага. Израда гасних ласера великих снага је заснована на познавању процеса судара електрона са атомима и молекулима радног гаса тих ласера, а такође и на познавању међусобних судара атома и молекула.

Од значаја су и процеси судара електрона са полимерима, нарочито при модификацији полимерних материјала, чије се физичке и хемијске особине модификују приликом и након третирања у плазми. Интеракција електрона са полимерима доводи до прекида одређених веза у полимерним ланцима, што се карактерише као процес њихове функционализације. У овим процесима такође учествују и јони створени у плазми, тако да је од значаја и проучавање судара високо-енергијских јона са полимерним материјалима. Након третирања полимерних материјала у плазми, омогућени су и други хемијски процеси, а то су углавном процеси њихове накнадне оксидације. Ово су управо главни механизми који доводе до промене физичких и хемијских особинама полимерних материјала.

Поред судара електрона са полимерима, од интереса је и њихова интеракција са макромолекулима у које можемо убројати ДНК биолошких ћелија. Од нарочитог интереса је проучавање прекидања молекулских ланаца ових макромолекула контролисаним “бомбардовањем”

електронима, што постаје актуелна област проучавања у оквиру биофизике. Природно UV зрачење, које је присутно у спектру Сунчевог зрачења, утиче на прекидања ових веза. Међутим, сам механизам прекидања веза је на првом месту повезан са трансфером енергије коју носе високо-енергијски фотони (Сунчевог зрачења) на електроне, који се налазе у ткиву. Након извршеног трансфера енергије, електрони имају велике кинетичке енергије, и приликом свог кретања кроз биолошко ткиво сударају се са макромолекулама ДНК, што и доводи до прекида веза у њиховим молекулским ланцима.

Свакако треба поменути и процесе судара електрона и јона са кластерима (групама молекула, међусобно повезаних Ван дер Валс-овим (Van der Waals) силама), који су због своје сложености најмање истражени. Ова врста судара се у последње време интензивно експериментално истражује у лабораторијским условима. Овакви процеси су веома бројни у атмосфери Земље, где се првенствено дешавају судари електрона са кластерима аеросола. Кластери аеросола су најчешће природно формиранни, али је често њихов састав модификован услед присуства индустријских загађења. Такође у Земљину атмосферу се емитују, и налазе се присутни, и разни вештачки формиранни кластери, што се дешава као пропратни, нежељени ефекат приликом разних индустријских процеса. Проучавање судара електрона са овом специфичном врстом кластера је од нарочитог интереса, јер су ови сударни процеси доминантни у поступцима филтрације (засноване на електричном пражњењу) ових кластера и њихове елиминације из емитованих гасова, што се проучава у оквиру физике екологије.

2. КЛАСИФИКАЦИЈА АТОМСКИХ СУДАРНИХ ПРОЦЕСА

2.1. Подела атомских честица по врстама

Под појмом **атомска честица**, поред **електрона**, подразумевају се и појединачни **атоми**, **молекули**, **позитивни и негативни јони**, **макромолекули** у које спадају и **полимери**, као и **кластери**. Најпростије атомске честице, које имају унутрашњу структуру¹, су појединачни **атоми**, у чији састав улази њихово атомско језгро и један или више електрона. Унутрашња структура атома је одређена интеракцијом електрона са атомским језгром и међусобном интеракцијом електрона и зависи од врсте атома. Изоловани атоми се у природи ретко налазе, чак и у случају гасова, јер се обично везују у молекуле или су део кристалне структуре као у случају чврстих тела. Појединачни атоми стабилно самостално егзистирају само у случају инертних гасова. Из тих разлога највише експерименталних истраживања која се баве интеракцијом електрона са атомима је и спроведено са инертним гасовима.

Сложеније атомске честице су **молекули**, који се састоје од два или више атома. Најпрости молекули се састоје од два атома и због своје релативно простије структуре, интеракције електрона са двоатомским молекулима су најчешће истраживане, како експериментално, тако и теоријски. Сложенији молекули могу имати у свом саставу три и више атома. У овој групи, експериментално и теоријски су најистраженије интеракција електрона са молекулима који су састављени од три атома. Интеракције електрона са молекулима који се састоје од више атома су мање истражене, а и сама теоријска интерпретација експерименталних

¹ Атомске честице са унутрашњом структуром би се могле дефинисати и као атомски системи, односно системи који се састоје од електрона и атомских језгара. Таква дефиниција је избегнута у овом уџбенику да не би дошло до мешања са дефиницијом која се односи на више међусобно корелираних атома који се називају системи атома или атомски системи. Из тих разлога се аутор определио да атом као и друге сложеније атомске честице са унутрашњом структуром назове једним именом атомске честице.

результата добијених мерењима је знатно сложенија. Од интереса су и судари молекула и молекулских јона, веома важни за моделирање горњих слојева атмосфере. Углавном су истраживања рађена на простијим двоатомским и троатомским молекулима и њиховим јонима.

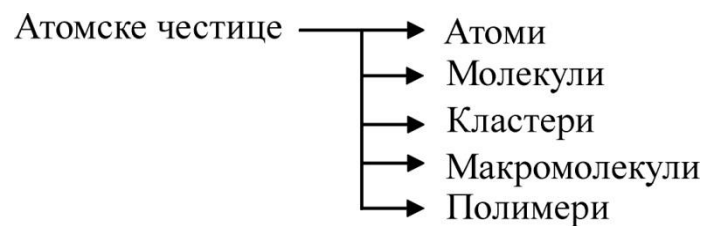
Молекуле са сто и више атома сматрамо **макромолекулима**². Због великог броја атома од којих се састоје, теоријска интерпретација експерименталних резултата мерења интеракција електрона са макромолекулима је доста сложена, па се углавном анализирају само одређена врста могућих процеса који се одигравају при овим сударима. Експериментално се омогућавају процеси судара електрона или јона са испитиваним макромолекулима, под контролисаним условима, а затим се накнадном анализом одређују ефекти екситације или раскидања одређених веза у појединим атомским групама испитиваног макромолекула, који су последица ових судара.

У посебну класу макромолекула на основу броја атома који их сачињавају, можемо убројати и **полимере**. Ипак због своје карактеристичне структуре полимери се класификују као посебна врста атомских система. Макромолекул полимера је формиран од низа мањих идентичних молекулских структура, односно молекулских јединица - мономера, које се међусобно спајају формирајући молекулски ланац. У случају судара полимера са електронима или другим атомским честицама (углавном са високо-енергијским атомским јонима) анализирају се прекиди веза између одређених атома у полимерним ланцима који су изазвани приликом ових судара.

Кластере дефинишемо као системе који се могу састојати од неколико молекула или молекулских група међусобно повезаних Ван дер Валс-овим (Van der Waals) силама. Најчешћа ситуација је да се кластер у

² У неким уџбеницима се макромолекули дефинишу као молекули који у свом саставу садрже бар хиљаду и више атома.

основи састоји од једне молекулске групе која чини базу кластера, а да се у њему налазе и други молекули, или макромолекули, као примесе. Разумљиво је да су интеракције електрона са кластерима најсложеније и из тог разлога најмање експериментално истражене и са најмање урађених теоријских интерпретација и модела. Када се разматра интеракција електрона са кластерима, најчешће се проблем редукује на интеракцију са молекулом или макромолекулом доплантом који је од интереса за проучавање. Тако се у случају кластера аеросола, које налазимо у атмосфери, при истраживању прати интеракција са молекулима полутантима који се налазе у оквиру кластера. Шематски приказ поделе атомских честица по врстама дат је на слици 2.1.



Слика 2.1. Шематски приказ поделе атомских честица са унутрашњом структуром по врстама

2.2. Појам атомских судара

Под атомским сударом се подразумева свака интеракција атомских честица међусобно, или са електронима, која се дешава приликом њиховог међусобног приближавања, и при чему атомски системи и/или електрони мењају свој импулс. При томе, у случају атомских честица као учесника у судару може доћи и до промене њихове унутрашње енергије, а такође и

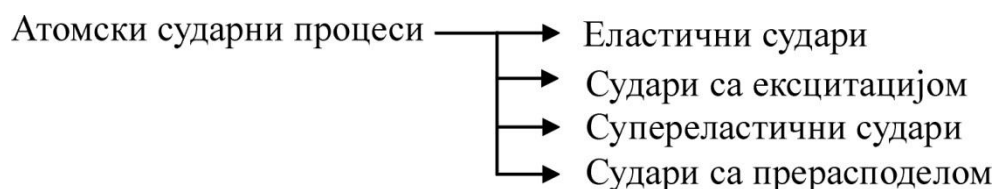
њиховог састава. Укупан импулс атомских честица и електрона који учествују у судару биће непромењен, односно важиће закон одржања импулса. Такође ће важити и закон одржања укупног момента импулса, односно укупан збир момента импулса свих учесника у судару у односу на њихов заједнички центар масе пре судара и свих појединачних унутрашњих момената импулса атомских честица учесника у судару биће очуван током судара.

Уколико се приликом судара атомских честица међусобно, или са електронима, не промени укупна кинетичка енергија, односно уколико сума кинетичких енергија свих учесника у судару пре и после судара остане непромењена, говоримо о **еластичним сударима**. Свакако ће у случају еластичних судара важити и општији закон одржања механичке енергије свих атомских честица и електрона учесника у судару. То значи да уколико атомски честице и/или електрони интерагују Кулоновом електростатичком интеракцијом, или се налазе у неком спољашњем потенцијалном пољу, важиће закон одржања укупне механичке енергије све време током сударног процеса. Ови закони одржања се користе при теоријском опису судара и у формалном запису ће бити репрезентовани преко одговарајућих оператора кинетичке и потенцијалне енергије, због квантне природе атомских честица и електрона.

Уколико је приликом судара дошло до промене унутрашње структуре атомских честица учесника у судару, говоримо о **сударима са ексцитацијом**. Закон одржања механичке енергије неће важити, али ће важити општији закон одржања укупне енергије система честица. Промена укупне механичке енергије, која представља суму механичких енергија појединачних атомских честица и електрона учесника у судару, биће једнака промени унутрашње енергије атомских честица, који су услед интеракције са другим атомских честицама или електронима претрпели промену своје унутрашње структуре. При томе, да би ови процеси

енергијски били уопште могући, потребно је да укупна механичка енергија атомских честица пре судара буде већа или бар једнака укупној промени унутрашњих енергија атомских честица након судара. Ова минимална вредност кинетичке енергије се назива **енергија прага** за дати процес ексцитације. Специјални случај ове врсте судара је када укупна унутрашња енергија атомских честица учесника у судару буде мања након судара, у односу на њену вредност пре судара. Разлика у унутрашњој енергији одлази на повећање кинетичке енергије слободних електрона и атомских честица учесника у судару и овакве сударе називамо **судари са деексцитацијом, односно супереластични судари**.³

У случају најсложеније врсте судара, **судара са прерасподелом**, где се поред структуре атомских честица учесника у судару, мења и њихов састав, а такође последично и број слободних електрона и/или атомских честица, у односу на њихов број пре судара, важиће закон одржања укупне енергије. При томе ће укупна енергија, која је једнака суми унутрашњих енергија атомских честица који учествују у судару и њихових механичких енергија, као и механичких енергија електрона пре судара, бити једнака збиру унутрашњих и механичких енергија свих атомских честица и електрона након судара (при чему се број атомских честица и слободних електрона може променити током судара). Шематски приказ поделе атомских сударних процеса дат је на слици 2.2.



Слика 2.2. Шематски приказ поделе атомских сударних процеса

³ Често се у литератури оваква врста судара, када је у питању судар електрона са атомском честицом, назива и **супереластично расејање**.

Број учесника у сударима теоријски може бити произвољан, али када је реч о атомским честицама у гасовитом стању, онда су доминантни само истовремени судари две атомске честице⁴, односно **бинарни судари**. Вероватноћа да се истовремено сударе три или више атомских честица није занемарљива само у случају гасова у стању великих концентрација. У експерименталним изучавањима атомских судара увек се ради са бинарним сударима и најчешће су то судари електрона са одабраном врстом атомских система. Разлог за то је, да је тешко, готово немогуће, експериментално контролисати истовремени судар три или више атомских честица. Такође, за експериментално изучавање и интерпретацију резултата, судари две атомске честице су доста сложенији, па је број експерименталних поставки за њихово проучавање знатно мањи од судара електрона са атомским системима. Слична ситуација је и са развојем теоријских модела у оквиру теорије атомских судара. Најчешће теоријски моделирани и изучавани процеси су бинарни судари електрона са атомским честицама. Доста су ређа теоријска проучавања бинарних судара две атомске честице, управо због своје сложености. Такође, због недостатка експерименталних резултата, отежано је и тестирање предложених модела, односно њихова валидизација. Управо из ових разлога, у наставку уџбеника ћемо се концентрисати на бинарне сударе електрона са атомским честицама.

⁴ Као што смо већ напоменули под атомским честицама, учесницима у судару, у општем случају поред електрона убрајамо и атомске системе иако имају сложену унутрашњу структуру.

2.3. Класификација судара електрона са атомима и молекулима

2.3.1. Судари електрона са атомима

Прво ћемо разматрати процесе до којих могу довести судари електрона са атомима, као најпростијим међу атомским честицама са унутрашњом структуром. Могући процеси који се могу одиграти приликом судара електрона са атомима могу бити веома разноврсни⁵. Атом као честица са сложенom унутрашњом структуром може приликом ових судара променити своју унутрашњу структуру, али такође и састав, односно број електрона од којих је сачињен.

Свакако, у процесу судара се може десити да атом не промени ни унутрашњу енергију ни састав (а да евентуално дође до мерљиве промене његове транслаторне кинетичке енергије и импулса), што ћемо сматрати **еластичним сударом** електрона са атомом.

У случају да се мења само унутрашња структура, атом ће прећи у неко од побуђених енергијских стања, уколико је био у свом основном енергијском стању, односно стању са минималном енергијом. Овакви судари се називају **судари са ексцитацијом**.

Промена у саставу атома доводи до смањења (или повећања) броја електрона од којих је сачињен, чиме он постаје позитивно или негативно наелектрисан (односно атомски), јон. Овакви судари припадају класи **судара са прерасподелом**, а најчешће у случају судара електрона са атомима долази до **јонизације**, односно атом губи један од својих

⁵ Ови процеси се често називају и канали судара (по аналогији са каналима реакције у нуклеарној физици).

електрона. Могуће је и да атом приликом оваквог судара изгуби два или више електрона и онда такав процес зовемо **вишеструка јонизација**.

Иначе, због велике разлике у маси електрона и атома чак и у случају најлакших елемената, промене у транслаторној кинетичкој енергији и импулсу атома приликом судара са електронима су веома мале, па се у општем случају најчешће занемарују при теоријској интерпретацији. У литератури се ове промене у кинетичкој енергији називају енергијом узмака атома при расејању електрона на њима. С обзиром на велику разлику у маси, у присуству електричних поља електрони стичу знатно веће брзине од неутралних атома (или атомских јона) и из тих разлога се при разматрању њихових судара брзина атома занемарује и најчешће се узима да је она у лабораторијском референтном систему једнака нули. Такође се узима да је центар масе система електрон-атом у центру атома, што је ипак само приближно тачно. Егзактнији приступ захтева да се проблем раздвоји на кретање центра масе система електрон-атом, као и кретање релативне честице.

У случају еластичног судара не долази до промене унутрашњег стања, нити састава атома учесника у судару, тако да се укупна кинетичка енергија система електрон-атом одржава. Као што смо већ навели, због велике разлике у маси, кинетичка енергија атома се готово и не мења, па се апроксимативно сматра да се кинетичка енергија електрона такође не мења. Свакако да се при овој интеракцији мења импулс електрона, односно ако занемаримо промену његовог интензитета (односно брзине електрона), мења се правац и смер вектора импулса електрона у односу на његов почетни правац и смер. Та промена оријентације вектора брзине се квантитативно изражава углом расејања електрона у односу на почетни смер вектора импулса. При експерименталном истраживању еластичних судара електрона са атомима, мере се углови расејања електрона, односно вероватноћа да се електрон расеје под одређеним углом. При теоријском

опису, такође се израчунавају углови расејања електрона при еластичним сударима. С обзиром на квантну природу електрона и атома, адекватан теоријски опис еластичних судара електрона са атомима може бити само квантно-механички, и у том смислу се рачунају вероватноће да се електрон расеје под одређеним углом, које се изражавају адекватним физичким величинама.

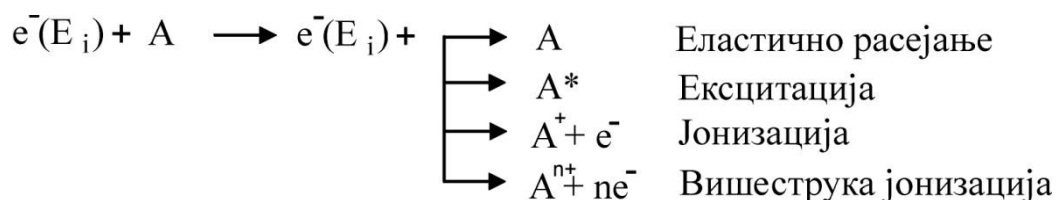
Друга класа електрон-атомских судара, коју смо навели, су нееластични судари при којима се мења унутрашња енергија, али не и састав атомске честице, односно судари са ексцитацијом. У том случају се атом, побуђује у неко од својих енергијски виших електронских стања. Електрон при том губи део своје кинетичке енергије која је утрошена на ексцитацију атома (егзактније говорећи систем електрон-атом губи део кинетичке енергије). Такође се мења и правац и смер импулса електрона, што се изражава углом расејања, као и у случају еластичног судара. Притом, као што смо већ напоменули за општи случај процеса судара са ексцитацијом, да би атом побудили у неко од побуђених електронских стања, неопходно је да упадни електрон има кинетичку енергију која је бар једнака или већа од енергије потребне за побуду у то побуђено стање. Ова чињеница произилази из закона одржања енергије, јер приликом судара електрон предаје део своје кинетичке енергије атому, и наставља кретање са мањом кинетичком енергијом, а предати део кинетичке енергије је управо енергија потребна да се атом из почетног стања побуди у одређено побуђено електронско стање. Да би се процес побуђивања уопште десио, потребно је да упадни електрон има кинетичку енергију једнаку или већу од енергије побуде, односно енергији прага за дати процес ексцитације.

При експерименталном истраживању ове врсте судара, побуђивање атома се може пратити индиректно, преко промене кинетичке енергије електрона. Ексцитација може бити детектована и оптички, преко накнадне деексцитације атома у неко од стања са мањом енергијом, при

чему се емитије фотон. Теоријски опис се бави израчунавањем вероватноће побуђивања атома у одређена (енергијски виша), електронска стања. Као и у случају еластичних судара, адекватан теоријски опис је квантно-механички, с тим што постоје и други апроксимативни класични и семикласични методи описа, који су мање или више успешни, у зависности од врсте апроксимације на којој су базирани, о чему ће бити речи касније.

Трећа класа електрон-атомских судара, коју смо навели, су судари са променом састава атома. При томе се најчешће смањује број електрона у атому, чиме он постаје позитивно наелектрисани јон. Ова врста процеса која се одиграва приликом судара електрона и атома је и најсложенија и најтежа за експериментално истраживање, као и теоријски опис. Адекватно експериментално истраживање захтева детекцију два или више електрона ослобођених током процеса судара, као и евентуално праћење новонасталог јона. Ово захтева неколико детектора електрона и рад у коинцидентној техници, како би се разлучили појединачни судари електрона са атомима.

Квантно-механички теоријски опис је знатно отежан управо због сложености ове врсте судара, па се често у немогућности егзактног приступа користе семи-класичне и класичне методе описа. Шематски приказ поделе судара електрона са атомима дат је на слици 2.3.



Слика 2.3. Шематски приказ поделе судара електрона са атомима

2.3.2. Судары електрона са молекулима

Судары електрона са молекулима отварају нове класе могућих канала процеса који се могу одиграти том приликом у односу на сударе електрона са атомима. Јасно је да су већ код двоатомског молекула, као сложеније атомске честице од атома, могући нови степени слободе кретања, као што су вибрације језгара око равнотежних положаја, а такође и њихова ротација око центра масе молекула. Ако се још има у виду да се у сваком појединачном електронском стању молекула он може налазити у различитим вибрационим и ротационим стањима, јасно је да се број канала реакција који се могу одиграти приликом судара електрона са молекулима вишеструко повећава.

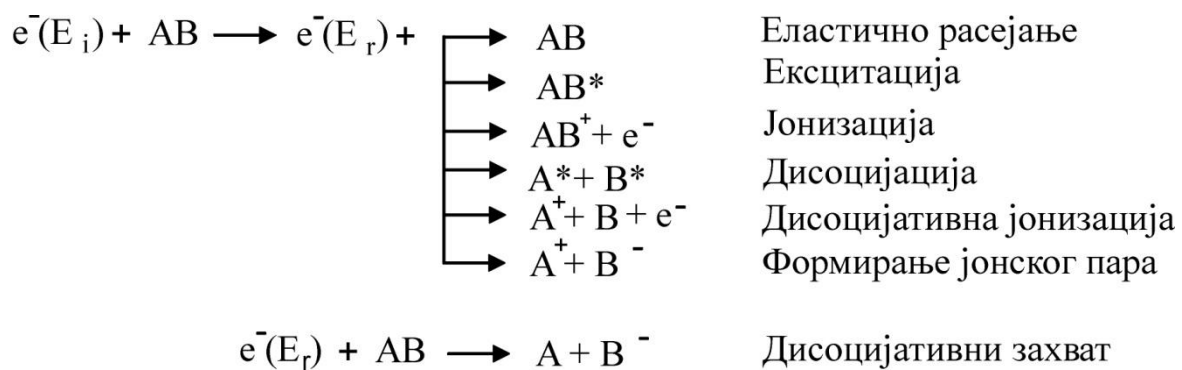
Код чисто **ротационих процеса побуђивања** молекула при сударима са електронима, део кинетичке енергије електрона прелази у енергију ротационог кретања молекула. Често се приликом експерименталног проучавања процеса судара процеси ротационог побуђивања не могу разлучити од чисто еластичног расејања, због мале енергије ротационе побуде и ограничене резолуције спектрометара са којима се изводе истраживања. Због тога се ови процеси у експерименталним мерењима често приписују еластичном расејању. Међутим, постоје експерименти у којима се, уз високу енергијску резолуцију остварену при мерењима и на основу додатне анализе ови процеси могу раздвојити и који дају резултате за чисто ротациону побуду. Такође, треба напоменути да се велики број молекула на собној температури налази у неком од побуђених ротационих стања, тако да су могући и **процеси супереластичног ротационог расејања**. У таквом процесу, електрон током судара са молекулом добија енергију, повећавајући своју кинетичку енергију на рачун смањења ротационе енергије молекула.

Следећи могући процеси приликом судара електрона са молекулима су **вибрационо побуђивање молекула**. Треба напоменути да се при њима често дешава и ротационо побуђивање, које је тешко експериментално разлучити од чисто вибрационог. **Супереластично вибрационо расејање електрона** на молекулима је редак процес на собној температури, јер је број молекула у побуђеном вибрационом стању занемарљив. Вибрационо побуђивање молекула електронима је од великог интереса за проучавање, јер је чест случај да су вероватноће за ове процесе релативно велике, а да се нарочито повећавају на одређеним, тзв. резонантним енергијама, о чему ће бити речи касније.

Као и код атома, могући су и процеси **ексцитације молекула у побуђена електронска стања**. За разлику од атома где је овај процес изолован, у случају молекула он је најчешће праћен истовременом ротационом и вибрационом побудом. Експериментално је лако раздвојити процесе побуђивања у одређено електронско или истовремено електронско-вибрационо побуђено стање, док је теже раздвојити процесе побуђивања у ротациона стања, па се они често придружују електронско-вибрационој побуди. Могућа су и супереластична расејања, када се молекули пре судара са електронима налазе у вишим електронским стањима, али су ти процеси занемарљиви на собној температури. Овакви процеси су од интереса у плазмама, а нарочито у случајевима када побуђена електронска стања имају дужа времена живота, односно ако су метастабилна. Рад гасних ласера је управо заснован на побуђивању у метастабилна стања.

Свакако су могући и **процеси јонизације молекула**, а том приликом молекулски јон који тада настаје приликом судара са електроном може остати у неком од побуђених електронских, вибрационих и ротационих нивоа. За разлику од атома где се при јонизацији избија један или више електрона, у случају молекула су могући и други процеси при којима се

мења састав ове сложеније атомске честице. При сударима могу настати две или више нових атомских честица, односно може доћи до **фрагментације молекула** на друге молекуле, молекулске јоне или атоме и атомске јоне. Сви ови процеси фрагментације су за одређен број простијих молекула проучавани и експериментално и теоријски, и они укључују **дисоцијацију** молекула, **формирање јонског пара** и **дисоцијативни захват**, при чему упадни електрон бива захваћен од стране једног од фрагмената.



Слика 2.4. Шематски приказ поделе судара електрона са двоатомским молекулима (звездице означавају побуђена стања)

2.3.3. Судар електрона са кластерима

Кластери можемо дефинисати као структуре молекула⁶ повезане међумолекулским силама, најчешће ван-дер-Валс-овог (van der Walls) типа. Процеси судара електрона са кластерима су најмање истражени, првенствено због своје сложености. Може се приметити да се у последње време интензивно експериментално истражују у лабораторијским условима. Ови процеси су значајни нарочито за сударе електрона са аеросолима (кластерима који су природно формиран), јер су веома бројни

⁶ Кластери (ређе) могу бити и структуре атома, и тада се зову атомски кластери (atomic clusters).

у атмосфери Земље. Од посебног значаја за физику екологије су истраживања везана за сударе електрона са кластерима вештачког порекла који се емитују приликом разних индустријских процеса. Судари електрона са овом класом кластера се истражују из два главна разлога. Први је изазивање захвата електрона од стране кластера приликом њихових судара, чиме се омогућава њихово уклањања из емитованих гасова употребом јаких електричних поља (такозвана електрична филтрација). Други разлог је изазивање хемијских реакција у циљу разградње штетних хемијских једињења који се налазе у вештачки генерисаним кластерима који се емитују заједно са гасовима, нус-продуктима разних индустријских процеса сагоревања.

Приликом извођења експеримената судара електрона са кластерима готово је немогуће детектовати појединачне процесе које се одвијају том приликом. Као прво, тешко је направити ансамбл идентичних кластера, углавном се у пракси то своди да су то слични кластери, односно да се састоје од исте врсте макромолекула. Такође, велики број разних процеса ексцитације и јонизације је могућ приликом судара. Анализе које се спроводе су углавном накнадне анализе, које се односе на одређивање хемијских реакција изазваних овом врстом судара. Те анализе укључују процену броја хемијских реакција одабраних за праћење, у зависности од енергије електрона пројектила приликом судара.

2.3.4. Судари електрона са макромолекулима

Приликом судара електрона са макромолекулима може доћи до разних процеса ексцитација, како вибрационе тако и електронске, процеса јонизације, процеса прекидања појединих веза у макромолекулу. Макромолекули се обично налазе инкорпорирани као део шире структуре

у кондензованој материји, и директно испитивање горе побројаних процеса је отежано или готово немогуће. На пример молекули протеина или молекул ДНК су саставни део биолошких ћелија и њихово изоловано и непосредно проучавање у експерименту у контролисаним условима судара са електронима је готово немогуће. Чак и уколико би остварили експерименте са појединачним сударима електрона са овим макромолекулима, због великог броја екситационих канала који се могу десити, анализа експеримента не би могла дати једнозначне резултате. Због тога се за моделирање и процену вероватноћа за одигравање одређених процеса приликом судара користе такозвани заменски молекули, који могу послужити за емулирање одређених веза између атома који су саставни део одређене молекулске подгрупе макромолекула. Тако се за процену вероватноће за одигравање разних врста електронских и вибрационих екситација, као и раскидања одређених веза код органских макромолекула и њихових молекулских подгрупа приликом судара са електронима, користе мањи молекули, а то су најчешће молекули ацетилена, етилена, метана и простих алкохола, који се у овом случају третирају као заменски.

2.3.5. Судари електрона са полимерима

Већ смо напоменули да посебну групу макромолекула чине полимери. Макромолекул је формиран од мањих идентичних молекулских структура, односно молекулских јединица - мономера, који се међусобно спајају формирајући молекулски ланац. Полимерни ланац се обично састоји од неколико стотина до неколико хиљада мономера. Најпознатији природни полимерни ланац је полимер целулозе. Најпознатији синтетички полимери су полиетилен, полистирен, тефлон и карбонске нанотубе.

У сударима електрона са полимерима долази до процеса вибрационе и електронске ексцитација, до процеса јонизације, а такође и до процеса прекидања појединих веза у полимерним ланцима молекула, као и процеса прекидања полимерних ланаца, односно њихове дефрагментације. Ови процесе је тешко појединачно контролисати у чак и у експерименту који би омогућио изоловани судар електрона са макромолекулом полимера. Уместо тога, за процене вероватноћа и моделирање израчунавања броја одређених врста ексцитација у јединици времена (када интерагују ансамбли електрона и полимера), такође се користе заменски молекули. У случају када се проучавају прекидања одређених веза између појединачних атома у полимерном макромолекулу, врши се углавном накнадна анализа која омогућава процену броја и врсте извршених процеса. У обичним амбијенталним условима такви процеси су занемарљиви. Међутим у условима третирања материјала који се састоје од полимерних макромолекула у плазми, број процеса који доводе до кидања веза између одређених атома, или молекулских група у полимерном ланцу није занемарљив, и може се успешно анализирати након третирања. Механизми који доводе до ових процеса су различити, а један од механизма је и судар полимера са електронима из плазме. На основу макроскопских параметара плазме може се одредити средња температура електрона и расподела електрона по енергијама и на тај начин статистички усредњено проценити број процеса раскидања одређених веза у полимеру до којих доводе судари електрона са њима. Други механизам је судар високоенергијских јона, који се такође налазе у плазми, са полимерним молекулима. Такође се на основу познавања температуре плазме може проценити и број високоенергијских јона који могу довести до ових процеса. Накнадна анализа раскидања полимерних веза, до којих је дошло приликом плазма третмана, се спроводи разним техникама, од којих је најпознатија XPS (X-ray Photoelectron Spectrum) анализа.

2.4. Резонанти процеси у сударима електрона са атомским честицама

У сударима електрона са атомима или молекулима, може доћи до привременог захвата електрона од стране честице мете, при чему се формира негативни атомски или молекулски јон. Овакво привремено стање се често назива **“приврмени негативни јон”** или **“саставно стање”**, а такође и **“резонанца”**. Јасно је одакле потичу ови називи, јер ово саставно стање електрона, као упадне честице пројектила, и честице мете је уствари приврмени негативни јон. Такође, пошто су ови процеси оствариљиви и дешавају се само у уском домену енергија упадног електрона, односно само при тачно одређеним резонантним енергијама, и долази и назив резонанца.

За разлику од процеса директног расејања, у случају резонантног расејања електрон се дуже задржава у области честице мете, па се теоријски гледано, разлика између резонантног и директног расејања може направити мерењем и поређењем времена судара, односно мерењем времена задржавања упадног електрона у области атома или молекула са којим интерагује. У случају резонантног расејања оно је свакако знатно дуже, него у случају директног расејања. За карактеристично време судара приликом директног расејања узима се време прелета упадног електрона кроз простор атомске честице, односно, $\tau = R/v$, где су R – димензије атомске честице, а v – брзина честице пројектила. Ако је време кашњења упадне честице T , знатно веће од карактеристичног времена судара при директном расејању, $T \gg \tau$, закључујемо да је дошло до резонантног процеса, приликом судара. Мерењем времена судара могло би се експериментално утврдити постојање резонанце при одређеним енергијама упадног електрона, али је ово практично тешко остварљиво, јер

су времена живота резонантних стања у атомским системима веома кратка.

Други начин да се експериментално детектује појава резонантног расејања базира се на мерењу вероватноће за одређене процесе. С обзиром да се време интеракције упадног електрона са атомским системом значајно повећава услед формирања резонанце, интуитивно је одмах јасно да то мора довести и до наглог повећања вероватноће одређеног процеса који се прати приликом судара. Нагло повећање вероватноће одређеног процеса⁷ приликом промене енергије упадног електрона јасан је експериментални знак да се судар, поред директног механизма расејања, одвија и преко резонантног механизма уз формирање саставног, резонантног стања. Услови под којима може настати резонанца, зависиће од карактера резонантног стања, што ћемо детаљније анализирати у следећим одељцима.

2.4.1. Класификација резонанци

Класификација резонанци се уводи преко електронске структуре резонантног стања. Као родитељско електронско стање резонанце дефинише се електронско стање атома, односно молекула, у коме се они налазе приликом привременог захвата упадног електрона. Конфигурација резонантног стања се добија формалним одстрањивањем привремено захваћеног електрона. У зависности да ли родитељско стање кореспондира са основним стањем атома, односно молекула, или са побуђеним стањем, као и да ли енергија резонанце⁸ лежи испод или изнад родитељског стања, дефинишу се следећи типови резонанци:

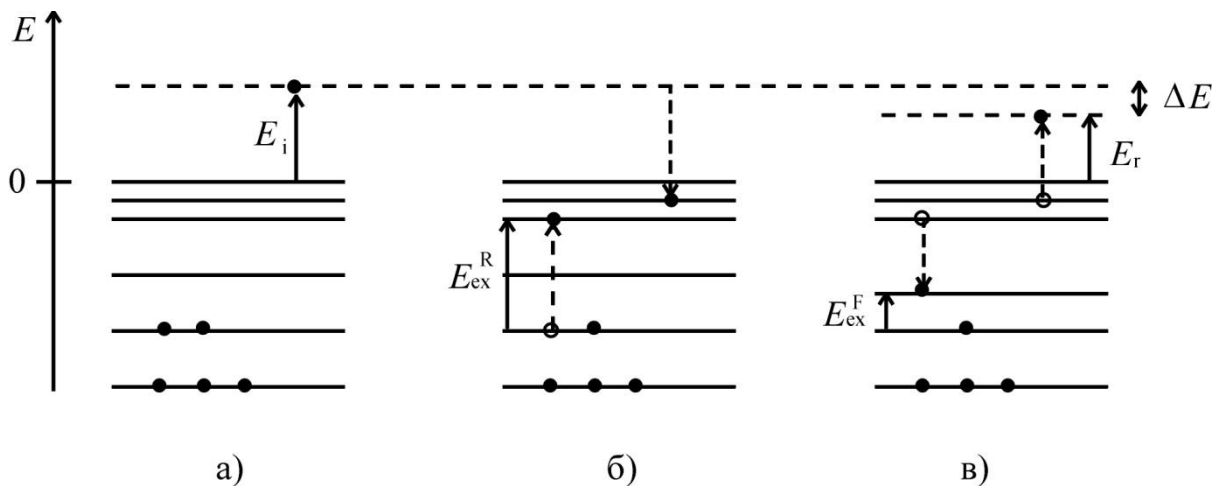
⁷ Вероватноћа одређеног процеса приликом судара се исказује преко амплитуде за одвијање процеса, односно преко ефективног пресека, а ове физичке величине биће дефинисане у наредним поглављима.

⁸ Под енергијом резонанце се сматра кинетичка енергија електрона, као упадне честице, при којој долази до његовог захвата, односно до формирања привременог негативног јона.

- a. “Тип I” или резонанце затворених канала (closed channel resonance) или “2p-1h” Фешбах (Feshbach) резонанце. Ова врста резонанци се карактерише Ридберговим или валентним родитељским стањем, које је по енергији изнад резонантног стања.
- b. “Тип II” , “просте” или “1p” резонанце облика (shape resonances). Код ове врсте резонанце, родитељско стање је основно стање атома или молекула.
- c. “Тип III” , “сложене” или “2p-1h” резонанце облика са побуђеним омотачем (core excited shape resonance). Родитељско стање ових резонанци је побуђено електронско стање атома, односно молекула, углавном валентно, а може бити и Ридбергово. У случају овог типа резонанце, родитељско стање је по енергији испод резонантног стања.

2.4.2. Фешбах резонанце

Приликом формирања Фешбах (Feshbach) резонанци упадни електрон приликом интеракције побуђује атом или молекул на коме се расејава и истовремено бива захваћен. У побуђеном стању, атом или молекул на коме долази до стварања резонантног стања има позитивни електронски афинитет, тако да су услови за захват упадног електрона испуњени. Родитељско стање резонанце може бити валентно или Ридбергово, енергија за његову ексцитације је већа од кинетичке енергије упадног електрона, што указује да упадни електрон мора бити заробљен. У том стању захваћени електрон не може да напусти атом или молекул, без претходне промене електронске конфигурације, односно електронског стања самог тог атома или молекула. Шематски приказ формирања Фешбах резонанце је приказан на слици 2.5.



Слика 2.5. Механизам формирања Фешбах резонанце: а) Упадни електрон и атомски систем у основном стању. б) Резонантно стање в) атомски систем остаје у ексцитованом стању, а расејани електрон има мању резидуалну енергију од упадне.

Ова енергијска забрана распада резонанце знатно продужава време живота резонантног стања, па су због тога времена живота Фешбах резонанци релативно велика (10^{-12} - 10^{-4} [s]). Оваква релативно велика времена живота доводе до добре енергијске дефинисаности електронског стања резонанце. У експериментима се запажа нагло повећање вероватноће за ексцитацију⁹ одређеног енергијског стања атома или молекула у веома уском домену упадних енергија електрона. Енергијска ширина резонантних стања, која је обрнуто пропорционална времену његовог живота, је реда неколико десетина meV и мања. Фешбах резонанце се обично формирају у близини родитељског стања које има велики ефективни пресек за ексцитацију на самом прагу. Сама резонанца се обично налази у енергијском интервалу 0 - 0,5 eV испод родитељског стања. Приликом распада родитељског електронског стања, мења се електронска конфигурација атома или молекула, и он остаје у неком од побуђених електронских стања. Могуће је да постоји више канала распада,

⁹ Већ смо напоменули да се физичка величина преко које се изражава вероватноћа за одређени процес који се може догодити приликом судара називаефективни пресек.

односно да родитељско стање може да се распадне у неколико различитих побуђених стања.

Типичан пример Фешбах резонанце код молекула азота је $N_2^-(X^2\Sigma_g^+)$ резонанца, која се налази на енергији од 11,49 eV. Родитељско стање ове резонанце је најниже Ридбергово стање $E^3\Sigma_g^+$, чији је праг на енергији од 11,87 eV, дакле 0,38 eV изнад резонантног. Ово стање се карактерише релативно великом вероватноћом за ексцитацију на прагу (прецизније, има велики ефективни пресек). Резонанца има више канала распада, поред основног стања, она се распада и у валентна стања: $V^3\Pi_g$, $a^1\Pi_g$ и $C^3\Pi_u$. Енергијска ширина ове резонанце је 0,6 meV.

2.4.3. Резонанце облика

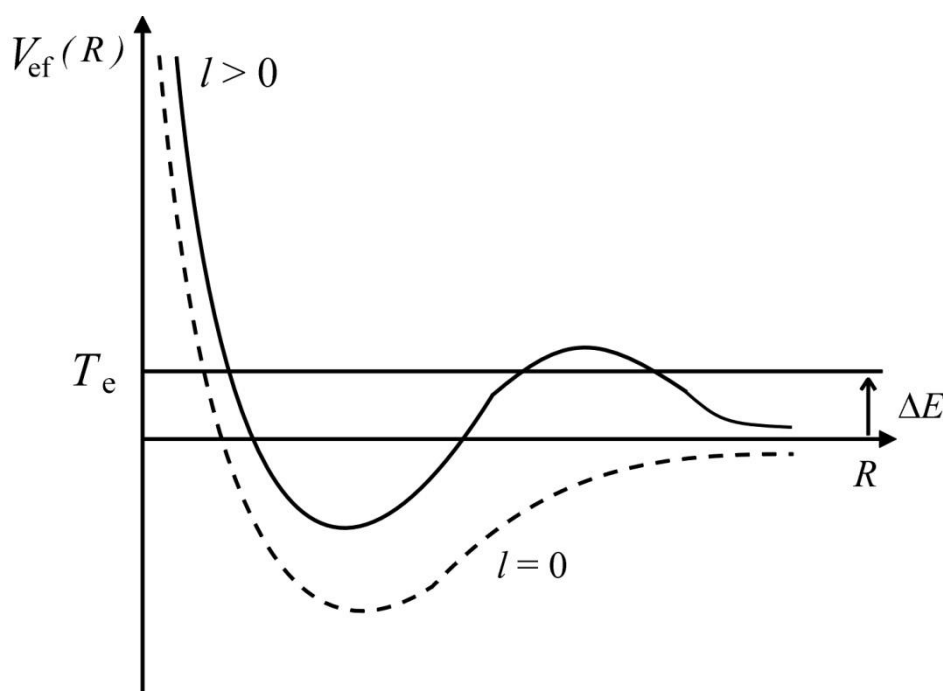
Енергија резонанце код овог типа резонантног расејања је изнад енергије родитељског стања. Електрон бива захваћен од стране атомске честице ефективним потенцијалом који се формира приликом њихове интеракције. Од облика ефективног потенцијала зависи и вероватноћа захвата електрона, а такође и дужина живота резонанце, и због тога се ова врста резонанци назива резонанца облика. Приликом распада електрон тунелира кроз баријеру ефективног потенцијала, а атом или молекул остаје у основном стању, а ако је реч о молекулу, он се може наћи у побуђеном вибрационом стању. Због непостојања енергијских услова који забрањују распад, резонанце облика имају краће време живота у односу на Фешбах резонанце и оно је у домену 10^{-15} - 10^{-13} [s]. Због тога је ова врста резонанци слабије енергијски дефинисана и јавља се у ширем домену енергија од Фешбах резонанци.

Када се електрон расејава на атому или молекулу који има приближно сферно-симетрични потенцијал $V(r)$, и уколико притом овај систем електрон-атом (електрон-молекул) има ненулти орбитални момент

импулса у односу на центар масе (приближно положај атома или молекула), чији је квантни број l , ефективна потенцијална енергија система електрон-атом (електрон-молекул), ће бити облика:

$$U_{\text{eff}}(r) = \frac{2\mu}{\hbar^2} V(r) + \frac{l(l+1)}{r^2},$$

Ако прикажемо ефективну потенцијалну енергију графички (слика 2.6.), можемо приметити формирање потенцијалне баријере за упадни електрон, али и потенцијалне јаме у којој он може бити заробљен као честица пројектил, од стране атома или молекула.



Слика 2.6. Ефективна потенцијална енергија и формирање резонанце облика

Приликом расејања на оваквом ефективном потенцијалу постоји велика вероватноћа да упадни електрон буде привремено заробљен од стране атома или молекула, као честице мете, и да се формира резонанца. Упадни електрон мора прво да савлада потенцијалну баријеру, што је квантно-механички могуће и познато као тунел ефекат. Након тунелирања, електрон се налази заробљен у пољу ефективног потенцијала атома или

молекула на коме се расејава и на тај начин долази до формирања резонанце облика. Електрон има позитивну укупну енергију, па не може бити трајно заробљен, изузев да неким радијативним процесом изгуби део своје кинетичке енергије. Због тога упадна честица након одређеног времена тунелира поново кроз ефективни потенцијал у супротном смеру, и бива расејана. Управо из разлога да се потенцијална јама у ефективном потенцијалу система електрон-атом (електрон-молекул) формира услед члана који припада орбиталном моменту импулса упадног електрона у односу на мету, јасно је да само електрони са орбиталним моментом импулса већим од нуле могу бити захваћени.

Ова врста резонанце је експериментално примећена у случају расејања електрона на малим двоатомским молекулима, као што су азот, угљен-моноксид, кисеоник и водоник. При резонантном процесу, електрон бива захваћен од стране молекула, формирајући резонантно стање, односно привремено живећи негативни молекулски јон. Услед појаве ове врсте резонантног расејања, упадни електрон значајно повећава време интеракције са молекулом на коме се расејава, што се манифестује кроз повећану вероватноћу како еластичног расејања електрона на молекулу, тако и вибрационе побуде. Вероватноће за процесе еластичног расејања и вибрационе побуде се притом увећавају и до два реда величине у односу на директно расејање.

Типични пример ове резонанце су $N_2^-(^2\Pi_g)$ резонанца облика молекула азота и $CO(^2\Pi)$ резонанца облика молекула угљен-моноксида. У енергијским доменама ових резонанци експериментално је константовано нагло повећање вероватноћа за еластично расејање, а такође и за вибрациону побуду. Енергијска ширина ове резонанце је око 2 eV.

2.4.4. Резонанце облика са побуђеним омотачем

У случају “Тип III”, “сложених” или “2p-1h” резонанци облика са побуђеним омотачем (core excited shape resonance), механизам формирања резонанце је исти као и код простих резонанци облика, али се притом побуђује и електронски омотач атомског система. Родитељско стање ових резонанци је побуђено електронско стање атома, односно молекула, углавном валентно, мада може бити и Ридбергово. Енергија резонанце је изнад родитељског стања, па енергијска забрана за распад резонанце не постоји. Распад резонантног стања се одвија преко тунелирања упадног електрона кроз потенцијалну баријеру формирану од стране ефективног потенцијала. Атом, односно молекул, углавном остаје у побуђеном родитељском стању. Због сличног начина формирања и распада, време живота ових резонанци је поредиво са временом живота “простих” резонанци облика. Пример ове резонанце облика је $N_2^-(^2\Sigma_u^+)$ резонанца облика која се формира одмах изнад енергијског прага за побуђивање Ридберговог $E^3\Sigma_g^+$ електронског стања молекула азота. Енергијска ширина ове резонанце је око 100 meV.

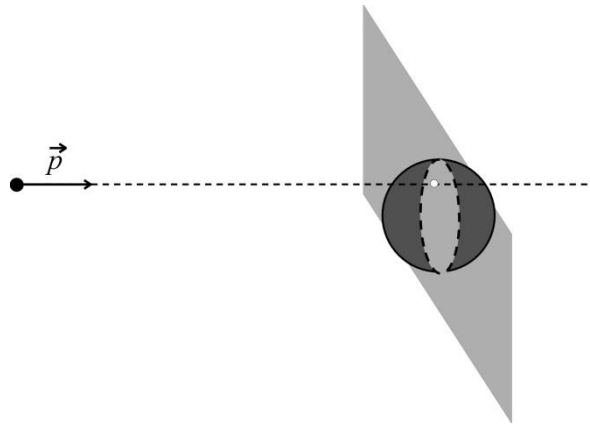
3. ЕФЕКТИВНИ ПРЕСЕЦИ ЗА СУДАРНЕ ПРОЦЕСЕ

3.1. Величине које карактеришу атомске сударне процесе

Да би омогућили квантитативно описивање атомских сударних процеса, неопходно је дефинисати физичке величине које их карактеришу. Размотримо прво еластичан судар хомогене чврсте кугле са куглицом, која је израђена од истог материјала, и претпоставимо да је полупречник R кугле знатно већи од полупречника r куглице, $R \gg r$. На основу претпоставке о хомогености, можемо закључити и да је маса кугле M , знатно већа од масе куглице m , $M \gg m$. Такође ћемо претпоставити да кугла мирује у односу на систем референце везан за лабораторију, а да се куглица креће равномерно праволинијски, односно да је слободна, да на њу приликом кретања не делују друга тела. Нека до интеракције, односно судара са већим куглом, може доћи искључиво приликом механичког контакта. Ако до механичког контакта, тј. судара, дође, примећује се промена начина кретања куглице, односно промена њеног импулса, док је због велике разлике у маси промена положаја велике кугле готово занемарљива.

Прво питање које се поставља, јесте да ли ће при кретању куглице до судара са већом куглом уопште доћи, а ако долази, под којим условима кретања куглице ће се судар десити. Дакле, можемо говорити о могућности да до судара дође. Свакако да ће ова могућност зависити од импулса куглице, односно од његовог правца и смера у односу на положај веће кугле. Уколико је правац кретања куглице такав да у простору геометријски пролази кроз запремину кугле, и уколико је кретање куглице усмерено ка кугли, до судара ће извесно доћи, што је приказано на слици 3.1. Геометријски гледано, услов да до судара дође може се еквивалентно дефинисати и преко **попречног пресека** кугле у односу на раван која

пролази кроз њен центар и која је нормална на правац вектора импулса куглице. До судара ће сигурно доћи уколико правац кретања кулице пролази кроз овај попречни пресек. У противном, уколико није испуњен овај услов, до судара сигурно неће доћи.

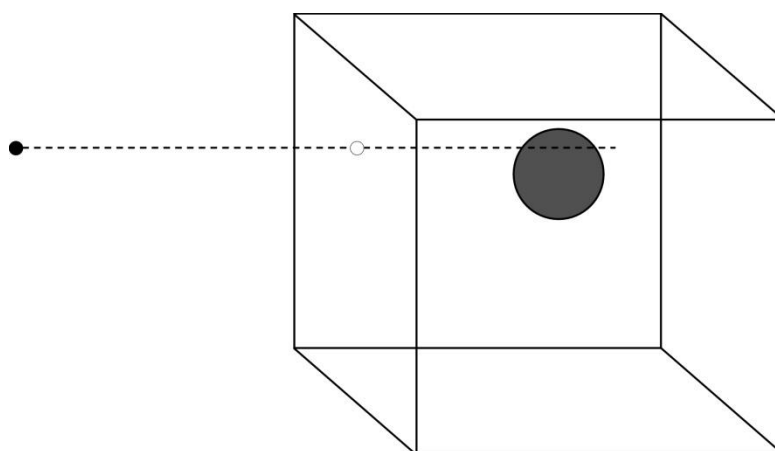


Слика 3.1. Геометријски услов за судар у случају куглице и кугле

Овде би могли закључити, да када се ради о макроскопским објектима, и уколико су познати њихови положаји и импулси, са сигурношћу можемо предвидети да ли ће до судара доћи или не. Ово нам је познато када се разматра питање да ли ће неко небеско тело, рецимо астероид приликом свог кретања доћи у контакт са Земљом. У том случају, за разлику од нашег примера, кретање астероида није равномерно праволинијско, јер се налази под дејством гравитационог сила Сунца и других планета у Сунчевом систему. Ни Земља не мирује, као у случају веће кугле, већ се креће око Сунца. Али ми можемо унапред прорачунати трајекторије кретања астероида и Земље, тако да су нам у сваком тренутку познати импулс и положај ових макроскопских објеката и на тај начин предвидети да ли ће до судара доћи, на основу могућности пресецања њихових трајекторија.

Као што је познато из квантне физике, у случају атомских честица као што су електрони, атоми и атомски системи, због њихове таласне

квантне природе не можемо прецизно истовремено познавати и њихов импулс и положај. Дакле положај и импулс атомских честица можемо познавати само са одређеном тачношћу. У случају нашег примера, уколико би уместо кугле посматрали атом, не би могли да одредимо његов тачан положај у простору, већ само део запремине простора у коме се он налази. Уколико уместо куглице посматрамо електрон, и претпоставимо да познајемо његов импулс, и да је он усмерен ка запремини простора где се налази атом, његов тачан положај у простору у сваком тренутку, односно његову трајекторију не можемо познавати, јер се његово кретање у том случају описује еквивалентно простирању равног таласа. Модификујмо сада наш разматрани случај судара кугле и куглице на начин да описује судар атомских честица (на пример електрона и атома), тако што ћемо предпоставити да се кугла налази у некој коцки чија је страница a , ($a \gg R$), а да куглица има импулс чији правац пролази нормално кроз једну страницу коцке, али са случајним положајем тачке у којој пресеца ту страницу. На овај начин смо наш прост модел судара прилагодили случају судара атомских честица, при чему смо укључили чињеницу да не можемо познавати њихове тачне положаје и трајекторије. Овај модел је шематски приказан на слици 3.2.



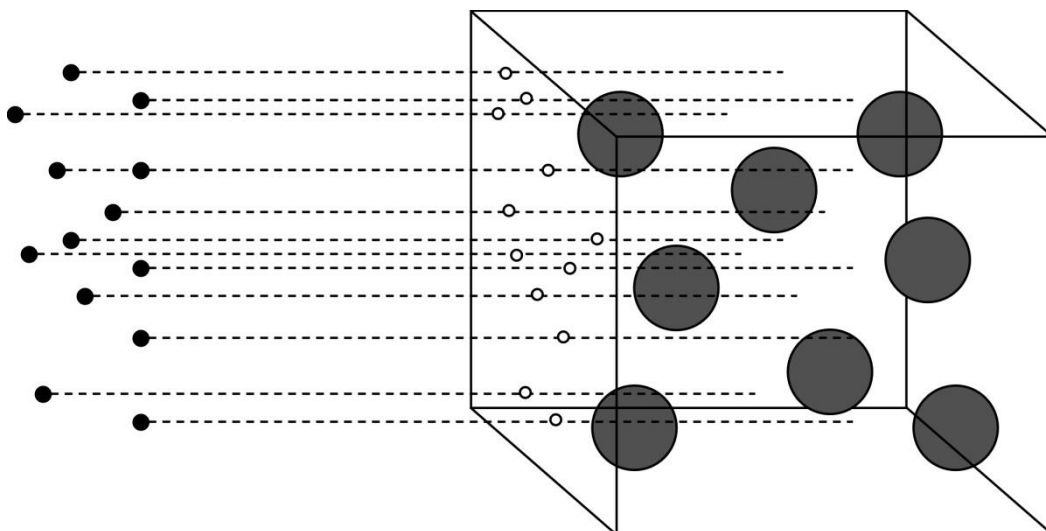
Слика 3.2. Судар куглице и кугле која се налази у коцки

Геомеријски услов за судар у случају нашег модела остаје исти, али сада услед непознавања тачног положаја кугле у коцки, као и тачне путање куглице, не можемо са сигурношћу знати да ли ће до судара доћи или не. Можемо говорити само о **вероватноћи** да до судара дође. Уколико куглица прође кроз страницу коцке и уколико се кугла сигурно налази у коцки, ова вероватноћа је пропорционална односу површине попречног пресека кугле и површине странице коцке. Међутим, услед непознавања тачног положаја кугле, као и трајекторије куглице, нисмо сигурни да ли се оне наћи у једном тренутку времена у замишљеној коцки или не. Да би повећали шансу за њихово налажење у оваквој замишљеној коцки, повећајмо сада страницу коцке два пута и поново израчунајмо вероватноћу за судар под истим полазним претпоставкама. Вероватноћа за судар коју изражавамо као однос површина попречног пресека кугле и површине стране коцке има сада 4 пута мању вредност. Међутим опет нисмо сигурни да ли се кугла налази у предвиђеној коцки, а такође чак ни да ли куглица пролази кроз ту коцку. Уколико даље повећавамо страницу коцке и рачунамо вероватноћу, њена вредност би тежила нули, и можемо закључити да на тај начин вероватноћу не можемо поуздано израчунати, јер не познајемо величину коцке која би сигурно омогућила да се кугла налази у њој, и да куглица сигурно пролази кроз њену запремину. Можемо закључити да у случају атомских честица, услед њихове таласне природе, нисмо у стању пратити и контролисати процесе њихових појединачних судара.

Да би превазишли ове принципијелне проблеме у одређивању вероватноће, морамо радити са мноштвом атомских честица које се налазе у одређеном истом стању, односно можемо радити са ансамблима честица. У нашем моделу, уместо једне кугле и једне куглице, разматраћемо мноштво идентичних кугли које су хомогено распоређене у простору, а такође и хомоген млаз идентичних куглица које имају исте импулсе и чији

правци кретања пресецају запремину у којој се налазе кугле. На тај начин постају небитне саме димензије запремине простора у коме се интеракција догађа, односно димензије коцке у нашем моделу. Сада можемо арбитрарно изабрати димензије коцке у коме се налази хомогени просторни ансамбл већих кугли, и кроз чију бочну страну пролази хомогени просторно-временски ансамбл кулица. При том је битно да знамо концентрацију већих кугли у коцки, n , а такође и интензитет млаза куглица, I , који кроз њу пролази.

Вероватоћу да до судара, између куглица и већих кугли, дође, обрачунату у јединици времена, P_s , можемо теоријски израчунати преко односа суме површина попречних пресека куглица, P_K , које се налазе у коцки (чије су странице, a) и површине једне њене стране, a^2 . За то морамо познавати површину попречног пресека већих кугли P_K , док флукс куглица које пролазе кроз коцку можемо одредити уколико познајемо интензитет млаза куглица, тј. флукс куглица је једнак Ia^2 .



Слика 3.3. Модел судара ансамбла куглица са ансамблом кугли које се налазе у коцки

Дакле укупна вероватноћа за судар куглица и већих кугли у јединици времена може бити изражена као производ, односа површина веће кугле и површине коцке, S_K/a^2 , броја већих кугли у коцки, na^3 , и броја куглица које у јединици времена пролазе кроз коцку, тј. њиховим флуksom, Ia^2 :

$$P_S = (S_K/a^2) * (na^3) * (Ia^2).$$

Уколико нас занима вероватноћа судара на једној честици (у јединици времена), укупну вероватноћу би поделили са бројем честица мета, односно вероватноћа је пропорционално попречном пресеку кугле коју гађамо и упадном интензитету:

$$P_1 = (S_K/a^2) * (Ia^2) = S_K * I.$$

Сада је потпуно јасно да уколико су кугле хомогено распоређене у простору, и уколико радимо са хомогеним млазом куглица, да вредност ове вероватноће неће зависити од димензија модела коцке у којој пратимо интеракцију. Уколико је интензитет млаза једнак једној куглици која прође кроз јединичну површину у јединици времена, онда је вероватноћа за интеракцију појединачних честица у јединици времена једнака:

$$P_{11} = S_K * I_1.$$

На овај начин смо видели да је могуће доћи и до вероватноће за појединачни судар, иако се појединачни судар не може контролисати у случају атомских честица. До ове вероватноће се може доћи само индиректно, радећи са ансамблима електрона и атомских система, а затим

се те вероватноће, одређене за ансамбле, нормирају по једној честици атомског система мете и по једној честици пројектила.

Из горње релације за вероватноћу појединачног судара можемо закључити да је ова вероватноћа пропорционална површини попречног пресека кугле, и увек се може израчунати уколико је познат овај попречни пресек и интензитет млаза куглица пројектила. Из тих разлога, базичније је познавати површину попречног пресека честице мете него саму вероватноћу. Због тога површина попречног пресека представља главну физичку величину коју би требало познавати за детаљан опис судара у нашем примеру. Такође треба приметити да у моделу судара класичних куглица и кугли, до судара извесно долази уколико у простору трајекторије куглица пролазе кроз запремину кугли, независно од брзине куглица. На тај начин, у нашем класичном моделу вероватноћа да дође до судара зависи само од попречног пресека кугле, који нема никакве везе са брзином куглице пројектила, нити објективно може од ње да зависи.

У микросвету, због таласне природе атомских честица, вероватноћа да дође до судара зависи од брзине честица пројектила. То можемо објаснити чињеницом да атомске честице, као што су електрони, због своје таласне природе имају ефективну таласну дужину приликом свог кретања, која зависи од импулса и која је дата Де Брољевом релацијом ($\lambda=h/p$). У упрошћеној слици судара електрона са атомским системима, приликом њихове интеракције долази до појаве ефеката дифракције, односно интерференције, самог електрона као микрочестице која има таласну природу, на атомском систему. Свакако знамо да ови ефекти зависе од таласне дужине упадног таласа (којим се описује електрон при кретању), и на тај начин од импулса, односно брзине електрона као честице пројектила. Због тога еквивалентни попречни пресек посматраног атомског система, као честице мете, зависи од брзине електрона, као честице пројектила, што је у класичном случају немогуће.

(У класичном случају овај попречни пресек је одређен само геометријом честице мете, константан је и не зависи од брзине честице пројектила.) Дакле, попречни пресек атомског система за судар са електроном неће бити константан, већ ће мењати своју вредност, тј. имаће различите вредности за различите брзине, односно енергије електрона, што је у судару макроскопских објеката незамисливо. Управо из тих разлога се, за разлику од макроскопских објеката где је попречни пресек за судар физичка величина одређена геометријом тих објеката, у физици атомских судара уводи одговарајућа величина која дефинише овај попречни пресек, али која се због своје променљивости (зависи од брзине честице пројектила) назива **ефективни пресек за судар**. Дакле за сваку брзину честице пројектила, атомском систему се приписује неки ефективни попречни пресек, којим се физички карактерише његова вероватноћа судара са честицом пројектилом, односно којом се може израчунати вероватноћа за њихов судар.

У наредном одељку ћемо егзактно дефинисати ову физичку величину, за коју смо показали да игра централну улогу у физици атомских сударних процеса.

3.2. Ефективни пресек за судар

У уводном делу овог поглавља смо разматрали величине које карактеришу интеракцију, односно судар две атомске честице. Дошли смо до закључка да је централна физичка величина која карактерише сударе две атомске честице ефективни пресек за судар. Уколико познајемо остале услове при којима до интеракције долази, као што су концентрација честица мете, пређени пут честица пројектила кроз запремину у којој се

налазе честице мете, као и интензитет честица пројектила, уз познати ефективни пресек, увек можемо израчунати вероватноћу за судар.

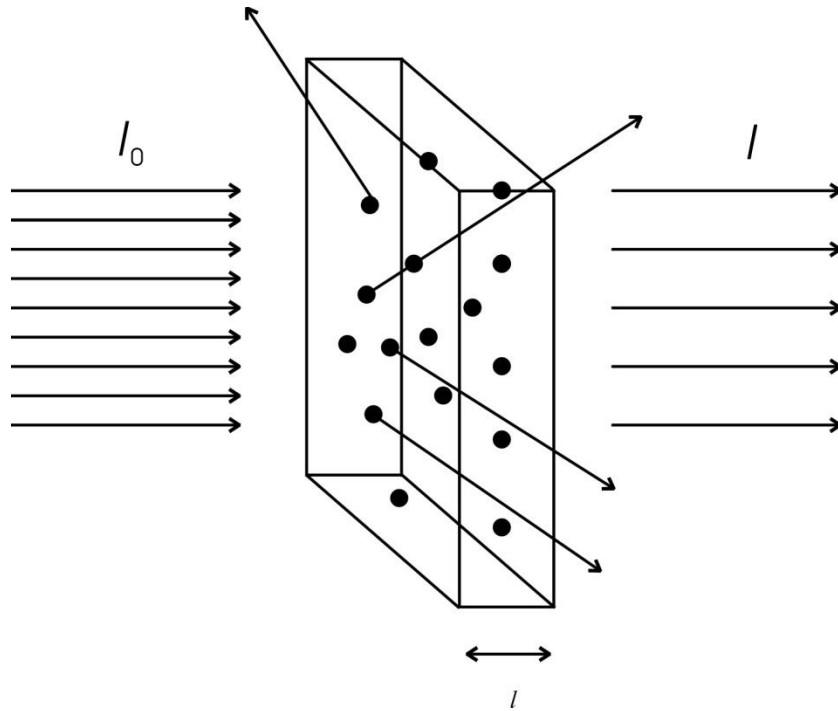
Ефективни пресек за судар ћемо сада егзактно дефинисати на следећи начин. Посматрајмо упадни млаз честица пројектила, чији је интензитет I . Нека млаз честица пролази кроз неку запремину у простору у којој се налазе честице мете чија је густина n . Услед интеракције честица из млаза са честицама мете долази до расејања једног дела честица из млаза, при чему њихов упадни интензитет опада након пролаза кроз интеракциону запремину. Промена интензитета честица из упадног млаза, dI , на њиховом инфинитезимално малом путу, dl , кроз интеракциону запремину, је пропорционална концентрацији честица мете, n , интензитету упадног млаза, I , и том пређеном путу, dl , и може се изразити на следећи начин:

$$dI = -\sigma * n * I * dl$$

Коефицијент пропорционалности, σ , представља **ефективни пресек за судар** честица пројектила са честицама мете. Ова физичка величина има димензије површине и може се изразити у мерним јединицама m^2 .

Након проласка млаза честица пројектила, чији је почетни интензитет, I_0 , на коначном путу l , интензитет млаза опада, а интегрирањем горње диференцијалне једначине добија се закон опадања интензитета млаза са пређеним путем, $I(l)$:

$$I(l) = I_0 e^{-\sigma * n * l}$$



Слика 3.4. Пролазак честица пројектила кроз интеракциону запремину
дебљине l

Уколико је познат ефективни пресек, σ , онда се може изразити и вероватноћа да се честица пројектил расеје на честицама мете чија је концентрација n , крећући се дуж инфинитезимално малог пута dl :

$$P_S = - dl / I = \sigma * n * dl$$

Вероватноћа за судар једне честице на коначном путу, l , може се изразити на следећи начин:

$$P(l) = \frac{I_0 - I}{I_0} = 1 - e^{-n * \sigma * l}$$

Уколико је тај пут мали, онда се горња функција може развити у Тејлоров ред, и након развоја експоненцијалног члана, виши чланови у развоју се могу занемарити. Добија се приближна једнакост за вероватноћу која је једнака горњем изразу за вероватноћу у случају инфинитезимално малог пута:

$$P(l) = 1 - e^{-n*\sigma*l} \cong \sigma * n * l$$

Овај исти израз смо већ добили, али претпостављајући инфинитезимално малу дебљину мете.

Већ смо раније нагласили да ефективни пресек за судар зависи од енергије честице пројектила, односно он ће бити функција енергије:

$$\sigma = \sigma(E).$$

Услед тога ће и вероватноћа за судар такође зависити од енергије честице пројектила, $P_S = P_S(E)$.

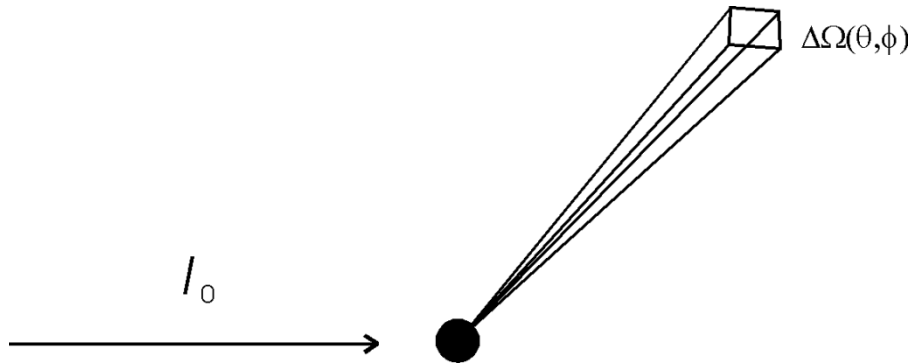
3.3. Диференцијални ефективни пресеци за судар

Ефективни пресек смо дефинисали као физичку величину која карактерише интеракцију, односно сударе честица пројектила са честицом мете. Знајући ефективни пресек, лако је израчунати вероватноћу да до интеракције, односно судара дође при конкретном пређеном путу честица пројектила у датој запремини, познате концентрације честица мете. При томе смо претпостављали да било какав судар доводи до скретања честице и њен губитак из упадног млаза. Нисмо водили рачуна о каквој врсти судара је реч, да ли честица при томе мења своју кинетичку енергију, а такође ни у ком правцу се расејава. Да би детаљније описали сударе, уводи се физичка величина коју називамо **диференцијални ефективни пресек за судар** која расчлањује могуће исходе приликом судара. У зависности од праћеног исхода судара разликоваћемо различите диференцијалне пресеке. На првом месту увешћемо диференцијални ефективни пресек у зависности од угла при коме се упадна честица пројектил расејава, при судару са честицом мете, у односу на смер и правац њеног почетног импулса.

Диференцијални ефективни пресек за судар честице унутар малог просторног угла $\Delta\Omega$, чија је оријентација у простору дефинисана поларним и азимуталним углом, θ, φ , односно $\Delta\Omega = \Delta\Omega(\theta, \varphi)$, дефинише се преко броја честица пројектила које пролазе у јединици времена кроз тај просторни угао, ΔN , услед тога што су се судариле са честицама мете концентрације, n , у елементарној сударној запремини, V .

Елементарни диференцијални ефективни пресек за судар, при коме се расејана атомска честица пројектил расејава у просторни угао $\Delta\Omega(\theta, \varphi)$ дефинише се као однос броја расејаних пројектила у јединици времена у тај просторни угао, ΔN , концентрације, n , сударној запремини, V и интензитета упадног млаза, I_0 , на следећи начин:

$$\Delta\sigma(\theta,\varphi) = \frac{\Delta N(\Delta\theta,\Delta\varphi)}{I_0 nV}$$



Слика 3.5. Расејање честица из упадног млаза на честицама мете, у одређени просторни угао $\Delta\Omega$

Одмах можемо уочити да ће број расејаних пројектила у јединици времена, ΔN , зависити од величине просторног угла, $\Delta\Omega$, унутар кога се честице расејавају. На тај начин ће и елементарни пресек зависити од величине $\Delta\Omega$, а она често у експерименту може бити арбитрарна, па је универзалније радити са другачијом физичком величином која не зависи од величине овог просторног угла. Из тих разлога се уводи физичка величина која представља елементарни ефективни пресек подељен са просторним углом за који је дефинисан. Уколико је просторни угао велики, онда та физичка величина представља средњу вредност диференцијалног пресека односно **средњи диференцијални ефективни пресек**. Пошто је циљ да познајемо диференцијални ефективни пресек при сваком углу θ и φ , бира се инфинитезимално мала величина просторног угла, па добијамо **диференцијални ефективни пресек за судар**:

$$\frac{d\sigma(\theta,\varphi)}{d\Omega} = \lim_{\Delta\Omega \rightarrow 0} \frac{\Delta\sigma(\theta,\varphi)}{\Delta\Omega} = \lim_{\Delta\Omega \rightarrow 0} \frac{\Delta N(\Delta\theta,\Delta\varphi)}{I_0 nV \Delta\Omega} = \frac{dN(\Delta\theta,\Delta\varphi)}{I_0 nV d\Omega}.$$

Уколико би сада желели да израчунамо укупни пресек за судар по свим расејаним честицама, без обзира на просторни угао при коме су расејане, требало би да овај израз сумирамо за све просторне углове, $\Omega(\theta, \varphi)$. На тај начин ћемо добити интеграл:

$$\sigma = \int_0^{4\pi} \frac{d\sigma(\theta, \varphi)}{d\Omega} d\Omega$$

Овај пресек се често назива и **интегрални пресек за судар**, јер је добијен интеграцијом диференцијалног пресека за судар по свим угловима, мада је по свом смислу еквивалентан ефективном пресеку за судар, који смо дефинисали у претходном одељку.

Уколико је диференцијални пресек независан од азимуталног угла φ , $\frac{d\sigma(\theta, \varphi)}{d\Omega} = \frac{d\sigma(\theta)}{d\Omega}$, што је случај када радимо са неполаризованим честицама пројектила и неполаризованим честицама мете, онда се диференцијални пресек може изразити на следећи начин

$$\sigma = \int_0^{4\pi} \frac{d\sigma(\theta)}{d\Omega} d\Omega = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi} \frac{d\sigma(\theta)}{d\Omega} \sin\theta d\theta$$

Већ смо нагласили да је интеграл диференцијалног пресека по свим угловима, по свом значењу, једнак укупном ефективном пресеку за судар.

Раније смо напоменули да сударне процесе можемо и финије разликовати, односно диференцирати их и на основу других могућих исхода судара, а не само на основу угла у простору при којем су честице расејане. На тај начин можемо увести диференцијалне пресеке вишег реда.

На пример, расејане честице можемо да разликујемо и преко кинетичке енергије коју имају након судара. Дефинисаћемо диференцијални ефективни пресек **другог реда**, код кога посматрамо све честице расејане у просторном углу $d\Omega(\theta, \varphi)$, које након судара, имају кинетичку енергију у интервалу $E_R, E_R + dE_R$, као:

$$\frac{d^2\sigma(E_R, \theta, \varphi)}{d\Omega dE_R} = \lim_{\Delta\Omega \rightarrow 0, \Delta E_R \rightarrow 0} \frac{\Delta N(\Delta E_R, \Delta\theta, \Delta\varphi)}{I_0 n V \Delta\Omega \Delta E_R}.$$

Слично можемо дефинисати и диференцијалне пресеке за судар вишег реда. На пример уколико хоћемо да разликујемо судар и по кинетичној енергији упадних честица E_i , онда можемо увести диференцијални пресек **трећег реда**, који зависи од просторног угла, упадне и резидуелне кинетичке енергије честице пројектила:

$$\frac{d^3\sigma(E_R, \theta, \varphi)}{d\Omega dE_R dE_I} = \lim_{\Delta\Omega \rightarrow 0, \Delta E_R \rightarrow 0, \Delta E_I \rightarrow 0} \frac{\Delta N(\Delta E_I, \Delta E_R, \Delta\theta, \Delta\varphi)}{I_0 n V \Delta\Omega \Delta E_R \Delta E_I}.$$

3.4. Парцијални и тотални ефективни пресеци за судар

Уводећи дефиницију ефективног пресека за судар нагласили смо да он зависи од енергије честице пројектила, односно $\sigma = \sigma(E)$. При горњим разматрањима нам је било битно само да ли је дошло до судара са честицом метом, не улазећи у то који од могућих процеса се при томе десио. У предходном поглављу смо навели да приликом судара електрона са атомима, молекулима и сложенијим атомским системима, може да дође до мноштва различитих процеса. Уколико сада желимо да разматрамо и конкретну врсту процеса до које је дошло приликом судара, онда морамо

дефинисати **парцијални ефективни пресек за судар**, који ћемо означити са σ_i , где се индекс i , односи на разматрани процес који пратимо приликом судара. Свакако да ће и парцијални ефективни пресек за судар зависити од кинетичке енергије честице пројектила. Притом, као што смо већ раније напоменули, за поједине процесе је потребна минимална енергија да би уопште могли да се догоде, коју смо дефинисали као енергија прага. Сваки од процеса побуде атома у различита електронска стања има своју енергију прага, тако да ћемо приликом писања ефективног пресека за судар поред индекса, наводити и енергију прага, а такође и енергију електрона од које тај ефективни пресек зависи: $\sigma_i(E_{\text{praga}}, E)$. Уколико сумирамо све могуће процесе побуде атома од стране електрона, укључујући и јонизацију, добићемо **тотални ефективни пресек за судар**:

$$\sigma(E) = \sum_i \sigma_i(E)$$

Овако дефинисан тотални ефективни пресек је еквивалентан ефективном пресеку који смо дефинисали раније када нисмо улазили у детаље који се парцијални процеси побуде при сударима дешавају.

3.5. Коефицијенти брзине сударних процеса

Честа је ситуација када се у некој запремини простора налазе две врсте атомских честица, на пример електрони и атоми, или атоми и/или молекули, који међусобно интерагују, при чему долази до судара између њих. Ти судари могу бити еластични, али могу бити и нееластични, па уколико се ради о атомима, могу довести и до њихових ексцитација, јонизација, а такође и дисоцијација, ако су бар једна од врста атомских честица молекули. У принципу у ситуацији када се интеракције дешавају између атома и/или молекула, тада се не разликују честице пројектили од честица мете. У случајевима када имамо сударе електрона који интерагују са честицама гаса, на пример у плазми, свакако да због велике разлике у маси, електрони преузимају улогу пројектила, док атомске честице гаса, због мањих брзина и мањих кинетичких енергија имају улогу мета.

У описаној ситуацији интеракције две врсте атомских честица, од интереса је увести неку физичку величину која ће карактерисати појединачне сударне процесе који се дешавају између њих. Уводи се коефицијент брзине за сваки од сударних процеса који може догодити приликом судара. Он се дефинише преко промене концентрације једне или друге врсте честица учесника у сударима, које се пре судара налазе у одређеном стању (имају одређен импулс или се налазе у одређеном енергијском стању), а након судара у неком другом одређеном стању (које карактерише изабрани сударни процес који се прати). Промена концентрација честица (које прелазе у одређено стање услед сударног процеса), у јединици времена, пропорционална је производу њихових почетних концентрација:

$$\frac{dn_A}{dt} = \frac{dn_B}{dt} = -Kn_A n_B ,$$

фактор пропорционалности, K , у горњој једнакости, управо представља **коэффициент брзине (rate coefficient) сударног процеса**¹⁰.

Покушајмо сада да овај коэффициент повежемо са до сада уведеним величинама које карактеришу судар. Раније смо показали да релативни интензитет честица пројектила у млазу опада пропорционално концентрацији честица мете, ефективног пресека и дужине пређеног пута:

$$- dl / l_0 = \sigma * n * l .$$

Уколико овај израз напишемо на други начин преко промене концентрација честица пројектила, а пређени пут честица пројектила изразимо преко њихове брзине, v_A , и интервала времена у коме се посматра њихово кретање, dt , можемо писати:

$$- \frac{dn_A}{n_A} = n_B \sigma v_A dt .$$

Напишимо ово сад на начин који је сличан дефиницији коэффициента брзине реакције:

$$\frac{dn_A}{dt} = -\sigma v_A n_A n_B$$

Поредећи сада ову релацију са горњом дефиницијом, одмах уочавамо да је коэффициент брзине реакције једнак производу ефективног пресека за сударе и брзине честица пројектила:

$$K = \sigma v_A$$

¹⁰ Уколико између две врсте атомских честица долази до хемијске реакције, при чему се стварају нове атомске честице, на сличан начин се дефинише **коэффициент брзине реакције**.

Ова релација одговара ситуацији када све честице пројектили имају исту брзину, v_A . Међутим у реалним случајевима, у гасовима или плазми, честице пројектили имају различите брзине, које се могу окарактерисати неком расподелом, $f(v)$. У том случају коефицијент брзине судара се може написати као усредњен производ пресека и брзине за дату расподелу:

$$\int_0^{+\infty} f(v)\sigma(v)v dv$$

Где је одговарајућа расподела честица пројектила нормирана на јединицу:

$$\int_0^{+\infty} f(v)dv = 1$$

Најчешћа реална ситуација је када су помешане атомске честице два гаса или када се посматрају судари електрона са атомским системима у плазми. Уколико се систем помешаних атомских честица налази у термодинамичкој равнотежи, у том случају је, макроскопски посматрано, позната температура оваквог система. Тада је расподела по брзинама, сваког од подсистема атомских честица, Максвелова. Најчешћа ситуација је да је једна врста атомских честица доста веће масе од друге, па се њено кретање може занемарити, а рачунање коефицијента брзине судара се своди на интеграцију по функцији расподеле лакших честица, односно честица са мањом масом. У случају електрона и атомских система у плазми, ово је сасвим прихватљива апроксимација, а Максвелова расподела електрона по брзинама за дату температуру плазме је дата функцијом:

$$f_M(v) = \frac{dn_e}{n_e dv} = 4\pi \left(\frac{m}{2\pi kT}\right)^{3/2} v^2 e^{-\frac{mv^2}{2kT}}$$

Уколико је позната расподела по брзинама електрона, онда је лако одредити коефицијент брзине при конкретним условима. У циљу израчунавања коефицијента брзине судара, Максвелова расподела се може изразити и у функцији енергије:

$$f_M(E) = \frac{dn_e}{n_e dE} = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{3}{2\langle E \rangle}\right)^{3/2} \sqrt{E} e^{-3E/2\langle E \rangle},$$

Одговарајући коефицијент брзине судара за дати процес, за који је позната енергија прага (E_{praga}), као и ефективни пресек за судар, у функцији енергије $\sigma(E)$, може се израчунати на следећи начин:

$$K_M(\langle E \rangle) = \frac{3\sqrt{3}}{\sqrt{m\pi}} \langle E \rangle^{-3/2} \int_{E_{\text{praga}}}^{+\infty} E \sigma(E) e^{-\frac{3E}{2\langle E \rangle}} dE.$$

Уколико познајемо коефицијент брзине одређеног сударног процеса, онда је могуће моделирање процеса плазми. При датим условима конкретног електричног пражњења у плазми, експериментално можемо контролисати концентрације атомских честица између којих долази до сударних процеса. На основу познавања коефицијента брзине одређеног сударног процеса, можемо одредити број тих процеса који се одигравају у јединици времена, а самом контролом електричног пражњења у плазми, можемо и подешавати број тих процеса и довести га на жељени ниво. Ово је од нарочитог интереса за технолошке примене у којим се врши третирање различитих материјала у плазмама и на тај начин модификација њихових физичких и хемијских особина.

4. ЕКСПЕРИМЕНТАЛНЕ МЕТОДЕ АТОМСКЕ СУДАРНЕ СПЕКТРОМЕТРИЈЕ

Да би се омогућило експериментално изучавање судара електрона и других атомских честица као пројектила са атомским честицама метама, потребно је у експерименту производити млазеве електрона (или других атомских честица) дефинисаног правца и смера кретања и дефинисане кинетичке енергије. На тај начин се остварује просторно-временски ансамбл честица пројектила, који је онда могуће усмерити ка честицама мете. При експерименталним проучавањима, електрони се највише користе као честице пројектила, јер су то честице без унутрашње структуре, па се промене унутрашње енергије атомских честица приликом судара своде на промене унутрашње енергије честица мете. Најчешће су честице мете у облику хомогеног гаса мале концентрације, који се састоји од атомских честица исте врсте, и које се налазе у ограниченом делу простора који називамо интеракционом запремином. На тај начин је остварен и просторни ансамбл честица мете и омогућена је њихова интеракција са млазом честица пројектила, чиме је дефинисан експеримент у коме је могуће мерити диференцијалне пресеке за сударе одабраних врста атомских система. Такође, за изучавање диференцијалних ефективних пресека, остварени су и експерименти који користе два млаза атомских честица које међусобно интерагују приликом пресецања (такозвана метода укрштених снопова или млазева). Познате су и методе при којима се млазеви у једном делу простора крећу дуж исте путање, што се користи ради повећања вероватноће интеракције између атомских честица које се налазе у њиховим саставу, такозване методе сустижућих снопова или млазева.

4.1. Дисперزيونи елементи за селекцију атомских честица по маси и енергијама

Да би се остварили млазеви електрона и других атомских честица, користе се монохроматори чија је улога да колимишу млаз честица, а такође и да изврше његову монохроматизацију по енергији. Када су електрони у питању, млазеви се стварају коришћењем убрзавајућих електричних поља и система електрода које га својим геометријским отворима колимишу и дефинишу. У случају атомских система, а када су у питању наелектрисане честице, атомски или молекулски јони, дефинисање млаза и његова колимација остварује се на сличан начин, углавном коришћењем убрзавајућих електричних поља и система фокусирајућих електрода. Када се желе остварити млазеви неутралних атомских система, онда се они прво јонизују, а затим и убрзавају електричним пољем и колимишу, а након тога неутрализују коришћењем разних метода, међу којима је најчешћа пролаз јона кроз танке фолије.

Пре формирања млаза, потребно је и створити жељену врсту неелектрисаних честица. Слободни електрони се у вакууму најчешће добијају процесом њихове термиемисије из усијане волфрамске нити. Јони атома и молекула се добијају из извора јона, а за њихов рад се користи различите методе. Најчешће се у овим изворима неутралан гас јонизује путем електричних пражњења, а затим се јони екстракцијом јаким електричним пољима извлаче из простора извора јона и даље убрзавају у циљу колимације.

Слободни електрони у вакууму добијени из термиемисије имају различите кинетичке енергије, правце и смерове кретања, односно различите импулсе. Њиховим убрзавањем у електричном пољу може се извршити колимација и формирање млаза, али то још није довољно за постизање монохроматског млаза. Свакако да млаз у коме се електрони

крећу разним брзинама, односно са различитим кинетичким енергијама, није добро дефинисан за експериментално изучавање судара, јер како не можемо контролисати сударе појединачних честица, онда не можемо знати ни тачну енергију са којом се судари дешавају, ако млаз електрона није моноенергизован.

Монохроматизација млаза се врши у монохроматору, а централни део сваког монохроматора је такозвани дисперзиони елемент. Постоје различите методе које се користе у пројектовању и реализацији дисперзионих елемената, а своде се на различите конфигурације електричних и магнетних поља у простору ових елемената. Ова електрична и магнетна поља омогућавају просторно расипање наелектрисаних честица приликом њиховог кретања, у зависности од кинетичке енергије коју поседују. На излазу из простора дисперзионог елемента постављају се електроде које својом геометријом омогућавају пролаз само честицама које се крећу у одређеном правцу. Како се у том изабраном правцу крећу само електрони тачно одређене кинетичке енергије, то омогућава њихову селекцију, односно монохроматизацију упадног млаза.

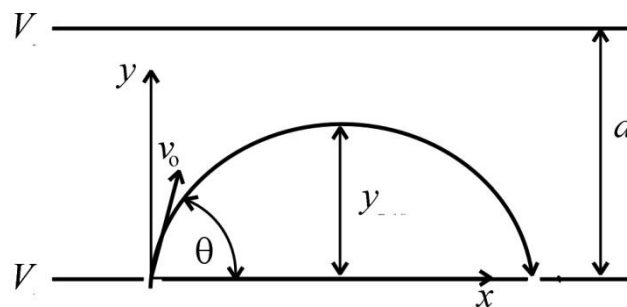
Након судара и расејања честица под разним угловима, може се извршити њихова детекција. Сама детекција наелектрисаних честица врши се помоћу електронских мултипликатора у којима након упада наелектрисане честице, долази до стварање „лавине“ секундарних електрона услед примене високог напона између крајева детектора и коришћења високо емисионо материјала при изради активне површине детектора. Појачање детектора је реда 10^7 , што значи да једна наелектрисана честица која упадне у детектор доведе до стварања лавине од 10^7 електрона. Електронски импулс, добијен на детектору у облику лавине електрона, се затим појачава струјно-напонским појачавачем и сигнал се шаље на бројач импулса.

Међутим да би при мерењу диференцијалног пресека по углу разлучили и парцијалне пресеке за појединачне процесе који се разликују по резидуалној (заосталој) кинетичкој енергији електрона, потребно је још пре детектора имати анализатор, који ће пропуштати само електроне тачно одређених, изабраних енергија. Енергијски анализатори су веома слични енергијским монохроматорима и у свој рад укључују коришћење дисперзионих елемената на готово идентичан начин. Разлика постоји у фокусирању млаза на излазима и улазима ових елемената због њихове различите улоге у електронским спектрометрима као сложеним системима чији су ово елементи.

Сада ћемо приказати најчешће реализације дисперзионих елемената, које се користе за селекцију наелектрисаних честица по енергијама, односно монохроматоре.

4.1.1. Равно електростатичко огледало

Равно електростатичко огледало је засновано на примени хомогеног електричног поља за моноенергизацију и енергијску анализу електрона. Шематски приказ равног електростатичког огледала дат је на слици 4.1.



Слика 4.1. Шематски приказ равног електростатичког огледала

Једначине кретања електрона у хомогеном електричном пољу могу се приказати на следећи начин:

$$\frac{d^2y}{dt^2} = -\frac{e}{m}E, \quad \frac{d^2x}{dt^2} = 0.$$

Овај облик диференцијалних једначина кретања у потпуности је аналоган диференцијалним једначинама за коси хитац у механици.

Ако је v_0 , почетна брзина којом електрони улазе у простор електростатичког огледа, а θ , угао под којим улазе у односу на раван огледала, коначне једначине кретања електрона могу се писати у облику:

$$x = (v_0 \cos \theta)t, \quad y = (v_0 \sin \theta)t - \frac{eEt^2}{2}.$$

Једначина трајекторије је:

$$y = -\frac{eEx^2}{v_0 \cos^2 \theta} + xt \tan \theta = x \left(-\frac{eEx}{v_0 \cos^2 \theta} + \tan \theta \right).$$

Лако се види да је домет електрона у хомогеном електричном пољу једнак:

$$x = \frac{v_0}{\frac{e}{m}E} \sin 2\theta.$$

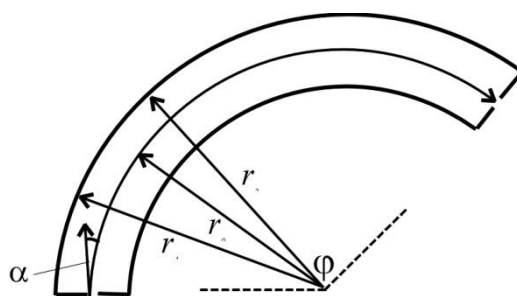
Уколико је упадни угао 45° , домет је максималан. Такође је очигледно да домет зависи од упадне енергије електрона, односно од њихове брзине, а да се у експерименту може подешавати мењањем јачине хомогеног електричног поља, односно напона између електрода електростатичког огледала. На тај начин се омогућава да само електрони одређене брзине, односно кинетичке енергије, прођу кроз излазни отвор на доњој електроди, и самим тим и њихова монохроматизација или енергијска анализа.

4.1.2. Цилиндрични кондензатор Хјуза-Ројанског

Цилиндрични кондензатор Хјуза-Ројанског је један од најкоришћенијих селекционих елемената у електронским монохроматорима и анализаторима. Заснова се на кретању електрона у електричном пољу између две коакцијалне цилиндричне електроде на различитим електричним потенцијалима. Идеална путања електрона у овом селекционом елементу би била по еквипотенцијали у простору између две цилиндричне плоче, а што је приказано на слици 4.2. При томе, да би се омогућило да се електрони, који имају брзину v_0 , крећу по еквипотенцијали, односно по кружници радијуса r_0 , треба да је задовољен услов:

$$\frac{mv_0^2}{r_0} = eE(r_0),$$

односно, центрипетална сила која омогућава кретање по кружници је управо једнака електростатичкој сили која делује на електрон у пољу цилиндричног кондензатора.



Слика 4.2. Шематски приказ цилиндричног кондензатора Хјуза-Ројанског

Диференцијалне једначине кретања у цилиндричним координатама могу се писати:

$$\frac{d^2r}{dt^2} - r \left(\frac{d\varphi}{dt} \right)^2 = -\frac{e}{m} E(r), \quad r^2 \frac{d\varphi}{dt} = r_0 v_0 \cos\alpha,$$

где је α мали угао одступања правца при којем електрон улази у простор селекционог елемента, од правца који је нормала на његов улаз. Једначина трајекторије може се приближно приказати (где су задржани само прва два члана у развоју по углу одступања од нормале на улазу у селекциони елемент) као:

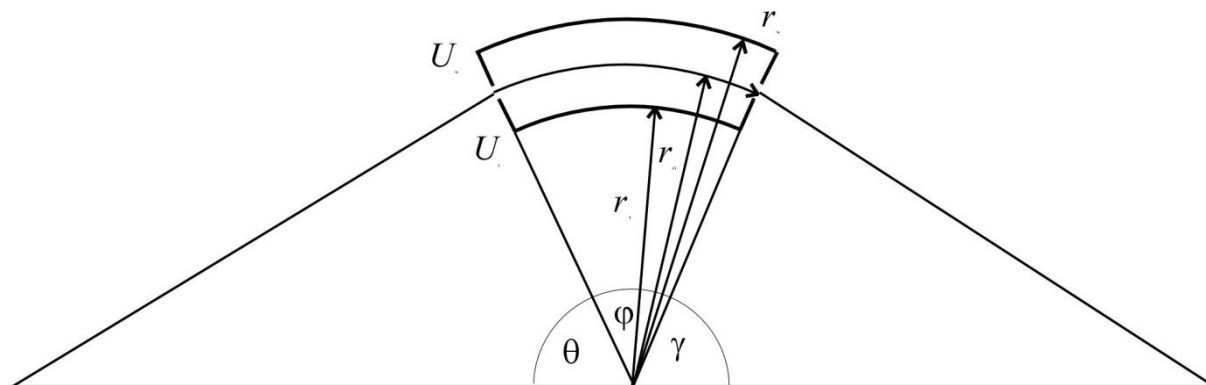
$$r \approx r_0 \left\{ (1 + \alpha \sin\varphi\sqrt{2}) - \frac{\alpha^2}{2} \left(\frac{1}{2} - \frac{5}{3} \cos\varphi\sqrt{2} + \frac{7}{6} \cos 2\varphi\sqrt{2} \right) \right\} + \dots$$

Анализом ове једначине трајекторије долази се до закључка да се фокусирање млаза упадних електрона добија при $\varphi = \pi/\sqrt{2}$, јер тада радијални положај електрона не зависи од угла одступања, већ од квадрата овог угла. Дакле упадни млаз електрона, исте брзине v_0 , који улази у селекциони елемент и има малу дисперзију по углу α , фокусира се у цилиндричном кондензатору при углу $\varphi = \pi/\sqrt{2} = 127,28^\circ$. Због тога се цилиндрични кондензатори управо и дизајнирају и праве тако да им је поларни излазни отвор под овим углом, што истовремено омогућава, поред монохроматизације упадног снопа, односно његове анализе по брзинама електрона у млазу, и просторно фокусирање млаза, чиме се повећава ефикасност у раду овог селекционог уређаја.

4.1.3. Сферни кондензатор

Један од дисперзионих елемената којим је могуће извршити моноенергизацију, или анализу кинетичке енергије електрона, је сферни кондензатор, чији је шематски приказ дат на слици 4.3. Слично као и у

случају цилиндричног кондензатора, идеална путања електрона је по еквипотенцијали која се налази између електрода сферног кондензатора.



Слика 4.3. Шематски приказ сферног кондензатора

Електрично поље на растојању од центра сфере може се изразити једначином ($U=U_2-U_1$ је напон између електрода сферног кондензатора):

$$E(r) = U \frac{r_1 r_2}{(r_2 - r_1) r^2}.$$

Диференцијалне једначине кретања се могу писати у облику:

$$\frac{d^2 r}{dt^2} - r \left(\frac{d\varphi}{dt} \right)^2 = -\frac{e}{m} E(r) = -\frac{e}{m} U \frac{r_1 r_2}{(r_2 - r_1) r^2}, \quad r^2 \frac{d\varphi}{dt} = r_0 v_0.$$

Елиминисањем времена из горњих једначина, може се добити следећа диференцијална једначина:

$$\frac{d^2 \left(\frac{1}{r} \right)}{dt^2} + \frac{1}{r} = \left(\frac{e}{m} U \frac{r_1 r_2}{(r_2 - r_1)} \right)^2 (r_0 v_0)^2$$

Решење ове једначине, односно једначина трајекторије у сферном кондензатору, у поларним координатама, у општем случају има облик:

$$\frac{1}{r} = A \cos \varphi + B \sin \varphi + \frac{\left(\frac{e}{m} U \frac{r_1 r_2}{(r_2 - r_1)} \right)^2}{(r_0 v_0)^2}.$$

Коришћењем овог решења, услов за фокусирање млаза честица у сферном кондензатору у општем случају се може изразити преко следеће једнакости:

$$r_0(x_1 + x_2) = \operatorname{tg}\varphi(x_1x_2 - r_0^2) .$$

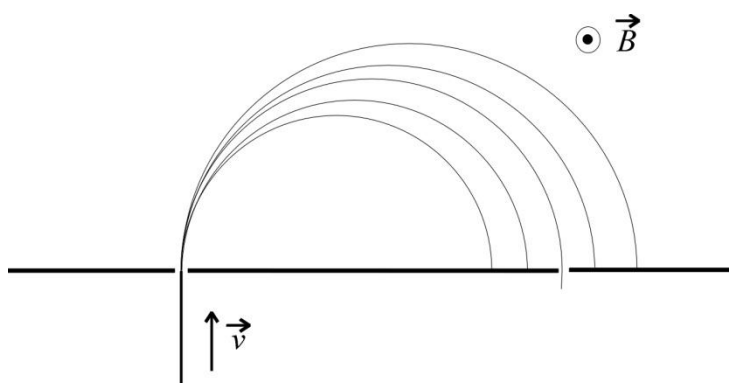
Показује се да збир углова у овој геометрији мора бити једнак 180° , односно да задовољавају Баберово правило:

$$\theta + \varphi + \gamma = \pi .$$

Ово правило намеће услов да извор електрона, центар сферног кондензатора и лик или фокус морају бити на истој правој, што је показано на слици 4.3. Само ће електрони тачно одређене упадне енергије v_0 , задовољавати горње једначине и кретати се по еквипотенцијали, те ће моћи да прођу кроз излазни отвор овог селекиционог елемента, чиме је омогућена монохроматизација упадног млаза електрона.

4.1.4. Моноенергизација попречним хомогеним магнетним пољем

Моноенергизација наелектрисаних атомских честица се може извршити и применом хомогеног магнетног поља чији је правац нормалан на раван кретања. Принцип рада ове врсте монохроматора дат је на слици 4.4.



Слика 4.4. Принцип рада монохроматора са попречним хомогеним магнетним пољем

Принцип рада овог магнетног монохроматора можемо објаснити користећи законе кретања наелектрисаних честица у магнетном пољу. У хомогеном магнетном пољу, које је нормално усмерено на вектор брзине којом се наелектрисана честица креће, делује Лоренцова сила и она приморава наелектрисане честице да се крећу по кружној путањи. Лоренцова сила у овом случају представља центрипеталну силу, тако да за кретање честице, наелектрисања q , масе m , по кружној путањи полупречника R , брзином v , можемо писати следећу једнакост:

$$qvB = \frac{mv^2}{R}.$$

Сада лако можемо изразити полупречник трајекторије по којој ће се кретати наелектрисана честица:

$$R = \frac{v}{\left(\frac{q}{m}\right)B}.$$

На основу овог израза може се закључити да ће наелектрисане атомске честице које имају већу брзину имати и трајекторије чији је полупречник већи. На основу тога је јасно да се ова конфигурација може употребити за селекцију наелектрисаних атомских честица по брзинама, односно за њихову монохроматизацију.

Такође замислимо да наелектрисане атомске честице имају исту брзину и исто наелектрисање, а да се разликују по маси. Уколико колимисан млаз оваквих честица уђе у попречно хомогено магнетно поље, доћи ће до његове просторне дисперзије. Јасно је да ће честице са већом масом имати већи полупречник путање и да ће само честице одређене масе моћи да прођу кроз отвор на монохроматору, што можемо и подешавати мењајући интензитет магнетног поља. У том смислу оваква конфигурација може бити употребљена и као **масени анализатор**. Из горњег израза се

може закључити да се при том не могу раздвојити атомске честице које имају исти однос наелектрисања и масе, q/m . У пракси често имамо такав случај, на пример у горњој конфигурацији не можемо раздвојити јон атома азота, N^+ , и двоструко јонизовани молекул азота, N_2^{++} .

Међутим, у пракси је ретка ситуација да у колимисаном млазу имамо наелектрисане атомске честице истих брзина, а различитих маса. Обично се у неком простору догоди јонизација приликом електричног пражњења, а затим се из тог простора екстрахују јони атома и/или молекула дејством јаког електричног поља. Због разлике у маси, различити јони који имају иста наелектрисања, биће различито убрзани, односно брзине након изласка из простора екстракције ће им бити различите. У случају да је екстракционо електрично поље приближно хомогено, и да је генерисано напоном између убрзавајућих електрода, U , брзине коју стичу јони можемо изразити преко једнакости:

$$qU = \frac{mv^2}{2}.$$

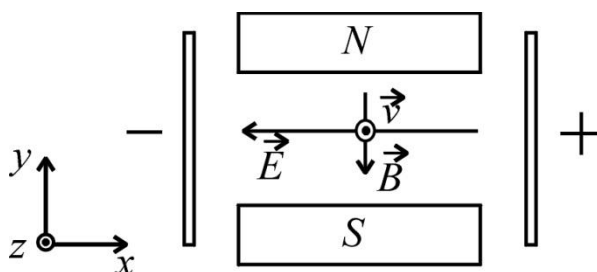
Уколико овако формиран млаз јона усмеримо у простор попречног магнетног поља, онда ће радијус путање честица зависити од убрзавајућег напона, U , и јачине магнетног поља, B , на следећи начин:

$$R = \frac{\sqrt{2U}}{\sqrt{\frac{q}{m}B}}.$$

Може се приметити да је у овој конфигурацији могуће раздвојити јоне по маси, али да ће опет бити немогуће раздвојити оне јоне чији је однос наелектрисања и масе, e/m , једнак.

4.1.5. Винов филтер

Принцип рада овог селекционог елемента се заснива на кретању наелектрисаних честица у хомогеним магнетним и електричним пољима укрштеној геометрији, где су правци ових поља међусобно нормални. Шематски приказ Виновог филтра дат не на слици 4.4. Наелектрисане честице улазе у простор селекционог елемента у правцу који је нормалан на раван, који дефинишу правци електричног и магнетног поља, нормално на раван слике.



Слика 4.5. Шематски приказ Виновог филтра

Диференцијалне једначине кретања можемо писати:

$$m \frac{d^2 x}{dt^2} = -eE + ev_z B,$$

$$m \frac{d^2 y}{dt^2} = 0,$$

$$m \frac{d^2 z}{dt^2} = -ev_x B.$$

Коначне једначине кретања се могу добити у следећем облику:

$$x = -\frac{1}{\omega_c} \left(v_{oz} - \frac{\alpha}{\omega_c} \right) \cos \omega_c t + \frac{v_{ox}}{\omega_c} \sin \omega_c t + \frac{1}{\omega_c} \left(v_{oz} - \frac{\alpha}{\omega_c} \right) + x_o,$$

$$y = v_{oy} t + y_o,$$

$$z = \frac{1}{\omega_c} \left(v_{oz} - \frac{\alpha}{\omega_c} \right) \sin \omega_c t + \frac{v_{ox}}{\omega_c} \cos \omega_c t + \frac{\alpha}{\omega_c} t + \left(z_o - \frac{v_{ox}}{\omega_c} \right).$$

где су уведене константе: $\alpha=eE/m$ и $\omega_c=eB/m$ (тзв. циклотронска учестатност), док су: v_{ox} , v_{oy} и v_{oz} компоненте вектора почетне брзине електрона.

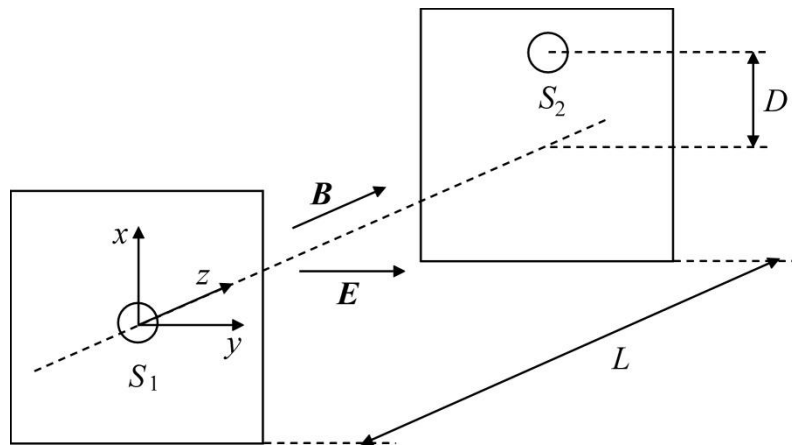
Из система диференцијалних једначина кретања видимо да за $v_{oz}=\alpha/\omega_c$ утицај електричног и магнетног поља дуж x-осе се компезује, односно резултантна сила је једнака нули. Пошто на наелектрисану честицу не делује сила ни дуж y-осе, честице са брзином $v_{oz}=\alpha/\omega_c$ ће се кретати без скретања са почетног правца у ху-равни, односно неће мењати правац и смер кретања у простору дисперзионог елемента. Како у експерименту можемо мењати јачине и електричног и магнетног поља, то значи да Винов филтер омогућава селектовање проласка наелектрисаних честица по брзини, тј. пролазе га само честице чија почетна брзина дуж z-осе задовољава горњи услов.

Такође се из коначних једначина може приметити да скретање дуж x-осе зависи од члана $\frac{1}{\omega_c} \left(v_{oz} - \frac{\alpha}{\omega_c} \right)$, односно да ће зависити од масе упадних честица које улазе у селекциони елемент. На тај начин се у Виновом филтеру може остварити просторна дисперзија честица и по маси.

Дакле, можемо закључити да Винов филтер, као селекциони елемент, може играти двоструку улогу, може служити и као енергијски монохроматор (селектор брзина), односно анализатор, а такође може служити и као масени анализатор.

4.1.6. Трохоидни електронски монохроматор

Овај дисперзиони елемент за монохроматизацију и енергијску анализу електрона користи хомогена електрична и магнетна поља у ускрштеној геометрији. Магнетно поље је усмерено дуж осе система, дуж које се креће и млаз електрона (z-оса). Хомогено електрично поље је усмерено нормално на магнетно (y-оса). На слици 4.6. је приказана геометрија трохоеидног електронског монохроматора као дисперзионог елемента.



Слика 4.6. Трохоидни електронски монохроматор

Диференцијалне једначине кретања могу се приказати у облику:

$$m \frac{d^2 x}{dt^2} = -e v_y B,$$

$$m \frac{d^2 y}{dt^2} = -e E + e v_x B, \text{ i}$$

$$m \frac{d^2 z}{dt^2} = 0.$$

Коначне једначине кретања могу се приказати у облику:

$$x = \frac{1}{\omega_c} \left(v_{ox} - \frac{\alpha}{\omega_c} \right) \sin \omega_c t + \frac{v_{oy}}{\omega_c} \cos \omega_c t + \frac{\alpha}{\omega_c} t - \frac{v_{oy}}{\omega_c} + x_o,$$

$$y = \frac{1}{\omega_c} \left(-v_{ox} + \frac{\alpha}{\omega_c} \right) \cos \omega_c t + \frac{v_{oy}}{\omega_c} \sin \omega_c t + \frac{1}{\omega_c} \left(v_{ox} - \frac{\alpha}{\omega_c} \right) + y_o,$$

$$z = v_{oz} t + z_o.$$

где су уведене константе: $\alpha = eE/m$ и $\omega_c = eB/m$ (циклотронска учестатност), док су: v_{ox} , v_{oy} и v_{oz} компоненте вектора почетне брзине електрона.

Кретање електрона у присуству магнетног поља у општем случају се одвија по хеликоиди, притом он има компоненту почетне брзине дуж правца магнетног поља, док у равни нормалној на вектор магнетног поља његова трајекторија описује кружницу. У овом селекционом елементу електрон се креће и у присуству електричног поља које је нормално на магнетно, па се кретање електрона у општем случају претвара у трохоидно. Ако се погледају коначне једначине кретања, може се запазити члан $\alpha t / \omega_c$ који описује равномерно померање центра кружнице, коју трајекторија електрона описује у ху-равни, дуж х-осе. Брзина удаљавања центра кружнице је:

$$v_d = \frac{\alpha}{\omega_c} = \frac{E}{B}.$$

Ову брзину називамо брзином дрифта електрона, и можемо видети да она зависи од јачине магнетног и електричног поља.

Да би електрон прелетео од улазног отвора S_1 до излазног отвора S_2 потребно је време:

$$t_L = \frac{L}{v_{oz}},$$

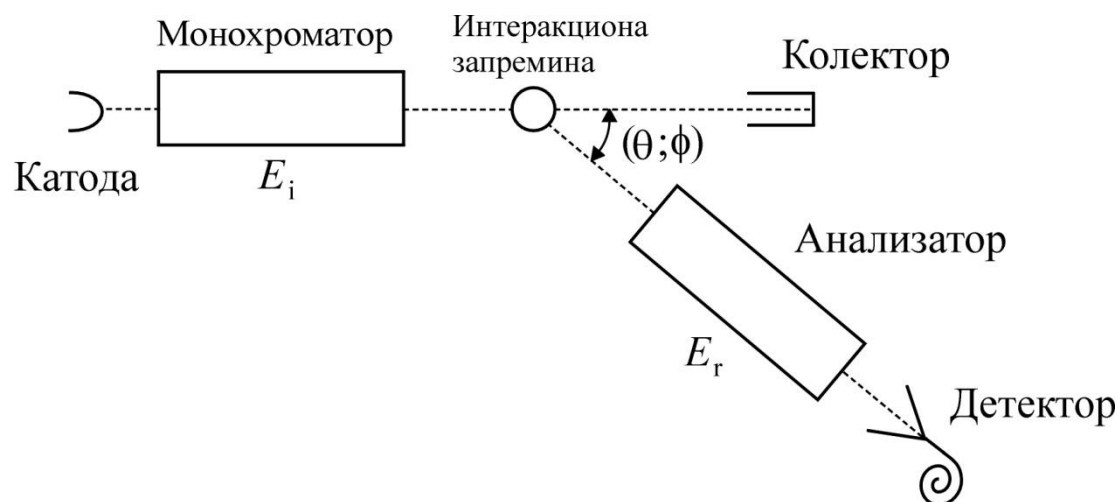
где је L -дужина селекционог елемента. Јасно је да, уколико је компонента брзине електрона дуж z -осе већа, да ће отклон путање електрона дуж x -осе услед дрефта бити мањи и обрнуто, електрони са мањом брзином дуж z -осе, имаће трајекторије са већим отклоном путање дуж x -осе. Управо ова зависност отклона од упадне брзине електрона у селекциони елемент омогућава њихову селекцију по кинетичкој енергији. Можемо закључити да ће само електрони који имају одређену компоненту брзине v_{oz} дуж z -осе проћи кроз отвор S_2 , а та брзина је једнака:

$$v_{oz} = \frac{\alpha L}{\omega_c D} = \frac{EL}{BD}.$$

Одавде видимо да у експерименту можемо подешавањем јачина електричног или магнетног поља (најчешће јачине електричног поља), селектовати електроне одређених брзина, који ће пролазити кроз овај селекциони елемент.

4.2. Електронски спектрометри

На слици 4.7. приказана је општа принципска шема електронског сударног спектрометра.



Слика 4.7. Општа принципска шема електронског сударног спектрометра

Као извор електрона најчешће се користи усијана катода из, које се термо-електронском емисијом добијају слободни електрони у вакууму. Они се извлаче из простора око катоде и електронском оптиком колимишу и убрзавају ка простору монохроматора. У монохроматору се врши њихова селекција по кинетичким енергијама и монохроматизација, при чему се у конкретној реализацији користи неки од типова монохроматора које смо навели у претходном одељку. На тај начин добијамо дефинисан млаз електрона, који је колимисан и у коме сви електрони имају готово једнаке кинетичке енергије.

Електрони се затим убрзавају у простору између монохроматора и улаза у сударну комору којом се реализује простор интеракционе запремине. То се омогућава разликом потенцијала између монохроматора, који се налази на негативном потенцијалу и сударне коморе, која се налази

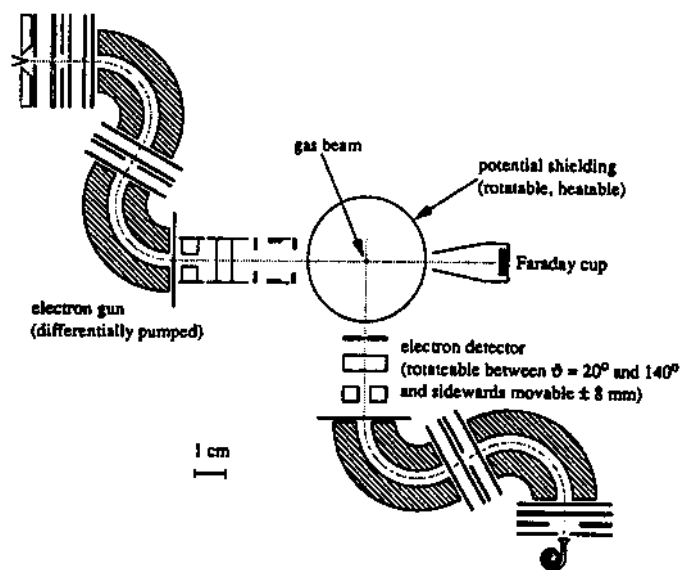
на нултом потенцијалу. Такође, геометрија сударне коморе обезбеђује одсуство електричног поља у простору интеракционе запремине. Убрзавајуће електрично поље може да се подешава и на тај начин регулише упадна енергија електрона, E_i . У сударној запремини се упушта гас атома или молекула за које се проучава процес судара. Углавном се гас у сударну комору (интеракциону запремину) уводи капиларом, при чему долази од пресецања млазева електрона и честица гаса и судара електрона са атомима или молекулима гасне мете. Друга варијанта је стационарно увођење гаса у сударну комору, али ово се ређе користи, јер се у том случају судари могу дешавати у целом простору спектрометра, чиме се смањује његова резолуција.

Приликом проласка електрона из упадног млаза кроз интеракциону запремину, један део електрона се судара са атомима или молекулима гаса, при чему долази до разних процеса расејања. Услед тога електрони из млаза могу мењати правац свог кретања, а такође и кинетичку енергију. Да би се детектовали расејани електрони из млаза, анализатор се поставља под одређеним углом у односу на упадни правац кретања млаза. На тај начин се омогућава да електрони расејани под одређеним просторним углом дођу до анализатора, чији положај и величина улазног отвора управо и одређују тај просторни угао. Такође, анализатор ће вршити и селекцију расејаних електрона по кинетичким енергијама, E_r , односно пропуштаће само електроне задате кинетичке енергија у неком уском домену. Вредност кинетичке енергије на којој анализатор пропушта расејане електроне, може да се подешава што омогућава мерења спектра њихове енергије. Електрони који су пропуштени кроз анализатор се затим детектују у детектору електрона.

На слици је приказан и колектор нерасејаних електрона који може служити за праћење стабилности струје у примарном млазу електрона, као и за одређивање апсолутне вредности струје електрона. Коришћењем

коллектора могуће је вршити и трансмисиона мерења, где се прате промене у струји примарног млаза у зависности од енергије електрона у примарном млазу.

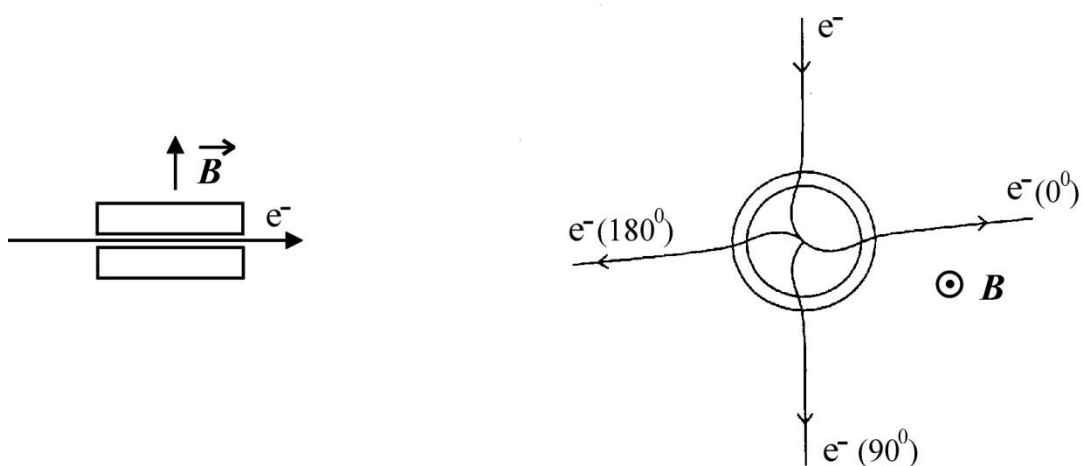
Конкретни типови спектрометара који се користе у пракси углавном се разликују према типу селекционих елемената, односно монохроматора електрона који се користе за монохроматизацију упадног млаза, а такође и анализатора за селекцију и анализу електрона по енергијама. Најчешће коришћени селекциони елементи су цилиндрични и сферни кондензатори. На слици 4.8. је приказан спектрометар, који ради постизања боље енергијске резолуције користи двоструке (тандем) цилиндричне кондензаторе и у монохроматору и анализатору.



Слика 4.8. Шема спектрометра двоструким цилиндричним кондензаторима (преузето из [8])

Одмах се примећује да је у овој конфигурацији немогуће мерити диференцијалне пресеке на 180° , јер анализатор не можемо довести у положај где се налази монохроматор. Такође је немогуће и мерење

диференцијалног пресека за еластично расејање на 0° , а мерење нееластичних пресека је такође отежано, јер се расејани електрони налазе у примарном млазу. Због тога их је тешко раздвојити, јер примарни млаз доводи до великог шума приликом мерења, када је директно усмерен ка анализатору. Међутим од стране Зубека и сарадника, осмишљен је и развијен метод који омогућава мерење диференцијалних ефективних пресека и на угловима од 0° и 180° . Метод се базира на увођењу слабог магнетног поља у области сударне запремине. Користе се Хелмколцови калемови који у простору сударне коморе, нормално на трајекторију електрона, која дуж аксијалне осе производе магнетно поља. Шематски приказ ове конфигурације је дат на слици 4.9. (лево). Услед присуства магнетног поља, путање расејаних електрона се преусмеравају, тако да електрони расејани на 180° , бивају преусмерени у неки други поларни угао где је могуће механички прићи са анализатором, и на тај начин их детектовати. Такође услед присуства магнетног поља у простору сударне запремине, електрони из примарног снопа се просторно раздвајају од електрона нееластично расејаних на 0° , што омогућава њихову лакшу детекцију и мерење диференцијалних ефективних пресека.



Слика 4.9. Шематски приказ примене Хелмколцових калемова у интеракционој запремини, која омогућава мерења на 0° и 180° степени.

4.3. Врсте спектара и модови рада електронских спектрометара

Општу геометријску шему електронских спектрометара дали смо у претходом поглављу, а сада ћемо размотрити модове рада спектрометара који омогућава мерења различитих типова енергијских и угаоних спектара:

- a) Спектри губитака енергије (ELS - Energy Loss Spectrum). Приликом мерења спектра губитака енергије, упадна енергија електрона има константну вредност, а такође је фиксан и угао у простору на коме се налази анализатор. У току снимања спектара мења се енергија при којој анализатор пропушта електроне, E_r . Она се мења у еквидистантним корацима и за сваку вредност енергије бележи се број електрона који се детектују у јединици времена. На тај начин се добија спектар губитака енергије електрона. Вредности енергија упадних електрона и угла анализатора у простору, представљају параметре ових спектара.
- b) Спектар константне резидуалне енергије (CRES - Constant Residual Energy Spectrum). При овим мерењима, енергија при којој анализатор пропушта електроне је константна, а енергија монохроматора се мења у жељеном опсегу. За сваку вредности упадне енергије електрона бележи се број детектованих електрона у јединици времена. Параметри ових спектара су вредност резидуалне енергије електрона и угао у простору на коме се налази анализатор.
- c) Спектри функције ексцитације (EFS – Excitation Function Spectrum). Приликом мерења се мењају и енергија упадних електрона и енергија на којој се детектују расејани електрони, а њихова разлика

се одржава константно. Разлика у енергији између монохроматора и анализатора се обично поставља тако да буде једнака прагу за ексцитацију одабраног електронског (и/или вибрационог стања) атомског система који се истражује. Ово омогућава снимања релативног парцијалног диференцијалног пресека за ексцитацију одабраног стања. Параметар ових спектра је угао у простору на коме се налази анализатор.

- d) Спектри угаоне расподеле (ADS – Angular Distribution Spectrum). Приликом снимања спектра угаоне расподеле разлика енергија између монохроматора и анализатора се држи константно и одговара прагу за ексцитацију одабраног испитиваног стања атомског система за које се врше мерења. Спектри се снимају у функцији угла расејаних електрона, што се остварује променом положаја анализатора, а код неких спектрометара и монохроматора.
- e) Трансмисиони спектри електрона (ETS – Electron Transmission Spectrum). У овом моду рада користи се колектор електрона на коме се мери струја примарног млаза у зависности од упадне енергије електрона. При томе се добија трансмисиони спектар електронског млаза на датој врсти испитиваног гаса. Услед разних процеса расејања, електрони се губе из примарног млаза, што се може уочити кроз смањење струје детектоване на колектору, и што указује на разне процесе расејања и пубуде. Параметри судара су одређени са вредностима упадне енергије, E_i , и резидуалне енергије, E_r .

У свим овим модовима рада, мери се број детектованих електрона у јединици времена, при чему се у еквидистантним корацима мењају енергије монохроматора и/или анализатора у зависности од конкретног мода рада. У случају мерења спектра угаоних расподела мења се и угао анализатора у простору у односу на правац упадног млаза. Сва ова мерења су релативна, а да би се омогућило добијање апсолутних вредности ефективних пресека потребно је извршити додатна мерења и нормирање. За то је неопходно мерење струје примарног млаза, односно броја електрона у примарном млазу у који у јединици времена падају на колектор, у одсуству гаса. Такође је потребно познавати и густину гасне мете, као и познавање величине интеракционе запремине. Да би се добили диференцијални ефективни пресеци по углу, потребно је познавати и просторни, односно прихватни угао анализатора. Уколико су сви ови подаци познати, онда је могуће релативне спектре добијене директним мерењем електронским спектрометром нормирати, и добити одговарајуће апсолутне ефективне пресеке за разне врсте процеса који се дешавају приликом судара електрона са испитиваним атомским системима.

5. ЕЛЕМЕНТИ ТЕОРИЈЕ АТОМСКИХ СУДАРНИХ ПРОЦЕСА

5.1. Класични модели теорије атомских судара

Најпростији модели теорије атомских сударних процеса су засновани на класичним законима расејања честице пројектила на атомима, молекулама и сложенијим атомским системима. При томе се рачунају класичне трајекторије честице пројектила, а такође и електрони у атомима и молекулама се третирају класично, где се посматрају њихове Кеплеровске трајекторије. Овакав приступ има ограничен домет и резултати које дају ови модели одговарају експериментима само у малом броју случајева, јер је природа микрочестица које учествују у овим процесима адекватно описана само квантономеханичким законима. Ипак при одређеним условима ови методи могу да се користе, како због квалитативног разумевања природе процеса, тако и за квантитативна израчунавања.

5.1.1. Класични опис еластичног расејања

Најпростији модели теорије атомских сударних процеса су засновани на класичним методама израчунавања расејања честице пројектила и ексцитације атома, молекула и сложенијих атомских система. Приликом рачунања диференцијалних пресека за еластично расејања наелектрисаних честица пројектила (најчешће електрона), користе се једначине класичне механике, пре чему се честица мете моделира као извор електричног потенцијала. Уколико је честица мете атомски јон, наелектрисања Ze , онда тај потенцијал узима прост аналитички облик облику Кулоновог потенцијала $-Ze^2/r$. Овај облик потенцијала је егзактан само када је честица мете протон или огољено атомско језгро. У свим осталим

случајевима реални физички потенцијал има само приближно облик Кулоновог потенцијала, и овакав аналитички облик потенцијала је добра апроксимација само на већим удаљеностима наелектрисане честице пројектила од атомске или молекулске мете. Физички разлог за то је што је позитивно наелектрисано језгро екранирано електронима и потенцијал се не може свести само на потенцијал једне позитивно наелектрисане честице. У случајевима сложеније атомске мете користи се развој потенцијала у ред и виши чланови у развоју су облика $-Ze^2/r^n$. Физички разлог појављивања виших чланови у развоју потенцијала интеракције се у случају атомске мете најчешће јавља као последица индукованог диполног момента и момента вишег реда услед интеракције наелектрисане честице пројектила са електронима атома.

У случају расејања на молекулима или сложенијим атомским системима, облик потенцијала може имати сложенију форму, а такође и електрично поље које они генеришу може бити различито усмерено у зависности од оријентације молекула у простору. Најпростији пример је расејање електрона на двоатомским молекулима са изразито јонском везом, који имају изражен диполни момент. На пример молекули NCl , KCl , па и троатомски молекул воде H_2O , имају изражене диполне моменте. Приликом рачунања диференцијалног пресека за расејање узима се у обзир тренутна просторна оријентација молекула, која се касније статистички усредњава по свим могућим оријентацијама честица мета, које у експериментима не можемо контролисати, изузев у случају рада са поларизованим (оријентисаним) честицама.

Да би се израчунао ефективни пресек за расејање, потребно је израчунати трајекторију честица које учествују у расејању. Како се најчешће третира расејање две честице, онда се прелази у систем центра масе, а судар се формално третира као расејање релативне честице редуковане масе на пољу центра силе који се налази у центру масе система

честица. Уколико се ради о расејању електрона на атомима или молекулама, онда се електрон може третирати као редукована честица чија је редукована маса приближно једнака његовој маси, због велике разлике у масама између електрона и атома или молекула. При томе код простијих облика потенцијала, трајекторија честице пројектила се може рачунати аналитички. У сложенијим случајевима трајекторије се не могу израчунати аналитички, па се користе нумеричке методе при њиховом рачунању.

5.1.1.1. Аналитичко рачунање трајекторија

Као што смо већ напоменули, у случају простијих облика потенцијала трајекторија честице пројектила може се рачунати аналитички. Тада треба аналитички повезати елементарну површину кроз коју пролазе честице пројектили, dS , са елементарним просторним углом на који се расејавају, $d\Omega(\theta, \varphi)$. Односно све честице које пре расејања прођу кроз елементарну површ dS , а њихов број у јединици времена озанчимо са dN , биће сигурно расејане у елементарни просторни угао $d\Omega(\theta, \varphi)$, па се може успоставити следећа релација:

$$dN = I dS = I \frac{d\sigma(\Omega)}{d\Omega} d\Omega(\theta, \varphi),$$

где је, I , упадни интензитет честица пројектила, а, $\frac{d\sigma(\Omega)}{d\Omega}$, диференцијални пресек за расејање. Одатле је лако изразити диференцијални пресек, као однос елементарне површине кроз коју пролазе честице пројектили и просторног угла на коме се расејавају:

$$\frac{d\sigma(\Omega)}{d\Omega} = \frac{dN}{I d\Omega(\theta, \varphi)} = \frac{dS}{d\Omega(\theta, \varphi)}.$$

Када је могуће аналитички одредити трајекторије честице пројектила онда се овај диференцијални пресек може одредити директно коришћењем горње једнакости.

Често облик потенцијала честице мете не зависи од азимутног угла φ , и у том случају се горњи израз може упростити. Елементарна површина, dS , кроз коју пролазе честице се може написати као $2\pi\rho\cdot d\rho$, где је ρ , параметар судара, односно најмање растојање кроз које би честица прошла да нема судара, док се елементарни просторни угао због осне симетрије може изразити само преко угла θ , као $2\pi\sin\theta\cdot d\theta$. У овом случају се диференцијални пресек може изразити као:

$$\frac{d\sigma(\Omega)}{d\Omega} = \frac{\rho\cdot d\rho}{\sin\theta\cdot d\theta}.$$

Сада се диференцијални пресек може израчунати из аналитичког решења за трајекторије уколико познајемо функцију $\rho = \rho(\theta)$.

У општем случају уколико се честица креће у пољу централне силе са потенцијалом $U(r)$, у поларним координатама се може изразити угао расејања честице пројектила, на следећи начин:

$$\theta(\rho) = \pi - 2\varphi = \pi - 2 \int_{r_0}^{\infty} \frac{\rho}{r^2} \frac{dr}{\sqrt{1 - \frac{\rho^2}{r^2} - \frac{2U(r)}{\mu v_0^2}}},$$

где је, ρ , параметар судара који представља најмање растојање на којем би честица пројектил прошла поред мете да нема поља централне силе, v_0 , почетна брзина честице, φ угао између осе симетрије и првобитног правца кретања честице (видети слику 5.1.) и, r_0 , најмање растојање између честице пројектила приликом проласка поред честице мете. Претпоставимо да је функција $\theta(\rho)$, једнозначна, монотона. У том случају функција би се могла решити по ρ , тј. тада можемо изразити функцију $\rho(\theta)$, што омогућава израчунавање диференцијалног пресека коришћењем класичног аналитичког приступа.

Пример за овакво решење и израчунавање диференцијалног пресека је Радерфорд-ов оглед, тј. расејање α -честица на језгрима атома злата. У том случају између честица делује одбојна Кулонова сила која опада са

растојањем, тј потенцијал је облика $U(r)=Z_1Z_2e^2/r$. Са повећањем сударног параметра ρ , угао расејања опада, тј. функција $\theta(\rho)$ је монотono опадајућа и једнозначна, јер за сваки сударни параметар постоји јединствена вредност угла расејања. Због тога се функција може решити по ρ , тј. тада можемо изразити функцију $\rho(\theta)$ у следећем облику:

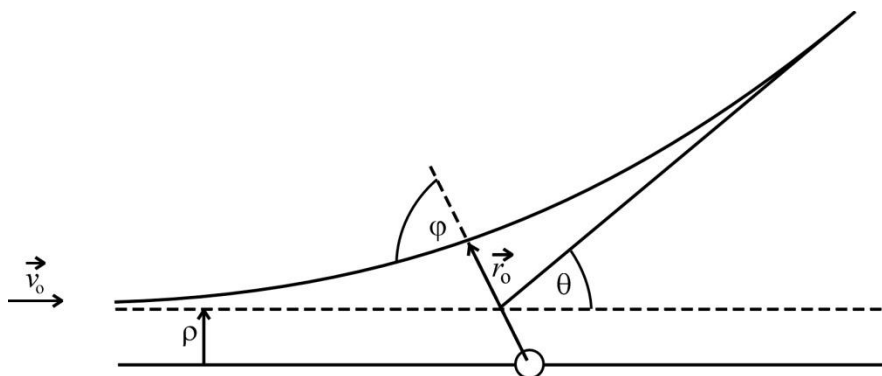
$$\rho(\theta) = (Z_1Z_2/2E) \operatorname{ctg}(\theta / 2).$$

Диференцијални пресек се притом може изразити као:

$$\frac{d\sigma(\Omega)}{d\Omega} = \frac{\rho \cdot d\rho}{\sin\theta \cdot d\theta} = \frac{Z_1^2 Z_2^2}{16E^2 \sin^4 \frac{\theta}{2}},$$

чиме добијамо познату Радефордову формулу.

Интересантно је да се овакав израз за диференцијални пресек добија и када се примени егзактан квантно-механички приступ. У овом случају се показује да је рачунање класичних трајекторија честице пројектила сасвим адекватан приступ, иако знамо да се кретање микрочестица због њихове таласне природе тачније описије као кретање таласног пакета, при чему се за разлику од класичне механике, положај и брзина честице познају само до одговарајуће неизвесности. Ипак, у овом случају се показује да је класични приступ довољан за опис расејања, и да чак даје егзактан резултат.



Слика 5.1. Шематски приказ расејања

5.1.1.2. Нумеричко рачунање трајекторија

Када је аналитичко рачунање трајекторија компликовано, користе се нумерички методи. Најчешће коришћен нумерички метод је Рунге-Кута, који се у циљу тачнијег израчунавања трајекторија користи у четвртом реду апроксимације. Притом се користе и генералисани нумерички изводи, тамо где су аналитички изводи у диференцијалним једначинама потребни. На тај начин се побољшава тачност нумеричког рачунања трајекторија. Тамо где је могуће поређење са аналитичким решењима једначина кретања показује се да је одступање реда нумеричке грешке заокруживања бројева.

Уколико се разматрају проблеми расејања код којих потенцијал интеракције има осну симетрију, односно при којима је кретање честице пројектила у току и након расејања независно од азимуталног угла φ , тада се користи директан нумерички приступ рачунања путања. За одабрану дискретну вредност параметра судара, ρ , нумерички се рачуна угао расејања, θ . Овакви резултати се затим приказују табеларно, а од префериране резолуције нумеричког израчунавања зависи бројчани интервал између изабраних вредности параметра судара за које се рачуна угао расејања. Помоћу израчунатих табелираних вредности и израза којим је дефинисан ефикасни пресек, лако је наћи диференцијални пресек за судар за било који табелирани угао расејања θ_n :

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}(\Omega_n) = \frac{\rho_n \cdot (\rho_{n+1} - \rho_n)}{\sin\theta_n \cdot (\theta_{n+1} - \theta_n)}.$$

Табелирањем ових вредности $\frac{d\sigma}{d\Omega}(\Omega_n)$, у функцији од θ_n , добија се нумеричка функција диференцијалног ефективног пресека.

Интегрална вредност пресека за расејање рачуна се преко нумеричке суме:

$$\sigma(E_i) = \sum_{n=0}^N 2\pi \frac{d\sigma}{d\Omega}(\Omega_n) \sin\theta_n (\theta_{n+1} + \theta_n),$$

Рачунање функције диференцијалног ефективног пресека, као и саме вредности интегралног пресека су резултати дати за једну вредност упадне енергије честице пројектила. Да би се добила нумеричка функција за интегрални пресек, потребно је ове поступке рачунања понављати за унапред припремљене вредности упадних енергија, чији избор зависи од опсега који је од интереса, а такође и од жељене тачности са којом одређујемо интегрални пресек.

Детаљан прорачун нумерички израчунатог интегралног пресека у функцији енергије може бити захтеван што се тиче компјутерског времена. То је нарочито случај уколико функција потенцијала честице мете нема осну симетрију. У таквим случајевима се примењују други нумерички методи засновани на случајном бирању почетних параметара судара и они спадају у Монте Карло методе рачунања диференцијалних и интегралних ефективних пресека.

5.1.2. Класични модели процеса ексцитације и јонизације

Класични модели описа атомских система су знатно лимитирани с обзиром на своју неадекватност, јер су ови системи изразито квантно-механичке природе. Због тога је применљивост описа ових система на класичан начин ограничена на неколико једноставних карактеристичних система. Применљивост се процењује на основу квантног принципа

кореспонденције, што се у случају атомских система своди на њихова стања са једним или више електрона побуђеним у високо побуђена стања са великим квантним бројевима n , и l . Тада се може користити класични опис стања ових квантних система, а самим тим и њихова интеракција са електронима као честицама пројектилима. У случају атома, оваква стања се називају Ридберговим. Интересантно је да се у плазми често дешава да се атоми налазе у високопобуђеним Ридберговим стањима, из којих сукцесивним прелазима (поштујући селекционо правило за Δl) са радијативним зрачењем прелазе у енергијски нижа стања. Судари слободних електрона са оваквим Ридберговим атомима чести су у плазми, па управо класични методи, који се могу применити у овом случају, добијају на значају. При овим сударима долази до ексцитација, већ ексцитираног атома, из Ридбергових стања датих са квантним бројевима, n_1, l_1 , у стања са квантним бројевима, n_2, l_2 . Свакако су могући и супереластични судари при којима упадни електрон повећава своју кинетичку енергију, смањујући степен ексцитације Ридберговог атома.

Навешћемо пример најпростијег Ридберговог атома са једним електроном у високо побуђеном стању. Дакле, разматраћемо атом водоника, или друге атоме са једним електроном у високо побуђеном стању, који се понашају слично атому водоника. Потенцијал интеракције електрона са остатком атомског система може се писати у облику:

$$V(r) = -\frac{Z}{r} - \frac{\alpha}{2r^4},$$

где се први члан односи на Кулонов потенцијал, а други на диполну поларизациону интеракцију електрона са атомским остатком. Најчешће се други члан може занемарити, изузев у случајевима када се третира негативни атомски јон, где онда он постаје доминантан. Када се занемари други члан, потенцијал интеракције се своди само на Кулоновску

интеракцију. У том случају су класичне путања електрона елипсе, такозване Кеплерове путање. Њихов ексцентрицитет, се може изразити преко квантних бројева n и l , као и преко ефективног наелектрисања атомског остатка (језгро и унутрашњи електрони):

$$\varepsilon = \sqrt{1 - \frac{l(l+1)}{Zn^2}}, \quad n \geq l \gg 1, Z \neq 0.$$

Кружна фреквенција орбитирања и велика полуоса се могу изразити на следећи начин:

$$\omega = -\frac{Z}{n^3};$$

$$a = -\frac{n^2}{Z}.$$

Такође се уводи и такозвана ексцентрична аномалија, u , преко једначине:

$$u - \varepsilon \sin u = \omega t + \delta.$$

У поларном координатном систему, за електрон се може писати следећа једначина трајекторије:

$$r = \frac{l^2}{Z} (1 + \varepsilon \cos \theta).$$

Једначина кретања за радијус и поларни угао је:

$$r(t) = a(1 - \varepsilon \cos u(t)),$$

$$\theta(t) = \arccos \left[\frac{1}{\varepsilon} \left(\frac{Za(1 - \varepsilon \cos u(t))}{l^2} - 1 \right) \right].$$

Једначине кретања се могу изразити и у Декартовом координатном систему:

$$x = a(\cos u - \varepsilon); y = a\sqrt{1 - \varepsilon^2} \sin u.$$

Сада се уз коришћење ових трајекторија за електрон у Ридберговом атому рачуна трансфер енергије упадног електрона који се може одиграти приликом његовог проласка у близини овог атома. Интеракције упадног електрона са високо побуђеним електроном и остатком атома се обично рачунају као Кулоновске. Такође се рачуна да се интеракција високо-побуђеног електрона са атомским остатком не мења у току судара, мада је то само апроксимација, с обзиром да се атомски остатак може знатно деформисати уколико упадни електрон има довољно велику енергију и прође у близини атомског језгра. Трансфер енергије се класификује на следећи начин: Промена енергије приликом судара једнака је разлици кинетичке енергије упадног електрона и његове кинетичке енергије након судара: $\Delta E = E_i - E_f$. Могуће су следеће ситуације: ако је трансфер енергије мањи од потенцијалне енергије Ридберговог електрона ($\Delta E < U$), урачунава се процес ексцитације или деексцитације; ако је трансфер енергије већи од потенцијалне енергије ($U < \Delta E$) урачунава се процес јонизације. При томе се рачунање трансфера енергије статистички усредњава и врши по свим путањама и свим почетним условима Ридберговог атома.

На основу ових статистичких усредњавања израчунава се диференцијални пресек за трансфер енергије, $d\sigma/d(\Delta E)$. На овом месту треба напоменути да су енергијска стања Ридберговог атома, рачуната по класичним путањама, континуална, што је у супротности са стварним квантним понашањем ових атомских система. Због тога се мора извршити адаптација између израчунатог диференцијалног пресека за пренос

енергије и квантно-механичког пресека. Квантно-механички ефективни пресек за ексцитацију се изражава преко главног квантног броја n , као:

$$\sigma(n_i \rightarrow n_f) = \int_{n_i}^{n_f} \frac{d\sigma}{dn} dn.$$

Адаптација на диференцијални пресек за трансфер енергије се врши на следећи начин:

$$\sigma(n_i \rightarrow n_f) = \int_{n_i}^{n_f} \frac{d\sigma}{d\Delta E} \frac{d\Delta E}{dn} dn.$$

Користећи Ридбергову формулу за енергијска стања атома, може се изразити трансфер енергије ΔE преко главних квантних бројева, на следећи начин:

$$\Delta E = R_e \left(\frac{1}{n_i^2} - \frac{1}{n_f^2} \right).$$

Отуда можемо израчунати промену трансфера енергије по интервалу главног квантног броја на следећи начин:

$$\frac{d\Delta E}{dn} = \frac{2R_e}{n^3}.$$

На тај начин је остварена кореспонденција. Рачунање ефективних пресека за ексцитације и јонизације Ридбергових атома на класичан начин показало се веома успешним, јер су поређења са експериментима дала добра слагања, што је потврда да се за ове системе може применити класичан приступ.

5.2. Семи -класични модели теорије атомских судара

Семикласични модели теорије атомских судара заснивају се на примени комбинованих метода, класичних и квантних, у рачунању ефективних пресека за расејање. Њихова примена је веома успешна када се рачунају ефективни пресеци за ексцитације атомских система у случајевима када је честица пројектил електрон, или наелектрисани јон. Са друге стране, примена семикласичних метода у случајевима разматрања јонизације је доста ограничена.

Приликом разматрања процеса расејања практикује се да се трајекторије упадних честица пројектила, а то су најчешће наелектрисане честице, електрони или јони, рачунају класично. Како све микрочестице имају квантну таласну природу, овакав приступ рачунању њихових трајекторија је приближан, поготово у случају електрона због њихове мале масе, док се у случају јона или неутралних атома, или тежих атомских система готово увек може применити. У случају електрона апроксимација је добра при великим брзинама, односно великим кинетичким енергијама, обзиром да је де Брољева таласна дужина електрона $\lambda = h/(mv)$. Да би имали приближно дефинисану трајекторију у односу на атомски систем са којим се судара, потребно је да та таласна дужина буде реда димензија тог атомског система, D , или мања ($\lambda \leq D$). Трајекторије електрона се рачунају у односу на врсту атомског система, честице мете, и углавном имају прост аналитички облик. Уколико се ради о неутралном атомском систему, онда су трајекторије практично праволинијске, док када се ради о позитивно или негативно наелектрисаном јону, трајекторије се рачунају на основу расејања у пољу Кулоновог потенцијала, а класичне трајекторије су сличне као у општем случају Радерфордовога расејања.

Када се примене класичне трајекторије кретања електрона или других честица пројектила, примењује се квантна теорија приликом рачунања

ефективних пресека за могуће процесе ексцитација или јонизације. При томе се утицај честице пројектила посматра као временски зависна пертурбација. Овај приступ је сада адекватнији од класичног, јер су процеси ексцитације и јонизације првенствано квантно-механички процеси. Међутим, с обзиром да се утицај честице пројектила уводи као пертурбација, и овде је уведена апроксимација, тако да и овај приступ важи под одређеним условима. Да би прорачун могао да се коректно обави коришћењем временски зависне теорије пертурбације, потребно је да утицај честице пројектила, односно потенцијал интеракције између честица пројектила и мете буде стално мањи од доминантног унутрашњег потенцијала интеракције електрона са атомским језгром који влада у унутрашњости атомског система. Општи услов применљивости теорије пертурбације је дат неједначином:

$$|V_{mn}(t)| \ll |E_n^{(0)} - E_m^{(0)}|, \quad \forall t, \quad \forall m, n,$$

где је V_{mn} , матрични елемент потенцијала пертурбације, развијен по базису својствених таласних функција непетурбованог Хамилтонијана, атомског система мете, а $E_m^{(0)}$ и $E_n^{(0)}$ његове својствене енергије, односно стања атомског система.

Да би се израчунале вероватноће за ексцитационе процесе овом методом, рачуна се таласна функција система након деловања краткотрајне временски зависне пертурбације, изазване присуством честице пројектила приликом њеног расејања на атомском систему честице мете. Узима се да је потенцијал пертурбације временски зависан ($V=V(t)$), а да се формално појављује у временском тренутку бесконачно у прошлости ($t \rightarrow -\infty$), да има максимум за ($t=0$), што физички одговара моменту када је пројектил најближи честици мете, и да нестаје у временском тренутку бесконачно у будућности ($t \rightarrow +\infty$).

Услед дејства ове временски зависне, пертурбације изазване проласком честице пројектила, атомски систем, честица мете, мења таласну функцију свог стања. Ако се атомски систем у почетном тренутку налазио у стању $\Psi_n^{(0)}$, у произвољном временском тренутку стање атомског система биће одређено таласном функцијом, која се у базису непетурбованог Хамилтонијана може приказати у облику:

$$\Psi = \sum_k a_{kn} \Psi_k^{(0)}$$

У првом реду теорије временски зависне пертурбације, коефицијенти a_{kn} се могу израчунати на следећи начин:

$$a_{kn} \approx a_{kn}^{(1)} = -\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t V_{kn} e^{i\omega_{kn}t} dt, (k \neq n)$$

Након дејства пертурбације, односно након проласка честице пројектила у временском тренутку бесконачно у будућности ($t \rightarrow +\infty$), атомски систем ће се налазити у стању:

$$\Psi = \sum_k a_{kn}(+\infty) \Psi_k^{(0)}.$$

На тај начин, вероватноћу да је систем услед дејства пертурбације прешао из почетног стања $\Psi_n^{(0)}$, које је најчешће основно, у неко од побуђених стања $\Psi_m^{(0)}$, можемо изразити преко квадрата коефицијената у развоју горње таласне функције преко стања непетурбованог Хамилтонијана:

$$\omega_{kn} = \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_{-\infty}^t V_{kn} e^{i\omega_{kn}t} dt \right|^2$$

У случају када нису испуњени услови за примену семикласичне апроксимације, мора се користити квантна теорија расејања.

5.3. Квантни модели теорије атомских судара

У експериментима који анализирају бинарне атомске сударе електрона са атомским системима (најчешће атомима или молекулима), користи се колимисан млаз електрона који имају одређену вредност кинетичке енергије. Млаз електрона представља просторно-временски ансамбл, чији сваки члан има дефинисан правац и смер кретања и исту кинетичку енергију. Такође, атомски системи, као честице мете налазе се у ограниченом и дефинисаном простору кроз који пролази упадни млаз електрона, и који се назива интеракциона запремина. На тај начин и атомски системи, као честице мете представљају просторни ансамбл, чији се сви чланови налазе у истом стању (најчешће је то основно стање испитиваних атома или молекула). Да би експеримент био у потпуности дефинисан, потребно је обезбедити и да млаз електрона има хомоген просторни интензитет, који је константан током времена, и такође да је концентрација атомских система у интеракционој запремини хомогена.

Раније смо већ објаснили да је рад са ансамблима у случају атомских судара неминовност, услед њихове квантне природе, односно због немогућности познавања трајекторија електрона приликом кретања и тачног положаја атомских система, који представљају честице мете. Због тога је немогуће контролисати појединачне сударе, односно немогуће је познавати временски тренутак и пратити појединачан судар електрона са атомским системом. Ове сударе можемо остварити само преко ансамбала и пратити их статистички. Међутим, како полазимо од тога да се сваки од припадника ансамбала налази у истом квантном стању, можемо статистичке резултате експеримента нормирати на једну честицу мете (јер познајемо њихову концентрацију и величину интеракционе запремине) и на једну честицу пројектила (јер познајемо интензитет упадног млаза) и на тај начин добити физичку величину која карактерише појединачан

судар електрона са испитиваним атомским системом. Дакле, иако нисмо у могућности да контролишемо појединачне сударе, користећи ансамбле можемо доћи до физичких величина које карактеришу појединачне сударе. Те физичке величине представљају диференцијалне и парцијалне ефектине пресеке за појединачне процесе и на основу њих се могу израчунати вероватноће да се приликом судара електрона са датим атомским системом догоди одређени процес.

Треба напоменути и да је познавање вероватноћа за одређени процес у случају атомских судара максимално могуће познавање. За разлику од судара макроскопских објеката, када познавајући почетне услове можемо унапред одредити исход судара, у случају микроскопских квантно-механичких честица, услед њихове таласне природе, максимално што можемо познавати су управо вероватноће са којима се одређени исходи судара могу догодити.

5.3.1. Диференцијални пресек и амплитуда расејања

Да би егзактно квантно-механички описали упадни млаза електрона, услед њихове таласне природе, он се мора приказати у облику равног таласа. Раван талас представља опис ансамбла млаза електрона, али и појединачног електрона припадника тог ансамбла. Упадни млаз електрона представља временско-просторни ансамбл, и адекватан опис укључује и временски и просторни део. Међутим, уколико је млаз константан у времену, можемо посматрати само његов просторни део и на тај начин у опису искључити временски део, односно посматрати процес судара као процес стационарног расејања електрона на посматраном атомском систему. Са друге стране, након судара један део електрона из упадног млаза се расејава на атомским системима, који представљају честице мете. Електрони се расејавају у свим правцима у различите просторне углове,

при чему за еластично расејани електрони имају приближно исту кинетичку енергију као и електрони из примарног млаза. Како се ова расејања стално дешавају током времена, просторни део укупне таласне функције, која представља упадни млаз електрона и одлазећи сферни млаз расејаних електрона у свим правцима, може се у граничном случају, када се посматрају велика растојања у односу на интеракциону запремину, представити преко следеће таласне функције:

$$\lim_{r \rightarrow \infty} \Psi(r, \theta, \varphi) = C(e^{ikz} + \frac{f(\theta, \varphi)}{r} e^{ikr})$$

При томе k представља таласни број ($k=2\pi/\lambda=p/\hbar$). Први члан у функцији је раван талас којим се описује упадни млаз електрона, док је други члан расејани одлазећи сферни талас у свим правцима. Функција $f(\theta, \varphi)$ представља амплитуду расејања. Одмах је јасно да амплитуда расејања мора представљати неку функцију од углова, θ, φ , тј. $f = f(\theta, \varphi)$ и да мора бити подељена са r , јер укупна амплитуда уз сферни одлазећи талас мора опадати са растојањем, како би вероватноћа налажења расејаних електрона, која је пропорционална квадрату ове укупне амплитуде расејања, опадала са квадратом растојања.

Сада ћемо ову функцију повезати са ефективним пресеком за судар на следећи начин. Елементарни ефективни диференцијални пресек за еластично расејање у просторни угао $\Delta\Omega$, чија је орјентација у простору дефинисана угловима, θ, φ , односно $\Omega = \Omega(\theta, \varphi)$, дефинисали смо као однос броја електрона, ΔN , који се у јединици време расејавају у дати просторни угао и концентрације честица мете, n , сударне запремине, V и интензитета упадног млаза I_0 :

$$\Delta\sigma(\theta, \varphi) = \frac{\Delta N(\Delta\theta, \Delta\varphi)}{I_0 n V}$$

Нормирајмо сада овај пресек по једној честици мете у интеракционој запремини, односно нека је $nV=1$. Сада можемо изразити интензитет млаза електрона преко густине електронске струје користећи први члан из горње функције као:

$$I_0 = v\Psi_i^* \Psi_i = v e^{-ikz} e^{ikz} = v,$$

где је v брзина електрона. Број електрона који се у јединици времена расејавају у дати просторни угао, ΔN , можемо такође изразити преко флукса расејаних честица кроз површину ΔS као:

$$\Delta N = v\Psi_r^* \Psi_r \Delta S = v \frac{f^*(\theta, \varphi)}{r} e^{-ikr} \frac{f(\theta, \varphi)}{r} e^{ikr} \Delta S = v \frac{f^*(\theta, \varphi)f(\theta, \varphi)}{r^2} \Delta S$$

Елементарни пресек сада можемо изразити као:

$$\Delta\sigma(\theta, \varphi) = f^*(\theta, \varphi)f(\theta, \varphi) \frac{\Delta S}{r^2} = f^*(\theta, \varphi)f(\theta, \varphi) \Delta\Omega = |f(\theta, \varphi)|^2 \Delta\Omega$$

Диференцијални ефективни пресек изражавамо на следећи начин:

$$\frac{d\sigma(\theta, \varphi)}{d\Omega} = \lim_{\Delta\Omega \rightarrow 0} \frac{\Delta\sigma(\theta, \varphi)}{\Delta\Omega} = |f(\theta, \varphi)|^2$$

Уколико се ради о неком процесу нееластичног расејања, при чему електрони имају почетни таласни број, k_i , а коначни, k_f , овај израз би се модификовао у парцијални диференцијални пресек за одређен процес нееластичног расејања и имао би облик:

$$\frac{d\sigma(\theta, \varphi)}{d\Omega} = \frac{k_f}{k_i} |f(\theta, \varphi)|^2.$$

Дакле уколико познајемо функцију $f(\theta, \varphi)$, односно амплитуду расејања, онда ћемо парцијални диференцијални пресек за сударе лако наћи преко односа таласних бројева и квадрата модула ове функције амплитуде расејања.

Проблем налажења парцијалних диференцијалних пресека смо редуковали на налажење одговарајућих амплитуда расејања. Да би нашли ове амплитуде расејања потребно је решити стационарну Шредингерову једначину за конкретан случај судара електрона са датим атомским системом. Јасно је да амплитуда расејања одговара асимптотском делу таласне функције електрона. Међутим, да би дошли до асимптотског дела таласне функције потребно је да решимо Шредингерову једначину, односно да добијемо ову функцију у целом простору, да би могли да искористимо само њен асимптотски део. У даљем тексту ћемо разматрати неке од метода решавања Шредингерове једначине у случају судара електрона са атомским системима.

5.3.2. Раздвајање променљивих у Шредингеровој једначини

Стационарну Шредингерову једначину у општем случају интеракције честица пројектил (електрон) и честица мета (атомски систем), можемо писати на следећи начин:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_e^2 - \frac{\hbar^2}{2M}\nabla_M^2 + V(\vec{r}_e, \vec{r}_M)\right]\Psi(\vec{r}_e, \vec{r}_M) = E_U\Psi(\vec{r}_e, \vec{r}_M).$$

Увек можемо из лабораторијског координатног систем прећи у систем центра масе, у коме ће се кретање пројектила свести на кретање релативне честице. На тај начин можемо писати:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2(m+M)}\nabla_C^2 - \frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2 + V(\vec{r})\right]\Psi(\vec{r}, \vec{R}_C) = E_U\Psi(\vec{r}, \vec{R}_C),$$

где је $\mu = mM/(m+M)$, редукована маса, односно маса релативне честице.

Таласна функција се сада може написати као производ таласних функција које описују кретање центра масе и таласне функције која описује стање, односно кретање, релативне честице:

$$\Psi(\vec{r}, \vec{R}_C) = \Psi(\vec{r})\Psi(\vec{R}_C)$$

Када применимо овај претпостављени облик таласне функције, горња једначина се раздваја на две једначине, прву која се односи на кретање центра масе:

$$-\frac{\hbar^2}{2(m+M)}\nabla_C^2\Psi(\vec{R}_C) = E_C\Psi(\vec{R}_C),$$

и другу која се односи на кретање релативне честице:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2 + V(\vec{r})\right]\Psi(\vec{r}) = E\Psi(\vec{r}).$$

Прва једначина описује кретање центра масе. Решење ове једначине ће бити раван талас, а својствена вредност је кинетичка енергија транслације система пројектил-мета, E_c .

Друга једначина описује кретање релативне честице масе μ у пољу потенцијалне енергије $V(\vec{r})$. Својствена вредност ове једначине, E , је енергија релативног кретања честице пројектила и честице мете. Укупна енергија система је једнака збиру ове две енергије: $E_u = E_c + E$.

Разматрајмо сада случај да је у лабораторијском систему честица пројектил имала кинетичку енергију E_p , а да је честица мете мировала. У том случају је укупна кинетичка енергија центра масе једнака:

$$E_c = mE_p/(m+M).$$

Такође се енергија кретања релативне честице у систему центра масе може приказати као разлика укупне кинетичке енергије и кинетичке енергије центра масе:

$$E = E_p - E_c = M_c E_p/(m_p + M_c).$$

Уколико је честица пројектил електрон, а честица мета атом или молекула, услед велике разлике у њиховим масама, може се закључити да ће енергија кретања релативне честице, бити приближно једнака енергији кретања електрона. Такође у том случају ће и редукована маса бити приближно једнака маси електрона, односно: $\mu = mM/(m+M) \approx m$. На основу овога можемо закључити да се у случају судара електрона са непокретним, или спорим, атомским системом проблем може приближно решавати и у лабораторијском систему, без преласка у систем центра масе.

5.3.3. Повезивање диференцијалних пресека из референтних система центра масе и лабораторијског система

У општем случају када честица пројектил није електрон, или када се брзина честице мете не може занемарити, проблем се мора решавати у систему центра масе, односно мора се решавати Шредингерова једначина за релативну честицу. Када се добије решење Шредингерове једначине за релативну честицу (5.3.2.3.), односно одговарајућа таласна функције тада се може израчунати и амплитуда расејања, као њен гранични, асимптотски облик за велика растојања. На основу овако израчунате амплитуде расејања, рачуна се диференцијални пресек за судар који представља пресек добијен у систему центра масе. Да би омогућили поређење теоријски израчунатог диференцијалног ефективног пресека за судар са експерименталним резултатима, овај диференцијални пресек се мора изразити у лабораторијском референтном систему, јер се експериментална мерења изводе управо у том референтном систему.

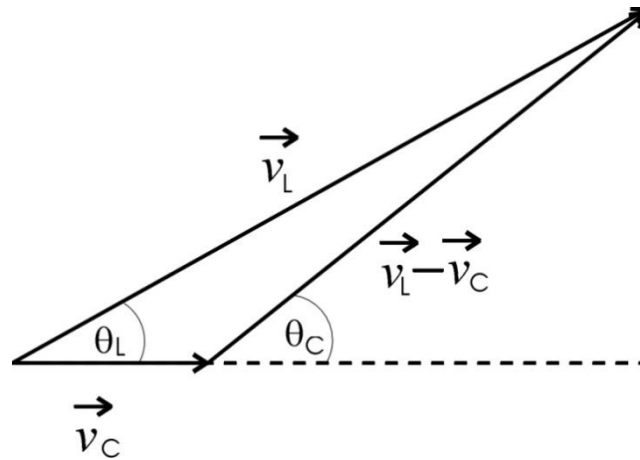
Сада ћемо успоставити кореспонденцију између диференцијалног ефективног пресека израчунатог у систему центра масе и пресека у лабораторијском референтном систему. На основу дефиниције диференцијалног пресека, број честица који се расеје у јединици времена у истом просторном углу је независан од тога из ког референтног система се посматра, па можемо писати следећу једнакост:

$$dN = I_0 n V \frac{d\sigma_C(\theta_C, \phi_C)}{d\Omega_C} d\Omega_C = I_0 n V \frac{d\sigma_L(\theta_L, \phi_L)}{d\Omega_L} d\Omega_L,$$

односно:

$$\frac{d\sigma_C(\theta_C, \phi_C)}{d\Omega_C} \sin\theta_C d\theta_C d\phi_C = \frac{d\sigma_L(\theta_L, \phi_L)}{d\Omega_L} \sin\theta_L d\theta_L d\phi_L.$$

Везу између углова у лабораторијском и систему центра масе ћемо пронаћи на основу приказивања вектора брзина у ова два система.



Слика 5.2. Вектори брзина честице пројектила и релативне честице у лабораторијском референтном систему и систему центра масе

Са слике се види да можемо писати следећу једначину:

$$V_L \sin \theta_L = (V_L - V_C) \sin \theta_C = \frac{M}{m+M} V_L \sin \theta_C$$

$$V_L \cos \theta_L = V_C + (V_L - V_C) \cos \theta_C = \frac{m}{m+M} V_L + \frac{M}{m+M} V_L \cos \theta_C$$

Сада можемо изразити тангенс угла судара у лабораторијском систему:

$$\operatorname{tg} \theta_L = \frac{M \sin \theta_C}{m + M \cos \theta_C}$$

Косинус угла θ_L можемо изразити преко тангенса:

$$\cos \theta_L = \frac{1}{\sqrt{1 + \operatorname{tg}^2 \theta_L}} = \frac{m + M \cos \theta_C}{\sqrt{m + 2mM \cos \theta_C + M^2}}$$

у случају осно симетричног потенцијала можемо писати: $\varphi_L = \varphi_C$, па коначно након диференцирања добијамо:

$$\frac{d\sigma_L(\theta_L, \varphi_L)}{d\Omega_L} = \frac{(1 + 2\frac{m}{M}\cos\theta_L + (\frac{m}{M})^2)^{3/2}}{|\frac{m}{M} + \cos\theta_L|} \frac{d\sigma_C(\theta_C, \varphi_C)}{d\Omega_C}$$

Тиме смо повезали диференцијални пресек за релативну честицу у систему центра масе са диференцијалним пресеком за честицу пројектил у лабораторијском систему. Први пресек можемо теоријски да израчунавамо, док други пресек меримо у експерименту. Овом релацијом омогућавамо поређење теоријских израчунавања и експерименталних мерења, што даље значи могућност провере ваљаност примењених теоријских модела.

5.3.4. Борнова апроксимација

Видели смо да је за добијање диференцијалног ефективног пресека довољно израчунати амплитуду расејања која представља гранични, асимптотски случај таласне функције релативне честице за велика растојања. Међутим да би дошли до могућности да израчунамо амплитуду расејања морамо решити Шредингерову једначину и добити таласну функцију релативне честице у целом простору. Ова није нимало лако, поготову ако потенцијал интеракције има компликован облик, па се често прибегава апроксимацијама. Једна од најпознатијих апроксимација у квантној теорији расејања је Борнова апроксимација, где се потенцијална енергија третира као пертурбација. Она се може тако третирати у случајевима када је кинетичка енергија атомских честица, учесника у судару, знатно већа од потенцијалне енергије њихове међусобне интеракције. Шредингерову једначину за релативну честицу у општем случају можемо писати као:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2 + V(\vec{r})\right)\Psi(\vec{r}) = E\Psi(\vec{r}).$$

У целом простору таласна функција релативне честице, која је решење Шредингерове једначине, може се записати у облику:

$$\Psi(\vec{r}) = e^{ikz} + \Phi(r, \theta, \varphi),$$

а асимптотско решење Шредингерове једначине мора имати следећи облик:

$$\lim_{r \rightarrow \infty} \Psi(r, \theta, \varphi) = C(e^{ikz} + \frac{f(\theta, \varphi)}{r} e^{ikr})$$

Ако се кинетичка енергија релативне честице одржава током судара, онда је она једнака енергији релативне честице пре почетка интеракције, односно можемо писати:

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu},$$

па можемо писати:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}(\nabla^2 + k^2)\Phi(r, \theta, \varphi) = V(\vec{r})(e^{ikz} + \Phi(r, \theta, \varphi))$$

Други члан у једначини са десне стране ћемо занемарити у односу на први, ако је у целом простору испуњен услов:

$$|\Phi(r, \theta, \varphi)| = |\Phi(\vec{r})| \ll |e^{ikz}|$$

тако да једначина постаје:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}(\nabla^2 + k^2)\Phi(\vec{r}) = V(\vec{r})e^{ikz}$$

Ову једначину решавамо као Борнову апроксимацију Шредингерове једначине.

Ова једначина по својој форми припада класи општих нехомогених линеарних диференцијалних једначина и решава се методом примене Гринове (Green) функције. Решење се тражи у облику интеграла израженог преко Гринове функције:

$$\Phi(\vec{r}) = \frac{2\mu}{\hbar^2} \int G_{\vec{r}}(\vec{r}, \vec{r}') V(\vec{r}') e^{ikz'} d^3\vec{r}'.$$

Гринова функција у случају наше једначине се може изразити преко развоја у базису својствених функција Лапласовог оператора, које имају физички смисао својствених таласних функција слободне честице са таласним бројем као својственом вредношћу, односно равних таласа:

$$\Psi_{\vec{k}'}(\vec{r}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \exp(i\vec{k}'\vec{r}).$$

Дакле, Гринову функцију можемо приказати као:

$$G_{\vec{k}}(\vec{r}, \vec{r}') = \frac{1}{(2\pi)^3} \int \frac{\exp(i(\vec{k}\vec{r} - \vec{k}'\vec{r}'))}{k^2 - k'^2} d^3\vec{k}'.$$

Може се показати да се Гринова функција након интеграције може написати у следећем облику:

$$G_{\vec{k}}(\vec{r}, \vec{r}') = \frac{1}{4\pi} \frac{\exp(ik|\vec{r} - \vec{r}'|)}{|\vec{r} - \vec{r}'|}.$$

Коначно, решење једначине добијене Борновом апроксимацијом Шредингерове једначине, можемо написати у облику:

$$\Phi(\vec{r}) = \frac{2\mu}{\hbar^2} \frac{1}{4\pi} \int \frac{\exp(ik|\vec{r} - \vec{r}'|)}{|\vec{r} - \vec{r}'|} V(\vec{r}') e^{ikz'} d^3\vec{r}',$$

Укупна таласна функција, која се састоји од упадног таласа и расејаног таласа, сада се може приказати као:

$$\Psi(\vec{r}) = e^{ikz} + \frac{2\mu}{\hbar^2} \frac{1}{4\pi} \int \frac{\exp(ik|\vec{r} - \vec{r}'|)}{|\vec{r} - \vec{r}'|} V(\vec{r}') e^{ikz'} d^3\vec{r}',$$

Физичка интерпретација добијеног решења за таласну функцију је следећа: први члан представља раван талас усмерен дуж осе судара који

представља честице пројектиле; други члан представља таласну функцију расејаног таласа у произвољној тачки \vec{r} у простору. Вредност таласне функције расејаног таласа у произвољној тачки \vec{r} је суперпозиција свих расејаних таласа који долазе из свих могућих тачака расејања, \vec{r}' , а амплитуда тих таласа је пропорционална амплитуди упадног таласа и потенцијалу на коме се упадни талас расејава у датој тачки \vec{r}' .

Са обзиром да потенцијал интеракције опада са растојањем, на великим растојањима релативне честице можемо писати:

$$\lim_{r \rightarrow \infty} |\vec{r} - \vec{r}'| = r - \cos(\vec{r}, \vec{r}')r'$$

$$\lim_{r \rightarrow \infty} |\vec{r} - \vec{r}'|^{-1} = \frac{1}{r}$$

Таласна функција се сада на великим растојањима може приказати у следећем облику:

$$\lim_{r \rightarrow \infty} \Psi(\vec{r}) = e^{ikz} - \left\{ \frac{2\mu}{\hbar^2} \frac{1}{4\pi} \int V(\vec{r}') \exp(ik(r' - \cos(\vec{r}, \vec{r}')z')) d^3\vec{r}' \right\} \frac{1}{r} \exp(ik\vec{r})$$

Отуда се види да амплитуда за расејање има следећи облик:

$$f(\theta, \varphi) = - \frac{2\mu}{\hbar^2} \frac{1}{4\pi} \int V(\vec{r}') \exp(ik(r' - \cos(\vec{r}, \vec{r}')z')) d^3\vec{r}' .$$

Односно:

$$f(\theta, \varphi) = - \frac{2\mu}{\hbar^2} \frac{1}{4\pi} \int V(\vec{r}') \exp(i\Delta\vec{K}\vec{r}') d^3\vec{r}' .$$

Где је таласни вектор $\Delta\vec{K}$ једнак разлици таласног вектора упадног млаза који је усмерен дуж z осе и таласног вектора расејаног млаза:

$$\Delta\vec{K} = \vec{k}_z - \vec{k}_r$$

У случају еластичног расејања, интензитети таласних вектора упадног и расејаног млаза су једнаки, па се интензитет таласног вектора $\Delta \vec{K}$ може изразити преко угла расејања:

$$\Delta K = 2k \sin \frac{\theta}{2}$$

Како $\hbar \Delta \vec{K}$, представља таласни број предатог импулса, горњи израз за амплитуду расејања можемо физички протумачити као суму равних таласа који долазе из свих тачака простора услед расејања упадног таласа на потенцијалу интеракције, а при чему се као ефективно растојање тих тачака узима њихова пројекција на таласни вектор предатог импулса при расејању у дати просторни угао.

Такође, у случајевима када је потенцијал интеракције сферно симетричан, тј: $V(\vec{r}) = V(r)$, и функција амплитуде расејања ће зависити само од поларног угла, тј.: $f(\theta, \varphi) = f(\theta)$.

У том случају након интеграције амплитуда за расејање постаје:

$$f(\theta, \varphi) = f(\theta) = -\frac{2\mu}{\hbar^2} \frac{1}{\Delta K} \int V(r') \sin(\Delta K r') dr'.$$

Треба приметити да у израз за амплитуду расејања, угао расејања и брзина честице пројектила, улазе само преко таласног вектора промене импулса:

$$\Delta K = 2 \frac{mv}{\hbar} \sin \frac{\theta}{2}.$$

5.3.5. Метод парцијалних таласа

У случају сферно симетричног потенцијала интеракције $V(\vec{r}) = V(r)$, погодно је применити метод парцијалних таласа за решавање Шредингерове једначине. Опште решење Шредингерове једначине:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2 + V(r)\right)\Phi(\vec{r}) = E\Phi(\vec{r}),$$

за кретање (стање) релативне честице у овом случају може да се напише у следећој форми:

$$\Phi(\vec{r}) = \Phi(r, \theta, \varphi) = \sum_{l,m} c_{lm} R_{k,l}(r) Y_{l,m}(\theta, \varphi) / r,$$

где су $R_{k,l}(r)$, радијални делови у развоју таласне функције, а $Y_{l,m}(\theta, \varphi)$, сферни делови таласне функције познати као сферни хармоници. Константе c_{lm} , се одређују из услова нормирања и граничних услова за конкретни случај стања релативне честице који се разматра.

Пошто су сферни хармоници својствене функције орбиталног момента импулса, Шредингерова једначина за радијални део таласне функције може се писати у следећем облику:

$$\left(\frac{d^2}{dr^2} - \frac{2\mu}{\hbar^2}V(r) - \frac{\hbar^2 l(l+1)}{r^2} + \hbar^2 k^2\right)R_{k,l}(r) = 0.$$

Како у сферно симетричном потенцијалу таласна функција расејања зависи само од растојања r и поларног угла θ , у горњем развоју су у овом случају присутни само сферни хармоници са квантним бројем $m=0$. Они се

могу представити преко Лежандрових (Legendre) полинома на следећи начин:

$$Y_{l,m=0}(\theta, \varphi) = \left[\frac{2l+1}{4\pi} \right]^{\frac{1}{2}} P_l(\cos\theta).$$

На тај начин таласну функцију расејања можемо приказати:

$$\Phi(r, \theta, \varphi) = \Phi(r, \theta) = \sum_l a_l R_{k,l}(r) P_l(\cos\theta).$$

Радијални део таласне функције на великим растојањима треба да се понаша на следећи начин:

$$\lim_{r \rightarrow \infty} R_{k,l}(r) = f_l(k) \frac{\exp[-i(kr-l\pi/2)]}{2ik} - f_l^*(k) \frac{\exp[i(kr-l\pi/2)]}{2ik},$$

где је $f_l(k)$, такозвана Јостова функција. Како се из горње Шредингерове једначине за радијални део види да функција $R_{k,l}(r)$ мора бити парна функција од k , одатле следи да је:

$$f_l^*(k) = f_l(-k).$$

Радијални део таласне функције на великим растојањима можемо писати у следећем облику:

$$\lim_{r \rightarrow \infty} R_{k,l}(r) = \frac{|f_l(k)|}{k} \sin(kr - l\pi/2 + \eta_l),$$

при чему је:

$$f_l(k) = f_l(-k) \exp(-2i\eta_l).$$

У односу на радијални део таласне функције за слободну честицу који има облик равног таласа ($\sin(kr-l\pi/2)$), видимо да утицај потенцијала интеракције $V(r)$ доводи до промене амплитуде тог таласа и до увођења фазног помака $\eta_l(k)$.

На тај начин се показује да се укупна таласна функција расејања може приказати у облику:

$$\Phi(r, \theta) = \sum_{l=0}^{\infty} c_l \frac{\sin(kr - l\pi/2 + \eta_l)}{kr} P_l(\cos\theta),$$

Такође, асимптотски део једначине која описује упадни раван талас и расејани талас, може преко развоја у ред да се напише у облику:

$$\lim_{r \rightarrow \infty} \Psi(r, \theta, \varphi) = C \left(e^{ikz} + \frac{f(\theta, \varphi)}{r} e^{ikr} \right) =$$

$$\sum_{l=0}^{\infty} \left\{ i^l (2l+1) \frac{\sin\left(kl - \frac{l\pi}{2}\right)}{kr} + h_l \frac{\exp(ikr)}{r} \right\} P_l(\cos\theta)$$

Повезујући ове две једначине, долазимо до коефицијената за c_l и h_l :

$$c_l = (2l+1) e^{i(\eta_l + \frac{l\pi}{2})};$$

$$h_l = \frac{1}{(2ik)} (2l+1) (e^{2i\eta_l} - 1).$$

Сада можемо изразити амплитуду расејања у облику следећег развоја у ред:

$$f(\theta) = \frac{1}{(2ik)} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) (e^{2i\eta_l} - 1) P_l(\cos\theta),$$

Диференцијални пресек за судар може се изразити преко амплитуде расејања као:

$$\frac{d\sigma(\theta, \varphi)}{d\Omega} = |f(\theta)|^2 = \frac{1}{(4k^2)} \left| \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) (e^{2i\eta_l} - 1) P_l(\cos\theta) \right|^2.$$

Укупан пресек за судар се може израчунати интеграцијом по просторном углу:

$$\sigma = \int_0^\pi \frac{d\sigma(\theta, \varphi)}{d\Omega} d\Omega = \frac{\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) |e^{2i\eta_l} - 1|^2 = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin^2(\eta_l).$$

Из једначине је јасно да се укупни пресек може представити као сума парцијалних пресека:

$$\sigma = \sum_{l=0}^{\infty} \sigma_l,$$

парцијални пресек за дати квантни број l , је дат као:

$$\sigma_l = \frac{4\pi}{k^2} (2l+1) \sin^2(\eta_l).$$

Ово представља парцијални пресек за расејање релативне честице са одређеним моментом импулса $\hbar l$. Укупни пресек, који је сума парцијалних пресека, даје расејање по свим могућим моментима импулса.

Из израза за парцијалне пресеке, видимо да је фазни помак физичка величина која одлучује о величини пресека. Већ смо разматрајући радијални део Шредингерове једначине дошли до закључка да утицај потенцијала интеракције $V(r)$ доводи до фазног помака у таласној функцији слободне честице. Проста физичка интерпретација се може дати на следећи начин. Уколико је потенцијал интеракције привлачан, честица пројектил ће у таквом потенцијалу брже да се креће, па се и њена таласна дужина ($\lambda = \hbar/k$) мања, што доводи до позитивног фазног помака ($\eta_l > 0$). На тај начин, као да се цео синусиодални талас, који предстаља талас слободне честице, услед дејства атрактивног потенцијала повлачи ка честици мете.

5.3.5.1. Еластично расејање

На основу разматрања у претходном одељку таласну функцију у општем облику можемо да пишемо као суму упадних и расејаних сферних таласа у развоју по квантном броју орбиталног момента импулса:

$$\Psi(r, \theta) = \frac{1}{(2k)} \sum_{l=0}^{\infty} (2l + 1) \left\{ (-1)^l \frac{\exp(-ikr)}{r} - S_l \frac{\exp(ikr)}{r} \right\} P_l(\cos\theta)$$

Када се таласна функција напише у овој форми, онда се разматрајући само израз у витичастој загради, коефицијент S_l , може протумачити као својствена вредност оператора трансформације који преводи систем пројектил-мета из почетног стања, у финално стање. Уколико за базисне векторе узмемо управо компоненте упадног и одлазећег сферног таласа, развијене по квантном броју орбиталног момент импулса l , онда репрезентацију оператора трансформације можемо приказати као матрицу расејања или такозвану S -матрицу.

У случају када је у процесу судара могуће само еластично расејање, S -матрица се своди на једнодимензионалну матрицу, а својствене вредности овог оператора трансформације, односно матрице расејања, могу се приказати као комплексне функције S_l . Већ смо навели да се у асимптотској области радијални део ове таласне функције (изражен преко Јостове функције $f_l(k)$) понаша на следећи начин:

$$\lim_{r \rightarrow \infty} R_{k,l}(r) = f_l(k) \frac{\exp[-i(kr - l\pi/2)]}{2ik} - f_l^*(k) \frac{\exp[i(kr - l\pi/2)]}{2ik},$$

Поређењем са горњом функцијом можемо закључити да се матрични елементи S_l матрице расејања могу изразити као:

$$S_l = \frac{f_l^*(k)}{f_l(k)}.$$

Користећи особине Лостове функције, које су наведене у претходном одељку, матрични елементи S_l матрице расејања могу изразити преко фазних помака:

$$S_l = \frac{f_l^*(k)}{f_l(k)} = \frac{f_l(-k)}{f_l(k)} = \exp(2i\eta_l).$$

Одмах је јасно да матрични елементи S -матрице расејања по модулу бити једнаки јединици: $|S_l|^2 = 1$.

Такође ћемо навести и следећу особину елемената S -матрице:

$$S_l^*(k^*) = S_l^{-1}(k).$$

У случају реалних вредности таласног вектора, ова особина се своди на особину унитарности.

Густину тока вероватноће за сваку компоненту упадног и расејаног таласа можемо рачунати помоћу следећег израза:

$$\vec{j} = -\frac{i\hbar}{2m} [\Psi^* \text{grad}\Psi - \Psi \text{grad}\Psi^*]$$

За упадни талас добијамо:

$$\vec{j}_{i,l} = -\frac{\hbar k}{\mu r^2} \vec{e}_r,$$

За расејани талас добијамо:

$$\vec{j}_{o,l} = |S_l|^2 \frac{\hbar k}{\mu r^2} \vec{e}_r.$$

С обзиром да је $|S_l|^2 = 1$, јасно је да је густина тока вероватноће једнака за упадни и расејани талас у случају чисто еластичног расејања, јер је број честица пројектила у јединици времена који иду ка мети, једнак броју еластично расејаних честица.

Сада ћемо разматрати случај када S_l , није једнако $\exp(2i\eta_l)$, односно када ни $|S_l|^2$ није једнако јединици, што физички одговара

ситуацији када поред чисто еластичног расејања у процесима судара имамо и друге ексцитационе канале расејања.

Амплитуду еластичног расејања (у случају када су могући и други, односно нееластичних канала расејања) можемо изразити, користећи израз за амплитуду расејања из претходног одељка, као:

$$f(\theta) = \frac{1}{(2ik)} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1)(S_l - 1) P_l(\cos\theta),$$

Диференцијални пресек ћемо изразити као:

$$\frac{d\sigma(\theta, \varphi)}{d\Omega} = |f(\theta)|^2 = \frac{1}{(4k^2)} \left| \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1)(S_l - 1) P_l(\cos\theta) \right|^2.$$

Одавде је:

$$\sigma = \int_0^{\pi} \frac{d\sigma(\theta, \varphi)}{d\Omega} d\Omega = \frac{\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) |S_l - 1|^2$$

Из једначине је јасно да се укупни пресек може представити као сума парцијалних пресека:

$$\sigma = \sum_{l=0}^{\infty} \sigma_l,$$

Парцијални пресек за дати квантни број l :

$$\sigma_l = \frac{\pi}{k^2} (2l+1) |S_l - 1|^2.$$

Ако поредимо ове изразе са изразима изведеним у претходном одељку, видећемо да су вредности за диференцијални пресек, парцијалне пресеке и укупни пресек поклапају у случају $S_l = \exp(2i\eta_l)$, јер то и јесте специјални случај када имамо присутно само еластично расејање. Међутим сада имамо генералније изразе за еластично расејање, који укључују и случај када су присутни и други, нееластични канали расејања приликом судара.

5.3.5.2. Нееластично расејање

Узрачунаћемо сада ефективне пресеке за нееластично расејање. При томе ћемо користити једнакост за ток вероватноће:

$$\vec{j} = -\frac{i\hbar}{2m} [\Psi^* \text{grad}\Psi - \Psi \text{grad}\Psi^*]$$

коју ћемо применити на укупну функцију расејања:

$$\Psi(r, \theta) = \frac{1}{(2k)} \sum_{l=0}^{\infty} \left\{ (-1)^l \frac{\exp(-ikr)}{r} - S_l \frac{\exp(ikr)}{r} \right\} P_l(\cos\theta)$$

Добићемо да је:

$$\vec{j} = -\frac{\pi\hbar}{\mu k} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) (1 - |S_l|^2) \vec{e}_r,$$

Укупан ток вероватноће је усмерен ка центру расејања, јер је број честица млаза који иду ка мети сада већи него број честица које излазе, за дати интензитет импулса честица, односно таласни број k . Због тога ће број честица које учествују у нееластичним сударима сада уствари бити једнак овој разлици, али са позитивним знаком, јер се ће се оне расејавати од језгра.

Ако овај млаз вероватноће поделимо са брзином честица, $v=p/\mu = \hbar k/\mu$ добићемо управо парцијални пресек за нееластичне сударе упадних честица пројектила:

$$\sigma_n = \frac{\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) (1 - |S_l|^2),$$

где је парцијални пресек за нееластично расејање једнак:

$$\sigma_{n,l} = \frac{\pi}{k^2} (2l + 1)(1 - |S_l|^2)$$

Анализирајући овај израз, можемо приметити да у случају када је $S_l = 1$, нема нееластичног расејања, међутим нема ни еластичног. Такође у случају када је $S_l = 0$, што одговара потпуној апсорпцији честица за дати квантни број угаоног момента, пресеци за еластично и нееластично расејања постају исти:

$$\sigma_{e,l} = \sigma_{n,l} = \frac{\pi}{k^2} (2l + 1) = \sigma_{o,l}.$$

Такође, за дату вредност $\sigma_{n,l}$, пресек за еластично расејање може бити у интервалу:

$$\sqrt{\sigma_{o,l}} - \sqrt{\sigma_{o,l} - \sigma_{n,l}} \leq \sigma_{e,l} \leq \sqrt{\sigma_{o,l}} + \sqrt{\sigma_{o,l} - \sigma_{n,l}}.$$

На тај начин долазимо до закључка да уколико је пресек за нееластично расејање различит од нуле, да онда мора бити различит од нуле и $\sigma_{e,l}$. Дакле, уколико постоји нееластично расејање, мора постојати и еластично.

5.3.6. Резонантно расејање

Већ смо говорили о резонантним процесима у случају судара електрона са атомским системима. Нагласили смо да је основна карактеристика резонантних процеса формирање привременог сложеног система од честице пројектила и мете, такозваног саставног стања (compound state). Оно што би се експериментално могло приметити је да постоји извесно кашњење упадних честица пројектила, које је доста веће од карактеристичног времена судара, које можемо дефинисати као: $\tau = R/v$, где су R – димензије атомског система, а v – брзина честице пројектила. Дакле ако је време кашњења упадне честице T , много веће од карактеристичног времена судара, $T \gg \tau$, можемо закључити да је дошло до резонантног процеса, приликом судара.

Да би се временски зависни резонантни процеси описали, адекватан формализам је нестационарна теорија расејања. Такође се може радити и са стационарном теоријом у оквиру које се генералише фазни помак $\eta_l(k)$, као релевантни физички параметар који одређује диференцијалне и ефективне пресеке за судар. Сада ћемо дати једноставан модел теоријског изучавања резонантних процеса на примеру потенцијалног расејања уз формирање резонанце облика (shape resonance).

Када се честица расејава на центру расејања са сферно-симетричном потенцијалном енергијом $V(r)$, радијална Шредингерова једначина за честицу за појединачан парцијални талас са орбиталним моментом импулса, чији је квантни број l , гласи:

$$\left(-\frac{d^2}{dr^2} + \left(\frac{2\mu}{\hbar^2} V(r) + \frac{l(l+1)}{r^2} \right) \right) R_{k,l}(r) = k^2 R_{k,l}(r) .$$

Из ове једначине видимо да можемо члан са потенцијалном енергијом и члан који потиче од кретања честице са одговарајућим

моментом импулса, такозвани центрифугални члан, да групишемо у ефективну потенцијалну енергију:

$$U_{\text{eff}}(r) = \frac{2\mu}{\hbar^2} V(r) + \frac{l(l+1)}{r^2},$$

чиме једнодимензионална Шредингерова једначина за радијални део таласне функције у случају парцијалног таласа са квантним бројем l , постаје:

$$\left(-\frac{d^2}{dr^2} + U_{\text{eff}}(r)\right) R_{k,l}(r) = k^2 R_{k,l}(r).$$

Ако анализирамо графички приказ ефективне потенцијалне енергије (слика 2.6.), можемо приметити формирање потенцијалне баријере за упадну честицу, али и потенцијалне јаме у којој може бити заробљена упадна честица пројектил.

Већ смо разматрали да приликом расејања на оваквом ефективном потенцијалу постоји велика вероватноћа да честица пројектил буде привремено заробљена од стране честице мете, односно да се формира резонанца. Упадна честица мора прво да савлада потенцијалну баријеру, што је квантно-механички могуће и познато као тунел ефекат. Након тунелирања, честица се налази заробљена у пољу ефективног потенцијала мете. Она не може бити трајно заробљена, јер има позитивну укупну енергију, изузев да неким радијативним процесом изгуби део своје кинетичке енергије. Из тих разлога упадна честица након одређеног времена тунелира поново кроз ефективни потенцијал, и бива расејана.

Вероватноћа налажења честице заробљене у простору честице мете има облик: $|\Psi(\vec{r}, t)|^2$, при чему је временски део ове таласне функције једнак e^{-iEt} . Како таласна функција честице није стационарна, него квази-стационарна, односно честица егзистира у том делу простора само одређено време, енергија честице се формално мора приказати као комплексан број, односно: $E = E_0 - i\Gamma/2$, где је Γ - ширина енергијског

нивоа. Период полураспада сложеног (составног) стања можемо приказати као $\tau = 1/\Gamma$.

Како је енергија повезана са таласним бројем, односно $E = \hbar^2 k^2 / 2\mu$, и таласни број мора имати комплексну вредност: $k = k_0 + ik_i$, где су, k_0 и ik_i реални бројеви и $k_0, k_i > 0$.

Такође се може показати да ће ова комплексна вредност када се стави у матрицу расејања давати да је:

$$S(k_0 + ik_i) = S^*(-k_0 + ik_i) = 0.$$

У одељку 5.3.5.1. смо навели особину елемената S-матрице:

$$S_l^*(k^*) = S_l^{-1}(k),$$

па можемо закључити да је при вредностима: $k = \pm k_0 - ik_i$ пол S-матрице.

Такође смо показали да се амплитуда расејања може изразити преко S-матрице као:

$$f_l(\theta) = \frac{1}{(2ik)} [(2l + 1)(S_l - 1)] P_l(\cos\theta),$$

а одатле можемо закључити да одговарајући парцијални ефективни пресек:

$$\sigma_l = \frac{\pi}{k^2} (2l + 1) |S_l - 1|^2.$$

има бесконачне вредности, при вредностима таласног вектора: $k = k_0 - ik_i$.

Дакле: $\sigma_l(k_0 - ik_i)$ има бесконачну вредност, при вредностима енергије: $E = \hbar^2 k^2 / 2\mu = \hbar^2 (k_0^2 - k_i^2 - 2ik_0 k_i) / 2\mu = E_0 - i\Gamma/2$.

Ефективни парцијални пресек као функција комплексног таласног броја има бесконачну вредност за: $\sigma(k^2)$. Међутим, физички мерљива величина у експерименту је само ефективни парцијални пресек у функцији реалног дела комплексног таласног броја, односно $\sigma(\text{Re}[k^2])$. Ефективни

пресек ће свуда имати коначну вредност, али у близини пола ће имати изражен максимум. Што је овај пол у комплексној равни k^2 ближи реалној оси, максимум ће бити израженији и ужи, тј. када је $\Gamma \ll 1$. Уколико је Γ велико, пол ће бити даље од реалне осе у k^2 комплексној равни, па максимум ефективног пресека неће бити изражен. Ово је физички разумљиво, јер ће тада на основу релација неодређености и време трајања резонанце бити кратко и поредиво са карактеристичним временом судара, па се појава резонанце неће разликовати од директног расејања.

5.3.6.1. Облици ефективних пресека у функцији енергије у случају резонантног расејања

Ефикасни пресек у близини резонанце има следећи облик: :

$$\sigma_1(k^2) = \frac{\pi}{k^2} (2l + 1) \left\{ \sin^2(\eta_l) - 4R_E \left[\exp(i\eta_l) \sin(\eta_l) \frac{\Gamma_0}{E - E_0 + i\frac{\Gamma_0}{2}} \right] + \frac{\Gamma_0^2}{(E - E_0)^2 + \frac{\Gamma_0^2}{4}} \right\},$$

што представља Брајт-Вигнерову формулу за расејање

Доминантни допринос пресеку даје последњи члан.

У близини пола матрични елементи S – матрице у случају расејања на потенцијалу се могу приказати у облику:

$$e^{2i\eta_l} = e^{2i\eta_l^D} + e^{2i\eta_l^R},$$

односно могу се раздвојити делови фазног помака који потичу од директног расејања, η_l^D , и од резонантног расејања, η_l^R . Део фазног помака који потиче од резонантног расејања се брзо мења у близини енергије резонанце, E_0 , по следећем закону:

$$\eta_l^R(k^2) = \eta_l^R(E) = -\arctg\left(\frac{2(E - E_0)}{\Gamma}\right)$$

Из формуле се може закључити да се вредност фазног помака нагло порасте за π приликом повећања енергије честице пројектила. Тај пораст је бржи уколико је ширина енергијског нивоа ужа, $\Gamma \ll 1$. У теоријским истраживањима се, на основу брзе промене и скока фазног помака у функцији енергије честице пројектила за вредност π , са сигурношћу може детектовати резонанца.

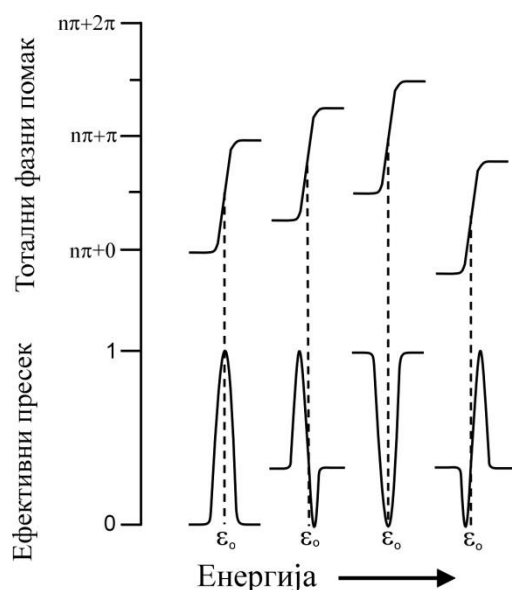
Да би се при експерименталним мерењима детектовала резонанца то се по правилу може учинити на основу наглог пораста ефективног пресека када се енергија упадног млаза честица приближи резонантној енергији, о чему смо већ говорили. Најчешће се након проласка кроз резонантну енергију ефективни пресек поново враћа на вредност пресека за директно расејање. Да би се детектовала енергијски „уска“ резонанца, потребно је имати монохроматор високе резолуције, односно добро дефинисан монохроматски млаз упадних честица пројектила. У случају лошије енергијске резолуције, веома је лако превидети постојање резонанце приликом снимања ефективног пресека.

Међутим промене ефективног пресека у функцији енергије честице пројектила могу имати и компликованије облике. Генерални опис резонантних структура у ефективном пресеку дат је Фаноовом формулом:

$$\sigma(\varepsilon) = \sigma_D + \sigma_R \frac{(q + \varepsilon)^2}{1 + \varepsilon^2},$$

где су: $q = -tg \eta_l^D$, а $\varepsilon = 2(E - E_0)/\Gamma$.

У зависности од фазног помака који потиче од директног расејања, односно тоталног фазног помака пре енергије резонанце, η_l^D , могући су различити облици ефективног пресека у функцији енергије, илустровани на слици 5.3.



Слика 5.3. Облици Фаноових профила у фунцкији фазног помака

Уколико постоје експериментална мерења, онда је могуће и на основу облика Фаноовог профила, фитовањем пресека са параметрима q и ϵ , одредити вредност резонантног дела фазног помака $\eta_l^R(E)$ и на тај начин одредити резонантну енергију:

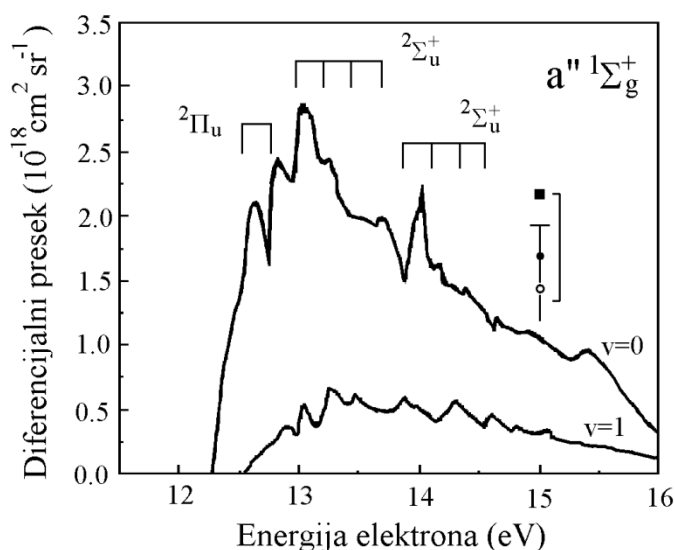
$$\eta_l(E_0) = (n + \frac{1}{2})\pi, \quad n=0,1,2,\dots$$

Такође је интересно запазити да постоје ситуације када је фазни помак већ имао вредност, $(n + \frac{1}{2})\pi$, пре проласка кроз резонанцу, да проласком кроз резонанцу ефективни пресек може имати чак и минимум. У том случају тотални фазни помак има вредност:

$$\eta_l^T = \eta_l^D + \eta_l^R = n\pi.$$

Ова теоријска предвиђања различитих облика диференцијалних пресека у функцији енергије су и експериментално потврђена у бројним

случајевима. На слици 5.4. су приказани диференцијални пресеци за побуђивање $a''\ ^1\Sigma_g^+$ електронског стања молекула азота. Ексцитација овог побуђеног стања одвија се директним механизмом побуде, али и преко бројних резонантних, привремено живећих (саставних) стања. Те резонанце су означене на основу симетрије саставног електронског стања и можемо разликовати једну $^2\Pi_u$ резонанцу и две $^2\Sigma_u^+$ резонанце, што је означено на слици. Пошто је у питању молекул, свака од ових резонанци, односно свако од ових резонантних електронских стања има и своје вибрационе нивое, што је на енергијској скали приказано са више енергијских положаја, за исто резонантно стање.



Слика 5.4. Диференцијални пресек за побуђивање $a''\ ^1\Sigma_g^+$ стања N_2 при расејању унапред у функцији енергије (преузето из референце [8]).

У функцији диференцијалног пресека за побуђивање $a''\ ^1\Sigma_g^+$ електронског стања молекула азота могу се приметити могућности различитих облика пресека при резонантним енергијама, које су управо теоријски предвиђене, када је конкурентно мешање директног и

резонантног механизма побуде: у случају ${}^2\Pi_u$ резонанце диференцијални пресек је скоро на максимуму, па је тотални фазни помак близу вредности $(n + \frac{1}{2})\pi$; у случају прве ${}^2\Sigma_u^+$ резонанце диференцијални пресек има превој, јер је тотални фазни помак је између вредности $n\pi$ и $(n + \frac{1}{2})\pi$, док у случају друге ${}^2\Sigma_u^+$ резонанце диференцијални пресек има минимум баш на енергији резонанце, а тотални фазни помак управо има вредности $n\pi$.

5.3.6.2. Облици ефективних диференцијалних пресека у функцији угла у случају резонантног расејања

У неким случајевима се може предвидети аналитички облик зависности диференцијалног пресека од угла расејања, када су у питању сферно симетричне атомске мете. Потребно је познавати симетрију симетрија почетног електронског стања, симетрију резонантног (саставног) стања и симетрију финалног стања. При томе се занемарује допринос директног расејања, чији је пресек за судар најчешће за ред величине мањи од резонантног. Такође, претпоставља се да нема других резонантних (саставних) стања у близини енергије резонантног стања које се разматра.

Стања упадних и расејаних електрона описију се равним таласом и развијају се по базису сферних хармоника. Показује се да се угаона зависност диференцијалног пресека може аналитички приказати преко развоја у Лежандрове (Легендре) полиноме у следећем облику:

$$W(\theta) = \sum_k A_k P_k(\cos\theta)$$

Коефицијенти развоја по Лежандровим полиномима, A_k , зависе од симетрије почетног, резонантног и финалног стања атомског система, као и од симетрије парцијалних таласа по којима се развија функција стања

електрона који учествују у расејању. Метод одређивања аналитичког облика диференцијалног пресека по углу такође се може применити и у случају мањих двоатомских молекула, чији се ефективни потенцијали могу приближно сматрати сферно-симетричним. При томе се занемарује ротација молекула, односно молекул се третира као непокретан, што је добра апроксимација ако је време судара, односно живота резонантног (саставног) стања, краће од периода ротације молекула.

У случајевима расејања електрона на атомима, или у случају расејања на малим двоатомским молекулима, који припадају групама симетрије D_{∞} и C_{∞} , коефицијенти у развоју по Лежандровим полиномима могу се написати у следећем облику:

$$A_k = \sum_{l,m} A(l,m) = \sum_{l,m} (2k+1) \begin{pmatrix} l & l & k \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}^2 \left\{ \begin{pmatrix} l & l & k \\ m-m & 0 \end{pmatrix}^2 + p \begin{pmatrix} l & l & k \\ m-m-2m \end{pmatrix}^2 \right\},$$

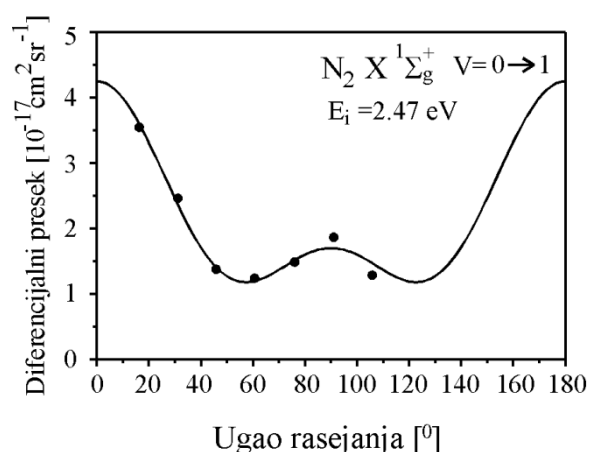
где је, p , коефицијент који зависи од типа резонанце, док су, $\begin{pmatrix} l_1 & l_2 & l_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix}$, ознаке Вигнерових (Wigner) 3-ј симбола.

Анализом горњег израза, може се доћи до закључка да ће у случају када у судару учествује само један парцијални талас, аналитичка угаона зависност диференцијалног пресека бити симетрична око угла 90° . То се може показати на основу чињенице да су коефицијенти A_k различити од нуле само за парне вредности индекса k . На тај начин су непарни Лежандрови полиноми искључени из горњег развоја, а они би допринели асиметрији у односу на угао 90° . Међутим, асиметрија се може појавити када је у процес расејања укључен бар још један парцијални талас. Тада може доћи до интерференције парцијалних таласа који учествују у процесу расејања, што управо може довести део асиметрије. Друге могућности које могу довести до асиметрије су када директан допринос

процесу расејања није занемарљив, а такође ако у истом енергијском опсегу постоји могућност формирања још једног резонантног (саставног) стања.

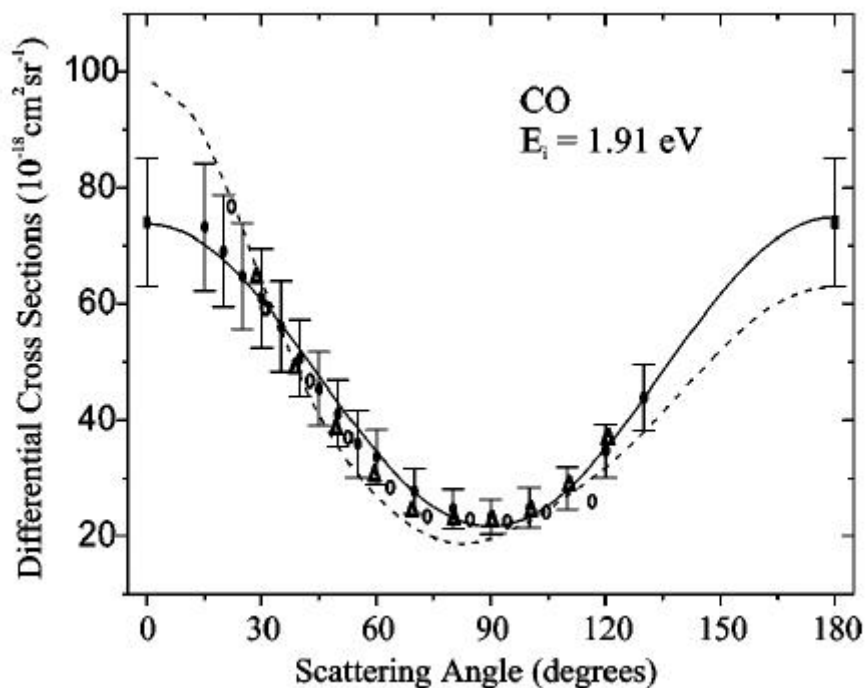
Пример расејања у коме учествује само један парцијални талас је резонанца облика (shape resonance) при вибрационом побуђивању молекула азота. Основно стање молекула азота има симетрију $X^1\Sigma_g^+$. Група симетрије овог хомонуклеарног молекула је $D_{\infty h}$, а симетрија резонантног стања је $^2\Pi_g$.

На основу анализе горње релације за дате типове симетрије закључује се да једини парцијални талас који може учествовати у расејању је управо d-парцијални талас. То онда имплицира да диференцијални ефективни пресек за расејање електрона при вибрационом побуђивању молекула N_2 мора бити симетричан у односу на угао од 90° , а такође да на том углу мора постојати и локални максимум. То је и потврђено у експерименталним мерењима, што је приказано на слици 5.5.



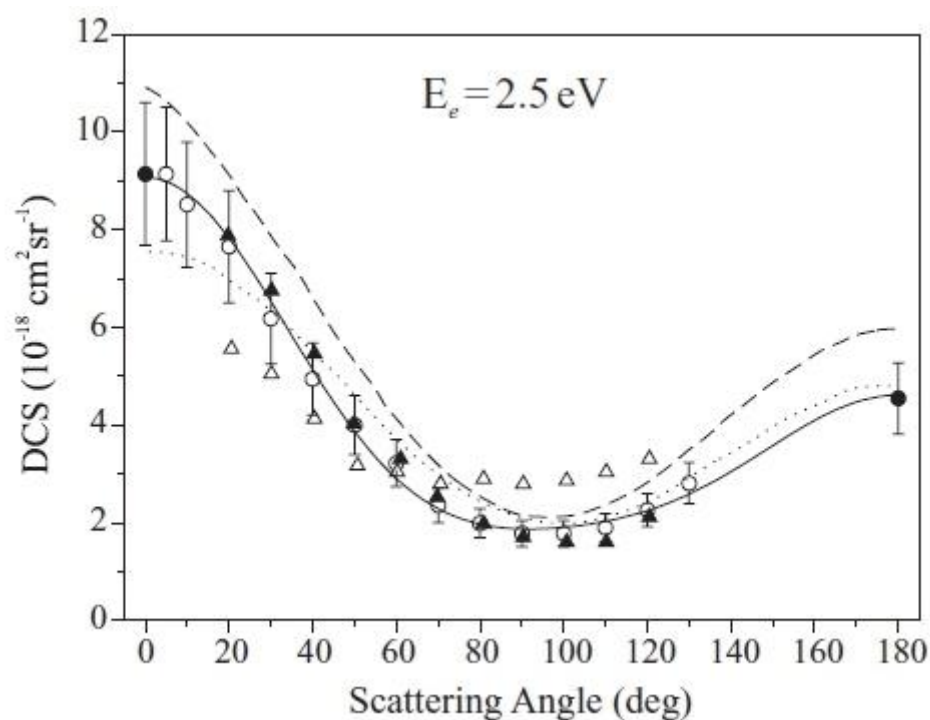
Слика 5.5. Експериментална мерења диференцијалних пресека за вибрационо побуђивање молекула N_2 у области $^2\Pi_g$ резонанце и теоријски предвиђена зависност (преузето из [8]).

Други пример је молекул угљен-моноксида који као хетеронуклеарни молекул припада групи симетрије $C_{\infty v}$. Симетрија његовог основног електронског стања је $X^1\Sigma^+$, а симетрија резонантног стања је $^2\Pi$. Анализом горњег израза за коефицијенте (5.3.6.2.1.) закључује се да поред d-парцијалног таласа у процесу расејања може учествовати и p-парцијални талас. То може довести до асиметрије у угаоној зависности диференцијалног пресека. Експериментална мерења за вибрационо побуђивање молекула CO, која су приказана на слици 5.3.6.2.1., показала су одсуство асиметрије. То указује да се у случају молекула CO у расејању ипак појављује само један парцијални талас, а одсуство локалног минимума на 90° , доводи до закључка да само p- парцијални талас учествује у резонантном процесу ексцитације.



Слика 5.6. Експериментална мерења диференцијалних пресека за вибрационо побуђивање молекула CO у области $^2\Pi$ резонанце и теоријски предвиђене зависности (преузето из [9]).

Трећи пример је резонантно вибрационо побуђивање молекула водоника. Молекул се налази у основном стању чија је симетрија $X \ ^1\Sigma_g^+$. Група симетрије овог хомонуклеарног молекула је $D_{\infty h}$, а симетрија резонантног стања је $^2\Sigma_u^+$. Анализом једначине (5.3.6.2.1.) закључује се да у расејању могу учествовати р-парцијални таласи, али и други. Мерења у случају резонантног вибрационог побуђивања молекула H_2 , су приказана на слици 5.3.6.2.3. Оно што се може приметити је управо постојање асиметрије у облику зависности диференцијалног пресека од угла расејања.



Слика 5.7. Експериментална мерења диференцијалних пресека за вибрационо побуђивање молекула H_2 у области $^2\Sigma_u^+$ резонанце и теоријски предвиђене зависности (преузето из [10]).

Локални минимум на углу од 90° указује да је у овом случају доминанто расејање преко р-парцијалног таласа, док постојање мале асиметрије указује на благи допринос још неког парцијалног таласа у процесу расејања, који у интерференцији са р-парцијалним таласом управо и доводи до ове асиметрије.

Литература:

1. Петар В. Грујић, Увод у теорију судара електрона са атомима и молекулима, Научна књига, Београд 1994.
2. Д. Белић и М. В. Курепа, Моноенергизација и енергијска анализа млазева електрона ниских и средњих енергија, Електрон – сто година од открића, свеска трећа, Млазеви слободних електрона, Завод за уџбенике и наставна средства, Београд, 1997.
3. Козлов Игорь Гордевич, Методы энергетического анализа электронных потоков, Атомиздат, Москва, 1971.
4. L.A.Artisimovich and S.Yu. Lukzanov, Motion of charged particles in electric and magnetic fields, Mir Publishers, Moscow, 1980.
5. Милан Курепа, Електронска и јонска оптика, Научна књига, Београд, 1981.
6. L.D. Landau and E.M. Lifshicz, Quantum mechanics, Pergamon press, U.K. Bristol, 1965.
7. Љубомир Новаковић, Квантна теоријска физика, Научна књига, Београд, 1991.
8. Горан Б. Попарић, Побуђивање вибрационих нивоа валентних и ридбергових стања молекула азота и угљен-мооксида електронима, Докторска дисертација, Универзитет у Београду, Физички факултет, Београд, 2001.
9. G. V. Poparić, M. D. Vikić and D. S. Belić, Resonant vibrational excitation of CO by low-energy electrons, PHYSICAL REVIEW A 73, 062713 2006.
10. G. V. Poparić, M. M. Ristić and D. S. Belić, Resonant vibrational excitation of H₂ by electron impact: Full-range differential cross sections, PHYSICAL REVIEW A 82, 012706 (2010)

ISBN: 978-86-84539-24-5