

TEORIJSKI METODI OPISIVANJA ATOMSKIH SUDARNIH
PROCESA RELEVANTNIH U FUZIONIM ISTRAŽIVANJIMA

Dževad Belkić i Tasko Grozdanov

Institut za fiziku - Beograd

1. Uvod

Teorijska i eksperimentalna istraživanja sudarnih procesa atomskih čestica od velikog su značaja za razumevanje i opisivanje složenih fizičkih sistema kao što su: zemljina atmosfera, astrofizička plazma, gasni laseri, fuzione plazme i sl. Teorija atomskih sudara pruža predviđanja osnovnih kvantitativnih karakteristika - preseka - elementarnih procesa. Ovako dobiveni preseki, direktno ili preko konstanti brzina odvijanja reakcija (dobivenih usrednjavanjem preseka po energetske raspodelama čestica koje učestvuju u sudarima) služe kao osnovni ulazni podaci za formiranje kinetičkog modela fizičkog sistema koji se proučava. Rešavanjem kinetičkih jednačina, koje opisuju evoluciju broja i vrste elementarnih konstituenata sistema u vremenu, dobijaju se parametri fizičkog sistema kao što su: koncentracije i temperature konstituenata, veličina i vrsta zračenja i sl. U ovom predavanju će različiti teorijski metodi koji se koriste za izračunavanje preseka biti demonstrirani na primeru konkretnih procesa u konkretnom sistemu; reč je o procesima izmene naelektrisanja i jonizacije atoma vodonika u sudarima sa višestruko naelektrisanim jonima u fuzionim plazmama uređaja tipa TOKAMAK.

Da bi se ostvarila osnovna fuzionna reakcija $T(d,n)He^4$, potrebne su visoke temperature koje će omogućiti jezgrima tricijuma i deuterijuma da u sudaru savladaju odbojen kulonske sile. TOKAMAK je uređaj koji koristi toroidalno oblikovano magnetno polje da "konfinira" plazmu i na taj način svede na minimum interakciju "vruće" plazme sa zidovima kontejnera. Plazma se greje uz pomoć pro-

toka velike indukovane električne struje i dodatno, absorbovanjem energije neutralnih snopova koji se ubacuju u plazmu. Uredjaj će početi da radi kao generator energije kad ukupna energija dobivena iz nuklearnih reakcija bude veća od ukupne uložene energije. Glavna prepreka u postizanju ovoga cilja su gubici različite vrste koji potiču od plazma-procesa i atomskih procesa.

Od velikog je značaja prisustvo (u plazmi) višestruko naelektrisanih jona A^{Z+} ($A=C, N, O, Fe, Mo, Ti, Nb, V, W$; $Z_{\max}=30$) koje potiče od interakcije plazme sa zidovima. Ovi joni posle sudara sa slobodnim elektronima i neutralnom komponentom na rubu plazme formiraju pobudjena stanja koja se zračenjem deekscituju i na taj način u velikoj meri doprinose radijativnim gubicima iz sistema [1]. Osim toga, neutralni snopovi (vodonika ili deuterijuma) kojima se dodatno greje plazma, se sudaraju sa višestruko naelektrisanim jonima na obodu plazme. Na taj način se procesima izmene naelektrisanja i jonizacije:



smanjuje neutralna komponenta u snopu a samim tim i penetrabilnost snopa u centralni deo plazme gde bi on trebalo da deponuje svoju energiju. Jasno je da isti efekat imaju i procesi sudara (1.a,b) sa protonima ili deutronima ($A^{Z+} = H^+, D^+$). Napomenimo da prisustvo višestruko naelektrisanih jona u velikoj meri menja i transportne osobine plazme. Zadatak teorije atomskih sudara je da izračuna preseke za procese (1.a,b) u širokom domenu energija sudara (od reda KeV-a do reda MeV-a).

Široko govoreći, metodi koji se sada koriste u rešavanju problema izmene naelektrisanja mogu se klasificirati na sledeći način:

(i) Metodi prvog reda, kao što su Brinkman-Kramers i Prva Bornova aproksimacija. Ovi metodi posmatraju samo direktan deo reak-

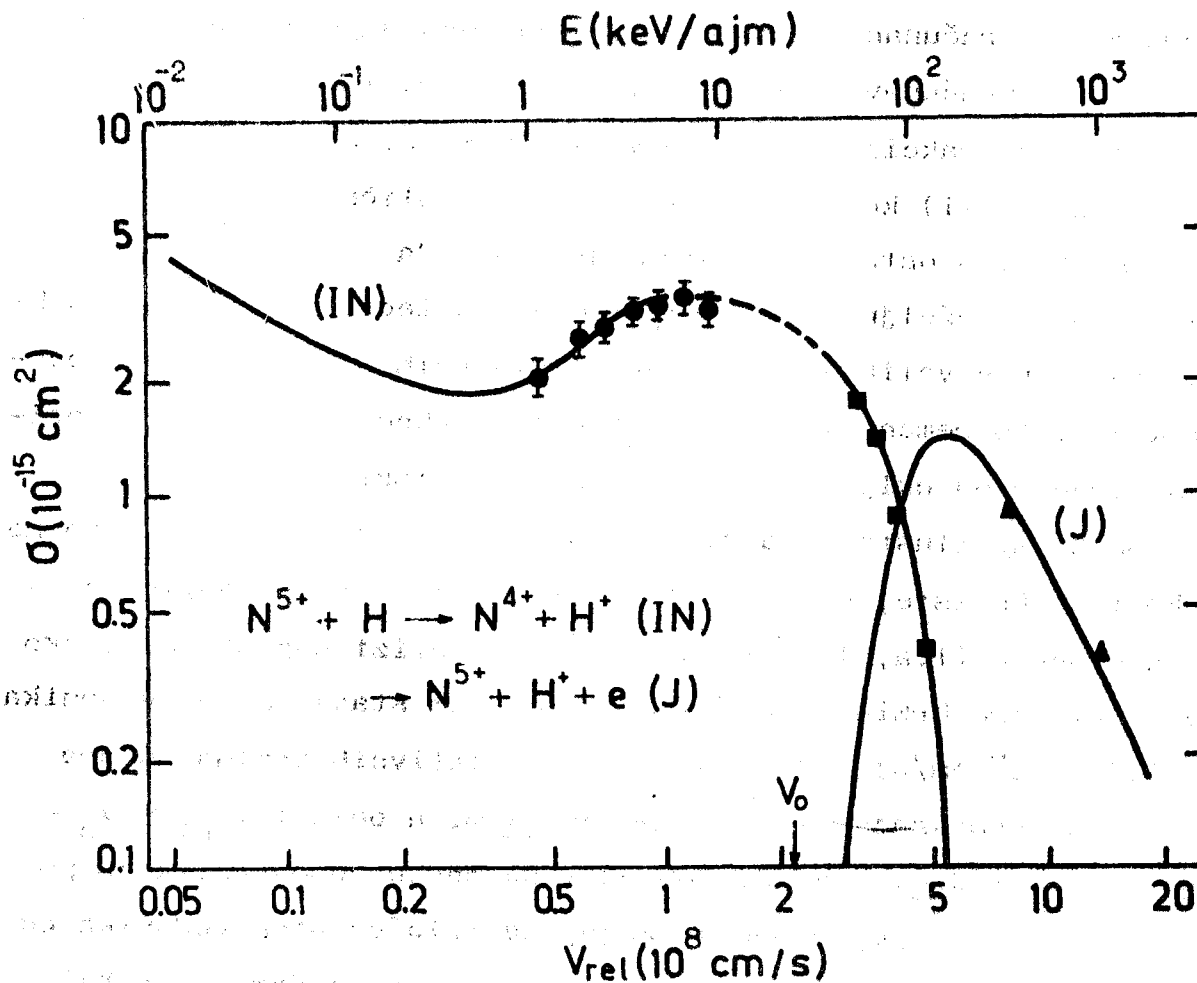
cije i ne uzimaju u obzir intermedijarna stanja. Metod bliskog sprezanja (close coupling method) i ostale aproksimacije bazirane na baznim funkcijama kao što su Metod Perturbovanih stacionarnih stanja (PSS) i Metodi razvoja po atomskim (AO) ili molekularnim (MO) orbitalama, uračunavaju u izvesnoj meri diskretna intermedijarna stanja izražavajući totalnu funkciju sistema kao linearnu kombinaciju svojstvenih funkcija mete i (iii) projektila. U praksi, međjutim, moguće je uračunati samo mali broj vezanih stanja zbog povećanja složenosti računanja do kog dolazi uključivanjem većeg broja baznih funkcija (problem rešavanja velikog broja spregnutih diferencijalnih jednačina postaje izvanredno složen). Štavište, činjenice u vezi sa atomima vodonika i heliuma pokazuju da je konvergencija Metoda bliske sprege izvanredno spora. Naročito je zapaženo da je moguće da su stanja isključena iz računanja nalaze u jekoj sprezi sa onim stanjima koja su uzeta u obzir, što dovodi do spore konvergencije ovog metoda. Ova teškoća je otežana činjenicom da su svi virtuelni neelastični kanali energetski dozvoljeni. Međjutim, relativno malo je poznato o ovoj sprezi sa intermedijarnim stanjima i detaljna ispitivanja se sada preduzimaju u tom pravcu [11]. Zajednička osobina svih aproksimacija sa diskretnim bazama je da one daju samo rezultate prvog reda na visokim energijama koji su sada konačno poznati kao neadekvatni [12]. Gornja diskusija može da se rezimira na ovaj način: ograničavajući broj baznih funkcija na nekoliko odabranih, dobija se jedan praktičan metod koji može da se dalje tretira numerički. Ovo je ekvivalentno uračunavanju beskonačnog broja prelaza između ograničenog broja stanja na način koji potpuno zanemaruje efekte prouzrokovane svim ostalim neuračunatim intermedijarnim neelastičnim procesima. Tako n.pr. jonizacija koja može da igra odlučujuću ulogu u intermedijarnoj fazi rasejanja, je potpuno zanemarena. Štaviše, pošto nije jasno kako se ovaj poslednji efekat može uključiti u uobičajene metode razvoja po bazi, moguće je da ovi metodi konvergiraju netačnim rezultatima, ukoliko uopšte konvergiraju. ii) Teorije drugog reda su oni metodi kojim

se pokušavaju uračunati kontinuumska intermedijarna stanja. Napri-
mer, druga Bornova aproksimacija, impulsna metoda, zatim metoda
izobličjenih kontinuumskih talasa (CDW) kao i aproksimacija konti-
nuumskih intermedijarnih stanja (CIS) [12] su metodi drugoga reda.
Značajna osobina ovih aproksimacija je da sve one predviđaju, za
rezonantnu izmenu naelektrisanja u osnovnoj reakciji $H^+ + H(1s) \rightarrow$

$H(1s) + H^+$, sledeće visokoenergetsko ponašanje totalnog preseka:
 $Q \approx (0.3 + \mu v) Q^{BK}$ gde je μ neki mali broj, v je brzina projektila
i Q^{BK} je Brinkman-Kramersova aproksimacija prvog reda: $Q^{BK} \approx (2^{18}/5)v^{-12}$
(τa_0^2). Ovo je u vrlo izrazitom neslaganju sa visokoenergetskim po-
našanjem preseka predviđenih teorijama prvog reda. Aproksimacija
dva-stanja Bates-McCarrol [12] daje presek koji se ponaša kao Q^{BK}
na visokim energijama, i nema razloga da se sumnja da bi se takvo
ponašanje moglo izmeniti daljim uključivanjem drugih vezanih sta-
nja. Primetimo, da iako je koeficijent μ mali u gore navedenom re-
zultatu teorija drugog reda, njegov doprinos se ne može zanemariti
na visokim nerelativističkim energijama. Član koji se ponaša kao
 v^{-11} fizički proizilazi iz dvostrukog rasejanja (o kome će više
biti reči u § 3): to je jedan efekat drugog reda koji mora da
se uračuna da bi se dobio korektan visokoenergetski granični slu-
čaj. Medjutim, metodi drugog reda koje smo gore pomenuli daju loše
rezultate na niskim energijama (ispod 50 keV u slučaju $H^+ - H$), i
nisu u stanju da dovedu do sistematskog poboljšanja. Uticaj neelas-
tičnih intermedijarnih kanala na presek za izmenu naelektrisanja
se očekuje da budu značajan na visokim energijama zbog relativne
važnosti eksitacije i jonizacije u odnosu na izmenu naelektrisanja.
Naime, kada je brzina v projektila dovoljno velika (mnogo veća
nego klasična orbitalna brzina elektrona v_0) tada su dominantni
neelastični prelazi jonizacija i eksitacija, pa pošto su svi inter-
medijarni kanali otvoreni, moguće je da bi izmena naelektrisanja
bila značajno izmenjena uključujući ova intermedijarna stanja.
Druga Bornova aproksimacija bazirana na Green-ovoj funkciji G_0 slo-
bodnog stanja (to je inače jedina verzija metoda koja je relativno

jednostavna za računanje i koja je pored toga uopšteno govoreći najkorisnija) računava beskonačan broj otvorenih kanala do na drugi red u interakciji, ali zanemaruje kompletno povratnu spregu sa početnim i (iii) konačnim stanjem. Jedna slična situacija se može susresti i u ostalim metodima drugog reda pomenutim gore. Jasno, bilo bi poželjno da se razvije jedna teorijska šema koja bi uključila efekte velikog broja intermedijarnih neelastičnih procesa, i koja istovremeno može da se tretira sukcesivnim aproksimacijama baziranim na uključivanju najvažnijih diskretnih stanja.

Da bi se ilustrovala klasifikacija različitih teorijskih metoda koji se koriste, na slici 1 su prikazani tipični oblici preseka za procese (1.a,b) u slučaju $N^{5+} + H$ kolizionog sistema. Ako sa v_0 obeležimo brzinu elektrona u osnovnom stanju atoma vodonika ($v_0 \approx 2.2 \times 10^8$ cm/s) tada ćemo oblast relativnih brzina sudara $v_{rel} < v_0$ uslovno nazvati niskoenergetskom, a oblast $v_{rel} > v_0$ - visokoenergetskom. Ove dve oblasti se međusobno razlikuju po fizičkom karakteru perturbacije kojoj je izložen atom vodonika od strane višestruko naelektrisanog jona u procesu sudara (1.a,b). Pri niskim energijama sudara perturbacija je sporo-promenljiva (adijabatska) dok je na visokim energijama ona impulsnog karaktera. Iz ovoga je jasno da će se i metodi opisivanja procesa (1.a,b) međusobno razlikovati u dvema pomenutim oblastima. Najsloženija za opisivanje je prelazna oblast ($(v_{rel} \sim v_0)$) gde se koriste različite ekstenzije i popravka metoda koji se koriste na niskim i visokim energijama. Sa slike 1 se takodje vidi da pri "sporim" sudarima dominira proces izmene naelektrisanja (1.a) dok je jonizacija (1.b) dominantna na visokim energijama (jer je predaja impulsa elektrona u atomu vodonika mnogo veća pri velikim relativnim brzinama sudara). Stoga će u oblasti niskih energija sudara biti razmotren samo proces izmene naelektrisanja (1.a).

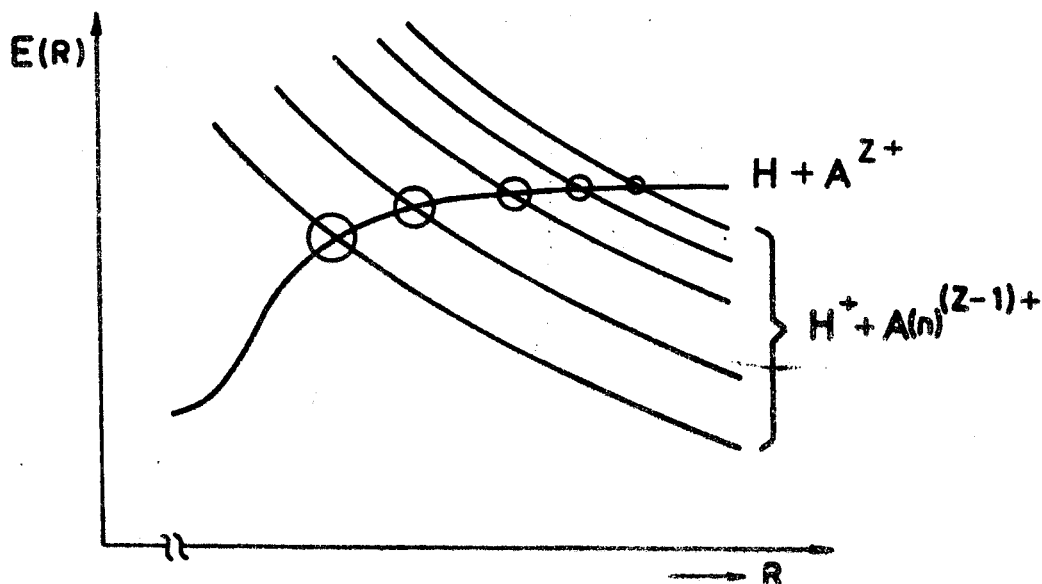


Slika 1. Presek za jednostruku izmenu naelektrisanja (IN) i jonizaciju (j) u funkciji relativne brzine (energije) sudara za kolizijski sistem $N^{5+} + H$. Linije predstavljaju teorijske rezultate (na niskim energijama PSS-metod, na visokim CTMC-metod, opisani dalje u tekstu) a tačke su eksperimentalni podaci. Slika je preuzeta iz reference [2]

2. Oblast niskih energija sudara

Najpogodniji prilaz u teoriji sporih (adijabatskih) jon-atomskih sudara je kvazi-molekularna predstava sudara. Kolizijski sistem se razmatra kao kvazi-molekul koji formiraju čestice koje učestvuju u sudaru (medjunuklearno rastojanje R se tretira kao sporo-promenljivi parametar) a elektronski prelazi su rezultat neadijabatske sprege molekularnih stanja. Molekularni sistem

$(HA)^{Z+}$ je karakterisan velikim brojem snažno spregnutih elektronskih konfiguracija (videti sliku 2) od kojih jedna asimptotski ($R \rightarrow \infty$) odgovara ulaznom kanalu $A^{Z+} + H$ procesa (1.a), dok ostale asimptotski odgovaraju mogućim izlanim kanalima $A^{(z-1)+}(n) + H$. (u kojima je jon $A^{(z-1)+}(n)$ u različitim pobudjenim stanjima n). U oblastima presecanja elektronskih molekularnih energija (slika 2) najjača je sprega adijabatskih stanja i mogući su prelazi izmedju njih (tzv. neadijabatski prelazi)



Slika 2. Šematski dijagram elektronskih molekularnih energija $E(R)$ sistema $(HA)^{Z+}$ na velikim medjunuklearnim rastojanjima R .

Polazeći u osnovi od iste, gore opisane, kvazi-molekularne predstave sudara, za izračunavanje preseka za proces (1.a) korišćeni su različiti metodi. U prvom redu to je voma precizna aproksimacija jake sprege uz korišćenje molekularnog bazisa talasnih funkcija ili tzv. metod perturbovanih stacionarnih stanja - PSS. Sa druge strane, za slučajeve kada se proces (1.a) odvija uz učešće visoko naelektrisanih jona ($Z \gg 1$) formulisan je niz modela, koji se odlikuju manjom preciznošću ali daju mogućnost donošenja opštih zaključaka o karakteru preseka (zavisnost od naelektrisanja

jona Z, relativne brzine sudara i sl.).

2.1. Metod perturbovanih stacionarnih stanja (PSS)

Ovaj metod je jedan od najefektivnijih koji se danas koriste uopšte u teoriji sporih jon-atomskih sudara (videti na primer [3]). Kao bazisne funkcije koriste se elektronske svojstvene funkcije kvazi-molekula kojeg formiraju partneri u toku sudara, i nalaze se kao rešenja svojstvenog problema

$$H(\vec{r}', R) \Psi_j(\vec{r}', R) = E_j(R) \Psi_j(\vec{r}', R) \quad (2)$$

ovde je \vec{r}' - skup svih elektronskih koordinata u molekularnom koordinatnom sistemu; R - je medjunuklearno rastojanje; $H(\vec{r}', R)$ - je elektronski hamiltonijan; $E_j(R)$ - su elektronske molekularne energije (slika 2) a $\Psi_j(\vec{r}', R)$ - talasne funkcije stacionarnih molekularnih stanja.

Pri opisivanju procesa (1.a) najčešće se koristi semiklaslična aproksimacija, tj. pretpostavlja se da se relativno kretanje jezgara može opisati metodima klasične fizike. U tom slučaju se medjunuklearno rastojanje $R(t)$ - može smatrati za zadatu funkciju vremena. Vremenski zavisna elektronska talasna funkcija se tada razvija po kompletnom skupu molekularnih funkcija

$$\Psi(\vec{r}, t) = \sum_j A_j(t) \Psi_j(\vec{r}', R) \quad (3)$$

gde je \vec{r} - skup elektronskih koordinata u laboratorijskom sistemu, a $A_j(t)$ su amplitude verovatnoća stacionarnih stanja. Zamenom razvoja (3) u vremenski zavisnu Schrödingerovu jednačinu (koristi se sistem atomskih jedinica $m_e = e = \hbar = 1$):

$$(H - i \frac{\partial}{\partial t}) \Psi(\vec{r}, t) = 0 \quad (4)$$

generiše se sistem spregnutih diferencijalnih jednačina za amplitude $A_k(t)$:

$$i \frac{d}{dt} A_k(t) = P_k(R) A_k(t) - i \sum_j \langle k | (-\frac{\partial}{\partial t})_{\vec{r}} | j \rangle A_j(t) \quad (5)$$

gde je

$$\langle k | (-\frac{\partial}{\partial t})_{\vec{r}} | j \rangle = \int \Psi_k^*(\vec{r}; R) (-\frac{\partial}{\partial t})_{\vec{r}} \Psi_j(\vec{r}; R) d\vec{r} \quad (6)$$

a delovanje operatora $(-\frac{\partial}{\partial t})_{\vec{r}}$ se uzima pri fiksiranoj veličini \vec{r} .

Neka se sistem pre sudara ($t = -\infty$) nalazio u kvantnom stanju $k=1$ (na slici 2, to bi bilo stanje koje asimptotiski teži ka $H+A^{z+}$). Tada se sistem (5) (za datu klasičnu trajektoriju $R(t)$, tj. datu vrednost modernog parametra sudara φ) rešava sa početnim uslovima

$$A_k(-\infty) = \delta_{k,1} \quad (7)$$

gde je $\delta_{k,1}$ - Kroneckerov simbol. Verovatnoća prelaza u kvantno stanje $k = n$ posle sudara (na slici 2, jedno od stanja koja asimptotiski teže ka $H^+ + A^{(z-1)+}(n)$) data je sa

$$P_n(\varphi) = |A_n(+\infty)|^2 \quad (8)$$

Parcijalni preseki se dobijaju integracijom po udarnim parametrima

$$\sigma_n = 2\pi \int_0^\infty P_n(\varphi) \varphi d\varphi \quad (9)$$

a totalni presek za proces izmene naelektrisanja (1.a) nalazi se sumiranjem po svim izlaznim kanalima

$$\sigma_{tot} = \sum_n \sigma_n \quad (10)$$

Pri praktičnoj primeni ovog metoda u razvoju (3) zadržava se konačan broj članova koji odgovaraju molekularnim stanjima za koje se pretpostavlja da učestvuju u dinamici sudara. Primena metoda zahteva, za svaki kolizijski sistem ponaosob, rešavanje svojs-

tvenog problema (2), izračunavanje matičnih elemenata (6), numeričko rešavanje sistema (5) i numeričku integraciju verovatnoća (9).

Na slici 1 su prikazani rezultati jednog ovakvog izračunavanja preseka za proces $N^{5+} + H \rightarrow N^{4+} + H^+$. Korišćen je bazis od 5 molekularnih funkcija [2].

2.2. Modeli

Glavni nedostatak PSS metoda je činjenica da on zahteva obimna izračunavanja za svaki kolizijski sistem posebno. Računi postaju naročito neekonomični u slučajevima kada u procesu (1.a) učestvuju joni velikog naelektrisanja ($z \geq 10$) jer je u dinamiku sudara uključen veliki broj molekularnih stanja. Zbog toga je, koristeći činjenicu da u problemu postoji veliki parametar $Z \gg 1$, formulisan niz modela koji u velikoj meri uspevaju da daju aproksimativne analitičke izraze za presek procesa (1.a) i to za čitave klase višestruko naelektrisanih jona.

a) Model apsorbcione sfere

U skladu sa poznatom von Neumann-Wignerovom teoremom [4] svako od presecanja energetskih nivoa molekularnih stanja iste simetrije (slika 2) predstavlja zapravo pseudo-presecanje koje se karakteriše veličinom "adijabatskog odbijanja" nivoa $\Delta(R_x)$ u tački pseudo-presecanja $R=R_x$. Landau-Zener formula [4] daje verovatnoću prelaza sistema iz jednog molekularnog stanja u drugo pri prolasku oblasti pseudo-presecanja

$$p = \exp \left[- \frac{\Delta^2(R)}{2v_r |\Delta F|} \right]_{R=R_x} \quad (11)$$

gde je v_r - radijalna brzina sudara a $\Delta F = \partial |E_1(R) - E_2(R)| / \partial R$ predstavlja razliku nagiba energetskih nivoa koja bi postojala u slučaju njihovog tačnog presecanja.

U slučaju kolizionog sistema $H + A^{z+}$, gde je $z \gg 1$ a A^{z+} je delimično ogoljen jon (poseduje elektronski ostatak), broj pseudopresecanja je ogroman (slika 2). Pretpostavljajući kontinuum tačaka pseudo-presecanja R_x i koristeći formulu (11) može se definisati kritično rastojanje R_c , takvo da je za sudare sa udarnim parametrom manjim od R_c verovatnoća izmene naelektrisanja jednaka jedinici. U okviru ovako definisanog modela apsorbcione sfere [5], presek za proces (1.a) je dat sa

$$\sigma_{as} = \pi R_c^2, \quad \frac{\pi}{2v} \frac{\Delta^2(R_c)}{|\Delta F(R_c)|} = 0.15 \quad (12)$$

gde je

$$\Delta(R) = 18.26 z^{-1/2} \exp \left[-\frac{1.324 R}{z^{1/2}} \right], \quad \Delta F(R) = (z-1)/R^2 \quad (13)$$

Analiza transcendentne jednačine (12) iz koje se određuje R_c pokazuje da za $z \gg 1$ presek približno linearno raste sa naelektrisanjem jona $\sigma_{as} \sim Z$ i logaritamski slabo zavisi od relativne brzine sudara v . Na slici 3 je prikazana z -zavisnost preseka (linija označena sa AS) za fiksiranu relativnu brzinu sudara. Jasno je na osnovu pretpostavki ovog modela (kontinuum tačaka pseudopresecanja) da on predviđa zapravo gornju granicu preseka za proces (1.a).

b) Model raspada (tunneliranja)

Ovaj model je analogan prethodnom u tom smislu što takodje ocenjuje gornju granicu veličine preseka za proces izmene naelektrisanja pri sudaru atoma vodonika i delimično ogoljenog jona A^{z+} ($z \gg 1$). Proces (1.a) se pretstavlja kao podbarijerni (tunelski) prelaz elektrona iz potencijalne jame protona u kvazi-kontinuum konačnih (pobudjenih) stanja lociranih u potencijalnoj jami jona A^{z+} . Situacija je u mnogome slična onoj koja se ima u slučaju raspada (jonizacije) atoma vodonika u prisustvu spoljašnjeg električnog polja, pa otuda i naziv modela. Perturbovano atomsko stanje sklono raspadu, može se karakteristai osim realnog i imaginarnim

delom energije koji određuje verovatnoću prelaza (tuneliranja) elektrona u jedinici vremena. Ova verovatnoća se može izračunati za fiksirano međjunuklearno rastojanje atoma H i jona A^{Z+} a zatim, integracijom po pretpostavljenim klasičnim trajektorijama i udarnim parametrima i presek za proces (1.a) u obliku [6] :

$$\sigma_r = \pi Z y(z, v) \quad (14)$$

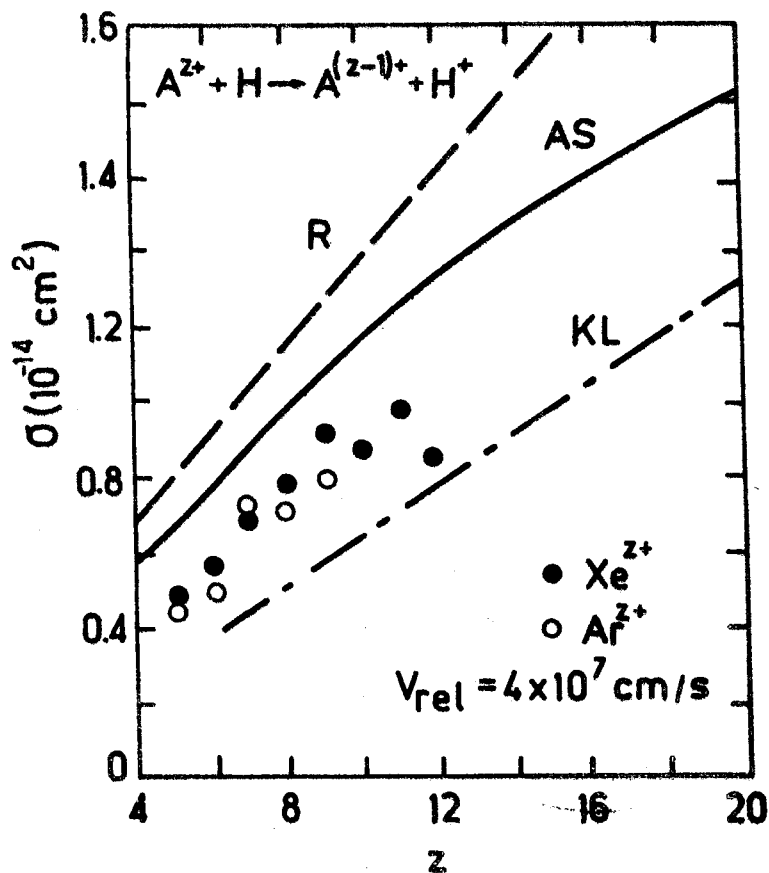
Sporo promenljiva funkcija $y(z, v)$ određuje se iz transcendentne jednačine

$$y \exp \left[-\frac{y}{\alpha} (1-f(\alpha)) - 2 \alpha f(\alpha) \right] = 0.14 \left[\frac{1-f(\alpha)}{\alpha \pi Z} \right]^{1/2} \quad (15)$$

gde je

$$f(\alpha) = \ln \frac{\sqrt{1+\alpha} + \sqrt{\alpha}}{\sqrt{\alpha(1+\alpha)}} \quad , \quad \alpha = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{y}{Z}} \quad (16)$$

Analiza pokazuje da presek u okviru ovog modela zavisi od naelektrisanja jona kao $\sigma_r \sim Z \ln Z$ a od relativne brzine sudara kao $\sigma_r \sim a - b \ln v$. Na slici 3. je prikazana z-zavisnost preseka (kriva označena sa R), koja se može uporediti sa predviđanjima drugih modela i postojećim eksperimentalnim rezultatima [7] .



Slika 3. z-zavisnost preseka za proces $H + A^{z+} \rightarrow H^+ + A^{(z-1)+}$. AS - model apsorbcione sfere; kriva R - model raspada; kriva KL - klasičan model. Eksperimentalni rezultati [7] su za Xe^{z+} (●) i za Ar^{z+} (○). Relativna brzina sudara iznosi $v = 4 \times 10^7 \text{ cm/s}$.

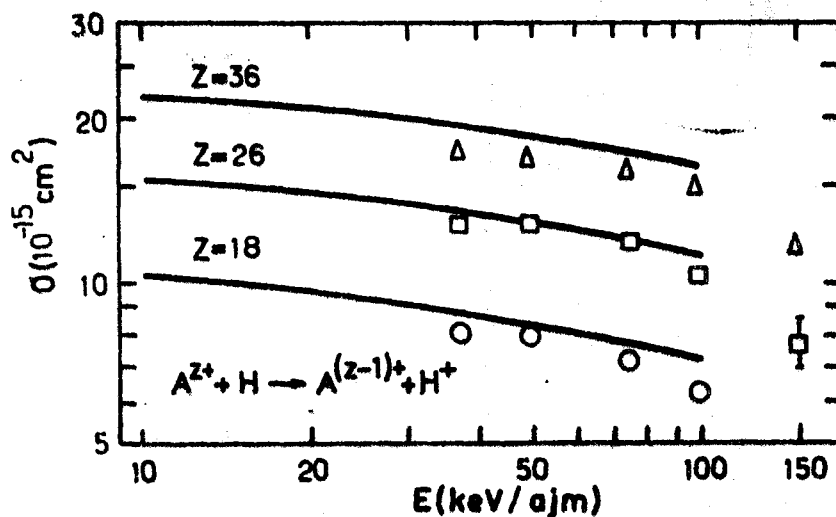
c) Klasičan model

Ovaj model je primenljiv za relativne brzine sudara $v \lesssim v_0$ (gornji deo niskocenergetske oblasti) i odnosi se na procese (1.a) u kojima učestvuju potpuno ogoljeni joni A^{z+} ($z \gg 1$). Kvazi-molekul ovakvog, jedno-elektronskog sistema, odlikuje se odredjenim specifičnostima. Naime, gustina tačaka pseudo-presecanja se povećava ka manjim medjunuklearnim rastojanjima R, tako da većina pseudo-presecanja koja su aktivna u razmatranom domenu energija sudara leži u oblasti $R < R_0$, gde su dozvoljeni nadbarijerni prelazi elektrona.

Kritično rastojanje R_0 određuje se iz uslova nestajanja potencijalne barijere za kretanje elektrona u polju protona i potpuno ogoljenog jona. U oblasti $R > R_0$ postoji određeni broj pseudo-presecanja koji odgovara podbarijernim prelazima elektrona. Međutim, oni su neefikasni pri razmatranim relativnim brzinama sudara i klasičan model ih zanemaruje.

Dakle pri $R < R_0$ elektron se kreće u zajedničkoj potencijalnoj jami protona i jona, i obzirom da je $z \gg 1$ veći deo vremena provodi u okolini jona, tako da pri razletanju čestica sa velikom verovatnoćom ostaje vezan za jon. Tada se u prvoj aproksimaciji za kritično rastojanje i presek nalazi [8] :

$$R_0 = 2 \sqrt{2Z-1} \quad , \quad \sigma_{ke} = \pi R_0^2 = 4\pi (2Z-1) \quad (17)$$



Slika 4. Presek za zahvat elektrona na Ar^{18+} , Fe^{26+} i Kr^{36+} u sudaru sa atomom vodonika. Pune linije su rezultati klasičnog modela a simboli klasičnih Monte-Karlo izračunavanja (CTMC)

Opisani model se može poboljšati, tako da se dobije zavisnost preseka i od energije sudara. Korišćen je koncept koji kretanje kvantne čestice (elektrona) zamenjuje mikrokanonskim ansamblom klasičnih čestica karakterisanim raspodelom koja uračunava održanje svih integrala kretanja sistema [9]. Za presek se nalazi

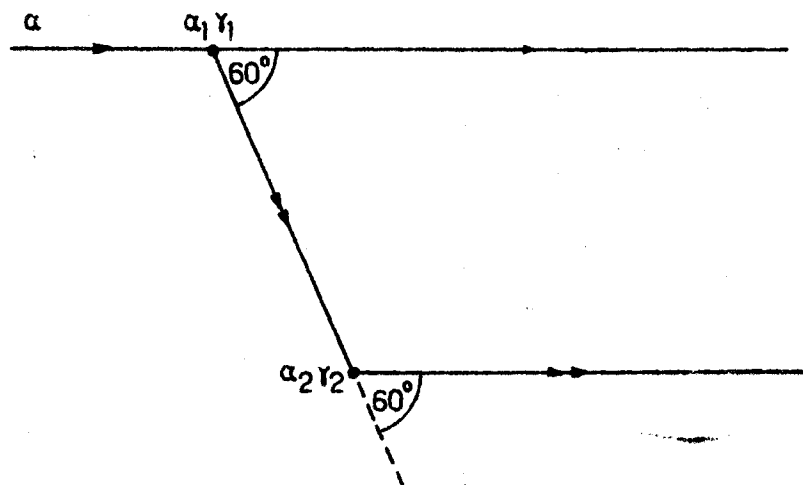
$$\sigma_K^* = 2\pi \int_0^{R_0} \left\{ 1 - \exp \left[-\frac{2}{v} \int_{\rho}^{R_0} \frac{W(R)RdR}{(R^2 - \rho^2)^{1/2}} \right] \right\} \rho \, d\rho \quad (18)$$

gde je ρ - udarni parametar, v - relativna brzina sudara a $W(R)$ je verovatnoća nadbarijernog prelaza elektrona, koja se može izračunati analitički [9]. Kao što se sa slike 4 vidi presek je slabo zavisna funkcija od energije sudara. Takodje se primećuje da se u prelaznoj oblasti $v \sim v_0$ ($E \sim 25$ keV/ajm) rezultati klasičnog modela dobro slažu sa klasičnim Monte-Karlo izračunavanjima. Z-zavisnost preseka je prikazana na slici 3 (kriva označena sa KL). Jasno je da zbog zanemarivanja podbarijernih prelaza elektrona, klasičan model daje procenu donje granice veličine preseka za proces (1.a).

3. Oblast visokih energija sudara

U čisto klasičnoj slici, prenos elektrona na visokim energijama dešava se preko dva binarna rasejanja (mi ćemo da razmatramo tro-čestični problem $\alpha + (\beta, \gamma) \rightarrow (\alpha, \delta) + \beta$ gde su α i β jezgra projektila i mete, respektivno, γ je elektron a zagrade označavaju vezana stanja [13]. U prvom sudaru α odbaci δ prema β . U drugom sudaru δ se rasejava na β i nastavlja da se kreće sa brzinom koja je ista kao i brzina čestice α ; tako dolazi do zahvata pošto medjusobno privlačenje α i δ služi da ih veže. Kretanje čestice α nije značajno izmenjeno u prvom sudaru zbog masenog odnosa $m_\alpha/m_\beta \gg 1$, a u drugom sudaru kinetička energija prenesena na β je zanemarljiva pošto je $m_\beta/m_\delta \gg 1$. Tako sledi da u prvom sudaru elektron mora da zadobije brzinu v koju ima α , i prema tome mora zbog zakona o održanju energije i momenta da se raseje za 60° (videti sl. 5). U drugom sudaru δ mora da se raseje elastično za sledećih 60° zadobijajući brzinu koja je paralelna onoj od projektila α , pa saglasno tome dolazi do zahvata elektrona δ pomoću α .

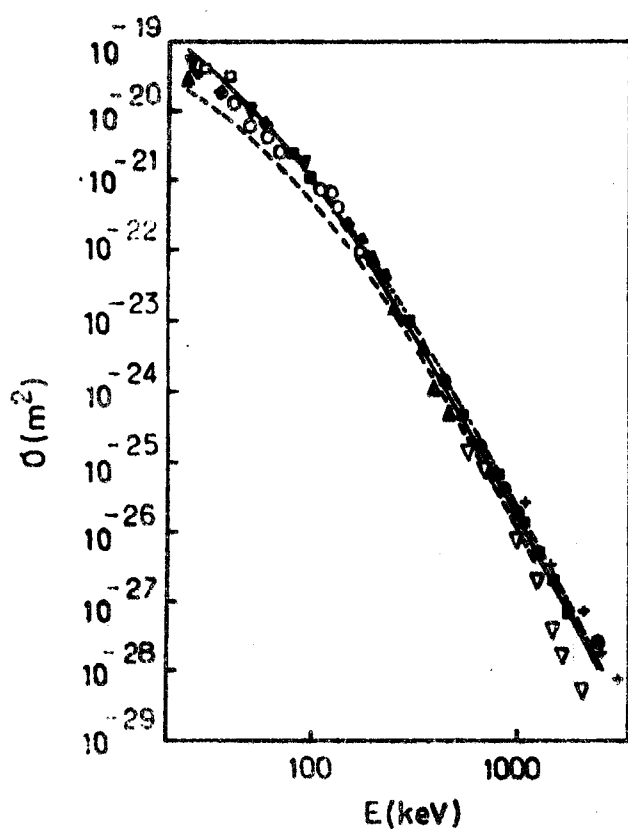
Presek za proces $H^+ + H(1s) \rightarrow H(1s) + H^+$ računat pomoću gore opisanog klasičnog modela Thomas-a ima vodeći v^{-11} član u slučaju kada je upadna brzina velika. U kvantnim teorijama drugog reda (druga Bornova aproksimacija B2, impulsna aproksimacija A, CDW i CIS) uzrok pojavi člana v^{-11} je takodje dvostruko rasejanje: pre nego što biva zahvaćen od strane čestice α , elektron ξ se intermedijarno rasejava i tako zaposeda bilo diskretna bilo slobodna



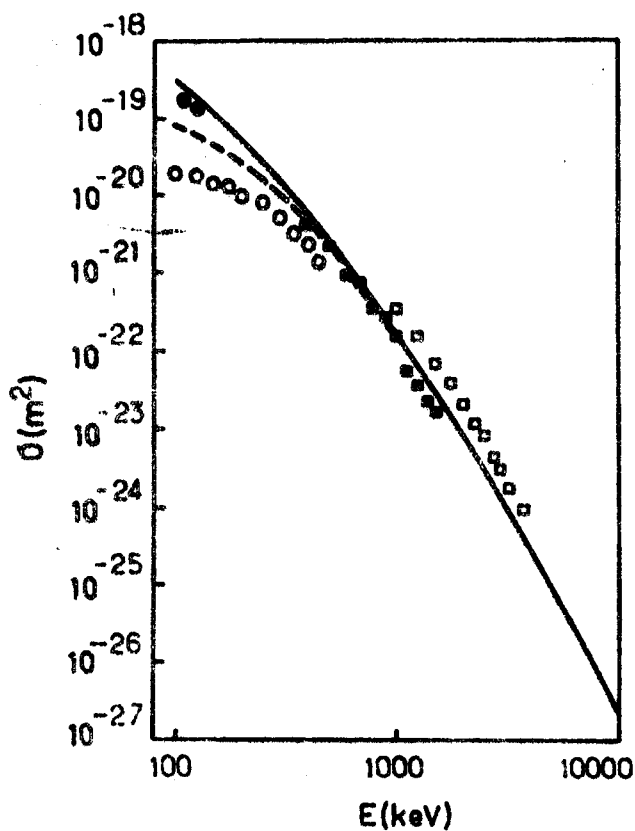
Slika 5. Dijagram pokazuje dva binarna rasejanja elektrona. Tačke $\alpha_1 \xi_1$ i $\alpha_2 \xi_2$ su, respektivno, položaji α i ξ u vreme prvog i drugog sudara.

stanja dvaju podsistema (α, ξ) ili (B, ξ). Sve gore pomenute teorije drugog reda uključuju samo kontinuumaska intermedijarna stanja elektrona ξ , na neki način, i sve one predviđaju da se presek za rezonantnu reakciju u sudaru $H^+ - H(1s)$ ponaša kao v^{-11} na vrlo visokim energijama. Sa druge strane, ukoliko su samo diskretna intermedijarna stanja uračunata (kao u metodima Perturbovanih stacionarnih stanja, ili metodima razvoja po atomskoj ili molekularnoj bazi) onda se dobija rezultat prvog reda Q^{BK} . Tako se zaključuje da otvoreni kanali igraju izvanredno važnu ulogu na visokim energijama. Pošto se na visokim energijama ($v \gg v_0$), klasično rasejanje neizostavno odvija preko dvostrukog sudara, izlazi da bi se korektan kvantno-mehanički analogon mogao dobiti ako bi se uračunali i članovi drugog reda u interakciji. Jedine teorije koje to čine su B2, IA,

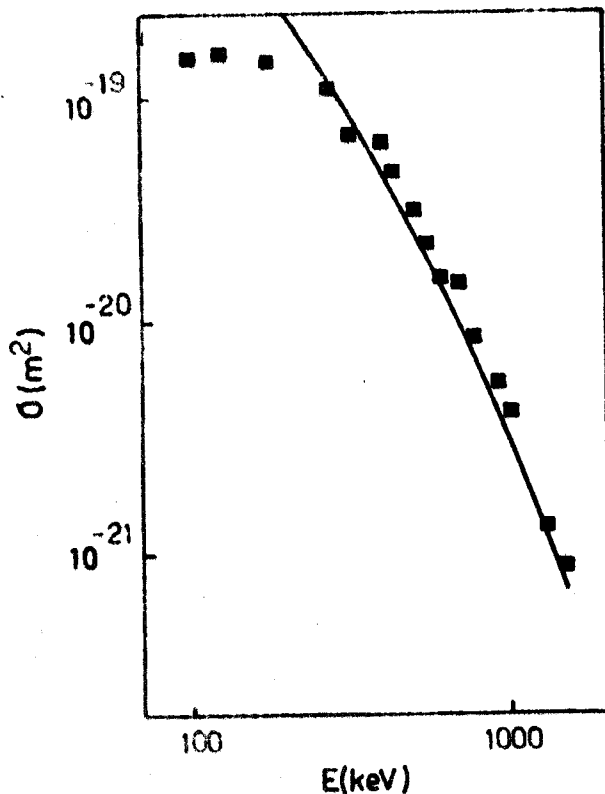
CDW i CIS. Glauberova aproksimacija je jedan visokoenergetski metod koji u izvesnoj meri uračunava asimptotske efekte drugog reda u talasnoj funkciji, ali ne daje v^{-11} - član u preseku ($Q^G \neq Q^{BK}$). Sličan komentar važi za visokoenergetske metode izobličjenih talasa Bassell-Gerjoy, kao i Gosh-ova aproksimacija, itd. Generalno je mišljenje da je CDW aproksimacija najadekvatnija teorija na visokim energijama (iznad 50 keV u slučaju rasejanja $H^+ - H(1s)$, ili, uopšteno $E(\text{keV}|\text{jezgro}) > 80|\sup\{E_i, E_f\}|$, gde su E_i i E_f elektronska energija orbitala u početnom i konačnom stanju izražene u atomskim jedinicama. Na sl. 6, 7 i 8 predstavljeni su totalni efikasni pre-



Slika 6. Zahvat elektrona pomoću H^+ u sva vodonikova stanja pri sudaru $H^+ - H(1s)$. Teorija: —CDW, ---IA, -.-.-CIS (Slika prenet iz ref. [12])



Slika 7. Zahvat elektrona pomoću He^{2+} u sva stanja He^+ pri sudaru $He^{2+} - H(10)$. Teorija: —CDW, ---IA (Slika prenet iz ref. [12])



Slika 8.

Zahvat elektrona pomoću Li^{3+} u sudaru $\text{Li}^{3+}-\text{H}(1s)$. Teorija:—CDW (slika preuzeta iz ref. [12])

seci σ u funkciji energije za proces tipa (1.a) gde je $z = 1, 2$ i 3 respektivno. Iz poredjenja sa eksperimentalnim rezultatima vidi se da CDW metod daje vooma zadovoljavajuće rezultate u jako širokom energetskom domenu u kome se presek menja za čak devet redova veličine (videti sl. 6).

CTMC (Classical Trajectory Monte-Carlo) metod [10] je numerički način jednovremenog izračunavanja preseka za procese izmene naelektrisanja i jonizacije (1a,b) u nižem delu visoko-energetske oblasti ($v \gg V_0$) uz korišćenje zakona klasične fizike.

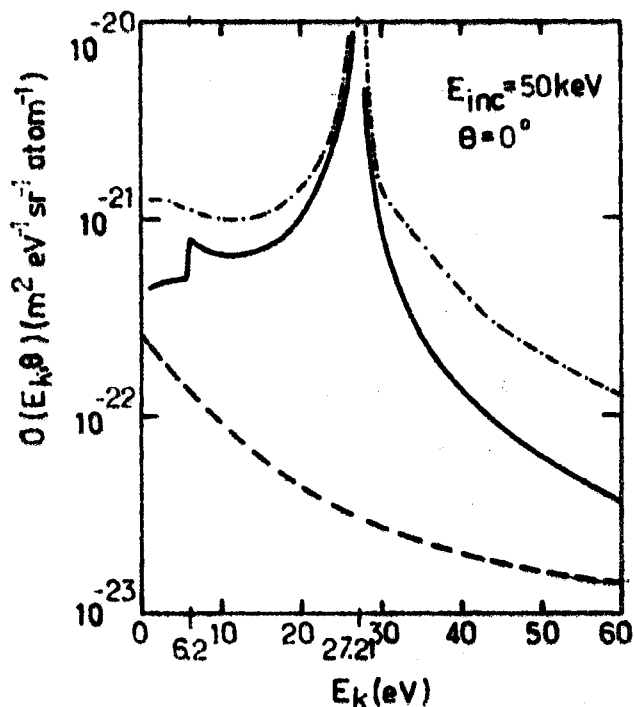
Pretpostavlja se mikrokanonska raspodela (sa fiksiranom energijom veze) za kretanje elektrona u osnovnom stanju atoma vodonika. Generatorima slučajnih brojeva zadaju se početni uslovi za kretanje elektrona kada se atom vodonika nalazi daleko od jona. Zatim se za zadatu upadnu energiju i udarni parametar jona nume-

rički rešavaju klasične jednačine kretanja za sistem tri tela (elektron, proton i jon). Trajektorije jezgara se računaju od velikih medjunuklearnih rastojanja do tačke najvećeg zblizenja i potom ponovo do velikih medjunuklearnih rastojanja. Ako je na kraju proračuna elektron još uvek vezan za proton, trajektorija se ubraja u klasu onih koje ne izazivaju nikakav proces. Ukoliko se ustanovi da je elektron vezan za jon, trajektorija se ubraja u klasu onih koje rezultuju u izmeni naelektrisanja, a ukoliko elektron nije vezan ni za proton ni za jon smatra se da je nastupila jonizacija. Verovatnoća za odgovarajući proces se dobija kao odnos broja trajektorija iz odgovarajuće klase prema ukupnom broju trajektorija. Preseci se dobijaju numeričkom integracijom verovatnoća po udarnim parametrima.

Na slici 1 su prikazani rezultati CTMC izračunavanja preseka za izmenu naelektrisanja i jonizaciju pri sudaru N^{5+} i atoma vodonika. Rezultati za izmenu naelektrisanja u sudarima A_r^{18+} , Fe^{26+} i Kr^{36+} sa H, dati su na slici 4. Za dobijanje jedne vrednosti preseka sa statističkom greškom od 10% potrebno je od 2000 do 10000 trajektorija.

Kao što je već bilo istaknuto ranije, jonizacija tipa (1.b) je vrlo važna za fuzionu istraživanja, a to se specijalno odnosi na visoke energije (videti sl. 1). Ovde ćemo se kratko osvrnuti samo na diferencijalne preseke za proces tipa (1.b), pošto oni najdramatičnije demonstriraju razlike između metoda prvog i drugog reda. U uobičajenoj prvoj Bornovoj aproksimaciji, jedino je uračunato izobličenje talasne funkcije usled Kulonove interakcije između izbačenog elektrona i rezidualnog jezgra mete. Medjutim, u CDW aproksimaciji [14], kao dodatno uračunato je i izobličenje talasne funkcije koje potiče od Kulonove interakcije između izbačenog elektrona i jezgra projektila. Ova poslednja interakcija je odgovorna za pik u energetske raspodeli elektrona (sl.9).

Pik se nalazi na onoj energiji izbačenog elektrona koji odgovara energiji upadnog protona. Efekat je poznat

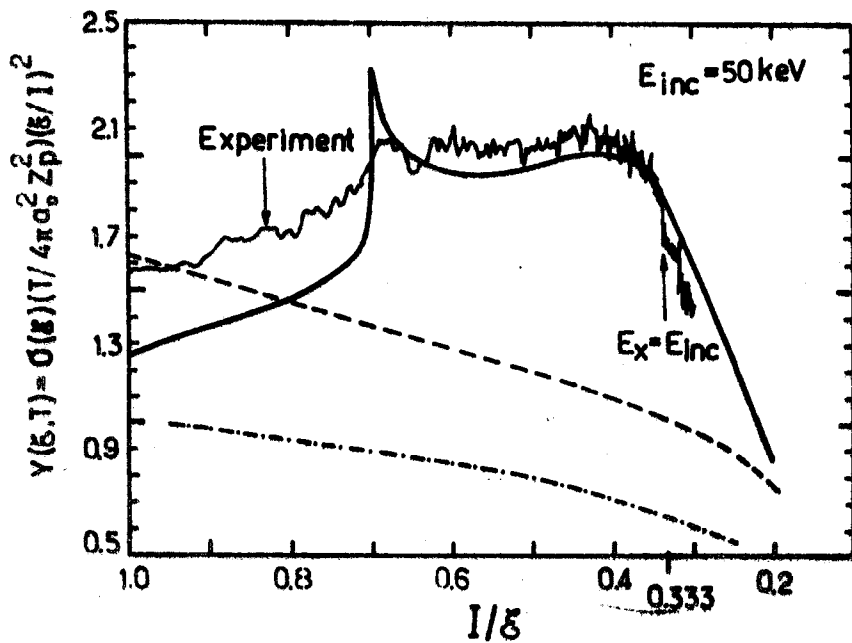


Slika 9. Energetska raspodela izbačenih elektrona na 0° iz atoma vodonika $H(1s)$ protonima od 50 keV. Prva Bornova aproksimacija --, DWB metod -.-.- i CDW metod — (Slika preuzeta iz ref.[14])

kao zahvat elektrona u kontinuum (elektron je slično Thomasovom mehanizmu "zahvaćen" projektilom ali ne u vezano nego u slobodno stanje). Ovaj efekat drugog reda je detaljnije ilustrovan na sl. 10 gde je predstavljena tzv. Platzmanov grafik. Funkcija $Y(\xi, T)$ je definisana kao količnik preseka $\sigma(\xi)$ i odgovarajućeg Rutherfordovog efikasnog preseka

$$Y(\xi, T) = \sigma(\xi) \frac{T}{4\pi a_0^2 Z_p^2} \left(\frac{\xi}{I} \right)^2$$

gde je a_0 Bohr-ov radius, $T = v^2/2$ (tj. $T = E_k$ za $k = v$, k je moment izbačenog elektrona), I je jonizacioni potencijal vodonika i \mathcal{E} je energetska gubitak projektila.



Slika 10. Platzmanov grafikon za jonizaciju vodonika udarom protona od 50 keV. Teorija: Prva Bornova aproksimacija ---, Glauberova aproksimacija -.-.- i CDW metod — (Slika preuzeta iz ref.[14])

Reference

- 1 Gibson A., 1976, Nuclear Fusion 16, 546
- 2 Shipsey F.J., Browne J.C., Olson R.E., 1981, J.Phys. B14,869
- 3 Briggs J.S., 1976, Rep.Progr.Phys. 39, 217
- 4 Landau L.D., Lifshitz E.M., 1974 "Kvantovaya Mehanika", Nauka: Moskva
- 5 Olson R.E., Salop A. 1976, Phys. Rev A14, 579
- 6 Grozdanov T.P., Janev R.K., 1978, Phys. Rev. A17, 880
- 7 Phaneuf R.A., Crandall D.H., Meyer F.W. 1981, Physica Scripta 23, 188
- 8 Komarov I.V., Solov'ev E.A., 1981, "Voprosy Teorii Atomnykh Stolknovenii" Vol.2, ed G.F. Drukarev, Leningrad: LGU
- 9 Grozdanov T.P., 1980, J. Phys. B 13, 3835
- 10 Olson R.E., Salop A. 1977, Phys. Rev. A 16, 531
- 11 Shakeshaft R., 1978, Phys. Rev. A18, 307
- 12 Belkić DŽ, Gayet R. and Salin A., 1979, Phys. Rep. 56,279,n^o6.
- 13 Thomas L.H., 1927, Proc. R. Soc. A114, 561
- 14 Belkić DŽ, 1978, J.Phys. B. Atom. Molec. Phys. 11, 3529