

NAUČNO NASTAVNOM VEĆU PRIRODNO MATEMATIČKOG FAKULTETA U Kragujevcu

Na sednici Naučno nastavnog veća Prirodno matematičkog fakulteta u Kragujevcu, održanoj dana 28.03.2007, odlukom broj 330/VII-1, određeni smo za članove Komisije za ocenu i odbranu doktorske disertacije pod naslovom **“RAČUNANJE ZAUSTAVNE MOĆI PREDSTAVLJANJEM PROJEKTILA I METE SKUPOM KVANTNIH OSCILATORA”**, kandidata Mr Nenada Stevanovića, istraživača pripravnika na Prirodno-matematičkom fakultetu u Kragujevcu. Nakon pročitane rada, a u skladu sa čl. 128 Zakona o visokom obrazovanju, a u vezi sa čl. 57 i 58 Zakona o Univerzitetu i u skladu sa čl. 51 stav 3 Statuta Fakulteta, podnosimo Veću Fakulteta sledeći

I Z V E Š T A J

Kandidat Mr Nenad Stevanović je podneo rad pod naslovom **“RAČUNANJE ZAUSTAVNE MOĆI PREDSTAVLJANJEM PROJEKTILA I METE SKUPOM KVANTNIH OSCILATORA”**. Rad je izložen na 104 strana, a u okviru teksta prikazano je 28 slika i 192 jednačine. Ukupno je citirano 56 literaturnih jedinica.

Podneti rad se sastoji iz dva dela A i B. Deo A je opšti, bez originalnog naučnog doprinosa autora, daje pregled stanja u ovoj oblasti i ima monografski karakter. Deo B predstavlja rad kandidata na zadatoj temi.

Deo A se sastoji iz četiri Glave.

U prvoj Glavi, pod nazivom **OPŠTE KARAKTERISTIKE PROLASKA NAELEKTRISANIH ČESTICA KROZ MATERIJU**, na nerelativistički način tretirani su opšti zakoni sudara između naelektrisanih čestica, preko parametara sudara, bazirajući se na Rutherford-ovom modelu rasejanja. Dat je opis osnovnih procesa, koji se javljaju prilikom prolaska naelektrisanih čestica kroz materiju. Značaj ovih procesa zavisi od upadne energije naelektrisane čestice, prema čemu su i klasificirani.

U drugoj Glavi, pod nazivom **TEORIJSKI TRETMAN ZAUSTAVNE MOĆI**, dat je teorijski opis zaustavne moći na osnovima klasične fizike (prema Bohru), i bazirajući se na principima kvantne mehanike (Betheov pristup). Pri tome je smatrano da se kinetička energija

tačkastog naelektrisanog projektila troši na ekscitaciju i jonizaciju atoma mete. Detaljno je dato izvođenje diferencijalnog efikasnog preseka sudara projektila sa elektronima atoma mete. Na osnovu toga prikazan je Betheov račun zaustavne moći u prvoj Bornovoj aproksimaciji.

U ovom delu diskutovane su aproksimacije koje su uvedene pri računanju zaustavne moći. Pored toga, detaljno su razmatrane korekcije uvedene u formulu za zaustavnu moć sa ciljem da se procesi prolaska naelektrisane čestice kroz materiju opišu što tačnije.

U trećoj Glavi rada, **TRETMAN DELIMIČNO OGOLJENOG JONA**, dat je pregled radova u kojima je računata zaustavna moć za delimično ogoljen jon. Opisano je uvođenje efektivnog naelektrisanja projektila, koji u sebi sadrži vezane eлектrone i efekat njihovog električnog ekraniranja. Naglašeno je da smanjenje naelektrisanja projektila, usled prisustva vezanih elektrona, smanjuje vrednost zaustavne moći.

Četvrta Glava rada, pod nazivom **ZAUSTAVNA MOĆ ZA DELIMIČNO OGOLJEN JON**, sadrži detaljan opis izvođenja diferencijalnog efikasnog preseka za sudar delimično ogoljenog jona sa atomima mete na osnovima kvantne mehanike, u prvoj Bornovoj aproksimaciji, bazirajući se na Betheovom principu. Za razliku od tačkastog projektila, gde se uračunava njegova interakcija sa elektronima mete, kod delimično ogoljenog jona potrebno je uračunati i interakciju njegovih elektrona sa elektronima i jezgrom atoma mete. Na osnovu toga izvedena je formula za računanje zaustavne moći za delimično ogoljen jon. U slučaju delimično ogoljenog jona, koji se formira pri niskim upadnim energijama, njegova kinetička energija se transformiše dodatno na njegovu ekscitaciju i jonizaciju. To povećava vrednost ukupne zaustavne moći. Posebno je tretiran deo koji predstavlja doprinos zaustavnoj moći usled ekscitacije i jonizacije projektila.

Deo B, za razliku od dela A, predstavlja originalan rad kandidata. Rezultati su predstavljeni u okviru V, VI i VII Glave i Zaključka.

U petoj Glavi, pod nazivom **PREDSTAVLJANJE PROJEKTILA I METE SKUPOM KVANTNIH OSCILATORA**, kandidat je razmatrao sudar kvantnih naelektrisanih oscilatora, koji interaguju Kulonovom silom. Smatrao je da je potencijal interakcije mnogo manji od kinetičke energije projektila-oscilatora, što omogućava da se diferencijalni efikasni presek računa u prvoj Bornovoj aproksimaciji. Diferencijalni efikasni presek je izrazio preko svojstvenih stanja harmonijskih oscilatora. Ovako dobijen efikasni presek je funkcija naelektrisanja projektila i mete, brzine projektila i energije pobuđenja

oscilatora projektila i mete. U podnetom radu je, na osnovu toga, izveden analitički izraz za gubitak energije kvantnog harmonijskog oscilatora.

Prema izrazu koji je kandidat izveo, ispitan je koliki se deo kinetičke energije projektila gubi na njegovo pobuđenje u zavisnosti od početne kinetičke energije projektila. U radu je pokazano da energija pobuđenja projektila znatno utiče na vrednost zaustavne moći, naročito pri njegovim nižim kinetičkim energijama (u oblasti Braggovog pika). U radu je nađeno da vrednost zaustavne moći opada sa porastom energije pobuđivanja projektila, naročito u oblasti Braggovog pika (maksimalne vrednosti zaustavne moći). Pored toga, kandidat je pokazao da se Braggov pik blago pomera u desno, ka višim vrednostima kinetičke energije projektila, odnosno, da se maksimalna vrednost izgubljene energije projektila javlja pri višim kinetičkim energijama, ukoliko energija pobuđenja projektila raste.

Iz ovog dela rada publikovan je jedan rad **Stevanović, N., Nikezić, D., *Stopping power. Projectile and target modeled as oscillators, Phys. Lett. A 340, 290 (2005).***

U šestoj Glavi, pod nazivom **ANALITIČKI IZRAZ ZA ZAUSTAVNU MOĆ, PREDSTAVLJAJUĆI PROJEKTIL I METU ANSAMBLIMA KVANTNIH OSCILATORA**, kandidat je izveo analitički izraz za zaustavnu moć skupa kvantno mehaničkih oscilatora; taj izraz je dat u obliku sume zaustavnih moći pojedinačnih oscilatora mete i projektila. U podnetom radu zaustavna moć neke materije za dati projektil se računa kao suma zaustavnih moći pojedinačnih oscilatora utežnjenih dipolnim jačinama oscilatora atoma mete i projektila. Ovo je poboljšanje u odnosu na rad Sigmunda i Haagerupa (Phys. Rev. A, **34**, 892, 1986.), gde se zaustavna moć računa preko dipolnih jačina oscilatora mete (ne i projektila). Pri tome sumiranje se obavlja preko diskretnog i kontinualnog spektra energije projektila i mete, što opisuje njihovu ekscitaciju i jonizaciju.

Analitički izraz za zaustavnu moć dobijen u ovom radu je predstavljen u obliku zbira dva člana: jedan predstavlja doprinos zaustavnoj moći usled pobuđenja i jonizacije atoma mete i drugi koji predstavlja doprinos usled pobuđenja i jonizacije projektila.

U ovom radu zaustavna moć je računata za vodonik (H), helijum (He) i ugljenik (C), a razmatrani projektili su vodonik i helijum. Pri tome je pokazano da ukoliko projektil ima visoku kinetičku energiju, doprinos usled pobuđenja projektila postaje beznačajan, jer i broj vezanih elektrona u projektilu teži nuli. Ukoliko je kinetička energija projektila niska, doprinos zaustavnoj moći usled pobuđenja i jonizacije projektila postaje značajna. U zavisnosti od razmatranih projektila i mete, u radu je pokazano da doprinos zaustavnoj moći usled pobuđenja i jonizacije projektila iznosi 10-20%.

Iz ovog dela rada publikovan je jedan rad, **Stevanović, N., Nikezić, D.,** *Calculation of stopping power for partially stripped ions using an oscillator model*, Eur. Phys. J. D **42**, 397–406, 2007.

U sedmoj Glavi rada, **POREĐENJE SA TEORIJSKIM I DOSTUPNIM EKSPERIMENTALNIM PODACIMA**, analitički izraz za zaustavnu moć, koji je izveden u Glavi VI, poređen je sa SRIM-om, Bethe-ovom formulom i izrazom koji je dat u radu (Cabrera-Trujillo et al., Phys. Rev. A, **55**, 2864, 1997.) Eksperimentalni podaci zaustavne moći, za razmatrane atome mete i projektila su prikazani sa greškom od 5-10%. Pri visokim energijama projektila, dobijeno je veoma dobro slaganje između izvedene formule i pomenutih eksperimentalnih i teorijskih podataka, dok pri nižim energijama postoje mala odstupanja, ali u okviru pomenutih grešaka.

U **ZAKLJUČKU** je dat sažet pregled rezultata i dostignuća rada. Diskutovani su nađeni rezultati u svetlu postojećih eksperimentalnih i teorijskih podataka.

Kao glavne naučne doprinose, izdvajamo da je kandidat u podnetom radu:

1. razmatrao sudar kvantnih naelektrisanih oscilatora;
2. izveo izraz za zaustavnu moć kvantnog harmonijskog oscilatora u prvoj Bornovoj aproksimaciji, ako je projektil, takođe, kvantni harmonijski oscilator;
3. pokazao da energija pobuđenja projektila znatno utiče na vrednost zaustavne moći;
4. pokazao da se maksimalna vrednost izgubljene energije projektila javlja pri višim kinetičkim energijama, ukoliko energija pobuđenja projektila raste;
5. uveo da se zaustavna moć neke materije za dati projektil, računa kao suma zaustavnih moći pojedinačnih oscilatora uteženih dipolnim jačinama oscilovanja atoma mete i atoma projektila;
6. pokazao da doprinos zaustavnoj moći usled pobuđenja i jonizacije projektila iznosi 10-20%.

ZAKLJUČAK KOMISIJE

Komisija, ističe da je podneti tekst samostalan rad kandidata i da postoje novi i originalni rezultati. Pristup modelovanja projektila ansamblom kvantnih harmonijskih oscilatora u računanju zaustavne moći je originalan, i omogućuje pogodno računanje zaustavne moći.

Komisija takođe ističe da su 2 (dva) rada publikovana u časopisima R51-B i R52 kategorije: *Physics Letters A* sa indeksom citiranosti 1.550 i *European Physical Journal D* sa indeksom citiranosti 1.515. Pored toga, kandidat je do sada objavio još 9 (devet) radova kategorije R51 i R52 iz oblasti Radijacione fizike, koji nisu u direktnoj vezi sa disertacijom.

Na osnovu gore iznetih rezultata i podataka o radu **“RAČUNANJE ZAUSTAVNE MOĆI PREDSTAVLJANJEM PROJEKTILA I METE SKUPOM KVANTNIH OSCILATORA”**, kandidata Mr Nenada Stevanovića, kao i činjenice da su dva članka iz ovog rada prihvaćena za publikovanje u časopisima sa visokim indeksom citiranosti, Komisija predlaže Naučno-nastavnom Veću Prirodno - matematičkog fakulteta u Kragujevcu da prihvati ponuđeni tekst kao doktorsku disertaciju.

U Kragujevcu

25.04.2007. god.

K O M I S I J A

Dr Dragoslav Nikezić, red. prof.

PMF- Kragujevac,

N.O. Radijaciona fizika, **mentor**

Dr Ivan Mančev, red. prof.

PMF – Niš,

N.O. Kvantna fizika i sudarni procesi

Dr Miroljub Dugić, van. prof.

PMF-Kragujevac,

N.O. Kvantna teorijska fizika

Spisak radova mr Nenada Stevanovića

I Magistarska teza

Faktor uzmaka ^{214}Pb , Prirodno-matematički fakultet, Kragujevac, 2004.

II Radovi u međunarodnim časopisima

(a) Radovi proistekli iz disertacije

2.1. N. Stevanović and D. Nikezić. **Stopping power. Projectile and target modeled as oscillators.** *Physics Letters A*, 340 (1-4), 290-298, 2005. IF=1.55, R51 B

2.2. N. Stevanović and D. Nikezić. **Calculation of stopping power for partially stripped ion by using oscillator model.** *Eur. Phys. J. D* **42**, 397-406, 2007. IF=1.515, R52

(b) Radovi iz Radijacione fizike, van disertacije

2.3. N. Stevanović, D. Nikezić. **Recoil factor of ^{214}Pb .** *Journal of Aerosol Science.*, 35(8), 1041, 2004. IF=1.861, R51

2.4. D. Krstić, D. Nikezić, N. Stevanović i M. Jelić. **Vertical distribution of ^{137}Cs in soil.** *Applied Radiation and Isotopes.*, 61(6), 1487, 2004. IF=1.000, R51

2.5. D. Nikezić, N. Stevanović. **Room model with three modal distribution of attached radon progeny.** *Health of Physics.*, 87(4), 405-409, 2004. IF=0.796, R51

2.6. D. Nikezić and N. Stevanović. **Influence of variability of ^{214}Pb recoil factor on lung dose.** *Radiation Protection Dosimetry.*, 109, 197-199, 2004. IF=0.680, R52

2.7. D. Nikezić and N. Stevanović. **Room model with three modal distributions of attached ^{220}Rn progeny. Dose conversion factor for ^{220}Rn progeny.** Podneto u *Radiation Protection Dosimetry*, Accepted 2006. doi:10.1093/rpd/ncl089 IF=0.490, R52

2.8. D. Nikezić and N. Stevanović. **Radon progeny behavior in diffusion chamber.** *Nuclear Instruments and Methods B*, 239 (4), 399-406, 2005. IF=1.181, R51

2.9. D. Nikezić, B.M.F. Lau, N. Stevanović and K.N.Yu. **Absorbed Dose in Target Cell Nuclei and Dose Conversion Coefficient of Radon Progeny in the Human Lung,** *Journal of Environmental Radioactivity*, 89, 18-29, 2006. IF=1.243, R51

2.10. D. Krstić, N. Stevanović, J. Milivojević and D. Nikezić. **Transfer of ^{137}Cs from soil to plants.** *Isotopes in Environmental Health Studies*, 43(1), 1-9, 2007. IF=1.500, R51

2.11. D. Nikezić and N. Stevanović. **Behavior of ^{220}Rn progeny in diffusion chamber.** *Nuclear Instruments and Methods A*, 570, 182-186, 2007. IF=1.224, R51

III Radovi na međunarodnim konferencijama

3.1. D. Nikezic, N. Stevanovic, D. Krstic , V. Urosevic, **Behavior of ^{218}Po in diffusion chamber for radon measurements.** *ECE*, Niska Banja, SCG, 6-10 jun 2005.

3.2. D. Nikezic, D. Kostic, N. Stevanovic, K.N.Yu. **Solving the track wall equation by finite difference method.** INTS (23rd International Conference on Nuclear Tracks in Solids), Beijing, China, September 11-15, 2006. (štampan u izvodu).

IV Radovi na domaćim konferencijama

4.1. D. Krstić, D. Nikezić, V. LJubenov i N. Stevanović. **Računanje efektivne doze u plućama i gonadama od ^{137}Cs u tlu.** *Zbornik radova, XXII Simpozijum Jugoslovenskog Društva za Zaštitu od Zračenja*, Petrovac, 2003.

4.2. D. Krstić, D. Nikezić, N. Stevanović i M. Jelić. **Vertikalna raspodela ^{137}Cs u tlu.** *Zbornik radova, XXII Simpozijum Jugoslovenskog Društva za Zaštitu od Zračenja*, Petrovac, 2003. p. 181-184.

4.3. N. Stevanović i D. Nikezić. **Zaustavna moć alfa čestica u CR-39 detektoru.** *Zbornik radova, XXII Simpozijum Jugoslovenskog Društva za Zaštitu od Zračenja*, Petrovac, 2003.

4.4. N. Stevanović, D. Nikezić, D. Krstić, D. Kostić, M.S.Kovačević. **Faktor uzmarka radonovih potomaka.** *Zbornik radova, XXIII Simpozijum DZZSCG*, Donji Milanovac 26-28 septembar, 2005. 327-331, ISBN: 86-7306-075-3

4.5. D. Krstić, D. Nikezić, N. Stevanović, D. Vučić. **Radioaktivnost nekih uvoznih gradjevinskih materijala.** *Zbornik radova, XXIII Simpozijum DZZSCG*, Donji Milanovac 26-28 septembar, 2005. 309-311, ISBN: 86-7306-075-3

UNIVERZITET U KRAGUJEVCU
PRIRODNO – MATEMATIČKI FAKULTET
KATEDRA ZA FIZIKU



mr Nenad Stevanović

**RAČUNANJE ZAUSTAVNE MOĆI PREDSTAVLJANJEM
PROJEKTILA I METE SKUPOM KVANTNIH
OSCILATORA**

DOKTORSKA DISERTACIJA

Kragujevac, 2007.

UNIVERZITET U KRAGUJEVCU

PRIRODNO – MATEMATIČKI FAKULTET

KATEDRA ZA FIZIKU

Rukovodilac: Dr Dragoslav Nikezić, redovni profesor

Ova disertacija je rađena na Prirodno-matematičkom fakultetu pri Katedri za fiziku u Kragujevcu pod rukovodstvom prof. Dr Dragoslava Nikezića.

Izražavam posebnu zahvalnost mentoru prof. Dr Dragoslavu Nikeziću na datoj slobodi u izboru teme i neprocenjivoj podršci u toku rada ove disertacije.

Zahvaljujem se prof. Dr Miroljubu Dugiću na dobronamernim savetima i diskusijama.

Zahvalnost dugujem prof. Dr Ivanu Mančev na korisnim savetima i sugestijama.

Zahvaljujem se svim profesorima, kolegamicama i kolegama sa Katedre za fiziku, koji su mi pružili pomoć prilikom izrade disertacije.

Finansijsku podršku u izradi ove disertacije pružilo mi je Ministarstvo za nauku i zaštitu životne sredine (projekat 141023).

Želim da se zahvalim svojoj porodici, bratu Predragu, sestri Gordani, majci Ljubici i ocu Dragomiru, za strpljenje i podršku koju su mi pružili.

Zahvalnost dugujem i svima onima, koji ovde nisu pomenuti, na interesovanju i pruženoj pomoći.

Spisak oznaka u radu

Zaustavna moć	S
Brzina projektila	v
Naelektrisanje projektila i mete	z_1, z_2
Efikasni presek	σ
Energija pobuđenja oscilatora projektila i mete	$\hbar\omega_p, \hbar\omega_t$
Parametar sudara	b
Predati impuls	q
Predana energija	Q
Vektor dometa	\vec{R}
Lateralni domet	R_L
Projektovani domet	R_p

Spisak slika u radu

Slika 1. Veličine koje se odnose na pređeno rastojanje projektila u materiji. \vec{R} - vektor dometa; R_L - lateralni domet; R_p - projektovani domet; x -dužina prodiranja

Slika 2. Rutherford-ov model rasejanja

Slika 3. Trougao promene impulsa

Slika 4. Vektori impulsa pri sudaru projektila sa atomom. p (p') je impuls projektila pre (posle) sudara; $q=p'-p$.

Slika 5. Radijus vektori položaja projektila i elektrona u atomu mete u odnosu na jezgro atoma mete

Slika 6. Blochova korekcija u funkciji parametra $y = z_1 v_0 / v$

Slika 7a. Zavisnost zaustavnog broja od energije projektila za $z_1=1$

Slika 7b. Zavisnost zaustavnog broja od energije projektila za $z_1=5$

Slika 8. Korekcija ljuske kao funkcija energije projektila

Slika 9. Korekcija usled efekta gustine

Slika 10. Barkasova korekcija kao funkcija energije projektila za različite vrednosti atomskog broja mete

Slika 11. Skretanje snopa jona He prolaskom kroz materiju koji se nalazi u magnetnom polju; S-izvor; K-kolimator; Z-zaklon.

Slika 12. Međusobni položaj projektila i atoma mete

Slika 13. Interakcija između projektila i mete kao oscilatora. Projektil je predstavljen sa dve naelektrisane čestice ($z_1 e$) i ($-z_1 e$) čije su mase m_1 . Meta je predstavljena naelektrisanjima ($z_2 e$) i ($-z_2 e$), sa masama m_2

Slika 14. Zaustavna moć harmonijskog oscilatora za tačkasti projektil kao funkcija od upadne energije projektila, za različite vrednosti energije pobuđenja mete

Slika 15. Uticaj energije pobuđenja mete na zaustavnu moć harmonijskog oscilatora za tačkasti projektil

Slika 16. Zaustavna moć harmonijskog oscilatora kao funkcija kinetičke energije projektila-oscilatora za različite vrednosti energije njegovog pobuđenja. Energija pobuđenja oscilatora mete je $\hbar \omega_t = 5 eV$

Slika 17. Zaustavna moć harmonijskog oscilatora kao funkcija kinetičke energije projektila-oscilatora za različite vrednosti energije njegovog pobuđenja. Energija pobuđenja oscilatora mete je $\hbar \omega_t = 10 eV$

Slika 18. Zaustavna moć harmonijskog oscilatora kao funkcija kinetičke energije projektila-oscilatora za različite vrednosti energije njegovog pobuđenja. Energija pobuđenja oscilatora mete je $\hbar \omega_t = 15 eV$

Slika 19. Frakcija elektrona vezanih za projektil u zavisnosti od njegove kinetičke energije

Slika 20. Zaustavna moć vodonika za vodonikov jon u funkciji od energije projektila

Slika 21. Zaustavna moć helijuma za vodonikov jon u funkciji od energije projektila

Slika 22. Zaustavna moć ugljenika za helijumov jon u funkciji od energije projektila

Slika 23. Poređenje zaustavne moći vodonika dobijene SRIM-om sa eksperimentalnim podacima

Slika 24. Poređenje zaustavne moći helijuma dobijene SRIM-om sa eksperimentalnim podacima

Slika 25. Poređenje zaustavne moći ugljenika dobijene SRIM-om sa eksperimentalnim podacima

Slika 26. Zaustavna moć vodonika za vodonikov jon u funkciji od energije projektila. Poređenje sa Bethe-om, C-Trujillo et al. i SRIM-om.

Slika 27. Zaustavna moć ugljenika za vodonikov jon u funkciji od energije projektila. Poređenje sa Bethe-om, C-Trujillo et al. i SRIM-om.

Slika 28. Zaustavna moć ugljenika za helijumov jon u funkciji od energije projektila. Poređenje sa Bethe-om, C-Trujillo et al. i SRIM-om.

SADRŽAJ

UVOD.....	1
A) UVODNI DEO, OPŠTA RAZMATRANJA.....	9
I OPŠTE KARAKTERISTIKE PROLASKA NAELEKTRISANIH ČESTICA KROZ MATERIJU.....	9
<i>I 1. Sudar naelektrisanih čestica prema Rutherford-ovom modelu.....</i>	<i>9</i>
<i>I 2. Procesi gubitka energije projektila pri prolasku kroz materiju</i>	<i>13</i>
II TEORIJSKI TRETMAN ZAUSTAVNE MOĆI	16
<i>II 1. Bohr-ov račun zaustavne moći</i>	<i>16</i>
<i>II 2. Kvantno - mehanički račun zaustavne moći</i>	<i>20</i>
<i>II 2.1. Diferencijalni efikasni presek sudara u prvoj Bornovoj aproksimaciji</i>	<i>20</i>
<i>II 2.2. Bethe-ov račun zaustavne moći</i>	<i>27</i>
<i>II 2.3. Blochov izraz za zaustavnu moć.....</i>	<i>33</i>
<i>II 3. Aproksimacije uvedene pri računanju zaustavne moći.....</i>	<i>35</i>
<i>II 4. Poređenje Bohrove, Betheove i Blochove formule za zaustavnu moć</i>	<i>36</i>
<i>II 5. Korekcije Bohr-Bethe-Bloch formule.....</i>	<i>39</i>
<i>II 5. 1. Korekcija ljuske (shell correction)</i>	<i>39</i>
<i>II 5. 2. Korekcija usled efekta gustine (density effect).....</i>	<i>40</i>
<i>II 5. 3. Barkasov efekat</i>	<i>41</i>
III TRETMAN DELIMIČNO OGOLJENOG JONA.....	43
<i>III 1. Efektivno naelektrisanje projektila.....</i>	<i>43</i>
<i>III 2. Uticaj efektivnog naelektrisanja na zaustavnu moć</i>	<i>45</i>
IV ZAUSTAVNA MOĆ ZA DELIMIČNO OGOLJEN JON.....	46
<i>IV 1. Opis sistema delimično ogoljen jon + atom mete.....</i>	<i>46</i>
<i>IV 2. Diferencijalni efikasni presek i zaustavna moć za delimično ogoljen jon.....</i>	<i>48</i>

B) TEORIJSKI DEO RADA.....	51
V PREDSTAVLJANJE PROJEKTILA I METE SKUPOM KVANTNIH OSCILATORA.....	51
<i>V 1. Opis modelovanja projektila i mete ansamblom kvantnih oscilatora.....</i>	<i>52</i>
<i>V 2. Računanje zaustavne moći harmonijskog oscilatora</i>	<i>54</i>
<i>V 2.1. Računanje matičnih elemenata.....</i>	<i>58</i>
<i>V 2.2. Konačna formula za zaustavnu moć kvantnog harmonijskog oscilatora.....</i>	<i>61</i>
V 3. Rezultati.....	62
<i>V 3.1. Zaustavna moć harmonijskog oscilatora za tačkasti projektil</i>	<i>63</i>
<i>V 3.2. Zaustavna moć harmonijskog oscilatora za projektil-oscilator</i>	<i>65</i>
V 4. Zaključak.....	67
VI ANALITIČKI IZRAZ ZA ZAUSTAVNU MOĆ, PREDSTAVLJAJUĆI PROJEKTIL I METU ANSAMBLIMA KVANTNIH OSCILATORA.....	68
VI 1. Izražavanje zaustavne moći preko sume parcijalnih zaustavnih brojeva.....	69
<i>VI 2. Računanje zaustavnih brojeva, L^{osc}, preko stanja kvantno mehaničkog oscilatora.....</i>	<i>72</i>
<i>VI 3. Računanje parcijalnih zaustavnih brojeva, L^{af}, za metu i projektil</i>	<i>75</i>
<i>VI 4. Broj vezanih elektrona u pojektilu kao funkcija od njegove brzine</i>	<i>78</i>
VI 5. Rezultati.....	80
VII POREĐENJE SA TEORIJSKIM I DOSTUPNIM EKSPERIMENTALNIM PODACIMA.....	83
<i>VII 1. SRIM i eksperimentalni podaci.....</i>	<i>83</i>
<i>VII 2. Poređenje sa SRIM-om i teorijskim podacima</i>	<i>87</i>
VIII ZAKLJUČAK	90
LITERATURA	92
DODATAK I.....	97
DODATAK II.....	99
DODATAK III	101
DODATAK IV PUBLIKOVANI RADOVI	

UVOD

Početak druge dekade prošlog veka pojavio se značajan interes za proučavanje interakcije brzih i teških naelektrisanih čestica sa materijom kroz koju prolaze. Ova problematika je predmet istraživanja u mnogim oblastima fizike kao što su atomska i nuklearna fizika, fizika plazme, fizika čvrstog stanja, radijaciona fizika, i druge. Teorijska i eksperimentalna izučavanja prolaska naelektrisanih čestica kroz materiju odigrali su veliku ulogu u razvoju moderne fizike. Mnoge knjige, monografije i naučni članci su posvećeni ovoj problematici.

Različiti teorijski i eksperimentalni aspekti prolaska naelektrisanih čestica kroz materiju tretirani su u mnogim radovima [Rutherford, 1911; Thomson, 1912; Bohr, 1913, 1915; Bethe, 1930; Mott, 1931; Bloch, 1933]. Izučavanje rasejanja alfa čestica na atomima zlata, pri Kulonovoj interakciji, dovelo je do otkrića jezgra i definisanja strukture atoma.

Koristeći detektore tragova čestica (»cloud« komore, »bubble« komore, nuklearne emulzije,...) otkrivene su mnoge elementarne čestice. Razvoj novih detektora naelektrisanih čestica doprineo je dobijanju obilja eksperimentalnih rezultata u izučavanju interakcije naelektrisanih čestica niskih, srednjih i visokih energija sa materijom.

U toku poslednjih nekoliko decenija izgrađen je veći broj akceleratorских mašina, koje generišu snopove jona različitog intenziteta i energije. Snopovi jona se primenjuju u različitim granama tehnike i nauke. U tehnologiji materijala snopovi jona se koriste za implantaciju raznih atoma, poboljšavajući karakteristike implantiranog materijala. Kod izrade poluprovodničkih detektora jonski snopovi se koriste za ugradnju odgovarajućih primesa radi menjanja karakteristika detektora. Jonski snopovi imaju veliku primenu u medicini i radio-terapiji.

Izučavanje prolaska naelektrisanih čestica kroz materiju je važno, jer povezuje istraživanja i razvoj različitih naučnih disciplina. Razvoj i primena visokoenergetskih akceleratora teških jona (sa energijama od nekoliko GeV/amu) je unapređena dobrim razumevanjem delovanjem teških naelektrisanih čestica na materijalnu sredinu pri prolasku kroz nju. Korektna interpretacija podatka iz visokoenergetskog kosmičkog zračenja, koja je bitna za razumevanje raznih visokoenergetskih fizičkih i astrofizičkih fenomena, zavisi od dobrog poznavanja, kako prolaza teških jezgara kroz materiju, tako i od odgovora detektora na isto.

Treba napomenuti da je jedan od najefikasnijih načina tretiranja kancera primenom visokoenergetskog zračenja. Prednost terapije visokoenergetskim česticama nad elektromagnetskim zračenjem je višestruka. Jedan od razloga je što naelektrisane čestice imaju bolju relativnu biološku efikasnost (RBE). Takođe, bolje razumevanje interakcije teških jona sa materijom omogućava brže napredovanje u istraživanju teškojonske fuzije (intenzivan snop teških jona na zagrejanu plazmu deuterijuma).

Od velikog interesa je izučavati mehanizme posredstvom kojih atomi materije deluju na upadne čestice, i obrnuto. Najinteresantnije i najneophodnije je izučavati načine i oblike energije u koje se početna energija upadne čestice ili snopa pretvara prolaskom kroz datu sredinu. U tu svrhu korisno je proučavati jednu veličinu koja je se naziva zaustavna moć materije (*stopping power*).

Zaustavna moć materije se definiše kao količnik kinetičke energije koju projektil izgubi, dE , pri prolasku rastojanja, dx , i tog rastojanja ($S = -dE/dx$). Pomoću ove veličine određuju se domet projektila, distribucija njegove energije, deponovana energija u materiji, kao i mnoge druge karakteristike.

Bilo da su bazirani na principu klasične fizike ili na kvantno-mehaničkom pristupu (teoriji perturbacija) većina teorijskih radova je dala rezultate da je zaustavna moć proporcionalana kvadratu atomskog broja projektila i funkcija je njegove brzine. U teorijskom tretmanu prolaska čestice kroz materiju, smatrano je da projektil interaguje sa elektronima atoma mete i da svoju energiju gubi na pobuđenje ili jonizaciju atoma. Uzmicanje jezgra atoma mete je zanemarljivo, dok se elektromagnetno zračenje, usled promene brzine kretanja projektila, javlja pri visokim energijama.

Za razliku od Thomsona [Thomson, 1912], koji je materiju kroz koju čestica gubi svoju energiju modelovao kao skup slobodnih elektrona, Bohr je [Bohr, 1913] je smatrao da gubitak energije projektila potiče od vezanih elektrona u atomima materije. Vezanim elektronima pripisivao je oscilatornu prirodu, pri čemu je divergenciju efektivnog preseka uklonio uvodeći konačne vrednosti domena interakcije, odnosno, parametara sudara.

Razvojem kvantne mehanike, primenjujući prvu Bornovu aproksimaciju, teoriju zaustavne moći su razvijali, Bethe, Moller i Bloch [Bethe, 1930; Moller, 1931 i Bloch, 1933]. Efikasni presek sudara je izveden u funkciji impulsa, koji projektil preda meti, smatrajući da projektil deluje samo na elektrone atoma mete. Pri ovoj Kulonovoj interakciji smatrano je da projektil gubi svoju kinetičku energiju na ekscitaciju i jonizaciju atoma mete i da je izgubljena energija mnogo manja od početne kinetičke energije.

Uprkos višedecenijskom istraživačkom radu na problemima prolaska čestice kroz materiju mnogi fenomeni i detalji nisu u potpunosti teorijski objašnjeni i eksperimentalno potvrđeni. Ova problematika zaokuplja rad i entuzijazam mnogih teorijskih i eksperimentalnih fizičara.

Posebno veliki problem predstavlja računanje zaustavne moći pri niskim energijama projektila na kojima projektil intenzivno razmenjuje elektrone sa atomima sredine. U tom slučaju projektil se ne može smatrati kao tačkasto naelektrisanje, već kao sistem koji sadrži vezane elektrone i tretira se kao *delimično ogoljen jon*.

Pri interakciji sa atomom mete, kinetička energija delimično ogoljenog jona se može utrošiti na ekscitaciju/jonizaciju atoma mete i na ekscitaciju/jonizaciju projektila. Mehanizmi gubitka energije projektila pri nižoj vrednosti kinetičke energije su složeniji i višestruki, što će detaljnije biti opisano u narednim poglavljima ovog rada.

Objavljeno je više teorijskih i eksperimentalnih radova u kojima je određivana zaustavna moć za delimično ogoljen jon. Predloženo je da se uvede efektivno naelektrisanje projektila usled mogućnosti da projektil zahvati elektrone od atoma mete, i na taj način smanji svoje ukupno naelektrisanje [Northcliffe,1960; Northcliffe, 1963]. Efektivno naelektrisanje projektila je rastuća funkcija brzine projektila sa asimptotskom vrednošću njegovog rednog broja. U mnogim radovima broj vezanih elektrona u projektilu opisan je kao funkcija njegove brzine [Cabrera-Trujillo et al, 1997]. Pri niskim energijama projektil postaje elektro neutralan pa je broj vezanih elektrona jednak rednom broju, i efektivno naelektrisanje postaje jednako nuli.

Koristeći Betheovu teoriju Kim i Čeng su predložili da se atomski broj projektila, z_1 , i jonizacioni potential I_2 , zamene efektivnim vrednostima, z_{2eff} i I_{2eff} koji zavise od osobina projektila [Kim and Cheng, 1980]. Moneta i Czerbanik su računali zaustavnu moć u prvoj Bornovoj aproksimaciji, preko parametara sudara, pri čemu je uzeto u obzir da projektil može da se ekscituje i jonizuje bez razmene naelektrisanja [Moneta and Czerbniak,1994]. Kaneko i Tsuchida su izveli analitičku formulu za zaustavnu moć za projektil sa dva elektrona u metastabilnom stanju bez razmene naelektrisanja [Kaneko and Tsuchida, 1994; Tsuchida and Kaneko, 1997]. Glazov [Glazov, 2002] je razmatrao projekte sa konstantnim naelektrisanjem uzimajući u obzir: elastične sudare, ekscitaciju i jonizaciju atoma mete i ekscitaciju projektila. U radu [Cabrera-Trujillo et al, 1997] autori su računali zaustavnu moć uzimajući u obzir ekscitaciju i jonizaciju atoma mete i projektila, pri čemu je broj elektrona vezanih u projektilu funkcija njegove brzine i izveden je predstavljajući atom Thomas-Fermijevim modelom.

Prilikom računanja zaustavne moći potrebno je poznavanje stanja projektila i atoma mete pre i posle sudara. Kako su funkcije koje ih opisuju složenog oblika, u svim pomenutim pokušajima uvodile su se aproksimacije ili je računata zaustavna moć za konkretna pobuđena stanja projektila i mete.

Sigmund i Haagerup [Sigmund and Haagerup, 1986] su modelovali atom mete kao ansambl kvantnih harmonijskih oscilatora. Izračunali su zaustavnu moć medijuma za tačkasti projektil. Zaustavna moć datog medijuma predstavlja sumu zaustavnih moći svih oscilatora, utežjenih jačinama dipolnih oscilatora atoma diskretnog i kontinualnog spektra.

U ovom radu projektil, kao delimično ogoljen jon, i atom mete su modelovani ansamblom kvantnih harmonijskih oscilatora. Razmatrana je Kulonova interakcija oscilatora projektila i mete. Na osnovu toga izveden je diferencijalni efikasni presek kojim se opisuje proces prelaska stanja projektila i mete iz osnovnog u pobuđeno stanje. Ispitan je uticaj energije pobuđenja projektila na vrednost zaustavne moći.

Izraz za zaustavnu moć je napisan kao suma zaustavnih moći (zaustavnih brojeva) svakog oscilatora kojim se modeluje projektil i meta. Forma izraza omogućuje da se sagleda doprinos zaustavnoj moći usled ekscitacije projektila i ekscitacije mete, posebno. Za konkretan atom mete i projektil, suma zaustavnih brojeva se utežnjava jačinama dipolnih oscilatora datih atoma.

Raspored materijala po glavama

Ovaj rad se sastoji iz dva dela A i B. Deo A je opšti, bez originalnog naučnog doprinosa autora, daje pregled stanja u ovoj oblasti i ima monografski karakter. Deo A se sastoji iz četiri glave.

U prvoj glavi su na nerelativistički način tretirani opšti zakoni sudara između naelektrisanih čestica, preko parametara sudara, bazirajući se na Rutherford-ov modelu rasejanja. Dat je opis osnovnih procesa koji se javljaju prilikom prolaska naelektrisanih čestica kroz materiju. Značaj ovih procesa zavisi od upadne energije naelektrisane čestice, prema čemu su i klasificirani.

U drugoj glavi je prikazan teorijski tretman zaustavne moći na osnovima klasične fizike, od strane Bohr-a, i na osnovima kvantne fizike od strane Bethe-a and Bloch-a. Proces koji su oni opisivali je transformacija kinetičke energije tačkastog projektila na ekscitaciju i jonizaciju atoma mete. U ovom delu su diskutovane aproksimacije koje su oni

uveli pri računanju zaustavne moći. Detaljno su razmatrane korekcije koje se uvode u formulu za zaustavnu moć da bi se procesi prolaska naelektrisane čestice kroz materiju tačnije opisali.

U trećoj glavi je dat pregled radova u kojima je računata zaustavna moć za delimično ogoljen jon. Opisano je uvođenje efektivnog naelektrisanja za projektil koji u sebi sadrži vezane eлектrone i efekat njihovog električnog ekraniranja. Opisano je kako smanjenje naelektrisanja projektila, usled prisustva vezanih elektrona, utiče na zaustavnu moć.

U četvrtoj glavi je, prema Betheovom radu, prikazano izvođenje diferencijalnog efikasnog preseka za sudar delimično ogoljenog jona sa atomima mete na osnovima kvantne mehanike, u prvoj Bornovoj aproksimaciji. Na osnovu toga izvedena je formula za računanje zaustavne moći za delimično ogoljen jon. Posebno je tretiran deo koji predstavlja doprinos zaustavnoj moći usled ekscitacije projektila.

Deo B, za razliku od dela A predstavlja originalan rad kandidata. Rezultati su predstavljeni u okviru V, VI i VII Glave i Zaključka.

U petoj glavi je tretiran sudar kvantnih naelektrisanih oscilatora koji interaguju Kulonovom silom. Uzeto je da je potencijal interakcije mnogo manji od kinetičke energije projektila, što omogućava da se diferencijalni efikasni presek računa u prvoj Bornovoj aproksimaciji. Diferencijalni efikasni presek je izražen preko svojstvenih stanja harmonijskih oscilatora. Ovako dobijen efikasni presek je funkcija naelektrisanja projektila i mete, brzine projektila i energije pobuđenja oscilatora projektila i mete. Na ovaj način može da se ispita koliki se deo kinetičke energije projektila gubi na njegovo pobuđenje.

Na osnovu ovako dobijenog diferencijalnog efikasnog preseka određuje se zaustavna moć kao suma zaustavnih moći pojedinačnih oscilatora.

U šestoj glavi je računat izraz za zaustavnu moć skupa oscilatora i taj izraz je dat kao suma zaustavnih moći pojedinačnih oscilatora mete i projektila. Zaustavna moć neke materije za dati projektil, se računa kao suma zaustavnih moći pojedinačnih oscilatora uteženih dipolnim jačinama oscilatora atoma mete i projektila. Sumiranje se vrši preko diskretnog i kontinualnog spektra energije projektila i mete.

Rezultati dobijeni na osnovu formula izvedenih u prethodnim Glavama su poređeni sa dostupnim eksperimentalnim rezultatima u Sedmoj Glavi.

U Zaključku je dat sažet pregled rezultata i dostignuća rada. Diskutovani su nadjeni rezultati u svetlu postojećih eksperimentalnih i teorijskih podataka.

Opšti pojmovi u teoriji sudara

U ovom odeljku definisane su neke veličine, koje se najčešće koriste u tretiranju prolaska naelektrisanih čestica kroz materiju [Sigmund, 2004].

Centralna veličina koja karakteriše zaustavljanje čestice pri prolasku kroz materiju je *zaustavna moć*. Ona se definiše kao količnik izgubljene kinetičke energije projektila, dE , na pređenom rastojanju, dx , i tog rastojanja.

$$S = -\frac{dE}{dx} \quad (1)$$

Znak minus se uvodi da bi ova veličina bila pozitivna. Jedinica za zaustavnu moć je J/m. Zaustavna moć je povezana sa srednjom promenom impulsa po jedinici pređenog puta kao

$$S = -\frac{dE}{dx} = -v \frac{dP}{dx} \quad (2)$$

Za kompozitni projektil kao što je delimično ogoljen jon, molekul ili klaster, kod koga kinetička energija može biti transformisana u unutrašnju, zaustavna moć je definisana kao

$$\frac{dE}{dx} = \sum_i v_i \left(\frac{dP}{dx} \right)_i \quad (3)$$

pri čemu se sumira po svim konstituentima klastera [Sigmund, 2004].

Masena zaustavna moć je količnik zaustavne moći i gustine materije.

$$S = -\frac{1}{\rho} \frac{dE}{dx} \quad (4)$$

Osnovna jedinica je $\frac{J}{kg} m^2$. U praksi se masena zaustavna moć najčešće izražava u

$$\frac{MeV}{mg} cm^2 .$$

Parametar koji je od osnovnog značaja u atomskoj, nuklearnoj i molekularnoj fizici je *zaustavni efikasni presek*, Sc , i definiše se kao [Sigmund, 2004]

$$Sc = \sum_j w_j \sigma_j \quad (5)$$

Sumiranje se vrši po svim »kanalima« reakcije usled kojih se gubi energija projektila. w_j i σ_j su izgubljene energije i efikasni preseki pri j -toj reakciji.

Gubitak energije, ΔE , za dati pređeni put projektila, l , je statistička veličina, koja ima statističku raspodelu $F(\Delta E, l)$. Srednja izgubljena energija je povezana sa zaustavnom moći prema

$$\langle \Delta E \rangle = \int \Delta E \cdot F(\Delta E, l) \cdot d(\Delta E) = -\frac{dE}{dx} \cdot l \quad (6)$$

Fluktuacija (raštrkavanje) gubitka energije posle pređene putanje, l , u materiji se opisuje *varijansom* [Sigmund, 2004]

$$\Omega^2 = \langle (\Delta E - \langle \Delta E \rangle)^2 \rangle \quad (7)$$

Parametar raštrkavanja gubitka energije, W , se u klasičnoj fizici definiše kao

$$W = \frac{1}{n} \frac{d\Omega^2}{dx}, \quad (8)$$

gde je n brojna koncentracija atoma mete (at/m^3).

U kvantnoj fizici, parametar raštrkavanja gubitka energije projektila se definiše kao [Sigmund, 2004]

$$W = \sum_j w_j^2 \sigma_j. \quad (9)$$

gde su w_j i σ_j opisani u definicijama prethodnih veličina

Parametar sudara predstavlja najmanje rastojanje između početnog pravca projektila i mete, koja je pre sudara u stanju mirovanja.

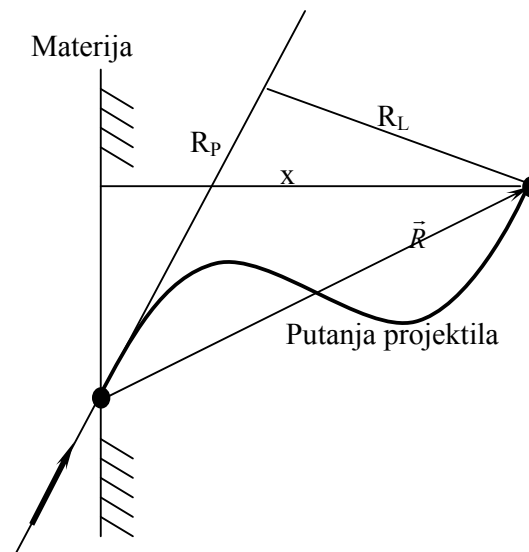
Domet projektila je rastojanje koje pređe projektil u materiji dok ne izgubi svu energiju i preko zaustavne moći se definiše kao

$$R = \int_0^{E_0} \frac{dE}{S(E)}, \quad (10)$$

gde je E_0 početna energija projektila.

Pored ovih veličina od interesa je pomenuti i sledeće [Sigmund, 2004] (Slika 1):

- *Vektor dometa*, \vec{R} , je vektor od startne tačke projektila do krajnje tačke trajektorije.
- *Projektovani domet*, R_p , predstavlja projekciju vektora dometa na početni pravac kretanja projektila
- *Lateralni domet*, R_L , predstavlja komponentu vektora \vec{R} , koja je normalna na početni pravac kretanja
- *Dubina prodiranja*, x , predstavlja komponentu vektora \vec{R} duž pravca koji je normalan na ravan površine mete.



Slika 1. Veličine koje se odnose na pređeno rastojanje projektila u materiji

\vec{R} - vektor dometa; R_L - lateralni domet; R_p - projektovani domet; x -dužina prodiranja

A) UVODNI DEO, OPŠTA RAZMATRANJA

U ovom delu je dat opšti pregled stanja u oblasti prolaska naelektrisanih čestica kroz medijum. Sastoji se iz četiri Glave. U ovom delu su opisane opšte karakteristike prolaska naelektrisanih čestica kroz materiju i procesi koji se pri tome dešavaju. Teorijski je tretiran gubitak energije naelektrisanih čestica na osnovima klasične i kvantne fizike u domenu nerelativističkih energija projektila. Posebno je prikazan teorijski tretman gubitka energije tačkastog projektila i delimično ogoljenog jona.

I OPŠTE KARAKTERISTIKE PROLASKA NAELEKTRISANIH ČESTICA KROZ MATERIJU

U ovoj glavi prikazani su neki aspekti prolaska naelektrisanih čestica kroz materiju. Na nerelativistički način tretirani su opšti zakoni sudara između naelektrisanih čestica, preko parametara sudara, oslanjajući se na Rutherford-ov model rasejanja. Iako je računanje efikasnog preseka za Rutherford-ovo rasejanje dobro poznato, u ovoj tezi je to prikazano radi celine izlaganja. Drugi razlog je što se u ovom modelu javlja divergencija efikasnog preseka zbog beskonačne vrednosti parametara sudara, što je Bohr prevazišao uvodeći konačnu vrednost parametara sudara za daleke sudare.

Naelektrisana čestica pri prolasku kroz materiju gubi svoju energiju preko elastičnih i neelastičnih sudara sa atomima mete i u formi elektromagnetnog zračenja (radijacioni gubici). Ovi procesi su detaljnije opisani u ovoj Glavi, dok je njihov teorijski tretman prikazan u sledećoj Glavi.

1.1. Sudar naelektrisanih čestica prema Rutherford-ovom modelu

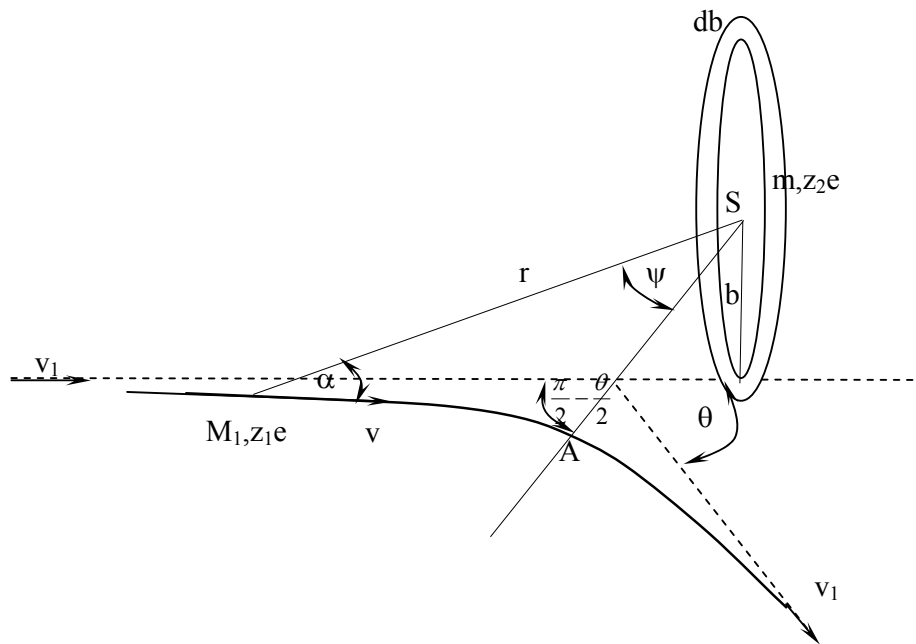
U ovom poglavlju prikazano je izvođenje formule za efikasni presek i gubitak energije teške naelektrisane čestice, koja se kreće i sudara sa naelektrisanom česticom. Sudar je tretiran prema Rutherfordovom modelu preko parametara sudara.

Čestica mase M_1 , naelektrisanja z_1e , koja se kreće brzinom v_1 i približava se čestici mase m ($M_1 \gg m$) naelektrisanja z_2e , koja relativno miruje, Slika 2. Početni pravac kretanja

upadne čestice je na rastojanju b (parametar sudara) od centra rasejanja. Nakon interakcije, pravac kretanja upadne čestice biće promenjen za ugao θ .

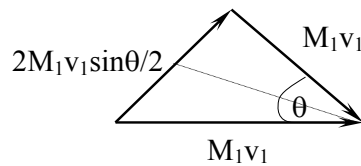
Između projektila i mete deluje Kulonova sila

$$F = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{4\pi\epsilon_0 r^2} \quad (11)$$



Slika 2. Rutherford-ov model rasejanja

Ako se uzmak čestice koja predstavlja centar rasejanja zanemari, može se smatrati da se brzina projektila tokom rasejanja malo menja. Usled dejstva sile dolazi do promene impulsa, čija promena iznosi $\Delta p = 2M_1 v_1 \sin \theta / 2$, u smeru SA (Slika 2. i Slika 3.).



Slika 3. Trougao promene impulsa

Promena impulsa se može izračunati preko sile

$$\Delta p = \int F dt = \int_0^{\infty} \frac{z_1 z_2 e^2}{4\pi\epsilon_0 r^2} \cos(\psi) dt = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{z_1 z_2 e^2}{4\pi\epsilon_0 r^2} \cos(\psi) \frac{ds}{v} \quad (12)$$

$$\Delta p = \frac{z_1 z_2 e^2}{4\pi\epsilon_0} \int_{-\pi/2}^{\pi/2} \frac{\cos(\psi)}{r^2 v} \frac{rd\psi}{\sin(\alpha)} \quad (13)$$

Prema zakonu održanja momenta impulsa važi da je $bv = vr \sin \alpha$, tako da je promena impulsa jednaka

$$\Delta p = \frac{z_1 z_2 e^2}{2\pi\epsilon_0 bv} \cos \frac{\theta}{2} \quad (14)$$

Pošto je na početku predpostavljeno da upadna čestica ima veoma veliku masu u odnosu na česticu sa kojom se sudara, skretanje upadne čestice je veoma malo, i može se postaviti da je $\theta=0$. Zamenom u izraz (12) da je $z_2=1$, dobija se

$$\Delta p = \frac{z_1 e^2}{2\pi\epsilon_0 bv} \quad (15)$$

Za nerelativističko kretanje energija koju projektil preda meti jednaka je

$$Q = \frac{\Delta p^2}{2m} \quad (16)$$

Odnosno, zamenom relacije (15) za predatu energiju se dobija

$$Q = \frac{1}{8\pi^2 \epsilon_0^2} \frac{z_1^2 e^4}{mb^2 v^2} \quad (17)$$

Ako projektil prolazi kroz materiju, koja ima N_2 elektrona (centra rasejenja) u jedinici zapremine, tada se ukupna izgubljena energija projektila, koji u materiji pređe rastojanje dx , može napisati kao

$$dE = 2\pi N_2 dx \int_{b_{\min}}^{b_{\max}} Q \cdot b \cdot db \quad (18)$$

Zamenjujući (17) u (18) se dobija

$$dE = 2\pi N_2 dx \frac{1}{8\pi^2 \epsilon_0^2} \frac{z_1^2 e^4}{mv^2} \int_{b_{\min}}^{b_{\max}} \frac{db}{b} \quad (19)$$

Iz prethodne relacije se dobija da je

$$\frac{dE}{dx} = \frac{1}{4\pi \epsilon_0^2} \frac{z_1^2 e^4}{mv^2} N_2 \ln \left(\frac{b_{\max}}{b_{\min}} \right) \quad (20)$$

Gubitak energije projektila, dat izrazom (20), zavisi od naelektrisanja, mase i brzine projektila i atoma iz kojih je sastavljena materija

Problem koji se javlja pri računanju gubitka energije projektila preko parametara sudara, je definisanje minimalne i maksimalne vrednosti parametara sudara. Ukoliko se za minimalnu vrednost parametara sudara uzme da je $b_{\min}=0$, argument logaritamske funkcije divergira. Sličan problem nastaje ako se za maksimalnu vrednost parametra sudara uzme $b_{\max}=\infty$. Pri ovim vrednostima parametara sudara izraz (18) za računanje gubitka energije projektila će divergirati. Kako je taj problem rešio Bohr, biće rečeno u poglavlju I 3.

I 2. Procesi gubitka energije projektila pri prolasku kroz materiju

Kulonova interakcija teških naelektrisanih čestica sa atomskim elektronima je glavni uzrok gubitka energije projektila pri prolasku kroz materiju i najveći procenat energije se gubi usled te interakcije. Postoji više procesa na osnovu kojih teške naelektrisane čestice gube svoju energiju prilikom interakcije sa materijom kroz koju prolaze (rasejanje, excitacija, jonizacija, gubitak energije zračenjem, i dr.). Svi ovi procesi su jako složeni i mogu se klasifikovati u šest grupa:

1. ekscitacija i jonizacija atoma mete;
2. ekscitacija i jonizacija projektila;
3. razmena naelektrisanja;
4. uzmak jezgra atoma mete;
5. elektromagnetno zračenje i
6. nuklearne interakcije.

Prilikom sudara projektila sa atomom mete može doći do excitacije atoma mete, odnosno da njegovi elektroni predju u viši energetska nivo. Energija koju elektroni atoma mete dobijaju pri takvom prelazu potiče od izgubljene kinetičke energije projektila. Ukoliko je ta energija dovoljno velika može doći do odvajanja elektrona iz atoma, što se naziva *primarnom jonizacijom*. Tako nastali elektroni-*primarni elektroni* mogu imati dovoljnu energiju da i dalje izazovu jonizaciju atoma mete-*sekundarnu jonizaciju*.

Pri usporavanju projektila koji prolazi kroz materiju, mogućnost da za sebe veže elektrone od atoma mete postaje više verovatna. Kada projektil zahvati elektrone od atoma mete, tada se on ne tretira kao *tačkasto* naelektrisanje, već kao *delimično ogoljen jon*. Prilikom sudara sa metom delimično ogoljen jon može da izgubi kinetičku energiju, a da je ne preda atomu mete, već da se ona utroši na njegovo pobuđenje ili jonizaciju.

Proces je malo složeniji ukoliko se atom mete i delimično ogoljen jon nalaze u ekscitovanim stanjima pre sudara. U tom slučaju projektil, nakon interakcije sa atomom mete, može da ima veću kinetičku energiju, koja potiče od njegove deekscitacije ili deekscitacije atoma mete.

Pored excitacije i jonizacije atoma mete i projektila, dodatni proces usled kojeg projektil gubi svoju energiju je uzmak atoma mete. Prilikom interakcije projektila i atoma mete može da se desi da njihova unutrašnja stanja ostanu nepromenjena, a da se meta pomeri iz svog prvobitnog položaja (elastično rasejanje). Bethe je u svom radu o prolasku naelektrisanih čestica kroz materiju [Bethe, 1930], pokazao da je energija eksitacije atoma mete M_1/m puta veća nego energija koja je potrebna da se atom uzmakne. U tom radu Bethe je pokazao da se energija koju projektil gubi usled elastičnog sudara i uzmicanja atoma odnosi prema energiji koju gubi pri neelastičnom sudaru na eksitaciju atoma, kao $\frac{z_2 m}{M_1}$. To znači da je izgubljena energija projektila usled uzmaka atoma mete manja od 0.1% i prilikom razmatranja interkacije, uzmak atoma se može zanemariti i atom materije tretirati kao beskonačno teška meta.

Interakcija između brze naelektrisane čestice i jezgra može da dovede do naglog ubrzanja. Po zakonima elektrodinamike, to dovodi do emisije elektromagnetnog zračenja. Tako izazvano zakočno zračenje je važan mehanizam gubitka energije čestice pri prolazu kroz materiju ukoliko projektil ima visoku kinetičku energiju. Pri nižim energijama ovaj proces je manje dominantan. Drugi oblik, radijativnog gubitka, koji se u osnovi razlikuje od zakočnog zračenja, jeste Čerenkovo zračenje. Ono se javlja kao posledica longitudinalne polarizacije sredine, pri prolasku naelektrisane čestice, čija brzina prelazi faznu brzinu svetlosti u toj sredini.

Pri visokim energijama projektila, dejstvo nuklearnih sila se može zanemariti, jer efikasni presek interakcije preko nuklearnih sila 10^{-10} puta manji od efikasnog preseka interakcije sa elektronskim omotačem.

Ukupan gubitak energije neke čestice pri prolasku kroz materiju je usled sudara i zračenja i zaustavna moć materije se može definisati kao

$$S = -\frac{dE}{dx} = \left(-\frac{dE}{dx}\right)_{\text{sudar}} + \left(-\frac{dE}{dx}\right)_{\text{zra}}, \quad (21)$$

gde znak “minus” govori da se energija projektila gubi pri prolasku kroz materiju.

Pri prolasku kroz materiju, teške naelektirsane čestice najviše predaju energiju elektronima atoma mete. Pri tome se atom pobudjuje ili jonizuje. S obzirom da je masa

elektrona mnogo manja od mase projektila, skretanje projektila je zanemarljivo i multi-rasejanje nije potrebno razmatrati.

Za sudare između naelektrisanih ili neutralnih čestica, lakih ili teških, važe zakoni održanja energije i impulsa. Ti zakoni određuju odnose između uglova rasejanja i uzmaka i daju rezultate koji su nezavisni od detaljnog mehanizma sudara.

II TEORIJSKI TRETMAN ZAUSTAVNE MOĆI

U ovoj Glavi dat je prikaz teorijskog tretmana gubitka energije projektila koji prolazi kroz materiju na osnovu klasične i kvantne fizike. Na početku je prikazan metod kojim je Bohr izračunao zaustavnu moć na osnovima klasične fizike koristeći parametar sudara [Bohr, 1913]. Za razliku od Thomsona [Thomson, 1912], koji je materiju modelovao slobodnim elektronima, Bohr je elektrone materije tretirao kao klasične harmonijske oscilatore, pripisujući im ugaonu učestanost, ω , i opisivao interakciju projektila sa njima.

Dvadeset godina kasnije, Bethe je izveo na osnovi kvantne mehanike i prve Bornove aproksimacije, izraz za zaustavnu moć [Bethe, 1930]. Pri tome je diferencijalni efikasni presek izražen kao funkcija predatog impulsa. U svom radu smatrao je da projektil gubi energiju na ekscitaciju i jonizaciju atoma mete.

Bloch je korigovao Betheov izraz za zaustavnu moć [Bloch, 1933]. Njegova korekcija daje prelaz u klasičnu Bohrovu teoriju zaustavne moći i dodaje se Betheovom izrazu za male brzine projektila [ICRU49]

Bohr - Bethe – Bloch-ova formula za zaustavnu moć odstupa od eksperimentalnih podataka pri nižim vrednostima kinetičke energije projektila. Uvedene su korekcije koje su ublažile teorijska odstupanja od eksperimentalnih rezultata. To su korekcija ljuske, korekcija gustine i Barkasova korekcija. One će detaljno biti opisane na kraju ovog poglavlja.

II 1. Bohr-ov račun zaustavne moći

Bohr je polazio od toga da su efekti vezivanja elektrona bitni za gubitak energije projektila. U ranijim radovima je problem prolaska naelektrisanih čestica kroz materiju tretiran uzimajući u obzir sudare sa slobodnim elektronima. Za maksimalnu vrednost parametra sudara uzeta je vrednost koja bi uklonila divergenciju u formuli za gubitak energije projektila. Ova divergencija je u smislu da integral Rutherfordovog diferencijalnog preseka divergira. Ograničena vrednost parametara sudara uvedena je i u ranijim radovima. Smatrano je da maksimalna vrednost parametara sudara odgovara radijusu atoma, izvan koga je dejstvo sila jednako nuli. Thomson je predlagao da maksimalna vrednost parametara bude međuelektronski prostor [Thomson, 1912].

Jedan od originalnih zaključaka Bohra je da se gubitak energije projektila, koji prolazi kroz materiju sastoji od dve komponente: gubitak usled interakcije sa jezgrom mete (*nuclear stopping*) i gubitak energije usled interakcije projektila sa elektronima atoma mete (*electronic stopping*). U svojim prvim radovima Bohr je došao do zaključka da je gubitak energije projektila usled interakcije sa elektronima mnogo puta veći od energije koja se izgubi na uzmak atoma. Do ovog zaključka je došao preko kinematike sudara i relativnog odnosa mase mnoštva elektrona mete i jezgara. Prvi je u teorijskom tretmanu zaustavne moći uveo strukturu atoma tako što je elektronima atoma mete pripisao oscilatornu prirodu, dodelio orbitalne frekvencije dobijene iz optičkih spektara i računao predatu energiju za takve harmonijske oscilatore.

Bohr je računao zaustavnu moć koristeći parametar sudara. Iz relacije (15) se vidi da impuls, koji projektil preda elektronu, zavisi od parametara sudara, b . Izraz (18), koji predstavlja izgublenu energiju projektila divergira ukoliko se razmatra čeon sudar ($b_{\min}=0$) i ukoliko se smatra da je projektil beskonačno udaljen od elektrona mete sa kojim interaguje ($b_{\max} = \infty$).

Maksimalna vrednost predatog impulsa, pri čeonom sudaru jednaka je $2m_e v$, ukoliko je masa upadnog projektila mnogo veća od mase elektrona. Iz relacije (15) za minimalnu vrednost parametara sudara se dobija

$$b_{\min} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{z_1 e^2}{mv^2} \quad (22)$$

Pri interakcijama projektila i elektrona mete sa velikim parametrom sudara, Bohr je smatrao da postoji određeno vreme interakcije. Ukoliko je to vreme mnogo duže od orbitalnog perioda elektrona, te interakcije treba zanemariti. Otuda maksimalna vrednost parametra sudara iznosi

$$b_{\max} = \frac{v}{\omega} \quad (23)$$

gde je ω učestanost oscilovanja elektrona u atomima mete.

Zamenjujući minimalnu i maksimalnu vrednost parametara sudara u izraz (20) za zaustavnu moć se dobija

$$\frac{dE}{dx} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{z_1^2 e^4}{mv^2} N_2 \ln \left(4\pi\epsilon_0 \frac{mv^3}{z_1 e^2 \omega} \right) \quad (24)$$

Postoji još jedan pristup računanju zaustavne moći korišćenjem parametara sudara, pomoću kojeg je Bohr do sličnog izrara. Pretpostavio je da postoji kritična vrednost parametara sudara, b_I , tako da sudari sa parametrom $b > b_I$ mogu biti tretirani kao elektromagnetna eksitacija naelektrisanog harmonijskog oscilatora u uniformnom električnom polju nastalom prolaskom naelektrisane čestrice. Sudari sa parametrom $b < b_I$ mogu biti tretirani kao rasejanje projektila na slobodnim elektronima.

Uz pretpostavku da je masa projektila mnogo veća od mase elektrona, $M_1 \gg m$, Bohr je dobio da je izgubljena energija projektila, u funkciji od parametra (za veće vrednosti parametara sudara) sudara ima oblik [Bohr, 1913]

$$\Delta E(b) = \frac{2z_1^2 e^4}{mv^2 b^2} \left(\xi^2 K_1^2(\xi) + \frac{\xi^2 K_0^2(\xi)}{\gamma^2} \right), \quad b > b_I \quad (25)$$

gde je $\xi = \frac{\omega b}{\gamma v}$, ω je kružna učestanost oscilatora, $\gamma = 1/\sqrt{1 - v^2/c^2}$, a $K_{0,1}(\xi)$ su Beselove funkcije [Mitrinović, 1991].

Za manje vrednosti parametara sadara dobijen je izraz

$$\Delta E(b) = \frac{2z_1^2 e^4}{(4\pi\epsilon_0)^2 mv^2} \frac{1}{b^2 + (Z_1 e^2 / mv^2 \gamma)^2}, \quad b < b_I \quad (26)$$

Zaustavna moć za sudare sa $b > b_I$ je izračunata integracijom od $b = b_I$ do $b = \infty$ [Jackson, 1975]:

$$S_{>b_I} = \frac{4\pi z_1^2 e^4}{(4\pi\epsilon_0)^2 mv^2} \left(\xi_1 K_1(\xi) K_0(\xi) - \frac{1}{2} \beta^2 \xi_1^2 (K_1^2(\xi) - K_0^2(\xi)) \right), \quad (27)$$

a integracijom izraza (26) $b=0$ do $b=b_l$ zaustavna moć ima oblik

$$S_{<b_l} = \frac{2\pi z_1^2 e^4}{(4\pi\epsilon_0)^2 mv^2} \ln \left(1 + \left(\frac{mv^2 \gamma b_l}{Z_1 e^2} \right)^2 \right). \quad (28)$$

$S_{>b_l}$ divergira kada b_l teži nuli i $S_{<b_l}$ takođe, divergira ako b_l teži beskonačnosti. Birajući da je $b_l \ll \gamma v / \omega$ i $b_l \gg Z_1 e^2 / mv^2 \gamma$, ove dve jednačine se mogu napisati kao:

$$S = \frac{4\pi z_1^2 e^4}{(4\pi\epsilon_0)^2 mv^2} N \left(\ln \frac{1.123mv^3}{Z_1 e^2 \omega} - \ln(1 - \beta^2) - \frac{\beta^2}{2} + R_1 \right) \quad (29)$$

gde je $R_1 = R_1(b)$ funkcija od parametra sudara i ima oblik:

$$R_1 = \frac{1}{2} \left(\frac{Z_1 e^2}{mv^2 \lambda b_l} \right)^2 + \frac{1}{4} \xi_1^2 \left(1 - \frac{2 \left(0.577 + \ln \left(\frac{\xi_1}{2} \right) \right)^2}{\gamma^2} - 2\beta^2 \left(0.077 + \ln \left(\frac{\xi_1}{2} \right) \right) \right) \quad (30)$$

Vidi se da Bohr-ova formula za zaustavnu moć sadrži i članove koje se odnose na relativistički efekat. Za nerelativistički slučaj u SI jedinicama zaustavna moć prema Bohr-u ima oblik

$$S = \frac{4\pi z_1^2 e^4}{(4\pi\epsilon_0)^2 mv^2} N \ln \left(4\pi\epsilon_0 \frac{1.123mv^3}{Z_1 e^2 \omega} \right) \quad (31)$$

II 2. Kvantno - mehanički račun zaustavne moći

Dvadesetih godina prošlog veka došlo se na ideju da se kvantni efekti uključe u problem zaustavne moći. Henderson je 1922. primenio koncept diskretnih energetskih nivoa ograničavajući moguće energetske prelaze u vrednosti ispod jonizacionog potencijala, [Henderson,1922]. Gaunt 1927. je došao do istog rezultata kao i Bohr tako što je dejstvo atoma sredine na upadnu česticu tretirao kao perturbaciju [Gaunt, 1927].

Bethe [Bethe, 1930] je zaustavnu moć računao kvantno mehanički u prvoj Born-ovoj aproksimaciji, pri čemu je sistem »naelektrisana čestica + atom« tretirao kao kvantno mehanički sistem. U svom radu je uzeo u obzir da projektil gubi svoju kinetičku energiju na pobuđenje i jonizaciju atoma mete.

U ovom poglavlju je prikazano izvođenje diferencijalnog efikasnog preseka za sudar projektila sa atomom mete u prvoj Bornovoj aproksimaciji koristeći teoriju vremenski zavisne perturbacije. Zatim je na osnovu tako dobijenog efikasnog preseka opisan kvantno mehanički račun zaustavne moći.

II 2.1. Diferencijalni efikasni presek sudara u prvoj Bornovoj aproksimaciji

Prva Bornova aproksimacija je približna metoda pomoću koje se određuju stanja sistema nakon dejstva perturbacije. Ona predstavlja aproksimativni pristup određivanja verovatnoće da se nakon dejstva perturbacije sistem nađe u nekom od neperturbovanog stanja. U ovom radu je prikazano izvođenje verovatnoće prelaska, u prvoj Bornovoj aproksimaciji, prema [Herbut, 1982] i [Ivanović, 1974]

Pretpostavimo da se Hamiltonian sistema može napisati kao

$$\hat{H}(t) = \hat{H}_0 + \hat{H}'(t) \quad (32)$$

gde je \hat{H}_0 neperturbovani hamiltonian, koji je dominantan i koji ne zavisi od vremena. $\hat{H}'(t)$ je perturbacija zavisna od vremena.

Svojstveni problem neperturbovanog Hamiltoniana je oblika

$$\hat{H}_0|n\rangle = E_n|n\rangle \quad (33)$$

Ukoliko se u početnom trenutku, t_0 , sistem nalazi u stanju $|\Psi(t_0)\rangle$, tada će nakon vremena $t-t_0$ sistem biti u stanju $|\Psi(t)\rangle$ koje se određuje evolucionim operatorom

$$|\Psi(t)\rangle = \hat{U}(t-t_0, t_0)|\Psi(t_0)\rangle \quad (34)$$

Primena teorije perturbacija zavisnih od vremena je u razvoju stanja $|\Psi(t)\rangle$ u red

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_{p=0}^{\infty} |\Psi^{(p)}(t)\rangle \quad (35)$$

i izračunavanju članova $|\Psi^{(p)}(t)\rangle$. Stanje $|\Psi^{(p)}(t)\rangle$ predstavlja p-tu popravku stanja $|\Psi(t)\rangle$.

Ono što je važno istaći je da stanje $|\Psi(t)\rangle$ ne mora biti svojstveno za hamiltonian $\hat{H}(t)$ kao ni za hamiltonian \hat{H}_0 .

Svako stanje u sumi se može napisati kao

$$|\Psi^{(p)}(t)\rangle = \hat{U}^{(p)}(t-t_0, t_0)|\Psi(t_0)\rangle \quad (36)$$

Kombinujući relacije (35) i (36) dobija se relacija

$$\hat{U}(t-t_0, t_0) = \sum_{p=0}^{\infty} \hat{U}^{(p)}(t-t_0, t_0) \quad (37)$$

iz koje dobijamo članove razvoja evolucionog operatora, $\hat{U}^{(p)}$.

Evolucioni operator, \hat{U} , se može napisati kao $\hat{U} = \hat{U}_0 \hat{U}'$, gde je \hat{U}_0 evolucionni operator neperturbovanog Hamiltonijana \hat{H}_0 , a \hat{U}' je evolucionni operator perturbacije $\hat{H}'(t)$. Evolucionni operator, \hat{U} , zadovoljava diferencijalnu jednačinu

$$i\hbar \frac{\partial \hat{U}}{\partial t} = \hat{H}\hat{U} \quad (38)$$

i dobija se da važi

$$i\hbar \frac{\partial \hat{U}'(t-t_0, t_0)}{\partial t} = \hat{H}'_I \hat{U}'(t-t_0, t_0) \quad (39)$$

gde je

$$\hat{H}'_I = \hat{U}_0^\dagger(t-t_0, t_0) \hat{H}'(t) \hat{U}_0(t-t_0, t_0) \quad (40)$$

Prema diferencijalnoj jednačini (39) dobija se

$$\hat{U}'(t-t_0, t_0) = \hat{I} - i\hbar^{-1} \int_{t_0}^t \hat{H}'_I(t_1) \hat{U}'(t_1-t_0, t_0) dt_1 \quad (41)$$

Odnosno, iterativno, zamenjujući izraz (40) u izraz (41) dobija se

$$\begin{aligned} \hat{U}'^{(0)}(t-t_0, t_0) &= \hat{I} \\ \hat{U}'^{(1)}(t-t_0, t_0) &= -i\hbar^{-1} \int_{t_0}^t \hat{H}'_I(t_1) dt_1 \\ \hat{U}'^{(2)}(t-t_0, t_0) &= (i\hbar)^{-2} \int_{t_0}^t \hat{H}'_I(t_1) \int_{t_0}^{t_1} \hat{H}'_I(t_2) dt_2 dt_1 \end{aligned} \quad (42)$$

Iz relacije (37) može se napisati

$$\hat{U} = \sum_{p=0}^{\infty} \hat{U}^{(p)} = \sum_{p=0}^{\infty} \hat{U}_0 \hat{U}'^{(p)} \Rightarrow \hat{U}' = \sum_{p=0}^{\infty} \hat{U}'^{(p)} \quad (43)$$

Odnosno, odgovarajući elementi u sumi postaju

$$\hat{U}^{(0)}(t-t_0, t_0) = \hat{U}_0 \hat{U}'^{(0)}(t-t_0, t_0) = \hat{U}_0(t-t_0, t_0) \quad (44)$$

$$\begin{aligned}
\hat{U}^{(1)} &= \hat{U}_0 \hat{U}^{(1)} = \hat{U}_0(t-t_0, t_0) \left(-i\hbar^{-1} \int_{t_0}^t \hat{H}'(t_1) dt_1 \right) = \\
&= -i\hbar^{-1} \int_{t_0}^t \underbrace{\hat{U}_0(t-t_0, t_0)}_{\hat{U}_0(t-t_1, t_1) \hat{U}_0(t_1-t_0, t_0)} \hat{U}_0^+(t_1-t_0, t_0) \hat{H}'(t_1) \hat{U}_0(t_1-t_0, t_0) dt_1
\end{aligned} \tag{45}$$

$$\hat{U}^{(1)} = -i\hbar^{-1} \int_{t_0}^t \hat{U}_0(t-t_1, t_1) \hat{H}'(t_1) \hat{U}_0(t_1-t_0, t_0) dt_1 \tag{46}$$

Verovatnoća da nakon dejstva perturbacije sistem iz stanja $|n_0\rangle$, u kome se nalazio u nekom trenutku t_0 , pređe u stanje $|n\rangle$ u trenutku t ($t > t_0$) je

$$P(|n_0\rangle, t_0 \Rightarrow |n\rangle, t) = \left| \langle n | \hat{U}(t-t_0, t_0) | n_0 \rangle \right|^2 \tag{47}$$

Odnosno, zamenom relacije (37) postaje

$$P = \left| \langle n | \sum_p \hat{U}^{(p)}(t-t_0, t_0) | n_0 \rangle \right|^2 \approx \left| \langle n | \hat{U}^{(0)}(t-t_0, t_0) + \hat{U}^{(1)}(t-t_0, t_0) | n_0 \rangle \right|^2 \tag{48}$$

Zamenjujući izraz (46) u izraz (48) dobija se

$$P = \left| \langle n | \hat{U}^{(1)}(t-t_0, t_0) | n_0 \rangle \right|^2 = \left| \langle n | -i\hbar^{-1} \int_{t_0}^t \hat{U}_0(t-t_1, t_1) \hat{H}'(t_1) \hat{U}_0(t_1-t_0, t_0) dt_1 | n_0 \rangle \right|^2 \tag{49}$$

Pošto su stanja $|n\rangle$ svojstvena evolucionom operatoru U_0 , izraz (49) dobija oblik

$$P = \left| -i\hbar^{-1} \int_{t_0}^t e^{\frac{i}{\hbar} E_n(t-t_1)} \langle n | \hat{H}'(t_1) | n_0 \rangle e^{-\frac{i}{\hbar} E_{n_0}(t_1-t_0)} dt_1 \right|^2 \tag{50}$$

U slučaju da perturbacija ne zavisi od vremena, i da je početni trenutak dejstva perturbacije $t_0 = 0$, izraz za verovatnoću se uprošćuje kao

$$P = \left| -i\hbar^{-1} \langle n | \hat{H}' | n_0 \rangle e^{\frac{i}{\hbar} E_n t} \int_0^t e^{\frac{i}{\hbar} (E_n - E_{n_0}) t_1} dt_1 \right|^2 \quad (51)$$

Odnosno,

$$P = \left| -i\hbar^{-1} \langle n | \hat{H}' | n_0 \rangle e^{\frac{i}{\hbar} E_n t} \int_0^t e^{i w_{n_0} t_1} dt_1 \right|^2, \quad w_{n_0} = \frac{E_n - E_{n_0}}{\hbar} \quad (52)$$

Nakon integracije verovatnoća prelaska postaje

$$P = \left| -i\hbar^{-1} \langle n | \hat{H}' | n_0 \rangle e^{\frac{i}{\hbar} E_n t} \frac{e^{i w_{n_0} t} - 1}{i w_{n_0}} \right|^2 \quad (53)$$

Kada se razvije kvadrat modula

$$P = \left| \langle n | \hat{H}' | n_0 \rangle e^{\frac{i}{\hbar} E_n t} \frac{1 - e^{i w_{n_0} t}}{\hbar w_{n_0}} \right|^2 = \frac{|\langle n | \hat{H}' | n_0 \rangle|^2}{(\hbar w_{n_0})^2} (1 - e^{i w_{n_0} t})(1 - e^{-i w_{n_0} t}) \quad (54)$$

i uvedu trigonometrijske transformacije, verovatnoća prelaska ima oblik

$$P = \frac{|\langle n | \hat{H}' | n_0 \rangle|^2}{(\hbar w_{n_0})^2} (2 - 2 \cos(w_{n_0} t)) \quad (55)$$

Odnosno, može se napisati

$$P = \frac{4 \cdot |\langle n | \hat{H}' | n_0 \rangle|^2}{(\hbar w_{n_0})^2} \sin^2 \left(\frac{w_{n_0} t}{2} \right) \quad (56)$$

Neka je broj konačnih stanja u kojima može da se nađe sistem posle dejstva perturbacije jednak $d\xi$, tada je gustina konačnih stanja

$$\rho(E) = d\xi/dE \quad (57)$$

Ako je P verovatnoća da stanje n_0 pređe u stanje n, tada

$$dW = P \cdot d\xi \quad (58)$$

predstavlja verovatnoću da sistem pređe u neko konačno stanje.

Zamenom izraza (56) u izraz (58) dobija se

$$dW = \frac{4 \cdot |\langle n | \hat{H}' | n_0 \rangle|^2}{(\hbar w_{m_0})^2} \sin^2 \left(\frac{w_{m_0} t}{2} \right) d\xi \quad (59)$$

Integraleći po energiji, izraz (58) postaje

$$W = 4 \cdot |\langle n | \hat{H}' | n_0 \rangle|^2 \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\sin^2 \left(\frac{w_{m_0} t}{2} \right) \rho(E)}{(\hbar w_{m_0})^2} dE \quad (60)$$

Ako je gustina stanja konstantna (ne zavisi od energije), tada $\rho(E)$ može da iziđe ispred integrala. Koristeći $dE = \hbar d\omega$, može se napisati

$$W = \frac{4 \cdot |\langle n | \hat{H}' | n_0 \rangle|^2}{\hbar} \rho \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\sin^2 \left(\frac{w_{m_0} t}{2} \right)}{(w_{m_0})^2} dw_{m_0} \quad (61)$$

Kako je $\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\sin^2 x}{x^2} dx = \pi$, dobija se

$$W = \frac{4 \cdot |\langle n | \hat{H}' | n_0 \rangle|^2}{\hbar} \rho \frac{\pi t}{2} \quad (62)$$

Verovatnoća da sistem u jedinici vremena pređe iz stanja n_0 u stanje n , nakon dejstva peturbacije \hat{H}' , ima oblik

$$dw = \frac{2\pi \cdot |\langle n | \hat{H}' | n_0 \rangle|^2}{\hbar} \frac{d\xi}{dE} \quad (63)$$

Element zapremine faznog prostora koji odgovara jednom stanju, usled relacije neodređenosti iznosi h^3 . S toga, ukupan broj stanja u nekom elementu zapremine $d\Gamma$ iznosi $d\xi = d\Gamma/h^3$. $d\Gamma = dp_x dp_y dp_z = p^2 dp d\Omega$, $d\Omega$ je element prostornog ugla vektora impulsa, \vec{p} .

Broj stanja u elementu zapremine faznog prostora $d\Gamma$ iznosi

$$d\xi = \frac{d\Gamma}{(2\pi\hbar)^3} = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} p^2 dp d\Omega \quad (64)$$

S obzirom da je veza između energije i impulsa

$$E = \frac{p^2}{2m} \Rightarrow dE = \frac{p}{m} dp \quad (65)$$

prema relaciji (63) broj stanja u koji sistem može da pređe nakon dejstva peturbacije u jedinici vremena jednak je

$$dw = \frac{m}{4\pi^2 \hbar^4} \left| \langle n | \hat{H}' | n_0 \rangle \right|^2 p d\Omega \quad (66)$$

Diferencijalni efikasni presek se definiše kao

$$d\sigma = \frac{dw}{J} \quad (67)$$

gde je J gustina verovatnoće upadnih čestica i brojno je jednaka brzini projektila

$$J = \frac{i\hbar}{2m} \left(\psi \frac{d\psi^*}{dx} - \psi^* \frac{d\psi}{dx} \right) = \frac{i\hbar}{2m} \left(e^{ikx} (-ik) e^{-ikx} - e^{-ikx} i k e^{ikx} \right) = \frac{i\hbar}{2m} (-2ik) = \frac{\hbar k}{m} = v \quad (68)$$

Na osnovu relacija (66-68) diferencijalni efikasni presek postaje

$$d\sigma_n = \frac{m^2}{4\pi^2 \hbar^4} \left| \langle n | \hat{H}' | n_0 \rangle \right|^2 d\Omega \quad (69)$$

gde je sa indeksom n označen kvantni broj koji karakteriše konačno stanje sistema. Diferencijalni efikasni presek da usled sudara, sistem iz nekog početnog stanja (i) pređe u konačno stanje (f), je oblika

$$d\sigma_{if} = \frac{m^2}{4\pi^2\hbar^4} |\langle f | \hat{H}' | i \rangle|^2 d\Omega \quad (70)$$

II 2.2. Bethe-ov račun zaustavne moći

Razlika između Bohrovog i Betheovog računanja diferencijalnog efikasnog preseka je u tome što je Bethe koristio predati impuls u prvoj Bornovoj aproksimaciji, a ne parametar sudara. Za veoma male parametre sudara, klasičan tretman ne daje dobre rezultate.

Zaustavna moć se korišćenjem diferencijalnog efikasnog preseka može definisati kao

$$-\frac{dE}{dx} = N \sum_n (E_n - E_0) \int_{Q_{\min}}^{Q_{\max}} d\sigma_n \quad (71)$$

gde je N je broj čestica mete po jedinici zapremine; Q_{\min} i Q_{\max} su minimalna i maksimalna energija koju projektil može da preda meti, pri čemu će se vrednost impulsa projektila, p , promeniti za vrednost q na vrednost p' , ($q=p'-p$); E_n i E_0 su svojstvene vrednosti energije za pobuđeno i osnovno stanje atoma mete.

Prema Bethe-u diferencijalni efikasni presek u prvoj Bornovoj aproksimaciji je dat kao (izvodjenje se može videti i u [Fano, 1963])

$$d\sigma_n = \frac{2\pi}{\hbar v} |\langle p', n | \hat{H}' | p, 0 \rangle|^2 \delta(E' + E_n - E) \frac{d\vec{p}'}{h^3} \quad (72)$$

gde $|p, 0\rangle$ i $|p', n\rangle$ predstavljaju početno i konačno stanje sistema “atom+projektil”.

δ funkcija nameće zakon održanja energije. Energija sistema pre sudara jednaka je energiji sistema posle sudara

$$E + E_0 = E' + E_n \quad (73)$$

gde su E i E' energije projektila, pre i posle sudara.

S obzirom da je pogodnije integraciju vršiti po predatoj energiji projektila $Q = \frac{q^2}{2m}$, diferencijal, $d\vec{p}'$, u relaciji (72) se može transformisati kao

$$d\vec{p}' = p'^2 \frac{dp'}{dE'} dE' d\Omega \equiv p'^2 \frac{1}{v'} dE' d\Omega \quad (74)$$

Zamenom u relaciju (72) diferencijalni efikasni presek postaje

$$d\sigma_n = \frac{1}{4\pi^2 \hbar^4 v'} |\langle p'n | \hat{H}' | p, 0 \rangle|^2 p'^2 d\Omega \quad (75)$$

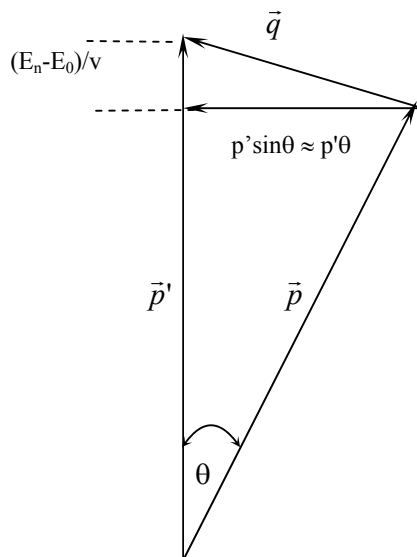
Pošto je masa projektila mnogo veća od mase elektrona, ugao rasejanja je vrlo mali i $d\Omega = 2\pi \sin\theta d\theta = 2\pi\theta d\theta$, te se dobija

$$p'^2 d\Omega = 2\pi p'^2 \theta d\theta \quad (76)$$

Na Slici 4 su prikazani vektori impulsa projektila, \vec{p} i \vec{p}' , pre i posle sudara, respektivno. Njihova razlika je predati impuls $\vec{q} = \vec{p}' - \vec{p}$. Ugao θ je ugao između vektora impulsa pre i posle sudara. Jedna komponenta predatog impulsa \vec{q} se odnosi na pobuđenje atoma mete, a druga na promenu pravca projektila. Ako je $\vec{q} \ll \vec{p}$ tada je $p' \sin\theta = p'\theta$

Sa Slike 4 se vidi da je kvadrat predatog impulsa jednak

$$q^2 = p'^2 \theta^2 + \frac{(E_n - E_0)^2}{v^2} \quad (77)$$



Slika 4. Vektori impulsa pri sudaru projektila sa atomom.
 p (p') je impuls projektila pre (posle) sudara; $q = p' - p$.

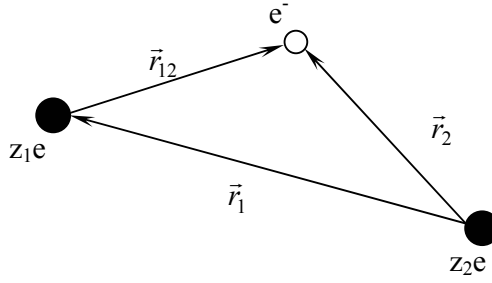
Iz relacije (77) se dobija da je $q dq = p'^2 \theta d\theta$. Imajući u vidu da je vrednost predate energije jednaka $Q = \frac{q^2}{2m}$, iz relacije (76) se dobija

$$p'^2 d\Omega = 2\pi q dq = 2\pi m dQ \quad (78)$$

Zamenom relacije (78) u izraz za diferencijalni efikasni presek (izraz(75)) dobija se

$$d\sigma_n = \frac{m}{2\pi\hbar^4 v^2} \left| \langle p' n | \hat{H}' | p, 0 \rangle \right|^2 dQ \quad (79)$$

Na Slici 5 prikazan je medjusobni položaj tačkastog projektila ($z_1 e^-$) i mete ($z_2 e^- + e^-$). Radijus vektor, \vec{r}_1 , je vektor položaja projektila u odnosu na jezgro mete; radijus vektor, \vec{r}_2 , je vektor položaja elektrona mete u odnosu na jezgro mete; \vec{r}_{12} je vektor medjusobnog položaja projektila i elektrona mete.



Slika 5. Radijus vektori položaja projektila i elektrona u atomu mete u odnosu na jezgro atoma mete

Pošto se razmatra samo interakcija projektila i elektrona u atomu, tada se njihova interakcija može prema slici opisati kao $\hat{H}' = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{z_1 e^2}{\hat{r}_{12}}$.

Izraz za diferencijalni efikasni presek postaje

$$d\sigma_n = \frac{z_1^2 e^4 m}{2\pi(4\pi\epsilon_0)^2 \hbar^4 v^2} \left| \langle p' | \langle n | \frac{1}{\hat{r}_{12}} | p \rangle | 0 \rangle \right|^2 dQ \quad (80)$$

Matrični element $M = \langle p' | \langle n | \frac{1}{\hat{r}_{12}} | p \rangle | 0 \rangle$ se računa kao

$$M = \iint e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}_1} \psi_n^*(\vec{r}_2) \frac{1}{|\vec{r}_{12}|} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}_1} \psi_0(\vec{r}_2) d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \quad (81)$$

gde su ψ svojstvena stanja elektrona atomu, a $e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$ talsne funkcije slobodne čestice (projektla pre i posle interakcije). Dalje, matrični element postaje

$$M = \int d\vec{r}_2 \psi_n^*(\vec{r}_2) \psi_0(\vec{r}_2) \underbrace{\int e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{q}\cdot\vec{r}_1} \frac{1}{|\vec{r}_{12}|} d\vec{r}_1}_{I_2} \quad (82)$$

Integral I_2 se računa uvođenjem smene [Ivanović, 1974]

$$I_2 = \int e^{\frac{i}{\hbar} \vec{q} \vec{r}_1} \frac{1}{|\vec{r}_{12}|} d\vec{r}_1 = \int e^{\frac{i}{\hbar} \vec{q} \vec{r}_1} \frac{1}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} d\vec{r}_1 \quad (83)$$

Nakon uvođenja smene $\vec{u} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2$, $d\vec{u} = d\vec{r}_1$, integral I_2 postaje

$$I_2 = \int e^{\frac{i}{\hbar} \vec{q} (\vec{u} + \vec{r}_2)} \frac{1}{|\vec{u}|} d\vec{u} = e^{\frac{i}{\hbar} \vec{q} \vec{r}_2} \underbrace{\int e^{\frac{i}{\hbar} \vec{q} \vec{u}} \frac{1}{|\vec{u}|} d\vec{u}}_{4\pi\hbar^2/q^2} = \frac{4\pi\hbar^2}{q^2} e^{\frac{i}{\hbar} \vec{q} \vec{r}_2} \quad (84)$$

Koristeći vrednost integrala I_2 , matrični element postaje

$$M = \frac{4\pi\hbar^2}{q^2} \int d\vec{r}_2 \psi_n^*(\vec{r}_2) \psi_0(\vec{r}_2) e^{\frac{i}{\hbar} \vec{q} \vec{r}_2} = \frac{4\pi\hbar^2}{q^2} \langle \psi_n | e^{\frac{i}{\hbar} \vec{q} \vec{r}_2} | \psi_0 \rangle \quad (85)$$

Zamenom u izraz za diferencijalni efikasni presek (izraz (80)) dobija se

$$d\sigma_n = \frac{z_1^2 e^4 m}{2\pi(4\pi\epsilon_0)^2 \hbar^4 v^2} \left(\frac{4\pi\hbar^2}{q^2} \right)^2 \left| \langle \psi_n | e^{\frac{i}{\hbar} \vec{q} \vec{r}_2} | \psi_0 \rangle \right|^2 dQ \quad (86)$$

Diferencijalni efikasni presek se može izraziti korišćenjem predatog energije

$$Q = \frac{q^2}{2m} \text{ kao}$$

$$d\sigma_n = \frac{2\pi z_1^2 e^4}{(4\pi\epsilon_0)^2 m v^2} \left| \langle \psi_n | e^{\frac{i}{\hbar} \vec{q} \vec{r}_2} | \psi_0 \rangle \right|^2 \frac{dQ}{Q^2} \quad (87)$$

Matrični element u izrazu (87) se može razviti u red, za malu vrednost predatog impulsa, q . Ukoliko se pretpostavi da je vektor \vec{q} u pravcu z -ose, može se napisati

$$\langle \psi_n | e^{\frac{i}{\hbar} \vec{q} \vec{r}_2} | \psi_0 \rangle = \frac{i}{\hbar} q \langle \psi_n | z | \psi_0 \rangle \quad (88)$$

Na osnovu toga, diferencijalni efikasni presek u relaciji (87) postaje

$$d\sigma_n = \frac{2\pi z_1^2 e^4}{(4\pi\epsilon_0)^2 mv^2} \frac{q^2}{\hbar^2} \left| \langle \psi_n | z | \psi_0 \rangle \right|^2 \frac{dQ}{Q^2} \quad (89)$$

Nakon male transformacije, koristeći vezu $Q = \frac{q^2}{2m}$ dobija se

$$d\sigma_n = \frac{2\pi z_1^2 e^4}{(4\pi\epsilon_0)^2 mv^2} \frac{2m}{\hbar^2} \left| \langle \psi_n | z | \psi_0 \rangle \right|^2 \frac{dQ}{Q} \quad (90)$$

Zamenom relacije (90) u relaciju (71) izraz za zaustavnu moć postaje

$$-\frac{dE}{dx} = \frac{2\pi z_1^2 e^4}{(4\pi\epsilon_0)^2 mv^2} N \sum_n (E_n - E_0) \frac{2m}{\hbar^2} \left| \langle \psi_n | z | \psi_0 \rangle \right|^2 \int_{Q_{\min}}^{Q_{\max}} \frac{dQ}{Q} \quad (91)$$

Maksimalna vrednost energije koju projektil može da preda atomu mete iznosi $Q_{\max} = 2mv^2$, dok je minimalna vrednost predate energije je ona energija koja je potrebna da atom iz osnovnog stanja pređe u neko pobuđeno stanje ili da se jonizuje, tj. $E_{\min} = E_n - E_0$. Na osnovu toga, relacija (91) postaje

$$-\frac{dE}{dx} = \frac{2\pi z_1^2 e^4}{(4\pi\epsilon_0)^2 mv^2} N \sum_n (E_n - E_0) \frac{2m}{\hbar^2} \left| \langle \psi_n | z | \psi_0 \rangle \right|^2 (\ln(2mv^2) - \ln(E_n - E_0)) \quad (92)$$

Koristeći pravilo sumiranja $\frac{2m}{\hbar^2} \sum_n (E_n - E_0) \left| \langle \psi_n | z | \psi_0 \rangle \right|^2 = z_2$ (Thomas-Reiche-Kuhn

sum rule) [Bethe, 1930], gde je z_2 redni broj atoma mete, relacija (92) se svodi na

$$-\frac{dE}{dx} = \frac{2\pi z_1^2 e^4}{(4\pi\epsilon_0)^2 mv^2} z_2 N \ln \frac{2mv^2}{I} \quad (93)$$

pri čemu je I jonizacioni potencijal atoma mete i definiše se kao

$$\ln(I) = \frac{2m}{\hbar^2 z_2} \sum_n \ln(E_n - E_0) \left| \langle \psi_n | z | \psi_0 \rangle \right|^2 \quad (94)$$

Veličina $f_n = \frac{2m(E_n - E_0)}{\hbar^2 z_2} \left| \sum_j \langle n | x_j | 0 \rangle \right|^2$ naziva se jačina dipolnog oscilatora

II 2. 3. Blochov izraz za zaustavnu moć

Bloch je došao ne ideju [Bloch, 1933] da Bohrovu formulu, koja se zasniva na klasičnoj fizici, i Betheovu, zasnovane na kvantnoj fizici, ujedini u jednu formulu. Bloch je posebno razmatrao sudare sa malim i velikim parametrom sudara. Za male parametre sudara, Bloch je interakciju projektila sa metom tretirao kao rasejanje projektila na slobodnim elektronima (isto kao Bohr). Za velike parametre sudara uveo je dipolnu aproksimaciju i pokazao da viši članovi u toj aproksimaciji nestaju ako su proporcionalni sa neparnim stepenom od z_1 , dok su članovi reda z_1^4 za $(Z_1 e^2 r_0)^2 / (b\hbar v)^2$ puta manji od članova koji su proporcionalni z_1^2 .

Bloch je imao suprotno mišljenje od Bethea, tj. smatrao je da se elektroni ne mogu predstaviti ravnim talasima iz prostog razloga što oni međusobno interaguju, jer njihove talasne funkcije međusobno interferiraju. To za posledicu ima da je efikasni presek pri takvom sudaru veoma različit od Kulonovog za rasejanje ravnih talasa.

Nakon svega, nerelativistički oblik Blochove formule je

$$S = \frac{4\pi N Z z_1^2 e^4}{(4\pi\epsilon_0)^2 m v^2} \left(\ln \frac{2mv^2}{I} + \Psi(1) - \operatorname{Re} \Psi \left(1 + i \frac{z_1 \alpha}{\beta} \right) \right) \quad (95)$$

gde je $\psi(z)$ izvod logaritma od Gama funkcije $\Gamma(z)$. Izraz $\Psi(1) - \operatorname{Re} \Psi \left(1 + i \frac{z_1 \alpha}{\beta} \right)$

predstavlja Blochovu korekciju formule za zaustavnu moć.

Relativistički oblik Blochove formule je

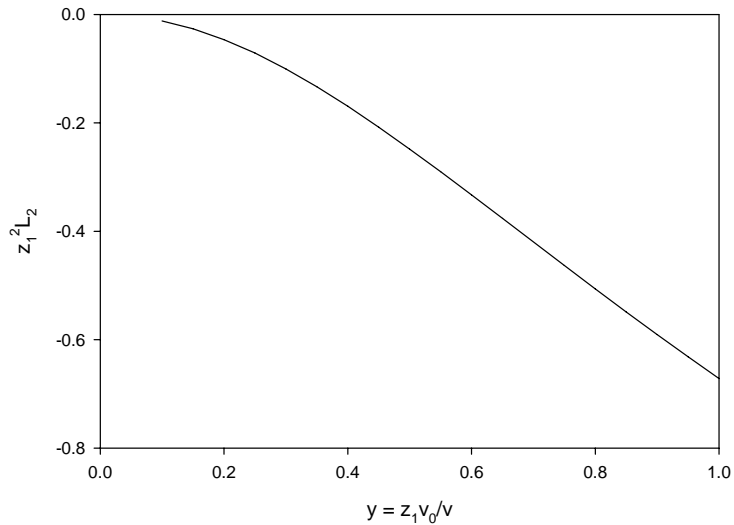
$$S = \frac{4\pi N Z_1^2 e^4}{(4\pi\epsilon_0)^2 m v^2} \left(\ln \frac{2mv^2}{I} - \frac{1}{2} \ln(1 - \beta^2) - \frac{\beta^2}{2} + \Psi(1) - \operatorname{Re} \Psi \left(1 + i \frac{Z_1}{\beta} \right) \right) \quad (96)$$

Blochova korekcija je dominantna u slučaju $v \leq 2z_1 v_0$ [Sigmund, 2004]. Bichsel je Blochovu korekciju napisao u pogodnijoj formi [Bischel, 1990]

$$z_1^2 L_2 = -y^2 (1.202 - y^2 (1.042 - 0.855y^2 + 0.343y^4)) \quad (97)$$

gde je $y = z_1 v_0 / v$, v je brzina projektila, v_0 je Bohrova brzina, $v_0 = \alpha c$; α je konstanta fine strukture, $\alpha = 1/137$, a c je brzina svetlosti u vakuumu.

Na Slici 6. prikazana je Blochova korekcija, prema relaciji (97), kao funkcija od $y = z_1 v_0 / v$.



Slika 6. Blochova korekcija u funkciji parametra $y = z_1 v_0 / v$

Blochova korekcija ima negativnu vrednost i smanjuje vrednost zaustavne moći. Sa porastom naelektrisanja projektila apsolutna vrednost korekcije raste, dok sa porastom energije projektila, apsolutna vrednost opada.

II 3. Aproksimacije uvedene pri računanju zaustavne moći

Činjenica je da je prolaz čestice projektila kroz datu materijalnu sredinu jako složen proces. Naime tom prilikom može da se desi niz različitih procesa: interakcija sa naelektrisanim česticama, eksitacija, jonizacija, zračenje usled promene brzine projektila. Veoma je teško teorijski tretirati sve ove procese. Iz tog razloga, potrebno je uvesti izvesne aproksimacije i pretpostavke kako bi, bar pod tim uslovima mogao da se reši problem. U ovom delu iznesene su aproksimacije i pretpostavke pod kojima su Bohr, Bethe i Bloch izveli pomenute jednačine. To su [Ahlen, 1980]:

1. Brzina projektila je mnogo manja od brzine svetlosti u vakuumu (Bohr, Bloch);
2. Brzina projektila je mnogo veća od karakteristične orbitalne brzine elektrona (Bohr, Bethe, Bloch);
3. Absorber je male gustine (Bohr, Bethe, Bloch);
4. $M_1 \gg m\gamma$ (Bohr, Bethe, Bloch);
5. Zanemarena je unutrašnja struktura projektila (Bohr, Bethe, Bloch);
6. Rasejanje projektila unazad je zanemareno (Bohr, Bethe, Bloch);
7. Korekcije usled gubitka energije zračenja su zanemarene (Bohr, Bethe, Bloch);
8. Bliski sudari su razmatrani kao interakcija projektila sa slobodnim elektronima (Bohr, Bethe, Bloch);
9. Bliski sudari se događaju između projektila i elektrona koji imaju klasično definisanu trajektoriju (Bohr);
10. Bliski sudari se dešavaju između veoma teških projektila i elektrona i karakterisani su ravanskim talasima sa početnim stanjem u sistemu centra masa (Bethe);
11. Daleki sudari su tretirani kao dipolna u aproksimacija prvog reda (Bethe, Bloch);
12. Daleki sudari su tretirani kao klasično predavanje energije naelektrisanom harmonijskom oscilatoru (Bohr);
13. Korišćenje prve Bornove aproksimacije (Bethe);
14. Naelektrisanje projektila je konstantno (Bohr, Bethe, Bloch);
15. Spin elektrona je zanemaren u svim tipovima sudara (Bohr, Bethe, Bloch).

Pretpostavka (2) može biti delimično otklonjena uvođenjem korekcije efekta ljuske, o čemu će biti više reči kasnije. Pretpostavka (3) predstavlja efekat gustine i uvedena je dodatna korekcija da bi se taj efekat opisao. Pretpostavke (4)-(7) važe u slučajevima kada brzina projektila nije ultrarelativistička i ako projektil nije elektron. Pretpostavke (8)-(12) su uvedene kako bi jednom formulom moglo da se obuhvate bliski i daleki sudari.

S obzirom da sve tri formule date od strane ovih autora imaju dosta dodirnih tačaka i zajedničkih pretpostavki poželjno bi bilo da se one uporede. Na taj način može da se vidi pod kojim uslovima se ove tri formule međusobno slažu i kako se uopšte ponašaju u određenom opsegu energija projektila.

II 4. Poređenje Bohrove, Betheove i Blochove formule za zaustavnu moć

Iako su Bohrova, Betheova i Blochova formula za zaustavnu moć slične, one daju različite rezultate za neke opsege energija projektila i atomskog broja mete. U ovom poglavlju predstavljeno je poređenje njihovih izraza za zaustavnu moć.

Radi poređenja, pogodno je napisati sve tri formule u obliku

$$S = \frac{4\pi N Z_1^2 e^4}{(4\pi\epsilon_0)^2 m v^2} \cdot L \quad (98)$$

gde je, L , zaustavni broj, koji je u saglasnosti sa Bohrovom, Betheovom i Blochovom formulom, za nerelativistički slučaj, definisan kao:

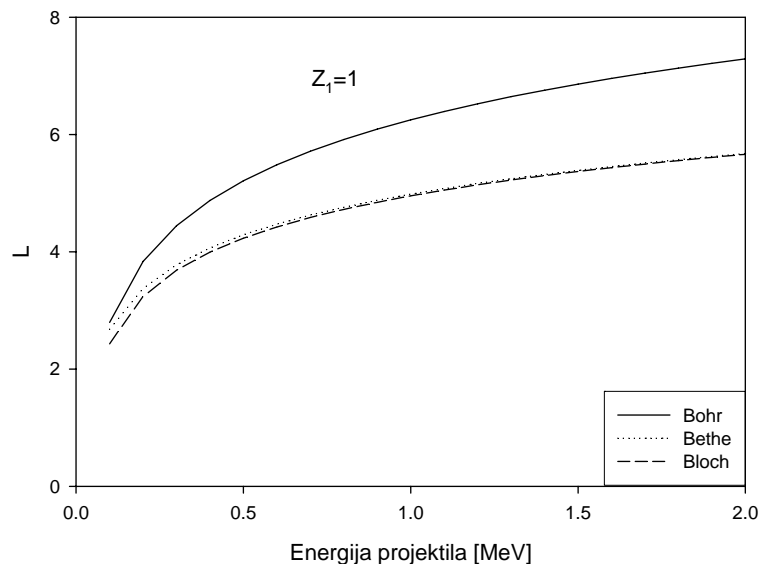
$$L_{Bohr} = \ln\left(4\pi\epsilon_0 \frac{1.123 m v^3}{Z_1 e^2 \omega}\right) \quad (99)$$

$$L_{Bethe} = \ln \frac{2 m v^2}{I} \quad (100)$$

$$L_{Bloch} = \ln \frac{2 m v^2}{I} + \Psi(1) - \operatorname{Re} \Psi\left(1 + \frac{i Z_1 \alpha}{\beta}\right) \quad (101)$$

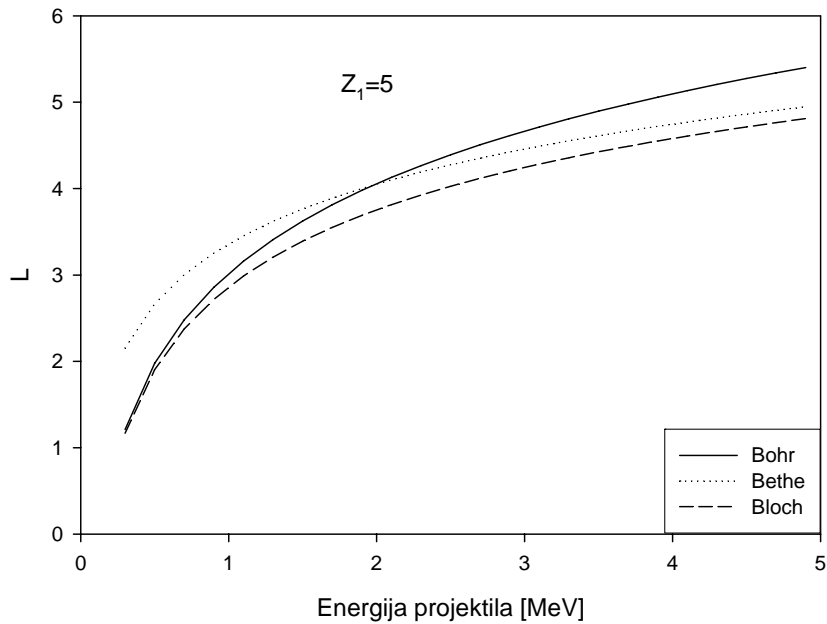
Na Slikama (7a i 7b) su prikazani zaustavni brojevi datih od strane Bethea, Bohra i Blocha prema relacijama (99-101) u funkciji od energije projektila. Blochova korekcija je računata prema relaciji (97). Za jonizacioni potencijal, I , uzeta je vrednost od 15 eV, što odgovara atomu vodonika.

Na slici (7a) su prikazani zaustavni brojevi za $z_1=1$. Vidi se da su vrednosti zaustavnih brojeva prema Betheu i Blochu jednake. Vrednost zaustavnog broja koju daje Bohrova teorija su oko 1.5 puta veće od onih koje daju Bethe i Bloch.



Slika 7 a. Zavisnost zaustavnog broja od energije projektila za $z_1=1$

Sva tri zaustavna broja su približno jednaka za $z_1=5$ (Slika 7 b),. Zaustavni broj prema Blochu ima nižu vrednost od ostala dva u datom opsegu energija projektila 1-5 MeV. I u ovom slučaju, zaustavni broj prema Bohru ima najviše vrednosti u najvećem delu domena energije projektila. Na oba grafika se vidi da je zaustavni broj rastuća funkcija energije projektila.



Slika 7 b. Zavisnost zaustavnog broja od energije projektila za $z_1=5$

Na osnovu izloženog se može zaključiti da svaki od modela nije do kraja konzistentan, već da se samo dopunjuju u određenom domenu energije. Glavni nedostatak ovih formula je taj što je za niske energije projektila, zaustavni broj negativan, što je fizički nemoguće. Usled nedostataka teorije i odstupanja od eksperimentalnih podataka, uvedene su dodatne korekcije. Ovim korekcijama su opisani procesi koji se događaju pri prolasku projektila kroz materiju, a koji nisu obuhvaćeni u ova tri izraza za zaustavnu moć.

II 5. Korekcije Bohr-Bethe-Bloch formule

Kao što se iz prethodnog vidi, nijedna od ponuđenih formula za zaustavnu moć ne opisuje dovoljno precizno prolazak čestice kroz materiju. To je za očekivanje, jer su sve tri formule izvedene pod različitim pretpostavkama navedenih gore. Procesi koji se dešavaju pri prolasku teških naelektrisanih čestica kroz materiju su jako složeni i do danas nisu potpuno matematički opisani.

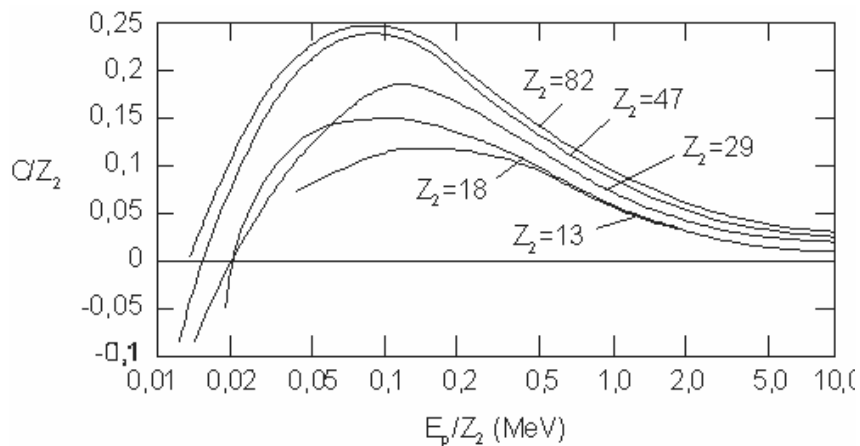
U traganju za tačnijim formulama, dati izrazi su dopunjavani raznim korekcijama. Naime, pri izračunavanju zaustavne moći, Bohr-Bethe-Bloch formulu prate korekcije koje se odnose na vrednost energije upadne čestice, naelektrisanje upadne čestice, polarizaciju sredine kroz koju prolazi čestica, i druge. Ovde ćemo navesti neke od najvažnijih, koje se najčešće koriste i najvećim delom doprinose preciznijem izračunavanju zaustavne moći.

II 5. 1. Korekcija ljuske (shell correction)

Korekcija ljuske se uzima u obzir kada upadna čestica ima veoma malu energiju, odnosno kada je brzina projektila približno jednaka brzini vezanog elektrona. Kako energija upadne čestice opada, ovaj efekat (ova korekcija) dolazi do izražaja, i mora se uzeti u obzir interakcija projektila sa svakim elektronom u atomu mete. Ovaj efekat doprinosi zaustavnoj moći i do 6% od ukupne vrednosti. Postoje više metoda za računanje korekcije usled efekta ljuske, a najznačajniji su: Talasna funkcija vodonika (Hydrogenic Wave Function - HWF) i Aproksimacija lokalne gustine (Local Density Approximation - LDA).

HWA metod razmatra slučaj interakcije upadne čestice sa pojedinačnim elektronima atoma mete, čija su stanja opisana talasnom funkcijom vodonika. Interakcija između elektrona u atomu mete se zanemaruje, i uzima se u obzir samo interakcija tih elektrona sa projektilom.

LDA metod razmatra slučaj interakcije upadne čestice sa slobodnim elektronskim gasom odgovarajuće gustine. U ovoj metodi se pretpostavlja da je gradijent elektronske gustine u meti jako mali, i da interakcija projektila sa jednim elektronom mete ne zavisi od interakcije sa drugim elektronima.



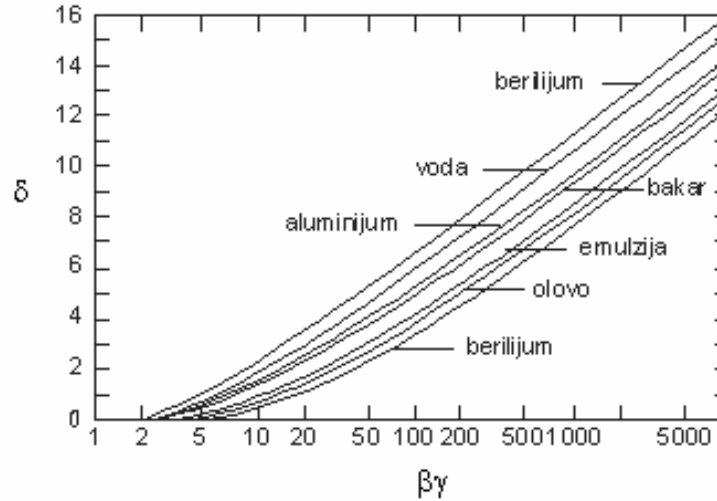
Slika 8. Korekcija ljske kao funkcija energije projektila

Na Slici 8. prikazane su eksperimentalne krive korekcije ljske, C/Z_2 , za više materijala okarakterisanim atomskim brojem z_2 , dok se za projektil koristi proton. Ove korekcije su dali Bichsel i Fano, [Fano, 1963; Bichsel, 1972]. Vidi se da za većinu materijala efekat ljske postoji samo za niske vrednosti energije projektila. Pri višim energijama projektila korekcija ljske teži nuli.

II 5. 2. Korekcija usled efekta gustine (density effect)

Poređenje eksperimentalnih podataka i Bohr-Bethe-Bloch formule za zaustavnu moć, veoma brzih projektila, pokazalo je izvesna odstupanja. Odstupanja su veća ukoliko je gustina materije, kroz koju prolazi projektil, veća.

Na primer, zaustavna moć za proton energije 1000MeV u fotografskoj emulziji je za 1% manja od predviđene; na energiji od 8GeV razlika je oko 7%; dok za gušće sredine razlika je još veća. Ovaj fenomen je nazvan efekat gustine (density effect). Do ovog efekta dolazi kada kinetička energija projektila prelazi njegovu masu mirovanja, dakle pri visokim energijama projektila. Prva teorijska razmatranja ovog efekta potiču od Fermija, [Fermi, 1940] i od Sternheimera, [Sternheimer, 1960, 1966].



Slika 9. Korekcija usled efekta gustine

Na Slici 9. prikazan je doprinos efekta gustine zaustavnoj moći za čvrsta tela i gasove. Do efekta gustine dolazi ako su energije projektila reda 1000 MeV i više.

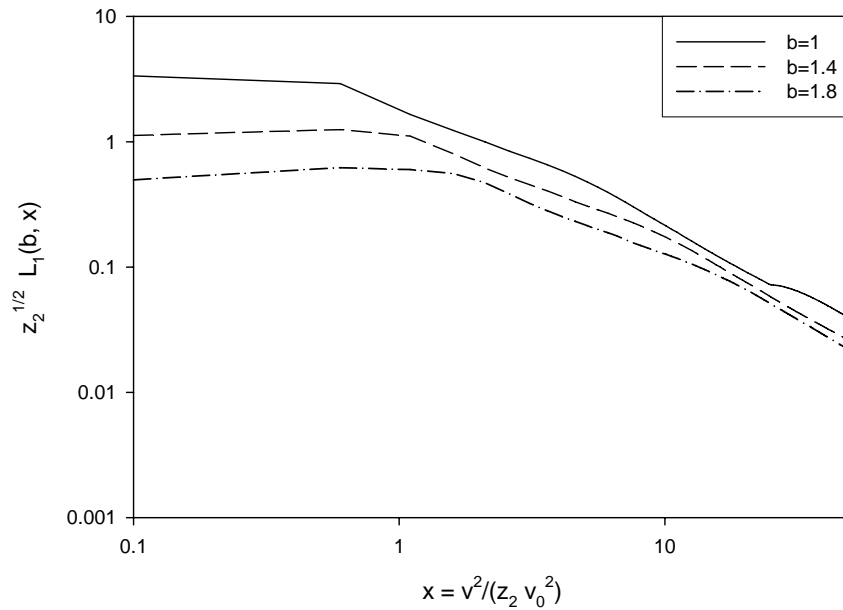
II 5. 3. Barkasov efekat

Barkasov efekat predstavlja razliku u zaustavnoj moći pozitivnih i negativnih projektila. Naime, Barkas i njegovi saradnici [Barkas et al, 1956; Barkas, 1963] su izučavali procese pri raspadu $K \rightarrow 3\pi$ u emulzijama i uvideli da se dometi π^+ i π^- piona razlikuju. Andersen i saradnici [Andersen et al., 1976] su merili zaustavnu moć alpha čestica i dobili da je više od četiri puta veća nego zaustavna moć za protone i deuteron, što je u suprotnosti sa Betheovom teorijom. Zato se u Betheovu formulu uvodi korekcija (Barkasova korekcija) kojom će se opisati efekat usled naelektrisanja projektila različitog polariteta.

Barkasova korekcija se može predstaviti koristeći sledeću formulu

$$z_1 L_1 = z_1 \cdot \frac{F\left(\frac{b}{x^{1/2}}\right)}{z_2^{1/2} \cdot x^{3/2}} \quad (102)$$

gde su $x = v^2 / (z_2 v_0^2)$, a b je parametar. Tabelirane vrednosti funkcije F se mogu naći u [Ashley, 1972]. Barkasova korekcija je funkcija energije (brzine) projektila i rednog broja atoma mete, z_2 . Na Slici 10 nacrtane su krive $z_2^{1/2} L_1$ kao funkcije od redukovane brzine, x , za različite parametre b .



Slika 10. Barkasova korekcija kao funkcija energije projektila za različite vrednosti atomskog broja mete

Barkasov efekat se javlja kao promena orbitala elektrona mete, prilikom približavanja projektila. Taj efekat se naziva *polarizacija mete*. Na Slici 10 se vidi da za velike energije projektila Barkasov efekat postaje beznačajan pošto se pri tim energijama projektil veoma brzo kreće i ne utiče na orbite elektrona mete.

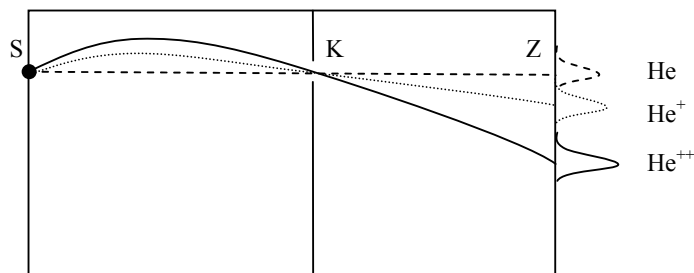
III TRETMAN DELIMIČNO OGOLJENOG JONA

U ovoj glavi su opisani radovi u kojima je računata zaustavna moć za delimično ogoljen jon. Opisan je tretman projektila koji u sebi sadrži vezane elektrone i efekat njihovog električnog ekraniranja. Naglašeno je kako smanjenje naelektrisanja projektila, izazvano prisustvom vezanih elektrona, utiče na vrednost zaustavne moći.

III 1. Efektivno naelektrisanje projektila

Handerson je otkrio da se snop alfa čestica pri prolazu kroz materiju uvek sastoji od mešavine jednostruko u dvostruko naelektrisanih čestica [Henderson, 1922]. Deo jednostruko naelektrisanih čestica osetno raste prema kraju dometa, gde nastaje i mala komponenta neutralnih atoma helijuma. Neutralni atomi su posledica izmene naelektrisanja jona helijuma nastalih zahvatom atomskih elektrona i naknadom rejonizacijom u sudarima.

Pojava tri komponente u snopu se lako može pokazati magnetskom analizom snopa, kao što je prikazano na Slici 11.



Slika 11. Skretanje snopa jona He prolaskom kroz materiju koji se nalazi u magnetnom polju
S-izvor; K-kolimator; Z-zaklon.

Ako alfa čestice prođu kroz absorber, na putu do detektorskog ekrana javiće se tri odvojena traga He, He⁺ i He⁺⁺ jona.

Procesi zahvata i emisije elektrona su značajni pri niskim energijama projektila i čine dodatnu komplikaciju teorijskom tretmanu. Naelektrisanje projektila, z_1 , se zbog

razmene elektrona smanjuje, a sa tim se smanjuje i zaustavna moć. Nameće se pitanje šta uzeti za efektivno naelektrisanje projektila.

Betz je 1972. godine [Betz, 1972] prikazao teorijske aspekte stanja naelektrisanja i efikasne preseke za izmenu naelektrisanja brzih teških čestica u gasovima i čvrstim telima. Naelektrisanja projektila su merena pri izlasku iz mete. Novija experimentalna istraživanja naelektrisanja projektila pri prolasku kroz metu su izvršili [Brunelle et al., 1997] i [Geissel et al, 2002].

Teorijski tretman naelektrisanja projektila pri prolasku kroz materiju zahteva jasnu razliku između elektrona koji se kreću sa projektilom i elektrona, koji se ne kreću zajedno sa njim. Primarni interes je »ravnotežno zaustavljanje« tj. zaustavljanje sa ravnotežnim naelektrisanjem. To je dinamička ravnoteža okarakterisana frakcijom naelektrisanja $P(v, q_1)$. Ova veličina predstavlja verovatnoću da projektil ima naelektrisanje $q_1 e$ pri brzini v . Na osnovu toga može da se definiše ravnotežno naelektrisanje.

$$\bar{q}_1 = \sum_{q_1} P(v, q_1) q_1 \quad (103)$$

i ravnotežna zaustavna moć kao

$$\bar{S} = \sum_{q_1} P(v, q_1) \cdot S(v, q_1) \quad (104)$$

gde je $S(v, q_1)$ zaustavna moć »zamrznutog« naelektrisanja, koja karakteriše usrednjeno zaustavljanje između dva događaja promene naelektrisanja. Gubitak energije projektila usled razmene naelektrisanja je potrebno dodati u izraz (104) ukoliko se računa zaustavna moć u domenu energije projektila u kome je proces razmene naelektrisanja značajan [Sigmund, 2004]. Vrednost $S(v, q_1)$ može biti experimentalno određena pod ravnotežnim uslovima, odnosno merenjem gubitka energije projektila u veoma tankim slojevima.

Eksperimentalno je potvrđeno da je ravnotežno naelektrisanje brzog i teškog projektila veće ukoliko je materija u gasovitom stanju nego ako je u čvrstom stanju [Lassen, 1951 a,b] Ravnotežno naelektrisanje za teške jone je intenzivno određivano [Shima et al, 1982; Shima et al, 1992].

Za zaustavnu materiju u čvrstom stanju rezultati su sumirani analitičkom formulom za srednju vrednost naelektrisanja projektila nakon izlaska iz medijuma [Shima et al, 1982] kao i za amorfne ugljenike [Shima et al, 1992]. Thomas - Fermi formula

$$\bar{q}_1 = z_1 \left(1 - e^{-\frac{v}{z_1^{2/3} v_0}} \right) \quad (105)$$

može dobro da representuje podatke za projekte do rednog broja $z \leq 18$. Iz prethodne relacije se vidi da za velike brzine projektila njegovo efektivno naelektrisanje odgovara rednom broju projektila (potpuno ogoljenom jonu), dok za veoma male brzine naelektrisanje postaje jednako nuli.

Uticao elektrona projektila na pobudjenje atoma mete se može opisati ekraniranjem (screening). Ekraniranje predstavlja elektrostatički efekat što za posledicu ima smanjenje jačine električnog polja jezgra projektila. Ovaj efekat zavisi od rastojanja projektila od atoma mete i usled njega zaustavna moć ima nižu vrednost.

III 2. Uticaj efektivnog naelektrisanja na zaustavnu moć

Efekat ekraniranja je uveden u teoriju zaustavne moći uvođenjem efektivnog naelektrisanja. U radovima [Northcliffe, 1960; Northcliffe, 1963] definisano je efektivno naelektrisanje kao

$$q_{1,eff} = \gamma z_1 \quad (106)$$

gde je γ efektivna frakcija naelektrisanja i predstavlja odnos zaustavne moći za neku tešku naelektrisanu česticu i zaustavne moći za proton. γ je određena empirijski poređenjem zaustavne moći za teške projekte sa zaustavnom moći za protone ili alfa čestice. Teorijski doprinos ovakvom konceptu dali su [Yarlagadda et al, 1978]; [Brandt and Kitagawa, 1982], kao i drugi.

Radi ocenjivanja uticaja efektivnog naelektrisanja na zaustavnu moć ispitivane su

krive odnosa $\frac{S}{2 \left(\frac{z_1}{z_2} \right)^{2/3}}$ u funkciji od q_1/z_1 , gde su z_1 i z_2 atomski brojevi projektila i mete.

Za slučaj kada je $z_2 \gg z_1$ funkcionalna zavisnost je skoro parabolična, što kazuje da u tim slučajevima dolazi do veoma dobrog ekraniranja od strane elektrona projektila. U svim ostalim slučajevima pokazana je slaba zavisnost zaustavne moći od efektivnog naelektrisanja projektila.

IV ZAUSTAVNA MOĆ ZA DELIMIČNO OGOLJEN JON

U ovoj glavi je, prema Betheovom principu, izveden difenrencijalni efikasni presek za sudar delimično ogoljenog jona sa atomom mete. Na osnovu toga ispisana je formula za zaustavnu moć za delimično ogoljen jon. Posebno je odvojen deo koji predstavlja doprinos zaustavnoj moći usled ekscitacije projektila.

IV 1. Opis sistema delimično ogoljen jon + atom mete

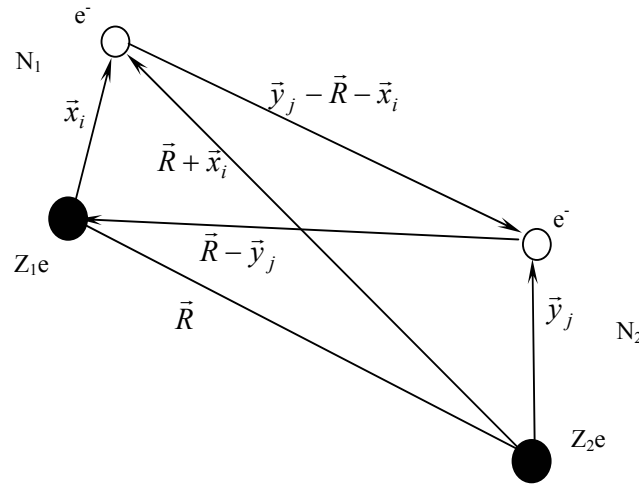
Elektroni mogu biti zahvaćeni projektilom i u slučaju kada je brzina projektila veća od orbitalne brzine elektrona u atomu mete [Kim and Cheng, 1980]; [Kaneko and Tsuchida, 1994]; [Tsuchida and Kaneko, 1997]. Zahvat i gubitak elektrona su procesi koji su najverovatniji kada je brzina projektila $v_0 < v < v_0 z_1^{2/3}$, gde je v_0 Bohrova brzina. U tom domenu brzine (energije) projektila, pomenuti procesi najviše doprinose zaustavnoj moći [Bohr 1948]. Da bi se zaustavna moć adekvatno opisala za širok domen energija projektila, potrebno je razmatrati i elektronsku strukturu projektila.

Prva teorijska izučavanja su izvršena sredinom 50-ih godina prošlog veka [Bates and Griffing, 1953]. Oni su računali zaustavnu moć za najprostiji proces sudara: dva atoma vodonika. U toku nekoliko zadnjih godina zavisnost zaustavne moći od naelektrisanja projektila je postala aktivna tema istraživanja. Skaliranje zaustavne moći na osnovu efektivnog naelektrisanja projektila [Brandt and Kitagawa, 1982] je nedovoljno da opiše zahvat i gubitak elektrona.

U skorije vreme objavljeni su radovi računanja zaustavne moći, prema Betheovoj teoriji, za delimično ogoljen jon. Tu ideju su predložili Kim i Cheng u radu [Kim and Cheng, 1980]. Oni su zaustavnu moć izveli od originalne Betheove formule zamenjujući redni broj projektila, z_1 , i jonizacioni potencijal atoma mete, I_2 , efektivnim vrednostima, z_{eff} i I_{eff} . Obe pomenute efektivne vrednosti zavise od karakteristika atoma mete i projektila. Moneta i Czerbniak su koristili prvu Bornovu aproksimaciju za računanje zaustavne moći za delimično ogoljen jon preko parametara sudara [Moneta i Czerbniak, 1994]. U njihovom modelu razmatrana je ekscitacija i jonizacija projektila, ali razmena naelektrisanja nije uzeta u obzir.

Uticaj elektrona vezanih za jezgro projektila na zaustavnu moć ispitivali su [Cabrera -Trujillo et al, 1997; Glazov, 2002]. Pošto je računanje zaustavne moći, predstavljanjem projektila i mete ansamblima kvantnih oscilatora, zasnovano na njihovom tretmanu, ovde je ukratko izložena postavka tretiranja interakcije delimično ogoljenog jona i mete.

Projektil mase M_1 i brzinom v , interaguje sa elektronima atoma mete, mase m_e . Naelektrisanje jezgra projektila je naelektrisanja, z_1e , okruženo je sa N_1 elektrona, dok je naelektrisanje jezgra atoma mete, z_2e , okruženo sa N_2 elektrona (Slika 12).



Slika 12. Međusobni položaj projektila i atoma mete

\vec{R} je radijus vector jezgra projektila u odnosu na jezgro atoma mete, \vec{y}_j su radijus vektori elektrona atoma mete u odnosu na njegovo jezgro, dok su \vec{x}_i radijus vektori elektrona projektila u odnosu na njegovo jezgro.

Hamiltonijan ovog sistema se može napisati kao

$$\hat{H} = \hat{H}_p + \hat{H}_t + \hat{V} \quad (107)$$

gde su \hat{H}_p i \hat{H}_t Hamiltonijani projektila i mete, respectivno, a \hat{V} predstavlja operator interakcije između njih. Svojevredna stanja operatora \hat{H}_p i \hat{H}_t su $|n\rangle$ i $|m\rangle$; njihove svojevredne vrednosti energija su E_n i E_m . Važi da je $\hat{H}_p|n\rangle = E_n|n\rangle$ i $\hat{H}_t|m\rangle = E_m|m\rangle$, $m=1,2,\dots$ i $n=1,2,\dots$

Neka je pre sudara projektil bio u stanju $|n_0\rangle$, a atom mete u stanju $|m_0\rangle$. Posle sudara njihova konačna stanja su $|n\rangle$ i $|m\rangle$. Stanja celog sistema (projektil + atom mete) su $|i\rangle = |k_0\rangle|n_0\rangle|m_0\rangle$ pre sudara i $|f\rangle = |k\rangle|n\rangle|m\rangle$ posle sudara. k_0 i k su talasni vektori projektila pre i posle sudara.

Potencijal interakcije između projektila i mete je dat kao [Cabrera -Trujillo et al, 1997].

$$V = \frac{z_1 z_2 e^2}{R} - \sum_{j=1}^{N_2} \frac{z_1 e^2}{|\vec{R} - \vec{y}_j|} - \sum_{i=1}^{N_1} \frac{z_2 e^2}{|\vec{R} + \vec{x}_i|} + \sum_{i,j=1}^{N_1, N_2} \frac{e^2}{|\vec{y}_j - \vec{R} - \vec{x}_i|} \quad (108)$$

Prvi član u jednačini (108) opisuje interakciju jezgara projektila i mete; drugi član opisuje interakciju jezgra projektila sa elektronima mete; treći član opisuje interakciju jezgra mete sa elektronima projektila; dok poslednji član opisuje interakciju elektrona projektila sa elektronima mete.

IV 2. Diferencijalni efikasni presek i zaustavna moć za delimično ogoljen jon

Prema izloženom u prethodnom poglavlju i analogno relaciji (79), diferencijalni efikasni presek sudara delimično ogoljenog jona sa atomom se može napisati kao [Cabrera -Trujillo et al., 1997].

$$d\sigma_{nm} = \frac{m_e}{2\pi\hbar^4 v^2} |\langle k | \langle n | \langle m | \hat{V} | k_0 \rangle | n_0 \rangle | m_0 \rangle|^2 dQ \quad (109)$$

Ovim diferencijalnim efikasnim presekom opisuje se interakcija projektila sa atomom mete, pri čemu projektil preda atomu energiju dQ ; u sudaru atom mete pređe u

pobuđeno stanje $|m\rangle$, a projektil u pobuđeno stanje $|n\rangle$. U ovom procesu važi zakon održanja energije

$$\frac{\hbar^2 k_0^2}{2M_1} - \frac{\hbar^2 k^2}{2M_1} = (E_n - E_{n0}) + (E_m - E_{m0}) \quad (110)$$

Leva strana predstavlja kinetičke energije projektila pre i posle sudara. Na osnovu zakona održanja energije i $\hbar\vec{q} = \hbar(\vec{k} - \vec{k}_0)$ dobija se da je minimalna predata energija projektila, Q

$$\frac{((E_n - E_{n0}) + (E_m - E_{m0}))^2}{2m_e v^2} = Q \quad (111)$$

Zaustavna moć se može izraziti preko efikasnog preseka datog u relaciji (109), kao

$$S = N \sum_{n \geq n_0, m \geq m_0} \int [(E_m - E_{m0}) + (E_n - E_{n0})] d\sigma_{nm} \quad (112)$$

gde se sumiranje vrši po stanjima projektila i mete. N predstavlja koncentraciju atoma mete.

Relacija (112) se može transformisati kao

$$S = N \left\{ \sum_{n \geq n_0, m > m_0} (E_m - E_{m0}) \int d\sigma_{nm} + \sum_{n > n_0, m \geq m_0} (E_n - E_{n0}) \int d\sigma_{nm} \right\} \quad (113)$$

U relaciji (113) prvi član predstavlja doprinos zaustavnoj moći usled pobudjenja i jonizacije atoma mete, a drugi usled pobudjenja i jonizacije projektila.

Odnosno,

$$S = N \left\{ \sum_{m>m_0} (E_m - E_{m0}) \int d\sigma_{n_0 m} + \sum_{n>n_0, m>m_0} (E_m - E_{m0}) \int d\sigma_{nm} + \right. \\ \left. \sum_{n>n_0} (E_n - E_{n0}) \int d\sigma_{nm_0} + \sum_{n>n_0, m>m_0} (E_n - E_{n0}) \int d\sigma_{nm} \right\} \quad (114)$$

Sume se mogu grupisati kao

$$S = N \left\{ \sum_{m>m_0} (E_m - E_{m0}) \int d\sigma_{n_0 m} + \sum_{n>n_0} (E_n - E_{n0}) \int d\sigma_{nm_0} + \right. \\ \left. \sum_{n>n_0, m>m_0} [(E_m - E_{m0}) + (E_n - E_{n0})] \int d\sigma_{nm} \right\} \quad (115)$$

Prvi član predstavlja gubitak energije projektila na pobudjenje atoma mete, dok stanje projektila ostaje nepromenjeno. Drugi član predstavlja gubitak energije projektila na njegovo pobudjenje, dok stanje atoma mete ostaje nepromenjeno. Treći član opisuje gubitak energije projektila pričemu ni atom mete ni projektil ne ostaju u osnovnim stanjima.

B) TEORIJSKI DEO RADA

Ovaj deo rada sastoji se iz tri glave. U prvoj glavi ovog dela (Glava V) tretirana je interakcija projektila i mete koji su predstavljeni kvantno-mehaničkim harmonijskim oscilatorima. Na osnovu takvog tretmana projektila i mete izveden je izraz za zaustavnu moć. U drugoj glavi ovog dela (Glava VI) izraz za zaustavnu moć oscilatora primenjen je i prilagođen za računanje zaustavne moći date materijalne sredine i za određene projekte, koji u sebi mogu imati vezane elektrone. U poslednjoj glavi izvršeno je poređenje rezultata sa dostupnim teorijskim i eksperimentalnim podacima.

V PREDSTAVLJANJE PROJEKTILA I METE SKUPOM KVANTNIH OSCILATORA

Jedan od problema pri računanju zaustavne moći, prema Betheovom modelu, u prvoj Bornovoj aproksimaciji, predstavlja računanje matričnog elementa, $M = \langle m | e^{i\vec{q}\vec{r}} | m_0 \rangle$, koji se javlja u jednačini (86). m_0 predstavlja početno stanje atoma mete, dok m predstavlja konačno stanje atoma mete nakon dejstva projektila. $\hbar\vec{q} = \hbar\vec{k} - \hbar\vec{k}_0$ predstavlja impuls koji projektil preda meti pri interakciji. Bethe [Bethe, 1930] je računao zaustavnu moć za slučaj kada je predata energija projektila, $Q = \frac{\hbar^2 q^2}{2m_e}$, mnogo manja u odnosu na njegovu početnu energiju. Odnosno, za slučaj kada je predati impuls mnogo manji od početnog impulsa projektila ($q \ll p$), što je uslov za primenu prve Bornove aproksimacije. Na osnovu toga, Bethe je matrični element, M , računao razvojem eksponencijalne funkcije u red, što je prikazano u Glavi II ovog rada.

Sigmund i Haagerup [Sigmund and Haagerup, 1986], su modelovali atom mete ansamblom kvantnih oscilatora i smatrali da su stanja m_0 i m svojstvena stanja kvantnog harmonijskog oscilatora. Matrični element, M , su izračunali prema tom modelu, pri čemu su projektil smatrali kao tačkasto naelektrisanje.

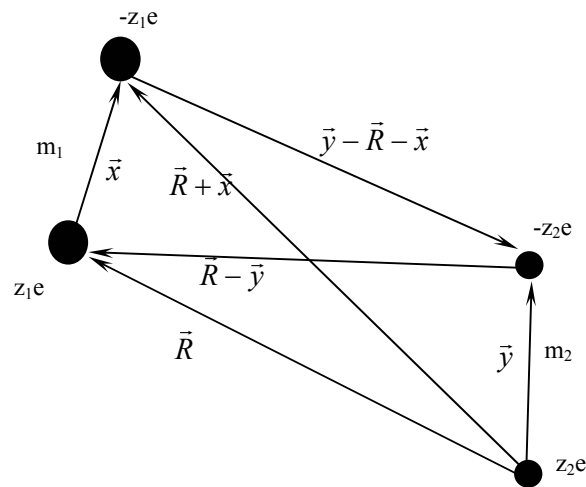
Pošto jezgro projektila pri nižim energijama zahvata elektrone od atoma mete, postaje delimično ogoljen jon i ne može se smatrati tačkastim naelektrisanjem. To predstavlja

povod da se i projektil kao delimično ogoljen jon modeluje ansamblom kvantnih oscilatora.

U ovoj Glavi prikazan je kvantno mehanički tretman interakcije harmonijskih oscilatora (projektil+meta) i na osnovu toga izveden je izraz za zaustavnu moć.

V 1. Opis modelovanja projektila i mete ansamblom kvantnih oscilatora

Posmatrajmo dva harmonijska oscilatora predstavljena kao dva dipola koja se sastoje od dve naelektrisane česice. Jedan oscilator se kreće brzinom v i predstavlja projektil, dok drugi (meta) relativno miruje. Dipolni momenti projektila i mete su $z_1 e \vec{x}$ and $z_2 e \vec{y}$ (Slika. 13). Ova slika je slična Slici 12, sa istim oznakama radijus vektora koji predstavljaju međusobne položaje oscilatora.



Slika. 13. Interakcija između projektila i mete kao oscilatora. Projektil je predstavljen sa dve naelektrisane čestice ($z_1 e$) i ($-z_1 e$) čije su mase m_1 . Meta je predstavljena naelektrisanjima ($z_2 e$) i ($-z_2 e$), sa masama m_2 .

Mase naelektrisanih čestica su m_1 i m_2 uz uslov da je $m_1 \gg m_2$. Frekvencije oscilovanja dipola projektila i mete su ω_p i ω_t . Prilikom interakcije oscilatora projektil menja pravac kretanja, a može doći do pobuđenja i projektila i mete.

Hamiltonijan ovog sistema se može napisati kao

$$\hat{H} = \hat{H}_p + \hat{H}_t + \hat{V} \quad (116)$$

gde \hat{H}_p i \hat{H}_t predstavljaju Hamiltonijane projektila i mete, respektivno, dok \hat{V} predstavlja operator interakcije između njih. Oblik Hamiltonijana je isti kao u jednačini (107). Svojstvene funkcije operatora \hat{H}_p i \hat{H}_t su $|n\rangle$ i $|m\rangle$, a njihove svojstvene vrednosti energija su E_n i E_m . Tako da važi da je $\hat{H}_p|n\rangle = E_n|n\rangle$ i $\hat{H}_t|m\rangle = E_m|m\rangle$, pri čemu važi da kvantni brojevi imaju vrednosti $m=0,1,2,\dots$ $n=0,1,2,\dots$

Potencijal interakcije je oblika

$$V = \frac{z_1 z_2 e^2}{R} - \frac{z_1 z_2 e^2}{|\vec{R} - \vec{y}|} - \frac{z_1 z_2 e^2}{|\vec{R} + \vec{x}|} + \frac{z_1 z_2 e^2}{|\vec{y} - \vec{R} + \vec{x}|} \quad (117)$$

Kao što je opisano u prethodnoj Glavi stanje sistema (projektil + meta) pre sudara se može napisati kao $|i\rangle = |k_0\rangle|n_0\rangle|m_0\rangle$, dok je stanje sistema posle sudara $|f\rangle = |k\rangle|n\rangle|m\rangle$.

Diferencijalni efikasni presek da pri interakciji projektila i mete, projektil preda energiju dQ , pri čemu sistem pređe iz stanja $|i\rangle$ u stanje $|f\rangle$ pod uticajem potencijala V , u nerelativističkom slučaju u prvoj Bornovoj aproksimaciji je oblika kao i u relaciji (109)

$$d\sigma_{if} = \frac{m_2}{2\pi \hbar^4 v^2} |\langle f | \hat{V} | i \rangle|^2 dQ, \quad (118)$$

gde je $Q = \frac{\hbar^2 q^2}{2m_2}$ predata energija.

Na osnovu ovako napisanog diferencijalnog efikasnog preseka je zaustavna moć se računa prema relaciji (112)

$$S(v) = N \sum_{n,m} \int [(E_n - E_{n_0}) + (E_m - E_{m_0})] d\sigma_{n,m} \quad (119)$$

gde važi zakon održanja energije

$$\frac{\hbar^2 k_0^2}{2m_1} - \frac{\hbar^2 k^2}{2m_1} = (E_n - E_{n_0}) + (E_m - E_{m_0}) \quad (120)$$

Relacije (119) i (120) opisuju proces u kome se deo kinetičke energije projektila oscilatora transformiše u energiju njegovog pobuđenja i energiju pobuđenja mete oscilatora. Unutrašnja energija projektila oscilatora se menja sa E_{n_0} na E_n , dok se unutrašnja energija mete oscilatora menja sa E_{m_0} na E_m .

V 2. Računanje zaustavne moći harmonijskog oscilatora

Prvi korak u računanju zaustavne moći kada se projektil i meta tretiraju kao oscilatori je računanje diferencijalnog efikasnog preseka dat relacijom (118). Kada se izraz (117) za potencijal zameni u izraz (118) dobija se

$$d\sigma_{nm} = \frac{m_2}{2\pi \hbar^4 v^2} \left| \langle knm | \frac{z_1 z_2 e^2}{R} - \frac{z_1 z_2 e^2}{|\vec{R} - \vec{y}|} - \frac{z_1 z_2 e^2}{|\vec{R} + \vec{x}|} + \frac{z_1 z_2 e^2}{|\vec{y} - \vec{R} + \vec{x}|} | k_0 n_0 m_0 \rangle \right|^2 dQ \quad (121)$$

Odnosno, može se napisati

$$d\sigma_{nm} = \frac{z_1^2 z_2^2 e^4 m_2}{2\pi \hbar^4 v^2} \left| \langle knm | \frac{1}{R} - \frac{1}{|\vec{R} - \vec{y}|} - \frac{1}{|\vec{R} + \vec{x}|} + \frac{1}{|\vec{y} - \vec{R} + \vec{x}|} | k_0 n_0 m_0 \rangle \right|^2 dQ \quad (122)$$

Konciznije, relacija (122) se može napisati kao

$$d\sigma_{nm} = \frac{z_1^2 z_2^2 e^4 m_2}{2\pi \hbar^4 v^2} |M_1 + M_2 + M_3 + M_4|^2 dQ \quad (123)$$

gde $M_{1,2,3,4}$ predstavljaju matrične elemente u izrazu (122). Ovi matrični elementi su rešavani posebno. Pri njihovom računanju, stanja koja predstavljaju kretanje projektila sa talasnim vektorom k se u koordinatnoj prezentaciji predstavljaju ravnim talasima oblika $|k\rangle = e^{i\vec{k}\vec{R}}$.

Prvi matrični element je jednak

$$M_1 = \langle knm | \frac{1}{R} | k_0 n_0 m_0 \rangle = \langle nm | \int e^{-i\vec{k}\vec{R}} \frac{1}{R} e^{i\vec{k}_0\vec{R}} d\vec{R} | n_0 m_0 \rangle \quad (124)$$

Pošto je $\vec{k}_0 - \vec{k} = \vec{q}$, prethodni izraz postaje

$$M_1 = \langle nm | \int e^{i\vec{q}\vec{R}} \frac{1}{R} d\vec{R} | n_0 m_0 \rangle = \frac{4\pi}{q^2} \delta_{nm0} \delta_{mm0} \quad (125)$$

Izraz (125) je rešen na osnovu integrala [Ivanović, 1974]

$$\int e^{i\vec{a}\vec{x}} \frac{1}{x} d\vec{x} = \frac{4\pi}{a^2} \quad (126)$$

Prvi matrični element sadrži proizvod Kronekerovih simbola $\delta_{nm0}\delta_{mm0}$, tako da prilikom sumiranja u izrazu (119) za zaustavnu moć daje nulu. Interakcija jezgra projektila i jezgra mete ne doprinosi zaustavnoj moći ukoliko se posmatra Kulonova interakcija između njih, i ukoliko se kinetička energija projektila transformiše na njegovu ekscitaciju i na ekscitaciju mete.

Drugi matrični element se javlja usled interakcije pozitivno naelektrisanog dela oscilatora projektila i negativno naelektrisanog dela oscilatora mete.

$$M_2 = \langle knm | \frac{1}{|\vec{R} - \vec{y}|} | k_0 n_0 m_0 \rangle = \langle nm | \int e^{-i\vec{k}\vec{R}} \frac{1}{|\vec{R} - \vec{y}|} e^{i\vec{k}_0\vec{R}} d\vec{R} | n_0 m_0 \rangle \quad (127)$$

Izraz (127) se računa uvođenjem smene $\vec{R} - \vec{y} = \vec{u}$, i dobija se

$$M_2 = \langle nm | \int e^{-i\vec{q}(\vec{u} + \vec{y})} \frac{1}{u} d\vec{u} | n_0 m_0 \rangle = \langle nm | e^{-i\vec{q}\vec{y}} \int e^{-i\vec{q}\vec{u}} \frac{1}{u} d\vec{u} | n_0 m_0 \rangle \quad (128)$$

Nakon rešavanja integrala, matrični element M_2 dobija oblik

$$M_2 = \frac{4\pi}{q^2} \delta_{m0} \langle m | e^{-i\vec{q}\vec{y}} | m_0 \rangle \equiv \frac{4\pi}{q^2} \delta_{m0} M_{mm0} \quad (129)$$

gde je M_{mm0} matrični element istog oblika koji se javlja u relaciji (86).

Po analogiji rešavanja matričnog elementa, M_2 , matrični element M_3 se svodi na oblik

$$M_3 = \frac{4\pi}{q^2} \delta_{mm0} M_{nn0} \quad (130)$$

gde je $M_{nn0} = \langle n | e^{iq\bar{x}} | n_0 \rangle$

Četvrti matrični element M_4 je jednak

$$M_4 = \langle knm | \frac{1}{|\bar{R} - \bar{y} + \bar{x}|} | k_0 n_0 m_0 \rangle = \langle nm | \int e^{iq\bar{R}} \frac{1}{|\bar{R} - \bar{y} + \bar{x}|} d\bar{R} | n_0 m_0 \rangle \quad (131)$$

Ovaj matrični element se rešava uvođenjem smene $\bar{R} - \bar{y} + \bar{x} = \bar{u}$, pri čemu se na kraju dobija da je

$$M_4 = \frac{4\pi}{q^2} M_{mm0} M_{nn0} \quad (132)$$

Zamenom matričnih elemenata $M_{1,2,3,4}$, diferencijalni efikasni presek, napisan u izrazu (123), postaje

$$d\sigma_{nm} = \frac{z_1^2 z_2^2 e^4 m_2}{2\pi \hbar^4 v^2} \left(\frac{4\pi}{q^2} \right)^2 |\delta_{nn0} \delta_{mm0} - \delta_{nn0} M_{mm0} - \delta_{mm0} M_{nn0} + M_{nn0} M_{mm0}|^2 dQ \quad (133)$$

Kada se izraz $Q = \frac{\hbar^2 q^2}{2m_e}$ za predatu energiju, zameni u izraz (133), dobija se

$$d\sigma_{nm} = \frac{2\pi \cdot z_1^2 z_2^2 e^4}{m_2 v^2} |\delta_{nn0} M_{mm0} - \delta_{mm0} M_{nn0} + M_{nn0} M_{mm0}|^2 \frac{dQ}{Q^2} \quad (134)$$

Prvi matrični element je izostavljen, jer on ne doprinosi zaustavnoj moći.

Zamenom diferencijalnog efikasnog preseka iz prethodne relacije u izraz za zaustavnu moć dat relacijom (119) dobija se

$$S = N \frac{2\pi \cdot z_1^2 z_2^2 e^4}{m_2 v^2} \sum_{n,m} \int [(E_n - E_{n_0}) + (E_m - E_{m_0})] |\delta_{nn0} M_{mm0} - \delta_{mm0} M_{nn0} + M_{nn0} M_{mm0}|^2 \frac{dQ}{Q^2} \quad (135)$$

Razvojem prethodnog izraza za zaustavnu moć, dobija se suma od sedam članova u formi:

$$\begin{aligned}
S = N \frac{2\pi z_1^2 z_2^2 e^4}{m_2 v^2} & \left\{ \sum_{n,m} [(E_n - E_{n0}) + (E_m - E_{m0})] \int \delta^2_{nn0} | {}_2 M_{mm0} |^2 \frac{dQ}{Q^2} \right. \\
& - \sum_{n,m} [(E_n - E_{n0}) + (E_m - E_{m0})] \int \delta_{nn0} | {}_2 M_{mm0} |^2 \frac{dQ}{Q^2} \\
& + \sum_{n,m} [(E_n - E_{n0}) + (E_m - E_{m0})] \int \delta^2_{mm0} | {}_1 M_{nn0} |^2 \frac{dQ}{Q^2} \\
& - \sum_{n,m} [(E_n - E_{n0}) + (E_m - E_{m0})] \int \delta_{mm0} | {}_1 M_{nn0} |^2 \frac{dQ}{Q^2} \\
& - \sum_{n,m} [(E_n - E_{n0}) + (E_m - E_{m0})] \int \delta_{nn0} | {}_1 M_{nn0} |^2 \frac{dQ}{Q^2} \\
& - \sum_{n,m} [(E_n - E_{n0}) + (E_m - E_{m0})] \int \delta_{mm0} | {}_2 M_{mm0} |^2 \frac{dQ}{Q^2} \\
& \left. + \sum_{n,m} [(E_n - E_{n0}) + (E_m - E_{m0})] \int | {}_1 M_{nn0} |^2 | {}_2 M_{mm0} |^2 \frac{dQ}{Q^2} \right\}
\end{aligned} \tag{136}$$

Svaki član u izrazu (136) predstavlja integraciju preko predate energije, Q , i dve sume preko svih mogućih stanja projektila i mete. Gornja granica integracije je jednaka beskonačnosti [Sigmund and Haagerup, 1986], dok se donja granica integracije određuje na osnovu zakona održanja energije iz izraza (120), na sledeći način.

Impuls koji projektil preda meti iznosi $\hbar \vec{q} = \hbar(\vec{k} - \vec{k}_0)$. Kvadriranjem ovog izraza i izražavanjem predatog impulsa preko predate energije, Q , dobija se

$$2m_2 Q = \hbar^2 k_0^2 + \hbar^2 k^2 - 2\hbar^2 \vec{k}_0 \vec{k} \tag{137}$$

Deljenjem relacije (137) sa $2m_1$ i imajući u vidu zakon održanja energije (izraz (120)), dobija se

$$\frac{m_2 Q}{m_1} = -((E_m - E_{m0}) + (E_n - E_{n0})) - \frac{\hbar^2 \vec{k}_0 (\vec{k} - \vec{k}_0)}{m_1}, \tag{138}$$

odnosno, pošto je $\hbar \vec{k}_0 = m_1 \vec{v}$ sledi da je

$$\left((E_n - E_{n_0}) + (E_m - E_{m_0}) + \frac{m_2}{m_1} Q \right)^2 = 2m_2 v^2 Q, \quad (139)$$

S obzirom da je masa projektila mnogo veća od mase mete, član $\frac{m_2}{m_1} Q$ u jednačini (139) može da se zanemari, odakle se dobija da je donja granica integracije u izrazu (136) jednaka

$$Q_{\min} = \frac{((E_n - E_{n_0}) + (E_m - E_{m_0}))^2}{2m_2 v^2} \quad (140)$$

V 2.1. Računanje matričnih elemenata

U ovom delu su računane sume i integrali koji se nalaze u relaciji (136). Matrični elementi se računaju preko stanja kvantnog harmonijskog oscilatora. Pretpostavlja se da su projektil i meta pre sudara u osnovnom stanju ($n_0=0$ i $m_0=0$). Može se pokazati da važi da je [Sigmund and Haagerup, 1986].

$$M_{k_0} = \frac{1}{\sqrt{k!}} \left(i \sqrt{\frac{Q}{\hbar \omega}} \right)^k e^{-\frac{Q}{2\hbar \omega}} \quad (141)$$

Za harmonijske oscilatore važi da je $E_n - E_0 = n\hbar \omega_p$ i $E_m - E_0 = m\hbar \omega_t$, gde su $n=1,2,3\dots$ i $m=1,2,3\dots$ i otuda donja granica integracije data izrazom (140) ima oblik

$$Q_{\min} = \frac{(n\hbar \omega_p + m\hbar \omega_t)^2}{2m_2 v^2} \quad (142)$$

Prvi član u relaciji (136) obeležimo sa I_1 , i on je jednak

$$I_1 = \sum_{n,m} [(E_n - E_0) + (E_m - E_0)] \delta_{n_0}^2 \int_{\frac{(n\hbar \omega_p + m\hbar \omega_t)^2}{2m_2 v^2}}^{\infty} |M_{m_0}|^2 \frac{dQ}{Q^2} \quad (143)$$

Usled Kronekerovog simbola i relacije (141), prethodni izraz se svodi na

$$I_1 = \sum_m m \hbar \omega_t \int_{\frac{(m \hbar \omega_t)^2}{2m_2 v^2}}^{\infty} \frac{1}{m!} \left(\frac{Q}{\hbar \omega_t} \right)^m e^{\frac{Q}{\hbar \omega_t}} \frac{dQ}{Q^2} \quad (144)$$

Nakon uvođenja smene $\xi_t = \frac{Q}{\hbar \omega_t}$ i $\varepsilon_t = \frac{\hbar \omega_t}{2m_2 v^2}$, dobija se da je

$$I_1 = \sum_{m=1}^{\infty} \frac{1}{(m-1)!} \int_{\frac{\varepsilon_t}{m^2}}^{\infty} \xi_t^{m-2} e^{-\xi_t} d\xi_t \quad (145)$$

Drugi član u relaciji (136) ima oblik

$$I_2 = \sum_{n,m} [(E_n - E_0) + (E_m - E_0)] \delta_{n0}^2 \int_{\frac{(n \hbar \omega_p + m \hbar \omega_t)^2}{2m_2 v^2}}^{\infty} |M_{m0}|^2 \overline{M_{n0}} \frac{dQ}{Q^2} \quad (146)$$

i analogno prethodnom članu svodi se na

$$I_2 = \sum_m m \hbar \omega_t \int_{\frac{(m \hbar \omega_t)^2}{2m_2 v^2}}^{\infty} \frac{1}{m!} \left(\frac{Q}{\hbar \omega_t} \right)^m e^{-\frac{Q}{\hbar \omega_t}} e^{-\frac{Q}{2\hbar \omega_p}} \frac{dQ}{Q^2} \quad (147)$$

Nakon uvođenja smene $\beta_p = \frac{2\hbar \omega_p + \hbar \omega_t}{2\hbar \omega_p} \varepsilon_t$ i $\alpha_p = \frac{1}{\hbar \omega_t} + \frac{1}{2\hbar \omega_p}$, relacija (147)

postaje

$$I_2 = \sum_{m=1}^{\infty} \frac{1}{(m-1)!} \frac{1}{(\hbar \omega_t)^{m-1}} \alpha_p^{1-m} \int_{\frac{\beta_p}{j^2}}^{\infty} \xi_t^{m-2} e^{-\xi_t} d\xi_t \quad (148)$$

Treći i četvrti članovi u relaciji (136) su istog oblika kao i prethodna dva i dati su samo u konačnoj formi

$$I_3 = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{(n-1)!} \int_{n^2 \varepsilon_p}^{\infty} \xi_p^{n-2} e^{-\xi_p} d\xi_p, \quad (149)$$

gde su $\xi_p = \frac{Q}{\hbar\omega_p}$ i $\varepsilon_p = \frac{\hbar\omega_p}{2m_2v^2}$.

$$I_4 = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{(n-1)!} \frac{1}{(\hbar\omega_p)^{n-1}} \alpha_{pt}^{1-n} \int_{n^2 \beta_{pt}}^{\infty} \xi_p^{n-2} e^{-\xi_p} d\xi_p, \quad (150)$$

gde su uvedene sledeće oznake $\beta_{pt} = \frac{2\hbar\omega_t + \hbar\omega_p}{2\hbar\omega_t} \varepsilon_p$ i $\alpha_{pt} = \frac{1}{2\hbar\omega_t} + \frac{1}{\hbar\omega_p}$.

Pošto je $M_{00} = \overline{M_{00}}$, može se napisati da važi da je peti član u relaciji (136) jednak drugom članu, i da je šesti član u toj relaciji jednak četvrtom članu, odnosno, $I_5=I_2$ i $I_6=I_4$.

Konačno sedmi član ima oblik

$$I_7 = \sum_{n,m} (n\hbar\omega_p + m\hbar\omega_t) \int_{\frac{(n\hbar\omega_p + m\hbar\omega_t)^2}{2m_2v^2}}^{\infty} |M_{n0}|^2 |M_{m0}|^2 \frac{dQ}{Q^2} \quad (151)$$

Nakon zamene relacije (141) sedmi član, I_7 , postaje

$$I_7 = \sum_{n,m} (n\hbar\omega_p + m\hbar\omega_t) \int_{\frac{(n\hbar\omega_p + m\hbar\omega_t)^2}{2m_2v^2}}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(\frac{Q}{\hbar\omega_p} \right)^n e^{-\frac{Q}{\hbar\omega_p}} \frac{1}{m!} \left(\frac{Q}{\hbar\omega_t} \right)^m e^{-\frac{Q}{\hbar\omega_t}} \frac{dQ}{Q^2} \quad (152)$$

Posle određenih transformacija I_7 se svodi na

$$I_7 = \sum_{n,m=1}^{\infty} (n\hbar\omega_p + m\hbar\omega_t) \frac{1}{n!} \frac{1}{m!} \frac{1}{(\hbar\omega_p)^n} \frac{1}{(\hbar\omega_t)^m} \alpha^{1-n-m} \int_{\beta_{ij}}^{\infty} \xi^{n+m-2} e^{-\xi} d\xi, \quad (153)$$

gde su $\alpha = \frac{1}{\hbar\omega_t} + \frac{1}{\hbar\omega_p}$, $\beta_{ij} = \frac{(i\hbar\omega_p + j\hbar\omega_t)^2}{2M_2v^2} \alpha$, pri čemu je $\xi = \alpha Q$.

V 2.2. Konačna formula za zaustavnu moć kvantnog harmonijskog oscilatora

Iz izraza (136) i korišćenjem izračunatih elemenata od I_1 do I_7 dobija se konačna formula za računanje zaustavne moći kvantno mehaničkog harmonijskog oscilatora.

Integrali koji su definisani u članovima $I_1 \dots I_7$ se svode na Gama funkcije sa donjom granicom integracije različitom od nule. S obzirom da važi da je $I_5=I_2$ i $I_6=I_4$, relacija (136) se svodi na zbir od pet članova.

$$\begin{aligned}
 S = N \frac{2\pi(z_1 z_2)^2 e^4}{m_2 v^2} & \left\{ \sum_{m=1}^{\infty} \frac{1}{(m-1)!} \Gamma(m-1, m^2 \varepsilon_t) - 2 \sum_{m=1}^{\infty} \frac{1}{(m-1)!} \frac{1}{(\hbar \omega_t)^{m-1}} \alpha_{p'}^{1-m} \Gamma(m-1, m^2 \beta_{p'}) \right. \\
 & + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{(n-1)!} \Gamma(n-1, n^2 \varepsilon_p) - 2 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{(n-1)!} \frac{1}{(\hbar \omega_p)^{n-1}} \alpha_{pt}^{1-n} \Gamma(n-1, n^2 \beta_{pt}) \\
 & \left. + \sum_{n,m=1}^{\infty} (n\hbar \omega_p + m\hbar \omega_t) \frac{1}{n!} \frac{1}{m!} \frac{1}{(\hbar \omega_p)^n} \frac{1}{(\hbar \omega_t)^m} \alpha^{1-n-m} \Gamma(n+m-1, \beta_{ij}) \right\}
 \end{aligned} \tag{154}$$

Izraz (154) je pogodno napisati preko parametara $\varepsilon_t = \frac{\hbar \omega_t}{2m_2 v^2}$ i $\varepsilon_p = \frac{\hbar \omega_p}{2m_2 v^2}$, tako

da se dobija

$$\begin{aligned}
 S = N \frac{2\pi(z_1 z_2)^2 e^4}{m_2 v^2} & \left\{ \sum_{m=1}^{\infty} \frac{1}{(m-1)!} \Gamma(m-1, m^2 \varepsilon_t) - 2 \sum_{m=1}^{\infty} \frac{1}{(m-1)!} \frac{\left(\frac{1}{\varepsilon_t} + \frac{1}{2\varepsilon_p}\right)^{1-m}}{(\varepsilon_t)^{m-1}} \Gamma\left(m-1, m^2 \left(\frac{2\varepsilon_p + \varepsilon_t}{2\varepsilon_p}\right) \varepsilon_t\right) \right. \\
 & + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{(n-1)!} \Gamma(n-1, n^2 \varepsilon_p) - 2 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{(n-1)!} \frac{\left(\frac{1}{\varepsilon_p} + \frac{1}{2\varepsilon_t}\right)^{1-n}}{(\varepsilon_p)^{n-1}} \Gamma\left(n-1, n^2 \left(\frac{2\varepsilon_t + \varepsilon_p}{2\varepsilon_t}\right) \varepsilon_p\right) \\
 & \left. + \sum_{n,m=1}^{\infty} \frac{1}{n!} \frac{1}{m!} \frac{(n\varepsilon_p + m\varepsilon_t)}{\varepsilon_p^n \varepsilon_t^m} \left(\frac{1}{\varepsilon_p} + \frac{1}{\varepsilon_t}\right)^{1-n-m} \Gamma\left(n+m-1, (n\varepsilon_p + m\varepsilon_t)^2 \left(\frac{1}{\varepsilon_p} + \frac{1}{\varepsilon_t}\right)\right) \right\}
 \end{aligned} \tag{155}$$

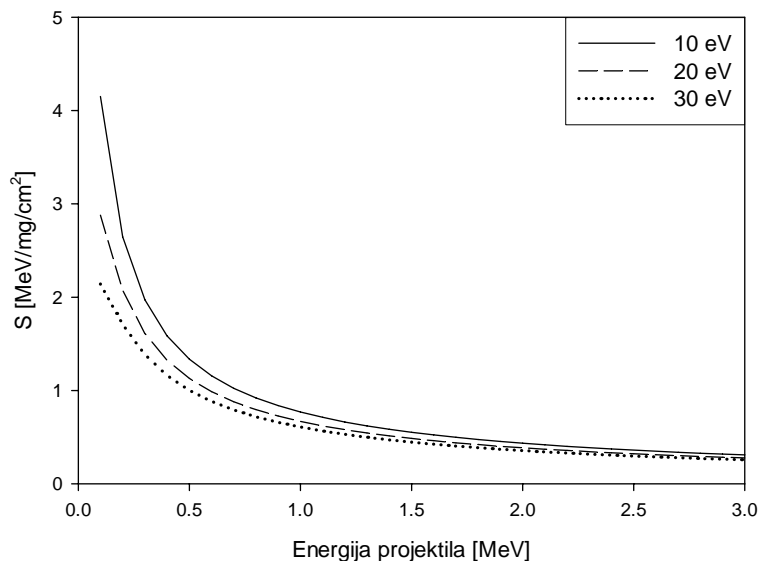
Prvi član u relaciji (155) predstavlja doprinos zaustavnoj moći ukoliko se projektil smatra tačkastim naelektrisanjem i njegova energija se gubi na pobuđenje mete. Ostali članovi imaju smisla samo ako projektil nije tačkasto naelektrisanje. Drugi član predstavlja doprinos zaustavnoj moći pri čemu projektil ostaje u osnovnom stanju. Treći član predstavlja proces pri kome dolazi do pobuđenja projektila u interakciji sa tačkastom metom. Četvrti član u relaciji (154) predstavlja doprinos zaustavnoj moći kada dolazi do pobuđenja projektila, dok meta ostaje u osnovnom stanju. Poslednji član predstavlja gubitak energije projektila na pobuđenje projektila i mete.

V 3. Rezultati

Zaustavna moć harmonijskog oscilatora je računata prema relaciji (155). Za računanje zaustavne moći napisani su programi *SP_Oscilator_1.nb* i *SP_Oscilator_2.nb*, u softveru MATHEMATICA[®] [MATHEMATICA[®]], (videti *DODATAK I* i *DODATAK II*). Ovaj softver omogućava računanje Gamma funkcije, koje u ovom slučaju, zavise od parametara ε_t i ε_p . Svaki član od I_1 do I_7 , u relaciji (155), predstavlja sumu po kvantnim brojevima harmonijskog oscilatora mete i projektila. Teorijski, sumiranje ide do beskonačnosti. Pošto se vrednost sume ne menja ako je broj članova u sumi veći od 1000, onda je to prihvaćeno za broj elemenata u sumi. Na osnovu napisanog programa dobijeni su rezultati, koji su opisani u sledećim sekcijama.

V 3.1. Zaustavna moć harmonijskog oscilatora za tačkasti projektil

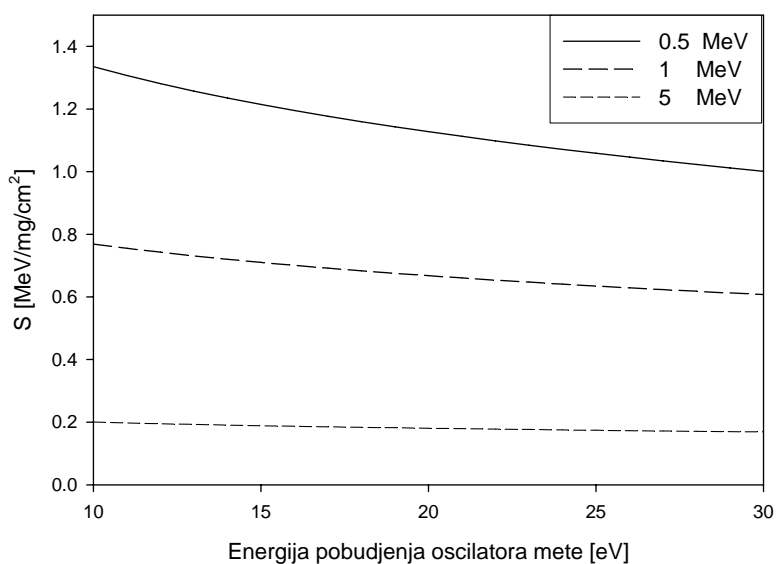
U slučaju kada je projektil tačkasto naelektrisanje preostaje samo prvi član u zagradi relacije (155). Na Slici 14 predstavljena je zaustavna moć harmonijskog oscilatora, za tačkasti projektil kao funkcija od upadne energije projektila.



Slika 14. Zaustavna moć harmonijskog oscilatora za tačkasti projektil kao funkcija od upadne energije projektila, za različite vrednosti energije pobuđenja mete

Zaustavna moć je predstavljena za različite vrednosti energije pobuđenja oscilatora mete, $\hbar\omega_i = 10, 20, i 30 \text{ eV}$. Sa grafika se vidi da zaustavna moć opada sa porastom kinetičke energije projektila, kao i sa porastom energije pobuđenja oscilatora mete. Pri visokim energijama projektila (iznad 2 MeV) uticaj energije pobuđenja oscilatora mete je zanemarljiv. On je dominantan u domenu nižih energija, naročito u oblasti Bragg-ovog pika. Sa porastom energije pobuđenja oscilatora mete, Bragov pik je niži.

Na Slici 15 predstavljena je zaustavna moć kao funkcija energije pobuđenja mete, $\hbar\omega_t$, za različite vrednosti kinetičke energije projektila. Kinetičke energije projektila su 0.5, 1 i 5 MeV. Zaustavna moć opada sa porastom energije pobuđenja mete za datu kinetičku energiju projektila.



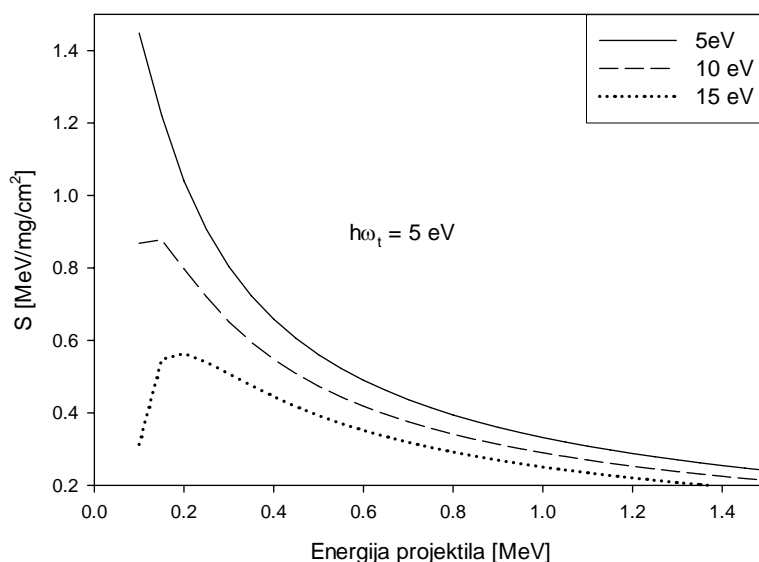
Slika 15. Uticaj energije pobuđenja mete na zaustavnu moć harmonijskog oscilatora za tačkasti projektil

Uticaj energije pobuđenja mete je veći pri nižim kinetičkim energijama projektila, što se vidi iz nagiba krivih (videti krive za 0.5 i 1 MeV). Pri visokim kinetičkim energijama projektila uticaj energije oscilovanja mete na vrednost zaustavne moći je zanemarljiv.

V 3.2. Zaustavna moć harmonijskog oscilatora za projektil-oscilator

Predstavljanjem projektila oscilatorom, isto kao i metu, pogodno je za ispitivanje uticaja energije pobuđivanja projektila na vrednost zaustavne moći. Izraz za zaustavnu moć za projektil-oscilator sadrži četiri dodatna člana u odnosu na izraz kada je projektil tačkasto naelektrisanje. Ovi članovi predstavljaju transformaciju kinetičke energije projektila na energiju njegovog pobuđenja, pri interakciji sa negativnim i pozitivnim naelektrisanjem mete oscilatora.

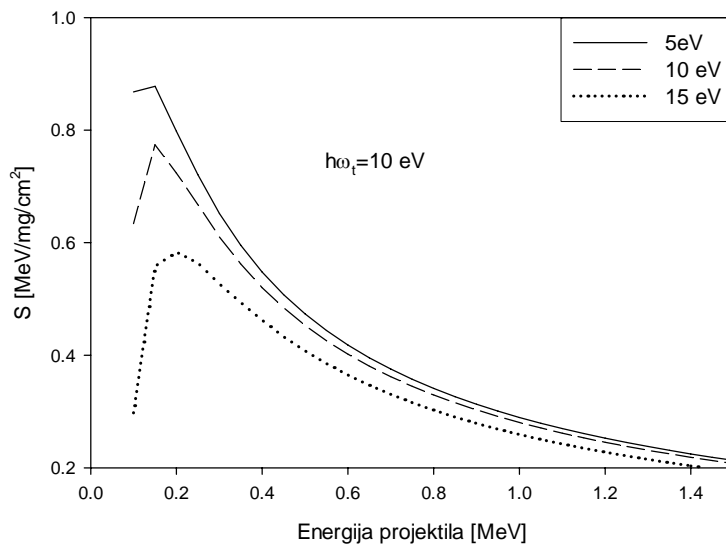
Na Slici 16 prikazana je zavisnost zaustavne moći u funkciji od kinetičke energije projektila za različite vrednosti njegove energije pobuđivanja. Energija pobuđivanja mete je $\hbar\omega_i = 5\text{ eV}$. Uticaj energije pobuđivanja projektila oscilatora na zaustavnu moć je veliki, naročito u domenu nižih energija.



Slika 16. Zaustavna moć harmonijskog oscilatora kao funkcija kinetičke energije projektila-oscilatora za različite vrednosti energije njegovog pobuđenja. Energija pobuđenja oscilatora mete je $\hbar\omega_i = 5\text{ eV}$

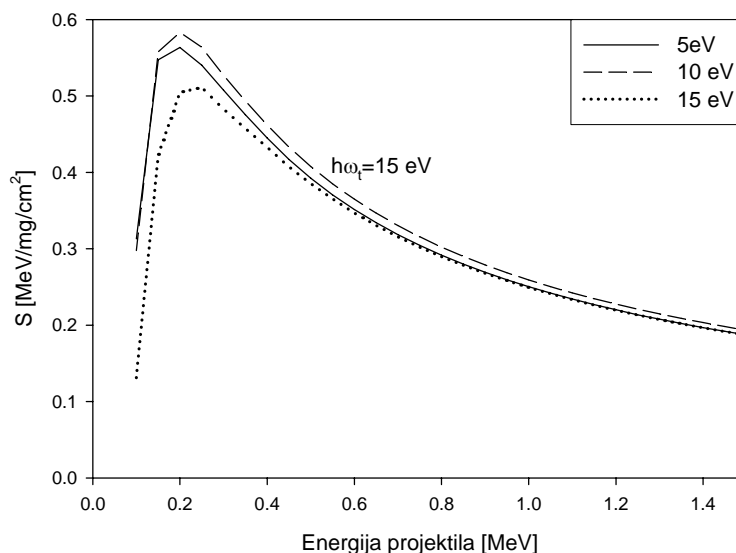
Vrednost zaustavne moći opada sa porastom energije pobuđivanja projektila, naročito u oblasti Braggovog pika. Bragov pik se smanjuje sa porastom energije pobuđenja projektila. Pored toga, primećuje se blago pomeranje Braggovog pika u desno, ka višim vrednostima kinetičke energije projektila.

Na Slici 17 prikazani su grafici zaustavne moći u funkciji od kinetičke energije projektila za različite vrednosti energije pobuđenja projektila, dok je vrednost energije pobuđenja mete $\hbar\omega_i = 10\text{ eV}$. Efekat je isti kao u na Slici 16. Pored toga, vrednosti zaustavne moći su niže u odnosu na slučaj kada je $\hbar\omega_i = 5\text{ eV}$.



Slika 17. Zaustavna moć harmonijskog oscilatora kao funkcija kinetičke energije projektila-oscilatora za različite vrednosti energije njegovog pobuđenja. Energija pobuđenja oscilatora mete je $\hbar\omega_i = 10\text{ eV}$

Upoređujući grafike sa Slike 16 i 17, primećuje se da se uticaj energije pobuđenja projektila na vrednost zaustavne moći smanjuje sa porastom energije pobuđenja mete. To se potvrđuje i na Slici 18, gde je data zaustavna moć kao funkcija kinetičke energije projektila kada je vrednost energije pobuđenja mete $\hbar\omega_i = 15\text{ eV}$. Uticaj energije pobuđenja projektila na vrednost zaustavne moći je još manji u odnosu na prethodna dva razmatrana slučaja. Ovaj efekat je više uočljiv u domenu viših kinetičkih energija projektila.



Slika 18. Zaustavna moć harmonijskog oscilatora kao funkcija kinetičke energije projektila-oscilatora za različite vrednosti energije njegovog pobuđenja. Energija pobuđenja oscilatora mete je $\hbar\omega_t = 15 eV$

V 4. Zaključak

Ako se projektil smatra kao tačkasti projektil, pri čemu se zanemaruje mogućnost njegovog pobuđenja, u izrazu (155) potrebno je zameniti $\hbar\omega_p \rightarrow 0$. Kao posledica toga u pomenutom izrazu, svi članovi postaju jednaki nuli, osim prvog, i izraz postaje jednak kao i u radu [Sigmund and Haagerup, 1986], gde je projektil tretiran kao tačkasto naelektrisanje.

Modelovanjem projektila oscilatorom omogućava računanje efekta da se njegova kinetička energija pretvori u energiju njegovog ekscitovanja. U ovom poglavlju je pokazano da ekscitacija projektila ima veliki uticaj na vrednost zaustavne moći, koja je računata prema Betheovom principu, u prvoj Bornovoj aproksimaciji.

Najveći uticaj energije ekscitacije projektila na zaustavnu moć je pri nižim kinetičkim energijama projektila, posebno u oblasti Braggovog pika. Bragov pik se blago pomera udesno sa porastom energije pobuđenja projektila. Ovaj efekat se smanjuje pri porastu energije pobuđenja mete.

VI ANALITIČKI IZRAZ ZA ZAUSTAVNU MOĆ, PREDSTAVLJAJUĆI PROJEKTIL I METU ANSAMBLIMA KVANTNIH OSCILATORA

U Glavi II ovog rada (relacija(98)) izraz za zaustavnu moć je napisan u formi

$$S = \frac{4\pi z_1^2 e^4}{m_e v^2} N_0 \cdot z_2 \cdot L \quad (156)$$

gde L predstavlja zaustavni broj. Vrednost zaustavnog broja zavisi od karakteristika projektila i atoma mete.

Sigmund i Haagerup [Sigmund and Haagerup, 1986] su modelovali atom mete ansamblom kvantnih oscilatora i računali zaustavni broj, $L^{osc}(v, \hbar\omega)$, preko stanja svojstvenih za kvantno mehanički harmonijski oscilator. Ovako dobijen zaustavni broj je funkcija brzine projektila, v , i energije pobuđenja oscilatora mete, $\hbar\omega$. Da bi se odredio zaustavni broj materijalne sredine od određenih atoma, $L^{at}(v)$, potrebno je sumirati zaustavne brojeve svih kvantnih harmonijskih oscilatora tog ansambla, kojim je predstavljena sredina i utežnjavati jačinama dipolnog oscilatora, f_{nn0} , tih atoma. To se može napisati kao

$$L^{at}(v) = \sum_n f_{nn0} L^{osc} \left(\frac{2m_e v^2}{E_n - E_{n0}} \right) \quad (157)$$

Sumiranje se vrši preko svih stanja atoma diskretnog i kontinualnog spektra energije.

Ovaj pristup za računanje zaustavne moći je kasnije korišćen u mnogim radovima [Jansen and Mikkelsen, 1996] za računanje gubitka energije H_2^+ u amorfnim ugljenicima i za mnoge druge materijale [Mikkelsen and Mortensen, 1990; Xia Y, et al., 1994].

U ovom poglavlju je računata zaustavna moć predstavljanjem i projektila i mete ansamblima kvantno mehaničkih oscilatora. Pristup je isti kao što su predložili Sigmund i Haagerup, samo što se u ovom radu projektil ne smatra kao tačkasto naelektrisanje, već se i on tretira kao skup kvantno mehaničkih oscilatora. Izraz za zaustavnu moć je izražen preko zbira parcijalnih zaustavnih brojeva, koji zavise od karakteristika projektila i mete.

Parcijalni zaustavni brojevi su računati sumiranjem zaustavnih brojeva pojedinačnih oscilatora mete i projektila, utežnjavanjem njihovim jačinama dipolnih oscilatora. Sumiranje se vrši preko diskretnog i kontinualnog spektra.

VI 1. Izražavanje zaustavne moći preko sume parcijalnih zaustavnih brojeva

Neka imamo projektil mase M_1 , naelektrisanja jezgra z_1e , koji oko sebe ima N_1 electrona, Taj projektil se kreće brzinom v , i interaguje sa atomom mete rednog broja z_2 , koji oko sebe ima N_2 electrona. Potencijal interakcije je između projektila i mete je oblika sličnog relaciji (117).

$$V = -\sum_{j=1}^{N_2} \frac{z_1 e^2}{|\vec{R} - \vec{y}_j|} - \sum_{i=1}^{N_1} \frac{z_2 e^2}{|\vec{R} + \vec{x}_i|} + \sum_{i,j=1}^{N_1, N_2} \frac{e^2}{|\vec{y}_j - \vec{R} - \vec{x}_i|} \quad (158)$$

U relaciji (158) izostavljen je član koji opisuje interakciju jezgara projektila i mete, jer on ne doprinosi zaustavnoj moći.

Na osnovu relacije (113) u kome je definisana vrednost zaustavne moći za delimično ogoljen jon i diferencijalnog efikasnog preseka u relaciji (121) može se napisati da je zaustavna moć jednaka

$$S = \frac{2\pi e^4}{m_e v^2} N_0 \cdot \left\{ \sum_{n \geq n_0, m \neq m_0} \int (E_m - E_{m_0}) \left| -z_1 \delta_{nn_0} {}_2 M_{mm_0} - z_2 \delta_{mm_0} {}_1 M_{nn_0} + {}_1 M_{nn_0} {}_2 M_{mm_0} \right|^2 \frac{dQ}{Q^2} + \sum_{n \neq n_0, m \geq m_0} \int (E_n - E_{n_0}) \left| -z_1 \delta_{nn_0} {}_2 M_{mm_0} - z_2 \delta_{mm_0} {}_1 M_{nn_0} + {}_1 M_{nn_0} {}_2 M_{mm_0} \right|^2 \frac{dQ}{Q^2} \right\} \quad (159)$$

gde matrični elementi imaju M_{mm_0} i M_{nn_0} forme

$$M_{nn_0} = \sum_{i=1}^{N_1} \langle n | e^{-iq\vec{x}_i} | n_0 \rangle ; M_{mm_0} = \sum_{j=1}^{N_2} \langle m | e^{-iq\vec{y}_j} | m_0 \rangle \quad (160)$$

Članovi $z_2\delta_{mm0_1}M_{mn0}$ i $z_1\delta_{nn0_2}M_{mm0}$ u prvoj i drugoj zagradi izraza (159) ne doprinose zaustavnoj moći, pa se zanemaruju u daljem računu. Nakon izvlačenja zajedničkih elemenata ispred zagrada, dobija se [Cabrera-Trujillo, et al., 1997]

$$S = \frac{2\pi e^4}{m_e v^2} N_0 \left\{ \sum_{n \geq n_0, m \neq m_0} \int (E_m - E_{m_0}) |z_1 \delta_{nn0} M_{mn0}|^2 |M_{mm0}|^2 \frac{dQ}{Q^2} + \sum_{n \neq n_0, m \geq m_0} \int (E_n - E_{n_0}) |z_2 \delta_{mm0} M_{mm0}|^2 |M_{nn0}|^2 \frac{dQ}{Q^2} \right\} \quad (161)$$

Izraz (161) se može napisati u pogodnijoj formi kao

$$S = \frac{2\pi e^4}{m_e v^2} N_0 \left\{ \sum_{n \geq n_0, m \neq m_0} \int (E_m - E_{m_0}) |F_{nn0}^p(-\vec{q})|^2 |F_{mm0}^t(\vec{q})|^2 \frac{dQ}{Q^2} + \sum_{n \neq n_0, m \geq m_0} \int (E_n - E_{n_0}) |F_{nn0}^p(-\vec{q})|^2 |F_{mm0}^t(\vec{q})|^2 \frac{dQ}{Q^2} \right\} \quad (162)$$

gde su

$$F_{nn0}^p(-\vec{q}) = \langle n | z_1 - \sum_i e^{-i\vec{q}\vec{r}_i} | n_0 \rangle \quad (163)$$

$$F_{mm0}^t(\vec{q}) = \langle m | z_2 - \sum_j e^{i\vec{q}\vec{r}_j} | m_0 \rangle$$

neelastične amplitude rasejanja projektila i mete [Glazov, 2002].

Donja granica integracije je data izrazom (140), a gornja granica predate energije se dobija iz uslova maksimalnog predatog impulsa pri čeonom sudaru i iznosi $2m_e v^2$.

Posle razvoja sume, relacija (162) se može napisati kao [Stevanović and Nikezić, 2007]

$$S = \frac{4\pi e^4}{m_e v^2} N_0 \cdot \left\{ \frac{1}{2} N_2 \sum_{m > m_0} \int_{\frac{(E_m - E_{m_0})^2}{2m_e v^2}}^{2m_e v^2} |F_{n_0 n_0}^p|^2 f_{mm0}^t(Q) \frac{dQ}{Q} + \frac{1}{2} N_1 \sum_{n > n_0} \int_{\frac{(E_n - E_{n_0})^2}{2m_e v^2}}^{2m_e v^2} f_{nn0}^p(Q) |F_{m_0 m_0}^t|^2 \frac{dQ}{Q} + \frac{1}{2} N_1 N_2 \sum_{m > m_0, n > n_0} \frac{(E_m - E_{m_0}) + (E_n - E_{n_0})}{(E_m - E_{m_0}) \cdot (E_n - E_{n_0})} \int_{\frac{((E_n - E_{n_0}) + (E_m - E_{m_0}))^2}{2m_e v^2}}^{2m_e v^2} f_{nn0}^p(Q) f_{mm0}^t(Q) dQ \right\} \quad (164)$$

pri čemu su $f_{kk0}^i(Q) = \frac{E_k - E_{k0}}{N_i \cdot Q} |F_{kk0}^i|^2$ generalisane jačine oscilatora (generalized oscillator strengths - GOS), N_i je broj vezanih elektrona ($i=p$ za projektil; $i=t$ za metu).

Relacija (164) za zaustavnu moć se može napisati preko sume parcijalnih zaustavnih brojeva u formi [Stevanović and Nikezić, 2007]

$$S = \frac{4\pi e^4}{m_e v^2} N \cdot \{N_2 L_t^{at} + N_1 L_p^{at} + N_1 N_2 L_{t,p}^{at}\} \quad (165)$$

gde su parcijalni zaustavni brojevi za atome mete i projektila definisani preko zaustavnih brojeva oscilatora kao [Stevanović and Nikezić, 2007]

$$L_t^{at} = \sum_{m>m0} f_{mm0}^t L_t^{osc} \left(\frac{2m_e v^2}{E_m - E_{m0}} \right), \quad L_p^{at} = \sum_{n>n0} f_{nn0}^p L_p^{osc} \left(\frac{2m_e v^2}{E_n - E_{n0}} \right) \quad (166 a)$$

$$L_{t,p}^{at} = \sum_{m>m0, n>n0} f_{mm0}^t f_{nn0}^p L_{t,p}^{osc} \left(\frac{2m_e v^2}{E_m - E_{m0}}, \frac{2m_e v^2}{E_n - E_{n0}} \right)$$

pri čemu parcijalni zaustavni brojevi oscilatora imaju formu [Stevanović and Nikezić, 2007]

$$L_t^{osc} = \frac{1}{2} \sum_{m>m0} \int_{\frac{(E_m - E_{m0})^2}{2m_e v^2}}^{2m_e v^2} |F_{n0n0}^p|^2 f_{mm0}^t(Q) \frac{dQ}{Q}, \quad L_p^{osc} = \frac{1}{2} \sum_{n>n0} \int_{\frac{(E_n - E_{n0})^2}{2m_e v^2}}^{2m_e v^2} f_{nn0}^p(Q) |F_{m0m0}^t|^2 \frac{dQ}{Q} \quad (166 b)$$

$$L_{t,p}^{osc} = \frac{1}{2} \sum_{m>m0, n>n0} \frac{(E_m - E_{m0}) + (E_n - E_{n0})}{(E_m - E_{m0}) \cdot (E_n - E_{n0})} \int_{\frac{((E_n - E_{n0}) + (E_m - E_{m0}))^2}{2m_e v^2}}^{2m_e v^2} f_{nn0}^p(Q) f_{mm0}^t(Q) dQ$$

Prema predlogu Sigmunda i Haagerupa [Sigmund and Haagerup, 1986] zaustavni broj za određene atome, L_{at} , se računa prema relaciji (157). Da bi se primenila relacija (157) potrebno je u izrazu za zaustavnu moć izdvojiti izraz za zaustavni broj. Taj isti izraz se koristi i za računanje zaustavnog broja oscilatora L_{osc} , preko stanja i energija svojstveni za harmonijski oscilator, (relacija (166 b)).

VI 2. Računanje zaustavnih brojeva, L^{osc} , preko stanja kvantno mehaničkog oscilatora

U ovom delu računati su zaustavni brojevi za oscilatore. Prvi parcijalni broj, definsan u relaciji (166b), predstavlja interakciju između projektila i mete pri čemu projektil ostaje u osnovnom stanju, dok se meta pobuđuje

$$L_t^{osc} = \frac{1}{2} \sum_{m>m_0} (E_m - E_{m_0}) \int_{\frac{(E_m - E_{m_0})^2}{2m_e v^2}}^{2m_e v^2} |F_{n_0 n_0}^p(-\vec{q})|^2 |F_{mm_0}^t(\vec{q})|^2 \frac{dQ}{Q^2} \quad (167)$$

Kvadrat modula od $F_{mm_0}^t$ za harmonijski oscillator prema [Sigmund and Haagerup, 1986] je oblika

$$|F_{mm_0}^t|^2 = \frac{1}{m!} \left(\frac{Q}{\hbar\omega} \right)^m e^{-\frac{Q}{\hbar\omega}} \quad (168)$$

gde je $E_m - E_0 = m\hbar\omega_t$.

Otuda relacija (167) postaje

$$L_t^{osc} = \frac{1}{2} \sum_{m>m_0} \frac{\hbar\omega_t}{(m-1)!} \int_{\frac{(m\hbar\omega_t)^2}{2m_e v^2}}^{2m_e v^2} |F_{n_0 n_0}^p(-\vec{q})|^2 \left(\frac{Q}{\hbar\omega_t} \right)^m e^{-\frac{Q}{\hbar\omega_t}} \frac{dQ}{Q^2} = \frac{1}{2} \sum_{m>m_0} \frac{1}{(m-1)!} \int_{\frac{m^2 \hbar\omega_t}{2m_e v^2}}^{\frac{2m_e v^2}{\hbar\omega_t}} |F_{n_0 n_0}^p|^2 t^{m-2} e^{-t} dt \quad (169)$$

U desnom delu relacije (169) uvedena je promenljiva $t = \frac{Q}{\hbar\omega_t}$ i integracija može da se

podeli na dva dela [Tsuchida and Kaneko, 1997]: prvi deo je integracija od $t_{\min} = \frac{m^2 \hbar\omega_t}{2m_e v^2}$

do t_0 , a drugi deo je od t_0 do t_{\max} . t_0 predstavlja vrednost koja je dovoljno mala da se uvede dipolna aproksimacija u neelastičnoj amplitudi rasejanja u formi

$$|F_{mm_0}^t|^2 = \left| \langle m | \sum_j e^{i\vec{q}\vec{r}_j} | m_0 \rangle \right|^2 \approx q^2 |d_{mm_0}|^2, \text{ gde je } \mathbf{d}_{mm_0} \text{ dipolni matricni element. Na osnovu}$$

ovoga, relacija (169) postaje

$$L_t^{osc} = \frac{1}{2} \sum_{m>0} \frac{1}{(m-1)!} \int_{\frac{m^2 \hbar \omega_i}{2m_e v^2}}^{t_0} |F_{n0n0}^p|^2 t^{m-2} e^{-t} dt + \frac{1}{2} \sum_{m>0} \frac{1}{(m-1)!} \int_{t_0}^{\frac{2m_e v^2}{\hbar \omega_i}} |F_{n0n0}^p|^2 t^{m-2} e^{-t} dt \quad (170)$$

Tejlorov razvoj funkcije, $e^{-t} \approx 1$, može biti korišćen u prvom integralu relacije (170) i prvi član sume ($m = 1$) daje najveći doprinos. U drugom članu može se zameniti redosled integracije i sumiranja. Koristeći sumu $\sum_m \frac{1}{(m-1)!} t^{m-1} = e^t$, izraz (170) postaje

$$L_t^{osc} = \frac{1}{2} \int_{\frac{\hbar \omega_i}{2m_e v^2}}^{t_0} |F_{n0n0}^p|^2 \frac{dt}{t} + \frac{1}{2} \int_{t_0}^{\frac{2m_e v^2}{\hbar \omega_i}} |F_{n0n0}^p|^2 \frac{dt}{t} = \frac{1}{2} \int_{\frac{\hbar \omega_i}{2m_e v^2}}^{\frac{2m_e v^2}{\hbar \omega_i}} |F_{n0n0}^p|^2 \frac{dt}{t} \quad (171)$$

i konačno,

$$L_t^{osc} = \frac{1}{2} \int_{\frac{(\hbar \omega_i)^2}{2m_e v^2}}^{\frac{2m_e v^2}{2m_e v^2}} |F_{n0n0}^p(Q)|^2 \frac{dQ}{Q} \quad (172)$$

Na sličan način parcijalni zaustavni broj za projektil, L_p^{osc} , postaje

$$L_p^{osc} = \frac{1}{2} \int_{\frac{(\hbar \omega_p)^2}{2m_e v^2}}^{\frac{2m_e v^2}{2m_e v^2}} |F_{m0m0}^t(Q)|^2 \frac{dQ}{Q} \quad (173)$$

Prema relaciji (163) imamo $F_{00}^i = z_i - {}_i M_{00}$; ${}_i M_{00}$ su matricni elementi oblika ${}_i M_{00} = \langle 0 | \sum_j e^{-i\vec{q}\vec{r}_j} | 0 \rangle$, i prema [Cabrera-Trujillo et al., 1997] su jednaki

$${}_i M_{00} = N_i \left[1 - A_i Q \cdot \left(\frac{0.37}{A_i Q + 13.88} + \frac{0.63}{A_i Q + 0.96} \right) \right] \quad (174)$$

gde su $A_i(v) = \frac{2m_e}{\hbar^2} \Lambda_i^2(v) b^2$ funkcije brzine projektila.

Integrali u izrazima (172) i (173) mogu biti napisani [Stevanović and Nikezić, 2007]

$$I_i(Q) = \int |F_{00}^i|^2 \frac{dQ}{Q} = \int (z_i - M_{00})^2 \frac{dQ}{Q} = (z_i - N_i)^2 \ln(Q) + Y_i(Q) \quad (175)$$

gde je funkcija $Y_i(Q)$ oblika

$$Y_i(Q) = N_i \left(\frac{1.9N_i}{13.88 + A_i Q} + \frac{0.38N_i}{0.97 + A_i Q} - (0.9N_i - 1.3z_i) \ln(A_i Q + 0.97) - (0.1N_i - 0.74z_i) \ln(A_i Q + 13.88) \right) \quad (176)$$

Ako se funkcija $Y_i(Q)$ razvije u red tada integral u (175) za $Q=Q_{min}$ postaje

$$I_i(Q_{min}) = (z_i - N_i)^2 \ln(Q_{min}) + N_i(0.3N_i + 1.9z_i) \quad (177)$$

dok je za $Q=Q_{max}$ jednak

$$I_i(Q_{max}) = (z_i - N_i)^2 \ln(Q_{max}) + N_i(2z_i - N_i) \ln(AQ_{max}) \quad (178)$$

Shodno tome, parcijalni zaustavni brojevi, definisani relacijama (172) i (173) postaju jednaki [Stevanović and Nikezić, 2007]

$$L_t^{osc} = \left\{ (z_1 - N_1)^2 \ln \left(\frac{2m_e v^2}{\hbar \omega_t} \right) - \frac{1}{2} N_1 \left((0.29N_1 + 1.9z_1) + (N_1 - 2z_1) \ln \left(\frac{4m_e^2 \Lambda_1^2 b^2 v^2}{\hbar^2} \right) \right) \right\} \quad (179)$$

$$L_p^{osc} = \left\{ (z_2 - N_2)^2 \ln \left(\frac{2m_e v^2}{\hbar \omega_p} \right) - \frac{1}{2} N_2 \left((0.29N_2 + 1.9z_2) + (N_2 - 2z_2) \ln \left(\frac{4m_e^2 \Lambda_2^2 b^2 v^2}{\hbar^2} \right) \right) \right\} \quad (180)$$

Treći parcijalni zaustavni broj definisan u relaciji (166b) može biti napisan u formi

$$L_{t,p}^{osc} = \frac{1}{2} \sum_{m>n_0; n>n_0} ((E_m - E_{m_0}) + (E_n - E_{n_0})) \int_{\frac{((E_m - E_{m_0}) + (E_n - E_{n_0}))^2}{2m_e v^2}}^{2m_e v^2} \frac{|F_{nm0}^p|^2 |F_{mm0}^t|^2}{Q^2} dQ \quad (181)$$

i prema relaciji (168) dobija se

$$L_{t,p}^{osc} = \frac{1}{2} \sum_{m>n_0; n>n_0} (m\hbar\omega_t + n\hbar\omega_p) \frac{1}{m!n!} \int_{\frac{(m\hbar\omega_t + n\hbar\omega_p)^2}{2m_e v^2}}^{2m_e v^2} \left(\frac{Q}{\hbar\omega_t}\right)^m \left(\frac{Q}{\hbar\omega_p}\right)^n e^{-\left(\frac{1}{\hbar\omega_t} + \frac{1}{\hbar\omega_p}\right)Q} \frac{dQ}{Q^2} \quad (182)$$

Uvođenjem smene $t = \left(\frac{1}{\hbar\omega_t} + \frac{1}{\hbar\omega_p}\right)Q$, izraz (182) postaje

$$L_{t,p}^{osc} = \frac{1}{2} \sum_{m>n_0; n>n_0} \frac{1}{m!n!} \frac{m\varepsilon_t^n \varepsilon_p^{m-1} + n\varepsilon_t^{n-1} \varepsilon_p^m}{(\varepsilon_t + \varepsilon_p)^{m+n-1}} \cdot \Gamma\left(m+n-1, \frac{(m\varepsilon_t + n\varepsilon_p)^2}{\varepsilon_t + \varepsilon_p}\right) \quad (183)$$

gde su $\varepsilon_t = \frac{\hbar\omega_t}{2m_e v^2}$; $\varepsilon_p = \frac{\hbar\omega_p}{2m_e v^2}$ i $\Gamma(n, x) = \int_x^\infty \xi^{n-1} e^{-\xi} d\xi$ je Gama funkcija.

Parcijalni zaustavni broj $L_{t,p}^{osc}$ u relaciji (183) je računat numerički i fitovan u softveru MATHEMATICA[®] [MATHEMATICA[®]], kao funkcija od parametara $\varepsilon_t^{-1} = y$ i $\varepsilon_p^{-1} = x$.

Na osnovu toga dobijen je sledeći izraz.

$$L_{t,p}^{osc}(y, x) = 0.1 - 0.001y - 2.5 \cdot 10^{-7} y^2 - 0.001x - 2.5 \cdot 10^{-7} x^2 + 0.51 \cdot \ln(y) + 0.51 \cdot \ln(x) \quad (184)$$

VI. 3 Računanje parcijalnih zaustavnih brojeva, L^{at} , za metu i projektil

Parcijalni zaustavni brojevi za metu i projektil prema relaciji (166a) mogu biti računati koristeći relacije (179, 180 i 184) [Stevanović and Nikezić, 2007]. Sumiranje se vrši preko svih stanja diskretnog i kontinualnog spektra, utežnjavanjem jačinama dipolnih oscilatora, f_{i0} , datih atoma. Pri tome, potrebno je zameniti energiju ekscitacije i jonizacije atoma, $E_i - E_{i0}$ sa energijom ekscitacije kvantnog harmonijskog oscilatora, $\hbar\omega$.

Iz izraza (166a) se vidi da svi članovi u L_t^{osc} su nezavisni od energije ekscitacije i jonizacije, osim prvog logaritamskog člana. Konačan izraz za parcijalni zaustavni broj, L_t^{at} , ima oblik

$$L_t^{at} = (z_1 - N_1)^2 \ln\left(\frac{2m_e v^2}{I_2}\right) - \frac{1}{2} N_1 \left[(0.29N_1 + 1.9z_1) + (N_1 - 2z_1) \ln\left(\frac{4m_e^2 \Lambda_1^2 b^2 v^2}{\hbar^2}\right) \right] \quad (185)$$

Ovde je uveden srednji jonizacioni potencijal I , definisan kao $\ln I = \sum_m f_{mm0} \ln(E_m - E_{m0})$ pri čemu važi $\sum_m f_{mm0} = 1$ kao i u [Sigmund and Haagerup, 1986].

Cabrera-Trujillo [Cabrera-Trujillo, 1999] je tretirao elektrone mete kao haronijski vezane i dobio izraz za zaustavnu moć kao sumu zaustavnih moći koje potiču od pojedinačnih elektrona.. Uzimajući osobinu dipolne jačine oscilatora za kvantne harmonijske oscilatore i -te orbite, $f_{m,m_0}^{(i)} = \delta_{m,m_0}$, zaključio je da je orbitalni jonizacioni potencijal, I_i , jednak $I_i = \hbar\omega_{i0}$ [Cabrera-Trujillo, 1999].

U ovom radu pristup je malo drugačiji. Jačine dipolnih oscilatora koje figurišu u izrazu (166a) nisu za oscilatore, već za atome, i sumiranje se vrši preko diskretnog i kontinualanog spektra atoma, a ne preko stanja harmonijskih oacilatora. Na ovaj način mogućnost jonizacije atoma se uzima u obzir za razliku od [Cabrera-Trujillo, 1999].

Na sličan način, zaustavni broj, L_p , postaje

$$L_p^{at} = (z_2 - N_2)^2 \ln\left(\frac{2m_e v^2}{I_1}\right) - \frac{1}{2} N_2 \left[(0.29N_2 + 1.9z_2) + (N_2 - 2z_2) \ln\left(\frac{4m_e^2 \Lambda_2^2 b^2 v^2}{\hbar^2}\right) \right] \quad (186)$$

Parcijalni zaustavni broj, $L_{t,p}$, u relaciji (166a), se računa sumiranjem preko stanja projektila i mete. Za visoke energije projektila svi kvadratni članovi i članovi višeg reda mogu biti zanemareni [Kaneko, 1991], tako da zaustavni broj postaje

$$L_{t,p}^{at} = 0.1 + 0.51 \cdot \ln\left(\frac{2m_e v^2}{I_2}\right) + 0.51 \cdot \ln\left(\frac{2m_e v^2}{I_1}\right) \quad (187)$$

Konačno, izraz za zaustavnu moć prema jednačini (165), postaje [Stevanović and Nikezić, 2007]

$$\begin{aligned}
S = \frac{4\pi e^4}{m_e v^2} N \cdot & \left\{ N_2 (z_1 - N_1)^2 \ln \left(\frac{2m_e v^2}{I_2} \right) - \frac{1}{2} N_1 N_2 \left((0.29N_1 + 1.9z_1) + (N_1 - 2z_1) \ln \left(\frac{4m_e^2 \Lambda_1^2 b^2 v^2}{\hbar^2} \right) \right) + \right. \\
& N_1 (z_2 - N_2)^2 \ln \left(\frac{2m_e v^2}{I_1} \right) - \frac{1}{2} N_1 N_2 \left((0.29N_2 + 1.9z_2) + (N_2 - 2z_2) \ln \left(\frac{4m_e^2 \Lambda_2^2 b^2 v^2}{\hbar^2} \right) \right) + \\
& \left. N_1 N_2 \left(0.1 + 0.51 \cdot \ln \left(\frac{2m_e v^2}{I_2} \right) + 0.51 \cdot \ln \left(\frac{2m_e v^2}{I_1} \right) \right) \right\}
\end{aligned}$$

(188)

Ovaj izraz može biti podeljen na dva dela: prvi koji predstavlja doprinos usled ekscitacije i jonizacije projektila, S_i ,

$$\begin{aligned}
S_i = \frac{4\pi e^4}{m_e v^2} N \cdot N_2 & \left\{ (z_1 - N_1)^2 \ln \left(\frac{2m_e v^2}{I_2} \right) - \frac{1}{2} N_1 \left((0.29N_1 + 1.9z_1) + (N_1 - 2z_1) \ln \left(\frac{4m_e^2 \Lambda_1^2 b^2 v^2}{\hbar^2} \right) \right) + \right. \\
& \left. N_1 \left(0.05 + 0.51 \cdot \ln \left(\frac{2m_e v^2}{I_2} \right) \right) \right\}
\end{aligned}$$

(189)

i drugi, S_p , što predstavlja doprinos usled ekscitacije i jonizacije projektila

$$\begin{aligned}
S_p = \frac{4\pi e^4}{m_e v^2} N \cdot N_1 & \left\{ (z_2 - N_2)^2 \ln \left(\frac{2m_e v^2}{I_1} \right) - \frac{1}{2} N_2 \left((0.29N_2 + 1.9z_2) + (N_2 - 2z_2) \ln \left(\frac{4m_e^2 \Lambda_2^2 b^2 v^2}{\hbar^2} \right) \right) + \right. \\
& \left. N_2 \left(0.05 + 0.51 \cdot \ln \left(\frac{2m_e v^2}{I_1} \right) \right) \right\}
\end{aligned}$$

(190)

VI 4. Broj vezanih elektrona u projektilu kao funkcija od njegove brzine

Broj elektrona vezanih za projektil, N_I , fluktuirá tokom kretanja projektila kroz materiju usled procesa zahvata i gubitka elektrona. Tokom prolaska projektila kroz materiju, uspostavlja se dinamička ravnoteža između procesa zahvata i gubitka elektrona, pa se $N_I=N_I(v)$ tretira kao ravnotežni broj elektrona vezanih za projektil u funkciji od njegove brzine.

Funkcija broja elektrona vezanih za projektil, $N_I(v)$, je preuzeta iz rada [Cabrera-Trujillo, et al., 1997] i u ovom radu date su samo osnovni izrazi koji određuju ovu funkciju.

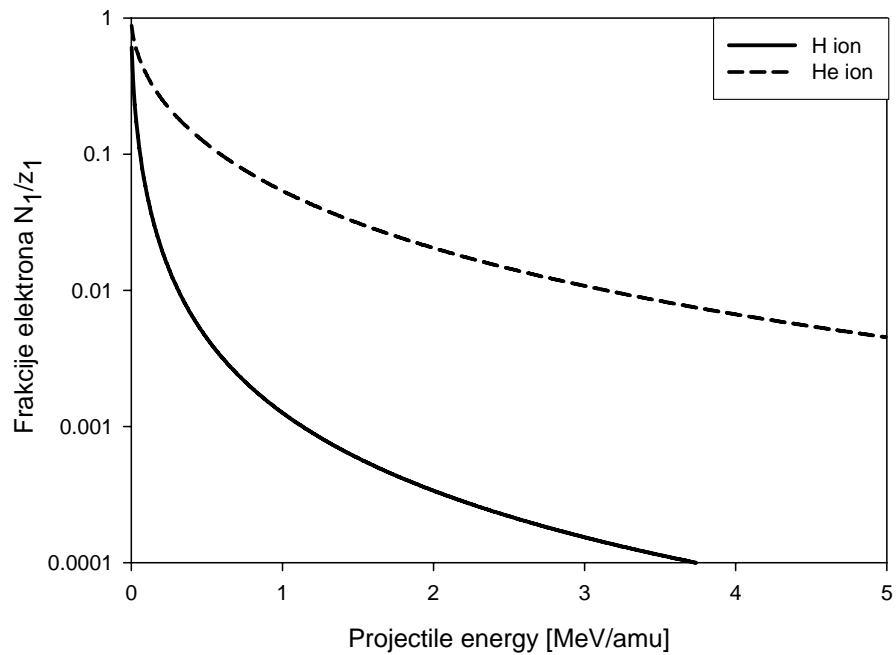
$$N_I(v) = z_1 \left(1 - \frac{b^2 (3 \cdot x_c(v) + b)}{(x_c(v) + b)^3} \right) \quad (191)$$

gde je $b = \left(\frac{8}{\pi} \right)^{2/3}$.

$$x_c(v) = -2 \left(\frac{b}{3} \right) + \frac{1}{\left(\frac{a(v)}{2} + \left(\frac{b}{3} \right)^3 + \sqrt{\left(\frac{a(v)}{2} \right)^2 + a(v) \cdot \left(\frac{b}{3} \right)^3} \right)^{1/3}} \left(\frac{b}{3} \right)^2 + \left(\frac{a(v)}{2} + \left(\frac{b}{3} \right)^3 + \sqrt{\left(\frac{a(v)}{2} \right)^2 + a(v) \cdot \left(\frac{b}{3} \right)^3} \right)^{1/3} \quad (192)$$

pri čemu su $y(v) = \frac{v}{z_1^{2/3} v_0}$; $a(v) = \frac{2b^2}{0.60647(y(v))^2}$; v_0 je Bohrova brzina i iznosi $v_0 = 2.19 \cdot 10^6$ m/s.

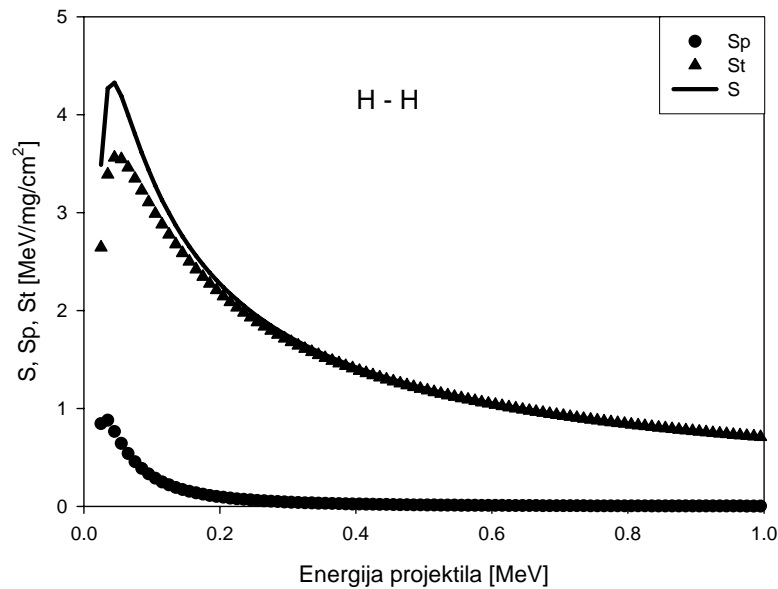
Na Slici (19) je dat grafik frakcije broja vezanih elektrona, N_1/z_1 , u jonima H i He, kao funkcije njihovih kinetičkih energija. To je opadajuća funkcija, što govori da je pri visokim energijama broj elektrona vezanih za projektil veoma mali. Sa smanjenjem energije broj vezanih elektrona teži rednom broju projektila, što oslikava neutralizaciju projektila pri smanjenju njegove brzine tokom kretanja kroz datu sredinu.



Slika 19. Frakcija elektrona vezanih za projektil u zavisnosti od njegove kinetičke energije

VI 5. Rezultati

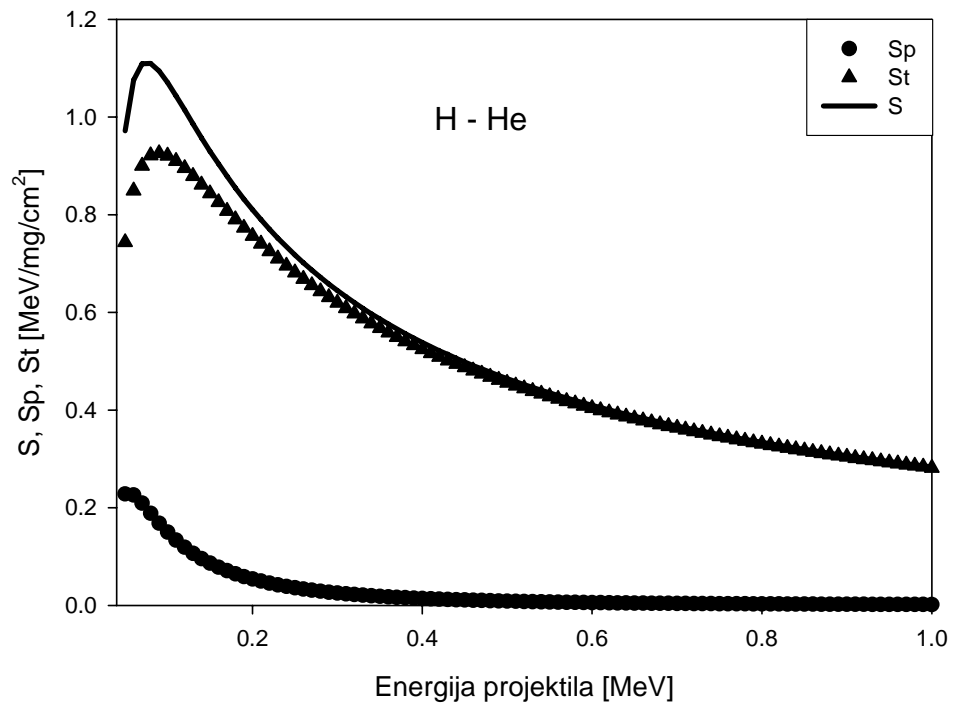
Zaustavna moć data relacijama (188-190) računata je programom *SP_atom.nb*, napisanim u MATHEMATICA (videti *DODATAK III*). Zaustavna moć vodonika za vodonikov jon kao funkcija kinetičke energije projektila data je na Slici (20). Na Slici su posebno prikazani doprinosi zaustavnoj moći usled ekscitacije mete, St, i usled ekscitacije projektila, Sp.



Slika 20. Zaustavna moć vodonika za vodonikov jon u funkciji od energije projektila

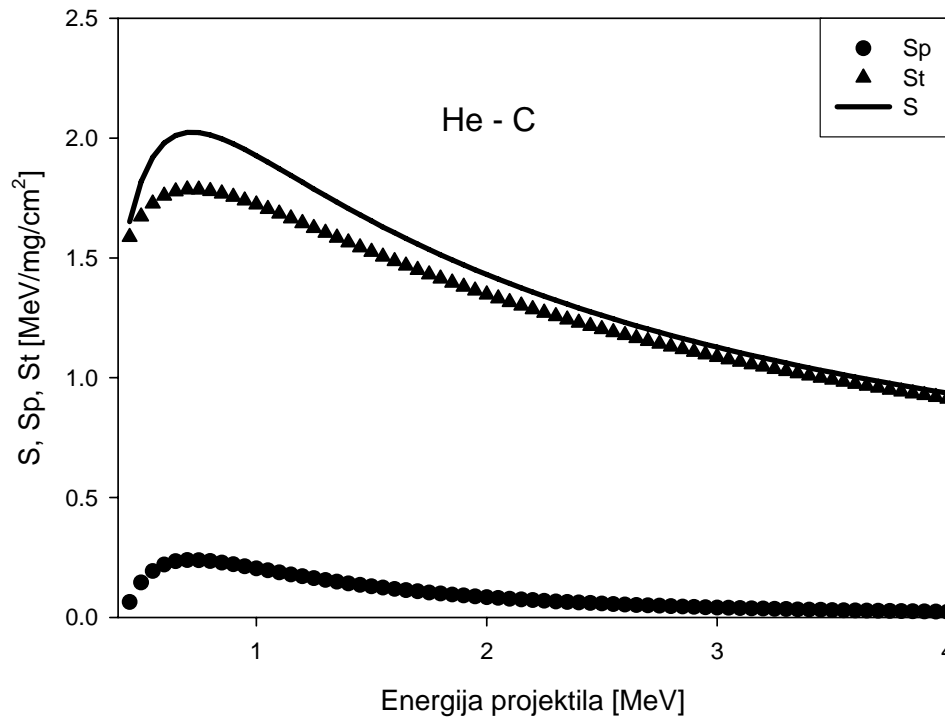
Doprinos zaustavnoj moći usled ekscitacije mete, St, je računat u ovom radu prema relaciji (189) i na Slici (20) prikazan je grafik sa tačkama. Kriva sa trouglicima predstavlja Sp računatu prema relaciji (190). Puna linija predstavlja zbir ovih veličina, odnosno, ukupnu zaustavnu moć. Sa grafika se vidi da najveći doprinos ušted pobuđenja projektila je pri nižim energijama, kada je i frakcija vezanih elektrona najveća. U toj oblasti, doprinos zaustavnoj moći usled pobuđenja i jonizacije projektila, u slučaju vodonik-vodonik, iznosi oko 20%.

Na Slici 21 prikazana je zaustavna moć helijuma kada je projektil vodonik. Najveći doprinos zaustavne moći usled excitacije projektila je u oblasti Bragovog pika i iznosi oko 20%. Za energije projektila veće od 0.4 MeV, taj doprinos nestaje, i ukupna zaustavna moć potiče usled ekcitanije i jonizacije atoma mete.



Slika 21. Zaustavna moć helijuma za vodonikov jon u funkciji od energije projektila

Na Slici 22 prikazana je zaustavna moć ugljenika kada je projektil atom helijuma. Kao i za prethodne kombinacije mete i projektila, pokazuje se da je najveći doprinos zaustavne moći usled excitacije projektila u oblasti Bragovog pika. U ovom slučaju je oko 10%. Pri višim energijama projektila, taj doprinos opada, ali još uvek postoji, sto govori o postojanju vezanih elektrona u projetilu. Razlog što helijumov jon ima frakciju vezanih elektrona i pri višim energijama, za razliku od vodonika, je veći redni broj. Veće naelektrisanje jezgra projektila zadržava elektrone i pri visokim energijama.



Slika 22. Zaustavna moć ugljenika za helijumov jon u funkciji od energije projektila

VII POREĐENJE SA TEORIJSKIM I DOSTUPNIM EKSPERIMENTALNIM PODACIMA

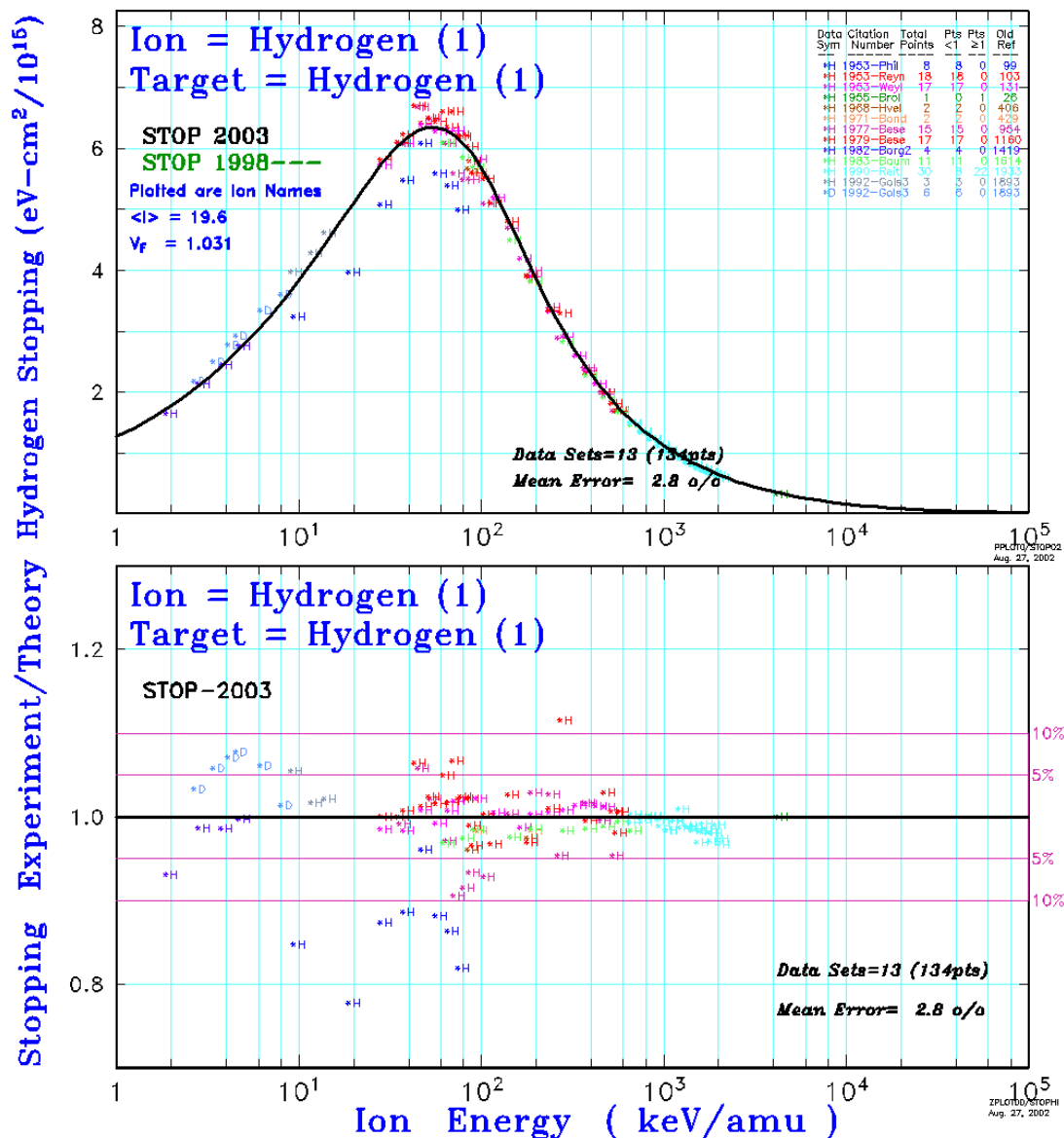
U ovoj Glavi poredene su vrednosti zaustavne moći, koje se dobijaju relacijama (189) i (190), sa teorijskim i dostupnim eksperimentalnim rezultatima. Izraz dobijen u ovom radu poreden je sa Betheovom formulom i sa izrazom izveden u radu [Cabrera-Trujillo et al., 1997].

VII 1. SRIM i eksperimentalni podaci

SRIM - The Stopping and Range of Ions in Matter [SRIM, 2006] je grupa programa kojom se računa zaustavna moć i domet u materiji za jone do 2 GeV/nucl. Ovaj softver je baziran na kvantno - mehaničkom tretmanu sudara jona sa atomima mete. U toku sudara tretirano je da jon i atom interaguju sa Kulonovim potencijalom, uključujući izmene i korelacije interakcije između preklapajućih nivoa elektrona. Naelektrisanje projektila je opisano koristeći koncept efektivnog naelektrisanja, koja uključuje zavisnost od brzine projektila duž putanje. Za niže energije projektila, teorijske vrednosti zaustavne moći korigovane su fitovanjem prema eksperimentalnim podacima kako bi odsupanja bila minimalna.

Na sajtu SRIM-a [SRIM, 2006] su prikazani grafici zaustavne moći pojedinih atoma kada su projektili vodonik (H) i helijum (He). Sa tog sajta preuzeti su grafici zaustavne moći vodonika, helijuma i ugljenika koje su tretirane u ovom radu.

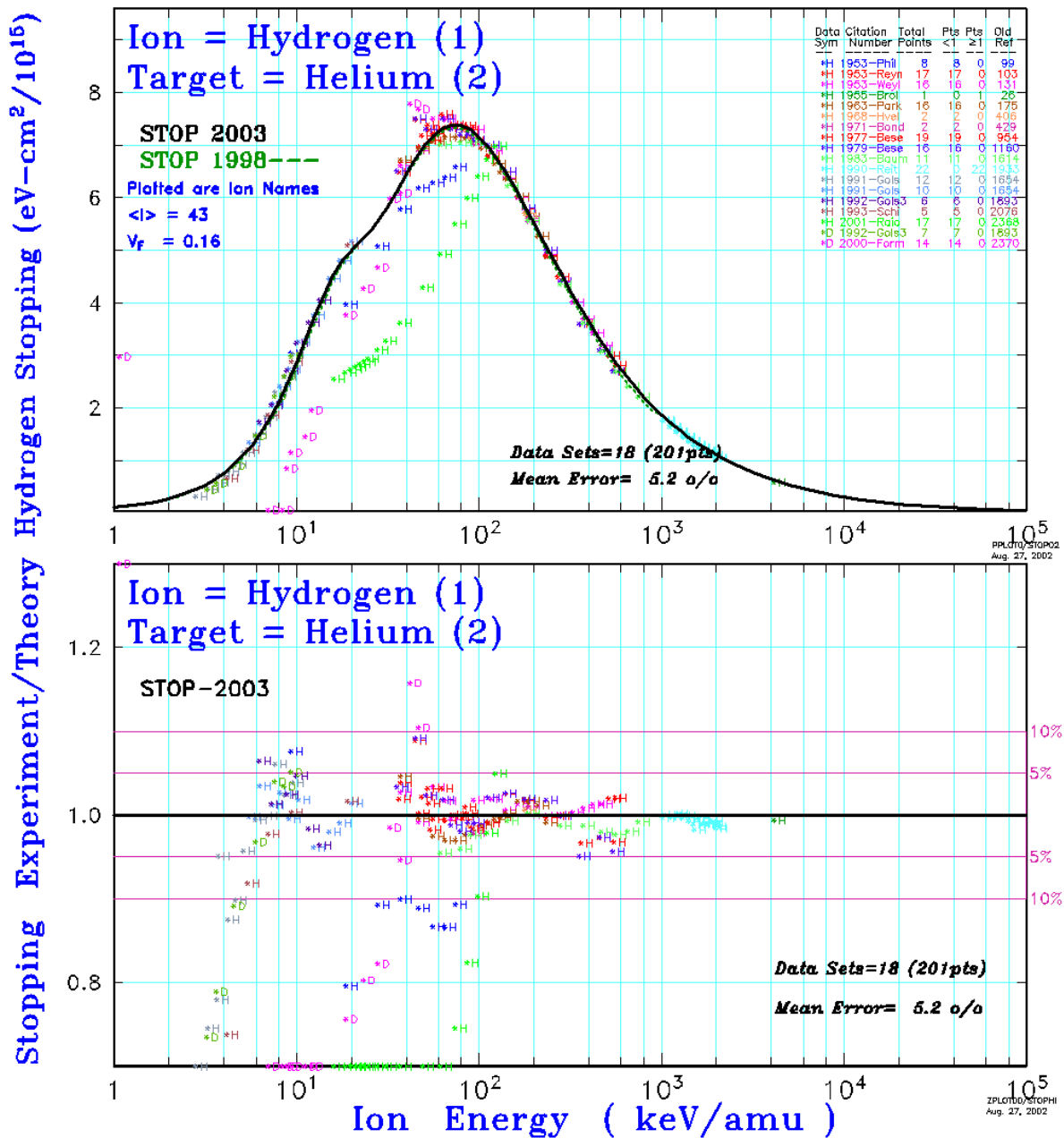
Na Slici 23 prikazan je grafik zaustavne moći vodonika računane SRIM-om i eksperimentalnih podataka kao funkcije energije projektila.



Slika 23. Poređenje zaustavne moći vodonika dobijene SRIM-om sa eksperimentalnim podacima

Prikazano je i procentulano odstupanje vrednosti koje daje SRIM od tih eksperimentalnih podataka u zavisnosti od energije projektila. Greška SRIM-a u domenu energija ispod 100 keV prelazi 5%.

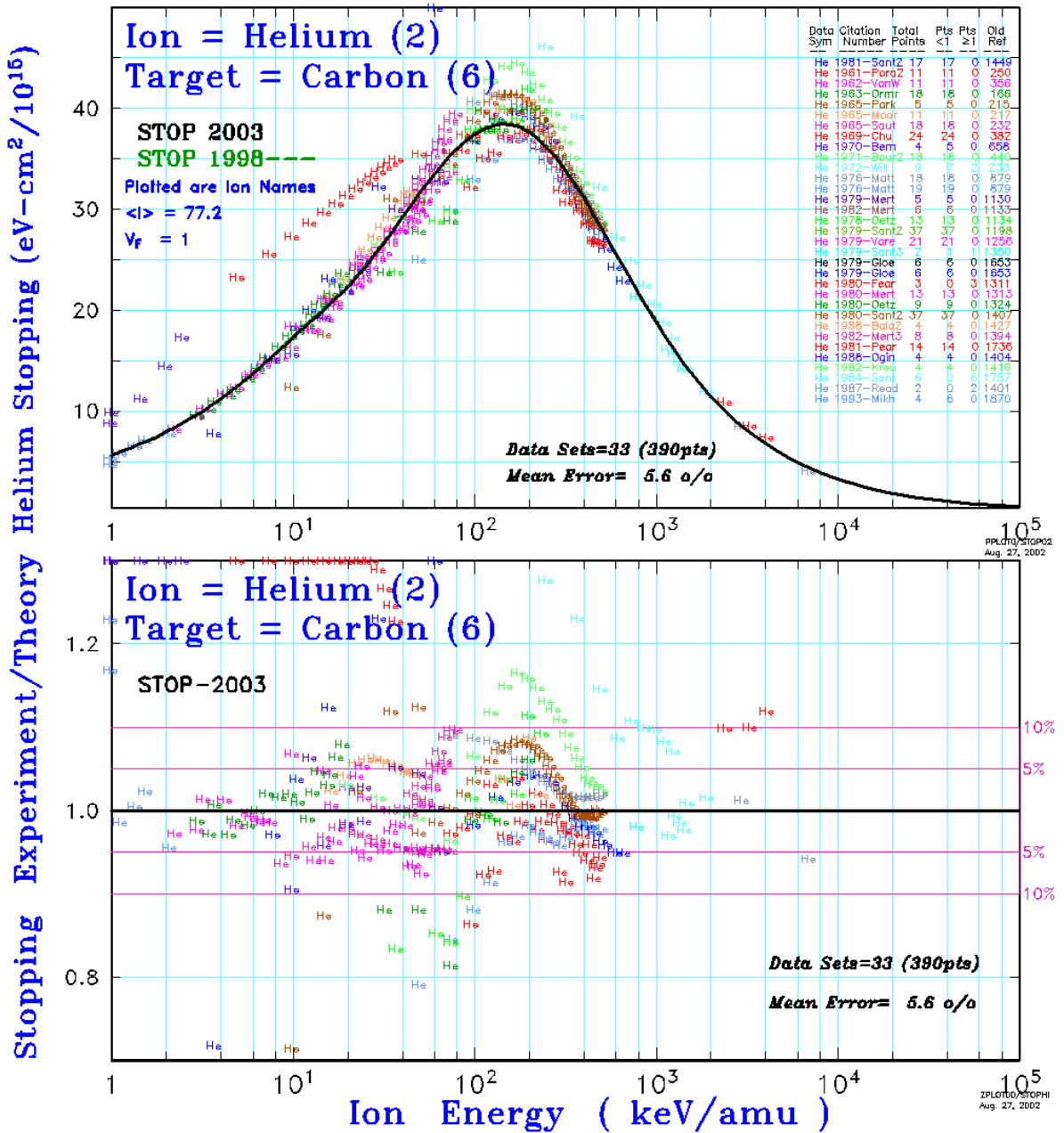
Na Slici 24 prikazana je zaustavna moć helijuma za vodonik u funkciji od njegove energije. Grafik je preuzet iz SRIM-a sa datim eksperimentalnim podacima.



Slika 24. Poređenje zaustavne moći helijuma dobijene SRIM-om sa eksperimentalnim podacima

Pri energijama nižim od 100 keV odstupanje SRIM-a u odnosu na eksperimentalne podatke je i više od 10%.

Radi prikazivanja tačnosti koje daje SRIM u računanju zaustavne moći ugljenika sa jonom helijuma, prikazana je Slika 25. Veoma dobro slaganje SRIM-a sa elspperimentalnim podacima je za energije projektila iznad 1 MeV, dok pri nižim energijama odstupanje je veće od 10%.



Slika 25. Poređenje zaustavne moći ugljenika dobijene SRIM-om sa eksperimentalnim podacima

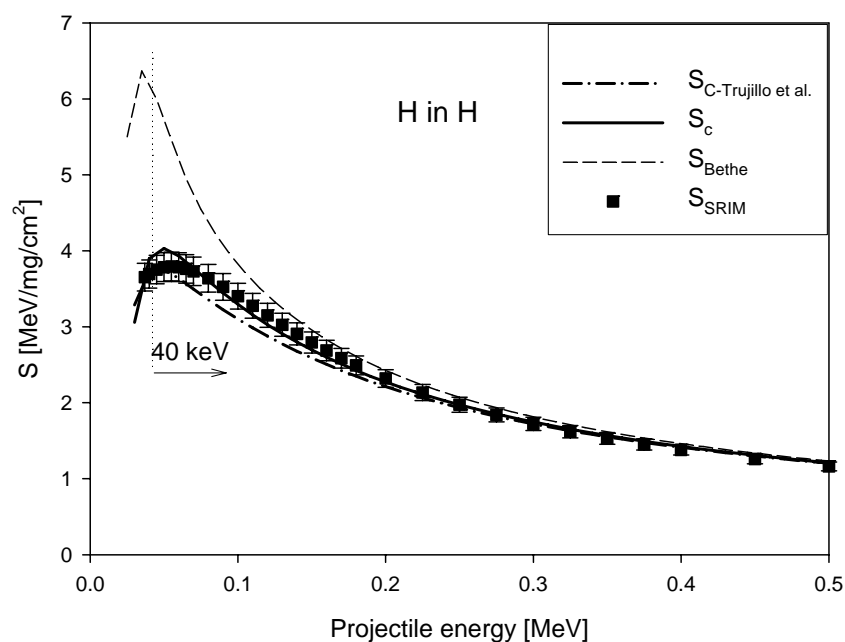
VII 2. Poređenje sa SRIM-om i teorijskim podacima

Da bi račun u ovom radu poredili sa eksperimentalnim podacima zaustavna moć vodonika, helijuma i ugljenika je računata koristeći SRIM [SRIM, 2006] sa greškom od 5-10%.

Ovi podaci poređeni su sa Bethe-ovom formulom [Bethe, 1930]; izrazom koji je dat u radu [Cabrera-Trujillo et al, 1997]; i izrazom (188) ovog rada. Pri tome su uvdene potrebne korekcije: Shell, Barkas-ova i Bloch-ova korekcija [Stevanović and Nikezić, 2007].

Na sledećim graficima (Sl. 26, 27 i 28) dato je poređenje vrednosti za ukupnu zaustavnu moć vodonika, helijuma i ugljenika, ako su projektili vodonik i helijum. Razmatran je domen energije projektila u kome važe pomenute korekcije [Stevanović and Nikezić, 2007].

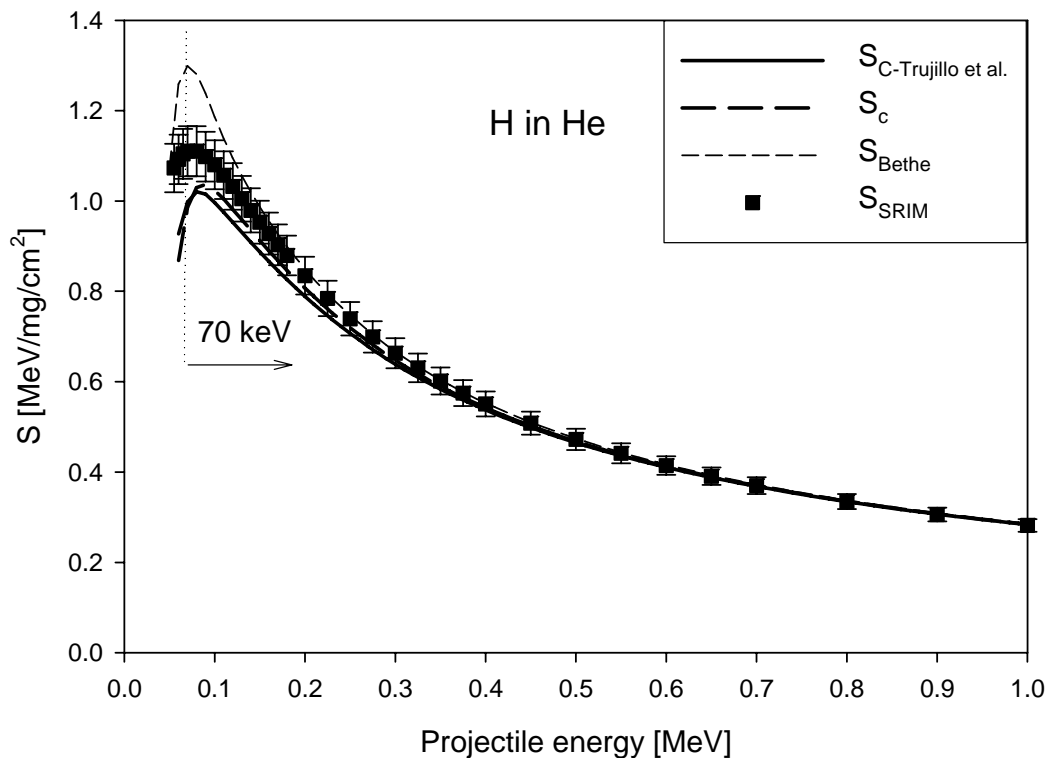
Na Slici 26 predstavljena je zaustavna moć vodonika sa projektilom jona vodonika, kao funkcija od upadne energije. Na grafiku su predstavljeni izrazi datim u ovom radu, S_c ; u radu od [Cabrera-Trujillo-et al,1997]., $S_{C-Trujilo}$ et al; Betheov izraz, S_{Bethe} , korigovani potrebnim korekcijama, kao i vrednosti koje daje SRIM, S_{SRIM} . Pri unošenju podataka od SRIM-a dodata je greska od 5%.



Slika 26. Zaustavna moć vodonika za vodonikov jon u funkciji od energije projektila. Poređenje sa Bethe-om, C-Trujillo et al. i SRIM-om.

Na grafiku se vidi veoma dobro slaganje iznad energije od 0.2 MeV. Ispod te energije, javljaju se mala odstupanja, ali u okviru greške. Betheova formula daje znatno više vrednosti ispod 0.1 MeV. Granica od 40 keV predstavlja granicu važenja formula S_C i $S_{C-Trujillo et al.}$

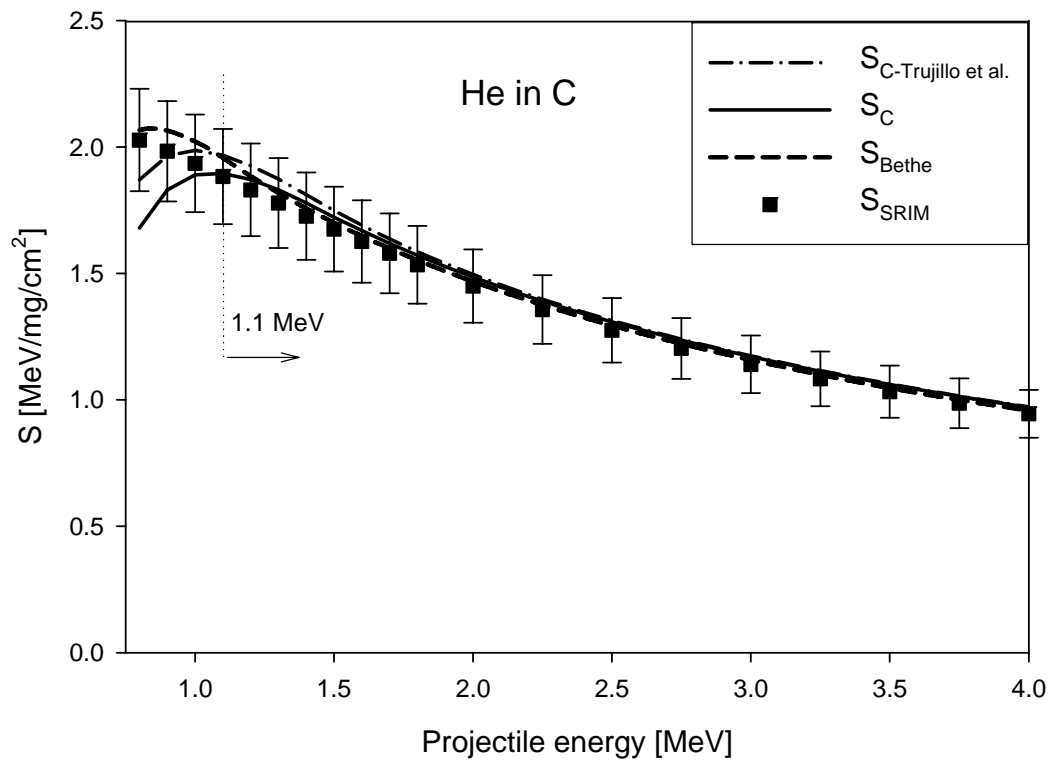
Slika 27 pokazuje zaustavnu moć helijuma kada je projektil vodonik. Oznake su iste kao na prethodnom grafiku. Takođe, se vidi veoma dobro slaganje za energije veće od 0.2 MeV. Pri nižim energijama vrednosti zaustavne moći od S_C i $S_{C-Trujillo et al.}$ su niže u odnosu na SRIM, ali u domenu greške od 5%, dok Betheova formula daje više vrednosti. Donja granica važenja izraza S_C i $S_{C-Trujillo et al.}$ je 70 keV [Stevanović and Nikezić, 2007].



Slika 27. Zaustavna moć ugljenika za vodonikov jon u funkciji od energije projektila.

Poređenje sa Bethe-om, C-Trujillo et al. i SRIM-om.

Na Sici 28 data je zaustavna moć ugljenika za helijumov jon kao funkcija od energije projektila. Donja granica važenja formula S_C i $S_{C-Trujillo et al.}$ je 1.1 MeV . Pri energijama projektila većih od 1.1 MeV, svi izrazi daju vrednosti kao i SRIM su u granicama greške od 10%. Pri energijama većih od 2 MeV vidi se veoma dobro poklapanje i slaganje podataka.



Slika 28. Zaustavna moć ugljenika za helijumov jon u funkciji od energije projektila. Poređenje sa Bethe-om, C-Trujillo et al. i SRIM-om.

VIII ZAKLJUČAK

U ovom radu predstavljen je lakši metod računanja zaustavne moći, modelujući projektil i metu ansamblima kvantnih harmonijskih oscilatora. Olakšavajuća okolnost se zasniva u računanju matričnih elemenata preko stanja kvantnih harmonijskih oscilatora, [Stevanović and Nikezić, 2005; Stevanović and Nikezić, 2007]. Model, koji je prikazan u ovom radu predstavlja proširen model od modela u radu [Sigmund and Haagerup, 1986]. Proširenje se zasniva na modelovanje delimično ogoljenog projektila ansamblom kvantnih harmonijskih oscilatora.

Razmatranjem Kulonove interakcije između projektila i mete koji su predstavljeni kvantno-mehaničkim harmonijskim oscilatorima, izveden je izraz za zaustavnu moć. Modelovanjem projektila oscilatorom omogućava uračunavanje efekta da se njegova kinetička energija pretvori u energiju njegovog ekscitovanja. Dobijeni izraz za zaustavnu moć je funkcija brzine projektila, energije pobuđenja projektila i energije pobuđenja mete.

Prema dobijenom izrazu za zaustavnu moć kvantnog harmonijskog oscilatora ispitan je uticaj energije pobuđenja mete na vrednost zaustavne moći. Sa porastom energije pobuđenja oscilatora mete, zaustavna moć opada. Pri visokim energijama projektila (iznad 2 MeV) uticaj energije pobuđenja oscilatora mete je zanemarljiv. On je dominantan u domenu nižih energija, naročito u oblasti Bragg-ovog pika. Sa porastom energije pobuđenja oscilatora mete, Bragov pik je niži.

U ovom radu je pokazano da energije pobuđenja projektila oscilatora na vrednost zaustavne moći je veliki, naročito u domenu nižih energija. Vrednost zaustavne moći opada sa porastom energije pobuđivanja projektila, naročito u oblasti Bragovog pika. Pored toga, primećuje se blago pomeranje Bragovog pika u desno, ka višim vrednostima kinetičke energije projektila.

U ovom radu je izraz za zaustavnu moć oscilatora primenjen i prilagođen za računanje zaustavne moći date materijalne sredine i za određene projekte, koji u sebi mogu imati vezane elektrone (delimično ogoljene jone). Izraz za zaustavnu moć je izražen preko zbira parcijalnih zaustavnih brojeva, koji zavise od karakteristika projektila i mete. Parcijalni zaustavni brojevi su računati sumiranjem zaustavnih brojeva pojedinačnih oscilatora mete i projektila utežnjavanjem njihovim jačinama dipolnih oscilatora. Sumiranje se vrši preko diskretnog i kontinualnog spektra.

Dobijeni analitički izraz za zaustavnu moć se može podeliti na dva člana: jedan koji predstavlja doprinos zaustavnoj moći usled pobuđenja i jonizacije atoma mete i drugi koji predstavlja doprinos usled pobuđenja i jonizacije projektila.

Pri nižim energijama projektila dolazi do znatne izmene elektrona sa atomima mete. Pri toj razmeni uspostavlja se dinamička ravnoteža, odnosno broj zahvaćenih elektrona jednak je broju oslobođenih elektrona sa projektila. Otuda se broj vezanih elektrona u projektilu može opisati kao funkcija od njegove brzine. Pri visokim brzinama, ovaj broj teži nuli, dok za male energije broj vezanih elektrona teži rednom broju projektila, pa njegovo efektivno naelektrisanje postaje jednako nuli.

Zaustavna moć je računata, konkretno, za vodonik (H), helijum (He) i ugljenik (C), a projektili koji su razmatrani u ovom radu su vodonik i helijum. Pri višim energijama doprinos usled pobuđenja projektila postaje beznačajan, jer i broj vezanih elektrona u projektilu teži nuli. Pri nižim kinetičkim energijama frakcija vezanih elektrona postaje značajna kao i doprinos zaustavnoj moći usled pobuđenja projektila. U zavisnosti od razmatranih projektila i mete, ovaj doprinos je od 10-20%. Slični rezultati su dobijeni i u radu [Cabrera-Trujillo et al, 1997].

Analitički izraz dobijen u ovom radu poređen je SRIM-om [SRIM, 2006]; Bethe-ovom formulom [Bethe, 1930] i izrazom koji je dat u radu [Cabrera-Trujillo et al, 1997]. Pri visokim energijama projektila, dobijeno je veoma dobro slaganje, dok pri nižim energijama postoje mala odstupanja, ali u okviru greške procenjene SRIM-om.

Kao glavni naučni doprinosi ovog rada, mogu se izdvojiti:

1. razmatran je sudar kvantnih naelektrisanih oscilatora;
2. izveden je izraz za zaustavnu moć kvantnog harmonijskog oscilatora u prvoj Bornovoj aproksimaciji, ako je projektil, takođe, kvantni harmonijski oscilator;
3. pokazano je da energija pobuđenja projektila znatno utiče na vrednost zaustavne moći;
4. pokazano je da se maksimalna vrednost izgubljene energije projektila javlja pri višim kinetičkim energijama, ukoliko energija pobuđenja projektila raste;
5. uvedeno je da se zaustavna moć neke materije za dati projektil, računa kao suma zaustavnih moći pojedinačnih oscilatora utežnjenh dipolnim jačinama oscilovanja atoma mete i atoma projektila;
6. pokazano je da doprinos zaustavnoj moći usled pobuđenja i jonizacije projektila iznosi 10-20%.

LITERATURA

Ahlen, S. P. *Theoretical and experimental aspects of energy loss of relativistic heavily ionizing particles*, Rev. Modern. Phy, **52**, 121, 1980.

Andersen, H.H., Bak, J.F., Knudsen, H., Moller-Petersen P. and Nielsen, B.R., *Physics of Ionized Gases.*, Navinsek (ed.), J. Stefan Institute, Ljubljana, 221, 1976.

Ashley, J.C., Ritchie, R.H., Brandt, W., Z_1^3 *Effect in the Stopping Power of Matter for Charged Particles*, Phys. Rev. B **5**, 2393 (1972).

Barkas, W. H., Birnbaum, W. and Smith, F. M., *Mass-Ratio Method Applied to the Measurement of L-Meson Masses and the Energy Balance in Pion Decay*, Phys. Rev. **101**, 778, 1956.

Barkas, W. H., Dyer, N. J. and Heckman, H. H., *Resolution of the Σ^- -Mass Anomaly*, Phys. Rev. Lett. **11**, 26, 1963.

Bates D. R. and Griffing W., Proc. Phys. Soc. London Sect A. **66**, 961, 1953.

Bethe, H., *Zur Theorie des Durchgangs schneller Korpuskularstrahlen durch Materie*, Ann. Physik, **5**, 324, 1930.

Betze, H. D. *Charge state and charge changing cross sections of fast heavy ions penetrating through gaseous and solid media*, Rev. Mod. Phy. **44**, 465, 1972

Bischel H., Amer. Inst. Phys. Handbook. McGraw Hill, New York, 8-142, (1972)

Bischel, H., *Barkas effect and effective charge in the theory of stopping power*, Phy. Rev. A, **41**, 3642, 1990.

Bloch, F., *Zur Bremsung reach bewegter Teilchen beim Durchgang durch de Materie*, Ann., Physik, **16**, 285, 1933.

Bohr, N., *On the theory of the decrease of velocity of moving electrified particles on passing through matter*, Phil. Mag., **10**, 25, 1913.

Bohr, N., *On the decrease of velocity of swiftly moving electrified particles in passing through matter*, Phil. Mag., **30**, 581, 1915.

Bohr, N., *The penetration of atomic particles through matter*, Mat. Fys. Medd. Dan. Vidensk. Selsk. **18**, 1, 1948.

Brandt, W. and Kitagawa, M. *Effective stopping power charges of swift ions in condensed matter*, Phys. Rev. B. **25**, 5631, 1982.

Brunelle, A., Della-Negra, S. Depauw J., Jacquet, D., LeBezec, Z. and Pautrat, M. *MeV cluster interactions with solids: explosion, charge states and secondary emission*, Technical report IPNO-DRE-97-35, Institut de Physique Nucleaire, Orsay, 1997.

Cabrera-Trujillo, R., Cruz, S. A., Oddershede, J. and Sabin, J. R., *Bethe theory of stopping incorporating electronic excitations of partially stripped projectiles*, Phys. Rev. A, **55**, 2864, 1997.

Cabrera-Trujillo, R., *Stopping power in the independent-particle model: Harmonic oscillator results*, Phys. Rev. A , **60**, 3044 (1999).

Fano, U., *Penetration of Protons, Alpha Particles, and Mesons*, Ann. Rev. Nucl. Sci., **13**, 1 1963.

Fermi, E., *The Ionization Loss of Energy in Gases and in Condensed Materials*, Phys. Rev., **57**, 485, 1940

Gaunt, I. A., Proc Camb. Phil Soc 23, 732, 1927

Geissel H, Weick, H., Scheidenberger, C., Bimbot, R. and Gardes, D., *Experimental studies of heavy ion slowing down in matter*, Nucl. Instrum. Meth. B, **195**, 3, 2002.

Glazov, L. G., *Frozen charge stopping of ions in Bethe regime*, Nucl. Meth. B, **195**, 118, 2002.

Henderson, G. H., Philos. Mag., **44**, 680, 1922.

Herbut, F., *Kvantna Mehanika za istraživače*, Prirodno matematički fakultet u Beogradu, Beograd, 1982.

ICRU49, Berger M.J. et al: *Stopping powers and ranges of proton and alpha particles*, ICRU report 49, January 1992.

Ivanović, D. M., *Kvantna Mehanika*, Naučna knjiga, Beograd, 1974.

Jackson, J. D., *Classical Electrodynamics*, 2nd Ed., Wiley, New York, 1975.

Jansen, J. and Mikkelsen, H. H., *Calculations of electronic energy loss of fast molecules in amorphous carbon*, Nucl. Instr. Meth. B **115** 39, 1996.

Kaneko, T., *Stopping power for hydrogenlike and heliumlike particles: Bethe theory* Phys. Rev. A, **43**, 4780, 1991.

Kaneko, T. and Tsuchida, H., *Energy loss of swift metastable projectiles with two bound electrons*, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **27**, 97, 1994

Kim Y. K. and Cheng K., *Stopping power of partially stripped ion*, Phys. Rev A **22**, 61, 1980.

Lassen, N. O., *Total charges of fission fragments as functions of pressure in stopping gas*. Mat Fys. Medd. Dan Vid. Selsk., **26(12)**, 1, 1951 a.

Lassen N. O. *The total charges of fission fragments in gaseous and solid stopping media*. Mat Fys. Medd. Dan Vid. Selsk., **26(5)**, 1, 1951 b.

MATHEMATICA[®], Available on the web page <http://wolfram.com>

Mikkelsen, H., H. and Mortensen, E., *The extended oscillator model of atomic stopping — application to proton stopping in noble gases*, Nucl. Instr. Meth. B **48** 39, 1990.

Mitrinović, D., Uvod u specijalne funkcije, Naučna knjiga, Beograd, 1991.

Moller, C. Ann. Physik, 14,531, 1931

Moneta, M. and Czerbniak, J., *Electronic stopping power of atoms for ions*, Nucl. Instr. Meth. B, **90**, 67, 1994.

Mott, N.F., Proc Camb. Phil Soc 27, 553, 1931

Northcliffe, L. C., *Energy loss and effective charge of heavy ions in aluminum*, Phys. Rev., **120**, 1744, 1960.

Northcliffe L. C., *Passage of heavy ions through matter*, Ann. Rev. Nucl. Sci. **13** 67, 1963.

Rutherford, E. Phil. Mag., **21**, 212, 1911.

Shima, K. Ishihara, T. and Mikumo T., *Empirical formula for the average charge state of heavy ions behind various foils*. Nucl. Instrum. Methods 200, 605, 1982.

Shima, K. , Kuno, N., Yamanouchi, M. and Tawara, H., *Equilibrium charge fractions of ions of $z=4-92$ emerging from carbon foil*. Atom. Data. Nucl. Data Tab. **51**, 173, 1992.

Sigmund, P. and Haagerup, U., *Bethe stopping theory for a harmonic oscillator and Bohr's oscillator model of atomic stopping*, Phys. Rev. A, **34**, 892, 1986.

Sigmund, P. *Stopping of heavy ions*, Springer tracks in modern physics, 2004.

Sternheimer, R. M., *Range Straggling of Charged Particles in Be, C, Al, Cu, Pb, and Air*, Phys. Rev. **117**, 485, 1960.

Sternheimer, R. M., *Density Effect for the Ionization Loss of Charged Particles*, Phys. Rev. **145** 247, 1966.

Stevanović, N., Nikezić, D., *Stopping power. Projectile and target modeled as oscillators*, Phy. Lett. A **340**, 290, 2005.

Stevanović, N., Nikezić, D., *Calculation of stopping power for partially stripped ions using an oscillator model*, Eur. Phys. J. D **42**, 397, 2007.

SRIM 2006: J.F. Ziegler, J.P. Biersack, U.Littmark, "The Stopping and Range of Ion in Matter", Pergamon Press (1985). Računanje je izvršeno sa SRIM2006 (videti <http://www.SRIM.org>).

Thomson, J.J., Phil Mag., **449**, 6-23, 1912.

Tsuchida, H. and Kaneko, T., *Electronic stopping power for swift excited He-like ions with bound electrons in the $1s\ n\ l$ state ($n=2,3$ and $l=0,1$)*, J. Phy. B: At. Mol. Opt. Phys. **30**, 1747, 1997.

Xia, Y., Tan, C., and Lennard, W. N., *Electronic energy loss of heavy ions colliding with atoms obtained from the harmonic oscillator model and from the shell-wise model*, Nucl. Instr. Meth. B **90** 88, 1994.

Yarlagadda, B.S., Robinson, J.E. and Brandt, W., *Effective charge theory and the electronic stopping power of solids*. Phys. Rev. B, **17**, 3473, 1978.

DODATAK I

SP_Oscilator_1.nb

Energije pobudjenja projektila i mete

$$\text{ionp} := 5 * 1.6 * 10^{-19}$$

$$\text{iont} := 15 * 1.6 * 10^{-19}$$

$$z1 := 1$$

$$z2 := 1$$

$$\text{Ma} := 1 * 10^{-3} \quad (* \text{ Ma je u } \frac{\text{kg}}{\text{mol}} \quad *)$$

Funkcije brzine projektila i energije pobudjenja

$$\text{epst}[v_] := \frac{\text{iont}}{2 * 9.1 * 10^{-31} * v^2}$$

$$\text{epsp}[v_] := \frac{\text{ionp}}{2 * 9.1 * 10^{-31} * v^2}$$

$$\text{betat}[v_] := \frac{2 * \text{ionp} + \text{iont}}{2 * \text{ionp}} * \text{epst}[v]$$

$$\text{betap}[v_] := \frac{2 * \text{iont} + \text{ionp}}{2 * \text{iont}} * \text{epsp}[v]$$

$$\text{alfat} = \frac{1}{\text{iont}} + \frac{1}{2 * \text{ionp}}$$

$$\text{alfap} := \frac{1}{\text{ionp}} + \frac{1}{2 * \text{iont}}$$

$$\text{alfa} := \frac{1}{\text{ionp}} + \frac{1}{\text{iont}}$$

$$\text{beta}[n_, m_, v_] := \frac{(n * \text{ionp} + m * \text{iont})^2}{2 * 9.1 * 10^{-31} * v^2} * \text{alfa}$$

$$\text{Prvi}[v_] := \text{NSum}\left[\frac{\text{N}[\text{Gamma}[m - 1, m^2 * \text{epst}[v]]]}{\text{Factorial}[m - 1]}, \{m, 1, 1000\}\right]$$

$$\text{Drugi}[v_] := -\text{NSum}\left[\text{alfat}^{1-m} * \frac{\text{N}[\text{Gamma}[m - 1, m^2 * \text{betat}[v]]]}{(\text{iont})^{m-1} * \text{Factorial}[m - 1]}, \{m, 1, 1000\}\right]$$

$$\text{Treci}[v_] := \text{NSum}\left[\frac{\text{N}[\text{Gamma}[n - 1, n^2 * \text{epsp}[v]]]}{\text{Factorial}[n - 1]}, \{n, 1, 1000\}\right]$$

$$\text{Cetvrti}[v_] := -\text{NSum}\left[\text{alfap}^{1-n} * \frac{\text{N}[\text{Gamma}[n - 1, n^2 * \text{betap}[v]]]}{(\text{ionp})^{n-1} * \text{Factorial}[n - 1]}, \{n, 1, 1000\}\right]$$

$$\text{Sedmi}[v_]:= \text{NSum}\left[\text{NSum}\left[(n * \text{ionp} + m * \text{iont}) * \frac{1}{\text{Factorial}[n] * \text{Factorial}[m]} * \frac{1}{\text{ionp}^n * \text{iont}^m} * \text{alfa}^{1-n-m} * N[\text{Gamma}[n + m - 1, \text{beta}[n, m, v]]], \{m, 1, 1000\}\right], \{n, 1, 1000\}\right]$$

$$\text{Clan}[v_]:= \text{Prvi}[v] + 2 * \text{Drugi}[v] + \text{Treci}[v] + 2 * \text{Cetvrti}[v] + \text{Sedmi}[v]$$

$$\text{konstanta}[\text{Ene_}] = \frac{z1^2 * z2 * (1.6 * 10^{-19})^4 * 6.02 * 10^{23}}{4 * \pi * (8.85 * 10^{-12})^2 * \text{Ma} * \frac{2 * (9.1 * 10^{-31})}{1.67 * 10^{-27}} * 1.602 * 10^{-13}} * \frac{1}{1.602} * \frac{10^{13} * 10^4}{10^6} * \frac{1}{\text{Energy}}$$

$$\text{SP}[\text{Energy_}] := \text{konstanta}[\text{Energy}] * \text{Clan}\left[\sqrt{\frac{2 * \text{Energy} * 1.6 * 10^{-13}}{1.67 * 10^{-27}}}\right]$$

DODATAK II

SP_Oscilator_2.nb

Energije pobudjenja projektila i mete
(* ionp, iont *)

z1 := 1

z2 := 1

Ma := 1 * 10⁻³ (* Ma je u $\frac{\text{kg}}{\text{mol}}$ *)

Funkcije brzine projektila i energije pobudjenja

$$\text{epst}[v_ , iont_] := \frac{\text{iont}}{2 * 9.1 * 10^{-31} * v^2}$$

$$\text{epsp}[v_ , ionp_] := \frac{\text{ionp}}{2 * 9.1 * 10^{-31} * v^2}$$

$$\text{betat}[v_ , ionp_ , iont_] := \frac{2 * \text{ionp} + \text{iont}}{2 * \text{ionp}} * \text{epst}[v, \text{iont}]$$

$$\text{betap}[v_ , ionp_ , iont_] := \frac{2 * \text{iont} + \text{ionp}}{2 * \text{iont}} * \text{epsp}[v, \text{ionp}]$$

$$\text{alfat}[\text{ionp}_ , \text{iont}_] = \frac{1}{\text{iont}} + \frac{1}{2 * \text{ionp}}$$

$$\text{alfap}[\text{ionp}_ , \text{iont}_] := \frac{1}{\text{ionp}} + \frac{1}{2 * \text{iont}}$$

$$\text{alfa}[\text{ionp}_ , \text{iont}_] := \frac{1}{\text{ionp}} + \frac{1}{\text{iont}}$$

$$\text{beta}[n, m, v, \text{ionp}_ , \text{iont}_] := \frac{(n * \text{ionp} + m * \text{iont})^2}{2 * 9.1 * 10^{-31} * v^2} * \text{alfa}[\text{ionp}, \text{iont}]$$

$$\text{Prvi}[v_ , \text{iont}_] := \text{NSum}\left[\frac{\text{N}[\text{Gamma}[m - 1, m^2 * \text{epst}[v, \text{iont}]]]}{\text{Factorial}[m - 1]}, \{m, 1, 1000\}\right]$$

$$\text{Drugi}[v_ , \text{ionp}_ , \text{iont}_] := -\text{NSum}\left[\frac{(\text{alfat}[\text{ionp}, \text{iont}])^{1-m} * \text{N}[\text{Gamma}[m - 1, m^2 * \text{betat}[v, \text{ionp}, \text{iont}]]]}{(\text{iont})^{m-1} * \text{Factorial}[m - 1]}, \{m, 1, 1000\}\right]$$

$$\text{Treci}[v_ , \text{ionp}_] := \text{NSum}\left[\frac{\text{N}[\text{Gamma}[n - 1, n^2 * \text{epsp}[v, \text{ionp}]]]}{\text{Factorial}[n - 1]}, \{n, 1, 1000\}\right]$$

$$\text{Cetvrti}[v_ , \text{ionp}_ , \text{iont}_] := -\text{NSum}\left[\frac{(\text{alfap}[\text{ionp}, \text{iont}])^{1-n} * \text{N}[\text{Gamma}[n - 1, n^2 * \text{betap}[v, \text{ionp}, \text{iont}]]]}{\text{ionp}^{n-1} * \text{Factorial}[n - 1]}, \{n, 1, 1000\}\right]$$

$$\text{Sedmi}[v_ , \text{ionp}_ , \text{iont}_] := \text{NSum}[\text{NSum}[(n * \text{ionp} + m * \text{iont}) * \frac{1}{\text{Factorial}[n] * \text{Factorial}[m]} * \frac{1}{\text{ionp}^n * \text{iont}^m} * (\text{alfa}[\text{ionp}, \text{iont}])^{1-n-m} * \text{N}[\text{Gamma}[n + m - 1, \text{beta}[n, m, v, \text{ionp}, \text{iont}]]], \{m, 1, 1000\}], \{n, 1, 1000\}]$$

$$\text{Clan}[v_ , \text{ionp}_ , \text{iont}_] := \text{Prvi}[v, \text{iont}] + 2 * \text{Drugi}[v, \text{ionp}, \text{iont}] + \text{Treci}[v, \text{ionp}] + 2 * \text{Cetvrti}[v, \text{ionp}, \text{iont}] + \text{Sedmi}[v, \text{ionp}, \text{iont}]$$

$$\text{konstanta}[\text{Energy}_] = \frac{z1^2 * z2 * (1.6 * 10^{-19})^4 * 6.02 * 10^{23}}{4 * \pi * (8.85 * 10^{-12})^2 * \text{Ma} * \frac{2 * (9.1 * 10^{-31})}{1.67 * 10^{-27}} * 1.602 * 10^{-13}} * \frac{1}{1.602} * 10^{13} * 10^4 * \frac{1}{\text{Energy}}$$

$$\text{SP}[\text{Energy}_ , \text{ionp}_ , \text{iont}_] := \text{konstanta}[\text{Energy}] * \text{Clan}\left[\sqrt{\frac{2 * \text{Energy} * 1.6 * 10^{-13}}{1.67 * 10^{-27}}}, \text{ionp}, \text{iont}\right]$$

DODATAK III

SP_Atom.nb

```

ele := 1.602 * 10-19
h :=  $\frac{6.625}{2 * \pi} * 10^{-34}$ 
me := 9.11 * 10-31
ab :=  $4 * \pi * 8.85 * 10^{-12} * \frac{h^2}{me * ele^2}$ 
alfa := 1 / ab
ioniz := 15 * 1.6 * 10-19

ATENE := 27.31 * 1.602 * 10-19
ATDUZ := 0.529 * 10-10
ioniz1 := 15 * 1.6 * 10-19
ioniz2 := 15 * 1.6 * 10-19

masapro := 1 * 1.66 * 10-27
z1 := 1; z2 := 1; Ma := 1 * 10-3 (* Ma je u  $\frac{kg}{mol}$  *)

(* konstanta[Ene_] =  $\frac{(ele)^4}{8 * \pi * (8.85 * 10^{-12})^2 * (me) * \frac{2 * Ene * 1.6 * 10^{-13}}{masapro} * \frac{6.025 * 10^{23}}{Ma} * 0.6 * 10^{11}}$  *)

konstanta[Ene_] =  $\frac{z1^2 * z2 * (ele)^4 * 6.02 * 10^{23}}{4 * \pi * (8.85 * 10^{-12})^2 * Ma * \frac{2 * (me)}{masapro} * 1.602 * 10^{-13}} * \frac{\frac{1}{1.602} * 10^{13} * 10^4}{10^6} * \frac{1}{Ene}$ 

 $\frac{0.143016}{Ene}$ 

SP1[Ene_] := konstanta[Ene] * Log[ $\frac{2 * me * \frac{2 * Ene}{masapro} * 1.602 * 10^{-13}}{ioniz2}$ ]

v0 = 2.19 * 106; (* Bohr velocity m/s *)

b =  $\left(\frac{8}{\pi}\right)^{2/3}$ ;

Y[v_] =  $\frac{v}{z1^{2/3} * v0}$ ;
a[v_] =  $\frac{2 * b^2}{0.60647 * (Y[v])^2}$ ;

```

$$xc[v_] = -2 * \left(\frac{b}{3}\right) + \frac{1}{\left(a[v]/2 + (b/3)^3 + \sqrt{(a[v]/2)^2 + a[v] * (b/3)^3}\right)^{1/3}} * \left(\frac{b}{3}\right)^2 + \left(a[v]/2 + (b/3)^3 + \sqrt{(a[v]/2)^2 + a[v] * (b/3)^3}\right)^{1/3};$$

$$N1[v_] = z1 * \left(1 - \frac{b^2 * (3 * xc[v] + b)}{(xc[v] + b)^3}\right);$$

$$N2[v_] = z2 ;$$

$$a0 = 0.529 * 10^{-10}; (* Bohrov radius *)$$

$$LAMBDA1[v_] = \frac{0.969376 * a0}{z1^{1/3} * b * \left(1 - \frac{1}{7} * \frac{N1[v]}{z1}\right)} * \left(\frac{N1[v]}{z1}\right)^{2/3};$$

$$LAMBDA2[v_] = \frac{0.969376 * a0}{z2^{1/3} * b * \left(1 - \frac{1}{7} * \frac{N2[v]}{z2}\right)} * \left(\frac{N2[v]}{z2}\right)^{2/3};$$

$$A1[v_] := \frac{2 * me}{h^2} * LAMBDA1[v]^2 * b^2$$

$$A2[v_] := \frac{2 * me}{h^2} * LAMBDA2[v]^2 * b^2$$

(***** BLOCH CORR *****)

$$LBloch[Ene_] = - \left(\frac{z1 * v0}{\sqrt{\frac{2 * Ene * 1.6 * 10^{-13}}{masapro}}} \right)^2 * \sum_{n=1}^{100} \frac{1}{n * \left(n^2 + \left(\frac{z1 * v0}{\sqrt{\frac{2 * Ene * 1.6 * 10^{-13}}{masapro}}} \right)^2 \right)};$$

(***** SHELL CORR *****)

$$Shell[Ene_] := \frac{z2^{1.4} * v0^2}{2 * \frac{2 * Ene * 1.6 * 10^{-13}}{masapro}}$$

(***** BARKAS CORR *****)

Podaci={{0.02,23},{0.03,20},{0.06,17},{0.1,15},{0.2,9},{0.3,7},
{0.4,6},{0.5,4.8},{0.7,3},{1,1.8},{1.2,1.5},{1.5,1},{2,0.4},{2.3,0.3}};

F2=Interpolation[Podaci]

InterpolatingFunction[{{0.02,2.3}},<>]

F1[x_] := 10^{-3.25*Log[10,x]+0.65}

F[x_]=If[x>2.3,F1[x],F2[x]]

If[x>2.3,F1[x],F2[x]]

$$X[\text{Ene}_] = \frac{\left(137 * \sqrt{\frac{2 * \text{Ene} * 1.6 * 10^{-13}}{\text{masapro}}}\right)^2}{9 * 10^{16} * z2}; \quad (* \quad X[v_] = \frac{(137 * v)^2}{9 * 10^{16} * z2} \quad *)$$

bbb=1.8;

$$\text{Barkas}[\text{Ene}_] = \frac{1.41 * z1}{z2^{0.5}} * \frac{F\left[\frac{\text{bbb}}{(X[\text{Ene}_])^{0.5}}\right]}{(X[\text{Ene}_])^{1.5}};$$

$$\text{SP11}[\text{Ene}_] := \text{konstanta}[\text{Ene}] * \left(\text{Log}\left[\frac{2 * \text{me} * \frac{2 * \text{Ene}}{\text{masapro}} * 1.602 * 10^{-13}}{\text{ioniz2}}\right] - \text{Shell}[\text{Ene}] + \right. \\ \left. z1 * \text{Barkas}[\text{Ene}] + \text{LBloch}[\text{Ene}] \right)$$

$$\text{LT1}[v_] := \text{N2}[v] * z1^2 * \left(\text{Log}\left[\frac{2 * \text{me} * v^2}{\text{ioniz2}}\right] \right);$$

$$\text{LT2}[v_] := \text{N2}[v] * \left(\frac{1}{2} * \text{N1}[v] * (2 * z1 - \text{N1}[v]) * \left(\text{Log}[\text{A1}[v] * 2 * \text{me} * v^2] - 2 * \text{Log}\left[\frac{2 * \text{me} * v^2}{\text{ioniz2}}\right] \right) \right) - \\ \text{N2}[v] * \frac{1}{2} * \text{N1}[v] * (0.3 * \text{N1}[v] + 1.9 * z1);$$

$$\text{LP1}[v_] := \text{N1}[v] * z2^2 * \left(\text{Log}\left[\frac{2 * \text{me} * v^2}{\text{ioniz1}}\right] \right);$$

$$\text{LP2}[v_] := \text{N1}[v] * \left(\frac{1}{2} * \text{N2}[v] * (2 * z2 - \text{N2}[v]) * \left(\text{Log}[\text{A2}[v] * 2 * \text{me} * v^2] - 2 * \text{Log}\left[\frac{2 * \text{me} * v^2}{\text{ioniz1}}\right] \right) \right) - \\ \text{N1}[v] * \frac{1}{2} * \text{N2}[v] * (0.3 * \text{N2}[v] + 1.9 * z2);$$

$$\text{LPT}[v_] := \text{N1}[v] * \text{N2}[v] * \left(0.1 + 0.51 * \text{Log}\left[\frac{2 * \text{me} * v^2}{\text{ioniz2}}\right] + 0.51 * \text{Log}\left[\frac{2 * \text{me} * v^2}{\text{ioniz1}}\right] \right);$$

$$\begin{aligned}
SP[Ene_] := & \frac{konstanta[Ene]}{z1^2 * z2} * \left(LT1 \left[\sqrt{\frac{2 * Ene * 1.6 * 10^{-13}}{masapro}} \right] + LT2 \left[\sqrt{\frac{2 * Ene * 1.6 * 10^{-13}}{masapro}} \right] + \right. \\
& LP1 \left[\sqrt{\frac{2 * Ene * 1.6 * 10^{-13}}{masapro}} \right] + LP2 \left[\sqrt{\frac{2 * Ene * 1.6 * 10^{-13}}{masapro}} \right] + LPT \left[\sqrt{\frac{2 * Ene * 1.6 * 10^{-13}}{masapro}} \right] - \\
& N2 \left[\sqrt{\frac{2 * Ene * 1.6 * 10^{-13}}{masapro}} \right] * \left(z1 - N1 \left[\sqrt{\frac{2 * Ene * 1.6 * 10^{-13}}{masapro}} \right] \right)^2 * Shell[Ene] + \\
& \left(z1 - N1 \left[\sqrt{\frac{2 * Ene * 1.6 * 10^{-13}}{masapro}} \right] \right)^3 * N2 \left[\sqrt{\frac{2 * Ene * 1.6 * 10^{-13}}{masapro}} \right] * Barkas[Ene] + \\
& \left. \left(z1 - N1 \left[\sqrt{\frac{2 * Ene * 1.6 * 10^{-13}}{masapro}} \right] \right)^2 * N2 \left[\sqrt{\frac{2 * Ene * 1.6 * 10^{-13}}{masapro}} \right] * LBloch[Ene] \right)
\end{aligned}$$