التصادمات في البلازما

1.2- مقدمة

البلازما هي وسط معقد جداً يحتوي عدداً كبيراً من الجسيمات المختلفة في طبيعتها. هذه الجسيمات عبارة عن أنواع كيميائية متعددة توجد عادة بأشكال مختلفة (ذرات، جزيئات، أيونات). تتحرك الإلكترونات المتحررة من الذرات والجزيئات أثناء تأينها ضمن هذا المزيج لضمان الاعتدال الكهربائي للوسط.

وبسبب التهيج الحراري لكلٍ من المكونات المذكورة أعلاه، تحصل تصادمات عديدة داخل البلازما، تسمح بتبادل الاندفاع والطاقة. هذه الظواهر ذات أهمية كبيرة في البلازما لأنها تسمح بالوصول إلى حالة التوازن (سنعود إلى هذه المسألة في الفصل الثالث).

بغية وصف آلية التصادمات بشكل بسيط جداً سوف ندخل مقياسي ملاحظة الوسط:

- المقياس الميكروسكوبي، حيث إن الجسيمات ممثلة بنقاط مادية متحركة (النظرية الحركية)؛ وتدرس حركتها في جملة إحداثيات المخبر.
- المقياس تحت الميكروسكوبي، حيث إنّ البنية الداخلية لهذه الجسيمات تُؤخذ بالحسبان؛ وتدرس حركة مكوناتها العنصرية (النوى والإلكترونات المرتبطة بها) وذلك في جملة إحداثيات مرتبطة بمركز كتلتها.

تسمح هذه النظرة للبلازما بتعريف درجات حرية داخلية (تحت ميكروسكوبية) وخارجية (ميكروسكوبية) لكل جسيم فيها. تتعلق درجات الحرية الداخلية بعدد الإلكترونات المرتبطة وبالنوى الموجودة في الوسط. ويتعلق موضع واندفاع مركز كتلة الجسيم بمجموعة المتغيرات الداخلية. وتحسب مستويات الطاقة باستخدام الميكانيك الكوانتي. إذا كان الجسيم يملك نواة

واحدة (ذرة أو نواة) فإن مستويات الطاقة E_i^e تتعلق بتوزع الإلكترونات المرتبطة في الفضاء. إذا كان للجسيم (جزيئة أو جزيئة متأينة) أكثر من نواة فإنَّ هناك مستويات طاقة إضافية تنشأ بسبب حركة النُوى. سنرمز لهذه المستويات بـ E_i^v (الاهتزازات المتعلقة بالمسافة بين النوى) و E_i^r (دوران الجزيئة في الفراغ).

وبشكل عام تكتب الطاقة الداخلية E_i بالشكل التالي:

$$E_i = E_i^e + E_i^v + E_i^r \qquad (2.1)$$

فالموضع والاندفاع لمركز كتلة الجسيم هما المتغيران الخارجيان اللذان يسمحان بوصف حركته في جملة الإحداثيات المرتبطة بالمخبر.

انطلاقاً من التحليل السابق، نرى أن التصادمات في البلازما تثير تغيرات في درجات الحرية الداخلية والخارجية. حين تكون الطاقة الداخلية ثابتة فالتصادمات تكون مرنة (elastic) وفي الحالة المعاكسة تكون غير مرنة (inelastic).

سوف نفرض، بغية تبسيط هذه الدراسة، بأن البلازما ذات ضغط منخفض، وهي ممددة بما يكفي، كي تكون التصادمات بين جسيمين هي السائدة، ولكي تكون مدة التصادم أقصر بكثير من الزمن بين تصادمين متتاليين. تسمح هذه الفرضيات باعتبار الصدم كمسألة جسيمين (معزولين عن باقي الجملة)، وسوف تعالج الديناميكية الميكروسكوبية بشكل منفصل عن المسألة الإحصائية [24,23].

ليكن $P(i)$ و $Q(j)$ جسيمين قبل الصدم، و $P(k)$ و $Q(l)$ جسيمين بعد الصدم، و l,k,j,i هي حالاتهما الداخلية (الإثارات الإلكترونية، والاهتزازية، والدورانية)، و $\Delta E_{ij,kl}$ هو تغير الطاقة الداخلية الكلي أثناء عملية الصدم؛ يمكن أن نميز ثلاثة أنواع من التصادمات، الممثلة بالترتيب بحسب درجة التعقيد المتزايدة لها:

- التصادمات المرنة التي لا تغير حالات الطاقة الداخلية:

$$P(i)+Q(j) \rightarrow P(i)+Q(j)+\Delta E_{ij,kl} \qquad (2.2)$$

وأنَّ: $\Delta E_{ij,ij} = 0$

- التصادمات غير المرنة، التي تغير حالات الطاقة الداخلية للجسيمات:

$$P(i)+Q(j) \rightarrow P(i)+Q(j)+\Delta E_{ij,kl} \qquad (2.3)$$

بشكل عام، من أجل أي تصادم، يكون:

$$\Delta E_{ij,kl} \neq 0$$

ولكن حين يكون التصادم تجاوبياً (أي حين يكون تبادل الطاقة تاماً بين الحالات j,i و l,k) يكون:

$$\Delta E_{ij,kl} = 0$$

وحين يكون الصدم تجاوبياً تقريباً يكون:

$$\Delta E_{ij,kl} \simeq 0$$

- التصادمات التفاعلية التي تعطي النواتج $X(k)$ و $Y(l)$ المختلفة عن الجسيمات البدائية:

$$P(i) + Q(j) \rightarrow X(k) + Y(l) + \Delta E_{ij,kl} \qquad (2.4)$$

وأن:

$$\Delta E_{ij,kl} \neq 0$$

وهذا النوع من التصادم هو من النوع غير المرن.

سندرس، بشكل عام، التصادمات باعتبار أن الجسيمين معزولان عن باقي الجملة. التصادمات المرنة، الأسهل دراسة، لا تغير الحالة الداخلية للجسيمات. وبالتالي فالجسيمات تعتبر في هذه الحالة نقطية و متوضعة في مراكز كتلها C_1 و C_2 (الشكل 2.1). يتم الفعل المتبادل بينها بوساطة قوى (كولون، فان درفالس...) ويتعلق بطبيعة هذه الجسيمات (مشحونة، معتدلة، ...).

وبالتالي يمكن تحليل حركتها إلى حركتين اثنتين هما [11]: حركة مركز كتلتها المشترك C (بالنسبة لجملة إحداثيات المخبر) وحركة أخرى نسبية.

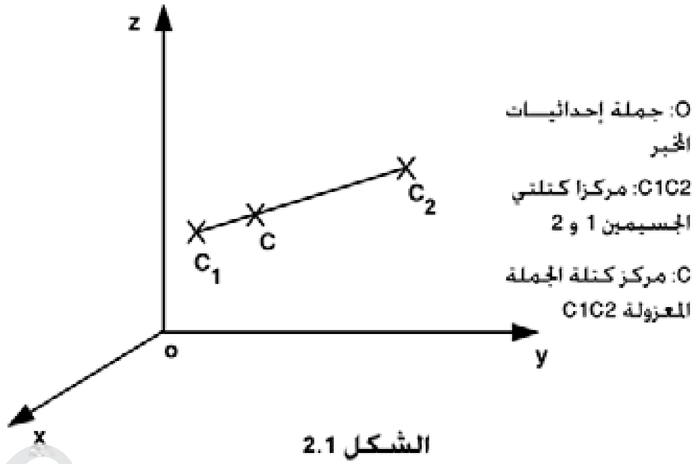
إن الطريقة المختارة لحل هذه المسألة (الطريقة الكلاسيكية (التقليدية) أو الكوانتية (الكمومية)) تتعلق بالشروط الفيزيائية. ويصح التقريب الكلاسيكي إذا كانت العلاقة (1.24) محققة أي:

$$\lambda_B << d$$

حيث λ_B هو طول موجة دي بروي و d هي المسافة المتوسطة بين جسيمين.

تتغير المسافة بين جسيمين أثناء عملية الصدم، وبالتالي نعرّف طولاً مميزاً δ، يقدر بعدة أنغسترومات [23] وبفرض أنّ:

$$\lambda_B << \delta \qquad (2.5)$$



الشـكـل 2.1

في الحالة العملية، δ هو من مرتبة المسافة التي تكون فيها الطاقة الكامنة للتفاعل (interaction) U(r) بين الجسيمين ذات تغير طفيف.

عند كتابة الاندفاع p كتابع للطاقة الحركية K، فإن طول موجة دي بروي (1.19) يكتب بالشكل:

$$\lambda_B = \frac{h}{(2\mu K)^{1/2}} \qquad (2.6)$$

حيث μ هي الكتلة المختزلة [11].

عند أخذ العلاقة (2.6) بالحسبان، تصبح المتراجحة (2.5) على النحو:

$$\frac{h}{(2\mu K)^{1/2}} \ll \delta \qquad (2.7)$$

وتكون المتراجحة (2.7) محققة عندما تكون الطاقة الحركية والكتلة المختزلة كبيرتين. عندما تكون هذه الشروط محققة يدرس الصدم بالطريقة الكلاسيكية بدراسة مساري الجسيمين المتفاعلين C_1 ، C_2. تحل المسألة بكتابة قوانين الانحفاظ للجملة المعزولة (الفقرة 2.2).

حين لا تكون المتراجحة (2.7) محققة، فالمسألة تحل بالطريقة الكوانتية [31-25] وتستبدل الجسيمات بحزمة موجبة (Wave packet) (الفقرة 2.3)، ولا يمكن تعيين المسار في هذه الحالة بسبب ارتياب هايزنبرغ [27-25,10]. يبرهن في هذه الحالة أن الصدم بين جسيمين مكافئ لانتشار حزمة موجية ناتجة عن حالة كمون.

في حالة التصادمات غير المرنة، لا يمكن دراسة تبادلات الطاقة بين درجات الحرية الداخلية والخارجية بشكل كلاسيكي (مستويات الطاقة الداخلية تكون مكممة). نستخدم إذاً نظرية هجينة (hybrid) تميز بين المتحولات الداخلية الكوانتية والمتحولات الخارجية الكلاسيكية: تدعى هذه النظرية بالنظرية شبه الكلاسيكية وتدعى أيضاً بتقريب الطريقة الكلاسيكية، تسمح المتحولات الخارجية بحساب المسار الكلاسيكي للجسيم في حين أن المتحولات الداخلية تكون ممثلة بتوابع موجية [24,23]. على الرغم من أن هذا التقريب يسهل الدراسة إلاّ أنّ الآلية الميكروسكوبية تبقى على درجة عالية من التعقيد. حين يكون الجسيمان $P(i)$ و $Q(j)$ (ذرتان أو جزيئتان) متباعدين الأول عن الثاني (قبل وبعد التصادم) يمكن أن نقبل أنه لا يحصل أي تفاعل بينهما. حين يبدأ تقارب الجسيمين، وذلك من أجل مسافات من مرتبة بضعة أنغسترومات، تبدأ الطبقات الإلكترونية الخارجية للجسيم $P(i)$ بالتأثر بنوى $Q(j)$ والعكس بالعكس. يتم أثناء الصدم تشكل تجمع شبه جزيئي (quasi-molecular)؛ إذا كان زمن الصدم τ_c كبيراً بالنسبة لعمر الحالات شبه الجزيئية، فإنه يحصل تبادل بالطاقة بين درجات الحرية الداخلية. وذلك يحصل في الحالة العملية من أجل أزمنة تصادم:

$$\tau_c > \text{بضع } 10^{-12} \text{ إلى } 10^{-11}\ s \tag{2.8}$$

وفي هذه الحالة يكون لدينا تصادم مركب (تغير مركب) يعبر عنه بـ:

$$P + Q \rightarrow [PQ] \rightarrow X + Y \tag{2.9}$$

يزداد احتمال هذا النوع من الآليات كلما كانت الجمل ذات عدد كبير من درجات الحرية.

2-2- النظرية التقليدية

2-2-1- وصف التصادم

ليكن التصادم مرناً بين جسيمين نقطيين معزولين M_1 و M_2 وفقاً لما هو مبين في الشكل 2.2.

نسمي O مبدأ الإحداثيات المرتبطة بالمخبر و C مبدأ الإحداثيات المرتبطة بمركز الكتلة [11] وبفرض أن:

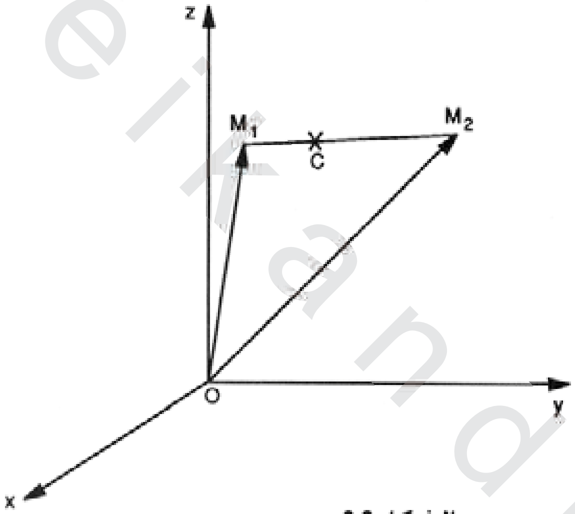
$$\vec{R} = \frac{m_1 \vec{r}_1 + m_2 \vec{r}_2}{m_1 + m_2} \tag{2.10}$$

$$\vec{r} = \vec{r}_2 - \vec{r}_1 \tag{2.11}$$

حيث إنّ $\vec{R}$ هو شعاع مركز الكتلة و $\vec{r}$ المسافة النسبية بين الجسيمين.

$$\vec{r}_1 = \vec{R} - \frac{m_2}{m_1 + m_2}\vec{r} \tag{2.12}$$

$$\vec{r}_2 = \vec{R} + \frac{m_1}{m_1 + m_2}\vec{r} \tag{2.13}$$



$\vec{r}_1 = \overrightarrow{OM_1}$
$\vec{r}_2 = \overrightarrow{OM_2}$
$\vec{R} = \overrightarrow{OC}$
$\vec{r} = \overrightarrow{M_1 M_2}$

الشكل 2.2

بما أنّ الجملة معزولة فإنّ الاندفاع الكلي يكون محفوظاً أثناء التصادم:

$$\frac{d}{dt}(m_1 \vec{w}_1 + m_2 \vec{w}_2) = 0 \tag{2.14}$$

بفرض أن الكتلتين m_1 و m_2 ثابتتان مع الزمن فإنه وبعد اشتقاق (2.12) و (2.13) نحصل على:

$$\vec{w}_1 = \vec{w}_c - \frac{m_2}{m_1 + m_2}\vec{w}_r \tag{2.15}$$

$$\vec{w}_2 = \vec{w}_c + \frac{m_1}{m_1 + m_2}\vec{w}_r \tag{2.16}$$

حيث $\vec{w}_c$ هي سرعة حركة مركز الكتلة و $\vec{w}_r$ هي السرعة النسبية.

إذا عوضنا العلاقتين الأخيرتين في (2.14) نجد أنّ:

$$\frac{d}{dt}\ \vec{w}_c = 0 \qquad (2.17)$$

أي إن مركز الكتلة يقوم بحركة مستقيمة منتظمة في جملة إحداثيات المخبر.

2.2.2- جملة الإحداثيات المرتبطة بمركز الكتلة والحركة النسبية

بما أن جملة الجسيمين معزولة، فإنّ عزمها الحركي الكلي $\vec{L}$ يكون محفوظاً أي إن:

$$\vec{L} = \vec{L}_1 + \vec{L}_2 \qquad (2.18)$$

وأنّ:

$$\vec{L}_i = \vec{r}_i \wedge m_i \vec{w}_i \qquad (2.19)$$

وبتعويض $\vec{r}_i$ من (2.13,2.12) و $\vec{w}_i$ من (2.16,2.15) في العلاقة (2.18) نحصل على [11]:

$$\vec{L} = \vec{L}_c + \vec{L}_r \qquad (2.20)$$

حيث $\vec{L}_c$ يرمز للعزم الحركي لمركز الكتلة و $\vec{L}_r$ للعزم الحركي النسبي، ويعطيان بالعلاقتين:

$$\vec{L}_c = \vec{R} \wedge M \vec{w}_c \qquad (2.21)$$

$$\vec{L}_r = \vec{R} \wedge \mu \vec{w}_r \qquad (2.22)$$

وأنّ:

$$M = m_1 + m_2 \qquad (2.23)$$

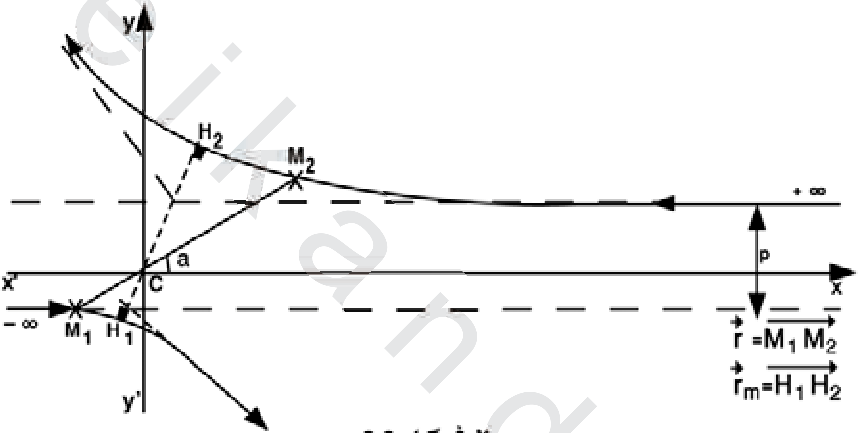
$$\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} \qquad (2.24)$$

حيث M هي الكتلة الكلية و μ هي الكتلة المختزلة.

باشتقاق العلاقة (2.21)، وباستخدام خصائص الجداء الشعاعي والعلاقة (2.17) يبرهن بأن العزم الحركي لمركز الكتلة $\vec{L}_c$ يبقى محفوظاً. ونستنتج أنّ $\vec{L}_r$ يبقى محفوظاً أيضاً، نظراً لأن العزم الحركي الكلي $\vec{L}$ من العلاقة (2.20)

يكون محفوظاً أثناء الصدم. يبقى الجسيمان ومركز كتلتيهما في مستوٍ متعامد مع $\vec{L}_r$: وبالتالي يمكن دراسة الصدم في مستوي باختيار جملة الإحداثيات المرتبطة بمركز الكتلة C (الشكل 2.3).

وعندما تكون المسافة بين الجسيمين لا نهائية يكون مساراهما عبارة عن مستقيمين (لا يوجد تفاعل بين الجسيمين). لنفرض أنهما موازيان للمحور $x'x$ ، نسمي المسافة بينهما وسيط التصادم بحسب المحور $y'y$ (الشكل 2.3). يتعين موضعا M_1 و M_2 بالمسافة النسبية بينهما r والزاوية α الكائنة بين القطعة المستقيمة M_1M_2 والمحور C_x.



الشكل 2.3

نحصل على إحداثيات M_1 و M_2 اعتماداً على العلاقتين (2.12) و (2.13) بعد الأخذ بالحسبان أنّ $\vec{R}$ يساوي الصفر في جملة الإحداثيات المرتبطة بمركز الكتلة :[11]

$$x_1 = -\frac{m_2}{m_1 + m_2} r \cos\alpha$$
$$y_1 = -\frac{m_2}{m_1 + m_2} r \sin\alpha \qquad (2.25)$$

و:

$$x_2 = -\frac{m_1}{m_1 + m_2} r \cos\alpha$$
$$y_2 = -\frac{m_1}{m_1 + m_2} r \sin\alpha \qquad (2.26)$$

والطاقة الحركية الكلية:

$$K=\frac{1}{2}m_1\,w_1^2+\frac{1}{2}m_2\,w_2^2 \tag{2.27}$$

يمكن كتابة K بحساب السرعات انطلاقاً من (2.25) و (2.26):

$$\begin{aligned} w_1^2&=\left(\frac{m_2}{m_1+m_2}\right)^2\left[\left(\frac{dr}{dt}\right)^2+r^2\left(\frac{d\alpha}{dt}\right)^2\right]\\ w_2^2&=\left(\frac{m_1}{m_1+m_2}\right)^2\left[\left(\frac{dr}{dt}\right)^2+r^2\left(\frac{d\alpha}{dt}\right)^2\right] \end{aligned} \tag{2.28}$$

ومنه:

$$K=\frac{1}{2}\,\mu\left[\left(\frac{dr}{dt}\right)^2+r^2\left(\frac{d\alpha}{dt}\right)^2\right] \tag{2.29}$$

حيث ترمز μ للكتلة المختزلة المعرفة في (2.24).

نحصل على العزم الحركي الكلي لهذه الحركة المستوية اعتماداً على التعريفين (2.18) و (2.19):

$$\left|\vec{L}\right|=x_1m_1w_{y1}-y_1m_1w_{x1}+x_2m_2w_{y2}-y_2m_2w_{x2} \tag{2.30}$$

ونجد عند التعبير عن المواضع والسرعات اعتماداً على (2.25) و (2.26) أنَّ:

$$\left|\vec{L}\right|=\mu\,r^2\,\frac{d\alpha}{dt} \tag{2.31}$$

يمكن التعبير عن الطاقة الحركية والعزم الحركي بحذف الزاوية α (الشكل 2.3):

$$p=r\sin\alpha \tag{2.32}$$

ومنه:

$$\cos\alpha\,\frac{d\alpha}{dt}=-\frac{p}{r^2}\frac{dr}{dt} \tag{2.33}$$

وباستخدام (2.32) أيضاً نجد:

$$\frac{d\alpha}{dt}=-\frac{p}{r^2(1-p^2/r^2)^{1/2}}\frac{dr}{dt} \tag{2.34}$$

وتصبح العلاقتان (2.29) و (2.31):

$$K = \frac{1}{2}\mu(\frac{dr}{dt})^2[1+\frac{p^2/r^2}{(1-p^2/r^2)}] \qquad (2.35)$$

$$|\vec{L}| = \frac{\mu p}{(1-p^2/r^2)^{1/2}}\frac{dr}{dt} \qquad (2.36)$$

ومن العلاقات السابقة، يمكن استنتاج الطاقة الحركية والعزم الحركي في اللحظة الابتدائية (حين يكون الجسيمان في اللا نهاية قبل الصدم) وذلك كما يلي:

$$g_o = \frac{dr}{dt} = |\vec{w}_1 - \vec{w}_2|_o \qquad (2.37)$$

ترمز g_0 للسرعة النسبية (السرعتان $\vec{w}_1$ و $\vec{w}_2$ متوازيتان).

حين يقع الجسيمان في اللانهاية (الشكل 2.3) يكون دوماً:

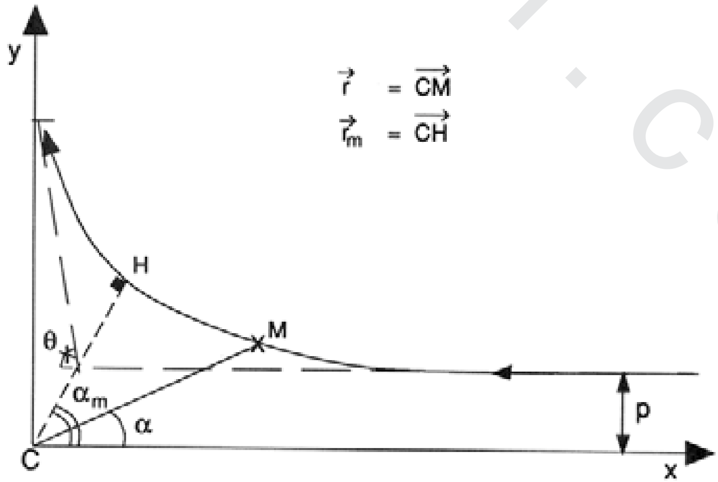
$$r >> p \qquad (2.38)$$

وبالتالي ضمن هذه الشروط تصبح العلاقتان (2.35) و (2.36)على الشكل:

$$K_o = \frac{1}{2}\mu g_o^2 \qquad (2.39)$$

$$|\vec{L}_o| = \mu p g_o \qquad (2.40)$$

يظهر تحليل النتائج السابقة أنّ الحركة المستوية المذكورة أعلاه تكون مكافئة لحركة متحرك وهمي M ذي كتلة μ يتحرك حول مركز قوة C ثابت (الشكل 2.4 حيث ترمز $\vec{r}_m$ لمسافة الاقتراب الأصغر. ومن الجدير بالذكر أن العلاقات (2.29)، (2.31) و (2.40) تبقى صالحة للاستخدام ضمن هذا التمثيل الجديد للصدم.



الشكل 2.4

3.2.2- المعادلة القطبية للمسار وزاوية الانحراف:

نحصل على الزاوية القطبية للمسار بكتابة قانون انحفاظ الطاقة والعزم الحركي للجملة المعزولة:

$$K_o + U_o = K + U \tag{2.41}$$

$$\left|\vec{L}_o\right| = \left|\vec{L}\right| \tag{2.42}$$

حيث يرمز U(r) لطاقة التفاعل الكامنة والتي سنفرضها مساوية للصفر حين تكون الجسيمات في اللانهاية أي:

$$U_o\ (\infty) = 0 \tag{2.43}$$

باستخدام (2.29) و (2.31) و (2.39) و (2.40)، تصبح معادلات الانحفاظ، (2.41) و (2.42) على النحو:

$$\frac{1}{2}\ \mu\, g_o^2 = \frac{1}{2}\mu\left[\left(\frac{dr}{dt}\right)^2 + r^2\left(\frac{d\alpha}{dt}\right)^2\right] + U(r) \tag{2.44}$$

$$\mu\, p\, g_o = \mu\ r^2\ \frac{d\alpha}{dt} \tag{2.45}$$

بحذف الأجزاء القطبية في كل من (2.44) و (2.45) نجد أنَّ:

$$\frac{1}{2}\ \mu\, g_o^2 = \frac{1}{2}\mu\left[\left(\frac{dr}{dt}\right)^2 + \frac{p^2 g_o^2}{r^2}\right] + U(r) \tag{2.46}$$

ومنه:

$$\left(\frac{dr}{dt}\right)^2 = g_o^2\left[1 - \frac{p^2}{r^2} - \frac{U(r)}{\frac{1}{2}\mu\, g_o^2}\right] \tag{2.47}$$

يعبر عن الجزء الأول من التصادم (قبل الصدم)، بأخذ القيمة السالبة للجذر التربيعي من (2.47) أي:

$$\frac{dr}{dt} = -g_o\left[1 - \frac{p^2}{r^2} - \frac{U(r)}{\frac{1}{2}\mu\, g_o^2}\right]^{1/2} \tag{2.48}$$

ونستنتج المعادلة القطبية بكتابة:

$$\frac{dr}{dt} = \frac{dr}{d\alpha}\frac{d\alpha}{dt} \qquad (2.49)$$

باستخدام (2.45) و (2.48) نجد:

$$\frac{dr}{dt} = -\frac{r^2}{p}\left[1 - \frac{p^2}{r^2} - \frac{U(r)}{\frac{1}{2}\mu g_o^2}\right]^{1/2} \qquad (2.50)$$

تتعلق مسافة الاقتراب الأصغرية r_m بنقطة انحناء أعظمي للمسار أي:

$$\left.\frac{dr}{d\alpha}\right|_{r_m} = 0 \qquad (1.51)$$

ومنه:

$$1 - \frac{p^2}{r_m^2} - \frac{U(r_m)}{\frac{1}{2}\mu g_0^2} = 0 \qquad (2.52)$$

حين يكون الصدم بين الجسيمين جبهياً (وسيط الصدم P معدوم) يتحرك الجسيمان على مسار واحد معرف بالمستقيم الواصل بين النقطتين M_1 و M_2 (الشكل 2.3). وتكون حركتهما إذاً وحيدة البعد (موازية لـ $x'x$) ويتوقفان (حين يكون الفعل المتبادل تنافرياً) على مسافة أصغرية r_c (المسافة الصغرى للاقتراب) قبل أن ترتد عائدة على خطاها. وتكون طاقتها الحركية معدومة على المسافة r_c وتصبح طاقتها الكامنة أعظمية (بفضل الانحفاظ الكلي للطاقة). في هذه الحالة الخاصة حين يكون وسيط التصادم معدوماً يكون:

$$1 - \frac{U(r_c)}{\frac{1}{2}\mu g_o^2} = 0 \qquad (2.53)$$

وبالتالي يمكن كتابة المعادلة القطبية (2.50):

$$\frac{dr}{d\alpha} = -\frac{r^2}{p}\left[1 - \frac{p^2}{r^2} - \frac{U(r)}{U(r_c)}\right]^{1/2} \qquad (2.54)$$

ونستنتج بالمكاملة الزاوية الصغرى للاقتراب، وهي:

$$\alpha_m = \int_{r_m}^{\infty} \frac{pdr / r^2}{\left[1 - p^2/r^2 - U(r)/U(r_c)\right]^{1/2}} \qquad (2.55)$$

حيث r_m هي حل المعادلة (2.52).

ونحصل على زاوية الانحراف θ (الشكل (2.4)) وفقاً لـ:

$$\theta = \pi - 2\alpha_m \qquad (2.56)$$

ومنه:

$$\theta = \pi - 2\int_{r_m}^{\infty} \frac{pdr / r^2}{\left[1 - p^2/r^2 - U(r)/U(r_c)\right]^{1/2}} \qquad (2.57)$$

3.2- النظرية الكوانتية

1.3.2- وصف التصادم

ليكن تصادم ذرتين أو جزيئتين ممثلتين بـ P(i) و Q(j) . لنفرض أنهما يشكلان جملة معزولة ذات هاملتوني محفوظ، والذي يكتب على النحو:

$$H_o(\eta,\xi) = K_l(\eta) + K_r(\xi) + U_{lr}(\eta,\xi) \qquad (2.58)$$

وأن:

$$U_{lr}(\eta,\xi) = U_l(\eta) + U_r(\xi) + U(\eta,\xi) \qquad (2.59)$$

حيث η و ξ هما بالترتيب الإحداثيات المعممة للنوى والإلكترونات المرتبطة في جملة إحداثيات المخبر. وتأخذ الطاقتان الحركية والكامنة K و U بالحسبان جميع نوى وإلكترونات الجسيمين المعتدلين P(i) و Q(j) ، أي:

$$K_l(\eta) = \sum_{k=1}^{N} \frac{p_k^2}{2m_k} \qquad (2.60)$$

$$K_r(\xi) = \sum_{l=1}^{N_e} \frac{p_l^2}{2m_l} \qquad (2.61)$$

$$U_l(\eta) = \sum_{k}^{N-1} \sum_{<\, l=1}^{N} \frac{Z_k Z_l e^2}{|\vec{\eta}_k - \vec{\eta}_l|} \qquad (2.62)$$

$$U_r(\xi) = \sum_{k}^{N_e-1} \sum_{<\, l=1}^{N_e} \frac{e^2}{|\vec{\xi}_k - \vec{\xi}_l|} \qquad (2.63)$$

$$U(\eta,\xi)=\sum_{k=1}^{N_c}\sum_{l=1}^{N}\frac{-Z_l e^2}{\left|\vec{\xi}_k-\vec{\eta}_l\right|} \qquad (2.64)$$

حيث m_k هي كتلة كل نواة و m_e هي كتلة الإلكترون.

في الحالة العملية يكون مركز الكتلة لهذه الجملة معيناً بشكل أساسي من النوى لأن كتلة الإلكترونات صغيرة جداً (كتلة البروتون أكبر تقريباً بألفي مرة من كتلة الإلكترون). من جهة أخرى من أجل الطاقات الحرارية التي تكون أقل من بضعة إلكترون-فولت[23]، الإلكترونات المرتبطة لها حركة عشوائية أكبر بكثير من حركة النوى. هذا يسمح كتقريب أولي باعتبار أن الإلكترونات "سريعة" (الدليل r) والنوى بطيئة (الدليل l). وبما أن مقياس الزمن ليس نفسه بالنسبة للنوى والإلكترونات المرتبطة نقبل أن النوى تتحرك ببطء (بشكل كظوم) في حين أن الإلكترونات تعيد تنظيم نفسها بشكل شبه لحظي في الفراغ. هذا يعني أن التفاعلات بين الإلكترونات والنوى لا تحدث وفق آليات فردية، فالنوى لا تتأثر إلاّ بالأفعال الوسطية (في الزمن) المتولدة عن مجمل الغمامة الإلكترونية.

تسمح هذه الملاحظات الفيزيائية بمعالجة الأيونات والإلكترونات المرتبطة كلاً على حدة أثناء عملية الصدم، وهي تشكل الأساس الذي يقوم عليه تقريب بورن-أوبنهايمر **Born-Oppenheimer [23]** .

2.3.2- إحداثيات مركز الكتلة وتقريب بورن-أوبنهايمر

يمكن تجزئة الهاملتوني الكامل للجملة (2.58) في جملة الإحداثيات المخبرية إلى ثلاثة حدود يصف كل منها حد الصدم ضمن جملة مناسبة. ويكتب هذا الهاملتوني على النحو:

$$H_o = H_{c/o} + H_{e_1e_2/c} + H_{e_1} + H_{e_2} \qquad (2.65)$$

يصف الحد الأول، $H_{c/o}$ ، حركة مركز الكتلة للجسيمين (ذرة، جزيئة) ضمن إحداثيات المخبر O (الشكل 1.2). وبما أن الجملة معزولة، فحركة المركز C مستقيمة منتظمة، ويعطى التمثيل الكوانتي لها على شكل موجة مستوية وحيدة التواتر أو اللون [11].

ويعبر الحد الثاني، $H_{c_1c_2/c}$ ، عن الحركة النسبية لمركزي الكتلتين C_1 و C_2 (الشكل 1.2) في جملة إحداثيات مركز الكتلة المشترك C.

ويسمح الحد الثالث، $H_{c_1} + H_{c_2}$ ، بوصف الحركات الخاصة للمركبات العنصرية لكل جسيم ضمن جملة إحداثيات مرتبطة بمركز كتلته (C_1 أو C_2).

مع الأخذ بالحسبان الملاحظات الفيزيائية التي ذكرت سابقاً، يبدو من الواضح أن النوى والإلكترونات المرتبطة، كتقريب أولي، يمكن أن تدرس بشكل منفصل. بغية عدم تعقيد الدراسة سنكتفي بدراسة الهاملتوني المرتبط بجملة إحداثيات المخبر (2.58)، ويكون التحليل نفسه حين تكون في جملة الإحداثيات المرتبطة بمركز الكتلة (خيار لا غنى عنه من أجل دراسة دقيقة).

يقوم تقريب بورن-أوبنهايمر على كتابة الهاملتوني للجملة (2.58) على الشكل التالي:

$$H_o(\eta,\xi) = H_r(\eta,\xi) + K_l(\eta) \qquad (2.66)$$

وأن:

$$H_r(\eta,\xi) = K_r(\xi) + U_{lr}(\eta,\xi) \qquad (2.67)$$

يمثل الجزء $H_r(\eta,\xi)$ ، المركبة السريعة، التي تتضمن الطاقة الكامنة للتفاعل بين النوى.

وتسمح المركبة البطيئة $K_l(\eta)$ بوصف حركة النوى (أي عملياً حركة مراكز الكتلة C_1 و C_2) مع الأخذ بالحسبان نسبة الكتلتين بين إلكترون - نواة.

مع اعتبار $|\psi(t)>$ شعاع الحالة للجملة المعزولة، تكتب معادلة شرودنغر [25]:

$$H_o\,|\psi(t)> = i\hbar \frac{d}{dt}\,|\psi(t)> \qquad (2.68)$$

نفرض، كمرحلة أولى، أن الإلكترونات المرتبطة تقع في حالات مستقرة وأن النوى غير متحركة أي:

$$H_r\,|\varphi_n> = \varepsilon_n\,|\varphi_n> \qquad (2.69)$$

تكون الأشعة الذاتية $|\varphi_n>$ متعامدة ومستنظمة:

$$<\varphi_n|\varphi_{n'}> = \delta_{nn'} \qquad (2.70)$$

وتحقق علاقة الانغلاق:

$$\sum_{n} \left| \varphi_n > < \varphi_n \right| = 1 \qquad (2.71)$$

ننشر شعاع الحالة $< \psi (t) |$ على الأساس $\{ |\varphi_n > \}$ باستخدام:

$$\left| \psi(t) > = \sum_{n'} a_{n'}(t) \right| \varphi_{n'} > \qquad (2.72)$$

حيث:

$$a_{n'}(t) = < \varphi_{n'} \left| \psi (t) > \right. \qquad (2.73)$$

التي تمثل مركبة $< \psi(t) |$ على $|\varphi_{n'} >$.

وتصبح معادلة شرودنغر (2.68) بعد الأخذ بالحسبان (2.66) و (2.72) على النحو:

$$[H_r + K_1] \sum_{n'} a_{n'}(t) \left| \varphi_{n'} > \right. = i\hbar \frac{d}{dt} \sum_{n'} a_{n'}(t) \left| \varphi_{n'} > \right. \qquad (2.74)$$

أو باستخدام (2.69):

$$\sum_{n'} a_{n'}(t) K_1 \left| \varphi_{n'} > \right. + \sum_{n'} a_{n'}(t) \varepsilon_{n'} \left| \varphi_{n'} > \right. = i\hbar \frac{d}{dt} \sum_{n'} a_{n'}(t) \left| \varphi_{n'} > \right. \qquad (2.75)$$

نسقط (2.75) على الأساس $\{ | \varphi_n > \}$، فنجد أنه بالأخذ بالحسبان (2.70) يكون:

$$\varepsilon_n a_n(t) + \sum_{n'} C_{nn'}(t) a_{n'}(t) = i\hbar \frac{da_n}{dt} \qquad (2.76)$$

بافتراض أنّ:

$$C_{nn'}(t) = < \varphi_n \left| K_1(\eta) \right| \varphi_{n'} > \qquad (2.77)$$

حيث إنّ $C_{nn'}(t)$ هو معامل الترابط بين المستويات المستقرة.

نلاحظ فوراً أن الحالة $< \psi (t) |$ تتعلق بمعامل الترابط (2.77)، لأنّ المركبات $a_n(t)$، حل المعادلة (2.76)، تتبع هي نفسها لـ $C_{nn'}(t)$. وبالتالي يؤدي اختيار التقريب على حدود الترابط دوراً مهماً في وصف حالة التصادم، أي المرحلة الأخيرة من تقريب بورن-أوبنهايمر، الذي يعتبر الحركة البطيئة للنوى، التي ستدرس بشكل تقليدي (تقريب الطريقة التقليدية).

3.3.2- التقريب الكظوم ووسيط ماسي Massey

الفرضية الأسهل التي يمكن افتراضها هي أن لا يكون هناك ترابط بين المستويات، مما يسمح بكتابة (2.76):

$$\varepsilon_n a_n(t) = i\hbar \frac{da_n}{dt} \qquad (2.78)$$

وبحل المعادلة (2.78)، تصبح حالة الجملة (2.72):

$$\left|\psi(t)\right> = \sum_{n'} b_{n'} e^{-i\varepsilon_{n'} t/\hbar} \left|\varphi_{n'}\right> \qquad (2.79)$$

حيث $b_{n'}$ هو ثابت التكامل.

يفترض التقريب الكظوم أنه لا يحصل تغير في الحالة الداخلية عند الصدم. فإذا كانت ε_n هي حالة مستقرة معطاة (حل لمعادلة القيم الذاتية (2.69)) قبل الصدم، فإن الجملة تبقى في هذه الحالة بعد الصدم، مما يسمح بالاحتفاظ فقط بالحد المتعلق به في النشر (2.79) أي:

$$\left|\psi(t)\right> = b_n e^{-i\varepsilon_n t/\hbar} \left|\varphi_n\right> \qquad (2.80)$$

إذا كان حد الترابط (2.77) لا يساوي الصفر، تصبح المركبات $a_n(t)$ و $\left|\psi(t)\right>$ ، حلول المعادلة (2.76)، توابع لموضع النوى η ($C_{nn'}(t)$ تتعلق بـ $K_1(\eta)$). ويصبح إذاً من غير الممكن معالجة مركبات الصدم بشكل منفصل. وكنتيجة لذلك، تصبح كذلك الطاقة ε_n (2.69) لـ η ، لأن الإلكترونات والنوى تتحرك معاً في الفراغ (في التقريب الكظوم، ε_n لا تتعلق بـ η ، النوى يفترض أنها ثابتة). بسبب هذه الحركة الإجمالية، يتعلق بالزمن ويصبح حل المعادلة (2.76) معقداً، لأن ε_n لم تعد ثابتة (تابع ضمني للزمن). وأخيراً، بغية تبسيط (2.76)، نكتب $a_n(t)$ بشكل قريب من المركبة (2.80) بافتراض:

$$a_n(t) = b_n(t) \exp\left[-\frac{i}{\hbar}\int \varepsilon_n dt\right] \qquad (2.81)$$

حيث إنّ b_n و ε_n تابعان للزمن.

بتعويض (2.81) في (2.76) والضرب بالمرافق العقدي نحصل على:

$$i\hbar \frac{db_n}{dt} = \sum_{n'} \left<\varphi_n\right|K_1\left|\varphi_{n'}\right> b_{n'}(t) \exp[-\frac{i}{\hbar}\int (\varepsilon_{n'} - \varepsilon_n) dt \qquad (2.82)$$

يعبر الحد الأسي عن تغير الحالة الداخلية أثناء الصدم، الترابط (الذي يمكن أن يعتبر كاضطراب perturbation) معطى عن طريق تمثيل المؤثر $K_1(\eta)$ بوساطة الأساس $\{|\varphi_n>\}$. وفي حالة الترابط المعدوم نجد جيداً نتائج التقريب الكظوم.

بعد التحليل السابق يبقى أن نحدِّد عند أي شروط يكون التقريب الكظوم مطبقاً. لهذا سنعتبر نواةً تتحرك باتجاه معين في الفراغ ولنرمز بـ $\Delta\eta$ للمسافة التي تقطعها النواة بين تغيرين للحالة الداخلية ندعوهما $\varepsilon_n(\eta)$ و $\varepsilon_{n'}(\eta+\Delta\eta)$.

بمقارنة $\Delta\eta$ بالمسافة التي يحصل عندها الصدم يمكن أن نستنتج مجالات التطبيق التالية:

- إذا كانت $\Delta\eta$ من مرتبة طول الصدم نفسها، لا يحصل تغير للحالة أثناء الصدم ويبقى التقريب الكظوم قابلاً للاستخدام.

- في الحالة المعاكسة، لا تكون فرضية الكظم قابلة للاستخدام بسبب تبادلات الطاقة بين درجات الحرية الداخلية والخارجية.

نقول إن فرضية الكظم تصبح أقرب للحقيقة كلما كبرت $\Delta\eta$. ويمكن أن تلخص الشروط السابقة بإدخال وسيط ماسي. وهكذا يكون النشر التالي:

$$\varepsilon_{n'}(\eta+\Delta\eta)-\varepsilon_n(\eta)=\varepsilon_{n'}(\eta)+\Delta\eta\frac{\partial\varepsilon_{n'}}{\partial\eta}-\varepsilon_n(\eta) \qquad (2.83)$$

يمثل الحد $\Delta\eta\partial\varepsilon_{n'}/\partial\eta$ الانحراف عن حالة الانتقال الآنية (من دون تغير موضع النواة) بين حالتين مستقرتين. وكلما كبر هذا الحد كانت الحالة المستقرة أكثر استقراراً، وهو الشرط الذي نبحث عنه لتطبيق التقريب الكظوم. ويكون معامل ماسّي معرفاً بملاحظة أنّ تكامل المعادلة (2.83) على الزمن، يمثل (بتقريب قدرة $\hbar$) صفحة الأسّ في المعادلة (2.82). وعليه فإن:

$$\gamma=\frac{1}{\hbar}\int\Delta\eta\frac{\partial\varepsilon_{n'}}{\partial\eta}dt \qquad (2.84)$$

نسمي v_η سرعة النواة، فيكون لدينا كتقريب أوليّ:

$$\gamma\simeq\frac{1}{\hbar}\int\Delta\eta\frac{\partial\varepsilon_{n'}}{v_\eta} \qquad (2.85)$$

أو أيضاً:

$$\gamma \simeq \frac{\Delta\eta}{\hbar}\frac{\Delta\varepsilon_{n'}}{v_\eta} \qquad (2.86)$$

ويعطى الشرط الدقيق لتطبيق التقريب الكظوم بـ $\gamma << 1$. ويكون هذا الشرط محققاً كلما كان الفرق الطاقي $\Delta\varepsilon_{n'}$ بين الحالات المستقرة كبيراً، وكلما كانت النوى ذات سرعات بطيئة (v_η صغيرة، مما يعني أنَّ طاقة التهيج الحراري صغيرة).

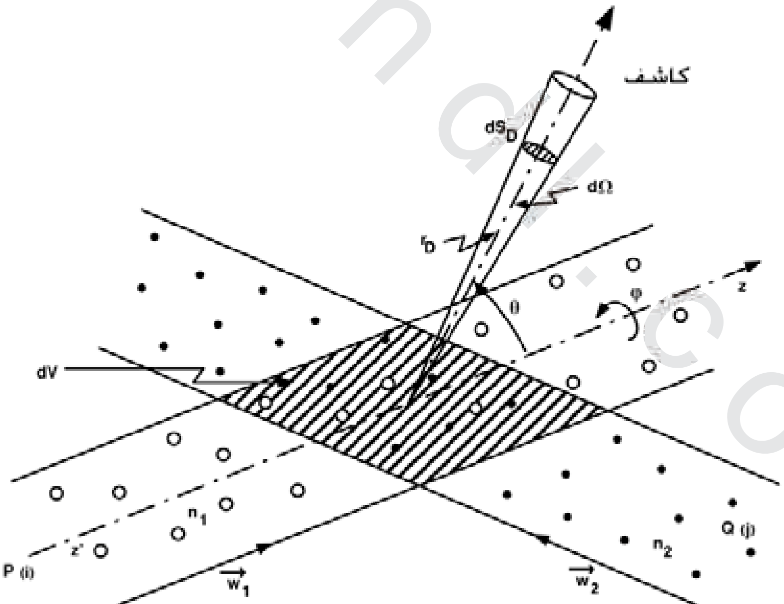
4.2- المقطع الفعال

1.4.2- المقطع الفعال التفاضلي

لنأخذ دفقين[1] متقاطعين من الجسيمات P (i) و Q (j) في الفراغ، تمثل i و j حالتين داخليتين لطاقتيهما (الشكل 2.5). n_1 و n_2 كثافتهما العدديتان، $\vec{w}_1$ و $\vec{w}_2$ سرعتاهما الموجهتان.

تعرف الحزمتان في الفراغ منطقة تصادم حجمها dV، يمكن المكشف عن نواتج التصادم X(k) بوضع حساس على سطح المدخل dS_D يبعد مسافة r_D عن المنطقة dV، هذه المنطقة تُرى ضمن زاوية صلبة معطاة بالعلاقة:

$$d\Omega = \frac{dS_D}{r_D^2} = \sin\theta \, d\theta \, d\varphi \qquad (2.87)$$



الشكل 2.5

1- jet دفق أو تيار: كخروج الماء من مضخة water jet

تتعلق طبيعة الجسيمات المكتشفة X(k) بنوع التصادم:

- إذا كان الصدم مرناً (2.2)، تكون الجسيمات مماثلة لجسيمات الحزمتين الواردتين P(i) و Q(j).

- وإذا كان الصدم غير مرن (2.3)، تكون الجسيمات مشابهة للجسيمات الأصلية، ولكنها مختلفة في حالاتها الداخلية P(k)، Q(l).

- أما إذا كان الصدم تفاعلياً (reactive) (2.4)، تكون النواتج X(k) و Y(*l*) مختلفة عن P(i) و Q(j) الابتدائيتين.

لتبسيط الوصف الفيزيائي للتصادم، سنفترض أن كل حزمة هي وحيدة السرعة (monokinetic) (للجسيمات السرعة الموجهة نفسها) وأن الكثافتين n_1 و n_2 ضعيفتان، بما يكفي لإهمال التفاعلات (interactions) ضمن الحزمة الواحدة.

يبدو من الواضح، بعد هذه الشروط، أنّ عدد الجسيمات d^3N التي يشعر بها الحساس (الكاشف) يتعلق بنوعين من المتحولات:

- المتحولات المتعلقة بالفراغ والزمن

أي:

حجم التصادم dV

زاوية المراقبة الصلبة $d\Omega$

زمن التفاعل dt

- المتحولات المتعلقة بالجسيمات

أي:

الكثافتان n_1 و n_2

السرعة النسبية $g = |\vec{w}_1 - \vec{w}_2|$

نشير إلى أنَّ d^3N متناسب مع كلّ من المتحولات السابقة، مما يمكن أن يكتب:

$$d^3N \propto dV d\Omega\, dt\, n_1 n_2 g \qquad (2.88)$$

وتكون معادلة الأبعاد في (2.88) محققة إذا أدخلنا معامل تناسب نسميه المقطع الفعال التفاضلي ويرمز له بـ $\sigma(g,\theta,\varphi)$:

$$\sigma (g, \theta, \varphi) = \frac{d^3N}{n_1\ n_2\ g\ dt\ dV\ d\Omega} \qquad (2.89)$$

هذا المتحول له أبعاد سطح ويتعلق بالسرعة النسبية g و بالإحداثيين θ و φ.

حين تكون الطاقة الحركية النسبية للجسيمات أكبر أو تساوي طاقة التهيج الحراري القياسي (الشروط النظامية لدرجة الحرارة) ويكون طول دي بروي De Broglie صغيراً بالنسبة للأبعاد المميزة للجزيئة (2.7) ضمن هذه الشروط، يمكن وصف الصدم بطريقة شبه تقليدية وذلك بأخذ المسارات الفردية للجسيمات.

يمكن إذاً استخدام نظرية الحركة النسبية (الفقرة 2.2.2) بتبديل جملة الدفقين وحيدي السرعة المتقاطعين (أو المتصالبين) (الشكل 2.5) بحزمة جسيمات P(i) ذات سطح S_1 وكثافة n_1 وسرعة g تعبر وسطاً غازياً من الجسيمات Q(j) ساكناً (غير متحرك) (الشكل 2.6).

تكتب العلاقة (2.89) أيضاً، بإدخال السطح S_1 للحزمة P(i) الواردة:

$$d^3N = \frac{\sigma(g,\theta,\varphi)}{S_1} n_1 S_1 g\, dt\, n_2 dV d\Omega \qquad (2.90)$$

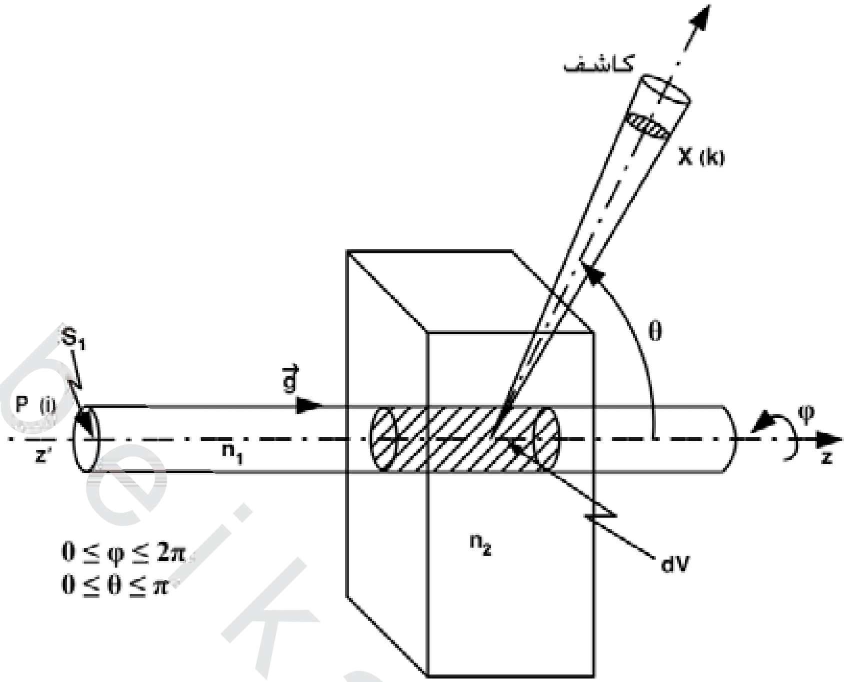
وبفرض أنّ:

$$dN_1 = n_1\ S_1 g\ dt \qquad (2.91)$$

حيث $S_1 g\ dt$ هو الحجم الممسوح من قبل الجسيمات ذات الكثافة n_1 أثناء الزمن dt، و dN_1 عدد الجسيمات الواردة المحتواة ضمن حجم التفاعل dV المعرَّف كما ورد سابقاً.

يعطى عدد الجسيمات Q(j) الموجود في هذا الحجم بالعلاقة:

$$dN_2 = n_2\ dV \qquad (2.92)$$



الشكل 2.6

أي يصبح عدد الجسيمات المسجلة بحسب الاتجاهين θ ، φ ، والناتجة عن تصادم dN_1 و dN_2 ضمن الحجم dV، وأثناء الزمن dt، معطى وفقاً لـ (2.90) بالعلاقة التالية:

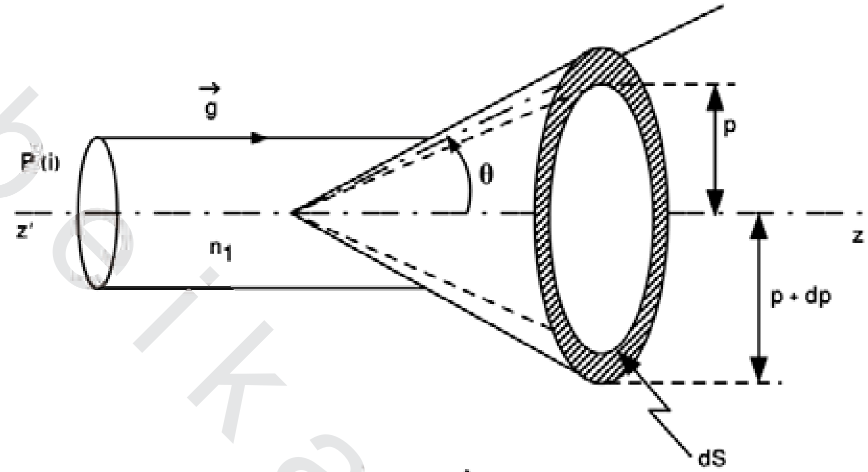
$$d^3N = dN_1 \, dN_2 \frac{\sigma(g, \theta, \varphi)}{S_1} d\Omega \qquad (2.93)$$

حيث إنّ التصادمات تكون متناحية (وهي خاصة ناتجة من توزع $P(i)$ و $Q(j)$ في الفراغ ومن شكل كمون التفاعل)، ويبقى القياس نفسه حين يتحرك الحساس على محيط دائرة يقع مركزها على المحور $z'z$ (الشكل 2.6). أما المقطع الفعال التفاضلي $\sigma(g,\theta)$ فلا يتعلق إلاّ بالزاوية θ. وبإجراء التكامل الجزئي على الزاوية الصلبة $d\Omega$ نحصل على عدد الجسيمات الملحوظة بحسب الاتجاه θ ضمن إطار قدره $2\pi \sin\theta \, d\theta$ يحيط بالمحور $z'z$ أي إن (2.93) تصبح على النحو:

$$d^3N = dN_1 \, dN_2 \frac{\sigma(g, \theta)}{S_1} 2\pi \sin\theta \, d\theta \qquad (2.94)$$

يمكن أيضاً إيجاد هذا العدد بالقول إن الجسيمات المسجلة بحسب الزاوية θ هي الجسيمات التي يكون وسيط الصدم لها متراوحاً ما بين p و p+dp (الفقرة 2.2.2) أي الجسيمات التي تجتاز الإطار ذا السطح:

$$dS = 2\pi\, p\, dp \qquad (2.95)$$



الشكل 2.7

إذا ما أخذ التقريب الجديد بالحسبان، فإن العدد d^3N سيتعلق بمجموعتين جديدتين من المتحولات هما:

- المتحولات المتعلقة بالفراغ والزمن:

حجم التصادم dV

سطح إطار الصدم dS

مدة التفاعل dt

- المتحولات المتعلقة بالجسيمات (التي تبقى ثابتة)، أي:

الكثافتان n_1 و n_2

السرعة النسبية g

ونكتب أنَّ d^3N متناسب مع كلٍّ من هذه المتحولات:

$$d^3N \propto dV\, dS\, dt\, n_1 n_2 g \qquad (2.96)$$

إن وسيط الصدم p لا يكفي لتعيين مميزات (characteristics) الجسيمات المسجلة بحسب الاتجاه θ. ويمكن لبعض الجسيمات أن توجد في حالات إثارة (excitation) داخلية

مختلفة، وأن يكون لها وسيط الصدم p نفسه. لإيجاد العدد المحتمل d^3N للأنواع (الملحوظة وفق الاتجاه θ) والتي لها حالة الإثارة الداخلية *l, k*، المعينة نفسها، يجب ضرب (2.96) باحتمال الانتقال $P_{ij,kl}(g,p)$ بين الحالات الداخلية j, i و l, k أي:

$$d^3N = P_{ij,kl}(g,p)\ dV\ dS\ dt\ n_1\ n_2\ g \qquad (2.97)$$

نلاحظ أنَّ $P_{ij,kl}(g,p)$ هو تابع للسرعة النسبية g ولوسيط الصدم p، وتتعلق التحولات الداخلية أثناء التصادم بالطاقة الحركية النسبية للجسيمات، وبالتوزع الفراغي لمركباتها العنصرية.

إذا أخذنا بالحسبان (2.91) و (2.92) نحصل على:

$$d^3N = dN_1\ dN_2\ \frac{dS}{S_1}\ P_{ij,kl}(g,p) \qquad (2.98)$$

ويمكن أيضاً أن نكتب (2.95):

$$d^3N = dN_1\ dN_2\ \frac{P_{ij,kl}(g,p)}{S_1}\ 2\pi p\ dp \qquad (2.99)$$

بمقارنة (2.94) و (2.99) نحصل على علاقة بسيطة بين المقطع الفعال التفاضلي واحتمال الانتقال ووسيط الصدم:

$$\sigma\ (g,\theta)\ \sin\theta\ d\theta = P_{ij,kl}(g,p)\ p\ dp \qquad (2.100)$$

يجب إتمام النتائج السابقة الصالحة من أجل جميع أنواع الصدم (مرن، أو غير مرن، أو تفاعلي) من أجل كل حالة تطبيقية خاصة:

- في الصدم المرن (حيث لا تغير في الحالة الداخلية) يكون:

$$P_{ij,kl}(g,p) = 1 \qquad (2.101)$$

- في الصدم غير المرن والتفاعلي (استنظام - احتمال الانتقال من أجل مسار معين):

$$\sum_{k\,l} P_{ij,kl}(g,p) = 1 \qquad (2.102)$$

2.4.2- التصادمات المرنة وغير المرنة

في المقدمة (الفقرة 2.1) حللنا الأنواع الثلاثة الممكنة للصدم، ولاحظنا أن الصدم المرن لا يغير الحالات الداخلية للطاقة. وهذا يوافق الحالة الخاصة

(2.101)، وتكون بالتالي العلاقة (2.100) بين المقطع الفعال ووسيط الصدم سهلة نسبياً.

أما في الحالة العملية، فتتعلق طبيعة الصدم (مرن أو غير مرن) بطاقة التهيج الحراري للجسيمات التي تُعين طاقتها الحركية (1.7) أثناء الصدم.

بما أن الطاقة الداخلية تكون مكممة، وأن تبادلات الطاقة الخارجية (الحركية)- الداخلية (المكممة) ليست ممكنة إلاّ إذا كانت الطاقة الحركية للجسيمات الداخلة في التصادم أعلى من عتبة معينة بالحالات الداخلية (2.1) للجسيمات المعتبرة (ذرات، جزيئات، أيونات).

ونشير، بشكل خاص، إلى أن طاقات الإثارة الإلكترونية، والاهتزازية، والدورانية تحقق دائماً المتراجحة التالية:

$$E_i^e >> E_i^v >> E_i^r \qquad (2.103)$$

فالطاقة اللازمة لإثارة ذرة أو جزيئة أو أيون هي من مرتبة بضعة إلكترون فولت من أجل السويات الإلكترونية E_i^e، ومن مرتبة جزء من عشرة من الإلكترون فولت من أجل السويات الاهتزازية E_i^v، وأقل من مرتبة جزء من مئة من الإلكترون فولت من أجل السويات الدورانية E_i^r. أما الطاقة اللازمة للتأين فهي من مرتبة الطاقة نفسها اللازمة للإثارة الإلكترونية.

تكون الذرات والجزيئات في غاز معتدل بدرجة حرارة الغرفة (300K) ذات طاقة تهيج حراري متوسطة أكبر من الطاقة اللازمة لإثارة السويات الدورانية (1eV=11600K)، حيث يكون لدينا:

$$\Delta E_{ij}^r < kT < \Delta E_{ij}^v \qquad (2.104)$$

حيث يرمز ΔE_{ij} لفرق الطاقة بين سويتين متجاورتين. ويبقى العدد الكوانتي العائد للسويات الدورانية كبيراً دائماً في الجزيئات في حين أن السويات الاهتزازية تبقى فارغة. ففي البلازما الباردة التي لها درجة الحرارة نفسها (300K) تمتلئ سويات الإثارة (E_i^e, E_i^v, E_i^r) بنتيجة التصادم الإلكتروني، لأن الإلكترونات تكون قد اكتسبت طاقة حركية عالية بفعل الحقل الكهربائي الخارجي المطبق (تكون درجة حرارتها إذاً، ولهذا السبب، أكبر بكثير من درجة حرارة الجسيمات المعتدلة).

في حالة التصادمات غير المرنة، تحصل تبادلات طاقية بين درجات الحرية الداخلية والخارجية، ويجب علينا أن نكتب الانحفاظ الكلي للطاقة أثناء الصدم. وتستبدل معادلة الانحفاظ (2.41) من أجل الجملة المعزولة بـ:

$$K_o + E_{ij} = K + E_{kl} \qquad (2.105)$$

فالطاقة الحركية الكلية K (2.27) تكتب باعتبار السرعات (2.15) و (2.16) [11]:

$$K = K_c + K_r \qquad (2.106)$$

وأن:

$$K_c = \frac{1}{2} M\, w_c^2 \qquad (2.107)$$

و:

$$K_r = \frac{1}{2} \mu\, g^2 \qquad (2.108)$$

حيث M و μ معرفتان بالعلاقتين (2.23) و (2.24)، K_c و K_r يمثلان بالترتيب الطاقتين الحركيتين لمركز الكتلة وللحركة النسبية للجسيمات على الترتيب.

وتكتب الطاقة الداخلية الكلية:

$$E_{ij} = E_i + E_j \qquad (2.109)$$

حيث تعرف E_i بالعلاقة (2.1) وتصبح المعادلة (2.105):

$$K_{co} + K_{ro} + E_{ij} = K_c + K_r + E_{kl} \qquad (2.110)$$

وبملاحظة أن الاندفاع الكلي يبقى محفوظاً أثناء عملية الصدم في الجملة المعزولة (2.17) يكون لدينا:

$$K_{co} = Kc \qquad (2.111)$$

ومنه:

$$K_{ro} + E_{ij} = K_r + E_{kl} \qquad (2.112)$$

وإذا اعتبرنا $\Delta E_{ij,kl}$ التغير الكلي للطاقة الداخلية أثناء عملية الصدم، فإنه يكون:

$$E_{kl} = E_{ij} - \Delta E_{ij,kl} \qquad (2.113)$$

مما يفرض، لتحقيق المتراجحة (2.112) أن يكون:

$$K_r = K_{ro} + \Delta E_{ij,kl} \qquad (2.114)$$

يُلاحظ أنَّ K_{ro} ، تبدو وكأنها الطاقة الحركية الحرة أثناء الصدم.

ويمكن أن نميز نوعين من الصدم غير المرن:

- الصدم الماص للطاقة endoergic (صدم من النوع الأول)، ويتميز بالشرط:

$$\Delta E_{ij,kl} < 0 \qquad (2.115)$$

- الصدم الطارد للطاقة exoergic (صدم من النوع الثاني المدعو أيضاً فائق المرونة super elastic) حيث:

$$\Delta E_{ij,kl} > 0 \qquad (2.116)$$

و في جميع الحالات يجب أن تكون الطاقة الحركية بعد الصدم أكبر أو تساوي الصفر أي:

$$K_r = K_{ro} + \Delta E_{ij,kl} \geq 0 \qquad (2.117)$$

هذا الشرط محقق دائماً من أجل التصادمات من النوع الثاني لأن $\Delta E_{ij,kl}$ يكون دائماً موجباً. في حين أنه في حالة التصادمات من النوع الأول هناك عتبة هي:

$$K_{ro} \geq \left|\Delta E_{ij,kl}\right| \qquad (2.118)$$

وهي الطاقة الحركية (قبل الصدم) الدنيا اللازمة من أجل تحقيق تبادل طاقي (بعد الصدم تكون الطاقة الحركية النسبية معدومة).

يُحصل من (2.108) على السرعة النسبية الأصغرية:

$$g_0 \geq \left(\frac{2\left|\Delta E_{ij,kl}\right|}{\mu}\right)^{1/2} \qquad (2.119)$$

ويلاحظ أخيراً أن التصادمات من النوع الثاني تعطي من الطاقة ما تأخذه الجملة تحت شكل طاقة حركية (2.114)، ومنه اسم الصدم فائق المرونة super elastic (السرعة النسبية بعد الصدم أكبر).

3.4.2- المقطع الفعال الكلي

حين عرفنا المقطع الفعال التفاضلي، لم نتطرق لمسألة اختيار جملة الإحداثيات. في الحالة العملية تتعلق زوايا المراقبة θ و φ بهذا الاختيار، ومنه يكون المقطع الفعال الكلي $\sigma_0(g)$ غير المتعلق بـ θ أو φ ، وبالمكاملة على الزاوية الصلبة $d\Omega$ يكون لدينا دائماً [26] ما يلي:

$$\sigma\,(g, \theta_o, \varphi_o)\,d\Omega_o = \sigma\,(g, \theta_c, \varphi_c)\,d\Omega_c \qquad (2.120)$$

حيث يشير الدليلان o و c بالترتيب إلى الإحداثيات المرتبطة بالمخبر وبمركز الكتلة.

يكتب المقطع الفعال الكلي إذاً:

$$\sigma_o(g) = \int_0^{\pi}\int_0^{2\pi} \sigma(g, \theta, \varphi)\sin\theta\,d\theta\,d\varphi \qquad (2.121)$$

أو بالأخذ بالحسبان (2.100) يكون:

$$\sigma_o(g) = 2\pi\int_0^{\infty} P_{ij,kl}(g, p)\,p\,dp \qquad (2.122)$$