

- 8. VI 1978

УНИВЕРЗИТЕТ У НОВОМ САДУ

Сп. бр.	Број	Датум	Бројдекс
02	496		

PRIRODNO - МАТЕМАТИЧКИ ФАКУЛТЕТ

Institut za fiziku

Radojica Maksimović

METODI FIZIKE I KRIMINALISTIKA

- doktorska disertacija -

Novi Sad, 1978. g.

Istraživanja koja su izvršena u ovoj disertaciji inspirisao je i vodio dr Lazar Marinkov, redovni profesor Univerziteta u Novom Sadu. Zbog toga mu dugujem iskrenu zahvalnost.

Prilikom analize mogućnosti za primenu metoda teorijske fizike u Kriminalistici imao sam veoma korisne konsultacije sa saradnicima Laboratorije za teorijsku fiziku - Instituta za fiziku u Novom Sadu, pa smatram svojim prijatnim dugom da se i njima zahvalim na saradnji.

S A D R Ž A J
=====

Strana

UVOD	1
----------------	---

PRVA GLAVA

METOD NEUTRONSKE AKTIVACIONE ANALIZE

1. Uvodne napomene	5
2. Neutroni i neutronski izvori	9
3. Neutronска aktivaciona analiza i njene primene	26
4. Neutronска aktivaciona analiza u kriminalističkim istraživanjima	37
5. Eksperimentalna analiza sadržaja mikroelemenata u vlasti kose	65
6. Statističko testiranje uzroka	88

DRUGA GLAVA

METODI STATISTIČKE FIZIKE

1. Uvodne napomene	99
2. Osnovni pojmovi i problemi statističke fizike	101
3. Teorija informacija i statistika	110
4. Neravnotežni statistički operator	118
5. Linearna reakcija sistema i Grinova funkcija	129
6. Spin-orbitalna interakcija i jednoelektronska pobudjenja	141
7. O problemu nelinearne eksitonske populacije	156
8. Statistički metod u istražnom postupku	170
ZAKLJUČAK	191
LITERATURA	196

U V O D

Nauka je u dvadesetom veku doživela veoma brz i intenzivan razvoj. Ovaj razvoj je svakako do-brim svojim delom posledica krupnih društvenih kre-tanja i promena koje su se odigravale u ovom veku. Veliki ratevi zahtevali su usavršavanje vojne te-hnike, a ovo je za sebe povlačilo pojačano finan-siranje naučnih istraživanja i samim tim povećalo njihov intenzitet i rezultate. Perast stanovništva zemlje i sve veća kriza energetskih izvora takođe su odigrali značajnu ulogu u razvoju nauke i naučnih istraživanja, dajući im značaj i karakter kakav do sada u istoriji nisu imali.

Gledano u ovom svetlu nije ni malo čutno da je i fizika kao nauka doživela krupan skok u svom razvoju baš u dvadesetom veku. U ovom veku mukle su nove, fundamentalne fizičke teorije, koje su predsta-vljale pravu revoluciju u čovekovim saznanjima o ma-teriji i njemom kretanju i osobinama. Rezultati fi-zičkih teorija doživeli su veoma brzu praktičnu rea-lizaciju, bitne su uticali i na ishode rateva i na posleratne odnose snaga u svetu. Naravno ovi se re-zultati koriste i koristiće se i u periodima mira za poboljšanje uslova života i rešavanje mnogih pro-bлемa sa kojima se suočava naša civilizacija. Upravo

ovakvi zadaci nauke uopšte i fizike posebno doveli su u poslednjim decenijama do fenomena interdisciplinarnosti i brisanja strogih granica između pojedinih naučnih disciplina. Nauka u izvesnom smislu postaje sve više opšte debro čovečanstva i ove kao da na neki način čini od nauke neku opštu disciplinu u kojoj se prepriču i uzajamno dopunjaju metodi i saznanja iz prividno uzajamne veoma udaljenih oblasti. Danas je teško povući granice između fizike i hemije ili između fizike i biologije, a sutra će možda premaći dubeke veze i analogije između društvenih i prirodnih fenomena, pa će se i naučni metodi iz oblasti izučavanja jednih i drugih tako tesno isprepletati da će i ovde biti teško da se učine stroga razgraničenja.

Korelacije i veze kriminalistike, koju u širem smislu treba shvatiti kao borbu protiv socijalnog zagadivanja čovekove sredine i kao takvu je svrstati u kategoriju društvenih nauka, sa medicinom, biologijem, hemijom i fizikom predstavljuju jedan od tipičnih primera sprezanja društvenih i prirodnih nauka. Za sada je ova veza u izvesnom smislu jednosmerna, jer kriminalistika zajmi i koristi metode i dostignuća prirodnih nauka, ali nije isključeno da će u budućnosti ta veza postati povratna i da će recimo, mešani, fizičko-kriminalistički metodi

inspirisati dalji razvoj fizike. O tome je za sada teško govoriti i u tom smislu se ne mogu davati никакve pouzdane prognoze, ali je i danas jasno da kriminalistička problematika utiče na problematiku i metodologiju fizike na taj način što ih preširuje i što im otvara novo polje primene.

Cilj ovoga rada je da se odaberu oni metodi fizike koji bi mogli da odigraju značajnu ulogu u razvoju kriminalistike i mjenih metoda, i da se na primerima demonstrira njihova efikasnost. Ovo, naravno, nije ni prvi ni poslednji pokušaj u tom smislu, i ne treba ga shvatiti drugačije do kao jedan od mnogobrojnih priloga opštem povezivanju ova dva vida istraživanja. Trudili smo se da testiramo mogućnosti primene u kriminalistici majsavremenijih metoda fizike. Pri tome su uzeti u obzir i teorijski i eksperimentalni metodi. Od eksperimentalnih metoda odabrali smo metod neutronske aktivacione analize, koji zbog svoje izvanredne velike osjetljivosti može da odigra veoma značajnu ulogu u kriminalističkim problemima identifikacije ličnosti i praćenja i otkrivanja tragova. Od disciplina teorijske fizike odabrana je statistička fizika koja se zbog svoje informacijske prirode najlakše može povezati sa kriminalističkom problematikom.

Što se tiče neutronске aktivacione analize akcenat istraživanja stavljen je na ispitivanje mogućnosti identifikacije ličnosti na osnovu prirodnog sadržaja mikroelemenata u vlasni kose. Metodi teorijske fizike korišćeni su dvojake. S jedne strane ispitani su neki novi efekti koji se mogu očekivati u optički aktivnim materijalima i u alkalmim primesama i razmotrena je mogućnost njihove primene u borbi protiv infracrvene špijunaže i u proceduri identifikacije. S druge strane, napravljene su izvesne analogije između pojava statistike i kriminalistike, pa se na bazi ovih analogija pokušalo da se pronađu i definišu izvesni statistički prilazi u istražnom postupku. Neobično se moglo reći da se u svim pokušajima u potpunosti uspele i da su data gotova rešenja za sve pomenute probleme, ali ipak ostaje konstatacija da je izvestan korak napred učinjen. Taj korak će biti utoliko veći i značajniji ukoliko ovde izvršena istraživanja budu poslužila kao inspiracija za dalje napore da se fizika i kriminalistika čvršće i efikasnije povežu.

P R V A G L A V A

METOD NEUTRONSKE AKTIVACIONE ANALIZE1. Uvodne napomene

Izvanredno brz razvoj fizike u XX veku do-
prineo je da oblast primene njenih metoda i rezul-
tata daleko prevaziđe ne samo granice fizičkih fe-
nomena, već i granice naučnih istraživanja u užem
smislu. Fizički metodi su se odavno preselili iz
fizičkih i čisto naučnih laboratorijs u gotove sve
oblasti ljudskog života i delovanja. Primenuju se
u industriji i poljoprivredi, ali i u medicini, bio-
logiji i psihologiji, a u poslednje dve decenije i
u čisto sociološkim problemima. Radi se o tome da
kriminal, koji se u najširem smislu može shvatiti
kao socijološko zagađivanje čovekove sredine, mora
da se suzbija svim raspolozivim sredstvima, a fizi-
čki metodi, međutim, sredstvima mogu da igraju ne
malu ulogu. Zbog toga su fizički rezultati i metodi
našli svoje mesto i ulogu u kriminalistici i pravno-
sudskim naukama (forensic sciences - izraz uzet iz
engleske literature) gde njihov značaj i primena vre-

menom postaju sve veći.

U kriminalistici se mogu koristiti kako metodi eksperimentalne fizike, tako i njeni teorijski metodi. Do sada su, što je i razumljivo, metodi eksperimentalne fizike brže i dublje pridrli u domen kriminalističkih istraživanja, ali ne bi trebalo podcenjivati ni šanse teorijske fizike i njenih metoda. Ako ni zbog čega drugoga ono zbog izuzetno čvrste povezanosti teorije i eksperimenta u fizici. Ova povezanost je osnovni preduslov napretka fizike, a samim tim i proširenja oblasti njene primene i povećanja efikasnosti njenih metoda. U ovoj glavi analiziraćemo neke primene metoda eksperimentalne fizike u kriminalistici. Sledеća glava biće posvećana metodima teorijske fizike i mogućnostima njihovog povezivanja sa kriminalističkim istraživanjima.

Bilo bi iluzorno i pokušati da se ^Uokvirima jednog ovakvog rada izvrši analiza svih aplikacija metoda eksperimentalne fizike u kriminalistici, jer su ove aplikacije mnogobrojne i veoma raznovrsne. U balističkim istraživanjima primenjuju se metodi mehanike, teorije fluida i termodinamike.

U drugim kriminalističkim ekspertizama našli su svoju posrednu ili neposrednu primenu elektromagnetizam, optika i akustika, ali najveću i najraznovrsniju primenu imaju metodi savremene fizike, koji izučavaju fenomene mikrosveta. Razvoj atomske i nuklearne fizike i fantastično usavršavanje aparatura i metodike eksperimentalnog istraživanja, pojava u mikrosvetu trasirali su širok put primene fizike u kriminalističkim istraživanjima. U kriminalistici se uveliko koriste elektronski mikroskopi, zatim metodi rentgenske spektroskopije i neutronske difrakcije. Takođe su široku primenu našli infra-crvena, vidljiva i ultra-violetna spektrometrija. Laserska tehnika takođe nalazi svoje mesto u kriminalističkim istraživanjima, tako da se danas bez lasera ne može ni zamisliti ni jedna bolje opremljena kriminalistička laboratorija.

Čini se ipak, da metodi aktivacione analize predstavljaju onu oblast fizike koja se najadekvatnije i najpotpunije može ukloniti u potrebe i problematiku kako kriminalistike, tako i sudskih nauka uopšte. Metodi aktivacione analize u kojima se

na bazi veštački izazvane radioaktivnosti mogu detektovati izvanredno male količine primesa u osnovnoj supstanci, predstavljaju najpouzdanije sredstvo otkrivanja tragova i identifikacije, pa kao takvi mogu da igraju veoma važnu ulogu prilikom prikupljanja dokaznog materijala za krivično-sudski postupak. Ovo tim pre što primena aktivacione analize nije ograničena ni kvantitativno ni vremenski. Tako na primer, ako se radi o ubistvu trovanjem, onda se metodama aktivacione analize mogu registrovati isčezavajuće male količine toksične supstance (10^{-7} - $10^{-14}\%$) i to godinama pa i decenijama posle izvršenog trovanja.¹⁾ Aktivacija supstanci može se vršiti na različite načine: α , β , γ -zracima, protonima, deuteronima, ali se najčešće vrši neutronima. Za ovo ima više razloga, a osnovni su ti, što se u reaktorima mogu dobiti izvanredno veliki fluksevi neutrona i što neutroni imaju relativno veliki presek za zahvat, pa se pomoću njih aktivacija najlakše postiže.

U svojim istraživanjima ograničićemo se na metod neutronske aktivacione analize. Materijal gve glave je tematski podeljen na tri dela. U prvom će biti izložene osnovne karakteristike neutrona kao i različiti metodi za dobijanje neutronskih flukseva.

Takođe će biti date osnove metoda neutronske aktivacione analize i pregled mogućnosti primene ovoga metoda. Drugi deo je posvećen različitim primenama neutronske aktivacione analize u kriminalistici i pravno-sudskim naukama. U trećem delu biće dati rezultati istraživanja koje smo izvršili u Institutu "Boris Kidrič" u Vinči i u Institutu za fiziku Prirodno-matematičkog fakulteta u Novom Sadu. Ova istraživanja odnose se na mogućnost identifikacije ličnosti na osnovu analize mikroelemenata u vlasima kose, pri čemu su metodima neutronske aktivacione analize ispitivani i prirodni sadržaj mikroelemenata u vlasima i uticaj okoline na kontaminaciju vlasa, usled čega može da dođe do promene sastava i odnosa mikroelemenata.

2. Neutroni i neutronski izvori

Hipotezu o postojanju elementarne, elektro-neutralne čestice u jezgru dao je još 1920. Rutherford. Više od deset godina ova Rutherfordova hipoteza nije mogla biti eksperimentalno potvrđena, ali su se početkom tridesetih godina pojavili eksperimenti koji su ukazivali na ispravnost Rutherfordove hipoteze. Godine 1930. Bode i Beker²⁾ su utvrdili da pri ozračivanju nekih lakih elemenata (litijum, berilijum,

bor, fluor) -česticama polonijuma nastaje zračenje koje se odlikuje izuzetno slabom apsorbcijom. Nešto kasnije³⁾ Irena Kiri i Frederik Žolio su konstatovali da zračenje koje su otkrili Bote i Beker stvara protone sa energijom od oko 5 Mev u slojevima parafina koji se nalazi na njihovom putu ili u drugim supstancama koje sadrže vodonik. Svi ovi fenomeni su u početku pripisivani γ -zracima izvanredne prodornosti. Pravu prirodu i sastav ovog zračenja otvio je Čedvik^{4,5)} posle niza eksperimenata, koje je vršio tokom 1932-1933. godine. On je konstatovao da se zračenje sastoји od nenaelektrisanih čestica sa masom koja je bliska masi protona. Čedvik je ove čestice nazvao neutronima. Uskoro posle toga dokazano je da neutroni zajedno sa protonima ulaze u sastav atomskog jezgra.⁶⁻⁹⁾ Masa neutrona iznosi $1,67470 \times 10^{-24}$ gr ili 939,505 Mev. Pošto nisu nenelektrisani, neutroni veoma slabo interaguju sa elektronskim omotačem i ne izazivaju ionizaciju atoma ili molekula. Ovo isključuje mogućnost za neposredno registrovanje neutrona ionizacionim metodima koji se primenjuju za nenelektrisane čestice, jer oni ne daju struju u ionizacionim komorama, ne stvaraju lavine u brojačima i ne ostavljaju tragove u Wilsonovoj komori ili u fotoemulziji. Ali bez obzira na sve to, neutrone nije teško detektovati posredno, tj. preko nenelektrisa-

nih čestica ili γ -zrakova koji nastaju prilikom reakcije neutrona sa atomskim jezgrima.

U nuklearnim procesima neutroni igraju veoma značajnu ulogu. Zahvaljujući činjenici da su nenaelektrisani, oni lako prodiru u atomska jezgra i u njima izazivaju najraznovrsnija reakcije. Karakter ovih reakcija u velikoj meri zavisi od energije upadnih neutrona, pa je zato celishodno da se izvrši njihova klasifikacija po energijama (ustvari po brzinama, jer se radi o kinetičkoj energiji upadnih neutrona). Prema energijama neutroni se mogu podeliti na nekoliko grupa.¹⁾ Treba ipak naglasiti da se granice u ovoj klasifikaciji ne smeju povući suviše opštro i da izvesna energetska tolerancija mora da se uzme u obzir. Ovde ćemo navesti danas usvojenu podelu: (vidi tablicu 1.).

Termalni, rezonantni i srednje brzi neutroni se ponekada nazivaju zajedničkim imenom spori neutroni. Aktivaciona analiza se obično vrši sporim neutronima, a ponekad i brzim. Hladni i super brzi neutroni se ne koriste u analizama ovog tipa.

Osnovni tipovi interakcije neutrona sa atomskim jezgrom nastaju prilikom sudara neutrona i jezgra.

Tablica 1

Naziv	Energetski interval
HLADNI NEUTRONI	MANJE OD 0,005 eV
TERMALNI NEUTRONI	IZMEĐU 0,005 i 0,4 eV
REZNANTNI ili SUPER-KADIJUMSKI NEUTRONI	IZMEĐU 0,4 i 10000 eV
SREDNJI BRZI NEUTRONI	IZMEĐU 1keV i 500 keV
BRZI NEUTRONI	IZMEĐU 0,5 MeV i 50 MeV
SUPER BRZI NEUTRONI	VIŠE OD 50 MeV

Prilikom sudara neutron može da bude skrenut sa svojeg puta dejstvom nuklearnih sila, ali se može desiti da ga jezgro zahvati i da dođe do formiranju novog jezgra. Prvi pomenuti proces pri kome se ne menjaju sumarna kinetička energija jezgra i neutrona, predstavlja de facto proces elastičnog rasejanja. Elastično rasejanje ima veoma važnu ulogu prilikom usporavanja neutrona.

Drugi proces, u kome jezgro zahvata neutron, je složeniji od elastičnog rasejanja i može da doveđe do čitavog niza nuklearnih transformacija. Posle zahvata neutrona jezgro se nalazi u pobuđenom stanju i spontano teži da pređe u stanje niže energije. Ovaj prelaz u niže energetsko stanje može da se vrši na razne načine. Prema tipu raspada složenog jezgra koje nastaje prilikom zahvatanja neutrona mogu se izdvojiti sledeći procesi:

1. Radijacioni zahvat (n, γ)
2. Emisija nanelektrisanih čestica (n, p) i (n, α)
3. Neutronska emisija $(n, 2n)$
4. Fisija (deoba) jezgra (n, f)
5. Neelastično rasejanje (n, n') .

Radijacioni zahvat je osnovni proces prilikom interakcije sporih i (delimično) srednje sporih neutrona sa jezgrima elemenata. U oblasti brzih neu-

trona presek za radijacioni zahvat je zanemarljivo mali. Jezgro koje se obrazuje prilikom radijacionog zahvata prelazi u osnovno stanje putem emisije jednog ili više γ kvanata i to za vreme od oko 10^{-14} sec. Svaki izotop u ovakvom prelazu emituje karakterističan i obično veoma složen spektar γ zračenja. Ovu reakciju možemo simbolički predstaviti kao:

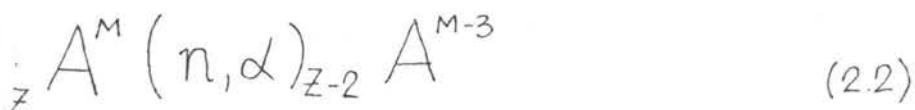
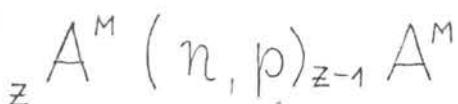


gde su Z i M redni broj i atomska težina, respektivno. Izotop $_{Z}^{A^{M+1}}$ ozračenog elementa $_{Z}^{A^M}$ je često stabilan, ali je mnogo češći slučaj kada prilikom radijacionog zahvata nastaju radioizotopi. Pošto ovi radioizotopi imaju višak neutrona oni najčešće trpe β^- raspad. Ređe dolazi do β^+ raspada ili do K-zahvata.

Pošto za izletanje nanelektrisanih čestica iz jezgra postoji potencijalna barijera (da bi izletela iz jezgra, nanelektrisana čestica mora da ima energiju veću od nekog određenog energetskog praga - "gep-a"), to procesi emisije nanelektrisanih čestica (n, p) i (n, α) najčešće nastaju posle zahvata brzin neutrona. Preseci za reakcije (n, p) i

(n, α) veći su kod lakih i srednjih jezgara nego kod teških. Za energije neutrona od 14 Mev presek se kreće od 0,1 barna za laka i srednja jezgra i opada do 0,001 barna za teška.

Jezgra dobijena u ovim reakcijama



raspolažu viškom neutrona i najčešće su β^- radioaktivna.

Za emisiju neutrona iz jezgra, tj. za reakciju



takođe je potrebno da se prevaziđe neki prag energije. Za većinu jezgara ovaj prag se nalazi u oblasti 6-12 Mev. Presek za ovu reakciju raste od lakih ka teškim jezgrima i to od 0,001 barna do 1-2 barna kada je $Z > 50$. Kao rezultat ove reakcije nastaju izotopi koji su deficitarni neutronima i zato su najčešće β^+ radioaktivni.

Fisija ili deoba jezgra nastaje kada se teška jezgra U^{235} i U^{233} zrače sporim neutronima. Istu pojavu mogu da izazovu kod U^{238} i U^{232} srednje brzi neutroni. Proces fisije se sastoji u tome što se teško jezgro podeli na dva dela približno iste mase (atomska težina ovih delova leži otprilike u intervalu između cinka i kadmijuma) uz oslobođanje novih neutrona. Produkti fisije obično imaju višak neutrona i zato su najčešće β^- radioaktivni. Ovde treba pomenuti i proces spalacije tj. proces raspadanja teškog jezgra na veliki broj lакih fragmenata. Do ovoga procesa dolazi pod uticajem brzih i superbrzih neutrona.

Tokom procesa neelastičnog rasejanja neutron odaje deo svoje energije i ona ide na pobuđivanje jezgra, ali sam neutron ne ostaje u jezgru. Neelastično rasejanje nastaje pri energijama od oko 1 Mev i presek za ovaj proces iznosi 0,6-3 barna. Pri prelasku iz pobuđenog u osnovno stanje jezgro najčešće ispušta svoje karakteristično γ zračenje, pa se na osnovu tipa γ zračenja može konstatovati o koome se tipu jezgra radi.

Ovaj pregled raznih tipova reakcija neutrona sa jezgrom i analiza posledica peakcije su neophodni, jer upravo na posledicama reakcije možemo da

registrujemo mikroelemente i primese koje nas interesuju.

Već više puta smo napomenuli da neutroni imaju veoma veliki presek za zahvat. Ovaj presek ponekad nekoliko hiljada puta prevazilazi geometrijski presek jezgra. Zbog toga su neutroni veoma pogodni aktivatori. Naravno, veličina preseka u mnogome zavisi i od tipa jezgra i od energije upadnih neutrona. Efikasni presek za zahvat neutrona je obrnuto proporcionalan kvadratnom korenju iz njegove energije tj. obrnuto je proporcionalan njegovoј brzini (zakon "1/v"). Ako je energija upadnog neutrona bliska energiji nekog od energetskih nivoa jezgra onda dolazi do rezonantnog zahvata neutrona. Formulu za presek rezonantnog zahvata dali su Brajt i Vigner¹⁰⁾ i ona ima sledeći oblik:

$$\tilde{\sigma} = g \cdot \frac{\lambda \chi^2}{4\pi} \cdot \frac{\Gamma^2}{(E - E_\chi)^2 + \frac{1}{4} \Gamma^2} \quad (2.4)$$

Ovde je $\tilde{\sigma}$ presek za zahvat, $\lambda = \frac{\hbar}{mv}$ je de Broglji-jeva talasna dužina neutrona koja za spore neutrone iznosi $(10^{-8} - 10^{-10}) \text{ cm}$, χ je radijus jezgra, Γ je širina pobuđenog nivoa, E je energija neutrona, a E_χ energija rezonantnog nivoa jezgra. Faktor g zavisi od spinova polaznog jezgra i jezgra nastalog posle za-

hvata i to po sledećoj formuli:

$$\mathcal{J} = \frac{2I + 1}{2(2J+1)} \quad (2.5)$$

gde je I spin polaznog jezgra, a J spin jezgra posle zahvata neutrona.

U tablici 2. date su rezonantne energije i širine linija za neke elemente. (vidi tablicu 2.)

Tablica 3. daje rezonantne preseke da zahvat termalnih neutrona σ_c i totalne preseke za reakciju sa jezgrom σ_t (vidi tablicu 3.).
Obe tablice uzete su iz reference ¹¹).

U tablici 4. uzetoj iz ¹²) dato je poređenje eksperimentalno nađenih preseka za zahvat i preseka izračunatih na osnovu Brajt-Vignerove formule. (vidi tablicu 4.)

Pošto neutroni imaju veliku primenu u mnogim oblastima fizike i tehnike velikapažnja je posvećena istraživanju različitih neutronskih izvora. Neutroni nastaju u različitim tipovima nuklearnih reakcija, pa se elementi koji učestvuju u reakcijama

TABLICA 2

REZONANTNE ENERGIE SPOŘÍH NEUTRONUA

JEZGRO	E_r [eV]	Γ_r [eV]	JEZGRO	E_r [eV]	Γ_r [eV]
⁵⁵ Mn	345	0,2	¹⁷⁷ Hf	1,08	0,12
⁵⁹ Co	123	0,3	¹⁸¹ Ta	2,34	0,16
⁷⁵ As	46	0,05	—	6,1	0,2
Br	36	(0,1)	—	10,3	(0,1)
¹⁰³ Rh	1,26	0,20	—	13,6; 20	0,07
¹⁰⁷ Ag	15,9	~ 0,11	¹⁸² W	4,15	(0,1)
¹⁰⁸ Ag	5,17	0,16	¹⁸³ W	7,8	0,15
¹¹³ Cd	0,176	0,115	¹⁸⁶ W	19,25	—
¹¹⁵ In	1,45; 3,85; 9	0,08	¹⁸⁵ Re	4,4; 11	0,14
¹¹⁷ In	5,8; 15	(0,1)	¹⁸⁷ Re	2,15	—
¹¹⁹ Sb	19,4	0,45	¹⁹³ Tl	5,9; 72	~ 0,15
¹⁴⁹ Sm	0,096	0,074	¹⁹⁷ Au	1,27	* 0,15
¹⁵⁵ Eu	0,47	0,20	U	4,78	* 0,15
¹⁵⁷ Gd	0,028	0,12	Dy	6,5; 14	
	1,74	(0,1)			

TABLICA 3 EFIKASNI PROCESI ZAROBLJAVANJA σ_c I TO-TALNI σ_t ZA TERMALNE NEUTRONE (0,025eV) (U BARNI)

ELEMENAT	σ_c	σ_t	ELEMENAT	σ_c	σ_t	ELEMENAT	σ_c	σ_t
1H	0,332	38	Ga	2,8	6,8	Ba	1,2	9,2
2D	$4,6 \cdot 10^{-4}$	7	Ge	2,45	5,5	La	9,3	-
9Be	0,01	7	^{75}As	4,3	10,3	Ce	0,73	-
B	755	759	Se	12,3	23,3	^{149}Pr	11,6	-
C	$3,4 \cdot 10^{-3}$	4,8	Br	6,7	12,7	Hd	46,2	-
N	1,88	12	Kr	31	38,2	Sm	5600	-
O	$< 2 \cdot 10^{-4}$	4,2	Rb	0,73	-	^{149}Sm	40800	-
^{23}Na	0,5	4,5	Sr	1,21	11,2	^{154}Sm	~ 10000	-
Mg	0,063	3,6	^{39}Y	1,31	-	Eu	4300	-
^{27}Al	0,023	1,4	Zr	0,18	8	Gd	46000	-
Si	0,16	1,8	^{93}Nb	1,15	6,1	^{155}Gd	~ 61000	-
^{31}P	0,2	5,2	Mo	2,7	9,7	^{157}Gd	~ 240000	-
S	0,52	1,6	^{99}Tc	22	-	Dy	950	1050
Cl	33,6	49,6	Ru	2,56	8,6	Hf	105	113
A	0,66	2,1	^{103}Rh	156	161	Ta	21	26
K	2,07	3,5	Pd	8,0	11,6	W	19,2	24,2
Ca	0,44	-	Ag	63	69	Re	86	100
^{45}Sc	24	48	Cd	2450	-	Os	15,3	-
Ti	5,8	10	^{113}Cd	20000	-	Ir	440	-
V	4,98	10	In	196	198	Pt	8,8	18,8
Cr	3,1	6,1	Sn	0,62	4,6	^{197}Au	98,8	108
^{25}Mn	13,2	15,5	Sb	5,7	10	Hg	380	400
Fe	2,53	13,5	Te	4,7	9,7	Tl	3,4	17,4
^{59}Co	37,0	44	^{127}I	7,0	10,6	Pb	0,17	11,2
Ni	4,8	22,3	^{124}Xe	74	-	^{209}Bi	0,034	9
Cu	3,77	11	^{135}Xe	$2,7 \cdot 10^6$	-	^{232}Th	7,56	-
Zn	1,10	4,7	^{133}Cs	29	-	U	7,68	-

TABLICA 4

POTPUNI EFIKASNİ PRESECI NEKIH ELEMENATA ZA SPORE NEUTRONE (3,51)

Z	TERMİČKİ NEUTRONİ G BARN	REZONANTNA APSOPPCİJA		IZRAČUNAT PRESEK	
		Erev	Sr BARN	g	Sr BARN
5B	710	—	—	5/8	540
23Na	0,48	330	550	1/2	4400
25Mn	12,6	345	4500	9/16	12200
27Co	39	123	12500	—	—
45Rh	149	1,3	1800	—	—
48Cd	2410	0,18	7200	—	—
49In	190	1,44	26400	—	—
62Sm	18000	0,096	15500	—	—
63Eu	4700	0,011 0,465	5570 >5670	—	—
64Gd	48000	0,028	45000	—	—
66Dy	1180	1,7	370	—	—
		5,5	300	—	—
72Hf	143	1,1 1,2	3300 3400	—	—
74W	17	19,3	90000	1	136000
77Ir	400	0,65 1,25	3500 2700	—	—
80Hg	425	—	—	—	—

u kojima nastaju neutroni nazivaju izvorima neutro-
na. Najkarakterističniji i najčešći izvori neutrona
navedeni su u tablici 5.(vidi tablicu 5.).
Prinosi za neutrone koji nastaju dejstvom radioakti-
vnih zrakova dati su u tablici 5. za 1 gr. Be ili
 D_2O i rastojanje od 1 cm od izvora. Vrednosti u po-
slednje dve kolone date su prema Feldu ⁽³⁾.

Fisija, koja se odvija u nuklearnim reakto-
rima je najčešći i najviše korišćeni izvor neutrona.
U današnje vreme postoji mnogo različitih tipova re-
aktora koji se, pored ostalog, razlikuju i po neutron-
skom fluksu. Ovde ćemo nabrojati neke najkarakteri-
stičnije tipove i njihove osobine.

Prvi američki reaktor, koji je konstruisao
Fermi, imao je kao gorivo 6 tona metalnog urana i 40
tona UO_2 . Moderator je bio grafit (385 tona) a regu-
lacione ploče bile su od bronce koja je bila prevu-
čena kadmijumom. Snaga ovog reaktora iznosila je
100 W, dok mu je neutronski fluks iznosio 4×10^6
neutrona na cm^2 u sekundi. Prvi reaktor koji je ra-
dio sa prirodnim uranom (10 tona metala) i teškom
vodom kao moderatorom (17 tona teške vode) konstru-
isan je u Shalk River-u u Kanadi. Posle izvesnih
prepravki reaktor je dostigao snagu od 30 MW i neu-

TABLICA 5

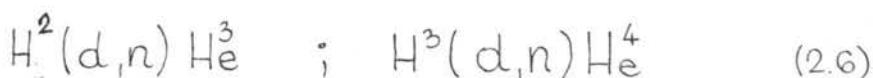
NEUTRONSKI IZVORI

IZVOR	NUKLEARNA REAKCIJA	VРЕМЕ РАСПАДА	ENERGIЈА НЕУТРОНА (MeV)	ПРИНОС У 10^4n/C/sec.
Be+Ra	$^9\text{Be} + ^4\text{He} = ^{12}\text{C} + n$	1620 god.	MARSIMALNI ИНТЕНЗИТЕТ НА 4	1700
Be+Rn (α)		3,825 d		1500*
Be + Ra (γ)	$^9\text{Be} + \gamma = ^{24}\text{He} + n$	1620 god	MARSIMALNI ИНТЕНЗИТЕТ НА 4	
Be + Po	$^9\text{Be} + ^4\text{He} = ^{12}\text{C} + n$	138 d.	ИНТЕНЗИТЕТ НА 3-5	300
B + Ra (α)	$^{10}\text{B} + ^4\text{He} = ^{13}\text{C} + n$	1620 god	MARSIMALNI ИНТЕНЗИТЕТ НА 3	680
D ₂ O + Ra (γ)	$^2\text{D} + \gamma = ^1\text{H} + n$	"	MARSIMALNI ИНТЕНЗИТЕТ НА 0,12	0,1
D ₂ O + D	$^2\text{D} + ^2\text{D} = ^3\text{He} + n$		MINIMUM 2,45	
Li + D	$^7\text{Li} + ^2\text{D} = ^2\text{H} + ^4\text{He} + n$		" 13,3	$10^8 - 10^{10}$
Li + H	$^7\text{Li} + ^1\text{H} = ^7\text{Be} + n$		" 29,4	n/sek.
Be + ¹²⁴ Sb	$^9\text{Be} + \gamma = ^{24}\text{He} + n$	60 d.	0,024	100
Be + ²⁴ Na	"	14,8 č.	0,83	13
D ₂ O + ²⁴ Na	$\text{D} + \gamma = ^1\text{H} + n$	"	0,22	27
Be + ¹⁴⁰ La	$\text{Be} + \gamma = ^{24}\text{He} + n$	40 d.	0,62	0,8
U + n	FISIЈА (REAKTOR)		KOMPLEKSНО	$(10^{10} - 10^{14})$ $n/\text{cm}^2/\text{sek.}$

* ПРИНОСИ ЗА NEUTRONE KOЈИ NASTAJU DEЈSTVOM ZRAKA DATI
SU ZA 1g Be ili D₂O I RASTOJANJE 1m OD IZVORA. ВЕЋИНА
ВРЕДНОСТИ U POSLEDNJE DVE KOLONE SU DATE PREMA FELDU.

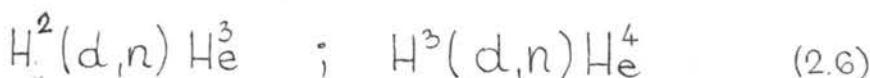
tronski fluks 7×10^{13} n/cm²/sec. Sovjetski reaktori (jedan od njih se nalazi i kod nas u Institutu "Boris Kidrič" u Vinči) su srednje snage - od 5 do 10 MW-i fluks im je reda veličine 10^{13} n/sm²/sec. U ovim reaktorima se koristi metalni uran kao gorivo, a kao moderator služi grafit ili teška voda.

Reaktori kao generatori neutrona imaju to preim秉stvo da daju veoma jake neutronske flukseve čija je gustina praktično konstantna u vremenu. Ipak, zbog glomaznosti reaktora i neophodnosti zaštite od zračenja, domen njihove primene za potrebe neutronske aktivacione analize je ograničen. Zbog toga se radi-lo na konstrukciji malih i relativno jeftinih neutron-skih generatora. Pojava ovih generatora veoma je uticala na razvoj neutronske aktivacije kao metoda kvantitativne i kvalitativne analize. Nisko voltažni neutronski generatori su prenosni, relativno jeftini i njima se veoma lako rukuje. Tokom rada ovi generatori ne emituju γ zrake tako da zaštita i obezbeđenje personala koji njima rukuje nisu potrebni. Ova osobina kao i njihove male dimenzije čine ih pogodnim za transport sa mesta na mesto, pa samim tim, u izvesnom smislu, obezbeđuje mogućnost analize "na licu mesta". Za dobijanje neutrona u ovim generatorima koriste se dve egzoenergetske reakcije interakcije deuterijuma sa deuterijumom ili deuterijuma sa tricijumom:



U ovim reakcijama dobijaju se brzi monohromatski neutroni sa energijama od 2,8 Mev (za prvu od reakcija) i 14,5 Mev (za drugu navedenu reakciju). Deuteroni se ubrzavaju direktno u konstantnom električnom polju. Naponska razlika na akceleratorskoj cesti iznosi najviše 200 Kv, tako da konstrukcija izvora za ovakav napon nije teška a njihove dimenzije mogu da budu i veoma kompaktne. Neutronski fluksevi ovih generatora iznose oko 10^7 - 10^8 neutrona po kvadratnom santimetru u sekundi i to za usporavane neutrone. Direktan fluks neusporavanih neutrona može da bude za dva do tri reda veličine veći. Ozbiljan nedostatak ovakvih neutronskih generatora je brzo smanjivanje intenziteta fluksa zbog gubitka deuterijuma ili tricijuma na meti. Ovi nedostaci se mogu otkloniti konstrukcijom termički stabilnih meta ili primenom autosaturacije mete, što produžuje radni vek ovakvih generatora.

Na kraju, kao izvori neutrona mogu da se koriste akceleratori elektrona i akceleratori jona. Tako naprimer linearni akcelerator elektrona sa tantalovom metom može da proizvede neutronske flukseve



U ovim reakcijama dobijaju se brzi monohromatski neutroni sa energijama od 2,8 Mev (za prvu od reakcija) i 14,5 Mev (za drugu navedenu reakciju). Deuteroni se ubrzavaju direktno u konstantnom električnom polju. Naponska razlika na akceleratorskoj cevi iznosi najviše 200 Kv, tako da konstrukcija izvora za ovakav napon nije teška a njihove dimenzije mogu da budu i veoma kompaktne. Neutronski fluksevi ovih generatora iznose oko 10^7 - 10^8 neutrona po kvadratnom santimetru u sekundi i to za usporavane neutrone. Direktni fluks neusporavanih neutrona može da bude za dva do tri reda veličine veći. Ozbiljan nedostatak ovakvih neutronskih generatora je brzo smanjivanje intenziteta fluksa zbog gubitka deuterijuma ili tricijuma na meti. Ovi nedostaci se mogu otkloniti konstrukcijom termički stabilnih mete ili primenom autosaturacije mete, što produžuje radni vek ovakvih generatora.

Na kraju, kao izvori neutrona mogu da se koriste akceleratori elektrona i akceleratori jona. Tako naprimer linearni akcelerator elektrona sa tantalovom metom može da proizvede neutronske flukseve

od 10^{10} neutrona po kvadratnom santimetru u sekundi. U akceleratorima teških jona najbolje je koristiti berilijumske mete. Za dovoljno debele mete takođe mogu da se postignu jaki fluksevi reda 10^9 - 10^{10} neutrona u sekundi po mikroamperu upadnog snopa.

Za potrebe neutronske aktivacione analize, najcelishodnije je, po našem mišljenju, dalje usavršavanje neutronskega generatora malih dimenzija, jer njihova transportabilnost može u značajnoj meri da poveća efikasnost primene neutronske aktivacione analize. Ovo naročito važi za primene neutronske aktivacione analize u kriminalistici, gde smo ponekad prinuđeni da radimo brzo i na samom mestu učinjenog prekršaja.

3. Neutronska aktivaciona analiza i njene primene

Neutronska aktivaciona analiza koristi se u onim slučajevima kada zbog malih količina primesa u ispitivanom uzorku obični analitički metodi ne mogu da nam pruže informaciju ni o prisustvu primesa ni o njihovoj količini. Gruba šema neutronske aktivacione analize može se predstaviti na sledeći način.

Uzorak se zrači neutronima, koji aktiviraju primese (mikroelemente) u uzorku. Ovi aktivirani mikroelementi postaju radioaktivni i emituju neko svoje karakteristično zračenje (najčešće γ). Pomoću detektora registruje se vrsta i intenzitet zračenja i dobijeni rezultati mogu da daju odgovor i o kom se mikroelementu radi i u kojoj se količini on nalazi u ispitivanom uzorku.

Masa ispitivanog elementa izračunava se po sledećoj formuli:

$$m_A = \frac{M_A}{\Phi \tilde{\sigma}_A N \alpha_A (1 - e^{-\lambda_B t})} \left(\frac{dN_B}{dt} \right) \quad (3.1)$$

Oznake upotrebljene u (3.1) su sledeće: m_A je masa ispitivanog elementa (primese), M_A je njegova molekulska težina, $\left(\frac{dN_B}{dt} \right)$ je aktivnost nastalog radioizotopa, Φ je fluks neutrona koji je izazvao aktivaciju, $\tilde{\sigma}_A$ je presek za zahvat neutrona, λ_B je konstanta radioaktivnog raspada nastalog radioizotopa, t je vreme ozračivanja neutrona, N je Avogadrov broj i α_A je izotopska obilnost elemenata.

Kao što je već podvučeno, metodom neutronske aktivacione analize mogu se registrovati izvanredno male količine primese. Tako se, na primer, u reaktorima čiji je neutronski fluks 10^9 - 10^{10} n/ $\text{sm}^2/\text{sec.}$ ⁴⁻¹⁸⁾

mogu odrediti primeće od 5×10^{-6} gr. mangana u Al_2O_3 , 10^5 gutehnecijumu (Tm) u spektroskopski čistom Eu_2O_3 , 4×10^{-6} gr. natrijuma i 2×10^{-6} gr., bakra u aluminujumu čistoće 99,998%, 10^{-5} - 10^{-6} gr. bakra, mangana, nikla, kobalta i arsena u gvožću velike čistoće, 10^{-5} - 10^{-6} gr., reniju-ma u meteoritima i manje od 10^{-9} gr. iridijuma u uzorku platine.

Pored izvanredno velike osetljivosti metod neutronske aktivacione analize ima i jedno veoma važno preim秉stvo u odnosu na druge analitičke metode. Pošto se zasniva na nuklearnim reakcijama i nuklearnim karakteristikama pobuđivanja, ovaj metod analize nije osetljiv na hemijsko stanje elemenata koji ispitujemo, u uzorku u kome se nalazi, tj., potpuno je svejedno da li je on hemijski vezan za uzorak ili nije. Takođe nije važno kako je on vezan za uzorak, ukoliko je on hemijski vezan. Prema tome sama registracija prisustva elemenata ne zahteva nikakva dopunska hemijska prepariranja uzorka pre analize.

Neutronska aktivaciona analiza može da se vrši termalnim, rezonantnim i brzim neutronima. Ova klasifikacija je u prvom redu uslovljena velikim razlikama u karakteru interakcije pomenutih energetskih grupa neutrona sa materijom.

Ozračivanje termalnim neutronima je bez sva-
ke sumnje osnovni metod aktivacione analize. Njegovo
preim秉stvo sastoji se u tome što prilikom ozračiva-
nja termalnim neutronim uglavnom protiče jedna reak-
cija - radijacioni zahvat (n,γ). Većina dobijenih
radioizotopa trpi β^- raspad koji je praćen γ
zračenjem i ovakvi radioizotopi mogu se formirati
za gotovo sve elemente periodnog sistema. To drugim
rečima znači da je metod aktivacije termalnim neutro-
nima praktično univerzalan, jer se njime mogu regi-
strovati primese gotovo svih elemenata periodnog si-
stema. Osim toga preseci za radijacioni zahvat (n,γ)
su često veoma veliki, što opet dovodi do veoma ve-
like osetljivosti metoda.

Aktivaciona analiza u kojoj se koriste rezonantni neutroni ima mnogo zajedničkog sa aktivacionom analizom koja se vrši termalnim neutronima. U prvom redu zbog toga što je radijacioni zahvat osnovna reakcija pri ozračivanju rezonantnim neutronima kao i u slučaju ozračivanja termalnim neutro- nima. Preim秉stvo aktivacije rezonantnim neutronima sastoji se u tome što funkcija aktivacije za određene energije neutrona i određene elemente ima izrazi- te pikove, a to s druge strane znači da je kod ne- kih elemenata presek za zahvat rezonantnih neutrona

daleko veći nego što uopšte može da bude presek za zahvat termalnih neutrona. Iz ovog odmah sledi selektivnost kao osnovno preim秉stvo neutronske aktivacione analize rezonantnim neutronima. To znači da pomoću rezonantnih filtera možemo odabrati onu energetsku grupu neutrona koja je rezonantna sa nivoima nekog određenog elementa, pa ozračivanjem ispitivati da li je taj element prisutan u uzorku.

Kod brzih neutrona presek za radijacioni zahvat je veoma mali, tako da osnovnu ulogu igraju reakcije sa "pragom" tj. (n, p) , (n, α) , $(n, 2n)$ i (n, n') . Prag za pomenute reakcije je rada veličine nekoliko megaelektronvolti. Slabija interakcija brzih neutrona sa jezgrima (u odnosu na interakciju sa termalnim neutronima) čini metod aktivacione analize brzim neutronima manje osetljivim nego što je metod termalnih neutrona. Ovaj metod se najčešće koristi za analizu kiseonika, azota, sumpora, fluora i još nekih elemenata za koje je presek za zahvat termalnih neutrona i suviše mali.

Kao što vidimo, mada je najpogodnije koristiti termalne neutrone, ne treba isključiti ni mogućnost aktivacije rezonantnim i brzim neutronima, jer se sva tri tipa analize uzajamno dopunjaju i svaki od njih ima svoj domen u periodnom sistemu

elemenata, u kome najefikasnije deluje. Termalni neutroni su najpogodniji, zato što im je pomenut domen najširi.

Detekcija radioaktivnog zračenja koje nastaje posle aktivacije neutrona predstavlja veoma važan element neutronske aktivacione analize. Ovi detektori mogu se podeliti na tri osnovne grupe i to na gasne, scintilacione i poluprovodničke. Svaki tip detektora ima svoje preimrućstvo i nedostatke, kao i tip zračenja koji najefikasnije detektuje. Tako se, na primer, gasni detektori najčešće koriste za detekciju α i β zračenja, dok se scintilacioni mogu koristiti i za α i za β i za γ zračenje. Poluprovodnički brojači su najefikasniji u detekciji γ zračenja, ali imaju taj nedostatak da se moraju hladiti do temperature tečnog azota ($78,3^{\circ}\text{K}$). U detaljnu analizu pojedinih tipova detektora se nećemo upuštati. Navešćemo samo tablicu osnovnih karakteristika nekih od najčešće korišćenih detektora. Vidi tablicu 6 koja je uzeta iz¹⁾!

Prvi uspešan pokušaj primene neutronske aktivacione analize učinjen je 1936. godine kada su Heveši i Levi odredili prisustvo 0,0001 gr. disoprozijuma (Dy) u parafinu. Efikasnost ovoga metoda i njegova preimrućstva nad ostalim analitičkim

TABLICA 6

DETEKTOR	MRTVO VREME (sec)	ENERGETSKA REZOLUCIJA		
		$\alpha = 5 \text{ MeV}$	$\beta = 1 \text{ MeV}$	$\gamma = 0,66 \text{ MeV}$
GAJGER-MİLEROV BROJAČ (SAMOGLASECI)	$2 \cdot 10^{-4}$	—	—	—
PROPORCIONALNI BROJAČ	OKO 10^{-4}	1,5	OKO 6	—
ORGANSKI SCINTILATOR	10^{-9}	—	OKO 6	—
KRISTAL NaI (Tl)	$2,5 \cdot 10^{-7}$	—	—	7,5
POLUPROVODNIČKI SA Površinskom BARIJEROM	10^{-9}	0,2-0,5	0,5-1	—
POLUPROVODNIČKI Ge (Li)	10^{-7}	—	—	0,5

metodima odmah su uočeni, ali je presudnu ulogu u njegovom daljem razvoju odigrala konstrukcija prvog nuklearnog reaktora 1942. godine, od strane Fermija i njegovih saradnika. U nuklearnim reaktorima dobijaju se veoma jaki fluksevi neutrona, tako da se sa ovim fluksevima mogla postići osetljivost metoda od $10^{-7}\text{--}10^{-11}$ %. Takođe je značajnu ulogu za razvoj neutronske aktivacione analize imala i razrada ideja u vezi sa konstrukcijom malih jeftinih neutronske generatora, o kojima je bilo reči u drugom paragrafu ove glave. Ovi neutronski generatori počeli su da se koriste i u analitičke svrhe 1953. godine. Danas se metod neutronske aktivacione analize uveliko koristi u gotovo svim oblastima ljudske delatnosti. Ovde ćemo pokušati da navedemo neke najkarakterističnije primere.

Razvoj savremene tehnike uveo je u domen proizvodnje veoma veliki broj novih materijala i istovremeno povisio potrebu za čistoćom i visokim kvalitetom ovih materijala. U reaktorskoj tehnici naprimer neophodna je izvanredno visoka čistoća materijala koji se koristi kao gorivo, ali isto tako i materijala koji se koristi kao moderator i refle-

ktor. Osim toga u aktivnu zonu reaktora ugrađuju se različite aparature i one ne bi smeće da sadrže primese elemenata koji imaju veliki presek za zahvat termalnih neutrona, niti primese koje pri ozračivanju neutronima daju radioizotope sa dugim vremenom života. Svi ovi problemi, kontrole čistoće i goriva i moderatora i aparatura koje se ugrađuju u reaktor, najefikasnije se mogu obaviti metodom neutronske aktivacione analize zbog njegove velike osetljivosti.

Elektronska industrija takođe zahteva izvanredno visoku čistoću poluprovodničkih materijala koji se u njoj koriste. Ova čistoća mora da bude reda (10^{-6} - 10^{-8})% i kao takva može se kontrolisati isključivo metodom neutronske aktivacione analize. Pošto se u poluprovodnike ugrađuju primesni elementi radi formiranja donorskih i akceptorskih nivoa, a količina ovih primesa mora da bude veoma predizno definisana, jedini način da se količina tačno odredi je aktivaciona analiza.

Neutronska aktivaciona analiza uspešno se može primenjivati u geologiji i kosmologiji. Ovim metodom može se određivati koncentracija pojedinih elemenata u zemljinoj kori, a takođe može da poslu-

ži za otkrivanje tragova retkih ruda i minerala. U kosmičkim istraživanjima neutronska aktivaciona analiza korišćena je za precizno ispitivanje sastava materijala koji je uzet sa mesečeve površine.

Značajna je uloga neutronske aktivacione analize u biologiji i medicini. U ovim oblastima je veoma važno odrediti i najmanje količine komponenata u sastavu materije, jer i najmanje količine ponekad mogu da odigraju značajnu ulogu u bio-procesima. Metodom neutronske aktivacione analize takođe se može izučavati proces migracije pojedinih elemenata u organizmu i njihovo sakupljanje u pojedinim organima. Ovakva koncentrisanja u pojedinim tačkama organizma su veoma opasna i proces sakupljanja treba spriječiti u samom začetku. Pošto se metodom neutronske aktivacione analize mogu registrovati izvanredno mali poremećaji koncentracije, očigledno je da ovaj metod u medicini može da predstavlja izvanredno efikasno dijagnostičko-profilaktičko oruđe.

U vezi sa sve većom zagađenošću čovekove sredine i borborom protiv ove zagađenosti raste i potreba za neutronskom aktivacionom analizom. Zagađe-

nost hrane ili vode i dr. može se najefikasnije registrirati primenom aktivacionog metoda.

U metalurškoj industriji se aktivacionim metodom određuje procenat kiseonika u metalurškim proizvodima. Zbog svoje osobine da ne menja hemijski sastav uzorka koji se ispituje i ne zahteva njegovo hemijsko razlaganje ili bilo kakvo drugo prepariranje, metod neutronske aktivacione analize našao je svoje mesto i u arheologiji, jer je tamo veoma važno da se prilikom ispitivanja sastav uzorak ne ošteti.

Ovde smo naveli samo neke najčešće prime-re za primenu neutronske aktivacione analize. Već više puta smo isticali da se ona sa uspehom primenjuje i u kriminalistici. Ove primene u kriminalistici razmotrićemo u sledećem paragrafu.

4. Neutronska aktivaciona analiza u
kriminalističkim istraživanjima

Neutronska aktivaciona analiza predstavlja analitički metod koji ima izvanredno visoku osetljivost, Pored toga ovaj metod nije destruktivan u hemijskom smislu (posle izvršene analize ispitivani uzorak ostaje hemijski nepromenjen). Ove dve osovine metoda čine ga veoma pogodnim za primenu u pravno-sudskim naukama i kriminalističkim ekspertizama, pošto se u kriminalističkim ekspertizama obično radi sa veoma malim količinama materijala i pošto se u većini slučajeva materijal prilikom eksperimente ne sme ošteti. U poslednjoj deceniji zapaža se povišen interes za korišćenje metoda neutronske aktivacione analize u pravno-sudskim naukama. Održano je više simpozijuma i međunarodnih konferencija posvećenih metodu neutronske aktivacione analize i mogućnostima njegove primene u kriminalistici.

Primena metoda neutronske aktivacione analize u kriminalistici mogu da budu veoma raznovrsne s obzirom na mogućnost metoda. Analize koje se vrše ovim metodom mogle bi se grubo podeliti na tri grupe.¹⁹⁾ Te grupe bi bile:

- a) detekcija i određivanje ostatka ^atoksičnih materijala u ostacima hrana, u ljudskim tkivima, u krvnoj plazmi, u izlučevinama itd;
- b) "individualizacija" (tj. određivanje pri-padnosti određenom licu ili određenom mestu) kose, noktiju, tkanine, droga, narkotika itd;
- c) analiza ostatka pucnja iz vatrene oružja na koži, kostima, na otvoru rane od metka, na odelu i u neposrednoj okolini mesta gde se pucalo.

Grupa analiza pod a) bazirala bi se ^{na}određivanju submikrogramskih količina fosfornih jedinjenja, arsenika, žive, selena i talijuma u posthumnim ostacima ili u hrani. Poređenjem ovih količina za trovanu i normalnu osobu ili za trovanu i normalnu hranu mogu se dobiti indikacije o trovanju koje bi poslužile kao dokazni materijal.

Grupa analiza pod b) odnosila bi se na ispitivanje odnosa karakterističnih mikroelemenata u kosi ili noktima, a takođe i u tkaninama ili narkoticima. Postoji verovanje da se mogu ustanoviti kriterijumi po kojima bi se moglo sa sigurnošću konstatovati da, recimo ta i ta vlas kose pripada toj i toj

osobi. Takođe se na osnovu sastava i koncentracije mikroelemenata može odrediti, recimo, poreklo neke droge jer se ove prave pod različitim uslovima i različitim sirovina (mak, marihuana itd.) koje rastu u različitim geografskim regionima pa im proportionalni sastav pojedinih mikroelemenata različit.

U grupi analiza pod c) ispitivanje tragova pucnja iz vatrene oružja na koži, odelu, otvoru rane itd. može da posluži kao dokaz i da se pucalo, ali se takođe može ustanoviti i kada se pucalo i sa kakvog rastojanja. Svi ovi nalazi mogu biti od neprocenjivog značaja kao dokazni materijal kod razjašnjavanja ubistva^a, samoubistva^a i sl.

Dalje ćemo se zadržati na nekim konkretnim primerima gore pomenutih ispitivanja. Kao prvo izložićemo neke rezultate analize tragova pucnja iz vatrene oružja. Ispitivanja je izvršila grupa sarađnika Naučno-istraživačkog kriminalističkog instituta u Voronježu SSSR²⁰). Analizirani su tragovi pucnja na ruci lica koje je pucalo iz kratkocevnog vatrene oružja. U analizi je primenjen metod neutron-ske aktivacione analize. Proizvodi pucnja koji su ostali na ruci lica koje je pucalo skidani su sa palca i kažiprsta i dela šake između njih pomoću tampona od vate umočenog u alkohol. Parafinsko skidanje ovde

nije korišćeno, jer je temperatura u kanalu reaktora gde je vršeno ozračivanje bila oko 150°C , što je prično iznad temperature topljenja parafina. Prilikom analize lice koje je pucalo nije čistilo i podmazivalo oružje da ne bi bilo primesa od maziva, tj. insistiralo se na "čistoj" situaciji u kojoj bi po mogućству na ruci ostali isključivo tragovi pucnja. Tamponi od vate sa tragovima pucnja su bili numerisani i upakovani u celofanske kesice. U reaktoru su istovremeno ozračivani tamponi čiste vate umočeni u alkohol, zatim uzorci sa poznatom količinom antimona i uzorci uzeti sa šake lica koje je pucalo. Vreme ozračivanja neutronim^a iznosilo je od 72 do 240 časova zavisno od količine produkta pucanja. U tablici 7 dati su rezultati analize za količinu antimona pronađenu na šaci lica koje je pucalo iz pištolja tipa "Makarov" (PM 9) na otvorenom prostoru. (vidi tablicu 7.). Sa tablice se vidi da su količine koje ostaju na ruci reda 10^{-6} gr. Vidi se da količina produkta raste sa povećanjem broja pucnjeva ali je analitičku zavisnost dosta teško ustaviti. Srednja vrednost raste za 22% posle dva pucnja a za 29% posle tri pucnja, tako da se sa sigurnošću može tvrditi da ova zavisnost količine produkta od broja pucnjeva nije linearna. Ova ne-linearna zavisnost objašnjava se time što se prili-

TABLICA 7

Količina antimona u produktima
pucnja na ruci posle pucanja pištoljem PM-9 (u 10^{-7} gr)

REDNI BROJ PUCNJA U SERIJI	BROJ PUCNJEVA		
	JEDAN	DVA	TRI
1	$9,55 \pm 1,05$	$9,34 \pm 0,98$	$16,70 \pm 1,49$
2	$7,60 \pm 0,72$	$10,81 \pm 1,09$	$13,68 \pm 1,37$
3	$9,42 \pm 0,91$	$14,68 \pm 1,42$	$10,98 \pm 1,05$
4	$10,37 \pm 1,07$	$9,16 \pm 0,92$	$15,00 \pm 1,43$
5	$11,81 \pm 1,13$	$15,97 \pm 1,43$	$12,14 \pm 1,12$
6	$9,90 \pm 0,93$	$15,63 \pm 1,41$	$17,01 \pm 1,52$
7	$8,36 \pm 0,78$	$14,87 \pm 1,42$	$10,94 \pm 1,05$
8	$10,36 \pm 1,07$	$14,06 \pm 1,36$	$16,10 \pm 1,47$
9	$11,24 \pm 1,11$	$10,76 \pm 1,04$	$14,01 \pm 1,38$
10	$10,50 \pm 1,08$	$11,95 \pm 1,15$	$12,23 \pm 1,14$
SREDNJA VREDNOST U CELOJ SERIJI	$9,91 \pm 0,98$	$12,72 \pm 1,22$	$13,88 \pm 1,30$

kom prvog pucnja obrazuje daleko veća količina pare usled sagorevanja maziva, a prisustvo ove pare potpomaže taloženje produkta na ruci. Ostali pucnji idu "na suvo" tj. sa smanjenom količinom pare, pa je zato relativni porast količine produkta sve slabiji.

U tablici 8 dati su rezultati analognih ispitivanja za pištolj "Tokarev" (TT 7,62) pri čemu su tri pucnja vršena na otvorenom prostoru, a jedan u zatvorenoj prostoriji. Kao što vidimo i ovde postoji nelinearna zavisnost između količine produkta i broja pucnjeva, ali su količine za TT 7,62 manje nego za PM 9 što znači da tip oružja može da igra značajnu ulogu prilikom određivanja količine produkta. Takođe se vidi da je količina produkta za skoro 10 puta veća prilikom pucnja u zatvorenom prostoru. Takođe su vršene analize za "Parabelum" kalibra 9 mm i "Nagan" kalibra 7,62 mm. Ispostavilo se da prilikom pucnja iz "Nagan"-a na rukama strelca ostaje tako mala količina produkta da se γ -linija antimona 122 ne može izdvojiti.

Takođe su vršene analize zavisnosti količine produkta od vremena koje je proteklo posle izvršenja pucnja. Tragovi pucnja skidani su 2, 4 i 6 časova posle izvršenog pucnja, pri čemu se u među-

TABLICA 8 Količina antimona u produktima
pucnja na ruci posle pucanja
pištoljem TT-7,62 (u 10^{-7} gr)

REDNI BROJ PUCNJA SERIJI	BROJ PUCNJEVA NA OTVORENOM PROSTORU			JEDAN PUCANJ U ZATVORENOM PROSTORU
	JEDAN	DVA	TRI	
1	$5,68 \pm 0,40$	$6,30 \pm 0,44$	$10,47 \pm 0,52$	$65,26 \pm 1,30$
2	$5,20 \pm 0,40$	$8,61 \pm 0,52$	$13,60 \pm 0,68$	$42,81 \pm 1,21$
3	$5,75 \pm 0,41$	$7,89 \pm 0,47$	$12,05 \pm 0,84$	$46,84 \pm 1,28$
4	$7,02 \pm 0,55$	$6,03 \pm 0,42$	$10,95 \pm 0,55$	$58,55 \pm 1,30$
5	$7,41 \pm 0,44$	$5,82 \pm 0,41$	$12,85 \pm 0,94$	$46,63 \pm 0,93$
6	$7,59 \pm 0,39$	$8,25 \pm 0,61$	$16,68 \pm 1,12$	$77,49 \pm 1,60$
7	$5,37 \pm 0,38$	$6,16 \pm 0,43$	$17,43 \pm 0,69$	$58,55 \pm 1,42$
8	$4,96 \pm 0,40$	$8,54 \pm 0,51$	$8,26 \pm 0,50$	$60,58 \pm 1,41$
9	$5,52 \pm 0,42$	$7,90 \pm 0,47$	$8,16 \pm 0,57$	$58,67 \pm 1,12$
10	$6,12 \pm 0,45$	$8,42 \pm 0,57$	$8,58 \pm 0,60$	$75,32 \pm 1,53$
SREDNJA VREDNOST PO CELOJ SERIJI	$6,06 \pm 0,42$	$7,39 \pm 0,49$	$11,90 \pm 0,70$	$56,47 \pm 1,31$

vremenu ruke nisu prale. Eksperimenti su pokazali da se produkti pucnja mogu otkriti 2 sata posle pucnja ako se ruke ne taru o odeću i to u količini od $(1,5 \pm 0,41) \times 10^{-7}$ gr. Ako vreme proteklo posle pucnja iznosi 4 ili 6 časova količina produkta je tako mala da se γ -linija antimona ne može izdvojiti. Takođe je eksperimentalno konstatovano da se produkti pucnja pranjem skidaju u potpunosti i da se ovakvim tipom analize ne mogu konstatovati. Zaključuje se da je metod dobar samo ako se ruke osumnjičenog lica ispituju neposredno posle pucnja. Takođe se zaključuje da je metod efikasniji u slučaju kada se radi o samoubistvu, jer se tada tragovi daleko duže zadržavaju.

Interesantne rezultate dobijene pomoću parafinskog testa nalazimo u ²⁴⁾. Uzorci parafina sa desne šake lica koje je pucao zračeni su tri časa neutronskim fluksom $10^{12} \text{ n/sm}^2/\text{sec}$. Ispitivana je količina barijuma i antimona dobijena sa različitim mesta šake. Mesta na šaci desne ruke označena su na slici 1.

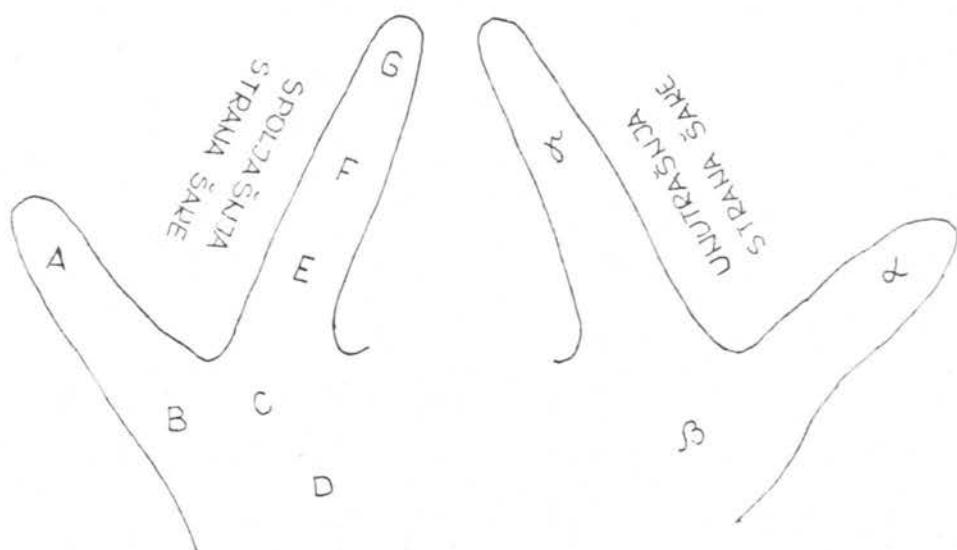
U tablici 9 dati su sadržaji barijuma i antimona u mikrogramima nađeni na mestima šake koja su označena na slici. Takođe su ispitivani sadržaji barijuma i antimona na levoj i desnoj šaci lica ko-

TABLICA 9

POZICIJA	Ba	Sb	POZICIJA	Ba	Sb
A	0,22	N.D.	α	1,9	0,11
B	0,24	0,12	β	0,15	N.D.
C	0,31	0,14	γ	0,31	N.D.
D	0,13	0,07			
E	2,30	0,07			
F	0,44	0,21			
G	0,07	0,11			

N.D - ZNAČI TRAGOVI NISU NAĐENI

SLIKA 1



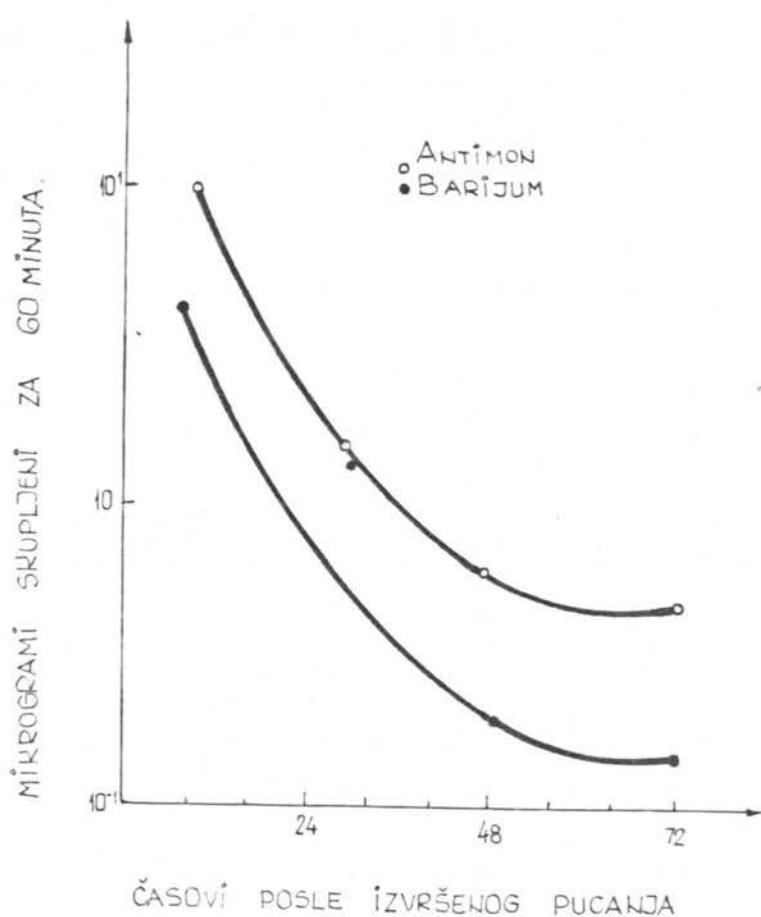
MESTA SKUPLJANJA PRODUKTA PUCNUA SA DESNE ŠAKE.

ja nisu pucala. Testirano je oko 50 lica različitih profesija: studenti, policajci, tehničari, fizičari laboratorijski hemičari itd. Ispostavilo se da antimon nije nađen ni kod jedne osobe dok su tragovi barijuma nađeni u količinama od 0,05 mikrograma do jednog mikrograma na desnoj ruci i u količinama do 0,2 mikrograma na levoj ruci. Iz ovoga se izvodi zaključak da tragovi antimona predstavljaju sigurniji dokaz da se pucalo.

U kriminalističkim ekspertizama je ponekad veoma bitno da se ustanovi gde se i kada pucalo. U tom cilju su metodom neutronske aktivacione analize vršena ispitivanja tragova antimona i barijuma u komorama određene zapremine i sa određenim tipom ventilacije (protoka vazduha kroz komoru) u različitim vremenima od momenta pucnja i na različitim rastojanjima od otvora cevi. Rezultati za vremensku distribuciju dati su na dijagramu 1.

U vezi sa pokušajima "individualizacije" kose i noktiju pojedinih osoba kao i u vezi sa pokušajima da se odredi poreklo i izvor tkanina i načotika takođe je do sada izvršeno mnogo ekspertiza

DIJAGRAM 1



Postoji verovanje da sastav i procentualni odnos mikroelemenata u vlasti ljudske kose može da posluži prilikom identifikacije ličnosti. Po neki autori idu toliko daleko da veruju da svaka individua ima svoj sastav mikroelemenata u vlasti kose, pa ovaj sastav može da posluži za identifikaciju u istoj onoj meri koliko i otisci prstiju. Prilikom ispitivanja uzoraka kose treba obraditi pažnju na sledeće:

- a) mnogi mikroelementi koji se mogu otkriti u vlasti kose nisu samo posledica unutrašnjeg sastava kose već i spoljašnje kontaminacije;
- b) napraviti razliku između prirodnih mikroelemenata i onih koji su došli usled kontaminacije ponekad je veoma teško, jer se običnim pranjem kose pojedini kontaminanti uopšte ne mogu odstraniti;
- c) ako se uzorci kose peru laboratorijski onda postoji opasnost da se pored spoljašnjih kontaminanata iz vlasti kose odstrani i oni mikro elemeni koji se u njoj prirodno sadrže.

I pored svih ovih teškoća danas se mnogo radi na ispitivanju mikroelemenata u vlasti kose putem neutronske aktivacione analize. U vlasti kose

su najčešće zastupljeni sledeći mikroelementi:

Na	Cl	Mn	Co	Cu	Zn
As	Se	Ag	I	Au	Hg

Uzajamni odnos ovih elemenata zavisi od veoma velikih broja faktora: od starosti osobe, od toga da li se uzima deo dlake koji je bliži temenu ili je dalje od njega, od načina pranja kose, od načina ishrane, od uslova u kojima se radi itd. Analize su do danas vršene s obzirom na sve ovde pomenute elemente. Velika raznovrsnost rezultata i mnoštvo uslova koji utiču na sastav mikroelemenata onemogućili su da se do danas dobije siguran odgovor na pitanje da li se zaista može izvršiti "individualizacija" ljudske vlasti ili ne.

Do danas su ipak postignuti pojedinačni uspesi dokazivanja krivice na osnovu identifikacije pomoću vlasti kose nađeno na mestu izvršenog zločina.

Tako se u²³⁾ navodi primer da su za tri različita ubistva izvršena u dosta velikom vremenskom razmaku na mestu počinjenog zločina uvek nađene vlasti kose za koje je metodom neutronske aktivacione analize pokazano da imaju veoma sličan sastav mikroelemenata. Istim metodom ispitivane su vlasti kose uzete od niza osumnjičenih osoba i za vlasti jedne od njih neutronska aktivaciona analiza je pokazala tako frapantnu sličnost sastava sa vlasima nađenim na mestu po-

činjenih ubistava da je osumnjičeni kada su mu predloženi rezultati odmah priznao sva tri zločina.

U radu ²⁴⁾ ispitivana je korelacija između mikroelemenata u kosi i njenog rasta. Korišćen je metod neutronске aktivacione analize, a pri detekciji γ -zračenja korišćeni su NaI /Tl/ i Ge /Li/ detektori. Vlasi su uzimane od ženskih osoba i to primerci dužine od 50 do 100 santimetara. Ova dužina odgovarala je rastu kose od 5 do 10 godina. Vlasi su ispitivane u odsečcima od po 10 sm. U različitim odsečcima nađeni su sledeći elementi: Na, Cl, Mn, Co, Cu, Zn, As, Se, Ag I, Au i Hg. Otkrivena je neuobičajeno visoka koncentracija selena i žive. U zavisnosti od odsečka varijacije pomenuih elemenata bile su veoma velike, izuzev za bakar i mangan, koji su praktično bili konstantni duž odsečaka.

U radu ²⁵⁾ su ispitivani tragovi žive, zlata, cinka i bakra u kosi stotinak muškaraca i žena. Pоказанo je da je procenat žive u ženskoj kosi 4 do 5 puta veći nego u muškoj. Takođe je konstatovano da je i procenat zlata u ženskoj kosi veći nego u muškoj. Količine cinka i bakra bile su podjednake. Takođe se ispostavilo da je procenat žive oko 200 puta veći na kraju vlasi nego kod korena vlasi.

Dobijeni rezultati ukazuju na to da se na osnovu povećanog procenta žive i zlata u ženskoj kosi može izvršiti diferencijacija ženske i muške vlas. Smatra se da ovo ipak nije rezultat prirodnog sastava kose već pre činjenice da se ženska kosa farbanjem i drugim vrstama kontaminacije menja u sastavu mikroelemenata u odnosu na mušku kosu.

Takođe se smatra da sastav i procentualni odnos mikroelemenata u noktima ruku i nogu može da posluži za identifikaciju ličnosti. Pošto na mesta-
ma učinjenog prekršaja obično češće ostaje kosa ne-
go nokti do sada se više pažnje posvećivalo identi-
fikaciji pomoću vlas i kose, mada se smatralo a i
dan se smatra da po svom sastavu nokti mogu da
budu isto tako dobro sredstvo identifikacije kao
kosa. Ovde ćemo navesti rezultate istraživanja iz ²³⁾
Ispitivani su nokti sa palca ruke jedne te iste
osobe. Uzeto je 9 uzoraka i to svaki u razmaku od
po godinu dana. Pre analize nokti su prani dejoni-
zovanom vodom i acetonom. Ozračivani su u reaktoru
i to pri fluksu od $4,3 \times 10^{12}$ n/sm²/sec. 30 sekundi
i pri fluksu $1,8 \times 10^{12}$ n/sm²/sec. 30 minuta. U
svim ispitivanim uzorcima bili su pronađeni sledeći
elementi:

Na Al Cl Mn Cu Ag i Au

Rezultati ispitivanja dati su u tablici 10. Rezultati pokazuju da su varijacije po godinama bile veoma velike, pa autori izvlače zaključak da bi za dobijanje pouzdanijih indikacija o vremenskoj distribuciji mikroelemenata u noštima trebalo vršiti opsežnije analize.

U vezi sa borbom protiv rasturanja droga neutronska aktivaciona analiza može da odigra veoma značajnu ulogu. Ispitivanja sastava droga i mikroelemenata može da ukaže na poreklo i izvor droge. Ovo se naročito odnosi na prirodne droge kao što su marihuana i mak. Analiza porekla ovih biljnih droga zasnivala bi se na činjenici da droge koje su rasle u različitim geografskim regionima moraju primetno da se razlikuju po sastavu mikroelemenata. Pri ovoj naravno treba uzeti u obzir da i biljke koje su rasle na jednom mestu takođe mogu da se razlikuju po sastavu mikroelemenata zbog različitog intenziteta unutrašnjih metaboličkih procesa. Zbog ovoga treba biti oprezan prilikom određivanja mesta odakle je droga potekla, jer razlike u sastavu mikroelemenata ne moraju obavezno da budu posledica različitih mesta na kojima je biljnja droga rasla. Analize koje su do danas vršene pokazuju da su razlike u sastavu biljne droge daleko veće ako su uzete sa dva različita mesta. Međutim, za marihanu

TABLICA 10

GODIŠNJA UZIMANJA UZORAKA	Količina	Mikroelementata u mg					
		Na	Al	Cl	Mn	Cu	Ag
1954	440	53	780	0,6	12	11	0,63
1955	790	160	1600	2,7	5	5	1,2
1956	340	72	690	0,6	9	5	0,41
1957	650	87	1200	0,5	22	5	0,42
1958	710	140	1200	0,9	27	21	1,8
1959	1300	76	3300	0,4	25	6	0,72
1960	650	80	1300	0,3	12	4	1,3
1961	440	87	910	0,3	16	7	1,1
1962	370	49	940	0,5	14	9	0,60

konkretno napravljeni su etaloni odstupanja u sastavu za uzorke marihuane sa istog mesta i uzorke sa dva različita mesta, tako da se identifikacija porekla može sa sigurnošću obaviti.

Karakteristični elementi koji ulaze u sastav marihuane određeni su u radu ²⁵⁾ i ispostavilo se da su to sledeći elementi:

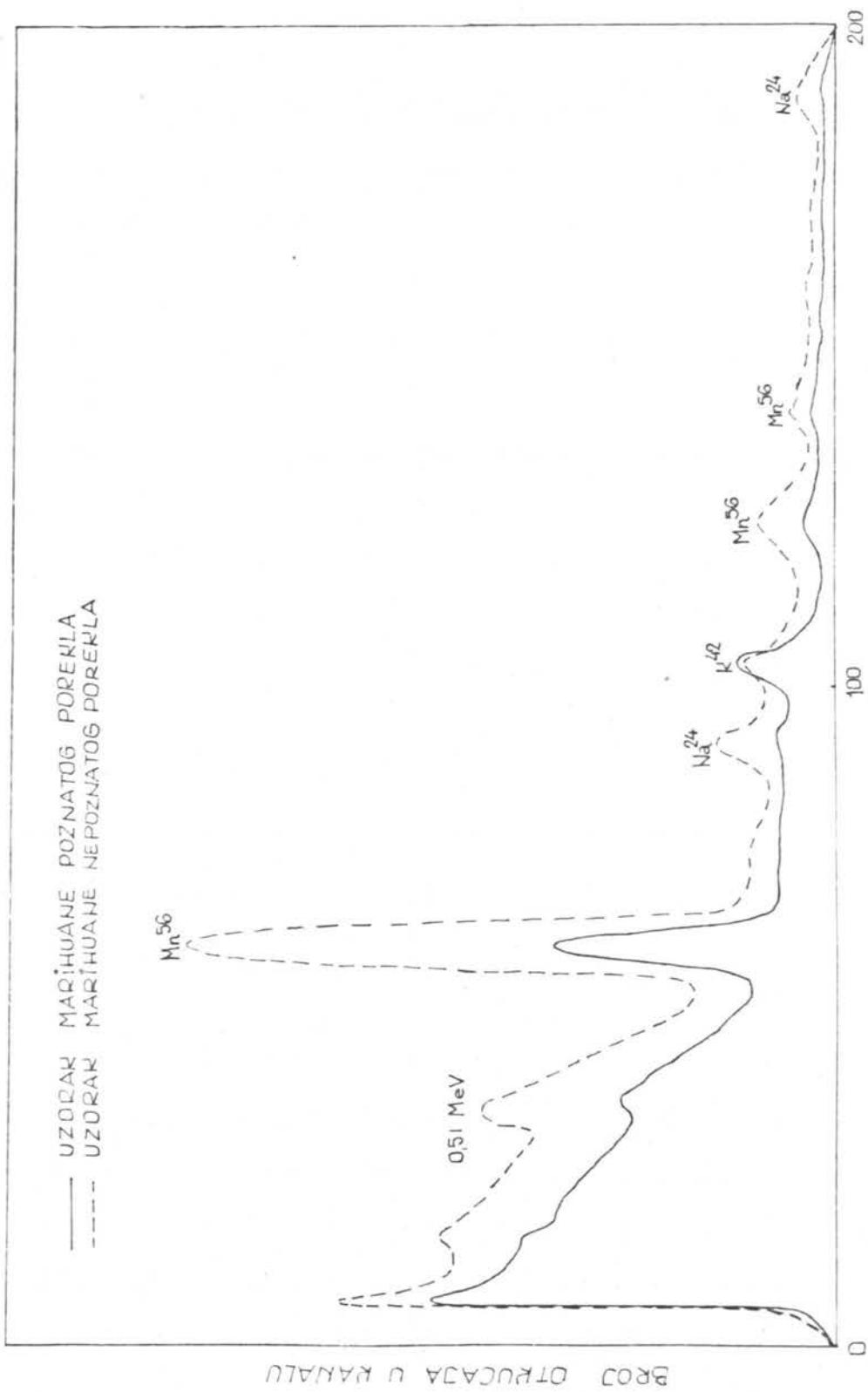
Na	Cl	Mn	Zn	Au	Cr	Br
Cu	Al	Ag	K	Se	Co	S

U istom radu ispitivana su 22 primerka marihuane pri čemu se za neke primerke znalo odakle su uzeti (gde su rasli) dok se za ostale proveravalo da li su rasli na istom mestu ili na nekom geografski udaljenijem mestu. Ispitivanja su vrešena metodom enutronske aktivacione analize, ozračivanje se vršilo 30 minuta pri fluksu $4,3 \times 10^{12}$ n/sm²/sec. Na osnovu ispitivanja koncentracije sledećih 9 elemenata:

Na	K	Cl	Mn	Al	Br	Cr	Sr	Sc
----	---	----	----	----	----	----	----	----

napravljen je dijagram za primerak marihuane sa poznatog mesta i dijagram za primerak čije mesto raščenja nije bilo poznato. (vidi dijagram 2.). Na osnovu dijagrama konstatovano je da je nepoznati primerak marihuane sigurno rastao na drukčijem zemljištu nego poznati.

Diagram 2



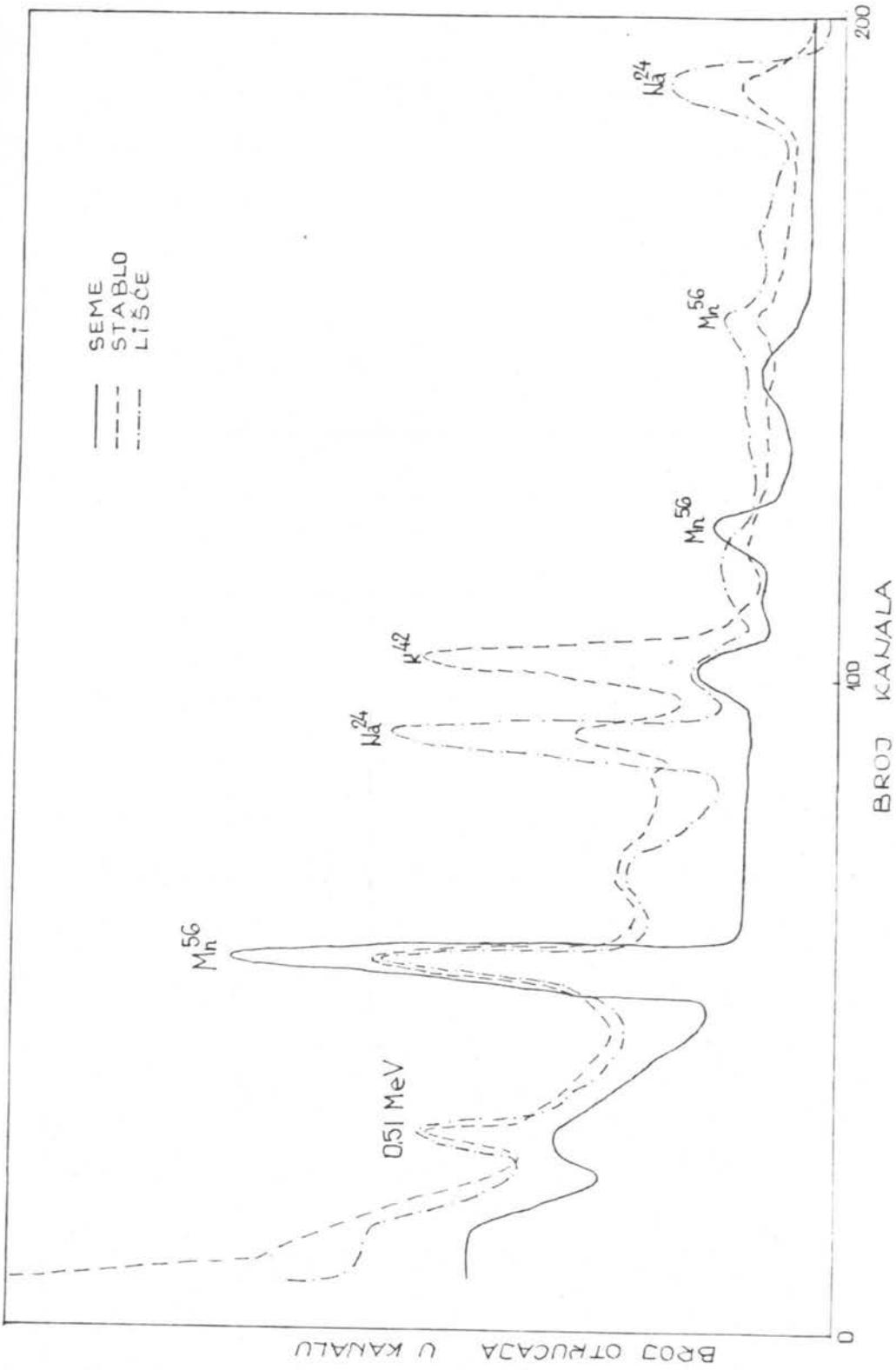
U ovom istom radu ispitivan je procentualni sastav za napred pomenutih 9 elemenata i to u lišću, stablu i semenu marihuane. Ispostavilo se da je on u pomenuta tri dela biljke različit. Rezultati su predstavljeni na dijagramu 3.

Neutronskom aktivacionom analizom ispitivan je procentualni sastav mikroelemenata u vlastima 6 grupa tkanina i to acetatnih, akrilinskih, modakrilinskih, najlonskih, poliesterskih i rajonskih. Uzorci tkanine ozračivani su 20 minuta neutronima čiji je fluks iznosio 5×10^{13} n/sm²/sec. Pronađeno je da u svih 6 grupa tkanina ulaze sledeći elementi:

Ti	Sr	Au	Zn	Sb	Br
Mn	Mg	Cu	In	Co	Cu
K	Al	Cl	Na	Ca	S Va

Konstatovane su velike kvantitativne razlike u sastavu i unutar grupa tkanina i između različitih grupa. Unutar nekih grupa materijali različitih proizvođača pokazivali su veliku sličnost. Sve ove analize navele su autore ²⁶⁾ da konstatuju neophodnost detaljnijih analiza, jer podaci do kojih su oni došli po njihovom mišljenju ne mogu da posluže kao sredstvo identifikacije porekla i proizvođača tkanina.

DIAGRAM 3



U vezi sa detekcijom toksičnih materijala do danas su vršena mnoga istraživanja i teško bi ih bilo sve navesti. Navešćemo samo dva interesantna primera.

U radu ²⁷⁾ ispitivan je sadržaj žive u kosi normalnih osoba i osoba za koje se predpostavljalo da su trovane živom. Došlo se do prilično konkretnih rezultata. Ustanovljeno je da koncentracija žive u vlasti kose normalne osobe iznosi 1-8 ppm. Procenat žive od 8 do 50 ppm nađen je kod osoba koje nisu pokazivale simptome trovanja živom, dok je kod osoba koje su ove simptome pokazivale procenat žive iznosio od 60 do 100 ppm. Ako se isključi interval 8-50 ppm rezultati ove analize mogu da posluže kao kriterijum o tome da li je neka osoba trovana živom ili ne.

Drugu jednu interesantnu analizu toksikološkog tipa izvršili su švajcarski kriminalisti ²⁸⁾. Metodom neutronske aktivacione analize određivana je količina arsenika u kosi, kostima i zemlji iz groba R.Brun-a za koga se verovalo da je otrovan arsenikom 1360. godine. Analize su vršene u 1970. godini. Sadržaj arsenika u kosi bio je normalan pa nije ukazivao na znake trovanja. Sadržaj arsenika

u kostima bio je povećan za 20 puta u odnosu na sadržaj arsenika u kostima normalne osobe. Zbog toga se u prvi mah mislilo dajje Brun trovan arsenikom. Ipak su naknadno izvršene analize kostiju uzetih iz istog groba i od osobe za koju se pouzdano znalo da je umrla prirodnom smrću, pa je i u ovim kostima pronađeno isto povećanje količine arsenika. Na osnovu ovoga došlo se do zaključka da kosti tokom dugog niza godina apsorbuju arsenik iz zemlje pa se otuda u kostima uvek može očekivati povećana količina arsenika u odnosu na kosu. Tako je zahvaljujući metodu neutronske aktivacione analize razjašnjena kriminalistička misterija stara preko 600 godina, i to tako što je pronađeno da su sumnje u trovanje arsenikom bile neosnovane.

Do sada su navođeni primeri analiza koje pripadaju napred navedenoj klasifikaciji pod a, b i c. Metodom neutronske aktivacione analize mogu se vršiti i druge ekspertize koje bi bilo teško razvrstati u jednu od pomenutih grupa. Veliki značaj u kriminalističkim ekspertizama imaju uzorci zemlje koji se mogu naći na cipelama, kolima, odelu itd. osumnjičenog. Ovi uzorci upoređeni sa uzorcima koji su uzeti s mesta gde je delikt izvršen često mogu da posluže kao dokaz da je osumnjičeni bio

na mestu učinjenog prekršaja. Veoma opsežne analize u vezi sa ovim problemom izvršene u radu ²⁹⁾. Ispitivani su uzorci zemlje sa seoskog terena, kada je analiza otežana zbog toga što u seoskim regionima postoji više od pola tuceta različitih tipova zemlje. Raspored zemlje i horizontalno i vertikalno veoma mnogo može da utiče na objektivnost nalaza. U konkretnom slučaju sakupljena je zemlja sa nekoliko kvadratnih kilometara i to i po horizontalnim i po vertikalnim profilima. Sastav je ispitivan neutronskom aktivacionom analizom pri čemu je zračenje neutronima vršeno jedan minut pri fluksu od 10^{12} n/sm²/sec. Rezultati ispitivanja pokazali su velike varijacije sastava mikroelemenata i to za dubinu od svega 10 santimetara od površine zemlje. Ovo navodi autore na zaključak da je ispitivanje uzorka zemlje u dokaznom postupku kriterijum sa kojim treba biti veoma oprezan. Po njima ovakve analize nikada ne mogu da budu pouzdan dokaz, već se mogu koristiti samo za eleminaciju broja osumnjičenih.

U drugom jednom radu ³⁰⁾ metodom neutronske aktivacione analize poređena je prašina prikupljena sa osumnjičenog i njegovih stvari i prašina prikupljena na mestu učinjenog prekršaja. Analiza 10

elemenata i to:

Al	Mn	Ca	Sr	Ba
Na	Va	Sc	Dy	S

bila je dovoljna da se dokaže da je prikupljena prašina sa osumnjičenog i sa mesta prekršaja po sastavu ista čime je dokaz prisustva osumnjičenog na mestu prekršaja bio utvrđen.

Neutronска aktivaciona analiza može da se koristi i prilikom ispitivanja falsifikata umetničkih slika. Jedan pokušaj u ovom smislu izvršen je u radu ³¹⁾). Aktivacionom analizom je ispitivan autentičnostslika slikara Ralfa Blejkloka. Analiza je bila interesantna zbog toga što je pomenuti slikar u jednom periodu svog stvaranja doživeo mentalni kolaps pa su mu se posle ovoga izmenili i tehnika i problematika. Aktivaciona analiza je pokazala razliku između slika rađenih do kolapsa i posle, ali je isto tako konstatovana opšta karakteristika slikarskog manira i koncentracije boja u nijansama koje su zajedničke za oba perioda stvaralaštva. Na dve analizirane slike primećeno je toliko odstupanje od uobičajene koncentracije boja da se posumnjalo u to da je Blejklok njihov autor. Kasnije analize koje su izvršili umetnički eksperti pokazale su da je rezultat dobijen neutronskom aktivacionom analizom zaista ispravan i da dve "sumnjive" slike

nisu pripadale Blejkloku već njegovim saradnicima.

Neutronska aktivaciona analiza može da se koristi i prilikom dentalne identifikacije ličnosti. Ovakve identifikacije su potrebne najčešće kada se identifikuju žrtve požara koje su ugljenisane i kada su plombe i mostovi u vilicama jedini način da se izvrši identifikacija žrtava. Identifikacija se može vršiti hemijskim metodama, ali ove nisu uvek pouzdane i to iz dva razloga. Prvi razlog je što nekad u požaru zbog visoke temperature dođe do promene hemijskog sastava dentalnih materijala. Drugi razlog je manja osjetljivost hemijskih metoda u odnosu na neutronsku aktivacionu analizu. Poslednjih godina su materijali od kojih se izrađuje plombe i mostovi manje više unificirani po sastavu tako da se razvrstavanje na osnovu procentualnog odnosa komponenata u ovom materijalu mora vršiti veoma osjetljivim metodama, a već je više puta isticano da je metod neutronske aktivacione analize najosjetljiviji i jedini sposoban da uhvati i najslabije varijacije u sastavu. Serija analiza zubnih materijala izvršila je grupa nemačkih eksperata u radu³²⁾ i oni su pokazali da se aktivacionom analizom može otkriti poreklo i proizvođač dentalnog materijala, pa samim tim i identifikovati žrtve.

Postoji čitav niz slučajeva kada se tokom provere autentičnosti pojedinih objekata ovi nesmeju oštetiti. I u ovakvim situacijama neutronska aktivaciona analiza predstavlja jedino sredstvo da se izvrše određene provere bez ikakvih oštećenja ispitivanih uzoraka. Kao što je već ranije rečeno prilikom neutronske aktivacione analize hemijski sastav uzoraka se ne menja, a sama analiza ne zahteva nikakve hemijske prepracije ispitivanih objekata.

U radu brazilskih krimimanlista ³²⁾izloženi su rezultati ispitivanja falsifikovanog viskija koji se uvozio u Brazil. Konstatovalo se prilikom potrošnje da se zajedno sa kvalitetnim škotskim viskiem prodaje u bocama sa istom etiketom i falsifikovani viski daleko slabijeg kvaliteta. Očigledno je da se provera prilikom uvoza nije mogla vršiti običnom degustacijom, jer to bi zahtevalo otvaranje svih boca . Zbog toga se pribeglo aktiviranju neutronima da bi se analizom ustanovio sastav običnog i falsifikovanog viskija. Ispitivanja su pokazala da neutronska aktivaciona analiza ne može da napravi razliku u sastavu samog viskija, jer i pravi i falsifikovani imaju isti procentualni odnos komponenata, a razlika u kvalitetu dolazi usled starosti viskija, načina čuvanja i načina pakovanja. Pravi trag je nađen tek analizom zatvarača boca kada su

konstatovane značajne razlike u primesama mikroelemenata u zatvaračima originalnog proizvođača i zatvaračima falsifikatora.

Sličan test primenjen je i u numizmatici. U radu ³⁴⁾ analizirano je dvehiljade primeraka starih rimskih srebrnjaka metodom neutronske aktivacione analize. Ispostavilo se da je i u drevna vremena novac bio falsifikovan i to na taj način što su komadići bakra bili oblagani srebrom. Način identifikacije i diferencijanja primeraka sastojao se u tome što su srebrnjaci ozračivani neutronima, pa je zatim merena indukovana aktivnost srebra. Prema intenzitetu ove indukovane aktivnosti moglo je da se odredi da li je novac sastavljen od čistog srebra ili u sebi sadrži bakarno jezgro. Očigledno je da se analize ovakvog tipa mogu vršiti samo neutronskom aktivacionom analizom, jer bi svaki drugi test zahtevao sečenje srebrnjaka i upropšćavanje i onih primeraka koji nisu falsifikovani.

Ovim završavamo pregled primena neutronske aktivacione analize u kriminalistici. Pregled koji smo dali ne pretenduje na kompletnost i sveobuhvatnost, ali ipak daje osnovne pravce u kojima se kreće primena neutronske aktivacione analize u kriminalistici. Iz izloženog se vidi da je do sada u tom

smislu mnogo urađeno, ali i to da ima još mnogo problema koji ostaju otvoreni i zahtevaju angažovanje i većeg broja ljudi i većih sredstava.

5. Eksperimentalna analiza sadržaja mikroelemenata u vlasim kose

Kao što smo već konstatovali identifikacija ličnosti putem sadržaja mikroelemenata u vlasim kose, može biti veoma pogodan metod (u odsutnosti drugih) za utvrđivanje nepoznatih izvršilaca krivičnih dela. Pri tome se postavlja pitanje da li postoji meki siguran test kojim bi se preko vlasim prepoznala ličnost kojoj ta vlas pripada. Na ovom problemu radili su mnogi istraživači pri čemu se uglavnom pokušavalo da se pokaže da je sadržaj mikroelemenata u vlasim glave karakterističan za svaku individu. Posle desetak i više godina istraživanja mišljenja su podeljena: jedni tvrde (istina malo njih) da ovaj metod nije u stanju da pruži informacije za identifikaciju ličnosti; drugi pak imaju oprečno mišljenje i smatraju da je ovaj metod veoma pogodan i koristan za utvrđivanje identiteta. Pošto je ovo pitanje i danas otvoreno preuzeli smo miz istraživanja vlasim kose i sadržaja mikroelemenata umanjio sa željom da doprinesemo razjašnjavanju pomenućih problema.

Vlasi kose spadaju u bieleske materijale.

Većina bieleskih materijala, kao što je dobro poznato, sastoji se uglavnom od vodomika, ugljenika i kiseonika sa relativno niskim procentom zastupljenosti N, S, P, Na, K, Ca, Mg i Cl. Pored ovih elemenata u bieleskim materijalima zastupljeni su i mnogi drugi elementi iz periodnog sistema elemenata, ali u vrlo malim količinama (trgovima) pa ih zato u inostranej literaturi nazivaju "trace elements". Ranije se mislilo da su biomaterijali samo zaprljani ovim elementima i da oni nemaju neku bioloski značajnu ulogu u njima. Međutim, kako se razvila nauka, a isto tako i metodologija uočeno je da jedan deo elemenata koji se u trgovima nalaze u živim organizmima ima izvanredno značajnu bielesku ulogu u njima.

Na osnovu ispitane bieleske uloge izvesnog broja elemenata u živim organizmima, elementi u trgovima razvrstani su prema njihovej funkciji u tri grupe:

- a) bieleski značajni elementi,
- b) elementi u trgovima koji bi mogli biti bieleski značajni i
- c) elementi u trgovima za koje se misli da nisu bieleski značajni (bar za sada).

U prvu grupu elemenata spadaju:

Fe I Cu Zn Mn Co Mo Se.

U drugu grupu elemenata svrstani su:

Ni Br As Cd Bo Sr.

Treću grupu elemenata sačimjavaju:

Al Sb Hg Ge Rb Au Bi Ti

i drugi elementi koji su nađeni u organizmima živih bića, a ne nalaze se u prve dve grupe.

Prema dosadašnjim ispitivanjima u vlasti glave čoveka nađeno je 29 elemenata i to:

Na	Al	Cl	Ca	K	Sc	Cr	
Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	
As	Se	Br	Rb	Sr	Mo	Ag	
Sb	I	Cs	La	Sn	Eu	Au	Hg.

Danas usvojena podela mikroelemenata u vlasti kose bila bi sledeća:

a₁) biološki značajni su:

Fe I Cu Zn Cr Mn Co Ce Mo

b₁) mogu da budu biološki značajni:

Ni As Br Sr

c₁) kontaminantni su:

Na	Al	Cl	K	Ca	Se	Ga	Rb
Ag	Sb	Cs	La	Sn	Eu	Au	Hg.

Svi navedeni elementi misu pogodni da se koriste za identifikaciju i zbog toga se treba opredeliti samo za određene elemente: Pošto je kosa složene strukture (sastojeći se od epiderma, kerteksa i medula), a neprekidno je izložena uticajima spoljašnje sredine (ponaša se kao neka vrsta jenskog izmenjivača) moguće je da se sadržaj mikroelemenata znatno menja umutar kratkog vremenskog perioda bilo hotimice, bilo zbog načina prirodnog življjenja (pranje, kupanje, bojenje, rad u raznim prašnjavim atmosferama itd.). Ako se uzme u obzir da metabolički procesi u organizmu i način ishrane utiču na sadržaj elemenata u kosi problem identifikacije se još više komplikuje. Prema tome, sadržaj mikroelemenata u vlasni može poticati od okoline (spoljni kontaminator), a isto tako i iz samog organizma. S obzirom na ovu situaciju spoljašnje kontaminante treba odstraniti specijalnim postupkom pranja, kako bi ostali samo oni elementi koji potiču od organizma koji ih je izlučio u medulu vlasti. Ti elementi, po našem mišljenju, trebalo bi da budu karakteristični za svaku individuu. Oni bi verovatno bili biološki značajni elementi i pripadali bi grupama elemenata označenih sa a_1 i b_1 . Elementi iz grupe c_1 bili bi vezani za radno mesto i oblast u kojoj živi ispitivana ličnost.

S obzirom na složenost problema i potrebu velike osetljivosti merenja u analizama odlučili smo da kao metod za detekciju elemenata u tragovima koristimo neutronsku aktivacionu analizu. Kao što smo već videli metod neutronске aktivacijske analize sastoji se u tome da se ispitivani uzorci (u ovom slučaju vlasti glave) ozrače u nuklearnom reaktoru termalnim neutronima. Zahvatom neutrona od elemenata u ozračenom uzorku nastaju radioaktivni izotopi koji emituju karakteristično nuklearno zračenje. Za identifikaciju elemenata se najčešće koristi karakteristično gama zračenje. Merenjem energije uvođenog zračenja može se odrediti vrsta mikroelemenata u uzorku, a merenjem aktivnosti pojedinih izotopa dobija se informacija o koncentraciji pojedinih vrsta preko formule:

$$m_A = \frac{M_A}{\Phi \delta_A N \alpha_A (1 - e^{-\lambda_B t})} \left[\frac{dN_B}{dt} \right] \quad (5.1)$$

koja je objašnjena u drugom paragrafu ove glave.

Na osnovu jednačine (5.1), znajući vreme ozračavanja t , fluks neutrona i masu ozračavanog izotopa može se načiniti tablica na osnovu koje se može zaključiti o osetljivosti neutronске aktivacijske analize. Podaci su dati u tablici 11.

Tablica 41 - OSETLJIVOST DETERCIOE ELEMENTATA U TRAGOVIMA

DOMET OSETLJIVOSTI , Mg	ELEMENAT
0.0000009 - 0.000001	Dy, Eu
0.00009 - 0.00001	In, Lu, Mn
0.0009 - 0.0001	Al, As, Cu, Ho, Ir, Pr, Re, Sm, V
0.009 - 0.001	Au, Br, Co, Er, Ga, Ge, Hg, K, Na, Nb
0.09 - 0.01	Pd, Rh, Sb, Sc, Sr, Ta, Tb, U, W, Y, Yb
0.9 - 0.1	Ag, Ba, Cd, Cs, Ce, Cl, Gd, Hf, Mo, Nd,
9 - 1	Ni, Os, Ru, Se, Si, Te, Tm, Ti, Zn Bi, Cr, Mg, P, Pt, Sn, Tl, Zr Ca, Fe, Pb, S

VREDNOSTI KOJE SU DOBIJENE U TABLICI NAVEDENIH ELEMENTA
OZNAČAVANE SU TEOMALNIM NEUTRONSKIM FLUROMOM $10^{12} n \times cm^{-2} s^{-1}$
ZA VРЕME OZРАЧАВАЊА БИЛО ЈЕ СЕДAM ДАНА.

Tablica demonstrira izvanredno veliku osjetljivost ovog metoda. Za detekciju kod miskih aktivnosti mora se koristiti detektor velike osjetljivosti i dobre moći razlaganja. U našem slučaju korišćen je nuklearni reaktor RA Institut "Boris Kidrič" u Vimči, a u Institutu za fiziku Prirodno-matematičkog fakulteta u Novom Sadu korišćen je poluprovodnički Ge(Li) detektor velike efikasnosti i visoke rezolucione moći sa 4096 kanalnim analizatorom tipa ND-2400.

Uzimajući u obzir složenost problema s jedne strane i osjetljivost metoda s druge strane, postupak postavljanja eksperimenta za određivanje elemenata u tragovima morao je imati određen redosled. Pre svega trebalo je odrediti:

1. materijal u kome će se kosa ozračavati,
2. kanal u reaktoru RA,
3. metod uzimanja kose i način pripreme za ozračavanje,
4. vreme trajanja ozračavanja,
5. metod vađenja kose iz ampule i priprema za merenje i
6. način analize dobijenih spektara.

Druga vrsta problema bila je vezana za odstranjivanje kontaminantnih elemenata kojima je kosa spolja zaprljana. Zbog toga je trebalo odabratи najpogodniji metod pranja kose. Zbog svega navedenog bilo je izvršeno više ozračavanja uzorka u reaktoru. U daljem tekstu opisаćemo izvršene eksperimente.

Odlučeno je da se ozračavanje uzorka vrši u kvarcnim ampulama. Kvarc je odabran zbog toga što je najotporniji na uticaj zračenja i na dejstvo nekih kiselina. Analizirane su kvarcene ampule triju proizvođača (SSSR, ČSR i DDR). Posle tri ozračavanja i analize dobijenih spektara utvrđeno je da su najpogodnije kvarcene ampule iz DDR. Zatim je odabrana pogodna dimenzija ampule i metod njenog pranja pre pakovanja kose. Korišćene su ampule debljine 2 mm i dužine 5 sm. Pre umošenja kose ampula se tretirala koncentrovanim HCl (proizvođač Merck p.a.), zatim je ispirana bidestilisanom vodom, a zatim kuvana u koncentrovanoj HNO_3 (Merck p.a.) deset minuta. Proces pranja bidestilisanom vodom i kuvanja u HNO_3 zatim je ponovljeno da bi se nakon konačnog ispiranja bidestilisanom vodom ampule sušile oko 2 sata u sušmici na 105°C . Uzorci kose su pre svakog ozračavanja pakovani u ovako pripremljene ampule.

Radi odabiranja najpogodnijeg mesta u reaktoru izvršeno je nekoliko probnih ozračavanja u raznim kanalima reaktora i prema rezultatima izvedenih eksperimenata ustanovljeno je da je napogodnij kanal VK 9, a isto tako i mesto u kanalu, koje ćemo ubuduće označavati sa VK9 /dno + 1 kener.

Za eksperimente uzimana je kosa dužine 12 sm, isecana je na komade dužine 3 sm. i pre pakovanja je podvrgnuta sledećem postupku: vlas su prane u posudi sa etrom dva puta po dva minuta, zatim u alkoholu jedanput po dva minuta, a potom su ispirane tri puta po deset minuta u posudi sa bdestilisanom vodom. Ovako oprana kosa sušena je u sušmici na 60°C. Po četiri komada ovako pripremljene kose zatim su zatopljena u kvarcnu ampulu. Ampule su zamotane u aluminijske folije i smeštene u kener. Aluminijumske folije bile su potrebne radi uspostavljanja termičkog kontakta sa telom kenera, radi odvođenja toplote generisane u uzorcima.

Iz literature je poznato da posle određenog vremena ozračavanja u reaktoru vlas evaporira i sublimacijom se hvata na zidove ampule. Da bi se ovo izbeglo trebalo je odrediti maksimalnu dužinu i temperaturu pri ozračavanju. Rezultati ovih eksperimenata su navedeni u tablici 12.

TABLICA 42

PODACI O DUŽINI GREJANJA VLASI NA ODREĐENIM
TEMPERATURAMA

T	VРЕМЕ ГРЕЈАЊА	ПОСЛЕДИЦЕ
120°C	1.5 h	VLAS se ne menja
152°C	1.5 h	VLAS se ne menja
183°C	2.0 h	VLAS se ne menja
200°C	1.5 h	VLAS se ne menja
250°C	1.5 h	VLAS se ugasila na unutrašnjim zidovima ampule i primjećuje se sublimaciјe organske materije. Struktura kože je zadržana ali postaje krtasta i raspada se pri malim potresima.

Za ozračavanje je pripremljeno sedam uzorka, čije su šifre i podaci navedeni u tablici 13.

Posle ozračavanja uzorci od IX.1.M do IX.6.M vizuelno ^{su}ispitivani iza providne olovne zaštite. Zapaženo je da je kosa očuvala svoju strukturu i posle pet časova ozračavanja. Za gama spektroskopsku analizu pripremljeni su uzorci IX.5.M, IX.5.A i IX.6.M+A (A-označava ampulu u kojoj je zračen uzorak). Posle ozračavanja ampule su prepakovane u neaktivni kener i premete u laboratoriju. U laboratoriji su ampule, iza zaštite, premete u guč i prane najpre u HCl, a potom u hrom-sumpornoj kiselini i ispirane vodom. Tek nakon toga su sušene. Kosa je vađena iz ampule na sledeći način. Ampula je u dužini 4/5 obavijena filter hartijem (koja je služila kao graničnik kružnog zareza) a zatim je kružno zarezana testericom za staklo. Nakon tega su kvarcni zarez, a potom i cela ampula obrisan ^{je} vlažnom vatom, kako bi se uklonio prah debijem na mestu zareza. Ampula je potom obavijena čistom filter hartijem do zareza, a deo koji se odvaja takođe je obavijen drugom filter hartijem. Slobodnim pritiskom na zarez, gornji, kraći deo ampule je odvojen. Kraj ampule, u kojoj se nalazila kosa, pažljivo je obrisan više puta slabo ovlažnom vatom. Vlasi kose su potom preraučene u ampulu od polietilema koja je zatim zatopljena na krajevima.

Tablica 13 Podaci o ozračenjim uzorcima

ŠIFRA	UZORAK	KOLIČINA ROSE	VРЕМЕ ОЗРАЧАВАЊА	У АЛФОЛИЈИ
IX. 1.M	4	VLAŠI	1 k	DA
IX. 2.M	4	VLAŠI	1 k	NE
IX. 3.M*	4	VLAŠI	3 k	DA
IX. 4.M	4	VLAŠI	3 k	NE
IX. 5.M	4	VLAŠI	5 k	DA
IX. 6.M*	4	VLAŠI	5 k	NE
IX. 7.M	1	VLAS	ZAGREVANA DO 250°C VAN REAKTORA	

* ROSA SUŠENA POMOĆU FILTER HARTIJE (W/RATMAN)

Uzorci kose koji su zračeni duže od 5 časova tretirani su na poseban način. Izvršena su dva zračenja od 10 i 20 časova. Uzorci koji su zračeni 10 časova šifrirani su sa IX.8.M i IX.9.M, a oni od 20 časova sa IX.10.M. U uzorcima koji su zračeni 10 časova u kamalu VK 9/dmo + 1 kener, kosa je bila zalepljena za zid kvarcne ampule. Kosa je odlepljena od zidova ampule alkoholom, potom sušena zajedno sa ampulom na 105°C , a posle ovog bilo je moguće preneti kosu u polietilensku ampulu. Kosa koja je ozračavana 20 časova ostala je zalepljena na zidovima ampule i posle tretmana sa alkoholom. Za ove uzorke razvijen je metod rastvaranja ozračene kose u koncentrisanoj azotnoj kiselini. Kosa je bila potpuno rastvorena u ovoj kiselini i celokupan rastvor je prenesen u polietilensku ampulu i u njoj zatopljen.

Od uzoraka navedenih u tablici 13. kvalitativna analiza vršena je za uzorak IX.5M koji je bio zračen 5 časova. Merena je ampula zajedno sa kosom (šifra IX.5.M+A), kosa izvadena iz ampule (šifra IX.5.M) i ampula u kojoj je vršeno ozračavanje (šifra IX.5.A). Gama spektri ovih uzoraka snimani su na Ge(Li) detektoru Instituta IBK - Vinča, tri dana posle ozračavanja, i na Ge(Li) detektoru Instituta za fiziku PMF u Novom Sadu, 5 dana posle vađenja iz reaktora. U tablici 14. prikazani su elementi koji su pronađeni analizom dobijenih spektara.

TABLICA 14 ELEMENTI DETERTOVÁJI U UZORKU IX.5

	Ge (Li)	IBK	Vinča	Ge(Li)	IF	Novi Sad
Z	IX.5.M	IX.5.A	IX.5. M+A	IX.5.M	IX.5.A	IX.5. M+A
11	Na	Na	Na	Na	Na	Na
19	-	-	-	-	-	-
21	-	-	-	-	-	-
24	-	-	-	-	-	-
26	-	-	-	-	-	-
27	-	-	-	-	-	-
30	-	-	-	-	-	-
31	-	-	-	-	-	-
33	-	-	-	-	-	-
35	-	-	-	-	-	-
42	-	-	-	-	-	-
45	-	-	-	-	-	-
51	-	-	-	-	-	-
55	-	-	-	-	-	-
57	-	-	-	-	-	-
58	-	-	-	-	-	-
62	-	-	-	-	-	-
71	-	-	-	-	-	-
74	-	-	-	-	-	-
79	-	-	-	-	-	-
80	-	-	-	-	-	-

Ovaj eksperiment je izveden sa mamerom da se utvrdi maksimalno vreme ozračavanja kose u reaktoru, i da se izvrši izbor kanala u reaktoru i položaj uzorka u kanalu. Eksperiment je pokazao:

- da zračenje kose na mestu VK 9/dmo + 1 kemer jeste pogodno i za sva buduća ozračavanja,
- da vreme zračenja može biti i duže od 5 časova pošto na uzorcima nije primećena sublimacija organske materije na zidovima kvarcne ampule,
- broj detektovanih elemenata pokazuje da detektor Instituta za fiziku u Novom Sadu ima prednost nad detektorm IBK u Vinči, pa da se buduća merenja mogu vršiti u Novom Sadu nekoliko dana posle ozračavanja,
- na osnovu rezultata navedenih u tablici 12. može se zaključiti da se prilikom ozračavanja na poziciji VK 9/dmo + 1 kemer temperatura uzorka ne penje do 250°C , što znači da se na ovom mestu može vršiti ozračavanje i duže od 5 časova. Ovo bi omogućilo i detekciju omih elemenata koji misu zaprežni u prikazanoj analizi.

Takođe su vršene kvalitativne analize uzorka sa dužim vremenom zračenja. Zračenje uzorka vršeno je 10 i 20 časova u kanalu VK 9/dmo + 1 kemer. Šifre uzorka, količina kose i vreme ozračavanja dati su u tablici 15.

TABLICA 15 UZORCI ZRAČENI VIŠE OD 5 ČASOVA

ŠIFRA UZORKA	KOLIČINA ROSE	VРЕМЕ ОЗРАЧАВАЊА
IX. 8. M	4 VLASI	10 ČASOVA UVIJEN U AL
IX. 9. M	4 VLASI	10 ČASOVA BEZ AL
IX. 10. M	4 VLASI	20 ČASOVA UVIJEN U AL

Tretiranje uzoraka i njihova priprema za merenje vršeni su na način kako je to opisano ranije. Uzorci pripremljeni za merenje šifrovani su:

1. IX.8.M - uzorak ozračene kose
2. IX.8.A - ampula u kojoj je zražen uzorak kose IX.8.M
3. IX.10.M - uzorak kose rastovoren u koncentrovanoj azotnoj kiselini i rastvor zatopljen u polietilenskoj ampuli.
4. IX.10.A - ampula u kojoj je ozračavan uzorak kose IX.10.M.
5. IX.10.IKA - alkohol kojim je prana kosa uzorka IX.10.M.

Spektri su snimljeni na Ge(Li) detektoru IF PMF u Novom Sadu pet dana po ozračavanju. Rezultati analize prikazani su u tablici 16. Kosa koja je korišćena u opisanim eksperimentima potiče od osobe ženskog pola. Rezultati eksperimenata pokazuju da se kosa može ozračavati i preko 20 časova, ukoliko je to potrebno. Zapaženo je da je prisustvo matrijuma u kosi velika smetnja za identifikaciju mikroelemenata, pa ga zato u budućim merenjima treba elimi-nisati određenim postupkom. Već i iz ova dva eksperimenta mogu se nazreti elementi koji bi mogli biti pogodni za identifikaciju ličnosti (Zn, Br, Sc, Cr,

TABLICA 16 ELEMENTI DETERTUOVANJU U UZORCIMA ZRAČENJIM VIŠE OD 5 ČASOVA

Z	IX.8. M	IX.10. M	IX.8. A	IX.10. A	IX.10. A *
11	Na	Na	Na	Na	Na
19	- Sc	- Sc	- Sc	- Sc	- Sc
21	-	- Cr	- Cr	- Cr	- Cr
24	-	- Fe	- Fe	- Fe	- Fe
26	-	- Co	- Co	- Co	- Co
27	-	- Zn	- Zn	- Zn	- Zn
30	-	- Br	- Br	- Br	- Br
35	-	- Sb	- Sb	- Sb	- Sb
42	-	- Mo	- Mo	- Mo	- Mo
51	-	- Ba	- Ba	- Ba	- Ba
55	-	- La	- La	- La	- La
56	-	- Sn	- Sn	- Sn	- Sn
57	-	- Sn	- Sn	- Sn	- Sn
58	-	- Yb	- Yb	- Yb	- Yb
62	-	- Lu	- Lu	- Lu	- Lu
63	-	- Hf	- Hf	- Hf	- Hf
70	-	- Ta	- Ta	- Ta	- Ta
71	-	- W	- W	- W	- W
72	-	- Au	- Au	- Au	- Au
73	-	- Hg	- Hg	- Hg	- Hg
74	-	-	-	-	-
79	-	-	-	-	-
80	-	-	-	-	-

A * - OZNAČAVA DA JE KVARCNA AMPULA MERENA 15 DANA POSLE UZRĀČAVANJA

La, Au, Hg).

Takođe su vršeni eksperimenti sa ciljem da se razjasni kako pojedini postupci pranja utiču na mikroelementarni sastav kose. U tu svrhu korišćene su dve vrste pranja kose.

Prvi je postupak da se kosa tretira prvo etrom, zatim alkoholom i potom ispira vodom. U daljem ćemo ovaj metod označiti sa EAV.

Drugi metod se sastoji u tome što se kosa prvo tretira benzolom, a zatim ispira vodom. Ovaj metod ćemo označavati sa BV.

Uzorci kose za ovaj eksperiment dobijeni su iz Laboratorije RSUP-a SR Srbije. Uzorci su pakovani prema ranije opisanom metodu, a šifre i podaci o uzorcima dati su u tablici 17.

Uzorci su ozračavani u kanalu VK 9/dno + 1 kener i to 20 časova. Nakon vodenja iz reaktora i pripreme uzorka za merenje, snimanje gama spektra izvršeno je u Novom Sadu i to jedan dan posle završetka ozračavanja. Izvršena je identifikacija elemenata i rezultati su prikazani u tablici 18.

TABLICA 17 ŠIFRE I KARAKTERISTIKE UZORAKA

ŠIFRA UZORAKA	KOLJČINA ROSE	TEŽINA ROSE (mg)	NACIN PRAVA
XII - II	2 VLASI	215	NEPRAVA
XII - III	5 VLASI	730	EAV
XII - IV	7 VLASI	710	EAV
XII - V	4 VLASI	603	BV

TABLICA 18 ELEMENTI DETEKTOVANÍ U UZORCÍMA XII-II DO XII-V

Z	SÍFRA :	XII - II	XII - III	XII - IV	XII - V
11	Na	Na	Na	Na	Na
19	K	-	K	K	K
21	Sc	Cr	-	Sc	Cr
24	Cr	-	Mn	-	-
25	-	Pe	-	Pe	-
26	Co	Co	Co	Co	Co
27	-	Zn	Cu	Cu	Cu
29	Zn	-	Zn	Zn	Zn
30	As	Br	As	As	As
33	Br	-	Br	Br	Br
35	-	-	Sr	Sr	-
36	-	-	Zr	Zr	-
40	-	-	Nb	Nb	-
41	Mo	-	Mo	Mo	Mo
42	Te	Ru	Te	Ru	Te
43	Ru	Ru	Ru	Ru	Ru
44	Se	Se	Se	Se	Se
45	I	I	I	I	I
51	Ba	-	Ba	Ba	Ba
53	-	Ba	Ba	Ba	Ba
55	La	-	La	La	La
57	Ca	-	Ca	Ca	Ca
58	-	-	Ca	Ca	Ca
60	Pm	-	Pm	Pm	Pm
61	-	-	-	-	Au
62	Sm	-	-	-	Hg
74	N	-	-	-	Au
80	Au	-	-	-	Hg

U ovoj tablici je naznačeno i vreme trajanja mereњa pojedinih spektara.

Na osnovu tablice 18 nije teško zaključiti da se neprani uzorak kose po sadržini elemenata u tragovima ne razlikuje od uzorka pranog postupkom BV. Uzorci prani postupkom EAV zmatno se razlikuju od nepranog uzorka. Sudeći po ovim rezultatima postupak pranja kose označen sa EAV obogatio je kosu nekim novim elementima koje ona nije imala pre pranja, pa se može zaključiti da je ovim postupkom (verovatno zbog nečistoća u hemikalijama) kosa zaprljana. Međutim, ako se uporedi prisustvo matrijuma u uzorcima može se zaključiti da se pranjem postupkom EAV količina matrijuma smanjuje za oko 100 puta u odnosu na nepranu kosu, dok postupak BV smanjuje količinu matrijuma 30 puta.

Rezultati izvršenih istraživanja mogu se rezimirati na sledeći način:

1. Odabran je kvarcna ampula iz DDR kao najpogodniji materijal u kome će se ozračavati uzorci kose.
2. Odabran je kanal u reaktoru i najpogodnije mesto u kanalu koje je označeno sa VK 9/dmo + 1 keraer.

3. Proverena su vremena ozračavanja i ustanovljeno je posle kog vremena ozračavanja kosa gubi svoju strukturu. Pokazalo se da u odabranim uslovima posle 10 časova ozračavanja kosa postaje krta i iz ampule se može izvaditi samo rastvaranjem u kiselini.

4. Razvijen je metod i postupak za vađenje ugljemisane i sublimisane kose iz ampule, što omogućuje korišćenje i dužih vremena ozračavanja.

5. Uočena je grupa elemenata koja će se u daljim istraživanjima moći koristiti za identifikaciju ličnosti.

6. Razvijen je metod uzimanja i pripremanja uzoraka kose za ozračavanje. Metod pranja kose treba dalje usavršavati da bi se odstranili još neki kontaminantni elementi.

Na kraju, za uzorak pod šifrom IX.10.M, vršena je i kvantitativna analiza mikroelemenata da bi se mogli ustanoviti neki teorijski kriteriji za identifikaciju ličnosti pomoću vlasti kose. Rezultati ovih analiza izloženi su u sledećem paragrafu.

6. Statističko testiranje uzoraka

Tokom rada pokušali smo da uspostavimo neke kriterijume za poređenje uzoraka. Zbog složenosti i skupoće eksperimenta nismo bili u mogućnosti da obavimo ispitivanje onog broja uzoraka, koji bi dozvolio da se testiranje vrši nekim od poznatih kriterijuma statistike velikog broja uzoraka, kao što su normalna, binomna ili Poasonova distribucija. Pored ovih, postoji i distribucije koje se koriste u situacijama kada se raspolaže malim brojem podataka. To su "Student"-ova distribucija i "hi-kvadrat" distribucija. Ovde ćemo koristiti "Student"-ovu t-distribuciju i to na način kako je ona korišćena u radu³⁵⁾. U radu³⁵⁾ upoređivani su uzorci boja automobila koji su bili dostupni posle automobilskog sudara. Uzete su bile iste količine boje sa automobila koji je bio udaren u sudaru i sa automobila za koji se sumnjalo da je izazvao sudar. Neutronskom aktivacionom analizom određivani su tragovi matrijuma u oba uzorka a zatim je korišćen metod unakrsnog poređenja sa upotrebom "Student"-ovog t-testa.³⁶⁾ Svaki od uzoraka boje deljen je na težinski dva jednakata dela, u svakom od ovih delova određivana je koncentracija matrijuma i ovi rezultati su uključeni u formulu za granice pou-

zdanosti t-testa. Na osnovu dobijenog rezultata i uopšte usvojenih kriterijuma, o kojima će kasnije biti više reči, konstatovano je da su uzorci "znatno različiti". Kasnije testiranje još jednog uzorka uzetog sa novog "sumnjivog" automobila pokazalo je "znatnu sličnost", pa je na taj način nađen prekršilac.

Rezultati ovoga rada naveli su nas na misao da na isti način testiramo rezultate analize mikroelemenata u vlasima koje su ispitivane na način opisan u prethodnom paragrafu. Uzet je uzorak pod šifrom IX.10.M koji je u aluminijskoj foliji zračen oko 20 sati u reaktoru. Ispitivana su po dva jednakaka dela za sve četiri vlasti. Ovi delovi bili su dugi 3 sm. Određivane su količine cinka (γ -linija od 438,7 Kev), zatim količina brom-a (γ -linija od 554,3 Kev) i antimona (γ -linija od 564,0 Kev) za svaku od polovina sve četiri vlasti. Rezultati su dati u tablici 19. Ovi rezultati bili su dovoljni da se izvrši testiranje po "Student"-ovoj distribuciji, analogno onome koje je izvršeno u ³⁵). Treba napomenuti da su za testiranje namerno odabrani cink, brom i aluminijski, jer oni pripadaju trima različitim grupama po svom biološkom značaju. Prema klasifikaciji koja je izvršena u prethodnom paragrafu cink pripada grupi biološki značajnih elemenata, brom bi mogao da bude biološki značajan,

TABLICA 19 KONCENTRACIJA MIKROELEMENTA U ppm

REDNI BROJ VLAŠI	X_{Zn}		X_{Br}		X_{Se}	
	PRVA POLOVINA	DRUGA POLOVINA	PRVA POLOVINA	DRUGA POLOVINA	PRVA POLOVINA	DRUGA POLOVINA
1	951	932	987	985	42	41
2	395	387	1275	1272	27	26
3	1358	1356	132	130	5	4
4	85	81	3278	3275	0,5	0,4

Zniman

dok se za ~~slavničkim~~ pretpostavlja da je kontaminant i da bi pranjem mogao da bude odstranjen. Unapred se znalo da su četiri ispitivane vlasti pripadale različitim osobama, pa je testiranje preduzeto sa ciljem da se proveri ispravnost hipoteze o razvrstavanju elemenata u grupe a_1 , b_1 i c_1 koja je izložena u prethodnom paragrafu.

U osnovi "Student"-ovog testa leži tzv.

- . "multa hipoteza" po kojoj su uzorci koji se upoređuju identični, ali se zbog grešaka pri meranju ova identičnost ne može ustanoviti. Zbog toga se uvodi granica pouzdanosti testa, koja predstavlja meru ispravnosti multe hipoteze. Ukoliko je granica pouzdanosti testa bliže jedinici, utoliko je multa hipoteza ispravnija i imamo više razloga da verujemo u identičnost upoređivanih uzoraka. Ako je granica pouzdanosti bliska nuli, to znači da je u datom slučaju multa hipoteza neispravna i da su upoređivani primerci međusobno različiti. Ponekad je zgodnije koristiti recipročnu vrednost granice pouzdanosti, kada se mora rasuđivati na sledeći način: bliskost recipročne vrednosti jedinici garantuje identičnost uzoraka, a njezin neogramičeno povećavanje označava različitost uzoraka.

U svom originalnom radu ³⁶⁾ V.S.Goset
 (koji je radeve objavljivao pod pseudonimom "Student") za granicu pouzdanosti $\alpha_f(t)$ navodi sledeći izraz:

$$\alpha_f(t) = 1 - \frac{1}{\sqrt{f\pi}} \frac{\Gamma(\frac{f+1}{2})}{\Gamma(\frac{f}{2})} \int_{-t}^t \frac{U_f(z) dz}{(1 + \frac{z^2}{f})^{\frac{f+1}{2}}} \quad (6.1)$$

gde je f broj stepeni slobode (broj merenja koji treba izvršiti umanjen za broj uzeraka koji se porede), $U_f(z)$ funkcija preko koje se obezbeđuje jednakost površina u intervalu $[-t, t]$ za različite vrednosti f i

$$\Gamma(x) = \int_0^\infty dt t^{x-1} e^{-t} \quad (6.2)$$

je poznata "gama"-funkcija. U slučaju koji se ovde razmatra broj stepeni slobode iznosi $f=2$ jer poredimo po dve vlasti, a pri tome uvek vršimo četiri merenja (merimo koncentracije mikroelemenata u dva dužinski jednaka dela svake vlasti). Za ovakav slučaj (u detalje računa i objašnjenja se neće moći upuštati) u ³⁶⁾ se za recipročnu vrednost granične pouzdanosti navodi sledeći izraz

$$\frac{1}{d_2(t)} = t^2 + \frac{3}{2} - \frac{1/2}{1+t^2+\sqrt{2+t^2}t^2} \approx t^2 + \frac{3}{2} \quad (6.3)$$

Granice distribucije t računaju se po obrazcu

$$t = \frac{\Delta}{S} \quad (6.4)$$

gde je Δ srednja greška pri merenju, a S ukupna varijanta. Ako sa $X_{ik}^{(A)}$ označimo koncentraciju elementa A u merenom delu uzorka, pri čemu prvi indeks označava uzorak, a drugi označava koja je polovina uzorka u pitanju, onda je, na osnovu (6.4), za uzorke i i j :

$$t_{ij}^{(A)} = \frac{\frac{1}{2}(X_{i1}^{(A)} - X_{j1}^{(A)} + X_{i2}^{(A)} - X_{j2}^{(A)})}{\sqrt{\left(\frac{X_{i1}^{(A)} - X_{i2}^{(A)}}{2}\right)^2 + \left(\frac{X_{j1}^{(A)} - X_{j2}^{(A)}}{2}\right)^2}} \quad (6.5)$$

pa je, na osnovu (6.3) :

$$\left[\frac{1}{\alpha_{ij}^{(A)}} \right]^n = \frac{(X_{i1}^{(A)} - X_{j1}^{(A)} + X_{i2}^{(A)} - X_{j2}^{(A)})^2}{(X_{i1}^{(A)} - X_{i2}^{(A)})^2 + (X_{j1}^{(A)} - X_{j2}^{(A)})^2} + \frac{3}{2} \quad (6.6)$$

Prilikom određivanja srednje greške pri merenju Δ , a preko nje i granice t za "Student"-ovu distribuciju uzeta je aritmetička sredina kao srednja vrednost koncentracije. Poznato je da ovo nije uvek najbolji način za određivanje srednje vrednosti i da svaka od distribucija za veliki broj uzoraka ima svoju srednju vrednost. Pošto ovde imamo mali broj uzoraka i mali broj merenja, mi nismo u mogućnosti da odredimo koji bi tip srednje vrednosti najviše odgovarao ispitivanom slučaju. Bez obzira na to, ipak se zna da srednja vrednosti variraju između aritmetičke sredine merenih vrednosti i aritmetičke sredine logaritama merenih vrednosti, pa ćemo zato koristiti dva izraza za recipročnu granicu pouzdanosti, i to izraz (6.6), koji je dobijem preko srednje vrednosti kao aritmetičke sredine vrednosti merenih koncentracija i izraz

$$\left[\frac{1}{d_{ij}} \right]^{log} = \frac{(\log x_{ii}^{(A)} - \log x_{ji}^{(A)} + \log x_{i2}^{(A)} - \log x_{j2}^{(A)})^2}{(\log x_{ii}^{(A)} - \log x_{i2}^{(A)})^2 + (\log x_{ji}^{(A)} - \log x_{j2}^{(A)})^2} + \frac{3}{2} \quad (6.7)$$

koji se dobija preko srednje vrednosti koja bi bila aritmetička sredina logaritama merenih koncentracija. Za svaki par uzoraka i za svaki element biće računati i $\left[\frac{1}{\alpha_{ij}}\right]^n$ i $\left[\frac{1}{\alpha_{ij}}\right]^{\log}$, a kao aktuelna biće uvek korišćena manja vrednost. Uzimanje manje vrednosti odgovara većoj ispravnosti multi hipoteze, što praktično znači da ako tako radimo onda možemo biti sigurniji u onaj rezultat testa koji tvrdi da su uzorci međusobno različiti³⁵⁾.

Rezultati izračunavanja recipročne granične pouzdanosti dati su u tablici 20. Tablica 21, uzeta iz³⁷⁾ daje uobičajenu procenu sigurnosti testa na bazi matematičkih recipročnih granica pouzdanosti, pa na osnovu tablica 20 i 21 možemo izvesti određene zaključke. Test sa cinkom pokazuje da sve četiri vlasti pripadaju različitim osobama. To isto pokazuje i test sa bromom. Testiranje aluminijuma daje odgovor da vlasti verovatno (a ne sigurno) pripadaju istoj osobi. Ovi rezultati mogu se interpretirati kao dokaz da je cink zaista biološki značajan element i da ga treba svrstati u grupu a_1 . Rezultati takođe pokazuju da je aluminijski kontaminant, jer njegovo testiranje pokazuje da vlasti verovatno pripadaju istoj osobi mada pouzdano znamo da one pripadaju različitim osobama. Ova "greška" koju daje aluminijski test

TABLICA 20 RECIPROČNE GRANICE POUZDANOSTI PO "STUDENT"-OVOM TESTU

i,j	Z_{α}	B_r	S_6
12	$\left[\frac{1}{d_{ij}} \right]^n \log \left[\frac{1}{d_{ij}} \right]^{\text{act}}$	$\left[\frac{1}{d_{ij}} \right]^n \log \left[\frac{1}{d_{ij}} \right]^{\text{act}}$	$\left[\frac{1}{d_{ij}} \right]^n \log \left[\frac{1}{d_{ij}} \right]^{\text{act}}$
13	28537	37414	28537
14	189356	15073	15073
15	78214	86420	78214
23	548930	147198	147198
24	47447	166674	47447
34	3246167	134350	134350

TABLICA 21 GRANICE TOLERANCIJE U "STUDENT-UVOM
TESTU

1000 - ∞	SIGURNO RAZLIČITI
100 - 1000	VEROVATNO RAZLIČITI
20 - 100	VEROVATNO ISTI
1,5 - 20	SIGURNO ISTI

ukazuje na to da on u postupku pranja nije dovoljno odstranjeno iz vlasa. Najinteresantniji odgovor daje testiranje brom-a. Rezultat brom-testa pokazuje da vlasti pripadaju razlicitim osobama, tj. isto ono sto pokazuje i cink-test. Na osnovu ovoga, brom bi se iz grupe b_1 (to su elementi koji mogu biti biološki značajni) mogao prebaciti u grupu a_1 , biološki značajnih elemenata.

Pošto smo metodiku eksperimenta detaljno razradili, nameravamo da u daljem ispitamo veliki broj uzoraka i da konačno ustanovimo sa koliko se opravdanosti ljudska vlas može "individualizovati". Ispitivanje većeg broja uzoraka omogućuje statističko testiranje po nekoj od distribucija za visoke populacije, pa se umesto ovde korišćenog "Student"-ovog testa mogu uzeti i neki drugi testovi, kao na primer onih iz referenci^{38,39}), gde se koriste Bayesov i modificirani Bayesov kriterijum.

D R U G A G L A V A

METODI STATISTIČKE FIZIKE1. Uvodne napomene.-

U skladu sa osnovnim našim ciljem - da izvršimo selekciju onih metoda fizike koji bi se najuspešnije mogli primeniti u kriminalističkim istraživanjima - ovde ćemo sa tog aspekta razmotriti oblast teorijske fizike i njene metode. S obzirom na razgranatost teorijske fizike i njenih metoda, bilo bi iluzorno pokušavati da se u jednom mahu oceni mogućnost primene celokupne teorijske fizike u kriminalistici, pa ćemo se zato ovde ograničiti na jednu njenu oblast - statističku fiziku - za koju nam se čini da bi najpre i najlakše mogla da se uklopi u potrebe kriminalistike.

Statistička fizika, koja bazira na osnovnim pojmovima teorije verovatnoće i matematičke statistike, danas predstavlja, u metodološkom smislu, najbogatiju i najrazvijeniju oblast fizike. Metodi koji se u njoj koriste, ujedinjuju u sebi ideje triju oblasti: matematike, fizike i teorije informacija, pa kao takvi predstavljaju jedno univerzalno orudje istraživanja, čiji se domet ne završava na granicama statističke fizike, pa ni fizike uopšte, već je daleko veći. Naravno, penetracija metoda statističke fizike u druge oblasti istraživanja, pa medju njima i u

kriminalistiku, zahteva dobro zasnovane analogije izmedju pojmove sa kojima se operiše u statističkoj fizici i pojmove karakterističnih za datu oblast istraživanja. Ovakve analogije moraju se, prema tome, pronaći i na relaciji statistička fizika - kriminalistika, ako želimo da kriminalističke metode u punoj meri obogatimo veoma efikasnom metodologijom statističke fizike. Ovo, naravno ne bi bio i jedini način povezivanja statističke fizike sa kriminalistikom. Pošto se metodima statističke fizike permanentno proširuju i usavršavaju naša saznanja o čisto fizičkim fenomenima, uvek postoji mogućnost da se neka od ovih novih saznanja iz fizike primene u kriminalistici. Otuda povezivanje statističke fizike sa kriminalistikom treba da se vrši u dva smera. Jedan bi bio formiranje discipline koju ćemo uslovno nazvati statistička kriminalistika, pri čemu bi u temelje ove discipline bile ugradjene analogije izmedju statističkih i kriminalističkih pojmove, i u kojoj bi se operisale metodima statističke fizike, dok bi se drugi sastojao u istraživanju mogućnosti primene novih fizičkih saznanja u kriminalistici.

Ovde ćemo pokušati da demonstriramo i jedno i drugo. Ove pokušaje treba pre shvatiti kao inicijativu da se pri povezivanju fizike sa kriminalistikom razmišlja na jedan određen način, nego kao gotovu i kompletну teoriju tog povezivanja. Na formiranju kompletne teorije treba još mnogo i dugo da se radi, a smatramo da bi se

ovde učinjeni pokušaji potpuno opravdali, ako bi pobudili veće interesovanje za formiranje jedne ovakve teorije i inicirali nova istraživanja u tom pravcu.

Tematski, materijal ove glave može se podeli na tri dela. U prvom bi bile izložene osnove statističke fizike i njeni najefikasniji metodi (treba napomenuti da statistička fizika koristi metode gotovo svih oblasti teorijske fizike), drugi bi bio posvećen istraživanju nekih karakteristika optičkog "pumpanja" materijala i istraživanju elektronske magnetne rezonance, sa osvrtom na eventualnu primenu dobijenih rezultata u kriminalističkim analizama i treći bi predstavljao pokušaj primene metoda statističke fizike u istražnom postupku na bazi analogije nekih osnovnih pojmoveva jedne i druge oblasti.

2. Osnovni pojmovi i problemi statističke fizike.-

Statistička fizika se pojavila zbog potrebe da se formira teorija srednjeg ponašanja sistema koji se sastoje od veoma velikog broja, u opštem slučaju, interagujućih čestica. Ove čestice se ponašaju bilo po zakonima klasične dinamike bilo po zakonima kvantne mehanike, pa na prvi pogled nema potrebe za formiranjem posebne oblasti koja bi izučavala njihovo ponašanje, jer ni klasični ni kvantni zakoni nemaju nikakva ograničenja u smislu broja objekata na koje se odnose. Na ovaku ideju dolazi se, kao što je rečeno, samo na prvi pogled. Ako se problem detaljnije razmotri onda dolazimo do zaključka da bi metodi klasične dinamike ili kvantne mehanike mogli da nam pruže

informaciju o ponašanju svake od čestica po osobi u svakom trenutku vremena (naravno ukoliko bismo uspeli da rešimo ogroman broj diferencijalnih jednačina koje opisuju ponašanje skupa čestica, što je samo po sebi ne izvodljivo), a to bi bio rezultat koji se ne bi mogao verifikovati ni najsavršenijim eksperimentalnim metodima, jer nemoguće je ni zamisliti aparat koji bi mogao istovremeno da registruje svaki detalj ponašanja svake od $N \sim 10^{24}$ i više čestica koje obrazuju sistem. Eksperiment nam daje samo srednje (makroskopske) karakteristike sistema, kao što su pritisak, zapremina, unutrašnja energija itd., pa je zbog toga neophodno formulisati teoriju koja bi pružala mogućnost da se za poznate mikroskopske karakteristike sistema izračunaju njegove srednje tj., makroskopske karakteristike. U ovome se i sastoji osnovni zadatak statističke fizike.

U klasičnoj statističkoj fizici osnovni pojam je funkcija raspodele f koja predstavlja verovatnoću da u aktu merenja registrujemo da nam se sistem nalazi u datom elementu faznog prostora. Funkcija f zavisi od koordinata i impulsa svih čestica koje čine sistem, i od vremena. Fazni prostor je konstruisan na projekcijama svih impulsa i svih koordinata svih N čestica koje čine sistem, pa prema tome, poznavanje jedne tačke ovog prostora znači poznavanje ponašanja celokupnog sistema u datom trenutku vremena. Pošto, kao što je napred rečeno, nama nije potrebno da znamo ponašanje svake od čestica po osobi, što bi

odgovaralo poznavanju "kretanja" fazne tačke kroz fazni prostor, to se u analizu uvodi pojam ansambla sistema, a to je skup beskonačno velikog broja kopija ispitivanog sistema koji se svi nalaze pod istim spoljašnjim uslovima (pritisak, zapremina, temperatura, kontakt sa okolinom itd.). Osim ovog ograničenja, nikakvi drugi uslovi se ne nameću na koordinate i impulse čestica koje ulaze u ansambl. Sada se zadatak teorije formuliše tako što se ne traži položaj fazne tačke u prostoru, već samo verovatnoća f da se jedna od faznih tačaka (znači jedan od sistema koji ulaze u ansambl) prilikom merenja registruje kao prisutna u elementu fazne zapremeine $dp dq$. Odavde očigledno sledi

$$\int dp dq f(p, q, t) = 1 \quad (2.1)$$

$$p = p_i ; q = q_i \quad i \in (1, 2, 3, \dots, 3N)$$

gde se integral uzima po celokupnom faznom prostoru. Ako znamo funkciju f , onda se srednja vrednost bilo koje fizičke karakteristike ansambla A određuje na osnovu zakona matematičke statistike kao matematičko očekivanje po raspodeli f tj., kao:

$$\langle A(p, q, t) \rangle = \int dp dq A(p, q, t) f(p, q, t) \quad (2.2)$$

Izračunavanjem srednjih vrednosti tipa (2.2) završen je osnovni zadatak statističke fizike, jer se ove srednje vrednosti dobijaju i kao rezultat merenja, pa imamo mogućnost povezivanja teorije sa eksperimentom.

Osnovnu teškoću statističke fizike predstavlja da se za date spoljašnje makroskopske uslove u kojima se nalazi sistem iz zakona dinamike izvode pravilna funkcija raspodele. Ovaj zadatak do danas nije rešen, jer Gibbs je postulirao, a ne izveo, funkcije raspodele za različite tipove ansambla. Maksimum informacije o ravnotežnoj funkciji raspodele (ravnotežna funkcija raspodele ne zavisi eksplicitno od vremena), koji se mogao dobiti iz zakona dinamike (ove je za sistem čestica najpogodnije iskazati Hamiltonovim jednačinama:

$$\dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i} ; \quad \dot{p}_i = - \frac{\partial H}{\partial q_i} ; \quad i \in \{1, 2, \dots, 3N\} \quad (2.3)$$

gde je H suma kinetičke i potencijalne energije sistema ili Hamiltonova funkcija), bilo je to, da ona predstavlja integral kretanja, pa da prema tome mora zavisiti od ostalih integrala kretanja koji karakterišu sistem. Ovaj zaključak, omogućuje da se zavisnost f od $6N$ varijabli p_i i q_i zameni zavisnošću od energije sistema kao integrala kretanja i zavisnošću od nekoliko parametara koji karakterišu spoljašnje uslove u kojima se sistem nalazi. Međutim, oblik zavisnosti f od ovih veličina, nije se

mogao izvesti iz dinamičkih zakona. On je mogao biti do-
sledno izведен samo na bazi teorije informacija.⁴⁰⁻⁴⁵⁾

U kvantnoj statističkoj mehanici ne može se koristiti pojam faznog prostora, jer je na osnovu Hajzenbergovog principa neodredjenosti nemoguće istovremeno i koordinatu i impuls čestice, pa ih prema tome ne možemo ni zadavati kao koordinate nekog hiperprostora. Ova neodredjenost u određivanju koordinate, odnosno impulsa, rešila je jedno veoma važno pitanje za klasičnu statističku fiziku, a to je, koliki je minimalni elemenat faznog prostora. Ispostavilo se da minimalni elemenat faznog prostora u klasičnoj statističkoj fizici ne može da bude tačka (element nulte zapreme), jer bi to vodilo na singularitete prilikom proračuna termodinamičkih sistemata. Tek sa pojavom kvantne mehanike usvojen je, da zbog principa neodredjenosti, minimalni element faznog prostora mora da ima "zapreminu" $\hbar^3 N$ gde je \hbar - Plankova konstanta, a N broj čestice u sistemu.

Pošto se u statističkoj fizici uvek posmatra sistem u nekom kontaktu sa okolinom, kvantna statistika mora da vodi računa o ovome i zbog toga ponašanje sistema čestica ne opisuje vektorom stanja već tako zvanom matricom gustine. U kvantnoj mehanici se predpostavlja da je kontakt sa okolinom zanemarljivo mali, pa se kvantni objekti najčešće opisuju vektorom stanja. Pomoću vektora stanja ⁴⁶⁾ $|t_K X \rangle$ gde je X skup koordinata, K skup kvan-

tnih brojeva i t - vreme, definiše se kvantno mehanička srednja vrednost fizičke veličine (linearnog i hermitovog operatora \hat{A}) na sledeći način:

$$\bar{\hat{A}}_{k,t} = \int dx \langle x k t | \hat{A} | t k x \rangle \quad (2.4)$$

Ovaj način opisivanja sistema uvek predstavlja idealizaciju stvarne situacije, jer je kvantni objekt uvek u nezanemarljivoj interakciji sa makroskopskim mernim instrumentom, pa bi strog opis zahtevao uvođenje vektor stanja za sistem: kvantni objekt + merni instrument.

U kvantnoj statistici ne smemo zanemariti kontakt sa okolinom (on u statistici, kao što je već napomenuto, bitno može da utiče na ponašanje sistema) i zato u principu treba da nadjemo vektor stanja koji bi opisivao i uočeni sistem i okolinu sa kojom je on u kontaktu, pa da iz njega apstrahujuemo vektor stanja samoga sistema. Zbog nepredvidive interakcije između mikroobjekata koji čine sistem i makroskopske okoline ovo apstrahuovanje vektora stanja sistema ne može ni u principu da se izvrši, pa smo zbog toga prinudjeni da koristimo vektor stanja izolovanog sistema i kvantnomehaničke srednje vrednosti $\bar{\hat{A}}_{k,t}$, ali pored toga moramo da zadamo i verovatnoće W_k da ćemo u aktu merenja registrovati da se sistem nalazi u stanju opisanom skupom kvantnih brojeva R . Tek tada se može izračunati kvantno-statistička

srednja vrednost

$$\langle \hat{A} \rangle_t = \sum_k W_k \hat{A}_{k,t} = \sum_k W_k \int dx \langle x | \hat{A} | t_k x \rangle \quad (2.5)$$

koja je upoređiva sa eksperimentom, jer kao što vidimo ona kao i u klasičnoj statistici predstavlja matematičke očekivanje po distribuciji W_k . Vrlo je važno naglasiti da su nalaženje vektora stanja čistog sistema i nalaženje verovatnoće W_k dva potpuno nezavisna problema, od kojih ovaj drugi, kao i u klasičnoj statistici, može neprotivurečno da se reši samo korišćenjem metoda teorije informacija. Uvodeći projekcioni operator:

$$\hat{P} = \int dx |x\rangle \langle x|$$

$$\hat{P}|y\rangle = \int dx |x\rangle \langle x|y\rangle = \int dx |x\rangle \delta(x-y) = |y\rangle \quad (2.6)$$

iz formule (2.5) lako zaključujemo da statistička srednja vrednost operatora \hat{A} predstavlja "špur", tj. sumu dijagonalnih elemenata matrice koja odgovara proizvodu operatora \hat{A} i nekog operatora \hat{P} ; ovaj poslednji se naziva statističkim operatorom. Zaista:

$$\begin{aligned}
 \langle \hat{A} \rangle_t &= \sum_k W_k \int dz \langle z_k t | \hat{A} | t_{kz} \rangle = \\
 &= \sum_k W_k \int dz \langle z_k t | \hat{p} \hat{A} \hat{p} | t_{kz} \rangle = \\
 &= \sum_k W_k \int dx dy dz \langle z_k t | x \rangle \langle x | \hat{A} | y \rangle \langle y | t_{kz} \rangle = \\
 &= \int dx dy \langle x | \hat{A} | y \rangle \langle y | \left\{ \sum_k W_k \int dz | t_{kz} \rangle \langle z_k t | \right\} | x \rangle = \\
 &= \int dx dy \langle x | \hat{A} | y \rangle \langle y | \hat{\rho}(t) | x \rangle = \\
 &= \text{Sp} \{ \hat{A}(t) \hat{\rho}(t) \}
 \end{aligned} \tag{2.7}$$

gde je:

$$\hat{\rho}(t) = \sum_k W_k \int dx | t_{kx} \rangle \langle x_k t | \tag{2.8}$$

Stavljući u (2.7) $\hat{A}(t)=1$ dolazimo do rezultata da je $\text{Sp } \hat{\rho}(t)=1$, a odatle sledi i:

$$\sum_k W_k = 1 \tag{2.9}$$

Matrica korespondira ^{naj} statističkom operatoru $\hat{\rho}(t)$
čiji su elementi dati sa:

$$\rho(x, y, t) = \langle x | \hat{\rho}(t) | y \rangle \tag{2.10}$$

naziva se matrica gustine i pošto X i Y predstavljaju skupove od po $3N$ konfiguracionih varijabli, po broju promenljivih od kojih zavisi, matrica gustine predstavlja pandan funkciji raspodele u klasičnoj statistici.

U kvantnoj statistici, mikroobjekti (čestice) se međusobno ne razlikuju i zato je potrebno voditi računa o pravilnoj simetriji vektora stanja u odnosu na permutacije čestica. Čestice koje se opisuju vektorom stanja simetričnim u odnosu na permutacije nazivaju se Bože-čestice ili bozoni. Čestice kojima se korespondira vektor stanja antisimetričan u odnosu na permutacije su Fermi-čestice ili fermioni. Prilikom primena kvantne statistike mora se stoga voditi računa o tome koja je simetrija čestica koje obrazuju sistem.

Gore su bile navedene razlike izmedju kvantne i klasične statistike. U svemu ostalom se poklapaju. Kvantna statistika takođe uvodi pojam ansambla i takođe ima teškoće da distribucije W_k izvede iz zakona kvantne mehanike. I ovde se radi formulisanja funkcija W_k za različite tipove ansambla moraju pozivati u pomoć teorije metodi i zakonitosti informacija.

3. Teorija informacija i statistika.-

U predhodnom paragrafu je više puta nepomenuto da se raspodele za pojedine tipove ansambla ne mogu izvesti iz zakona dinamike, koji leže u osnovi klasične statistike. To isto važi i za kvantne ansamble. Verovatnoće

ψ , da sistem u aktu merenja bude registrovan u stanju R , ne mogu se izvesti iz kvantnih zakonitosti sistema, koje su izražene Šredingerovom jednačinom. U klasičnoj statistici Gibbs je postulirao raspodele za pojedine tipove ansambla. Ovi Gibbsovi postulati su kasnije preneseni i u kvantu statistiku i obe teorije su davale dobre rezultate, mada njihova najvažnija radna formule nisu mogle da se izvedu iz osnovnih fizičkih zakonitosti koje vladaju u sistemu čestica.

Poslednjih godina se insistira na tome da se statistička fizika shvati kao jedna posebna oblast teorije informacija.⁴³⁾ Posebna u smislu da se odnosi na fizičke sisteme. Cvakav stav svakako ima svoje opravdanje, jer svaki akt merenja u fizici nije ništa drugo do sakupljanje informacije o sistemu čije se karakteristike mere.

Pošto se statistika kao fizička teorija pojavila u prvom redu zbog toga da bi se objasnili rezultati eksperimenata vršenih nad sistemima sa velikim brojem čestica, onda je i razumljivo da se osnovne statističke zakonitosti lakše mogu izvesti na osnovu logike teorije merenja, tj.

na osnovu informacionističkog rezonovanja, nego na osnovu dinamičkih zakonitosti, koje su za veliki broj interagujućih čestica veoma komplikovane. Ovde ćemo ukratko izložiti postupak pomoću koga se na bazi teorije informacija dobijaju raspodele za pojedine fizičke ansamble. Ograničićemo se na kvantne ansamble uz napomenu da se svi dobijeni rezultati mogu neposredno, bez ikakvih bitnih promena, primeniti i na klasične ansamble.

Posmatraćemo diskretan skup dogadjaja $1, 2, \dots, k, \dots, N$. Verovatnoću da se desi dogadjaj k označavamo sa Π_k . Očigledno je da veličine Π_k moraju da zadovoljavaju uslove

$$\sum_{k=1}^N \Pi_k = 1 ; \quad \Pi_k \geq 0 \quad k \in \{1, 2, \dots, N\} \quad (3.1)$$

Formiraćemo sada sladeću veličinu

$$S_i = - \sum_{k=1}^N \Pi_k \ln \Pi_k \quad (3.2)$$

Analizirajući osobine veličine S_i možemo zaključiti sledeće: ako je verovatnoća dogadjaja k ravna jedinici, a sve ostale ravne nuli, onda je $S_i = 0$; ako su svi dogadjaji pojednako verovatni, tj. $\Pi_k = \frac{1}{N}$ za svako $k \in \{1, 2, \dots, N\}$, ono S_i ima maksimalnu

vrednost koja iznosi $S_i = \ln N$. Kao što vidimo veličina S_i predstavlja meru odredjenosti, odnosno meodredjenosti, informacije o posmatranom sistemu. Ako je $S_i = 0$ onda je informacija potpuno određena, jer pri svakom informisanju o sistemu mi dobijamo uvek isti odgovor: desio se dogadjaj k . Ako je pak $S_i = \ln N$, onda je informacija o sistemu maksimalno neodredjena; pri svakom informisanju sa pojednakom verovatnoćom možemo očekivati odgovor da se desio bilo koji od K dogadjaja. Veličina S_i naziva se informaciona ili Šenonova entropija.⁴⁰⁾

Razmotrimo sada slučaj kvantne statistike. Verovatnoće W_k da u aktu merenja sistem registrujemo u kvantnom stanju k možemo poistovetiti sa verovatnoćama Π_k , ako akte merenja shvatimo kao pokušaje dobijanja informacija o sistemu čestica. Tada možemo uvesti i meru odredjenosti dobijane informacije o sistemu prilikom merenja, potpuno analogno Šenonovoj entropiji, tj. možemo uvesti statističku entropiju.

$$S = - \sum_k W_k \ln W_k \quad (3.3)$$

Sada se postavlja pitanje, kako na bazi uvedene veličine S koja predstavlja meru odredjenosti odgovara koji se dobija prilikom izvršenog merenja, formulisati onu distribuciju koja bi teorijski najadekvatnije opisivala rezultate merenja? Odgovor je logičan: moramo tražiti onu distribuciju koja odgovara maksimalno objektivnoj informaciji prilikom merenja sistema. Pošto se sistem uvek nalazi u nekom kontaktu sa okolinom, pri čemu tip kontakta definiše domen stanja u kojima se sistem pri merenju može registrovati, traženje maksimalno objektivne informacije svodi se na variranje entropije S uz zadate uslove, koji su definisani tipom kontakta sa okolinom.

Ovo ćemo demonstrirati na najkarakterističnijim statističkim ansamblima. Razmotrićemo prvo slučaj mikrokanoničkog ansambla. Sistem ima stalan broj čestica N i stalnu zapreminu V , a svojstvene vrednosti hamiltonijana sistema, tj. njegove energije E_k , mogu da variraju u uskom energetskom intervalu $E \leq E_k \leq E + \Delta E$; $\left| \frac{\Delta E}{E} \right| \ll 1$. Ovakav sistem se simulira beskonačno velikim skupom svojih kopija koje sve ispunjavaju navedene uslove, a ovakav skup kopija datog sistema se naziva mikrokanonički ansambl. Pri aktu merenja uvek će biti registrovana jedna od kopija i njena energija će ležati uvek negde u intervalu $[E, E + \Delta E]$. De facto, ne radi se ni o kakvim kopijama, jer je sistem jedan, ali se prilikom merenja može registrovati bilo

koja od energija iz intervala $[E, E + \Delta E]$, pa prividno izgleda da pri svakom merenju registrujemo neki, u energetskom smislu, novi sistem. Za mikrokanonički ansambl kontakt sa okolinom dopušta toleranciju energiju ansambla za veličinu ΔE . Formiramo entropiju $S = -\sum_k W_k \ln W_k$ i pošto važi uslov $\sum_k W_k = 1$, maksimalno objektivnu informaciju dobijamo izjednačujući sa nulom varijaciju veličine $\phi = \sum_k (W_k \ln W_k + \alpha W_k)$ gde je α neodređeni Lagranžev množitelj. Tada:

$$\delta \phi = -\sum_k \delta W_k (1 + \alpha + \ln W_k) = 0;$$

$$W_k = e^{-(1+\alpha)} \equiv \Omega^{-1}(E, N, V)$$

gde je Ω neka proizvoljna funkcija od parametra E , N i V koji definišu ponašanje ansambla. Zamenjujući W_k u uslovu normiranja i vodeći računa da prema zadatim uslovima k ne prolazi sve moguće vrednosti, već samo one za koje E_k leži u intervalu $[E, E + \Delta E]$ konačno dobijemo

$$\Omega(E, N, V) = \sum_{E \leq E_k \leq E + \Delta E} 1 ; \quad W_k = \Omega^{-1}(E, N, V) = \frac{1}{\sum_{E \leq E_k \leq E + \Delta E} W_k}$$

tj. da je distribucija mikrokanoničkog ansambla jednaka recipročnoj gustini kvantnih stanja u energetskom intervalu $[E, E + \Delta E]$.

Ako se sistem sa stalnom zapreminom V i stalnim brojem čestica N nalazi u kontaktu sa okolinom (termostatom) i to takvom da se u kontaktu razmenjuje energija u dozama $\Theta = K_B T$ (K_B je Boltzmanova konstanta i T absolutna temperatura) onda se ovakav sistem simulira beskonačnim skupom svojih kopija koje se sve nalaze u navedenim uslovima i ovaj skup se naziva kanonički ansambl. Razmena energije sa termostatom po pretpostavci teče tako da srednja energija ansambla ostaje očuvana, tj.:

$$\sum_k E_k W_k = \text{const} \equiv \langle \hat{H} \rangle \quad (3.5)$$

Verovatnoću koja odgovara najobjektivnijoj informaciji o sistemu za navedene uslove dobijamo izjednačujući sa nulom varijaciju forme

$$\phi = - \sum_k \left\{ W_k \ln W_k + \alpha W_k + \beta E_k W_k \right\} \quad (3.6)$$

gde se neodredjeni Lagranžev množitelj β definiše kao recipročna vrednost temperature izražena u energetskim jedinicama, tj., $\beta = \Theta^{-1}$. Znači:

$$\delta \phi = -\sum \delta w_i \left\{ 1 + \alpha + \beta E_K + \ln w_K \right\} = 0$$

$$w_K = e^{-(1+\alpha)} e^{-\frac{E_K}{\theta}} =$$

$$= Q^{-1}(\theta, N, V) e^{-\frac{E_K}{\theta}} \quad (3.7)$$

Funkciju $Q(\theta, N, V)$ koja zavisi od parametra θ , N i V koji definišu ponašanja sistema, odredujujemo iz uslova mormiranja $\sum_K w_K = 1$ tako da je

$$Q(\theta, N, V) = \sum_K e^{-\frac{E_K}{\theta}}$$

$$w_K = Q^{-1}(\theta, N, V) e^{-\frac{E_K}{\theta}} \quad (3.8)$$

Veličina Q je statistička suma kanoničkog ansambla. Ako su u formuli (2.8), $|t_{KX}\rangle$ svojstveni vektori hamiltonijana sistema, onda se na osnovu nađenih izraza za verovatnoće lako zaključuje da statistički operator kanoničkog ansambla ima oblik

$$\hat{\rho} = e^{\frac{F - \hat{H}}{\theta}} \quad (3.9)$$

gde je $F(\theta, N, V) = -\theta \ln Q(\theta, N, V)$ - slobodna energija ansambla.

Ako sistem sa termostatom razmenjuje i energiju i čestice, a zapremina mu je stalna i iznosi V , onda se radi o velikom kanoničkom ansamblu. Ovde verovatnoće

zavise i od K i od promenljivih brojeva čestica N_K , pa je uslov normiranja $\sum_{K,N_K} W_{K,N_K} = 1$. Prilikom razmene energije i čestica održava se srednja energija $\sum_{K,N_K} E_K W_{K,N_K} = \text{const}$ i srednji broj čestica $\sum_{K,N_K} N_K W_{K,N_K} = \text{const}$, pa zato najverovatniju raspodelu nalazimo izjednačujući sa nulom varijaciju veličine

$$\phi = -\sum_{K,N_K} \left\{ W_{K,N_K} \ln W_{K,N_K} + \alpha W_{K,N_K} + \beta E_K W_{K,N_K} + \gamma N_K W_{K,N_K} \right\} \quad (3.10)$$

gde je γ novi neodređeni Lagranžeov množitelj.

Uzimajući $\beta = \theta^{-1}$ i $\gamma = -M/\theta$ gde je M - hemijski potencijal, možemo pisati da iz $\delta\phi = 0$ sledi:

$$W_{K,N_K} = e^{-(1+\alpha)} e^{\frac{MN_K - E_K}{\theta}} = Z^{-1}(\theta, M, V) e^{\frac{MN_K - E_K}{\theta}}$$

i posle zamene u uslovu normiranja $\sum_{K,N_K} W_{K,N_K} = 1$ nalazimo da je

$$Z(\theta, M, V) = \sum_{K,N_K} e^{\frac{MN_K - E_K}{\theta}}$$

$$W_{K,N_K} = Z^{-1}(\theta, M, V) e^{\frac{MN_K - E_K}{\theta}} \quad (3.11)$$

Veličina Z je statistička suma velikog kanoničkog ansambla. Ako su vektori $|t \rangle$ u formuli (2.9) svojstveni vektori i operatora energije \hat{H} i operatora broja čestica \hat{N} , onda se statistički operator velikog kanoničkog ansambla može napisati kao

$$\hat{\rho} = e^{\frac{\Phi + \mu \hat{N} - \hat{H}}{\Theta}} \quad (3.12)$$

gde je $\Phi(\mu, \Theta, V) = -\Theta \ln Z(\mu, \Theta, V)$ – termodinamički potencijal ansambla.

Ovim smo završili našu analizu statističkih raspodela kao mera najobjektivnije informacije o sistemu u procesu merenja. Pošto sve naše saznanje o fizičkim sistemima dobijamo merenjem, ovakav način formulisanja raspodela čini nam se najrealnijim.

4. Neravnotežni statistički operator. –

U drugom paragrafu smo konstatovali da se srednja vrednost veličine $A(t)$ dobija kao "špur" produkta ermitskog i linearog operatora $\hat{A}(t)$, koji se u kvantnoj mehanici korespondira fizičkoj veličini $A(t)$ i statističkog operatora $\hat{\rho}(t)$ tj.:

$$\langle A(t) \rangle = \text{Sp} \{ \hat{A}(t) \hat{\rho}(t) \};$$

$$\hat{\rho}(t) = \sum_k W_k \int dx |t \rangle \langle x| \langle x| t| \quad (4.1)$$

U zavisnosti od toga da li statistički operator zavisi eksplisitno od vremena ili ne, statistički ansambl se dele na ravnotežne i neravnotežne. Ako statistički operator ansambla ne zavisi eksplisitno od vremena, tj.,

$$\frac{\partial \hat{P}}{\partial t} = 0$$

, onda takav ansambl nazivamo ravnotežnim. U protivnom ansambl je neravnotežan. U trećem paragrafu naveli smo eksplisitne izraze za statističke operatore nekih najkarakterističnijih ravnotežnih ansambla. Ovde ćemo razmotriti slučaj neravnotežnih ansambla.

Na osnovu formule (4.1) prividno izgleda da statistički operator $\hat{P}(t)$ zavisi eksplisitno od vremena, jer se argument t pojavljuje u vektoru stanja $|t_{RX}\rangle$. Možemo odmah pokazati da ako hamiltonijan sistema ne zavisi eksplisitno od vremena onda ni statistički operator \hat{P} ne zavisi eksplisitno od vremena. Vektor stanja $|t_{RX}\rangle$ je rešenje, Šredingerove jednačine

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |t_{RX}\rangle = \hat{H} |t_{RX}\rangle; \frac{\partial \hat{H}}{\partial t} = 0 \quad (4.2)$$

Pošto je $\frac{\partial \hat{H}}{\partial t} = 0$ lako dolazimo do zaključka da se rešenje jednačine (4.2) može napisati u obliku

$$|t_{RX}\rangle = e^{\frac{\hat{H}t}{i\hbar}} |RX\rangle; \langle x_{Rt}| = \langle x_R| e^{-\frac{\hat{H}t}{i\hbar}} \quad (4.3)$$

gde je vektor stanja $|RX\rangle$, koji ne zavisi eksplisitno od vremena, rešenje svojstvenog problema hamilto-

nijana \hat{H} , tj.;

$$\hat{H}|_{KX} = E_K|_{KX} \quad (4.4)$$

Ako eksponent $e^{\frac{\hat{H}t}{i\hbar}}$ u formuli (4.3) razvijemo u red i svaki član primenimo na $|_{KX}$, onda na osnovu (4.4) konstatujemo da se (4.3) može pisati kao:

$$|t_{KX}\rangle = e^{\frac{E_K t}{i\hbar}} |_{KX} ; \langle x_{Kt} | = \langle x_K | e^{-\frac{E_K t}{i\hbar}}$$

Zamenom (4.5) u (4.1) konstatujemo da je

$$\hat{\rho}(t) = \sum_k W_k \int dx |t_{KX}\rangle \langle x_{Kt}| = \\ = \sum_k W_k \int dx e^{\frac{E_K t}{i\hbar}} |_{KX} \langle x_K | e^{-\frac{E_K t}{i\hbar}} = \sum_k W_k \int dx |_{KX} \langle x_K | = \hat{\rho}$$

što znači da statistički operator ne zavisi eksplicitno od vremena. Prema tome, došli smo do veoma važnog zaključka: svi ansamblji čiji hamiltonijan ne zavisi eksplicitno od vremena su ravnotežni. (4.6)

Koristeći dobijene relacije, možemo izvesti formulu za evoluciju statističkog operatora u vremenu i Hajzenbergove jednačine kretanja. Pošto je

$$|t_{KX}\rangle = e^{\frac{\hat{H}t}{i\hbar}} |_{KX},$$

možemo pisati

$$\hat{\rho}(t) = \sum_k W_k \int dx |t k x\rangle \langle x k t| = \\ = e^{\frac{\hat{H}t}{i\hbar}} \left\{ \sum_k W_k \int dx |k x\rangle \langle x k| \right\} e^{-\frac{\hat{H}t}{i\hbar}}$$

tj.:

$$\hat{\rho}(t) = e^{\frac{\hat{H}t}{i\hbar}} \hat{\rho} e^{-\frac{\hat{H}t}{i\hbar}} \quad (4.7)$$

Ako ovu relaciju diferenciramo po vremenu

$$i\hbar \frac{\partial \hat{\rho}(t)}{\partial t} = e^{\frac{\hat{H}t}{i\hbar}} \hat{H} \hat{\rho} e^{-\frac{\hat{H}t}{i\hbar}} - e^{\frac{\hat{H}t}{i\hbar}} \hat{\rho} \hat{H} e^{-\frac{\hat{H}t}{i\hbar}} = \\ = e^{\frac{\hat{H}t}{i\hbar}} \hat{H} e^{-\frac{\hat{H}t}{i\hbar}} e^{\frac{\hat{H}t}{i\hbar}} \hat{\rho} e^{-\frac{\hat{H}t}{i\hbar}} - \\ - e^{\frac{\hat{H}t}{i\hbar}} \hat{\rho} e^{-\frac{\hat{H}t}{i\hbar}} e^{\frac{\hat{H}t}{i\hbar}} \hat{H} e^{-\frac{\hat{H}t}{i\hbar}}$$

dolazimo do jednačine koja definiše evoluciju statističkog operatora u vremenu:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{\rho}(t) = [\hat{H}(t), \hat{\rho}(t)]; \hat{H}(t) = e^{\frac{\hat{H}t}{i\hbar}} \hat{H} e^{-\frac{\hat{H}t}{i\hbar}} \quad (4.8)$$

Ovde, jasno, \hat{H} samo formalno zavisi od vremena.

Diferenciraćemo sada po vremenu srednju vrednost bilo koje fizičke veličine A .

$$\frac{d}{dt} \langle \hat{A}(t) \rangle = \left\langle \frac{d\hat{A}(t)}{dt} \right\rangle = \frac{d}{dt} \text{Sp} \left\{ \hat{A}(t) \hat{\rho}(t) \right\} = \\ = \text{Sp} \left\{ \frac{\partial \hat{A}(t)}{\partial t} \hat{\rho}(t) + \frac{1}{i\hbar} \text{Sp} \left\{ \hat{A}(t) \hat{H}(t) \hat{\rho}(t) - \hat{\rho}(t) \hat{H}(t) \hat{A}(t) \right\} \right\} = \left\langle \frac{\partial \hat{A}(t)}{\partial t} \right\rangle + \\ + \frac{1}{i\hbar} \left\langle [\hat{A}(t), \hat{H}(t)] \right\rangle$$

Prilikom dobijanja poslednjeg izraza korišćena je relacija (4.8) i činjenica da je pod znakom "špur"-a dozvoljena ciklična permutacija operatora. Ako izjednačimo izraze koji se nalaze pod znakom srednje vrednosti dobijamo zakon promene u vremenu fizičke veličine A .

$$\frac{d}{dt} \hat{A}(t) = \frac{\partial}{\partial t} \hat{A}(t) + \frac{1}{i\hbar} [\hat{A}(t), \hat{H}(t)] \quad (4.9)$$

Ukoliko \hat{A} ne zavisi eksplicitno od vremena, tj., $\frac{\partial}{\partial t} \hat{A}(t) = 0$, onda se (4.9) svodi na

$$i\hbar \frac{d}{dt} \hat{A}(t) = [\hat{A}(t), \hat{H}(t)] \quad (4.10)$$

Poslednja relacija predstavlja Hajzenbergove jednačine kretanja za operator $\hat{A}(t)$, korespondiran fizičkoj veličini A .

Sada možemo razmotriti slučaj neravnotežnih ansambla. Na osnovu već izvedenih zaključaka, očigledno je da će ansambl biti neravnotežni ukoliko hamiltonijan

sistema zavisi eksplicitno od vremena. Tada i statistički operator mora zavisiti od vremena. Najopštije je predpostaviti da se hamiltonijan sistema menja u vremenu na sledeći način:

$$\hat{H}(t) = \begin{cases} \hat{H}_0 & \text{za } t \leq t_0 \\ \hat{H}_0 + \hat{H}_{\text{int}}(t) & \text{za } t > t_0 \end{cases}; \frac{\partial \hat{H}_0}{\partial t} = 0 \quad (4.11)$$

Moment vremena t_0 je moment uključenja interakcije $\hat{H}_{\text{int}}(t)$. Na osnovu (4.11) vidimo da je za $t \leq t_0$ ansambl ravnotežni, a za $t > t_0$ on postaje neravnotežni. Za $t > t_0$ možemo pisati

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |S_{tKX}\rangle = [\hat{H}_0 + \hat{H}_{\text{int}}(t)] |S_{tKX}\rangle \quad (4.12)$$

gde indeks S označava Šredingerovu reprezentaciju za vektor stanja. Uvešćemo sada novi vektor stanja $|\mathcal{I}_{tKX}\rangle$ gde indeks \mathcal{I} označava reprezentaciju interakcije, i to na sledeći način:

$$|S_{tKX}\rangle = e^{\frac{\hat{H}_0 t}{i\hbar}} |\mathcal{I}_{tKX}\rangle; |\mathcal{I}_{tKX}\rangle = e^{-\frac{\hat{H}_0 t}{i\hbar}} |S_{tKX}\rangle \quad (4.13)$$

Diferenciramo (4.13) po vremenu i rezultat zamenimo u (4.12). Tako dolazimo do relacije:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\mathcal{J}_{tKX}\rangle = \hat{W}(t) |\mathcal{J}_{tKX}\rangle; \hat{W}(t) = e^{-\frac{\hat{H}_0 t}{i\hbar}} H_{int}^{(t)} e^{\frac{\hat{H}_0 t}{i\hbar}}$$
(4.14)

Jednačina (4.14) se najlakše rešava tako što se integracijom obeju strana po vremenu prevodi u integralnu jednačinu

$$|\mathcal{J}_{tKX}\rangle = |\mathcal{J}_{t_0 KX}\rangle + \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' \hat{W}(t') \quad (4.15)$$

Pošto je za $t = t_0$ vektor $|\mathcal{S}_{t_0 KX}\rangle = e^{\frac{\hat{H}_0 t_0}{i\hbar}} |\mathcal{H}_{KX}\rangle$ gde je $|\mathcal{H}_{KX}\rangle$ Hajzenbergov vektor stanja, koji ne zavisi od vremena, i $|\mathcal{H}_{t_0 KX}\rangle = e^{\frac{\hat{H}_0 t_0}{i\hbar}} |\mathcal{S}_{t_0 KX}\rangle$ dolazimo do zaključka

$$|\mathcal{J}_{t_0 KX}\rangle = |\mathcal{H}_{KX}\rangle \quad (4.16)$$

što znači da su svi vektori $|\mathcal{J}_{t KX}\rangle$ pri $t \leq t_0$ nezavisni od vremena.

Integralnu jednačinu (4.15) rešavaćemo metodom sukcesivnih aproksimacija uzimajući da je rešenje nulte aproksimacije $|\mathcal{J}_{t KX}\rangle^{(0)} = |\mathcal{J}_{t_0 KX}\rangle$. Tako dolazimo do rezultata

$$|\mathcal{J}t_{RX}\rangle = \left[1 + \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t dt_1 \hat{W}(t_1) + \left(\frac{1}{i\hbar}\right)^2 \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \hat{W}(t_1) \hat{W}(t_2) + \dots \right. \\ \dots + \left(\frac{1}{i\hbar} \right)^n \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \dots \int_{t_0}^{t_{n-1}} dt_n \hat{W}(t_1) \hat{W}(t_2) \dots \hat{W}(t_n) + \dots \right] |\mathcal{J}t_{0,RX}\rangle$$

$$t_0 < t_n < t_{n-1} < \dots < t_1 < t \quad (4.17)$$

Pošto operatori $\hat{W}(t)$ deluju u različitim trenucima vremena (redosled ovih trenutaka je naznačen u (4.17)) zgodno je uvesti Dajsonov hronološki operator \hat{T} sa osobinom

$$\hat{T} \hat{A}(t_1) \hat{B}(t_2) = \begin{cases} \hat{A}(t_1) \hat{B}(t_2) & \text{za } t_1 > t_2 \\ & ; \quad \hat{T}^n = \hat{T} \\ \hat{B}(t_2) \hat{A}(t_1) & \text{za } t_1 < t_2 \end{cases}$$

S obzirom da je $t_0 < t_n < t_{n-1} < \dots < t_1 < t$ formulu (4.17) možemo pisati na sledeći način:

$$|\mathcal{J}t_{RX}\rangle = \hat{T} \left[1 + \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t dt_1 \hat{W}(t_1) + \left(\frac{1}{i\hbar}\right)^2 \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \hat{W}(t_1) \cdot \hat{W}(t_2) + \dots + \left(\frac{1}{i\hbar}\right)^n \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \dots \int_{t_0}^{t_{n-1}} dt_n \hat{W}(t_1) \dots \hat{W}(t_n) \dots \right] |\mathcal{J}t_{0,RX}\rangle \quad (4.19)$$

Uvodjenje operatora \hat{T} , koji reguliše uredjenost po vremenu, daje nam mogućnost da (4.19) napišemo u kompaktnoj formi. Razmotrićemo treći član u formuli (4.19). Menjajući na osnovu Dirihleove formule, red integracije, možemo pisati

$$\begin{aligned} \hat{T} \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \hat{W}(t_1) \hat{W}(t_2) &= \hat{T} \int_{t_0}^t dt_2 \int_{t_0}^{t_2} dt_1 \hat{W}(t_1) \hat{W}(t_2) = \\ &= \hat{T} \int_{t_0}^t dt_2 \int_{t_0}^{t_2} dt_1 \hat{W}(t_1) \hat{W}(t_2) - \hat{T} \int_{t_0}^t dt_2 \int_{t_0}^{t_2} dt_1 \hat{W}(t_1) \hat{W}(t_2) = \\ &= \hat{T} \int_{t_0}^t dt \int_{t_0}^t dt_2 \hat{W}(t_2) \hat{W}(t_1) - \hat{T} \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \hat{W}(t_2) \hat{W}(t_1) = \end{aligned}$$

Operatori $\hat{W}(t_1)$ i $\hat{W}(t_2)$ ne komutiraju, pa im ne smemo promeniti red množenja. Na ovom mestu postaje jasna uloga hronološkog operatora \hat{T} . Pošto on po definiciji uređuje operatore po vremenu, mi sve vremenski zavisne operatore koji stoje levo od \hat{T} možemo pisati bilo kojim redom, jer će ih \hat{T} uvek "vratiti" na njihov zakoniti red u produktu. Znači:

$$\begin{aligned} \hat{T} \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \hat{W}(t_1) \hat{W}(t_2) &= \\ &= \hat{T} \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^t dt_2 \hat{W}(t_1) \hat{W}(t_2) - \hat{T} \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \hat{W}(t_1) \hat{W}(t_2) \end{aligned}$$

i odavde:

$$\hat{T} \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \hat{W}(t_1) \hat{W}(t_2) = \frac{1}{2!} \left[\hat{T} \int_{t_0}^t dt' \hat{W}(t') \right]^2 \quad (4.20)$$

Primenom dobijene formule može se pokazati da je

$$\begin{aligned} & \hat{T} \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \dots \int_{t_0}^{t_{n-1}} dt_n \hat{W}(t_1) \hat{W}(t_2) \dots \hat{W}(t_n) = \\ & = \frac{1}{n!} \left[\hat{T} \int_{t_0}^t dt' \hat{W}(t') \right]^n \end{aligned} \quad (4.21)$$

pa konačno možemo pisati:

$$|\mathcal{J}t\psi\rangle = \hat{S}(t, t_0) |\mathcal{J}t_0\psi\rangle;$$

$$\hat{S}(t, t_0) = e^{\frac{\hat{H}_0}{i\hbar} \int_{t_0}^t dt' \hat{W}(t')} = \hat{T} e^{\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' \hat{W}(t')} \quad (4.22)$$

Unitarni operator $\hat{S}(t, t_0)$ naziva se S-matrica sistema.

Kombinujući (4.13), (4.16) i (4.22) dolazimo do veze izmedju Šredingerovih i Hajzenbergovih vektora stanja:

$$|St\psi\rangle = e^{\frac{\hat{H}_0 t}{i\hbar}} \hat{S}(t, t_0) |Ht_0\psi\rangle;$$

$$\langle xRtS | = \langle xRH | \hat{S}^{-1}(t, t_0) e^{-\frac{\hat{H}_0 t}{i\hbar}} \quad (4.23)$$

Neravnotežni statistički operator, koji zavisi eksplicitno od vremena, mora biti izražen preko Šredingerovih vektora stanja. Odgovarajući ravnotežni operator mora biti izražen preko Hajzenbergovih vektora,

jer ovi ne zavise od vremena. Koristeći (4.23) možemo pisati: $\sum_k W_k \int dx |st_{kx} \rangle \langle x_{kst}| =$

$$= e^{\frac{\hat{H}_0 t}{i\hbar}} \hat{S}(t, t_0) \left\{ \sum_k W_k \int dx |H_{kx} \rangle \langle x_{kh}| \right\} \hat{S}^{-1}(t, t_0) e^{-\frac{\hat{H}_0 t}{i\hbar}}$$

što nas dovodi do sledeće veze izmedju neravnotežnog i ravnotežnog statističkog operatora:

$$\begin{aligned} \hat{\rho}_t &= e^{\frac{\hat{H}_0 t}{i\hbar}} \hat{S}(t, t_0) \hat{\rho}_0 \hat{S}^{-1}(t, t_0) e^{-\frac{\hat{H}_0 t}{i\hbar}} \\ \hat{\rho}_t &= \sum_k W_k \int dx |st_{kx} \rangle \langle x_{kts}|; \end{aligned} \quad (4.24)$$

$$\hat{\rho}_0 = \sum_k W_k \int dx |H_{kx} \rangle \langle x_{kh}|$$

Pošto se neravnotežni statistički operator može izraziti pomoću ravnotežnog operatora, to znači da se prilikom izračunavanja srednjih vrednosti po neravnotežnom ansamblu mogu koristiti ravnotežne distribucije, koje smo izveli u trećem paragrafu. Zaista:

$$\begin{aligned} Sp\{\hat{A}(t) \hat{\rho}_t\} &= Sp\left\{\hat{A}(t) e^{\frac{\hat{H}_0 t}{i\hbar}} \hat{S}(t, t_0) \hat{\rho}_0 \hat{S}^{-1}(t, t_0) e^{-\frac{\hat{H}_0 t}{i\hbar}}\right\} = \\ Sp\left\{\hat{S}^{-1}(t, t_0) e^{-\frac{\hat{H}_0 t}{i\hbar}} \hat{A}(t) e^{\frac{\hat{H}_0 t}{i\hbar}} \hat{S}(t, t_0) \hat{\rho}_0\right\} \end{aligned} \quad (4.25)$$

ili:

$$\langle \hat{A}(t) \rangle_t = \langle \hat{S}^{-1}(t, t_0) \hat{A}(t) \hat{S}(t, t_0) \rangle$$

$$\hat{A}(t) = e^{-\frac{\hat{H}_0 t}{i\hbar}} \hat{A}(t) e^{-\frac{\hat{H}_0 t}{i\hbar}} \quad (4.26)$$

gde indeks t označava srednju vrednost po neravnotežnom ansamblu, a indeks 0 srednju vrednost po ravnotežnom ansamblu.

Od mogućih tipova ravnotežnih statističkih operatora \hat{S} , u neravnotežnoj statistici treba koristiti \hat{S} za veliki kanonički ansambl, jer su tada u \hat{S} uključeni uslovi konzervacije unutrašnje energije i srednjeg broja čestica.⁴⁰⁾

5. Linearna reakcija sistema i Grinova funkcija.-

U ovom delu ćemo analizirati problem izračunanja neravnotežnih srednjih vrednosti na osnovu opštih izraza koji su navedeni u prethodnom paragrafu. U praktičnim problemima, najčešći oblik interakcije je sledeći:

$$\hat{H}_{int}(t) = \int dx \hat{B}(x, t) \mathcal{E}(x, t) \quad (5.1)$$

gde su $\hat{B}(x, t)$ operatori, dok funkcije $\mathcal{E}(x, t)$ nemaju operatorsku strukturu. Na osnovu (4.14) i (5.1) imamo:

$$\hat{W}(t) = e^{-\frac{\hat{H}_0 t}{i\hbar}} \hat{H}_{int}(t) e^{\frac{\hat{H}_0 t}{i\hbar}} = \int dx \hat{\mathcal{B}}(x,t) \mathcal{E}(x,t);$$

$$\hat{\mathcal{B}}(x,t) = e^{-\frac{\hat{H}_0 t}{i\hbar}} \hat{B}(x,t) e^{\frac{\hat{H}_0 t}{i\hbar}} \quad (5.2)$$

i S-matrica ima oblik:

$$\hat{S}(t,t_0) = \hat{T} e^{-\frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t dt' \int dx' \hat{\mathcal{B}}(x',t') \mathcal{E}(x',t')}$$

Potražićemo sada neravnotežnu vrednost neke fizičke veličine $\hat{A}(x,t)$ i to u aproksimaciji koja je linearna po interakciji $\hat{W}(t)$. Operator (5.3) razvijamo u red sa tačnošću do prvog stepena \hat{W} zaključno, tj.

$$\hat{S}^{\pm 1}(t,t_0) \approx 1 \pm \frac{1}{i\hbar} \hat{T} \int_{t_0}^t dt' \int dx \hat{\mathcal{B}}(x',t') \mathcal{E}(x',t') + O(W^2)$$

i tada možemo pisati (na osnovu (4.26)):

$$\langle \hat{A}(x,t) \rangle_t = \langle \hat{A}(x,t) \rangle_0 + \frac{1}{i\hbar} \int dx' \int_{t_0}^t dt' \hat{\mathcal{E}}(x',t') \langle$$

$$\langle \hat{T} [\hat{A}(x,t) \hat{\mathcal{B}}(x',t') - \hat{\mathcal{B}}(x',t') \hat{A}(x,t)] \rangle \quad (5.4)$$

Drugi član u dobijenom izrazu predstavlja popravku ravnotežne srednje vrednosti koja dolazi usled neravnotežnih procesa sistema i naziva se linerna reakcija sistema ili linerni $\overset{d}{\delta}ziv$ sistema na interakciju $\hat{H}_{int}(t)$.

Pošto u (5.4) mora biti $t > t'$ (za $t < t'$ ceo postupak nema smisla) mi možemo pisati:

$$\begin{aligned} & \langle \hat{T}[\hat{A}(x,t)\hat{B}(x',t') - \hat{B}(x',t')\hat{A}(x,t)] \rangle = \\ & = \Theta(t-t') \langle \hat{A}(x,t)\hat{B}(x',t') - \hat{B}(x',t')\hat{A}(x,t) \rangle. \end{aligned} \quad (5.5)$$

gde je $\Theta(t-t')$ Hevisajdova "step" funkcija

$$\Theta(t-t') = \begin{cases} 1 & \text{za } t > t' \\ 0 & \text{za } t < t' \end{cases} \quad (5.6)$$

Veličina:

$$G(x,x';t,t') = \Theta(t-t') \langle \hat{A}(x,t)\hat{B}(x',t') - \hat{B}(x',t')\hat{A}(x,t) \rangle. \quad (5.7)$$

naziva se dvovremenska, temperaturska, retardovana Grinova funkcija i ona igra veoma važnu ulogu kako u neravnotežnoj tako i u ravnotežnoj statistici. Koristeći Grinovu funkciju, popravljenu srednju vrednost veličine $\hat{A}(x,t)$ možemo izraziti na sledeći način:

$$\langle \hat{A}(x,t) \rangle_t = \langle \hat{A}(x,t) \rangle_0 + \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t dt' \int dx' \hat{E}(x',t') G(x,x';t,t') \quad (58)$$

Dalje možemo analizirati osobine Grinove funkcije (5.7). U opštem slučaju G zavisi od četiri argumenta x, x', t i t' . Ukoliko je sistem prostorne homogen tada ni jedna njegova fizička karakteristika ne može zavisiti od koordinata x i x' ponaosob, jer to bi značilo privilegovanje pojedinih tačaka u prostoru, već samo od njihove razlike $x - x'$. Iz ovoga, kao što znamo, sledi zakon o održanju impulsa u prostorno homogenim sredinama. Pošto Grinova funkcija predstavlja fizičku karakteristiku sistema (preko nje se izražavaju neravnotežne srednje vrednosti), to znači da ona u prostorno homogenim sredinama ne zavisi od x i x' ponaosob, već samo od razlike $x - x'$. Sada ćemo pokazati da ako operatori $\hat{A}(x,t)$ i $\hat{B}(x,t)$ ne zavise eksplicitno od vremena, tj. ako je $\hat{A}(x,t) = A(x)$ i $\hat{B}(x,t) = B(x)$ onda Grinova funkcija ne zavisi od momenta vremena t i t' ponaosob, već samo od njihove razlike $t - t'$. Sobzirom na (5.7), dovoljno je dokazati da $\langle \hat{A}(x,t) \hat{B}(x',t') \rangle$ zavisi od razlike $t - t'$.

Pošto je

$$\hat{\rho}_o = e^{\frac{z + M\hat{H}_o - \hat{H}_o}{\theta}}$$

to znači da $\hat{\rho}_o$ i $e^{\frac{\hat{H}_o t}{i\hbar}}$ komutiraju, jer komutiraju \hat{H}_o i \hat{H}_o .

Koristeći ovu činjenicu i ciklično permutoujući naznačene operatorske komplekse

$$\begin{aligned} \langle \hat{A}(x,t) \hat{B}(x't') \rangle_0 &= \text{Sp} \left\{ \hat{e}^{-\frac{\hat{H}_0 t}{i\hbar}} \hat{A}(x) e^{\frac{\hat{H}_0 t}{i\hbar}} \hat{e}^{-\frac{\hat{H}_0 t'}{i\hbar}} \hat{B}(x') e^{\frac{\hat{H}_0 t'}{i\hbar}} \hat{S}_0 \right\} \\ &= \text{Sp} \left\{ \hat{S}_0 e^{-\frac{\hat{H}_0(t-t')}{i\hbar}} \hat{A}(x) e^{\frac{\hat{H}_0(t-t')}{i\hbar}} \hat{B}(x') \right\} \end{aligned}$$

vidimo da je zaista:

$$\langle \hat{A}(x,t) \hat{B}(x't') \rangle_0 = f(t-t')$$

Prema tome, ako operatori koji ulaze u sastav Grinove funkcije ne zavise eksplicitno od vremena i ako je sistem prostorno homogen onda Grinova funkcija zavisi od razlike koordinata $x - x'$ i od razlike vremena $t - t'$, tj.:

$$G(x, x'; t, t') \rightarrow G(x-x'; t-t') \quad (5.9)$$

Kao što se vidi iz (5.4), ili iz još opštije formule (4.26), neravnotežne srednje vrednosti se izražavaju preko operatora u reprezentaciji interakcije $\hat{A}(x,t) = \hat{e}^{-\frac{\hat{H}_0 t}{i\hbar}} \hat{A}(x,t) \hat{e}^{\frac{\hat{H}_0 t}{i\hbar}}$, a ne preko originalnih operatora $\hat{A}(x,t)$. To drugim rečima znači, da za primenu ukazane procedure nije obavezno da nam operatori čiju srednju vrednost izračunavamo zavise eksplicitno od vremena, niti

je nužno da H_{int} zavisi eksplisitno od vremena. Bez obzira da li \hat{A} i \hat{B} zavise od eksplisitno od vremena ili ne formula (5.4) ima isti oblik, a to znači da se Grinova funkcija može koristiti i pri analizi ravnotežnih sistema, kada H_{int} ne zavisi eksplisitno od vremena. U praksi, Grinova funkcija se češće koristi kod ravnotežnih sistema, jer je obično ravnotežni hamiltonijan matematički toliko komplikovan da mu se svojstvene vrednosti moraju izračunavati perturbacionim metodom, tj. moraju se izraziti u vidu beskonačnog, konvergirajućeg reda popravki, koje se dobijaju razvijanjem S-matrice u red, i primenom formule (4.26). Ako interakcija ne zavisi eksplisitno od vremena, onda se obično postavlja pitanje izbora momenta t_0 - uključenja interakcije. Ovde se uvodi tzv. adijabatska hipoteza po kojoj je u beskonačno udaljenom trenutku vremena $t \rightarrow -\infty$ sistem bio sastavljen od slobodnih čestica, pa se zatim interakcija beskonačno lagano uključivala. Znači, formalno, ako \hat{H}_{int} ne zavisi eksplisitno od vremena, za donju granicu S-matrice uzima se vrednost $t = \infty$:

$$\hat{S}(t, t_0) \rightarrow \hat{S}(t) = \hat{T} e^{\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t dt' \hat{W}(t')} \quad (5.10)$$

Analiziraćemo Grinovu funkciju za slučaj kada originalni operatori \hat{A} i \hat{B} ne zavise eksplicitno od vremena. Kao što se vidii iz (5.7), Grinova funkcija je proporcionalna razlici srednjih vrednosti:

$$\begin{aligned} \langle \hat{B}(x,t) \hat{A}(x,t) \rangle &= I(x-x';t-t'); \\ \langle \hat{A}(x,t) \hat{B}(x',t') \rangle &= J(x-x';t-t') \end{aligned} \quad (5.11)$$

koje se nazivaju korelace funkcije. Potražimo eksplicitne izraze za ove korelace funkcije. Da bismo izbegli složene oznake i indekse, prilikom izračunavanja srednjih (5.11) koristićemo statistički operator kamoničnog ansambla (3.9)

$$\hat{\rho}_o = Q^{-1}(\theta, H, V) e^{-\frac{H}{\theta}} \quad (5.12)$$

Uvodeći projekcioni operator $\hat{P} = \sum_{\ell} |\ell\rangle \langle \ell|$, možemo pisati

$$\begin{aligned} I(x-x';t-t') &= Sp\{\hat{B}(x,t) \hat{A}(x,t) \hat{\rho}_o\} = \\ &= Sp\{\hat{B}(x,t) \hat{P} \hat{A}(x,t) \hat{\rho}_o\} = \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} I(x-x';t-t') &= Sp\{\hat{A}(x,t) \hat{B}(x',t') \hat{\rho}_o\} = \\ &= Sp\{\hat{B}(x,t) \hat{\rho}_o \hat{A}(x,t)\} = \\ &= Sp\{\hat{B}(x,t) \hat{\rho}_o \hat{P} \hat{A}(x,t)\} \end{aligned}$$

tako da su konačni izrazi:

$$I(x-x'; t-t') = Q^{-1}(\theta, \eta, V) \sum_{k\ell} \langle K | \hat{B}(x') | \ell \rangle \langle \ell | \hat{A}(x) | K \rangle \cdot e^{-\frac{E_K}{\theta}} e^{-i\Omega_{K\ell}(t-t')}$$

$$J(x-x'; t-t') = Q^{-1}(\theta, \eta, V) \sum_{k\ell} \langle K | B(x') | \ell \rangle \langle \ell | A(x) | K \rangle.$$

$$\cdot e^{\frac{k\Omega_{K\ell}}{\theta}} e^{-\frac{E_K}{\theta}} e^{-i\Omega_{K\ell}(t-t')} \quad (5.13)$$

$$\Omega_{K\ell} = \hbar^{-1} (E_K - E_\ell)$$

Posle Furije-transformacija tipa $f(x-x'; t-t') = \int_{-\infty}^{+\infty} dw f(x-x'; w) e^{iw(t-t')}$ poslednji izrazi prelaze u:

$$I(x-x'; \omega) = Q^{-1}(\theta, \eta, V) \sum_{k\ell} \langle K | \hat{B}(x') | \ell \rangle \langle \ell | \hat{A}(x) | K \rangle e^{\frac{E_K}{\theta}} \delta(\omega - \Omega'_{K\ell})$$

$$J(x-x'; \omega) = e^{\frac{k\omega}{\theta}} I(x-x'; \omega)$$

Ovde je veoma važno naglasiti da funkcije $I(x-x'; \omega)$ i $J(x-x'; \omega)$ imaju singularitet (postaju beskonačne) za $\omega = \Omega_{K\ell}$. Veličina $k\Omega_{K\ell} = E_K - E_\ell$ očigledno predstavlja energiju pobudjivanja sistema pri prelasku iz kvantnog stanja K u kvantno stanje ℓ . Prema tome, za one vrednosti energije ω koje su jednake energiji pubudjivanja sistema, korelaceone funkcije imaju singularitet. Pošto je Grinova funkcija proporcionalna korelacionim funkcijama, to znači da i Grinova funkcija ima singularitet za one vrednosti energije koje su ravne energiji pobudjivanja sistema. Ovaj vremena važan zaključak učinio je Grinovu funkciju efikasnim "orudjem" za analizu

fizičkih sistema, jer tražeći singularitete Grinove funkcije, mi de facto ispitujemo ponašanje elementarnih pobudjenja u sistemu.

Pošto je "delta" funkcija $\delta(t-t') = \int_{-\infty}^{\infty} dw e^{-iw(t-t')}$ izvod Hevisajdove funkcije po t' , to možemo pisati:

$$\Theta(t-t') = \frac{i}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\Omega \frac{e^{-i\Omega(t-t')}}{\Omega + i\delta} \quad (5.15)$$

$$\delta \rightarrow +0$$

Ako ovo zamenimo u (5.7) i izvršimo Furije-transformacije Grinove funkcije

$$G(x-x'; t-t') = \int_{-\infty}^{\infty} dw G(x-x'; \omega) e^{-iw(t-t')} \quad (5.16)$$

i Furije-transformacije korelacionih funkcija, dolazimo do sledeće veze izmedju Grinove funkcije $G(x-x'; \omega)$ i korelacione funkcije

$$G(x-x'; \omega) = \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} d\Omega (e^{\frac{i\Omega}{\Theta}} - 1) I(x-x'; \Omega) \frac{1}{\Omega - \omega - i\delta} \quad (5.17)$$

Pošto je $\frac{1}{x+i\delta} = \frac{1}{x} - i\pi\delta(x)$ iz poslednje formule lako zaključujemo da je:

$$(e^{\frac{i\omega}{\Theta}} - 1) I(x-x'; \omega) = \\ = G(x-x'; \omega + i\delta) - G(x-x'; \omega - i\delta) \quad (5.18)$$

$$\delta \rightarrow +0$$

Prema tome, ako poznamo Grinovu funkciju, ona se na osnovu (5.18) može izračunati korelaciona funkcija, a preko ove opet, srednje vrednosti tipa

$$\langle B(x') A(x) \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega I(x-x'; \omega) \quad (5.19)$$

Izračunavanje srednjih vrednosti i jeste naš krajnji cilj u statističkim istraživanjima, jer ako se radi o sistemima sa velikim brojem čestica, samo srednje vrednosti mogu da se mere.

Na kraju, navećemo proceduru izračunavanja Grinove funkcije. Uvećemo označku $G(x-x'; t-t') = \langle\langle \hat{A}(x,t) | \hat{B}(x',t') \rangle\rangle$, pa se tada (5.7) može pisati kao:

$$\langle\langle \hat{A}(x,t) | \hat{B}(x',t') \rangle\rangle = \Theta(t-t') \langle \hat{A}(x,t) \hat{B}(x',t') - \hat{B}(x',t') \hat{A}(x,t) \rangle \quad (5.20)$$

Ako poslednju relaciju diferenciramo po vodeći računa o tome da je izvod Hevisajdove funkcije po vremenu "delta" funkcija, i da je, na osnovu Hajzenbergovih jednačina kretanja $\frac{d}{dt} \hat{A}(x,t) = \frac{1}{i\hbar} [\hat{A}(x,t), H(t)]$, dolazimo do sledeće jednačine:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} \langle\langle \hat{A}(x,t) | \hat{B}(x',t') \rangle\rangle &= i\hbar \delta(t-t') C(x-x') + \Theta(t-t') \times \\ &\times \langle [\hat{A}(x,t) \hat{H}(t)] \hat{B}(x',t') - \hat{B}(x',t') [\hat{A}(x,t), H(t)] \rangle \\ C(x-x') &= \langle \hat{A}(x,t) \hat{B}(x',t') - \hat{B}(x',t') \hat{A}(x,t) \rangle. \end{aligned} \quad (5.21)$$

Kao što vidimo, prvočitna Grinova funkcija $\langle\langle \hat{A} | \hat{B} \rangle\rangle$ izražava se preko "više" Grinove funkcije $\langle\langle [\hat{A}, \hat{A}] | \hat{B} \rangle\rangle$ ova se istom procedurom može izraziti preko neke još složenije Grinove funkcije, tako da dolazimo do beskonačnog sistema jednačina u kome se, što dalje idemo, pojavljuju sve komplikovanije Grinove funkcije. Lanac jednačina se može prekinuti ako se u nekoj, dovoljno opravdanoj aproksimaciji, viša Grinova funkcija izrazi preko nižih. Tada se može izračunati polazna Grinova funkcija. Osnovni problem pri radu sa Grinovim funkcijama upravo se sastoji u tome da se u svakom konkretnom fizičkom problemu odabere ispravan način "presecanja" lanca jednačina, ili, kako se to obično kaže, da se odabere pravilna procedura dekuplovanja viših Grinovih funkcija.

U formuli (5.21) možemo izvršiti Furije-transformacije tipa:

$$f(x-x'; t-t') = \int dk \int d\omega f(k, \omega) e^{ik(x-x') - i\omega(t-t')} \quad (5.22)$$

posle čega ona prelazi u:

$$ik\omega \langle\langle \hat{A} | \hat{B} \rangle\rangle_{k, \omega} = \frac{i\hbar}{2\pi} C(k) + \langle\langle [\hat{A}, \hat{A}] | \hat{B} \rangle\rangle_{k, \omega} \quad (5.23)$$

Pretpostavljajući da se dekuplovanje više Grinove funkcije može izvršiti na sledeći način:

$$\langle\langle [\hat{A}, \hat{A}] | \hat{B} \rangle\rangle_{k,\omega} \approx \hbar \Omega(k) \langle\langle \hat{A} | \hat{B} \rangle\rangle_{k,\omega}$$

dolazimo do rezultata:

$$\langle\langle \hat{A} | \hat{B} \rangle\rangle_{k,\omega} = \frac{i}{2\pi} \frac{C(k)}{\omega - \Omega(k) + i\delta} \quad (5.24)$$

$\delta \rightarrow +0$

Pel Grinove funkcije nalazi se u tačci $\omega = \Omega(k)$. Pošto je ω u opštem slučaju kompleksna varijabla ovaj pol se nalazi u kompleksnoj ω ravni i to, za čestice, uvek u četvrtom kvadrantu. S obzirom na rame zaključke o fizičkom smislu singulariteta Grinove funkcije, jasno je da će nam realna koordinata pola funkcije $\langle\langle \hat{A} | \hat{B} \rangle\rangle_{k,\omega} \equiv G(k,\omega)$ (množena sa \hbar) dati energiju elementarnih ekscitacija u sistemu, dok će recipročna vrednost imaginarne koordinate predstavljati vreme života elementarnih ekscitacija.

Na osnovu (5.18) nalazimo korelacionu funkciju:

$$I(k,\omega) = C(k) \delta[\omega - \Omega(k)] \quad (5.25)$$

i pomeću nje srednje vrednosti

$$\langle \hat{B} \hat{A} \rangle_k = \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega C(k) (e^{\frac{\hbar\omega}{\theta}} - 1)^{-1} \delta[\omega - \Omega(k)] = \frac{C(k)}{e^{\frac{\hbar\Omega(k)}{\theta}} - 1}$$

$$\langle \hat{B}(x) \hat{A}(x) \rangle = \int dk \frac{C(k)}{e^{\frac{\hbar\Omega(k)}{\theta}} - 1}$$

Ovim bismo završili pregled problema i metoda statističke fizike. Dalje ćemo ove metode primeniti na neke

probleme fizike, sa ciljem da otkrijemo efekte koji se eventualno mogu koristiti u kriminalistici, a delimično ćemo ove metode primeniti i direktno na kriminalističke probleme, koristeći neke analogije izmedju statističkih i kriminalističkih pojmoveva.

6. Spin-orbitalna interakcija i jednoelektronska pobudjenja

Efekti spin-orbitalne interakcije izučavaju se poslednjih nekoliko godina u vezi sa magneto-optičkim fenomenima u magnetnim dielektricima. Problemi, ideje i razni prilazi analizi ovih fenomena izloženi su u monografiji⁶⁰⁾.

Ovde ćemo pokušati da formulišemo kompletну teoriju jednoelektronskih pobudjenja koji nastaju usled spin-orbitalne interakcije. Dobijeni rezultati mogu se direktno primeniti na gasove ili na kristale sa izvanredno malim L-S kuplovanjem. Forumulisanje ovakve teorije predstavlja neophodnu osnovu za formiranje odgovarajuće teorije jako vezanih sistema (kristala), pošto stanja izolovanog atoma predstavljaju osnovu za definisanje kristalnog Hamiltonijana. (vidi⁶¹⁾, str. 199-209). Ekscitacije koje će biti analizirane u ovom radu nastaju usled promene orijentacije i spinskog i orbitalnog momenta. Ovo su miskoenergetske ekscitacije, pa zbog toga topljeni efekti bitno utiču na stanje sistema. Spin-orbitalna interakcija se uzima kao glavni mehanizam koji karakteriše osobine ovih ekscitacija.

U prvoj fazi analize izvršićemo stabilizaciju Hamiltonijama. Posmatraćemo atome sa vodoničnom strukturom omotača i analizirati stanja samo jednog elektrona u atomu. Pretpostavljamo da se u topotnom kontaktu sa okolinom menjaju i spinski i magnetni kvantni broj elektrona. Energetski i orbitalni kvantni broj ostaju konstantni. Atom se nalazi u konstantnom spoljašnjem magnetnom polju \mathcal{H} . Hamiltonijan sistema može se napisati kao:

$$H = H_c + H_s + H_{cs} \quad (6.1)$$

gde je

$$H_c = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta - \frac{ze^2}{q}; \quad H_s = -M_B \mathcal{H} S^z$$

$$H_{cs} = R \vec{L} \cdot \vec{S} = R \left(L^z S^z + \frac{L^+ S^- + L^- S^+}{2} \right) \quad (6.2)$$

Ovde je m masa elektrona, ze je nanelektrisanje jezgra $M_B = 2 \frac{\pi e \hbar}{mc}$ je udvojeni Borov magneton i $R = \frac{ze^2 \hbar^2}{2m^2 c^2 q_B^2}$ (vidi ref. , str. 286) je konstanta L-S veze. Sa q_B označen je Borov radijus ($q_B = \frac{\hbar}{me^2}$) i C je brzina svetlosti, tako da dolazimo do ocene da je $R \sim 5 \cdot 10^{-15}$ euq.

Aktuelni skup elektronskih stanja je

$$\mathcal{A}_0 = \{ |0\rangle = |m_0 \uparrow\rangle; |1\rangle = |m_f \uparrow\rangle; |2\rangle = |m_0 \downarrow\rangle; |3\rangle = |m_f \downarrow\rangle \} \quad (6.3)$$

Energetski kvantni broj, koji je označen sa n , i orbitalni kvantni broj, koji je označen sa ℓ , ostaju ne-promenjeni tako da su svojstvene vrednosti Hamiltonijana H_c iste za sva stanja n, ℓ, m_f . Ove svojstvene vrednosti biće označene sa E_0 . Uvodeći Fermi-ope-

ratore Q_M^+ i Q_M koji kreiraju i anihiliraju elektrone u stanjima iz skupa (6.3) hamiltonijan (6.1) možemo napisati u reprezentaciji druge kvantizacije na sledeći način:

$$H = \sum_{M,\nu=1}^3 H_{M\nu} Q_M^+ Q_\nu; H_{M\nu} = \langle M | H | \nu \rangle; M, \nu \in (0, 1, 2, 3) \quad (6.4)$$

Pored fermionskih komutacionih relacija operatori Q_M^+ i Q_M zadovoljavaju sledeći dopunski uslov

$$\sum_{M=0}^3 Q_M^+ Q_M = 1 \quad (6.5)$$

Hamiltonijan (6.4) zatvoren je u Δ_A . Za $m_f = m_o + 1$ različiti od nule matični elementi $H_{M\nu}$ su:

$$H_{00}^{(A)} = E_o - \frac{1}{2} M_B \mathcal{H} + \frac{1}{2} R m_o; H_{11}^{(A)} = E_o - \frac{1}{2} M_B \mathcal{H} + \frac{1}{2} R (m_o + 1);$$

$$H_{22}^{(A)} = E_o + \frac{1}{2} M_B \mathcal{H} - \frac{1}{2} R m_o$$

$$H_{33}^{(A)} = E_o + \frac{1}{2} M_B \mathcal{H} - \frac{1}{2} R (m_o + 1); H_{03}^{(A)} = H_{30}^{(A)} = \frac{1}{2} R \Psi_A$$

$$\Psi_A = \sqrt{(\ell - m_o)(\ell_o + m_o + 1)}; m_o \in (-\ell_o, -\ell_o + 1, \dots, \ell_o - 1) \quad (6.6)$$

U slučaju $m_f = m_o - 1$ nalazimo da su različiti od nule sledeći matični elementi $H_{M\nu}$:

$$H_{00}^{(B)} = E_o - \frac{1}{2} M_B \mathcal{H} + \frac{1}{2} R m_o; H_{11}^{(B)} = E_o - \frac{1}{2} M_B \mathcal{H} + \frac{1}{2} R (m_o - 1);$$

$$H_{22}^{(B)} = E_o + \frac{1}{2} M_B \mathcal{H} - \frac{1}{2} R m_o$$

$$H_{33}^{(B)} = E_o + \frac{1}{2} M_B \mathcal{H} - \frac{1}{2} R (m_o - 1); H_{12}^{(B)} = H_{21}^{(B)} = \frac{1}{2} R \Psi_B$$

$$\Psi_B = \sqrt{(\ell_o + m_o)(\ell_o - m_o + 1)} ; \quad m_o \in (-\ell_o + 1, -\ell_o + 2, \dots, \ell_o) \quad (6.7)$$

Treba naglasiti da se ovde ne može edmah preći na kvazi-Pauli operatore $Q_M^+ = Q_M^+ Q_o$ i $Q_M = Q_o^+ Q_M$ koji kreiraju i anhiliraju eksitacije tipa M u sistemu, pošto se u hamiltonijanu mogu pojaviti članovi koji su linearni po Q , a to znači da energija osnovnog stanja sistema nije korektno definisana. Zato ćemo preći na move Fermi-operatore \mathcal{L}_θ^+ i \mathcal{L}_θ pomoću unitarne transformacije

$$Q_M = \sum_{\theta=0}^3 U_{M\theta} \mathcal{L}_\theta ; \quad \sum_{M=0}^3 U_{M\theta}^* U_{M\omega} = S_{\theta\omega} \quad (6.8)$$

Zbog unitarnosti transformacije Fermi-operatori \mathcal{L}_θ^+ i \mathcal{L}_θ zadovoljavaju uslov

$$\sum_{\theta=0}^3 \mathcal{L}_\theta^+ \mathcal{L}_\theta = 1 \quad (6.9)$$

Transformisani hamiltonijan (6.4) postaje

$$H = \sum_{\theta,\omega=0}^3 \Phi_{\theta\omega} \mathcal{L}_\theta \mathcal{L}_\omega ; \quad \Phi_{\theta\omega} = \sum_{M=0}^3 H_{M\theta}^* U_{M\theta}^* U_{M\omega} \quad (6.10)$$

Koristeći uslov (6.9) mi možemo u hamiltonijanu (6.10) izdvojiti energiju osnovnog stanja i vodeći računa o dopunskom uslovu koji zadovoljavaju elementi unitarne matrice, odrediti minimalnu energiju osnovnog stanja meted Lagranžovih množitelja. Za dva različita slučaja $m_f = m_o + 1$ i $m_f = m_o - 1$ ove procedure se neznatno razlikuju, pa ćemo ih zato dati odvojeno.

Za $M_f = M_o + 1$ hamiltonijan (6.10) napisaćemo na sledeći način

$$H_A = \Phi_{oo}^{(A)} + \sum_{\theta=1}^3 \Phi_{\theta o}^{(A)} \alpha_\theta^+ \alpha_o + \sum_{\theta=1}^3 \Phi_{o\theta}^{(A)} \alpha_o^+ \alpha_\theta + \sum_{\theta, \omega=1}^3 (\Phi_{\theta\omega}^{(A)} - \Phi_{o\theta}^{(A)} \delta_{\theta\omega}) \alpha_\theta^+ \alpha_\omega \quad (6.11)$$

Sada možemo konstruisati formu $W^{(A)} = \Phi_{oo}^{(A)} + \mathcal{L} \left(1 - \sum_{M=0}^3 U_{M0} U_{M0}^* \right)$ gde su \mathcal{L} Langražeovi množitelji, i staviti $\delta W^{(A)} = 0$ posle čega dobijamo sledeći sistem jednačina, koji određuje U_{M0} i \mathcal{L} :

$$\mathcal{L} U_{M0} = \sum_{\theta=0}^3 H_{M\theta} U_{\theta 0} ; M \in \{0, 1, 2, 3\} \quad (6.12)$$

Sistem jednačina (6.12) daje četiri rešenja sa \mathcal{L} .

Birajući najmanje od njih i uvodeći kvazi-Pauli operatore

$$\mathcal{P}_M^{(A)} = \alpha_M^+ \alpha_o ; \quad \mathcal{P}_M^{(A)} = \alpha_o^+ \alpha_M ; \quad M \in \{1, 2, 3\} \quad (6.13)$$

koji zadovoljavaju sledeće komutacione realcije (vidi ref. :

$$[\mathcal{P}_\theta^{(A)}, \mathcal{P}_\omega^{(A)}] = \delta_{\theta\omega} \left(1 - \sum_{\lambda=1}^3 \mathcal{P}_\lambda^{+(A)} \mathcal{P}_\lambda^{(A)} \right) - \mathcal{P}_\omega^{+(A)} \mathcal{P}_\theta^{(A)}$$

$$[\mathcal{P}_\theta^{(A)}, \mathcal{P}_\omega^{(A)}] = [\mathcal{P}_\theta^{(A)}, \mathcal{P}_\omega^{(A)}] = 0 \quad \mathcal{P}_\theta^{(A)} \mathcal{P}_\omega^{(A)} = 0 \quad \text{za } \theta \neq \omega \quad (6.14)$$

mi konačno dobijamo:

$$H_A = \mathcal{L}_A + \sum_{\theta=1}^3 \Delta_\theta^{(A)} P_\theta^{+(A)} P_\theta^{(A)}$$

$$\mathcal{L} = E_0 - \frac{1}{4}R - \frac{1}{2} \sqrt{\varphi_A^2 + R^2 \psi_A^2} ; \quad \varphi_A = M_B \mathcal{H} - R \left(m_0 + \frac{1}{2} \right)$$

$$\Delta_1^{(A)} = \frac{1}{2} \left\{ \sqrt{\varphi_A^2 + R^2 \psi_A^2} - \varphi_A + R \right\} ; \quad \Delta_2^{(A)} = \frac{1}{2} \left\{ \sqrt{\varphi_A^2 + R^2 \psi_A^2} + \varphi_A + R \right\}$$

$$\Delta_3^{(A)} = \frac{P_A^2 H_{00}^{(A)} + H_{33}^{(A)} - R \varphi_A P_A}{1 + P_A^2} ; \quad P_A = \frac{\varphi_A - \sqrt{\varphi_A^2 + R^2 \psi_A^2}}{R \psi_A} \quad (6.15)$$

Elementi unitarne matrice \hat{U} koji nisu ravnici su sledeći:

$$U_{00}^{(A)} = (1 + P_A^2)^{-1/2} ; \quad U_{03}^{(A)} = -P_A (1 + P_A^2)^{-1/2} ; \quad U_{11}^{(A)} = U_{22}^{(A)} = 1$$

$$U_{30}^{(A)} = P_A (1 + P_A^2)^{-1/2} ; \quad U_{33}^{(A)} = (1 + P_A^2)^{-1/2} \quad (6.16)$$

U slučaju $M_f = m_0 - 1$ zgodnije je da kao početno energiju osnovnog stanja izdvojimo energiju pa da onda izvršimo ranije navedenu proceduru minimiziranja. Sistem jednačina koji određuje \mathcal{L} je sledeći

$$\mathcal{L} U_M = \sum_{\nu=0}^3 H_{M\nu} U_\nu ; \quad M \in \{0, 1, 2, 3\} \quad (6.17)$$

U ovom slučaju kvazi-Pauli operatori se moraju definisati kao $P_M^{+(B)} = \mathcal{L}_M^+ \alpha_1 ; \quad M \in \{0, 1, 2, 3\}$, ali je zgodnije da posle određivanja odgovarajućih energija, izvrši prenumeracija indeksa. Tako mi dobijamo

$$H_B = \mathcal{L}_B + \sum_{\theta=1}^3 \Delta_\theta^{(B)} P_\theta^{+(B)} P_\theta^{(B)}$$

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_B &= E_0 - \frac{1}{4} R - \frac{1}{2} \sqrt{\varphi_B^2 + R^2 \psi_B^2}; \quad \varphi_B = M_B \mathcal{H} - R \left(m_0 - \frac{1}{2} \right) \\ \Delta_1^{(B)} &= \frac{1}{2} \left\{ \sqrt{\varphi_B^2 + R^2 \psi_B^2} - \varphi_B + R \right\}; \quad \Delta_2^{(B)} = \frac{1}{2} \left\{ \sqrt{\varphi_B^2 + R^2 \psi_B^2} + \varphi_B + R \right\} \\ \Delta_3^{(B)} &= \frac{P_B H_{11}^{(B)} + H_{22}^{(B)} - R \varphi_B P_B}{1 + S_B^2}; \quad S_B = \frac{P_B - \sqrt{P_B^2 + R^2 \psi_B^2}}{R \psi_B^2} \end{aligned} \quad (6.18)$$

Elementi matrice \hat{U} koji su različiti od nule su:

$$\begin{aligned} U_{00}^{(B)} &= U_{33}^{(B)} = 1; \quad U_{11}^{(B)} = (1 + S_B^2)^{-1/2}; \quad U_{12}^{(B)} = -S_B (1 + S_B^2)^{-1/2} \\ U_{21}^{(B)} &= S_B (1 + S_B^2)^{-1/2}; \quad U_{22}^{(B)} = (1 + S_B^2)^{-1/2} \end{aligned} \quad (6.19)$$

Na kraju navećemo energije p -elektrona za ($\ell_0=1$) zaslučaj kada je spoljašnje magnetno polje \mathcal{H} ravno nuli:

$$\begin{aligned} m_0 = -1 &; \quad \Delta_1^{(A)} = R; \quad \Delta_2^{(A)} = \frac{3}{2}R; \quad \Delta_3^{(A)} = \frac{3}{2}R; \quad S_A = -\frac{1}{\sqrt{2}} \\ m_0 = 0 &; \quad \Delta_1^{(A)} = \frac{3}{2}R; \quad \Delta_2^{(A)} = R; \quad \Delta_3^{(A)} = \frac{3}{2}R; \quad S_A = -\sqrt{2} \\ m_0 = 1 &; \quad \Delta_1^{(B)} = \frac{3}{2}R; \quad \Delta_2^{(B)} = R; \quad \Delta_3^{(B)} = \frac{3}{2}R; \quad S_B = -\sqrt{2} \\ m_0 = 1 &; \quad \Delta_1^{(B)} = R; \quad \Delta_2^{(B)} = \frac{3}{2}R; \quad \Delta_3^{(B)} = \frac{3}{2}R; \quad S_B = -\frac{1}{\sqrt{2}} \end{aligned} \quad (6.20)$$

Kao što se vidi u ovom slučaju pojavljuju se parovi degenerisanih stanja.

Sada ćemo analizirati termodinamičke osobine sistema jednoelektronskih pobudjenja, pretpostavljajući da sistem sa okolinom vrši razmenu energije. Skup kvazipaulionskih stanja je sledeći:

$$\mathcal{S}_g = \{ |0_1 0_2 0_3 \rangle, |1_1 0_2 0_3 \rangle, |0_1 1_2 0_3 \rangle, |0_1 0_3 1_3 \rangle \} \quad (6.21)$$

Zbog pretpostavljanja razmene energije sa termostatom koristićemo statistički operator za kanonički ansambl tj.:

$$\hat{\eta} = e^{\frac{F-H}{\tau}} ; \quad H = \mathcal{L} + \sum_{\theta=1}^3 \Delta_\theta \mathcal{P}_\theta^+ \mathcal{P}_\theta \quad (6.22)$$

gde je F slobodna energija sistema i $\tau = k_B T$ temperatura u energetskim jedinicama. Koristeći uslov normiranja $\text{Sp } \hat{\eta} = 1$ i izračunavajući $\text{Sp } e^{-\frac{H}{\tau}}$ po svim stanjima (6.21) dobijamo:

$$F = \mathcal{L} - \tau \ln \left(1 + \sum_{\theta=1}^3 e^{-\frac{\Delta_\theta}{\tau}} \right) \quad (6.23)$$

Takodje je interesantno da izračunamo srednje vrednosti kvazi-paulinskih okupacionih brojeva

$$\langle \mathcal{P}_\theta^+ \mathcal{P}_\theta \rangle = \text{Sp} (\mathcal{P}_\theta^+ \mathcal{P}_\theta \hat{\eta}) = e^{-\frac{\Delta_\theta}{\tau}} \left(1 + \sum_{\omega=1}^3 e^{-\frac{\Delta_\omega}{\tau}} \right); \theta \in \{1, 2, 3\} \quad (6.24)$$

i parametar uredjenosti sistema:

$$\tilde{\sigma} = 1 - \sum_{\theta=1}^3 \langle \mathcal{P}_\theta^+ \mathcal{P}_\theta \rangle = \left(1 + \sum_{\theta=1}^3 e^{-\frac{\Delta_\theta}{\tau}} \right)^{-1} \quad (6.25)$$

Unutrašnja energija sistema je data sa

$$\langle H \rangle = \text{Sp} (H \hat{\eta}) = \mathcal{L} + \tilde{\sigma} \sum_{\theta=1}^3 \Delta_\theta e^{-\frac{\Delta_\theta}{\tau}} \quad (6.26)$$

a entropija sistema je

$$S = -\frac{\partial F}{\partial \tau} = \frac{\langle H \rangle - F}{\tau} = \ln \tilde{\sigma}^{-1} + \tilde{\sigma} \tau^{-1} \sum_{\theta=1}^3 \Delta_\theta e^{-\frac{\Delta_\theta}{\tau}} \quad (6.27)$$

Sa ciljem da procenimo ponašanje sistema na visokim temperaturama, tj. kada je $\frac{\Delta\theta}{\tau} \ll 1$, eksponent ćemo razložiti na sledeći način $e^{-\frac{\Delta\theta}{\tau}} \approx 1 - \frac{\Delta\theta}{\tau}$ i u ovoj aproksimaciji dolazimo do rezultata:

$$\mathcal{G} = \frac{1}{4} \left(1 - \frac{\tau_c}{\tau}\right)^{-1}; \quad \tau_c = \frac{1}{4} \sum_{\theta=1}^3 \Delta_\theta \quad (6.28)$$

Takodje se vidi da na istoj temperaturi singularitet^{#)} ima i entropija $S = -\frac{\partial F}{\partial \tau}$, tako da na temperaturi $\tau = \tau_c$ može da se očekuje fazni prelaz druge vrste.

Termodinamičku analizu sistema završićemo ispitivanjem termodinamičkog ponašanja totalnog momenta sistema $\vec{I} = \vec{L} + \vec{S}$. U reprezentaciji druge kvantizacije operator \vec{I} može da se napiše kao:

$$\vec{I} = \sum_{M,V=0}^3 \langle M | \vec{I} | V \rangle a_M^+ a_V$$

Koristeći formule iz prethodnog paragrafa mi ćemo preći na kvazi-Paulionsku reprezentaciju, pa tako, za slučaj $m_f = m_o + 1$ dobijamo:

$$\begin{aligned} I_A^+ &= (1 + \rho_A)^{-1/2} \left[(\psi_A + \rho_A) P_1^{+(A)} + (1 + \psi_A \rho_A) P_2^A + (\psi_A - \rho_A) P_3^{+(A)} P_2^A + (1 - \psi_A \rho_A) P_1^{+(A)} P_3^A \right] \\ I_A^- &= (I_A^+)^+; \quad I_A^z = m_o + \frac{1}{2} + P_1^{+(A)} P_1^A - P_2^{+(A)} P_2^A \end{aligned} \quad (6.29)$$

^{#)} Singularitet u (6.28) je, u stvari, prevojna tačka parametra uredjenosti \mathcal{G} koja u upotrebljenoj aproksimaciji degeneriše u singularitet.

Odgovarajuće formule za slučaj $m_f = m_o - 1$ dobijaju se zamenom indeksa A indeksima B. U izrazu za I^z umesto $m_o + \frac{1}{2}$ treba da se piše $m_o - \frac{1}{2}$.

Kao što se vidi, jedino operator I^z ima razliku od nule ravnotežnu srednju vrednost. Pošto je hamiltonijan sistema dijagonalan, srednje vrednosti tipa $\langle P_\theta^+ P_\omega \rangle$; $\theta \neq \omega$ ravne su nuli. Prema tome:

$$\langle I^z \rangle = m_o \pm \frac{1}{2} + \langle P_1^+ P_1 \rangle - \langle P_2^+ P_2 \rangle \quad (6.30)$$

U visokotemperaturskoj aproksimaciji $\frac{\Delta_\theta}{\tau} \ll 1$; $e^{-\frac{\Delta_\theta}{\tau}} \approx 1 - \frac{\Delta_\theta}{\tau}$ dobijamo:

$$\begin{aligned} \langle I_A^z \rangle &\approx m_o + \frac{1}{2} + \frac{1}{4} \frac{\tilde{C} - \Delta_1^{(A)}}{\tilde{C} - \tilde{C}_c^{(A)}} - \frac{1}{4} \frac{\tilde{C} - \Delta_2^{(A)}}{\tilde{C} - \tilde{C}_c^{(A)}}; \quad \tilde{C}_c^{(A)} = \frac{1}{4} \sum_{\theta=1}^3 \Delta_\theta^{(A)} \\ \langle I_B^z \rangle &\approx m_o - \frac{1}{2} + \frac{1}{4} \frac{\tilde{C} - \Delta_1^{(B)}}{\tilde{C} - \tilde{C}_c^{(B)}} - \frac{1}{4} \frac{\tilde{C} - \Delta_2^{(B)}}{\tilde{C} - \tilde{C}_c^{(B)}}; \quad \tilde{C}_c^{(B)} = \frac{1}{4} \sum_{\theta=1}^3 \Delta_\theta^{(B)} \end{aligned} \quad (6.31)$$

Srednje vrednoszi $\langle I_A^z \rangle$ i $\langle I_B^z \rangle$ isčezavaju na temperaturama

$$\tilde{C}_z^{(A)} = \tilde{C}_c^{(A)} + \frac{1}{4} \frac{\Delta_1^{(A)} - \Delta_2^{(A)}}{m_o + \frac{1}{2}}; \quad \tilde{C}_z^{(B)} = \tilde{C}_c^{(B)} + \frac{1}{4} \frac{\Delta_1^{(B)} - \Delta_2^{(B)}}{m_o - \frac{1}{2}} \quad (6.32)$$

koje su analogne Kiri-tačci u teoriji feromagnetika. Kao što je poznato, u Kiri-tačci srednja vrednost S^z postaje ravna nuli. Za slučaj $\ell_o = 1$; $\mathcal{M} = 0$ (vidi formule (6.20)) dobijamo

$$\tilde{C}_c^{(A,B)} = R; \quad \tilde{C}_z^{(A,B)} = \frac{3}{2} R \quad (6.33)$$

Analizu sistema jednoelektronskih pobudjenja nastavićemo ispitivanjem nelinearne reakcije na spoljašnju perturbaciju koja je proporcionalna periodičnom magnetnom polju

$$\vec{h}(t) = \int_{-\infty}^{+\infty} d\Omega \vec{h}(\Omega) e^{-i\Omega t}; \vec{h}(-\Omega) = \vec{h}(\Omega) \quad (6.34)$$

Hamiltonijan interakcije ima oblik

$$H_{int}(t) = -R_L \vec{h}(t) \vec{L} - R_S \vec{h}(t) \vec{S} \quad (6.35)$$

gde su $R_S = M_B$ i $R_L = \frac{1}{2} M_B$ konstante interakcije.

Prelazeći na kvazi-Paulionsku reprezentaciju, dobijamo interakcionu Hamiltonijan u sledećem obliku:

$$H_{int}(t) = - \int_{-\infty}^{+\infty} d\Omega e^{-i\Omega t} [H_0(\Omega) + H_1(\Omega) + H_2(\Omega)] \quad (6.36)$$

gdje je

$$H_0(\Omega) = h^3(\Omega) [(m_0 \pm 1) R_L + \frac{1}{2} R_S + (R_L - R_S) \beta^2 (1 + \beta^2)^{-1}]$$

$$H_1(\Omega) = h^x(\Omega) \left[\frac{R_L \Psi + R_S \beta}{\sqrt{1 + \beta^2}} (\mathcal{P}_1 + \mathcal{P}_1^+) + \frac{R_S + R_L \beta \Psi}{\sqrt{1 + \beta^2}} (\mathcal{P}_2 + \mathcal{P}_2^+) \right] + \\ + h^z(\Omega) \frac{(R_L - R_S) \beta}{1 + \beta^2} (\mathcal{P}_3 + \mathcal{P}_3^+)$$

$$H_2(\Omega) = h^x(\Omega) \left\{ \left[\frac{(R_S - R_L) \beta^2}{1 + \beta^2} + R_L \right] \mathcal{P}_1^+ \mathcal{P}_1 + \left[\frac{(R_S - R_L)}{1 + \beta^2} - R_S \right] \mathcal{P}_2^+ \mathcal{P}_2 + \right. \\ \left. + \frac{(R_L - R_S)(1 - \beta^2)}{1 + \beta^2} \mathcal{P}_3^+ \mathcal{P}_3 \right\} + h^x(\Omega) \left\{ \frac{R_S - R_L \beta \Psi}{\sqrt{1 + \beta^2}} (\mathcal{P}_1^+ \mathcal{P}_3 + C.C.) + \right. \\ \left. + \frac{R_L \Psi - R_S \beta}{\sqrt{1 + \beta^2}} (\mathcal{P}_2^+ \mathcal{P}_3 + C.C.) \right\} \quad (6.37)$$

Za slučajeve $m_f = m_o + 1$ i $m_f = m_o - 1$ u poslednjim formulama treba, respektivno, pisati indekse A i B.

U aproksimaciji linearne reakcije (ako zanemari-mo srednje vrednosti tipa $\langle \mathcal{P} \mathcal{P}^+ \mathcal{P} \mathcal{P}^+ \rangle$ samo oni delovi operatora I^+ i I^- koji su linearni po \mathcal{P} i \mathcal{P}^+ imaju korekcije koje su različite od nule. Efektivni interakcioni hamiltonijan je sledeći:

$$\begin{aligned} V(t) &= - \int_{-\infty}^{+\infty} d\Omega e^{-i\Omega t} \left\{ h_1(\Omega) [\mathcal{P}_1(t) + c.c.] + h_2(\Omega) [\mathcal{P}_2(t) + c.c.] \right\} \\ \mathcal{P}_e(t) &= e^{-\frac{Ht}{i\hbar}} \mathcal{P}_e e^{\frac{Ht}{i\hbar}} \\ h_1(\Omega) &= h^x(\Omega) \frac{R_L \Psi + R_S \beta}{\sqrt{1 + \beta^2}} ; \quad h_2(\Omega) = h^x(\Omega) \frac{R_S + R_L \beta \Psi}{\sqrt{1 + \beta^2}} \end{aligned} \quad (6.38)$$

U skladu sa opštom teorijom linearne reakcije (vidi ref. str. 135-141) možemo pisati

$$\langle J^\pm(t) \rangle_{eq} = \langle \hat{S}^{-1}(t, t_0) J^\pm(t) \hat{S}(t, t_0) \rangle_{eq} \quad (6.39)$$

gde je $\hat{S}(t, t_0)$ "es" matrica sistema:

$$\hat{S}^{\pm 1}(t, t_0) = \hat{T} e^{\pm \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' V(t')} \approx 1 \pm \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' V(t') \quad (6.40)$$

gde je \hat{T} Dajsonov hronološki operator i

$$J^+(t) = j_1 \mathcal{P}_1^+(t) + j_2 \mathcal{P}_2^+(t); \quad J^-(t) = j_1 \mathcal{P}_1^-(t) + j_2 \mathcal{P}_2^-(t)$$

$$j_1 = \frac{\Psi + \beta}{\sqrt{1 + \beta^2}} \quad ; \quad j_2 = \frac{1 + \Psi \beta}{\sqrt{1 + \beta^2}} \quad (6.41)$$

Pretpostavljajući da se interakcija uključuje adiabatski, tj. $t_0 \rightarrow -\infty$ dobijamo:

$$\langle J^\pm(t) \rangle_{n.eq} = \frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^t dt' \langle\langle J^\pm(t) | V(t') \rangle\rangle \quad (6.42)$$

gde je $\langle\langle J^\pm(t) | V(t') \rangle\rangle$ dvovremenska, temperaturska Grinova funkcija. Grinova funkcija $\langle\langle J^\pm(t) | V(t') \rangle\rangle$ izražena je preko kvazi-Paulionskih Grinovih funkcija

$$\Gamma_{\theta\omega}(t) = \langle\langle P_\theta(t) | P_\omega^+(0) \rangle\rangle; \quad \Gamma_{\theta\omega}(t) = \int_{-\infty}^{+\infty} d\Omega \Gamma_{\theta\omega}(\Omega) e^{-i\Omega t} \quad (6.43)$$

Izraz za Grinovu funkciju Γ je sledeći:

$$\Gamma_{\theta\omega}(\Omega) = \frac{i}{2\pi} \frac{6\delta_{\theta\omega} - \langle P_\omega^+ P_\theta \rangle}{\Omega - \Omega_\theta + i\delta}; \quad \Omega_\theta = \hbar^{-1} \Delta_\theta \quad (6.44)$$

Koristeći spektralnu teoremu:

$$\langle P_\omega^+ P_\theta \rangle = 2 \int_{-\infty}^{+\infty} d\Omega (e^{\frac{i\Omega}{\tau}} - 1)^{-1} \text{Re} \Gamma_{\theta\omega}(\Omega) = \frac{6\delta_{\theta\omega} - \langle P_\omega^+ P_\theta \rangle}{e^{\frac{i\Omega}{\tau}} - 1}$$

mi konačno dobijamo

$$\langle P_\omega^+ P_\theta \rangle = S_{\theta\omega} 6 e^{-\frac{\Delta\theta}{\tau}}; \quad \Gamma_{\theta\omega}(\Omega) = \frac{i 6}{2\pi} S_{\theta\omega} \frac{1 - e^{-\frac{\Delta\theta}{\tau}}}{\Omega - \Omega_\theta + i\delta} \quad (6.45)$$

Kombinujući formule

za Furije-likove indukovanih momenata

$$\langle J^\pm(\Omega) \rangle_{n.eq} = (2\pi)^{-1} \int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{i\Omega t} \langle J^\pm(t) \rangle_{n.eq} \quad (6.46)$$

dobijamo sledeće izraze

$$\langle J^+(\Omega) \rangle_{n.eq} = \frac{6}{2\hbar} \left[\frac{j_2 h_2(\Omega)(1 - e^{-\frac{\hbar\Omega_2}{\tau}})}{\Omega - \Omega_2} - \frac{j_1 h_1(\Omega)(1 - e^{-\frac{\hbar\Omega_1}{\tau}})}{\Omega + \Omega_1} \right]$$

$$\langle J^-(\Omega) \rangle_{n.eq} = \frac{6}{2\hbar} \left[\frac{j_1 h_1(\Omega) (1 - e^{-\frac{k\Omega_1}{\tau}})}{\Omega - \Omega_1} - \frac{j_2 h_2(\Omega) (1 - e^{-\frac{k\Omega_2}{\tau}})}{\Omega + \Omega_2} \right] \quad (6.47)$$

Iz dobijenih formula zaključujemo da je spoljašnja stigulacija najefektivnija za $T=0$. Na visokim temperaturama, kada je $\frac{\Omega\theta}{\tau} \ll 1$, rezonantni delovi indukovanih momenata su

$$\begin{aligned} \langle J^+(\Omega) \rangle_{n.eq} &\approx \frac{j_2 h_2(\Omega)}{2} \cdot \frac{\Omega_2}{\tau} \cdot \frac{1}{\Omega - \Omega_2}, \\ \langle J^-(\Omega) \rangle_{n.eq} &\approx \frac{j_1 h_1(\Omega)}{2} \cdot \frac{\Omega_1}{\tau} \cdot \frac{1}{\Omega - \Omega_1}, \end{aligned} \quad (6.48)$$

i kao što se vidi, oni opadaju linearno sa porastom temperature.

Dobijene rezultate možemo rezimirati na sledeći način. U sistemu jednoelektronskih pobudjenja koja se sastoje u diskretnim promenama orijentacije spina i orbitalnog momenta postoje tri tipa eksitacije. One zadovoljavaju specifičnu, kvazi-Paulionsku kinematiku, a ova opet na bitan način određuje statističke i termodinamičke osobine sistema. Dinamičko ponašanje sistema bitno je uslovljeno spin-orbitalnom interakcijom. Ova činjenica daje mogućnost da se hamiltonijan sistema svede na dijagonalnu formu. Druga posledica pomenute činjenice, tj. da spin-orbitalna interakcija određuje dinamiku sistema, su male energije elementarnih ekscitacija, koje su reda veličine $30-50 \text{ K}_B$.

Izračunate su slobodna i unutrašnja energija sistema a takodje i njegova entropija, parametar uredjenosti i ravnotežna srednja vrednost z-komponente totalnog momenta. Pokazano je da parametar uredjenosti ima singularitet na temperaturi T_c a da srednja vrednost z-komponente totalnog momenta iščezava na temperaturi T_z . Temperatura T_z je viša nego temperatura T_c . Prema tome, dolazimo do zaključka da se u sistemu mogu očekivati dva tipa faznih prelaza.

Takodje je ispitana linearna reakcija sistema na spoljašnju perturbaciju koja je proporcionalna magnetnom polju. Pokazano je da spoljašnja stimulacija dovodi do pojave indukovanih momenata $\langle J^+(\Omega) \rangle_{neq}$ i $\langle J^-(\Omega) \rangle_{neq}$. Ovi indukovani momenti maksimalni su za $T=0$ i linearno opadaju kada temperatura raste.

Rezultati izložene analize direktno se mogu primeniti na gasove ili na kristale sa veoma slabim kuplovanjem izmedju suseda. Rezultati se mogu koristiti kao osnova za formulaciju opštije teorije spin-orbitalnih interakcija u kristalima, naročito za slučaj magnetnih dielektrika.

Rezultati takođe mogu biti korišćeni u kriminalističkim analizama. Pošto se dobijeni rezultati odnose u prvom redu na alkalne metale, oni mogu biti iskorisćeni za registrovanje alkalnih primesa u sistemima.

U prethodnoj glavi videli smo da se prilikom identifikacije ličnosti na osnovu nadjene vlas i kose metodom neutronske aktivacione analize određuje količina i odnos pojedinih elemenata u vlas i kose. Ako se radi o alkalnim primesama, ne moraju se obavezno koristiti metodi neutronske aktivacione analize, jer se prisustvo alkalnih primesa može registrovati na osnovu ovde dobijenih rezultata. Da bi se ove primese registrovale, potrebno je hladiti vlas u intervalu temperatura od 60 K stepeni do 20 K^o i to u oscilatornom magnetnom polju. Ukoliko u vlas i postoje alkalne primese, one bi odmah mogle da se registruju promenom oblasti u kojoj sistem apsorbuje magnetne oscilacije. Posle svakog od pomenutih faznih prelaza apsorbovane bi se magnetne oscilacije u oštro odvojenoj oblasti frekvence. Naravno, ovo je samo nabačena ideja, a o tehničkoj realizaciji trebalo bi još dosta razmišljati, naročito u smislu aparata koji bi registrovao promene apsorpcione oblasti magnetnih talasa.

7. O problemu nelinearne eksitonske populacije

Poslednjih godina intenzivno se proučavaju kvantni generatori svetlosti - laseri. Ovo je i razumljivo jer su oni našli veliku primenu u praksi, a naročito u domenu vojne tehnike i proizvodnje novih tipova oružja.

Laseri se koriste i u drugim oblastima, pa pored ostalog i u kriminalistici. Zbog toga ćemo u ovom paragrafu analizirati uslove pod kojima dolazi do stimulisane emisije svetlosne energije i neke fenomene vezane za ponašanje optičkih sistema u polju spoljašnjeg stimulatora. Konkretno, proučavaćemo nelienarnu populaciju eksitona, u slučaju kada se optički aktivan materijal nalazi u spoljašnjem elektromagnetsnom polju. Ovde se misli na Frenkelove eksitone koji nastaju u organskim materijama, tj. u takozvanim molekularnim kristalima. Najtipičniji predstavnici molekularnih kristala su antracen, naftalin, naftacen, benzol u čvrstom stanju, a osim toga, i plemeniti gasovi, kada se dovedu u kristalno stanje, takođe pokazuju osobine molekularnih kristala. Eksitonni imaju relativno visoke energije, pa promena temperature molekularnog kristala ne može da dovede do nekih značajnih efekata, a naročito ne može da dovede do faznog prelaza u superradiativno stanje u kome je sistem sposoban da spontano emituje energije tj. da se ponaša kao laser. O ovome se može videti u referencama^{64,65)}. U pomenutim radovima izračunavane su srednje vrednosti okupacionog broja eksitona po ravnotežnom ansamblu i analizirane su termodinamičke karakteristike eksitonskog sistema, uz pomoć ovih srednjih vrednosti. Ovde ćemo analizirati odgovarajuće neravnotežne srednje vrednosti, tj. srednje vrednosti tipa $\langle P_\alpha^+ P_\beta \rangle_{\eta \text{ eq}}$ koje su uzete po neravnotež-

žnom ansamblu. Operatori \hat{P}_α^+ i \hat{P}_β kreiraju i anihiliraju eksitone tipa α i β , respektivno. Interakcioni hamiltonijan je tipa $\vec{\epsilon} \vec{D}$ i tretira se kao perturbacija. Spoljašnje periodično elektročno polje označeno je sa $\vec{\epsilon}$ dok je \vec{D} ukupni dipolni momenat eksitonskog sistema. Da bismo uprostili račune, pretpostavljemo da se interakcija uključuje adiabatski, tj. da donja granica \hat{S} matrice sistema, to teži u $-\infty$. Korišćenje konačne granice za \hat{S} matricu ne stvara principijelne probleme, ali čini račune veoma glomaznim. Razmatra se eksitonski sistem koji odgovara multi-nivoškoj šemi molekularnih pobudjenja. Efekti Davidovljevog razdvajanja ne uzimaju se u račun, tj. razmatra se kristal sa jednim molekulom u elementarnoj celiji.

Hamiltonijan eksitonskog sistema, koji odgovara multinivoskoj šemi molekulskih pobudjenja ima sledeći oblik

$$\begin{aligned}
 H_0 = & H_g + \sum_{\mu\nu} \int d^3\vec{u} d^3\vec{u}' X_{\mu\nu} (\vec{u}-\vec{u}') \hat{P}_\mu^+(\vec{u}) \hat{P}_\nu(\vec{u}') + \\
 & + \sum_{\mu\mu'\nu\nu'} Y_{\mu\mu'\nu\nu'} (\vec{u}-\vec{u}') \hat{P}_\mu^+(\vec{u}) \hat{P}_\mu(\vec{u}) \hat{P}_\nu^+(\vec{u}') \hat{P}_\nu(\vec{u}') \quad (7.1) \\
 & (\mu, \nu) \in (1, 2, \dots, r)
 \end{aligned}$$

upotrebljene su oznake

$$H_g = [E_0 + \frac{1}{2} U_{0000}] V \quad X_{MV}(\vec{q} - \vec{q}') = [(E_M - E_0 - U_{0000}) S_{MV} + \\ + \frac{1}{2} (U_{MV00} + U_{00MV})] \delta(\vec{q} - \vec{q}') + \frac{1}{2} [\Phi_{M00V}(\vec{q} - \vec{q}') + \Phi_{00VM}(\vec{q} - \vec{q}')] \quad (1)$$

$$Y_{MM'VV'}(\vec{q} - \vec{q}') = \frac{1}{2} \left\{ \Phi_{MM'VV'}(\vec{q} - \vec{q}') + \frac{1}{2} [\Phi_{MM'00}(\vec{q} - \vec{q}') + \right. \\ \left. + \Phi_{00MM'}(\vec{q} - \vec{q}')] S_{VV'} + \Phi_{0000}(\vec{q} - \vec{q}') \delta_{MM'} \delta_{VV'} \right\} \quad (2)$$

Eksitonski operatori $P_M(\vec{q})$ i $P_M^+(\vec{q})$ konstruisani su od elektronskih operatora $Q_M(\vec{q})$ i $Q_M^+(\vec{q})$ na sledeći način $P_M(\vec{q}) = Q_o^+(\vec{q}) Q_M(\vec{q})$ i $P_M^+(\vec{q}) = Q_M^+(\vec{q}) Q_o(\vec{q})$

Oni zadovoljavaju veoma komplikovana komutaciona pravila (vidi ⁶³) i zovu se kvazi-Pauli operatori. Ako je koncentracija eksitona mala, kvazi-Pauli operatori mogu se približno zameniti Boze operatorima $B_M(\vec{q})$ i $B_M^+(\vec{q})$.

Indeksi M, M' i V, V' označavaju tip molekulskih eksitacija i indeks, 0 označava osnovno stanje molekula.

Energije E_M su svojstvene vrednosti hamiltonijana izolovanog molekula, tj. $H(\vec{\xi} \vec{q}) \varphi_M(\vec{\xi} \vec{q}) = E_M \psi_M(\vec{\xi} \vec{q})$ gde je $\vec{\xi} \vec{q}$ skup unutrašnjih koordinata molekula koji se nalazi na mestu \vec{q} i $\Phi_{MM'VV'}(\vec{q} - \vec{q}')$ su matrični elementi operatora dipol-dipolne interakcije.

$$\Phi_{MM'VV'}(\vec{q}-\vec{q}') = \int d^3\vec{\xi} d^3\vec{\xi}' \psi_M^*(\vec{\xi}\vec{q}) \psi_V^*(\vec{\xi}\vec{q}') \wedge (\vec{q}-\vec{q}') \psi_{V'}(\vec{\xi}\vec{q}') \psi_M(\vec{\xi}\vec{q})$$

$$\wedge (\vec{q}-\vec{q}') = \frac{e^2}{|\vec{q}-\vec{q}'|^3} \left\{ \frac{\vec{\xi}}{|\vec{q}|} \frac{\vec{\xi}'}{|\vec{q}'|} - \frac{3[(\vec{q}-\vec{q}')\vec{\xi}\vec{q}][(\vec{q}-\vec{q}')\vec{\xi}'\vec{q}']}{|\vec{q}-\vec{q}'|^2} \right\}$$

Zapremina kristala označena je sa V , e je nanelektrisanje dipola i $U_{MM'VV'} = \int d^3\vec{q} \Phi_{MM'VV'}(\vec{q})$.

Centar simetrije kristala poklapa se sa centrom inverzije molekula tako da u hamiltonijanu nemamo članove koji sadrže produkte tri eksitonska operatora. Osim toga, članovi hamiltonijana mogi su proporcionalni $\mathcal{P}\mathcal{P}$ i $\mathcal{P}^*\mathcal{P}^*$ zanemareni su jer su njihovi doprinosi mali⁶⁶⁾.

Interakcioni hamiltonijan ima oblik

$$H_{int}(t) = - \int d^3\vec{z} \vec{E}(\vec{q}t) \vec{D}(\vec{q})$$

gde je:

$$\vec{D}(\vec{q}) = \sum_m [\vec{D}_{0m}^* \mathcal{P}_m(\vec{q}) + \vec{D}_{0m} \mathcal{P}_m(\vec{q}) + \sum_{\nu} \vec{D}_{m\nu} \mathcal{P}_m^*(\vec{q}) \mathcal{P}_{\nu}(\vec{q})]$$

$$\vec{D}_{m\nu} = e \int d^3\vec{\xi} \vec{\xi} \psi_m^*(\vec{\xi}\vec{q}) \vec{\xi} \psi_{\nu}(\vec{\xi}\vec{q}); \vec{D}_{m\nu} = \vec{D}_{\nu m}; \vec{D}_{mm} = 0$$

i

$$\vec{E}(\vec{q}t) = \int d^3\vec{R} dw [\vec{s}(\vec{R}, \omega) e^{i\vec{R}\vec{q} - i\omega t} + c.c.];$$

$$\vec{s}(\vec{R}, \omega) = \vec{s}(-\vec{R}, \omega)$$

U reprezentaciji interakcije možemo pisati:

$$\hat{W}(t) = e^{-\frac{\hat{H}_0 t}{\hbar k}} \hat{H}_{int}(t) e^{\frac{\hat{H}_0 t}{\hbar k}} = \hat{W}^{(1)}(t) + \hat{W}^{(2)}(t)$$

$$\hat{W}^{(1)}(t) = \sum_m \int d^3\vec{q} d^3\vec{R} dw [\vec{s}(\vec{R}, \omega) e^{i\vec{R}\vec{q} - i\omega t} + c.c.] [\vec{D}_{0m} \mathcal{P}_m(\vec{q}, t) + c.c.]$$

$$\hat{W}^{(2)}(t) = - \sum_m \int d^3\vec{q} d^3\vec{R} dw [\vec{s}(\vec{R}, \omega) e^{i\vec{R}\vec{q} - i\omega t} + c.c.] [\vec{D}_{m\nu} \mathcal{P}_m^*(\vec{q}, t) \mathcal{P}_{\nu}(\vec{q}, t)] \quad (7.2)$$

Izračunavaćemo sledeću neravnotežnu srednju vrednost

$$\langle \hat{P}_\alpha^+ (\vec{q}, t) \hat{P}_\beta (\vec{q}, t) \rangle_{n.eq.} = \langle \hat{S}^{-1}(t, t_0) \hat{P}_\alpha^+ (\vec{q}, t) \hat{P}_\beta (\vec{q}, t) \hat{S}(t, t_0) \rangle_{n.eq.}$$

$$(\alpha, \beta) \in (1, 2, \dots, r) \quad (7.3)$$

gde je:

$$\langle \hat{A} \rangle_{eq.} = Sp \hat{A} \hat{\rho}_{eq.}; \hat{\rho}_{eq.} = e^{\frac{F_0 - H_0}{\Theta}}; \hat{S}(t, t_0) = T e^{\frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t dt \hat{W}(t)}$$

U poslednjoj formuli \hat{T} je Dajsonov hronološki operator, F_0 je slobodna energija neperturbovanog sistema i $\Theta = K_B T$ je temperatura u energetskim jedinicama. Ako \hat{S} matricu razvijemo do članova kvadratnih po interakciji onda dobijamo

$$\begin{aligned} \langle \hat{P}_\alpha^+ (\vec{q}, t) \hat{P}_\beta (\vec{q}, t) \rangle_{n.eq.} &= \langle \hat{P}_\alpha^+ (\vec{q}, t) \hat{P}_\alpha (\vec{q}, t) \rangle_{eq.} + \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t dt \langle \hat{P}_\alpha^+ (\vec{q}, t) \hat{P}_\beta (\vec{q}, t) \hat{W}^{(2)}(t) - \\ &- \hat{W}^{(2)}(t) \hat{P}_\alpha^+ (\vec{q}, t) \hat{P}_\beta (\vec{q}, t) \rangle + \frac{1}{\hbar^2} \left\{ \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^t dt_2 \langle \hat{W}^{(1)}(t_1) \hat{P}_\alpha^+ (\vec{q}, t) \hat{P}_\beta (\vec{q}, t) \hat{W}(t_2) \rangle_{eq.} - \right. \\ &\left. - \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^t dt_2 \langle \hat{P}_\alpha^+ (\vec{q}, t) \hat{P}_\beta (\vec{q}, t) \hat{W}^{(1)}(t_1) \hat{W}^{(2)}(t_2) - \hat{W}^{(1)}(t_2) \hat{W}^{(2)}(t_1) \hat{P}_\alpha^+ (\vec{q}, t) \hat{P}_\beta (\vec{q}, t) \rangle_{eq.} \right\} \end{aligned}$$

Pošto izvršimo sledeća dekuplovanja

$$\begin{aligned} \langle \hat{P}_{i_1}^+ (x_1) \hat{P}_{i_2} (x_2) \hat{P}_{i_3}^+ (x_3) \hat{P}_{i_4} (x_4) \rangle_{eq.} &= J_{i_2 i_1} (x_2 - x_1) J_{i_4 i_3} (x_4 - x_3) + \\ &+ J_{i_4 i_1} (x_4 - x_1) I_{i_2 i_3} (x_2 - x_1) \end{aligned}$$

gde su

$$J_{ij}(x-y) = \langle P_j^+(y) P_i(x) \rangle_{eq}; I_{ij}(x-y) = \langle P_i(x) P_j^+(y) \rangle_{eq} ; x = (\vec{q}, t) y = (\vec{q}, t)$$

korelace funkcije i pošto predjemo na Furije likove

$$A_{ij}(x-y) = \int d\vec{q} A_{ij}(\vec{q}) e^{i\vec{q}(x-y)}; \vec{q} = (\vec{R}, \omega); \vec{q} \times = \vec{R} \vec{u} - \omega \vec{t}; t_0 \rightarrow -\infty$$

konačno dobijamo

$$N_{\beta\alpha}(\vec{R}, \omega) = N_{\beta\alpha}^{(1)}(\vec{R}, \omega) + N_{\beta\alpha}^{(2)}(\vec{R}, \omega) + N_{\beta\alpha}^{(3)}(\vec{R}, \omega) \quad (1.5)$$

$$N_{\beta\alpha}^{(1)}(\vec{R}, \omega) = \langle P_\beta^+ P_\alpha \rangle_{eq} S(\vec{R}) \delta(\omega) \left\{ 1 - \frac{(2\bar{u})^8}{4k^2} \sum_{M\nu} \int d^3 \vec{q} d\Omega \chi(\vec{q}, \Omega) \times \right. \\ \times \left[\vec{D}_{ov} \vec{D}_{\beta M}^* I_{\nu M}(\vec{q}, \Omega) + \vec{D}_{ov}^* \vec{D}_{\beta M} I_{\nu M}(\vec{q}, \Omega) \right] \right\}$$

$$N_{\beta\alpha}^{(2)}(\vec{R}, \omega) = \frac{i(2\bar{u})^4}{2k} \sum_{M\nu} \int d^3 \vec{q} d\Omega \vec{D}_{\nu M} \vec{L}(\vec{R}, \omega) [I_{\beta M}(\vec{q}, \Omega)]_\omega \cdot \\ \cdot [(\vec{q} - \vec{k}, \Omega - \omega) - I_{\nu M}(\vec{q} - \vec{k}, \Omega - \omega)]_{\beta M}(\vec{q}, \Omega)$$

$$N_{\beta\alpha}^{(3)}(\vec{R}, \omega) = \frac{(2\bar{u})^8}{4k^2} \sum_{M\nu} \int d^3 \vec{q} d\Omega \tilde{\chi}(\vec{q} - \vec{R}, \Omega - \omega; \vec{q}, \Omega) \left\{ \vec{D}_{ov} \vec{D}_{\beta M}^* \times \right.$$

$$\times [J_{\nu\alpha}(\vec{q} - \vec{R}, \Omega - \omega)]_{\beta M}(\vec{q}, \Omega) - J_{\nu\alpha}(\vec{q} - \vec{k}, \Omega - \omega) I_{\beta M}(\vec{q}, \Omega) -$$

$$- J_{\beta M}(\vec{q}, \Omega) I_{\nu\alpha}(\vec{q} - \vec{k}, \Omega - \omega) + \vec{D}_{ov} \vec{D}_{\beta M} [I_{\beta M}(\vec{q}, \Omega) I_{\nu\alpha}(\vec{q} - \vec{k}, \Omega - \omega) -$$

$$- I_{\beta M}(\vec{q}, \Omega) J_{\nu\alpha}(\vec{q} - \vec{k}, \Omega - \omega) - I_{\nu\alpha}(\vec{q} - \vec{k}, \Omega - \omega) J_{\beta M}(\vec{q}, \Omega)] \right\}$$

gde je

$$\langle \mathcal{P}_\alpha^+ \mathcal{P}_\beta \rangle = \langle \mathcal{P}_\alpha^+(\vec{u}, t) \mathcal{P}_\beta(\vec{u}, t) \rangle_{eq}; X(\vec{R}, \omega) = 2|\vec{\delta}(\vec{R}, \omega)|^2 + \vec{\delta}^2(\vec{R}, \omega) + \vec{\delta}^{*2}(\vec{R}, \omega)$$

$$\vec{L}(\vec{R}, \omega) = \vec{\delta}(\vec{R}, \omega) + \vec{\delta}^*(\vec{R}, \omega);$$

$$T(\vec{R}', \omega', \vec{R}'^4, \omega^4) = [\vec{\delta}(\vec{R}', \omega') \vec{\delta}^*(\vec{R}'^4, \omega^4) + \vec{\delta}(\vec{R}', \omega') \vec{\delta}(\vec{R}'^4, \omega^4) + C.C]$$

$$N_{\alpha\beta}(\vec{R}, \omega) = (2\bar{v})^{-4} \int d^3 \vec{u} dt \langle \mathcal{P}_\alpha^+(\vec{u}, t) \mathcal{P}_\beta(\vec{u}, t) \rangle_{eq} e^{-i\vec{k}\vec{u} + i\omega t} \quad (7.6)$$

Kao što vidimo, član $\hat{W}^{(2)}(t)$ interakcionog hamiltonijana daje doprinose veličini $N_{\alpha\beta}(\vec{R}, \omega)$ u linearnoj aproksimaciji i dovodi do disipativnih procesa u sistemu. Prvi, različit od nule doprinos od $\hat{W}^{(1)}(t)$ dobija se u kvadratnoj aproksimaciji. Odavde se može zaključiti da spoljašnja interakcija (7.2) izaziva disipativne procese u sistemu, a osim toga dovodi do vremensko-prostorne disperzije srednjih vrednosti tipa $\langle \mathcal{P}_\alpha^+ \mathcal{P}_\beta \rangle$. Kao što je dobro poznato, ravnotežne srednje vrednosti $\langle \mathcal{P}_\alpha^+ \mathcal{P}_\beta \rangle_{eq}$ ne zavisi od \vec{R} i ω .

Analizu veličine $N_{\alpha\beta}(\vec{R}, \omega)$ nastavićemo koristeći harmonijsku aproksimaciju za eksitone, a to znači da ćemo u hamiltonijanu (7.1) zanemariti član koji je proporcionalan γ i kvazi-Pauli operatore \mathcal{P} i \mathcal{P}^+

nameniti Boze operatorima β i β^+ . Pošto se korelacione funkcije, koje figurišu u (7.5), mogu izraziti preko odgovarajućih Grinovih funkcija, mi ćemo prvo izračunati Grinove funkcije.

$$G_{ij}^{(0)}(\vec{q}-\vec{q}', t-t') = \Theta(t-t') \langle B_i(\vec{q}, t) B_j^+(\vec{q}', t') B_j(\vec{q}', t') B_i(\vec{q}, t) \rangle_{eq}$$

$$\Theta(t-t') = \begin{cases} 1 & \text{za } t > t' \\ 0 & \text{za } t < t' \end{cases}$$

$$B_i(\vec{q}, t) = e^{-\frac{\hat{H}_0^{(0)} t}{i\hbar}} B_i(\vec{q}) e^{\frac{\hat{H}_0^{(0)} t}{i\hbar}} \quad (7.3)$$

za harmonijski hamiltonijan

$$H_0^{(0)} = \sum_M d^3 \vec{q} d^3 \vec{q}' X_M(\vec{q}-\vec{q}') B_M^+(\vec{q}) B_M(\vec{q}') \quad (7.4)$$

Sistem jednačina za $G_{\alpha\beta}^{(0)}(\vec{q}-\vec{q}', t-t')$ može da se napiše na sledeći način:

$$ik \frac{\partial}{\partial t} G_{\alpha\beta}^{(0)}(\vec{q}-\vec{q}', t-t') = ik \delta(\vec{q}-\vec{q}') \delta(t-t') \delta_{\alpha\beta} +$$

$$+ \sum_M \int d^3 \vec{q}'' X_{M\alpha}(\vec{q}-\vec{q}') G_{M\beta}^{(0)}(\vec{q}''-\vec{q}', t-t') \quad (7.5)$$

$$\alpha, \beta \in \{1, 2, \dots, r\}$$

Posle Furije-transformacija

$$G_{\alpha\beta}^{(0)}(\vec{q}-\vec{q}', t-t') = \int d^3 \vec{R} dw G_{\alpha\beta}^{(0)}(\vec{R}, w) e^{i\vec{R}(\vec{q}-\vec{q}') - iw(t-t')}$$

$$X_{\alpha\beta}(\vec{q}-\vec{q}') = \int d^3 \vec{R} X_{\alpha\beta}(\vec{R}) e^{i\vec{R}\vec{q}'}$$

$$(7.6)$$

sistem jednačina može se napisati u matričnoj formi na sledeći način:

$$[\hat{E} - \hat{X}(\vec{R})] \hat{G}^{(o)}(\vec{R}, \omega) = \frac{i\hbar}{2\pi} \cdot \hat{1} \quad (7.7)$$

gde je:

$$\hat{G}^{(o)}(\vec{R}, \omega) = \| G_{\alpha\beta}^{(o)}(\vec{R}, \omega) \| ; \hat{E} = \| \hbar \omega \delta_{\alpha\beta} \|$$

$$\hat{X}(\vec{R}) = \| X_{\alpha\beta}(\vec{R}, \omega) \| ; \hat{1} = \| \delta_{\alpha\beta} \|$$

Ako uvedemo unitarnu matricu $\hat{M}(\vec{R})$ koja dijagonalizuje matricu $\hat{X}(\vec{R})$, tj.

$$\hat{X}(\vec{R}) \hat{M}(\vec{R}) = \hat{M}(\vec{R}) \hat{F}(\vec{R}) \quad \hat{F}(\vec{R}) = \| \hbar f_{\alpha\alpha}(\vec{R}) \delta_{\alpha\beta} \| \quad (7.8)$$

dobijamo

$$\begin{aligned} G_M^{(o)}(\vec{R}, \omega) &= \frac{i\hbar}{2\pi} [\hat{E} - \hat{F}(\vec{R})]^{-1} = \hat{M}^{-1}(\vec{R}) G^{(o)}(\vec{R}, \omega) \hat{M}(\vec{R}) = \\ &= \| G_{\alpha\alpha}(\vec{R}, \omega) \delta_{\alpha\beta} \| \\ G_{\alpha\alpha}(\vec{R}, \omega) &= \frac{i}{2\pi} \cdot \frac{1}{\omega - f_{\alpha\alpha}(\vec{R}) + i\delta} \end{aligned} \quad (7.9)$$

Kao što se vidi, harmonijska Grinova funkcija eksitonskog sistema je dijagonalna, pa su i odgovarajuće korelacione funkcije, u skladu sa opštim relacijama (vidi ⁶⁷ str. 216)

$$\begin{aligned} J_{ij}(\vec{R}, \omega) &= [G_{ij}(\vec{R}, \omega + i\delta) - G_{ij}(\vec{R}, \omega - i\delta)] \eta(\omega, \theta) \quad \delta \rightarrow 0 \\ I_{ij}(\vec{R}, \omega) &= e^{\frac{\hbar\omega}{\theta}} J_{ij}(\vec{R}, \omega) \\ \eta(\omega, \theta) &= [e^{\frac{\hbar\omega}{\theta}} - 1]^{-1} \end{aligned} \quad (7.10)$$

takodje dijagonalne.

Kombinujući (7.9) i (7.10) sa (1.5) mi dobijamo
 $N_{\beta\alpha}(\vec{R}, \omega)$ u harmonijskoj aproksimaciji:

$$\begin{aligned}
 [N_{\beta\alpha}^{(1)}(\vec{R}, \omega)]^{(0)} &= \langle B_\alpha^+ B_\alpha \rangle_{eq} \delta_{\alpha\beta} \delta(\vec{R}) \delta(\omega) \left\{ 1 - \frac{(2\bar{u})^8}{4\hbar^2} \sum_M \int d^3 \vec{q} |\vec{D}_{\alpha M}|^2 \right\} \\
 &\times \chi[\vec{q}, f_{MM}(\vec{q})] \operatorname{ctg} \theta \frac{k f_{MM}(\vec{q})}{2\theta} \\
 [N_{\beta\alpha}^{(2)}(\vec{R}, \omega)]^{(0)} &= \frac{i(2\pi)^4}{2\hbar} \int d^3 \vec{q} \vec{D}_{\alpha\beta} \vec{L}(\vec{R}, \omega) \left\{ [e^{\frac{k f_{\beta\beta}(\vec{q})}{\theta}} - e^{\frac{k f_{\alpha\alpha}(\vec{q})}{\theta}}] \right. \\
 &\times \eta[f_{\beta\beta}(\vec{q}), \theta] \eta[f_{\alpha\alpha}(\vec{q}-\vec{R}), \theta] \delta\{\omega - f_{\beta\beta}(\vec{q}) - f_{\alpha\alpha}(\vec{q}-\vec{R})\} \\
 [N_{\beta\alpha}^{(3)}(\vec{R}, \omega)]^{(0)} &= \frac{(2\bar{u})^8}{4\hbar^2} \int d^3 \vec{q} \vec{D}_{\alpha\alpha} \vec{D}_{\beta\beta} \tau[\vec{q}-\vec{R}, f_{\alpha\alpha}(\vec{q}-\vec{R}); \vec{q}, f_{\beta\beta}(\vec{q})] \times \\
 &\times \left\{ e^{\frac{k f_{\beta\beta}(\vec{q})}{\theta}} \eta[f_{\beta\beta}(\vec{q}), \theta] - \eta[f_{\alpha\alpha}(\vec{q}-\vec{R}), \theta] - 2e^{\frac{k f_{\alpha\alpha}(\vec{q}-\vec{R})}{\theta}} \right. \\
 &\times \eta[f_{\beta\beta}(\vec{q}), \theta] \eta[f_{\alpha\alpha}(\vec{q}-\vec{R}), \theta] \} \delta\{\omega - [f_{\beta\beta}(\vec{q}) - f_{\alpha\alpha}(\vec{q}-\vec{R})]\} \quad (7.11)
 \end{aligned}$$

Na kraju, možemo da dobijemo izraz za neravnotežni eksitonski okupacioni broj. Stavlјajući $\alpha = \beta$ u (7.11) nalazimo sledeći izraz za neravnotežni eksitonski okupacioni broj na $\theta \approx 0$:

$$\begin{aligned}
 [N_{\alpha\alpha}(\vec{R}, \omega)]_{\theta \approx 0}^{(0)} &= \\
 &= \frac{(2\pi)^8}{4\hbar^2} \int d^3 \vec{q} |\vec{D}_\alpha|^2 \tau[\vec{q}-\vec{R}, f_{\alpha\alpha}(\vec{q}-\vec{R}); \vec{q}, f_{\alpha\alpha}(\vec{q})] \times \\
 &\times \delta\{\omega - [f_{\alpha\alpha}(\vec{q}) - f_{\alpha\alpha}(\vec{q}-\vec{R})]\} \quad (7.12)
 \end{aligned}$$

U cilju procene ponašanja $[N_{\alpha\alpha}(\vec{R}, \omega)]_{\theta \approx 0}^{(0)}$ uzećemo približno $\tau[\vec{q}-\vec{R}, f_{\alpha\alpha}(\vec{q}-\vec{R}); \vec{q}, f_{\alpha\alpha}(\vec{q})] = \tilde{\tau}(Y_\infty)$ gde je $Y_\infty = k^{-1} (E_\alpha - E_0)$. Takođe ćemo koristiti aproksimaciju efektivne mase, pa otuda

$$f_{\alpha\alpha}(\vec{q}) - f_{\alpha\alpha}(\vec{q} - \vec{k}) = \frac{\hbar\kappa}{2m_\alpha} (2q \cos\lambda - \kappa)$$

$$\lambda \in (0, \pi); q \geq \frac{\kappa + Q(\kappa)}{2}; Q(\kappa) = \frac{q m_\alpha \omega}{\hbar \kappa}$$

gde je m_α efektivna masa eksitona iz zone sa indeksom α . Uz sve gore navedene aproksimacije mi konačno dobijamo

$$[N_{\alpha\alpha}(\vec{R}, \omega)]^{(0)}_{\theta \approx 0} = \frac{(2\pi)^3}{(2\hbar)^3 K} |\mathbf{m}_\alpha| |\vec{D}_{\alpha\alpha}|^2 T(\rho) \left\{ q_{\max}^2 - \left[\frac{\kappa + Q(\kappa)}{2} \right]^2 \right\} \quad (7.13)$$

Kao što se vidi, neravnotežni eksitonski okupacioni broj (izračunat po jedinici kvadrata zapremine i jedinici kvadrata vremena) imamo maksimalnu vrednost za $\omega = 0$ i teži nuli kada $\Phi \rightarrow \omega_c^{(\alpha)}(\kappa)$, gde je

$$\omega_c^{(\alpha)}(\kappa) = \frac{\hbar\kappa}{2m_\alpha} (2q_{\max} - \kappa) \quad (7.14)$$

Takodje se vidi da $N_{\alpha\alpha}$ raste dok κ opada.

Iščezavanje veličine $N_{\alpha\alpha}$ za $\omega = \omega_c$ može, uslovno da se shvati kao prelaz iz "stimulisane" u "ne-stimulisanu" fazu, pošto za $\omega > \omega_c$ uticaj spoljašnje stimulacije $\hat{W}(t)$ na eksitonski populacioni broj postaje zanemarljiv i posle toga ovaj okupacioni broj menja se uglavnom zahvaljujući termalnim efektima.

Rezultate analize nelinearne reakcije eksiton-skog sistema možemo rezimirati na sledeći način:

a) Spoljašnja perturbacija dovodi do prostorno-vremenske disperzije u srednjim vrednostima tipa $\langle \hat{P}_x^+ \hat{P}_{xq} \rangle$. Ova spoljašnja perturbacija, osim toga, izaziva disipativne procese u eksitonском систему.

b) Neravnotežni eksitonski okupacioni broj na niskim temperaturama opada sa porastom frekvence i talasnog vektora. Ovaj neravnotežni okupacioni broj postaje ravan nuli na — frekvenci $\omega = \omega_c$ a to znači da za $\omega > \omega_c$ uloga i uticaj spoljašnje stimulacije na populaciju eksitona postaje nebitan. Prema formuli (7.14) ako uzmemos $Q_{max} \sim 10^6 \text{ cm}^{-1}$ i $K \sim 10^5 \text{ cm}^{-1}$ dolazimo do rezultata da je granična frekvencija, posle koje spoljašnja stimulacija postaje nebitna reda veličine $\omega_c \sim 10^{15} \text{ sec}^{-1}$. Kao što vidimo, ova granična frekvencija je za dva reda veličine manja nego frekvencija vidljive svetlosti.

Pored čisto fizičkih aplikacija, dobijeni rezultati mogu da se koriste i van fizike. Poznato je da se poslednjih godina veoma razvila tehnika snimanja i špijunaze infracrvenim zracima. Tako se iz veštačkih satelita infracrvenim snimanjem mogu registrovati objekti koji se nalaze zakopani i do 10 m pod zemljom. Infracrveno snimanje se takodje vrši u noćnim uslovima i za sada tehnika registrovanih pokušaja infracrvenog snimanja kao i njegove ekrанизacije nije dovoljno razvijena. Rezultati do kojih smo ovde došli, pokazuju da

organske materije u infracrvenom regionu trpe čitav niz faznih prelaza iz superradiaktivnog u normalno stanje, i zbog toga je očigledno da bi organske materije mogle da se koriste kao indikatori koji otkrivaju infracrvene zrake. Treba odmah napomenuti da organska materija ne mora obavezno da bude kristal, već može da bude i polikristal (prašak), pa se tako njome mogu prekrivati prično velike površine. Površina prekrivena organskim praškom služila bi kao indikator infracrvenih talasa jer bi unjoj, u prisustvu ovih, dolazilo do oštrog skoka u luminiscenciji organskog materijala. Ako infracrveno zračenje predje napred pominjanu graničnu frekvencu, onda spoljašnja stimulacija naglo opada i organski prašak luminiscira svetlosnu energiju u oštro smanjenim dozama.

Organski materijal ne bi morao da služi samo kao indikator. On bi, takodje, mogao da ekranizuje postojeće infracrveno zračenje, jer u oblasti kada infracrveni zraci prevode molekule organske materije u stanje neravnotežne populacije, ovaj ih veoma intenzivno apsorbuje, pa se na taj način može postići smanjenje upadnog intenziteta i tako sprečiti snimanje objekta.

8. Statistički metod u istražnom postupku

Kao što je već više puta naglašavano, u kriminalistici se mogu sa uspehom primenjivati metodi i eksperimentalne i teorijske fizike. Metodi eksperimentalne fizike su već uveliko stekli svoje "pravo gradjanstva" u kriminalističkim istraživanjima, tako da se danas ni jedna kriminalistička laboratorija ne može zamisliti bez opreme koja se obično nalazi u laboratorijama eksperimentalne fizike. Metod neutronske aktivacione analize, zatim različiti spektroskopski metodi, primena lasera i drugo u velikoj meri povećavaju domet i efikasnost u praćenju tragova, a u nekim slučajevima ostaju kao jedina moguća sredstva otkrivanja tragova i identifikacije.

Metodi teorijske fizike se redje nego eksperimentalni metodi primenjuju u kriminalističkim istraživanjima, mada je očigledno da bi oni mogli da daju dobre rezultate, ukoliko bi se ustanovile pravilne analogije izmedju pojmove kojima operiše kriminalistika i veličina koje se istražuju u različitim oblastima teorijske fizike. Od teorijskih disciplina primenu u kriminalističi našli su, za sada, samo matematički metodi, i to u prvom redu oni iz oblasti matematičke logike, matematičke statistike i kibernetike. Ovde će biti učinjen pokušaj da se metodi statističke fizike infiltriraju u kriminalistička istraživanja. Kao što je već rečeno,

preduslov za primenu metoda teorijske fizike u kriminalistici je dobro zasnovana analogija izmedju veličina i karakterističnih situacija za jednu i drugu oblast. Ovde ćemo pokušati da ustanovimo pomenute analogije za slučaj istražnog postupka i da na osnovu tih analogija formulišemo statističku teoriju istražnog postupka.

Broj potencijalnih počinilaca delikta (broj osumnjičenih) označićemo sa N . Ukupni istražni materijal, koji je dobijen praćenjem tragova, snimanjem na mestu počinjenog delikta, izjavama svedoka, izjava ma osumnjičenih i t.d., označićemo sa \mathcal{D} . Na svako od N osumnjičenih lica dolazi deo D_i istražnog materijala koji ga tereti. Otuda je očigledna relacija

$$\sum_{i=1}^N D_i = \mathcal{D} \quad (8.1)$$

Treba odmah naglasiti da distribucija indicija D_i nije objektivno ispravna, jer ako je jedno lice počinilac (što se u daljem pretpostavlja), onda je indicija koja dolazi na to lice ravna \mathcal{D} , dok su sve ostale indicije D_i ravne nuli. S druge strane, pošto pravu istinu ne znamo, prinudjeni smo da izvršimo distribuciju indicija po potencijalnim počiniocima. Pri tome, ova početna distribucija indicija treba da bude izvršena maksimalno objektivno, jer to može samo da ubrza nalaženje prave istine.

Verovatnoću da je lice i počinilac delikta označićemo sa W_i . Za verovatnoće W_i važi uslov

$$\sum_{i=1}^N W_i = 1 \quad (8.2)$$

što znači da pretpostavljamo da je jedno od N lica sigurno počinilac. Izmedju verovatnoća i indicija postoji neka funkcionalna zavisnost koju ćemo označiti sa

$$D_i = D_i(W_i) ; \quad i \in (1, 2, \dots, N) \quad (8.3)$$

Na kraju, uvešćemo pojam kriminalističke entropije \mathcal{R} , koju preko verovatnoća W_i definišemo na sledeći način:

$$\mathcal{R} = - \sum_{i=1}^N W_i \ln W_i \quad (8.4)$$

Veličina \mathcal{R} uvedena je po analogiji sa informacionom entropijom koja služi kao mera objektivnosti informacije. Pošto je proces merenja u fizici de facto sakupljanje informacija o fizičkom sistemu koji se nalazi u napred zadatim uslovima, statistička entropija se definiše na isti način kao i informaciona entropija i služi kao mera objektivnosti našeg saznanja o sistemu za date uslove u kojima se nalazi. Na bazi statističke entropije definišu se najobjektivnije distribucije fizičkih objekata po energijama za različite ansamble objekata. Uvođenje veličine \mathcal{R} u istražni postupak znači uvođenje mere za objektivnost distribucije indicija pod zadatim uslovima. U našem slučaju uslovi su konstantnost ukupne

indicije, za H lica (formula(8.1)) i pretpostavka da je jedno od lica sigurno počinilac (formula(8.2)). Da bismo bolje razumeli smisao veličine R analiziraćemo dva granična slučaja. Ako je jedno lice sigurno počinilac recimo lice i , onda je $W_i = 1$, a sve ostale verovatnoće su ravne nuli. Tada na osnovu formule (8.4) i činjenice da je $\lim_{x \rightarrow 0} \ln x = 0$ kada $x \rightarrow 0$ dobijamo $R=0$. Ako polazni dokazni materijal podjednako tereti sva lica onda su sve verovatnoće W_i jednake međusobno i jednake $1/H$, pa je $R = \ln H$. Kao što vidimo, nalaženje stvarnog počinioca ekvivalentno je svodjenju kriminalističke entropije na nultu vrednost. S druge strane, najteži slučaj za rešavanje imamo kada su indicije ravnomerno distribuirane, tj. kada sakupljeni dokazni materijal u početnoj fazi tereti podjednako svakog od potencijalnih počinilaca. Očigledno je, prema gore navedenom, da se osnovni problem istražnog postupka svodi na smanjivanje kriminalističke entropije, pri čemu treba biti krajnje oprezan u smislu izbora metoda i same procedure snižavanja.

Potražićemo sada najobjektivniju distribuciju indicija za date uslove (8.1) i (8.2). Zbog relacije (8.3) koja vezuje verovatnoće i indicije, neophodno je zadati početne uslove. Najlogičniji početni uslovi su svakako takvi da je za $D_i=0$ i $W_i=0$, što znači da se lice

na koje dolazi nulta indicija može potpuno isključiti kao mogući počinilac.

Nalaženje najverovatnije distribucije izvršićemo metodom neodredjenih Lagranžeovih množitelja, a to znači da ćemo obrazovati formu:

$$\Phi = \sum_{i=1}^N [\alpha w_i + \beta D_i(w_i) - w_i \ln w_i] \quad (8.5)$$

gde su α i β neodredjeni Lagranžeovi množitelji, i izjednačiti sa nulom varijaciju forme Φ . Ovo je postupak koji je uobičajen u statističkoj fizici i u njoj se potpuno opravdao, jer su distribucije dobijene na ovaj način dovele teoriju i eksperiment u punu saglasnost. Pošto je

$$\delta \Phi = \sum_{i=1}^N \delta w_i (\alpha + \beta \frac{\partial D_i}{\partial w_i} - \ln w_i - 1)$$

posle izjednačavanja $\delta \Phi$ sa nulom i integracije dobijene diferencijalne jednačine dolazimo do rezultata

$$D_i = C + \frac{1}{\beta} (w_i \ln w_i - \alpha w_i); \quad i \in \{1, 2, \dots, N\}$$

gde je C integraciona konstanta. S obzirom na početne uslove, zaključujemo da je $C=0$, pa je najobjektivnija veza između indicija i verovatnoća data sa:

$$D_i = \frac{1}{\beta} w_i (\ln w_i - \alpha) \quad (8.6)$$

Zamenom (8.6) u (8.2) nalazimo

$$-\alpha = \ln \sum_{i=1}^N e^{\beta \frac{D_i}{w_i}} \quad (8.7)$$

dok zamena (8.6) u (8.1) daje

$$\beta D = -R - \alpha \quad (8.8)$$

iz čega zaključujemo da je $\beta < 0$ jer, $\mathcal{R} + \alpha$ pozitivno.

Da bismo definisali veličinu β razmotrićemo slučaj kada je jedno od N lica, recimo lice φ identifikovano kao siguran počinilac. Tada je $W_i = \delta_{i\varphi} = \begin{cases} 1 & i=\varphi \\ 0 & i \neq \varphi \end{cases}$. Indicija korespondirana licu φ postaje ravna sumi indicija D . Kombinujući (8.6) i (8.7) dobijamo:

$$W_i = e^{\beta \frac{D_i}{W_i}} \left[\sum_{k=1}^N e^{\beta \frac{D_k}{W_k}} \right]^{-1}; \beta < 0$$

i posle zamene $W_i = \delta_{i\varphi}$ nalazimo

$$D_\varphi = \frac{1}{\beta} \frac{\delta_{i\varphi}}{1 - \delta_{i\varphi}} \ln \delta_{i\varphi} = \begin{cases} -\frac{1}{\beta} & \text{za } i = \varphi \\ 0 & \text{za } i \neq \varphi \end{cases} \quad (8.9)$$

Pošto je za $i = \varphi$ indicija $D_\varphi = -\frac{1}{\beta}$, a za dati slučaj mora biti $D_\varphi = D$ to sledi:

$$\beta = -\frac{1}{D} \quad (8.10)$$

Ovim su sve karakteristične veličine odredjene i konačan skup obrazaca sa kojima se u datom slučaju operiše je:

$$W_i = e^{-\frac{D_i}{\mathcal{D} W_i}} \left[\sum_{k=1}^N e^{-\frac{D_k}{\mathcal{D} W_k}} \right]^{-1} = e^{1-\mathcal{K}-\frac{D_i}{\mathcal{D} W_i}}$$

$$\mathcal{L} = -\ln \sum_{i=1}^N e^{-\frac{D_i}{\mathcal{D} W_i}}; \mathcal{R} + \alpha = 1 \quad (8.11)$$

Poznavanje verovatnoća W_i daje mogućnost da se odredi srednja vrednost bilo koje veličine koja karakteriše istražni postupak. Svakako je najznačaj-

nije odrediti srednju indiciju Δ , koja se po definiciji daje kao matematičko očekivanje:

$$\Delta = \sum_{i=1}^N D_i W_i = \sum_{i=1}^N D_i e^{1-\mathcal{R}-\frac{D_i}{\mathcal{D} W_i}} \quad (8.12)$$

Zbog implicitno zadate verovatnoće, određivanje ove veličine može se izvršiti samo numeričkim računom.

S druge strane, srednja vrednost odnosa $\frac{D_i}{W_i}$ koju ćemo označiti sa R određuje se veoma prosto:

$$R = \sum_{i=1}^N \frac{D_i}{W_i} W_i = \sum_{i=1}^N D_i = \mathcal{D} \quad (8.13)$$

Ako diferenciramo α po \mathcal{D} dolazimo do sledeće veze:

$$\begin{aligned} \frac{d\alpha}{d\mathcal{D}} &= - \frac{d}{d\mathcal{D}} \ln \sum_{i=1}^N e^{-\frac{D_i}{\mathcal{D} W_i}} = - \frac{1}{\mathcal{D}^2} \cdot \frac{\sum_{i=1}^N \frac{D_i}{W_i} e^{-\frac{D_i}{\mathcal{D} W_i}}}{\sum_{i=1}^N e^{-\frac{D_i}{\mathcal{D} W_i}}} = \\ &= - \frac{1}{\mathcal{D}^2} \sum_{i=1}^N \frac{D_i}{W_i} W_i = - \frac{1}{\mathcal{D}^2} R = - \frac{1}{\mathcal{D}} \end{aligned}$$

i odavde je:

$$\alpha = C - \ln \mathcal{D} ; \mathcal{R} = 1 - C + \ln \mathcal{D}$$

Integracionu konstantu C možemo odrediti na dva načina. Ako sa \mathcal{D}_1 označimo onu ukupnu indiciju za koju je $\mathcal{R}=0$, tj. koja vodi na sigurno utvrdjenog počinjaca, onda je:

$$C = 1 + \ln \mathcal{D}_1 ; \mathcal{R} = \ln \frac{\mathcal{D}}{\mathcal{D}_1} \quad (8.14)$$

Ako je, pak, $\mathcal{D} = \mathcal{D}_N$ ona ukupna indicija ^{koja} dopušta da je svako od N lica počinilac, onda je $\mathcal{R} = \ln N$, pa dolazimo do rezultata:

$$C = 1 + \ln \frac{\mathcal{D}_N}{N} ; \quad \mathcal{R} = \ln \frac{N\mathcal{D}}{\mathcal{D}_N} \quad (8.15)$$

Pošto su entropije date formulama (8.14) i (8.15) jedna te ista entropija izražena na dva različita načina, njihovom izjednačavanjem dolazimo do, na prvi pogled, paradoksalnog zaključka:

$$\mathcal{D}_N = N \mathcal{D}_1$$

Zaključak ipak nije paradoksalan ako uzmemmo u obzir zaključak: nije počinilac predstavlja multu, a ne dopunsku indiciju. Ovim se indicija, kako je ovde definisana, razlikuje od informacije, gde bi iskaz: i - nije počinilac, predstavlja dopunsku informaciju.

Analizu osnovnih karakteristika izložene teorije završićemo proračunom entropije i indicije za slučaj jednakih verovatnoća. Ako je

$$W_i = \frac{1}{N} ; \quad i \in \{1, 2, \dots, N\} \quad (8.17)$$

onda za entropiju dobijamo sledeću vrednost:

$$\mathcal{R} = - \sum_{i=1}^N \frac{1}{N} \ln N^{-1} = \ln N \quad (8.18)$$

Zamenom (8.17) i (8.18) u (8.11) dobijamo indicije za slučaj jednakih verovatnoća:

$$\frac{1}{N} = e^{i - \ln N - \frac{D_i N}{\mathcal{D}}} ; D_i = \frac{\mathcal{D}}{N} ; i \in (1, 2, \dots, N) \quad (8.19)$$

Obrasci koje smo do sada dobili daju samo naj-objektivniju distribuciju indicija pri zadatom broju potencijalnih počinilaca N i zadatoj ukupnoj indiciji za ovih N počinilaca, koju smo označili sa \mathcal{D} . Ukupna indicija je u opštem slučaju funkcija broja osumnjičenih, pa ćemo u daljem ovu činjenicu istaći pišući $\mathcal{D} \equiv \mathcal{D}_N$. Videli smo da je kriminalistička entropija K proporcionalna broju potencijalnih počinilaca. S druge strane, opadanje entropije ka nuli znači sve tačnije utvrđivanje pravog počinioca delikta. Odavde je logično da zaključimo da redukcija ukupnog broja potencijalnih počinilaca N , koja vodi ka smanjenju entropije K predstavlja jedan od metoda za sužavanje "kruga" oko stvarnog počinioca. Ovaj zaključak se prirodno nameće i najprostijim razmišljanjem, pa na prvi pogled, uvodjenje pojmove verovatnoća, entropija, distribucija indicija i t.d. izgleda kao nepotrebno nagomilavanje pojmove koji samo zamagljuju jednu logički prostu situaciju. Ova primedba, razume se, nije na mestu, jer nam prost logički zaključak - da eliminacija broja potencijalnih počinilaca sužava "krug" oko stvarnog počinioca - ne daje ni način kako treba vršiti redukciju ni zakonitosti sušavanja "kruga" oko stvarnog počinioca. Uvedeni pojmovi kao i rezultati do kojih se došlo, daju nam pomenute zakoni-

tosti i omogućuju da se traženje pravog počinioca vrši na najobjektivniji mogući način.

Redukciju broja potencijalnih počinilaca vrši-ćemo uz pretpostavku da je ukupna indicija za $N-v$ preostalih počinilaca konstantna i da se stvarni počinilac nalazi među $N-v$ preostalih počinilaca. To znači:

$$\sum_{i=1}^{N-v} W_{i,N-v} = 1 ; \sum_{i=1}^{N-v} D_{i,N-v} = D_{N-v} ; v = (0, 1, \dots, N-1)$$

$$W_{i,N} = W_i ; D_{i,N} = D_i ; D_N = D \quad (8.20)$$

gde su $D_{i,N-v}$ indicije za preostalih $N-v$ potencijalnih počinilaca, a $W_{i,N-v}$ odgovarajuće verovatnoće.

Na osnovu uslova (8.20) može se zaključiti da je proces redukcije broja potencijalnih počinilaca veoma sličan kvazistatičkom procesu u statističkoj fizici, kada pri dovoljno sporom menjanju nekog od ekstenzivnih parametara (najčešće je to zapremina) sistem prolazi kroz sukcesivan niz ravnotežnih stanja u kojima se uslovi konzervacije definišu na isti način kao i za polazno stanje.

Potražićemo sada verovatnoće $W_{i,N}$. Uvodeći smenu $N-v = j ; j \in (N, N-1, \dots, 1)$ i pretpostavljajući da se W_{ij} može napisati u obliku $W_{ij} = Q_i b_j$, na osnovu (8.20) dobijamo:

$$\sum_{i=1}^j Q_i = C_j ; \sum_{i=1}^{j-1} Q_i = C_{j-1} ; C_j = b_j^{-1} ; j \in (N, N-1, \dots, 1)$$

Oduzimanje ovih dveju jednačina dolazimo do diferenčne jednačine:

$$C_j - C_{j-1} = Q_j \quad (8.21)$$

Da bismo rešili ovu jednačinu uvešćemo operator translacije za jedinicu sa osobinama:

$$\hat{\mathcal{C}}_{-1} f_j = f_{j-1}; (\hat{\mathcal{C}}_{-1})^{-1} = \hat{\mathcal{C}}_1; (\hat{\mathcal{C}}_{-1})^n = \hat{\mathcal{C}}_{-n}; \hat{\mathcal{C}}_{-n} f_j = f_{j-n} \quad (8.22)$$

Tada se jednačina (8.21) može pisati kao:

$$(1 - \hat{\mathcal{C}}_{-1}) C_j = Q_j; C_j = (1 - \hat{\mathcal{C}}_{-1})^{-1} Q_j$$

Razvijajući operator $(1 - \hat{\mathcal{C}}_{-1})^{-1}$ u red, tj.:

$$(1 - \hat{\mathcal{C}}_{-1})^{-1} = \sum_{n=0}^{\infty} (\hat{\mathcal{C}}_{-1})^n = \sum_{n=0}^{\infty} \hat{\mathcal{C}}_{-n}$$

nalazimo da je

$$C_j = \sum_{n=0}^{\infty} \hat{\mathcal{C}}_{-n} Q_j = \sum_{n=0}^{\infty} Q_{j-n}$$

Pošto su W_0, W_{-1} itd. ravne nuli, to moraju biti ravne nuli i funkcije Q_0, Q_{-1} itd, pa je:

$$C_j = \sum_{n=0}^{j-1} Q_{j-n} = \sum_{M=1}^j Q_j$$

$$b_{N-v} = \left(\sum_{M=1}^{N-v} Q_M \right)^{-1}; W_{i, N-v} = Q_i \left(\sum_{M=1}^{N-v} Q_M \right)^{-1}$$

Za $v=0$ iz poslednje relacije dobijamo

$$W_{i, N} = Q_i \left(\sum_{M=1}^N Q_M \right)^{-1}$$

pa pošto je $W_{i,N} = W_i$, to očigledno sledi $Q_i = W_i$.

Prema tome, traženi izraz za redukovane verovatnoće je:

$$W_{i,N-\nu} = W_i \left(\sum_{M=1}^{N-\nu} W_M \right)^{-1} \quad (8.23)$$

Na sličan način dolazimo i do izraza za redukovane indicije. Posle uvodjenja smene $N-\nu=j$ i pretpostavke $D_{ij} = X_i Y_j$ dolazimo do diferencne jednačine

$$Z_j - Z_{j-1} = X_j \quad ; \quad Z_j = \frac{D_j}{Y_j} \quad ; \quad j \in (N, N-1, \dots, 1)$$

Rešavanje ove jednačine dovodi nas do sledećeg izraza za redukovane indicije:

$$D_{i,N-\nu} = D_i D_{N-\nu} \left(\sum_{M=1}^{N-\nu} D_M \right)^{-1} \quad (8.24)$$

Za slučaj jednakih polaznih verovatnoća $W_i = N^{-1}$ i odgovarajućih polaznih indicija $D_i = DN^{-1}$, na osnovu (8.23) i (8.24) dobijamo odgovarajuće redukovane verovatnoće i redukovane indicije:

$$W_{i,N-\nu} = \frac{1}{N-\nu} \quad ; \quad D_{i,N-\nu} = \frac{D_{N-\nu}}{N-\nu} \quad (8.25)$$

U cilju daljeg razvijanja formalizma uvešćemo operator \hat{T} koji smanjuje broj N potencijalnih počinilaca za jedinicu

$$\hat{T} f_N = f_{N-1} \quad (8.26)$$

Ovako uveden operator \hat{T} analogan je anihilacionom operatoru u kvantnomehaničkom formalizmu druge kvantizacije. Primena operatora na verovatnoću $W_{i,N-v}$ daje sledeći rezultat:

$$\hat{T} W_{i,N-v} \simeq \hat{T} \frac{W_i}{\sum_{M=1}^{N-v} W_M} = \frac{W_i}{\sum_{M=1}^{N-v-1} W_M} = \frac{W_{i,N-v}}{1 - W_{N-v,N-v}}$$

Sukcesivnom primenom dobijene formule dolazimo do zaključka da je:

$$\hat{T}^n W_{i,N-v} = W_{i,N-v} \prod_{M=0}^{n-1} (1 - W_{N-v-M, N-v-M})^{-1} \quad (8.27)$$

tj. svojstvene vrednosti operatora \hat{T}^n su date sa:

$$T^n = \prod_{M=0}^{n-1} (1 - W_{N-v-M, N-v-M})^{-1}; \quad v+n \in (1, 2, \dots, N-1) \quad (8.28)$$

Koristeći dobijene rezultate lako dolazimo do zaključka da je

$$\hat{T}^n W_i = W_i \left(1 - \sum_{M=0}^{n-1} W_{N-M}\right)^{-1}; \quad n \in (1, 2, \dots, N-1) \quad (8.29)$$

a pošto operator \hat{T} komutira sa operacijom logaritmovanja, može se izvesti i sledeća formula:

$$\hat{T}^n \mathcal{H} = \hat{T}^n \left(-\sum_{i=1}^N W_i \ln W_i\right) = -\sum_{i=1}^N \hat{T}^n W_i \ln (\hat{T}^n W_i) =$$

$$= [\mathcal{K}_N + \ln \left(1 - \sum_{M=0}^{n-1} W_{N-M} \right)] \left[1 - \sum_{M=0}^{n-1} W_{N-M} \right]^{-1} \quad (8.30)$$

U slučaju jednakih polaznih verovatnoća $W_i = N^{-1}$ formule (8.29) i (8.30) prelaze u:

$$\hat{T}^n W_i = \frac{1}{N-n}; \quad \hat{T}^n \mathcal{K} = \frac{\ln(N-n)}{1 - \frac{n}{N}} \quad (8.31)$$

Operator \hat{T} može se primenjivati i na polazne i na redukovane indicije. Rezultat primene na polaznu indiciju D_i je:

$$\hat{T}^n D_i = \frac{D_i \mathcal{D}_{N-n}}{\sum_{M=1}^{N-n} D_M} \quad (8.32)$$

i dobijeni rezultat za slučaj jednakih verovatnoća, kada je $D_i = \frac{\mathcal{D}_N}{N}$, prelazi u:

$$\hat{T}^n D_i = \frac{\mathcal{D}_{N-n}}{N-n} \quad (8.33)$$

Uvodjenje anihilacionog operatora \hat{T} koji vrši redukciju jednog od potencijalnih počinilaca i n -te potencije ovoga operatora nije slučajno. Očigledno je da se proces redukcije počinilaca može najlakše analitički izraziti pomoću ovih operatora, pri čemu njihova primena daje mogućnost da se procesom redukcije diriguje na pregledan način. Ovo se postiže uvedenjem redukcionog operatora \hat{P} koji se u najopštijem slučaju može napisati kao

$$\hat{P} = \sum_{n=1}^{N-1} g_n \hat{T}^n \quad (8.34)$$

gde su g_n ; $n \in \{1, 2, \dots, N-1\}$ neodredjeni koeficijenti. Proces redukcije se vrši tako što se redukcioni operator primeni na polaznu entropiju \mathcal{R}_N i koeficijentni g_N zatim određe tako da redukovana entropija bude ravna nuli, ili bar minimalna. Na taj način, kao što je ranije pomenuto, sužava se "krug" oko stvarnog počinioca.

Sa ciljem da ilustrujemo gore navedeno, analiziraćemo slučaj sa četiri potencijalna počinioca sa jednakim polaznim verovatnoćama. Redukcioni operator za ovaj slučaj odabraćemo u obliku:

$$\hat{P}_4 = \sum_{n=1}^2 g_n \hat{T}^n \quad (8.35)$$

Operator \hat{P}_4 primenimo na \mathcal{R}_4 , $W_{i,4}$ i $D_{i,4}$. Pošto se radi o jednakim polaznim verovatnoćama, rezultati primena su sledeći:

$$\begin{aligned} \hat{P}_4 \mathcal{R}_4 &= \sum_{n=1}^2 g_n \frac{\ln(4-n)}{1 - \frac{n}{4}} ; \quad \hat{P}_4 W_{i,4} = \sum_{n=1}^2 g_n \frac{1}{N-n} \\ \hat{P}_4 D_{i,4} &= \sum_{n=1}^2 g_n \frac{\mathcal{D}_{N-n}}{N-n} \end{aligned} \quad (8.36)$$

Iz zahteva da $\hat{P}_4 \mathcal{R}_4$ bude ravno nuli i $\hat{P}_4 D_{i,4}$ bude ravno jedinici, dobijamo $g_1 = (\ln \frac{3}{2})^{-1} \ln 8$ i $g_2 = (\ln \frac{3}{2})^{-1} \ln 9$ tako da proces redukcije koji najefikasnije vodi ka stvarnom počiniocu treba opisati redukcionim operatom oblika:

$$\hat{P}_4 = \frac{1}{\ln \frac{3}{2}} (\hat{T}^2 \ln 9 - \hat{T} \ln 8) \quad (8.37)$$

Zahtevajući da redukovana indicija $\hat{P}_4 Di,4$ bude ravna polaznoj sumarnoj indiciji dolazimo do zaključka da nas operator \hat{P}_4 dovodi do stvarnog krivca ako su sumarne indicije povezane realcijom:

$$\mathcal{D}_2 = \frac{\mathcal{D}_4 \ln \frac{3}{2} + \mathcal{D}_3 \ln 2}{\ln 3} \quad (8.38)$$

Ovaj poslednji uslov je neophodan, jer se veličine \mathcal{D}_{H-V} određuju "eksperimentalno", tj. moramo ih unapred zadavati u skladu sa tim kako se najrealnije redukuje polazni istražni materijal, ako sumnje na jedno, dva ili više lica odbacujemo.

Treba naglasiti da je procedura redukcije, ovako kako je ovde izvedena, neposredno primenljiva samo u slučaju jednakih polaznih verovatnoća. Pošto sama procedura ne vodi računa o "individualnosti" (važan je samo broj redukovanih počinilaca, a ne koji su od njih individualno redukovani) očigledno je da je u ovoj formi ne možemo primenjivati, ako polazne verovatnoće nisu ravnomerno distribuirane.

Ovde ćemo uopštiti izloženu proceduru u tom smislu što ćemo uvesti u račun i činjenicu da nije svejedno kojih se \checkmark lica redukuje sa liste potencijalnih počinilaca.

Da bismo teoriju generalisali u pomenutom smislu, zgodno je da se polazni broj mogućih počinilaca predstavi na sledeći način:

$$N = \sum_{S=1}^N n(S) \quad (8.39)$$

gde je

$$n(S) = 1 ; S \in (1, 2, \dots, N) \quad (8.40)$$

Polazne verovatnoće i indicije mogu se predstaviti kao i ranije, tj.:

$$W_{i,N} = W_i ; D_{i,N} = D_i ; \mathcal{D}_N = \mathcal{D} \quad (8.41)$$

Redukcija samo jedne ličnosti dovodi do N verovatnoća i N indicija, tipa:

$$W_{i,N-n}(S_1) ; D_{i,N-n}(S_1) ; S_1 \in (1, 2, \dots, N) \quad (8.42)$$

Redukcija dve ličnosti daje $\binom{N}{2}$ verovatnoća i indicija tipa:

$$W_{i,N-n}(S_1)-n(S_2) ; D_{i,N-n}(S_1)-n(S_2) ; (S_1, S_2) \in (1, 2, \dots, N)$$

Redukcija v ličnosti daje $\binom{N}{v}$ verovatnoća i indicija tipa: $S_1 \neq S_2 \dots \neq S_v$ (8.43)

$$D_{i,N-n}(S_1)-n(S_2)-\dots-n(S_v)$$

$$W_{i,N-n}(S_1)-n(S_2)-\dots-n(S_v) ; (S_1, S_2, \dots, S_v) \in (1, 2, \dots, N); S_1 \neq S_2 \neq \dots \neq S_v$$

Ukupan broj verovatnoća i indicija pri redukciji broja potencijalnih počinilaca na jedinicu ravna je sumi binomnih koeficijenata za N -ti stepen binoma umanjenog za dva, tj.:

$$2^N - 2 \quad (8.45)$$

Pošto su svi $n(s)$ jednaki jedinicama, to je:

$$n(s_1) + n(s_2) + \dots + n(s_v) = v \quad (8.46)$$

za bilo koju od $\binom{N}{v}$ kombinacija indeksa, redukovane verovatnoće i indicije nalaze po formulama koje su potpuno analogne formulama (8.23) odnosno (8.24).

Znači:

$$W_{i,N-n(s_1)-n(s_2)-\dots-n(s_v)} =$$

$$= W_i \left[\sum_{M=1}^{N-n(s_1)-\dots-n(s_v)} W_M \right]^{-1}; D_{i,N-n(s_1)-\dots-n(s_v)} = \frac{D_i D_{N-n(s_1)-\dots-n(s_v)}}{\sum_{M=1}^{N-n(s_1)-\dots-n(s_v)} D_M}$$

Po analogiji sa anihilacionim operatorom
ovde se može uvesti N operatora $\hat{T}_{n(s)}$ sa osobinom:

$$\hat{T}_{n(s)} f_N = f_{N-n(s)} \quad (8.47)$$

Uместо M -tog stepena operatora \hat{T} ovde se uvodi $\binom{N}{m}$ operatora tipa $\hat{T}_{n(s_1)+n(s_2)+\dots+n(s_m)}$ sa osobinom:

$$\hat{T}_{n(s_1)+n(s_2)+\dots+n(s_m)} f_N = f_{N-n(s_1)-n(s_2)-\dots-n(s_m)} \quad (8.48)$$

Dejstvo operatora $\hat{T}_{n(s)}$ i $\hat{T}_{n(s_1)+\dots+n(s_m)}$ na indicije i verovatnoće može se naći prostom analogijom sa prethodnim rezultatima.

Redukcionu proceduru treba opisivati formama u koje su uključeni operatori

$$\hat{T}_{n(s_1)}, \hat{T}_{n(s_2)+n(s_2)}, \dots, \hat{T}_{n(s_1)+n(s_2)+\dots+n(s_m)},$$

$$\dots, T_n(s_1) + n(s_2) + \dots + n(s_{n-1}) \quad (8.49)$$

a koeficijente tih formi treba odredjivati iz zahteva da entropija redukovana ovakvim operatorom ima nullu, ili bar minimalnu vrednost. Ovakav način sužavanja "kruga" oko stvarnog počinioca je teži i zametniji nego u slučaju kada ne vodimo računa o individualnosti redukovanih počinilaca, ali je zato objektivniji baš zato što vodi računa o individualnosti.

Ovde smo pokušali da metode statističke fizike primenimo u procesu istražnog postupka. Sve do čega se došlo, svakako treba shvatiti kao pokušaj, a ne kao definitivnu i zaokrugljenu teoriju. Od pojmove koji su korišćeni, pojam kriminalističke entropije nesumnjivo treba koristiti i u ovoj, i u bilo kakvoj drugoj varijanti primene statistike u kriminalistici. Pojam dokaznog materijala i indicija nije, na žalost, potpuno jasno i često uklopljen u izloženu teoriju, i to u prvom redu zbog toga što nije razjašnjeno u kakvim bi se jedinicama on mogao "meriti". Ovo i nije postavljeno kao zadatak u iznesenim analizama, ali to je pitanje koje se posebnim analizama mora istražiti, jer samo tako bi moglo da se dodje do strogo zasnovane, neprotivrečne i "merljive", odnosno u praksi primenljive teorije.

Treba istaći da je teorija, ovako kako je zasnovana, dobijena za slučaj konzervacije ukupne

indicije. Ovo, razume se, nije i jedini mogući način zasnivanja teorije. Bliže idejama statističke fizike, bilo bi zasnivanje teorije uz zahtev da se održava srednja indicija $\bar{\Delta}$ (formula(8.12)). Tada bi se dobila distribucija W_i koja bi bila potpuno analogna distribuciji kanoničkog ansambla u statističkoj fizici. Ovde smo se, ipak, odlučili za iznesenu varijantu teorije, jer u ovoj drugoj, uslov $W_i = S_{ij}^g$, koji daje stvarnog počinioца, ne bi mogao da bude zadovoljen egzaktно, već samo u nekoj aproksimaciji. Mišljenja smo da bi ipak trebalo detaljno razraditi i ovu varijantu, što s obzirom na rezultate koji su ovde izneseni, ne bi predstavljalo nikakav problem. U izloženoj varijanti takodje nije razmatrana mogućnost jednakе indicije koja dolazi na grupu lica. Takav slučaj očigledno je obuhvaćen procedurom generalisane redukcije, ali u okvirima zahteva očuvanja ukupne indicije. Mogla bi se, međutim, zasnivati i teorija koja bi zahtevala da $\sum_i N_i D_i$ bude očuvano.

Na kraju, pošto je u razmatranom problemu N relativno mali broj, analogije između statistike i kriminalistike prestaju na onom mestu, gde počinju da deluju zakoni velikih brojeva. Oni rezultati statističke fizike, koji su rezultat zakonitosti u skupu

velikih brojeva, ovde se ne mogu primeniti, tako da se, bar za sada, ne može formulisati nešto što bismo uslovno nazvali termodinamika istražnog postupka.

Z A K L J U Č A K

U disertaciji je učinjen pokušaj da se povezivanje fizičkih metoda sa kriminalistikom i mješim problemima izvrši na jednom širem frontu no što je to do sada bio slučaj. Zbog sve veće potrebe za korišćenjem majsavremenijih dostignuća nauke koja se oseća u kriminalistici, čini nam se da je došlo vreme da se povezivaju fizike i kriminalistike pristup na jedan sistematskiji način no što je to do sada činjeno. Zbog toga smo ovde pokušali da u kriminalistička istraživanja infiltriramo metode i eksperimentalne i teorijske fizike sa namjerom da mogućnosti primene fizike u kriminalistici osvetlimo iz više uglova i da promađemo optimalan način korelisanja ove dve oblasti. Nije naše da ocenjujemo koliko se u ovim nastojanjima uspeло, ali nam se čini da će ovde uloženi naporи sebe potpuno opravdati, ukoliko inspirišu istraživače da e povezivanju fizike i kriminalistike razmišljaju na jedan kompleksniji, širi i raznovrsmiji način. Samo tako, a nikako sporadičnim pokušajima i analizama na uskom planu, može se postići pun uspeh i maksimalna efikasnost u saradnji.

Rezultati disertacije mogu se rezimirati na sledeći način:

a/ Metodom neutronskog aktivacione analize je ispitivano da li se na osnovu sadržaja mikroelemenata u vlasti kose može identifikovati ličnost. Ova istraživanja su veoma složena i komačan odgovor zahteva još mnogo rada i naporu, ali nam se čini da rezultati do kojih smo došli pružaju nadu da je moguće izvršiti "individualizaciju" ljudske vlasti, što bi opet predstavljalo jedno novo i moćno oruđe u procesu otkrivanja tragova i identifikacije. Konkretnije, pronađeni su optimalni uslovi pod kojima treba analizirati sastav i sadržaj elemenata u vlasti kose. Ovo se odnosi i na izbor neutronskog fluksa i na izbor vremena ozračavanja i na način odstranjuvanja spoljašnjih kontaminanata iz vlasti. Takođe su izvršena ispitivanja kategorizacije mikroelemenata u biloški značajne, verovatno biloški značajne i kontaminantne. U tom cilju merene su koncentracije cinka, brom-a i aluminiijuma u četiri vlasti za koje se znalo da su uzete od četiri različite osobe i rezultati su testirani metodom umakrsnog ispitivanja po "Student"-ovoj distribuciji. Testiranje cinka dalo je odgovor da su vlasti uzete od četiri različite osobe. Isti odgovor je dalo testiranje brom-a, dok su rezultati testiranja alumini-

juma davali različite odgovore, tj. po ovim rezultatima neke od vlasništva pripadale su istoj osobi, a neke različitim. Ova ispitivanja predstavljaju potvrdu opšteg mišljenja da je cink zaista biološki značajni element i da je aluminijski zaista kontaminant koji se pranjem može odstraniti iz kose. Što se tiče brom-a, on se za sada razvrstava u kategoriju elemenata koji su "verovatno biološki značajni". Rezultati naših ispitivanja ukazuju na to da se on može svrstati u kategoriju biološki značajnih elemenata.

b/ Metodom Grimovih funkcija analizirano je ponašanje organskih materija (molekularnih kristala) u uslovima spoljašnje stimulacije elektromagnetskim zračenjem. Pokazano je da u oblasti frekvenci koje su za dva reda veličine niže od frekvencije vidljive svetlosti u molekularnim kristalima nastupa fazni prelaz. Na osnovu ove činjenice analizirana je mogućnost primene organskih kristala kao detektora i ekrana u borbi protiv špijunaže infracrvenim zracima. Takođe su ispitivani fenomeni elektronske magnetne rezonance u polju L - S sila, koja bi mogla da nastupi kod elemenata prve grupe periodnog sistema. I ovde je otkrivena mogućnost faznog prelaza na niskim temperaturama, pa se na osnovu toga analizira mogućnost da se hlađenje ma-

terijala u periodičnom magnetnom polju koristi kao način detekcije alkalnih primesa. Ovaj metod bi bio veoma osetljiv, jer bi prisustvo čak i samo jednog atoma alkalnih metala moglo biti registrovano.

c/ Napravljen je pokušaj da se metodi statističke fizike i teorije informacija uključe u proceduru istražnog postupka i da se na osnovu ovoga formulišu neke zakonitosti same procedure. Uveden je pojam kriminalističke entropije čije smanjivanje treba da predstavlja sužavanje kruga indicija oko stvarnog počinioca. Takođe je ukazano na način i objektivne kriterijume po kojima bi se vršila redukcija potencijalnih počinilaca. Ova istraživanja se svakako ne mogu oceniti kao komična i zaokrugljena, ali smo mišljamje da je trebalo učiniti izvestan napor u pravcu ovakvog načina primene metoda statistike u kriminalistici, jer on, pri dobroj definisanju i određivanju "količine indicija" može i da ubrza i da objektivizira proceduru istražnog postupka.

Završavajući ovaj kratki pregled rezultata disertacije, ostaje nam da se nadamo da će oni predstavljati izvestan doprinos opštim maporima da se

sredstva i metodi savremene nauke što potpuniće uključe u borbu protiv kriminala i na taj način doprimesu iskorenjivanju ovog društvenog zla.

L I T T E R A T U R A
=====

1. P.A. Кузнецов: "Активационный анализ", АТОМИЗДАТ, Москва 1974.
2. W. Bothe, H. Becker: Z. Phys. 66, 289 (1930)
3. I. Curie, F. Joliot: Compt. Rend. Acad. Sci. 194, 273 (1932).
4. J. Chadwick: Nature 129, 312 (1932).
5. J. Chadwick: Proc. Roy. Soc. A142, 1 (1933).
6. Э. В. Шпольский : "Атомная физика" ГОСТЕХИЗДАТ, Москва, 1951.
7. E. Segre: "Experimental Nuclear Physics" N. York-London 1953.
8. D.J. Huges: "Pile Neutron Research", Combrigde, Mass. 1953.
9. H.A. Бласов: "Нейтроны", ГОСТЕХИЗДАТ, , Москва, 1955.
10. G. Breit, E.P. Wigner: Phus. Rev. 49, 519 (1936).
11. M. Haissinsky: "La Chimie Nucleaire et ses Applications", Masson et Cie, Paris, 1957.
12. A.U. Бродский: : Химия изотонов" Узг. АНССР, Москва, 1957.
13. B. Feld: "Experimental Nuclear Physics" 2, 209, Segre Ed., New York, 1953.
14. H. Clark, R. Overman: MDDC, 1329 (1949)
15. B. Ketelle, G. Boyd: JACS 69 2800 (1947).

16. P. Albert, M. Caron, G. Chaudron: *C.R.* 233, 1108 (1951)
17. E. Goldbery, H. Brown: *Journ. Rad. Chem.* 22, 308 (1950)
18. G. Boyd: *AECD* 2507 (1949)
19. R.E. Jervis: *SM-91/67 (Symposium on Nuklear Aktivierung
Techniques in the Life Sciences, Amsterdam 1967)*
20. Центральная Воронежская НИКП: "Экспертная практика и новые
методы исследований",
вып. 7, Москва 1973.
21. G. Barra, A. Brandone, G. De Bermardi, A. Farnari,
E. Orvini, M.A. Rollier:
Journ. Rad. Chem. 15, 51 (1973).
22. W.B. Renfro, W.A. Jester: *Journ. Rad. Chem.* 15, 79 (1973)
23. D.E. Bryan, V.P. Guin, D.M. Settle: *SM-91/67*.
24. S. Gangadharan, V.V. Lakshmi, M. Sankar Das:
*FAACONF 72;3/3. (Second International
Conference of Forensic Aktivierung
Analysis, Glasgow, 1972)*.
25. G.C. Vergtese, R. Kishore, V.P. Guinn: *FAACONF 72; 3/4*.
26. J.R. Vogt, D.M. Hashii: *FAACONF 72; 3/6*.
27. H. Al - Shahristani, I.K. Al Haddad: *FAACONF 72; 3/7*
28. A. Wyttensbach, S. Bajv, E. Hug: *FAACONF 72; 5/2*.
29. L.C. Bate: *FAACONF 72; 1/1*.
30. D.J.R. Evans, P. Kennedy, A.K. Bergh: *FAACONF 72;1/3*.
31. M.J. Cotter, R. Meyers, L. van Zelst, E.V. Saure:
Journ. Rad. Chem. 15, 317 (1973).
32. K. Rötzscher, S. Mende, J. Flachowsky, M. Geisler,
H.J. Wehran: *Journ. Rad. Chem.* 15, 317 (1973).
33. F.W. Lima, C.M. Silva, R. Guimares Jr., *FAACONF 72;5/1*.

34. A. van Dalen, H.A. Das, J. Zonderhuis; FAACONF 72; 2/1.
35. K. Lebsher: Journ. Rad. Chem. 15, 41 (1973).
36. Student (i.e. W.S. Gossett): Biometrika 1, 6 (1908).
37. M.J. Moroney: "Facts from Figures" repr. PENGUIN BOOKS, 1968, str. 218.
38. M. De Bruin, P.J.M. Korthoven, R. P.W. Duin, F. C.A. Groen, C.C. Bakels: Journ. Rad. Chem. 15, 181 (1873).
39. R. Dybczynski, K. Boboli.: Jounrn. Rad. Chem. 31, 267 (1976).
40. D.H. Зубарев: "Неравновесная статистическая термодинамика", HAYKA, Moscow, 1971.
41. E.T. Jaynes: Phys. rev. 106, 620 (1957).
42. E.T. Jaynes: Phys. Rev. 108, 171 (1957).
43. E.T. Jaynes: "Information Theory and Statistical Mechanics" Kol. Works: "Statistikal Physics", Brandies Lectures 3, 160 (1963).
44. К. Шенон: "Работы по теории информации и кибернетике" ИЛ 1963, Moscow.
45. А.Я. Хингин: УМН 8, 3 (1953).
46. P.A.M. Dirac: "The Principles of Quantum Mechanics" CLARENDON PRESS, Oxford, 1958.
47. U. фон Нейман: "Математические основы квантовой механики" ИЛ, Moscow, 1964.
48. J. Von Neuman: Göttingen Nachr. 3, 273 (1927).
49. L. Landau. Z. Phys. 45, 430 (1927).
50. T.-Matsubara: Progr. Theor. Phys. 14, 351 (1955).
51. D.H. Зубарев: "Двухвременные функции Грина в статистической физике" "УНН" 71, 71 (1960).
52. А.И. Алексеев: "Применение методов квантовой теории поля в статистической физике" "УФН" 73, 41 (1961).
53. В.Л. Бонч-Бруевич, С.В. Тябликов: "Метод функций Грина в статистической механике", ФИЗМАТГИЗ, Moscow, 1961.

54. A.A. Абрекосов, Л.П. Торъков, И.Е. Дзялошинский: "Методы квантовой теории поля в статистической физике" ФИЗМАТГИЗ, Москва, 1962.
55. Н.Н. Богоявленов, С.В. Падликов: ДАН СССР 126, 53 (1959).
56. Н.Н. Богоявленов, С.В. Падликов: "Квазисредние в задачах статистической физики" ОНДИ, Д-781, Дубна 1961.
57. M. Bolsterli: Phys. Rev. Letts. 4, 82 (1960).
58. D. ter Haar, W.E. Parry: Phys. Letts. 1, 145 (1962).
59. E.R. Pike: "Progr. Phys. Soc." 84, 83 (1964).
60. Е.Г. Петров: "Теория магнитных экситонов", НАУКОВАЯ ДУМКА, Киев, 1976.
61. N.N. Bogoliubov: "Lectures on Quantum Statistics" Macdonald Tech. and. Scientific, London, 1967.
62. L.I. Schiff: "Quantum Mechanics" Mc. Graw-Hill Book Comp. New York - London - Toronto 1955.
63. D.I. Lalović, B.S. Tošić, R.B. Žakula: Phys. Rev 178, 1472 (1969).
64. R. Djordjević, B.S. Tošić; Progr. Theor. Phys. 54, 1299 (1975).
65. M.M. Marinković: Phys. Stat. Sol. (b) 69, 291 (1975).
66. В.М. Агранович: ЖЭТФ 37, 430 (1959).
67. С.В. Падликов: "Методы квантовой теории магнетизма" НАУКА, Москва, 1975.

ISPRAVKE VAŽNIJIH UOČENIH GREŠAKA

Strana	Red	Stoji	Treba da stoji
28	2	tehnecijuma	tulijuma
54	18	So	S
56	16	Va	V
61	3	Va	V
67	4	Bo	B
89	23	aluminijum	antimon
93	3	varijanta	varijanca
95	18	aluminijuma	antimona
95	22	aluminijum	antimon
95	6	aluminijumski	antimonski
192	20	aluminijuma	antimona
192	26	aluminijuma	antimona
193	5	aluminijum	antimon
123	7	za ... on	za t t_o on
126	10	stoje levo od	stoje desno od
136	8	tu	tu
137	5	po	po t
138	11	po	po t
142	13	vidi ref	vidi ref ⁶²⁾
142	17	sa ...	sa n _o
144	8	transformacije...	transformacije (6.8)
145	11	vidi ref.....	vidi ref ⁶³⁾
152	9	vidi ref. ...	vidi ref ⁴⁰⁾
153	9	kombinujući formule	kombinujući formule (6.48), (6.41), (6.42) i (6.45)
166	8	$\Sigma (\mathcal{I}_\infty)$	$\Sigma (\mathcal{Y}_L)$

Strana	Red	Stoji	Treba da stoji
166	9	$I_{\infty} = k' (E_i - E_0)$	$I_d = k' (E_i - E_0)$
177	9 nije	i - nije
187	2	za bilo	pa se za bilo
192	20	aluminijuma	antimona
192	26	aluminijuma	antimona
193	5	aluminijum	antimon
197	15	Sekond International	Second International
197	16	Aktivation	Activation
198	14	Kol	Col
198	15	Statistikol	Statistical
198	27	YH	YH
199	7	Dybna	Dybna
199	8	Letls	Letts
199	9	Letls	Letts

NAPOMENA:

Broj reda se računa uvek odozgo i računaju se samo redovi kucanog teksta (redovi sa formulama se ne broje).