

УНИВЕРЗИТЕТ У БЕОГРАДУ

ФИЗИЧКИ ФАКУЛТЕТ

Мирјана М. Војновић

**КОЕФИЦИЈЕНТИ БРЗИНЕ
ПОБУЂИВАЊА И ЈОНИЗАЦИЈЕ
МОЛЕКУЛА СО И N₂ ЕЛЕКТРОНИМА
У ПРИСУСТВУ ЕЛЕКТРИЧНИХ И
МАГНЕТНИХ ПОЉА**

докторска дисертација

Београд, 2016.

UNIVERSITY OF BELGRADE

FACULTY OF PHYSICS

Mirjana M. Vojnović

**RATE COEFFICIENTS FOR ELECTRON
IMPACT EXCITATION AND IONIZATION
OF CO AND N₂ MOLECULES IN THE
PRESENCE OF ELECTRIC AND
MAGNETIC FIELDS**

Doctoral Dissertation

Belgrade, 2016.

Ментор:

др Горан Попарић, ванредни професор, Физички факултет, Универзитет у Београду

Чланови комисије:

др Горан Попарић, ванредни професор, Физички факултет, Универзитет у Београду

др Драгољуб Белић, редовни професор, Физички факултет, Универзитет у Београду

Академик др Зоран Петровић, научни саветник, Институт за физику, Универзитет у Београду

Датум одбране:

Ова докторска дисертација је урађена у Лабораторији за физику атомских сударних процеса Физичког факултета Универзитета у Београду. Овом приликом захваљујем ментору проф. др Горану Попарићу на пруженој помоћи у току израде тезе, уложеном труду и пренетом знању. Проф. др Драгољубу Белићу захваљујем на подршци, корисним саветима и сугестијама. Колеги др Мирославу Ристићу сам захвална на несебичној помоћи и непрестаном подстреку. Такође дугујем захвалност својој породици и пријатељима на пруженој подршци.

Београд, 20.01. 2016.

КОЕФИЦИЈЕНТИ БРЗИНЕ ПОБУЂИВАЊА И ЈОНИЗАЦИЈЕ МОЛЕКУЛА СО И N₂ ЕЛЕКТРОНИМА У ПРИСУСТВУ ЕЛЕКТРИЧНИХ И МАГНЕТНИХ ПОЉА

Резиме:

У овој докторској дисертацији проучавани су коефицијенти брзине побуђивања и јонизације молекула гаса СО и N₂ електронима. Разматрани су наведени поцеси на ниском притиску, у равнотежним и неравнотежним условима. Под неравнотежним условима у овом раду подразумева се примена спољашњих хомогених електричних и магнетних поља услед чега функција расподеле електрона по енергијама одступа од Максвел-Болцманове. Метода примењена за добијање неравнотежних функција расподеле је Монте Карло симулација кретања електрона кроз гас, развијена за случај када се електрони крећу под утицајем електричних и магнетних поља. Циљ истраживања је систематска анализа парцијалних и тоталних коефицијената брзине јонизације и побуђивања ротационих, вибрационих и електронских стања (синглетних и триплетних). Вршена је анализа у широком интервалу вредности редукованих електричних и магнетних поља и упоредна анализа тоталних равнотежних и неравнотежних коефицијената брзине побуђивања и јонизације у зависности од средње енергије електрона за молекуле СО и N₂. Интересано за ову студију је и поређење резултата добијених за ова два изоелектронска, по структури веома слична молекула.

Анализа зависности тоталних коефицијената брзине реакције од средње енергије електрона показала је да на нижим вредностима средње енергије (које углавном одговарају експерименталним условима) доминирају процеси вибрационог и ротационог побуђивања. Разлог за то су ниже вредности прагова и максимума ефективних пресека за ове процесе у односу на процесе електронског побуђивања и јонизације. Утврђено је да се резонантно вибрационо побуђивање слично манифестује у понашању одговарајућих коефицијената брзине побуђивања код оба молекула. Механизам резонантног побуђивања одговоран је за мање вредности тоталних неравнотежних од Максвелових коефицијената

вибрационог и ротационог побуђивања у области нижих и средњих енергија електрона.

Добијени резултати јасно указују на ефекат успоравања електрона под утицајем магнетног поља, који се углавном огледа у опадању коефицијената брзине побуђивања и јонизације са повећањем редукованог магнетног поља. Прорачун коефицијената брзине побуђивања и јонизације показао је правилну периодичну зависност од угла између правца електричног и магнетног поља. Из ове зависности добијена је аналитичка (семиемпиријска) формула која омогућава одређивање коефицијената брзине реакције за произвољну вредност угла између поља на основу резултата за случај одсуства магнетног поља, као и за ортогоналну конфигурацију поља, приказаних у овој дисертацији.

Макроскопске физичке величине које карактеришу транспорт електрона у гасовима добијају се симулацијом на основу база података, са углавном експериментално измереним ефективним пресецима. У циљу мерења ефективних пресека за јонизацију молекула у Лабораторији за физику атомских сударних процеса Физичког факултета развијен је нови експериментални уређај састављен од електронског спектрометра и масеног спектрометра (из времена прелета, ТОФ) за настале јоне. Овај уређај приказан је у 6. глави тезе, где су дати и први прелиминарни резултати добијени за јонизацију N_2 молекула електронима. На овај начин биће употпуњене базе података пресецима за јонизацију, за разне молекуле. То ће омогућити примену добијених резултата у моделовању неравнотежних лабораторијских и астрофизичких плазми у чијем саставу се налазе дати молекули.

Кључне речи: Азот, угљен-моноксид, побуђивање електронима, коефицијенти брзине побуђивања и јонизације, равнотежни услови, неравнотежни услови, функција расподеле електрона по енергијама, транспортни параметри, средња енергија електрона

Научна област: Физика

Ужа научна област: Атомска и молекулска физика. Физика атомских сударних процеса.

УДК број: 537.1; 621.039 (043.3)

RATE COEFFICIENTS FOR EXCITATION AND IONIZATION OF CO И N₂ MOLECULES BY ELECTRON-IMPACT IN THE PRESENCE OF ELECTRIC AND MAGNETIC FIELDS

Abstract:

In the present thesis rate coefficients for electron impact excitation and ionization of CO and N₂ gas molecules by electron-impact have been studied. The given processes have been considered at low pressure, in equilibrium and non-equilibrium conditions. In this thesis the non-equilibrium conditions imply the application of external homogeneous electric and magnetic fields due to which the electron energy distribution function deviates from Maxwellian shape. The method applied for obtaining non-equilibrium distribution functions is Monte Carlo simulation of electron movement through gas, developed for the case when electrons move under the influence of electric and magnetic fields. The goal of the research is systematic analysis of partial and total rate coefficients for ionization and excitation of rotational, vibrational and electronic states (singlet and triplet). The analysis has been made in a wide range of reduced electric and magnetic field values and a comparative analysis of total equilibrium and non-equilibrium excitation and ionization rate coefficient dependence on mean electron energies for CO and N₂ molecules. Interesting subject of this study is also the comparison of the results for these two isoelectronic, in structure very similar molecules.

The analysis of the total rate coefficient dependence on mean electron energy has shown that vibrational and rotational excitation processes dominate at low values of mean energy (that mainly correspond to the experimental conditions). This is caused by low values of the threshold and the maxima of the effective cross sections for these processes in regard to the processes of electronic excitation and ionization. It was found that resonant vibrational excitation manifests itself in a similar way in the behavior of the corresponding rate coefficients for both molecules. The mechanism of the resonant excitation is responsible for lower values of total non-equilibrium rates than corresponding Maxwellian rates for vibrational and rotational excitation in the range of low and intermediate mean electron energy.

The obtained results clearly indicate the effect of deceleration of electrons by the influence of the magnetic field that is mostly reflected in the excitation and ionization rate coefficient's decrease with increasing reduced magnetic field. The calculation of the excitation and ionization rate coefficient showed the proper periodical dependence on the angle between the directions of electric and magnetic fields. From this dependence the analytical (semi-empirical) formula was obtained that enables determining rate coefficients for arbitrary value of the angle between the fields on the basis of the results for the case when no magnetic field is applied and for orthogonal configuration of the fields, presented in the thesis.

Macroscopic physical quantities that characterize the electron transport in gases are obtained by the simulation on the basis of the datasets, containing mostly experimentally measured effective cross sections. In order to measure effective cross sections for ionization of molecules a new system consisting of electron spectrometer and mass spectrometer (with the time-of-flight technique) for ions was developed in the Laboratory for Atomic Collision Processes at the Faculty of Physics. This device is shown in the 6th Chapter of the theses, where the first preliminary results for the ionization of the N₂ molecule by electrons are also given. In this manner the datasets will be complemented with cross sections for ionization, for various molecules. This will enable the application of the obtained results in modeling non-equilibrium astrophysical and laboratory plasmas that contain the given molecules.

Key words: Nitrogen, Carbon-monoxide, electron impact excitation, excitation and ionization rate coefficients, equilibrium conditions, non-equilibrium conditions, electron energy distribution function, transport parameters, mean electron energy

Scientific field: Physics

Research area: Atomic and molecular physics, Physics of atomic collision processes

UDC number: 537.1; 621.039 (043.3)

Садржај:

Увод.....	1
1. Сударни процеси у гасу.....	4
1. 1 Врсте електрон-молекулских интеракција.....	4
1. 1. 1 Процеси нееластичних судара електрона и двоатомских молекула.....	5
1. 2 Вероватноћа судара.....	7
1. 3 Коефицијенти брзине реакције.....	9
1. 3. 1 Појам и дефиниција коефицијента брзине реакције.....	9
1. 3. 2 Функција расподеле електрона по енергијама. Равнотежни и неравнотежни коефицијенти брзине реакције.....	11
2. Кретање електрона у електричним и магнетним пољима.....	16
3. Опис симулације кретања електрона у гасу.....	19
3. 1 Монте Карло симулација и генератор случајних бројева.....	19
3. 2 Општи услови и циљ симулације.....	20
3. 3 Прорачун положаја и брзине електрона.....	22
3. 4 Пређени пут и одређивање врсте сударног процеса.....	31
3. 5 Одређивање положаја, брзине и енергије електрона током судара.....	33
3. 5. 1 Углови под којим долази до судара.....	33
3. 5. 2 Прерасподела енергије у случају судара.....	35
3. 5. 3 Правац расејања електрона после судара.....	35
3. 5. 4 Брзина кретања електрона након судара.....	37
3. 5. 5 Третирање секундарних електрона насталих јонизацијом.....	37
3.6 Узорковање функције расподеле и одређивање транспортних параметара.....	38
4. Тестирање симулације.....	43
4. 1 Поређење транспортних параметара за моделне гасове.....	43
4. 2 Поређење симулацијом прорачунатих транспортних параметара електрона у реалним гасовима са експерименталним мерењима.....	51
4. 2. 1 Резултати поређења за угљен-моноксид.....	54
4. 2. 2 Резултати поређења за азот.....	56

5. Резултати симулације и дискусија.....	59
5. 1 Молекул угљен-моноксида (CO).....	59
5. 1. 1 Средње енергије и функције расподеле електрона по енергијама за молекул угљен-моноксида.....	62
5. 1. 2 Коефицијенти брзине ротационог побуђивања молекула угљен-моноксида.....	64
5. 1. 3 Коефицијенти брзине вибрационог побуђивања молекула угљен-моноксида.....	66
5. 1. 4 Коефицијенти брзине побуђивања у синглетна електронска стања молекула угљен-моноксида.....	70
5. 1. 5 Коефицијенти брзине побуђивања у триплетна електронска стања молекула угљен-моноксида.....	73
5. 1. 6 Коефицијенти брзине јонизације молекула угљен-моноксида.....	77
5. 1. 7 Коефицијенти брзине дисоцијације молекула угљен-моноксида.....	80
5. 1. 8 Поређење неравнотежних и равнотежних коефицијената брзине реакције за молекул угљен-моноксида	81
5. 2 Молекул азота (N ₂).....	82
5. 2. 1 Средње енергије и функције расподеле електрона по енергијама за молекул азота.....	86
5. 2. 2 Коефицијенти брзине ротационог побуђивања молекула азота.....	88
5. 2. 3 Коефицијенти брзине вибрационог побуђивања молекула азота.....	91
5. 2. 4 Коефицијенти брзине побуђивања у синглетна електронска стања молекула азота.....	95
5.2. 5 Коефицијенти брзине побуђивања у триплетна електронска стања молекула азота.....	97
5. 2. 6 Коефицијенти брзине јонизације молекула азота.....	100
5. 2. 7 Коефицијенти брзине дисоцијације молекула азота.....	103
5. 2. 8 Поређење неравнотежних и равнотежних коефицијената брзине реакције за молекул азота.....	103
5. 3 Транспорт електрона кроз гас азота у електричним и магнетним пољима укрштеним под произвољним угловима.....	105

6. Развој спектрометра за мерење ефективних пресека за јонизацију молекула електронима уз детекцију фрагмената јона техником времена прелета.....	111
6. 1 Опис експерименталног уређаја.....	111
6. 2 Принцип рада електронског и масеног спектрометра.....	113
6. 3 Прелиминарни резултати мерења тоталних пресека за јонизацију и ТОФ спектра.....	118
Закључак.....	121
Литература.....	124
Прилози.....	131
Прилог А : Тестови транспортних параметара у моделном гасу Лукас-Сејли за произвољне углове између електричног и магнетног поља.....	131
Прилог Б : Истоветност услова паралелних електричних и магнетних поља и одсуства магнетног поља.....	135
Биографија.....	137
Списак публикација.....	138

Увод

Истраживања сударних процеса молекула гаса са електронима веома су важна за атмосферску физику, астрофизику, гасну електронику, технологију плазме и хемију. Добијање информације о вероватноћи интеракције две атомске честице одређивањем ефективних пресека је важно за разумевање механизма одигравања датог процеса. Пример за то је откриће резонанци – краткоживећих негативних јона - које могу настати приликом процеса побуђивања. Њихово постојање испољава се у промени облика зависности ефективног пресека од упадне енергије електрона. У новије време потреба за ефективним пресецима проширила се изван фундаменталних истраживања у област развоја симулација заснованих на физичким моделима.

Познавање динамике сударних процеса у физичком систему у ком долази до великог броја истовремених интеракција саставних честица, као што је плазма, важно је за описивање стања система који чине атомске честице под разним условима. Представу о динамици сударних процеса електрона са молекулима пружају коефицијенти брзине ексцитације и јонизације. Њихов фундаментални значај је у томе што се полазећи од њих, стиче појам о важности одређеног процеса судара у низу последица које доводе до неког феномена, као нпр. допринос дисоцијације јона O_3^+ електронима присутним у стратосфери (који потичу од Сунчевог ветра и продиру у атмосферу на магнетним половима Земље) смањењу Озонског омотача непосредно или посредно кроз стварање хемијски реактивних фрагмената (Vojnović and Belić 2014). Коефицијенти брзине побуђивања, јонизације или дисоцијације молекула налазе примену у прављењу модела астрофизичких и лабораторијских плазми, чиме се размере њихове важности шире ка потребама физике плазме. Коефицијенти брзине реакције се у већини студија рачунају за Максвел-Болцманову функцију расподеле електрона по енергијама. Оправданост претпоставке термалне равнотеже електрона и молекула у нискотемпературној плазми која је подређена утицају спољашњих електричних и/или магнетних поља, међутим, може бити доведена у питање. Проналажење неравнотежне функције расподеле електрона по енергијама у

таквом случају постаје важан корак у истраживању. Најчешће коришћене методе за одређивање функције расподеле електрона по енергијама при кретању кроз гас у присуству електричних и магнетних поља су решавање Болцманове једначине и Монте Карло симулације (Dujko 2010), али такође су у употреби разне експерименталне технике, о којима ће бити речи. За добијање неравнотежних функција расподеле електрона по енергијама у овом раду развијена је Монте Карло симулација кретања електрона кроз гас у присуству електричних и магнетних поља. Детаљан опис симулације ће бити приказан уз осврт на проблем нумеричког прорачуна у случају присуства магнетног поља и методе рачунања положаја и брзина електрона. Биће дат опис извршених тестова.

Симулација користи базу података са претежно експериментално одређеним пресецима на основу којих рачуна макроскопске параметре у плазми. Део пресека је раније измерен у Лабораторији за физику атомских сударних процеса Физичког факултета у Београду на двоструком троходном електронском спектрометру. Сличан уређај са масеним анализатором јона којим се планира мерење парцијалних и тоталних пресека за директну и дисоцијативну јонизацију молекула електронима је развијен у истој лабораторији. Посебно поглавље је посвећено овом систему.

На основу резултата симулације одређени су и анализирани парцијални и тотални коефицијенти брзине за процесе побуђивања, јонизације (и дисоцијације) молекула CO и N₂ електронима у присуству електричних и магнетних поља. Пажња је посвећена и упоредној анализи тоталних коефицијената брзине реакције добијених за неравнотежну функцију расподеле са коефицијентима за Максвел-Болцманову функцију расподеле електрона по енергијама, као и испитивању понашања тоталних неравнотежних коефицијената у зависности од угла између електричног и магнетног поља.

Молекули азота и угљен-мооксида чине саставне компоненте у атмосферама Земље, Марса и Венере. Молекул азота такође игра важну улогу на Титану и Тритону и доминантна је гасна компонента многих комета. Гасовити омотач на овим објектима Сунчевог система изложен је јаком магнетном пољу које потиче од самих небеских тела или околних планета. Ови молекули су од значаја и за уређаје који функционишу на бази пражњења у гасу CO или N₂, а који

често користе магнетно конфинирање електрона, као што су магнетрони (Borah 2013), гасни ласери (Mao and Chen 1995) и плазмени реактори (Lai et al. 1995). Моделовање атмосферске плазме је важно за разумевање процеса који се у њој одигравају, док је моделовање уређаја у којима се користи плазма потребно за њихову оптимизацију. Одређивање коефицијената брзине процеса судара електрона са датим молекулима у неравнотежним условима је од великог значаја за развој ових модела.

Молекули CO и N₂ су изоелектронски, због чега се одликују сличним пресецима за судар са електронима. Карактеристичне су приближно исте вредности њихове масе, равнотежног међујезгарног растојања, прагова за дисоцијацију и јонизацију и интервала резонантног вибрационог побуђивања. Молекул CO за разлику од N₂ поседује диполни момент, мада релативно слаб ($3.3 \cdot 10^{-31}$ Cm). Такође поседује јак квадруполни момент за фактор или два већи од истог код N₂. Један од предмета ове студије је истраживање манифестација наведених сличности, односно разлика у резултатима коефицијената брзине реакције ових молекула.

1. Сударни процеси у гасу

1.1 Врсте електрон-молекулских интеракција

Сударни процес атомских честица (електрона, протона, јона, атома, молекула) дефинише се као процес приближавања честица при коме долази до њихове међусобне интеракције. Ови процеси се међусобно разликују према броју честица које ступају у интеракцију. Тип судара у ком долази до интеракције две честице зове се бинарни судар. Ова врста судара је најчешће испитивана и експериментално и теоријски. Притом је у физици атомских сударних процеса уобичајено да честица – пројектил буде електрон, а мета нека масивнија честица као што је атом (или атомски јон) или молекул (или молекулски јон). Разлог лежи у томе што електрон не поседује унутрашњу структуру. Осим тога, због велике разлике у маси, центар масе система одговара положају теже честице. Обе ове чињенице омогућавају једноставнији опис сударних догађаја. Судари три, или више честица су могући, али је вероватноћа тог догађаја веома мала, нарочито када је занемарљива густина гасне мете.

У овом раду ће се разматрати бинарни судари електрона и молекула, и стога ће се у даљем тексту класификација сударних процеса односити само на овај случај.

Према прерасподели енергије међу учесницима, бинарни електрон-молекулски судари се класификују на еластичне сударне процесе, нееластичне сударне процесе и супереластичне сударне процесе.

Еластични сударни процеси су процеси након којих укупна кинетичка енергија остаје иста и не троши се на промену унутрашњег стања молекула. Део кинетичке енергије електрона може се прерасподелити на узмак молекула, али због велике масе овај ефекат је незнатан.

Нееластични сударни процеси су процеси при којима се део енергије електрона прерасподељује на молекул, при чему долази до промене унутрашње енергије молекула. Нееластични судари се даље деле на ексцитационе процесе, при којима се крајње енергијско стање молекула разликује од почетног и на интеракције при

којима долази до промене структуре честица, стварања јона, јонских парова и сл. Специјалан случај у коме молекул предаје разлику енергија између почетног и крајњег стања електрону се назива **супереластичан судар**.

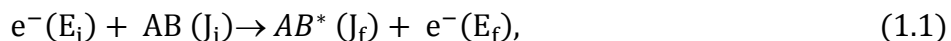
Након судара број честица може, али не мора остати исти. Судари при којима се број честица одржава се називају конзервативни судари. У ову врсту судара спадају еластично расејање и процеси нееластичног расејања при којима долази до побуђивања молекула. Судари при којима се број честица не одржава се називају неконзервативни судари, у које се убрајају јонизација, дисоцијација и захват електрона.

1.1.1 Процеси нееластичних судара електрона и двоатомских молекула

Нееластични сударни процеси до којих долази на одређеним енергијама електрона при интеракцији са двоатомским молекулима гаса се одигравају у различитим излазним каналима.

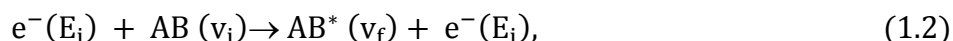
1. Екситација (побуђивање)

- **Ротациона екситација** је представљена процесом:



где је АВ двоатомски молекул. Молекул који је пре судара био у квантном стању са ротационим квантним бројем J_i (где индекс i означава почетно, односно иницијално стање) се побуђује у финално стање са ротационим квантним бројем J_f (индекс f означава финално стање) на рачун смањења кинетичке енергије електрона са вредности пре судара E_i на вредност после судара E_f .

- **Вибрациона екситација** се одвија на следећи начин:



где су v_i и v_f вибрациони квантни бројеви. Део кинетичке енергије електрона предате молекулу се прерасподељује на побуђивање из вибрационог нивоа v_i у вибрациони ниво v_f .

- **Електронска екситација**, при којој долази до побуђивања неког од електронских нивоа:

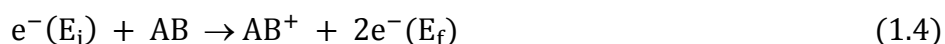


Електронско побуђивање може се одиграти уз ротационо, односно вибрационо побуђивање.

Уколико процес побуђивања траје веома кратко (време које електрон проведе у близини мете је реда $10^{-17}s$), говоримо о **директној екситацији**. У посебном случају може доћи до захвата електрона од стране молекула и формирања краткоживећег негативног јона, и тада је време интеракције електрона и молекула дуго. До формирања овог сложеног стања може доћи на одређеним енергијама електрона и то се манифестује увећаним ефективним пресеком за одређене процесе екситације у уском интервалу енергије. Формирано стање је нестабилно и назива се “привремени негативни јон“, “сложено стање“ или “резонанца“ (јер се јавља на тачно одређеним вредностима енергије електрона). Након извесног времена резонанца се распада у стање које може бити енергијски ниже од тзв. “родитељског стања“ уз емисију електрона (Ristić 2011).

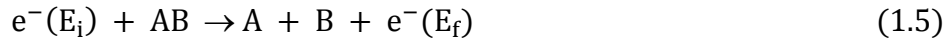
2. Јонизација

На већим енергијама електрона може доћи до избацивања електрона из молекула и формирања позитивног молекулског јона (**директна јонизација**):



3. Дисоцијација

Када кинетичка енергија електрона достигне праг за дисоцијацију долази до распада молекула на саставне атоме:



Осим дисоцијације у два неутрална атома могу се јавити и други облици дисоцијације молекула. Један од њих је **дисоцијативна ексцитација**, при чему након дисоцијације један од фрагмената остаје у побуђеном стању. У случају **дисоцијативне јонизације** долази до формирања јонских фрагмената. Такође је могућ и **дисоцијативни захват**, када долази до фрагментације молекула услед захвата електрона. Ови процеси се могу одиграти директно или преко образовања резонанце.

1.2 Вероватноћа судара

Квантитативна мера вероватноће одигравања одређеног сударног процеса карактерише се величином која се назива ефективни пресек за дати процес. Нека је млаз честица пројектила датог флукса, или интензитета I усмерен на мету, чија је концентрација n . Смањење интензитета млаза dI пропорционално је концентрацији честица мете и дубини продирања млаза dl :

$$dI = -\sigma n I dl. \quad (1.6)$$

Фактор пропорционалности σ у овом изразу има димензије површине и представља тотални ефективни пресек за судар. Тотални ефективни пресек зависи од упадне енергије пројектила, од унутрашњег стања мете и од њихове природе и даје вероватноћу судара. Ова величина може да се одреди експерименталним путем.

Вероватноћа да се електрон детектује након расејања са вредношћу резидуалне енергије E_{kr} у просторном углу $(\varphi, \varphi + \Delta\varphi; \theta, \theta + \Delta\theta)$, дефинисана за

упадну енергију електрона E_{kin} као параметра, назива се *диференцијални ефективни пресек другог реда* :

$$\frac{d^2\sigma(E_{kin}; E_{kr}, d\Omega)}{dE_{kr}d\Omega} . \quad (1.7)$$

За одређену врсту процеса овај пресек се назива *парцијални диференцијални ефективни пресек* $d^2\sigma_i/dE_{kr}d\Omega$, где се индекс i односи на врсту датог процеса.

Интеграцијом парцијалног диференцијалног пресека по расподели енергије E_{kr} долази се до парцијалног диференцијалног ефективног пресека за просторни угао $d\sigma_i/d\Omega$, а интеграцијом по просторном углу добија се *парцијални интегрални ефективни пресек* :

$$\sigma_i = \int_0^{4\pi} d\Omega \frac{d\sigma_i}{d\Omega} = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi \sin\theta d\theta \frac{d\sigma_i}{d\Omega(\theta, \varphi)} . \quad (1.8)$$

Збир парцијалних интегралних пресека по свим могућим излазним каналима реакције даје *тотални ефективни пресек*:

$$\sigma_{tot} = \sum_i \sigma_i + \sigma_{el} + \int_0^{E_{max}} \frac{d\sigma_j}{dE} dE , \quad (1.9)$$

где је први члан збир пресека за нееластичне сударе, други члан представља пресек за еластични судар, а последњи члан се односи на јонизацију. Тотални пресек је исти у лабораторијском систему и систему центра масе, јер укупан број судара не зависи од референтног система у ком се врши мерење, за разлику од диференцијалних пресека.

Ефективни пресек зависи од кинетичке енергије, односно брзине пројектила и у истраживању се обично одређује у зависности од енергије.

Вероватноћа да дође до i -тог типа сударног процеса када електрон енергије E_i крећући се кроз гас концентрације n прелази растојање l зависи од парцијалног интегралног ефективног пресека:

$$P_i(E_i) = 1 - e^{-\sigma_i(E_i)nl} . \quad (1.10)$$

1.3 Коефицијенти брзине реакције

1.3.1 Појам и дефиниција коефицијената брзине реакције

У систему са великим бројем честица различите врсте (ансамбли честица) долази до одигравања великог броја истовремених интеракција. Вероватноћу сударног процеса у том случају је уместо ефективним пресеком подесније описивати величином која се назива *коефицијент брзине реакције*, односно *коефицијент брзине процеса (побуђивања, јонизације, дисоцијације...)*, а која представља број процеса одређене врсте у јединици запремине и јединици времена по једном пројектилу и једној честичној мети.

Нека је концентрација ансамбла честица I врсте n_I , а концентрација ансамбла честице II врсте n_{II} .

Уколико се у систему одигравају процеси чији је резултат промена концентрације честица I или II врсте у току времена, смањење концентрације дате врсте биће пропорционално производу концентрација присутних честица:

$$-\frac{dn_I}{dt} = -\frac{dn_{II}}{dt} = Kn_I n_{II}. \quad (1.11)$$

Коефицијент пропорционалности K у једначини (1.11) је коефицијент брзине одређеног процеса, који зависи од природе честица I и II врсте и има димензије m^3/s . Како ова величина може да се схвати као квантитативни опис вероватноће одигравања одређеног процеса при интеракцији честица, може се са разлогом закључити да постоји веза коефицијента брзине реакције са ефективним пресеком за дати процес.

Нека су честице I врсте електрони, а честице II врсте молекули неког гаса. Претпоставимо да млаз електрона датог интензитета флукса I_I (број честица по јединици површине у јединици времена) истих брзина v , односно кинетичких енергија, пролази кроз гасну средину испуњену молекулима који мирују ($v_{II} = 0$). Интензитет флукса ће услед одигравања одговарајућег процеса опадати након пређеног пута dl сразмерно упадном интензитету флукса, концентрацији

молекула, n_{II} , и ефективном пресеку за тај процес, $\sigma(v)$, сходно релацији (1.6), која се за дате ознаке може написати у облику:

$$-dl_I = I_I n_{II} \sigma(v) dl. \quad (1.12)$$

Узимајући у обзир да је $dl = v dt$ и $I_I = n_I v$ и прелазећи из зависности по брзинама у зависност по енергијама коришћењем релације $E = mv^2/2$ добија се:

$$-dn_I = n_I n_{II} \sigma(E) \sqrt{\frac{2E}{m}} dt. \quad (1.13)$$

Из поређења ове једначине са једначином (1.11) следи да је:

$$K = \sigma(E) \sqrt{\frac{2E}{m}}. \quad (1.14)$$

Добијени израз важи за строго моноенергијски млаз електрона. У реалним условима упадни електрони имају одређену енергијску ширину, односно расподелу по енергијама за одређену вредност средње енергије ансамбла $f(\langle E \rangle, E)$. Коефицијент брзине реакције се онда рачуна статистичким усредњавањем по свим енергијама, односно као интеграл производа функције расподеле, ефективног пресека и енергије по свим могућим енергијама у опсегу од енергије E_p за праг процеса за који се рачуна коефицијент брзине до максималне енергије електрона E_{max} :

$$\begin{aligned} K(\langle E \rangle) &= \sqrt{\frac{2}{m}} \langle \sigma(E) \sqrt{E} \rangle = \sqrt{\frac{2}{m}} \int_{E_p}^{E_{max}} f(\langle E \rangle, E) \sigma(E) \sqrt{E} dE \\ &= \langle \sigma(v) v \rangle, \end{aligned} \quad (1.15)$$

при чему је претпостављено да је расподела $f(\langle E \rangle, E)$ нормирана, односно да је њен интеграл по свим енергијама једнак јединици:

$$\int_0^{E_{max}} f(\langle E \rangle, E) dE = 1 . \quad (1.16)$$

1.3.2 Функција расподеле електрона по енергијама. Равнотежни и неравнотежни коефицијенти брзине реакције.

Под условима термодинамичке равнотеже честица у систему (у нашем случају електрона и молекула гаса) функција расподеле електрона по брзинама се може описати добро познатим аналитичким обликом Максвел-Болцманове расподеле:

$$f_M(v) = 4\pi \left(\frac{m}{2\pi kT}\right)^{3/2} v^2 e^{-mv^2/2kT} . \quad (1.17)$$

Вероватноћа налажења електрона брзине v у интервалу брзина $v + dv$ може се изразити преко вероватноће налажења електрона енергије E у интервалу енергија $E + dE$:

$$f_M(v)dv = f_M(E)dE . \quad (1.18)$$

Ако се искористе релације $E = mv^2/2$ и $\langle E \rangle = 3kT/2$, из (1.17) се долази до Максвел-Болцманове функције расподеле електрона по енергијама:

$$f_M(E) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{3}{2\langle E \rangle}\right)^{3/2} \sqrt{E} e^{-\frac{3E}{2\langle E \rangle}} . \quad (1.19)$$

Када се израз (1.19) уврсти у једначину (1.15) добија се *равнотежни* или *Максвелов коефицијент брзине реакције*:

$$K_{M,i}(\langle E \rangle) = 3 \sqrt{\frac{3}{m\pi}} \frac{1}{\langle E \rangle^{3/2}} \int_{E_{p,i}}^{E_{max}} \sigma_i(E) E e^{-\frac{3E}{2\langle E \rangle}} dE . \quad (1.20)$$

За познату зависност пресека за i -ту врсту процеса од енергије, $\sigma_i(E)$, на основу ове формуле може се одредити Максвелов коефицијент брзине реакције при одређеној вредности средње енергије електрона.

Нека у систему са малом концентрацијом честица постоји спољашње електрично поље. Електрони ће непрестано добијати убрзање од примењеног поља. Електрично поље одржава кинетичку енергију електрона знатно већом од кинетичке енергије честица гаса, онемогућавајући успостављање термалне равнотеже. Коефицијент брзине процеса за неравнотежне услове назива се *неравнотежни коефицијент брзине реакције* и добија се из формуле (1.15) применом нормализоване неравнотежне функције расподеле. Функција расподеле у неравнотежним условима одступа у одређеној мери (у зависности од концентрације молекула гаса, јачине поља) од Максвел-Болцманове функције расподеле. Једна од најчешће примењиваних стандардних функција расподеле енергије електрона у условима присуства спољашњег електричног поља и доминантности еластичних судара (Sree Narsha 2006) је Драјвестајнова (енг. Druyvestein) функција расподеле:

$$f_D = 1.04 \frac{\sqrt{E}}{\langle E \rangle^{\frac{3}{2}}} e^{-\frac{0.55E^2}{\langle E \rangle^2}} . \quad (1.21)$$

Ова расподела даје већи број електрона са мањом енергијом и мањи број електрона са већом енергијом од Максвел-Болцманове расподеле.

Поред Драјвестајнове, постоје и друге расподеле изражене у аналитичкој форми у условима када је присутно електрично поље, као нпр. Дејвидова (енг. Davyd), која узима у обзир и термално кретање молекула (Wannier 1971) и друге. Наведене аналитичке расподеле узимају у обзир одређене апроксимације. Међутим, функција расподеле не може увек да се апроксимира постојећим моделима, који су само поједностављени облици реалних расподела. Реална неравнотежна функција расподеле може да се одреди уз помоћ експерименталних, теоријских и нумеричких метода.

1. експерименталне методе

Конвенционална експериментална метода за мерење функције расподеле електрона по енергијама у пражњењима на ниском притиску је употреба Лангмирове (енг. Langmuir) сонде. Функција расподеле се добија из другог извода директно измерене струјно-напонске карактеристике сонде ($I-V$), убачене у плазму. Тачност ове методе зависи од низа фактора, као што су нпр. загађеност површине сонде, величина сонде, пертурбациони ефекти и тачност одређивања другог извода $I-V$ карактеристике (Povov et al. 2006).

Такође су у употреби спектроскопске методе, као што је Томпсоново расејање, или популарна оптичка емисиона спектроскопија (ОЕС). Ове технике су успешне у условима када примена Лангмирове сонде не даје добре резултате (нпр. у опсегу већег притиска, у присуству магнетног поља, у RF пражњењима), међутим и оне са собом носе недостатке као што је слаб сигнал при ниској концентрацији електрона код Томпсоновог расејања (Washeski et al. 2013) или у случају ОЕС проблеми директне интерпретације резултата када су услови пражњења комплексни (Isola et al. 2010).

Наведене методе се могу користити самостално, али се неретко користе и у комбинацији (видети нпр. Lagarde et al. 2001, Carbone et al. 2012).

2. теоријски прорачун

Еволуција функције расподеле под унутрашњим и спољашњим утицајима се описује Болцмановом транспортном једначином. За кретање честица кроз неутрални гас, под утицајем укрштених просторно хомогених електричних и магнетних поља интензитета E и B Болцманова једначина је дата у облику (White et al. 1999):

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \vec{v} \cdot \frac{\partial f}{\partial \vec{r}} + \frac{q}{m} (\vec{E} + \vec{v} \times \vec{B}) \cdot \frac{\partial f}{\partial \vec{c}} = -J(f, f_0), \quad (1.22)$$

при чему је са f означена функција расподеле у 6-дим. фазном простору, \vec{v} и \vec{r} представљају векторе брзине и положаја честице, q и m су наелектрисање и маса

честице, док се $J(f, f_0)$ односи на брзину промене функције расподеле због бинарних конзервативних судара са неутралним молекулима.

Решавање скупа датих једначина је веома сложен поступак. Болцманова једначина се аналитички може решити само уз строге апроксимације које знатно поједностављују проблем. Најчешће коришћен аналитички приступ је развој Болцманове једначине у сферне хармонике и узимање у обзир прва два члана (тзв. двочлана апроксимација).

3. нумеричке методе

Да би се решила Болцманова једначина у општем случају користе се разне нумеричке технике. Дискретизација Болцманове једначине омогућава њено директно решавање применом алгоритама заснованих на развоју сферних хармоника. Тип методе директног решавања Болцманове једначине се класификује као детерминистичка нумеричка метода.

Пробабилитички приступ за добијање функције расподеле је Монте Карло симулација, у којој се симулира стохастичка природа физичких процеса. Постоје разни типови симулација транспорта електрона кроз гас са међусобном разликом у техникама које користе. Најпознатије су Particle in Cell Monte Carlo, Test Particle Monte Carlo, Direct Monte Carlo. Монте Карло симулације захтевају више времена у односу на нумеричке технике решавања Болцманове једначине, међутим њихова примена отвара многе могућности у погледу модела и комплексности физичког система, као и у броју физичких параметара који се могу прорачунати, а који се не могу одредити решавањем Болцманове једначине.

У литератури се понегде Монте Карло технике наводе као методе за решавање Болцманове једначине, мада је не решавају експлицитно, уз аргумент да решавање Болцманове једначине значи проналажење функције расподеле. Горе поменути типови Монте Карло симулација су представљени као модели засновани на Болцмановој једначини у којима се прате отежињене честице које су представници великог броја истоветних честица у фиктивној просторној мрежи. Наш став по овом питању је да постоји пресек Монте Карло симулације и Болцманове једначине у смислу да и једна и друга метода може дати функцију

расподеле електрона по енергијама, међутим ограничења која постоје у теоријском прорачуну као што је разматрање у нехидродинамичким условима и, уопште у сложенијим условима, се увелико превазилазе симулацијом и дају јој општију улогу у истраживањима.

За добијање неравнотежних расподела електрона по енергијама у овом истраживању развијена је стохастичка симулација независно од поменутих стандардних Монте Карло техника. У симулацији се егзактно симулирају сви реални физички процеси при транспорту електрона кроз гас коришћењем тачних дефиниција. Детаљан опис модела и начина рада симулације дат је у глави 3.

2. Кретање електрона у електричним и магнетним пољима

У основи симулације која ће бити представљена у овој тези садржано је временско праћење кретања појединачних електрона у простору са константним електричним, односно са константним електричним и магнетним пољем, што изискује осврт на фундаменталне физичке законе који важе за ово кретање.

Нека се наелектрисана честица креће под дејством хомогеног електричног поља јачине \vec{E} које је усмерено у негативном смеру z -осе:

$$\vec{E} = -E\vec{e}_z, \quad (2.1)$$

Вектори $\vec{e}_x, \vec{e}_y, \vec{e}_z$ су ортови оса x, y и z , редом, у Декартовом координантном систему.

Једначине кретања честице се добијају из система диференцијалних једначина:

$$m\ddot{\vec{r}} = q\vec{E}, \quad (2.2)$$

и гласе:

$$v_x = v_{0x}, \quad (2.3)$$

$$v_y = v_{0y}, \quad (2.4)$$

$$v_z = v_{0z} + \alpha t, \quad (2.5)$$

$$x = x_0 + v_{0x}t, \quad (2.6)$$

$$y = y_0 + v_{0y}t, \quad (2.7)$$

$$z = z_0 + v_{0z}t + \alpha t^2/2, \quad (2.8)$$

при чему је $\alpha = eE/m_e$.

Нека поред електричног делује и хомогено магнетно поља индукције \vec{B} , које са z -осом заклапа угао β :

$$\vec{B} = B_y \vec{e}_y + B_z \vec{e}_z. \quad (2.9)$$

Диференцијалне једначине кретања честице наелектрисања q која се креће брзином \vec{v} под дејством Лоренцове и електричне силе су дате изразом:

$$m\ddot{\vec{r}} = q\dot{\vec{r}} \times \vec{B} + q\vec{E}, \quad (2.10)$$

Из једначине (2.10) добијају се следеће диференцијалне једначине кретања електрона у скаларном облику:

$$\ddot{x} = \frac{e}{m_e} (\dot{z}B \sin\beta - \dot{y}B \cos\beta), \quad (2.11)$$

$$\ddot{y} = \frac{e}{m_e} \dot{x}B \cos\beta, \quad (2.12)$$

$$\ddot{z} = \frac{e}{m_e} (E - \dot{x}B \sin\beta), \quad (2.13)$$

Решавањем једначина (2.11 - 2.13) уз смене $\alpha = eE/m_e$ и $\omega = eB/m_e$ долази се до компоненти брзине електрона :

$$v_x = (v_{0z} \sin\beta - v_{0y} \cos\beta) \sin\omega t + \left(v_{0x} - \frac{\alpha \sin\beta}{\omega} \right) \cos\omega t + \frac{\alpha \sin\beta}{\omega}, \quad (2.14)$$

$$v_y = v_{0y} + \alpha \cos\beta \sin\beta + \cos\beta (1 - \cos\omega t) (v_{0z} \sin\beta - v_{0y} \cos\beta) + \sin\omega t \cos\beta \left(v_{0x} - \frac{\alpha}{\omega} \sin\beta \right), \quad (2.15)$$

$$v_z = v_{0z} + \alpha \cos^2\beta + \sin\beta (\cos\omega t - 1) (v_{0z} \sin\beta - v_{0y} \cos\beta) - \sin\omega t \sin\beta \left(v_{0x} - \frac{\alpha}{\omega} \sin\beta \right). \quad (2.16)$$

Интеграција (2.14 – 2.16) доводи до коначних једначина кретања електрона:

$$x(t) = x_0 + \frac{\alpha t \sin\beta}{\omega} + \frac{\sin\omega t}{\omega} \left(v_{0x} - \frac{\alpha \sin\beta}{\omega} \right) + \frac{(1 - \cos\omega t)}{\omega} (v_{0z} \sin\beta - v_{0y} \cos\beta), \quad (2.17)$$

$$\begin{aligned}
y(t) = & y_0 + (v_{0y} + (v_{0z}\sin\beta - v_{0y}\cos\beta)\cos\beta)t + \frac{\alpha\sin\beta\cos\beta}{2}t^2 \\
& - \frac{1}{\omega}(v_{0z}\sin\beta - v_{0y}\cos\beta)\cos\beta\sin\omega t \\
& + \frac{1}{\omega}\left(v_{0x} - \frac{\alpha\sin\beta}{\omega}\right)\cos\beta(1 - \cos\omega t), \tag{2.18}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
z(t) = & z_0 + (v_{0z} - (v_{0z}\sin\beta - v_{0y}\cos\beta)\sin\beta)t + \frac{\alpha\cos^2\beta}{2}t^2 \\
& + \frac{1}{\omega}(v_{0z}\sin\beta - v_{0y}\cos\beta)\sin\beta\sin\omega t \\
& + \frac{1}{\omega}\left(v_{0x} - \frac{\alpha\sin\beta}{\omega}\right)\sin\beta(\cos\omega t - 1). \tag{2.19}
\end{aligned}$$

Облик трајекторије коју електрон описује зависи од правца почетне брзине. Уколико је $\beta = \frac{\pi}{2}$ могу се издвојити специјални случајеви:

а) ако је у почетном тренутку електрон мировао, или ако је почетна брзина била усмерена у правцу електричног поља (као у симулацији представљеној у овом раду), по укључењу електричног и магнетног поља трајекторија ће бити циклоида.

б) ако је електрон имао компоненту почетне брзине нормалну на вектор магнетне индукције кретаће се по трохоиди; трохоидно кретање електрона карактеристично је за монохроматор у експерименталном уређају који ће бити описан у глави 6, а који је дизајниран по моделу електронског спектрометра (Vičić et al. 1998); овакви монохроматори су управо због трохоидног кретања електрона у њиховој унутрашњости са ортогоналним електричним и магнетним пољима названи трохоидни електронски монохроматори.

3 Опис симулације кретања електрона у гасу

3.1 Монте Карло симулација и генератор псеудослучајних бројева

Тип алгоритма који генерише случајне бројеве у циљу добијања резултата приликом испитивања одређеног проблема, зове се *Монте Карло код*, а метода коју користи *Монте Карло метода*. Ова метода је дуго проучавана у математици и има широку примену, нпр. у економији, финансијама, инжењерингу, биологији, хемији, квантној физици, итд. Погодност ове методе је моделовање сложених математичких и физичких система. У физици се јавља потреба за применом Монте Карло методе у следећим случајевима:

- кад систем није пробабилистички, али се због сложености система не могу решити једначине аналитички, односно када је велики број једначина потребних за опис таквог система (као што је решавање 3N димензионалне Шредингерове једначине стохастичким узорковањем таласне функције (Esler et al. 2008) или је Монте Карло приступ ефикаснији и/или једноставнији од аналитичког решавања;
- када се у систему одигравају стохастични процеси (радиоативни распад, интеракције честица при транспорту кроз материју и сл.), при чему алгоритам подражава стохастичност реалног система статистичким узорковањем из униформне расподеле и такав програм се зове *Монте Карло симулација*.

Низ случајних бројева се може генерисати на основу математичког алгоритма чији резултати зависе од почетне вредности, тзв. семена (*seed*). Са обзиром на то да су компјутери детерминистичке машине, бројеви које генеришу не могу бити заиста случајни. Да би се у одређеној мери избегла корелисаност и добили неповезани (псеудослучајни) бројеви, обично се за семе узима системско време рачунара, које се наравно мења сваке милисекунде. Генератори случајних бројева се испитују ригорозним статистичким тестовима како би се утврдило да ли постоји нежељена повезаност међу бројевима.

Интервал вредности генерисаних случајних бројева је обично $[0,1]$, што најчешће има смисао вероватноће догађаја, мада се тај интервал може проширити,

или смањити по потреби. Вредности променљивих у датом интервалу се извлаче из униформне (дискретне) расподеле, која се разликује од случајних бројева који подлежу некој континуалној расподели (нпр. Гаусовој расподели, са одређеном средњом вредношћу извучених бројева и стандардним одступањем) по томе што је подједнака вероватноћа извлачења свих вредности у датом интервалу.

У овој симулацији коришћен је генератор случајних бројева ran3 (Press et al. 1992), који је прошао бројне тестове квалитета.

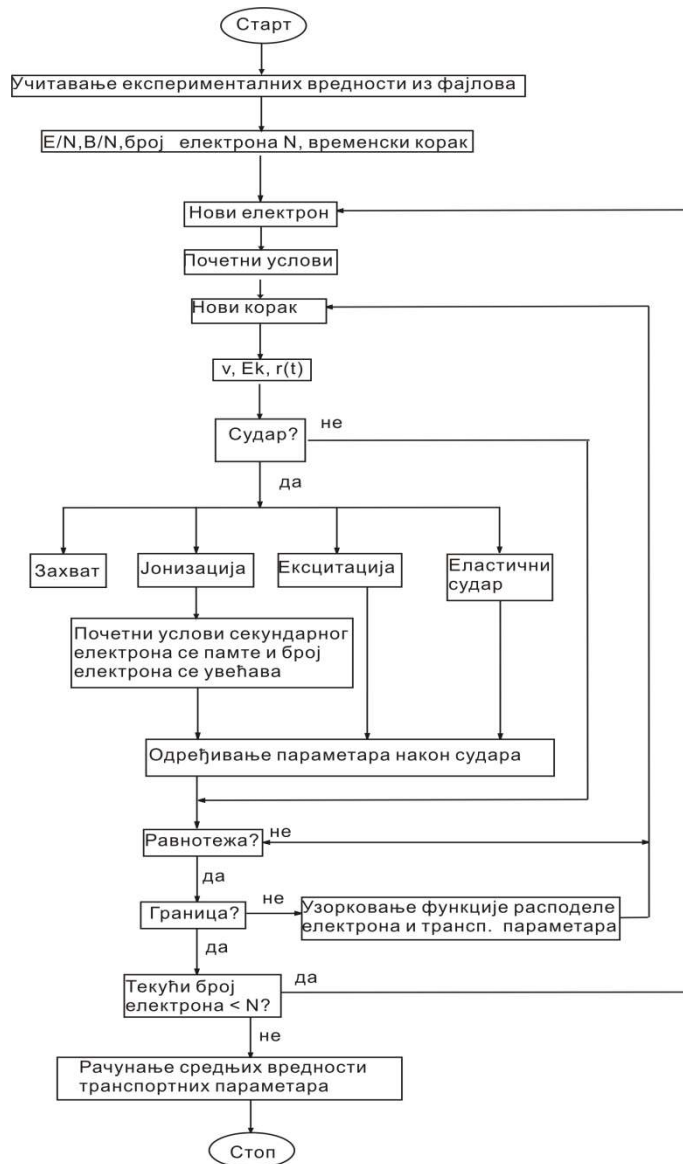
3.2 Општи услови и циљ симулације

Максвел-Болцманова функција расподеле електрона по енергијама има познат аналитички облик и коефицијент брзине одређеног процеса се рачуна према формули (1.20) коришћењем једноставне нумеричке интеграције. Међутим, у присуству електричног и/или магнетног поља аналитички израз за функцију расподеле није познат и у циљу њеног одређивања развијена је Монте Карло симулација описана у докторској дисертацији (Ristić 2011). Изворни код симулације написан је на C++ програмском језику, у лабораторији за физику атомских сударних процеса физичког факултета у Београду. Током рада на овом докторату оригиналан програм је допуњен опцијама које се односе на тестирање кода и на начин праћења кретања електрона. У овој глави биће изложен детаљан принцип рада симулације са овим допунама.

Симулација третира кретање електрона у безграничном простору испуњеном идеалним гасом, под дејством спољашњег хомогеног електричног и магнетног поља. Концентрација гаса је као код Реидовог моделног гаса. Термално кретање молекула се занемарује у симулацији уз претпоставку да су сви молекули у основном електронском, ротационом и вибрационом стању, док им се при судару са електронима рачуна узмак. Сваки од примарних електрона у почетном тренутку полази из координатног почетка лабораторијског координатног система, са истом кинетичком енергијом. Вредност почетне енергије се може одабрати да одговара средњој енергији која је постигнута у равнотежи на основу неколико пробних симулација ради уштеде времена рада програма. Даље кретање електрона је условљено дејством хомогеног електричног поља јачине \vec{E} , и

хомогеног магнетног поља, индукције \vec{B} . Претпостављено је да је електрично поље усмерено у негативном смеру z -осе ($\vec{E} = -E\vec{e}_z$), а да вектор магнетне индукције формира угао β са z -осом. Међусобна електро-магнетна интеракција електрона је занемарена претпостављањем мале концентрације електрона.

Симулација кретања електрона кроз гас у електричном и магнетном пољу може се илустровати алгоритмом (слика 3.1).



Слика 3.1 Шема алгоритма програма Монте Карло симулације написаног на C++ програмском језику.

Циљ симулације је одређивање функција расподеле електрона по енергијама на одговарајућим вредностима E/N и B/N (појашњење ових величина је дато даље у тексту), неопходних за израчунавање коефицијената брзине реакције у неравнотежним условима (присуство спољашњег поља). Међу излазним величинама су и транспортни параметри као што су брзине дрифта и дифузиони коефицијенти, рачунати у сврхе тестирања програма. Значај развоја ове симулације је управо у томе што на основу експериментално измерених пресека и тачних дефиниција релевантних физичких процеса омогућава добијање макроскопских параметара, који се могу измерити.

Коефицијенти брзине реакције и транспортни параметри рачунати су у одређеном опсегу редукованих вредности електричног E/N и магнетног поља B/N . Редуковано електрично поље представља однос јачине електричног поља и концентрације молекула гаса. Ова величина обично се изражава јединицом Таузенд ($1 \text{ Td} = 10^{-21} \text{ Vm}^2$). Редуковано магнетно поље је однос магнетне индукције и концентрације молекула гаса и изражава се јединицом Хаксли ($1 \text{ Hx} = 10^{-27} \text{ Tm}^3$).

Стандардно одступање резултата Монте Карло симулације је обрнуто пропорционално квадратном корену броја електрона због чега симулација третира велики број електрона, реда величине 10^7 . Даље увећање би допринело тачности резултата, међутим избор максималног броја електрона је ограничен меморијским и процесорским ресурсима рачунара.

3.3 Прорачун положаја и брзине електрона

Стандардне нумеричке технике решавања диференцијалних једначина кретања не дају задовољавајуће резултате за електрон који се креће у области у којој је присутно константно магнетно поље. Нпр. уколико нема електричног поља и ако је почетна брзина усмерена у правцу нормално на правац деловања магнетног поља, путања се неће очекивано затворити због нумерички добијене пречице, односно промене брзине електрона у току времена. Да би се отклонили ови проблеми за случај ортогоналних електричних и магнетних поља, увелико је

заступљена метода позната као Борисова ротација, у којој је примењено само електрично поље, док се ефекат магнетног поља добија ротацијом вектора брзине у сваком временском кораку (Dujko et al. 2005). Међутим овом методом се прецизно рачунају брзине, али не и положаји (Rasporović et al. 1999). Услед тога може доћи до поменутог “одвијања“ путање електрона у одсуству електричног поља, односно до ефекта увећања енергије који није физички, већ настаје услед нумеричке грешке. Мада даје добре резултате за ортогоналну конфигурацију поља, Борисова ротација ипак није погодна техника за произвољне углове између поља, стога је у том случају потребно применити аналитичка решења једначина кретања (Dujko et al. 2006).

Алгоритам написан у првој верзији симулације рачуна координате и брзине електрона према једначинама:

$$x_{n+1} = x_n + \frac{\alpha \Delta t \sin \beta}{\omega} + \frac{\sin \omega \Delta t}{\omega} \left(v_{nx} - \frac{\alpha \sin \beta}{\omega} \right) + \frac{(1 - \cos \omega \Delta t)}{\omega} (v_{nz} \sin \beta - v_{ny} \cos \beta), \quad (3.1)$$

$$y_{n+1} = y_n + (v_{ny} + (v_{nz} \sin \beta - v_{ny} \cos \beta) \cos \beta) \Delta t + \frac{\alpha \sin \beta \cos \beta}{2} (\Delta t)^2 - \frac{1}{\omega} (v_{nz} \sin \beta - v_{ny} \cos \beta) \cos \beta \sin \omega \Delta t + \frac{1}{\omega} \left(v_{nx} - \frac{\alpha \sin \beta}{\omega} \right) \cos \beta (1 - \cos \omega \Delta t), \quad (3.2)$$

$$z_{n+1} = z_n + (v_{nz} - (v_{nz} \sin \beta - v_{ny} \cos \beta) \sin \beta) \Delta t + \frac{\alpha \cos^2 \beta}{2} (\Delta t)^2 + \frac{1}{\omega} (v_{nz} \sin \beta - v_{ny} \cos \beta) \sin \beta \sin \omega \Delta t + \frac{1}{\omega} \left(v_{nx} - \frac{\alpha \sin \beta}{\omega} \right) \sin \beta (\cos \omega \Delta t - 1), \quad (3.3)$$

$$v_{n+1,x} = (v_{nz} \sin \beta - v_{ny} \cos \beta) \sin \omega \Delta t + \left(v_{nx} - \frac{\alpha \sin \beta}{\omega} \right) \cos \omega \Delta t + \frac{\alpha \sin \beta}{\omega}, \quad (3.4)$$

$$v_{n+1,y} = v_{ny} + \alpha \Delta t \cos \beta \sin \beta + \cos \beta (1 - \cos \omega \Delta t) (v_{nz} \sin \beta - v_{ny} \cos \beta) + \sin \omega \Delta t \cos \beta \left(v_{nx} - \frac{\alpha}{\omega} \sin \beta \right), \quad (3.5)$$

$$v_{n+1,z} = v_{nz} + \alpha \Delta t \cos^2 \beta + \sin \beta (\cos \omega \Delta t - 1) (v_{nz} \sin \beta - v_{ny} \cos \beta) - \sin \omega \Delta t \sin \beta \left(v_{nx} - \frac{\alpha}{\omega} \sin \beta \right). \quad (3.6)$$

Овај део кода је посебно анализиран и тестиран, нарочито због примене магнетног поља. На описани начин рачуна се путања електрона аналитички при преласку из једне тачке у следећу за време трајања корака, Δt . Потпуни аналитички приступ, међутим, подразумева употребу једначина кретања у зависности од континуалног времена које је протекло од почетка рачунања времена до датог момента. Симулација је допуњена овом методом, чији је опис дат у следећим редовима. Кретање електрона се прати рачунањем компонената брзина и координата положаја електрона у сваком кораку помоћу једначина (2.3-2.8) у одсуству магнетног поља и (2.14-2.19) у присуству магнетног поља, које зависе од времена које је протекло између два (суседна) догађаја расејања. Текуће време t се рачуна као збир елементарних корака Δt све до судара:

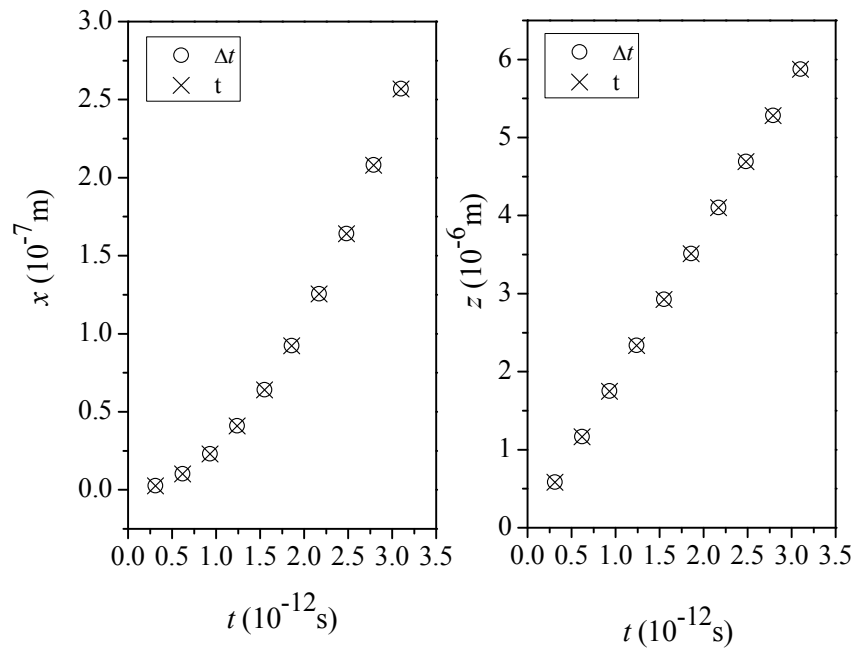
$$t = \sum \Delta t, \quad (3.7)$$

када се ресетује на нулу, а компоненте брзина и координата које је електрон имао у тренутку судара постају почетне вредности за једначине кретања у наредним корацима све до следећег сударног процеса.

У циљу поређења дискретног аналитичког (једначине кретања у зависности од константног временског корака) и пуног аналитичког алгоритма, као и испитивања тачности облика рачунатих путања под задатим условима дејства поља у одсуству гаса, у програм је унет алгоритам за записивање координата добијених у сваком временском кораку у излазни фајл. На основу података из фајла нацртане су путање електрона у програму Origin 8.0. Елиминација сударних процеса је извршена изједначавањем свих вероватноћа за судар са нулом. Правац почетне брзине електрона биран је задавањем почетних вредности азимутног и зенитног угла. Пуштен је један електрон са почетном кинетичком енергијом од 10 eV. Одабрана је вредност елементарног корака од $\Delta t = 3,1 \cdot 10^{-13} \text{ s}$.

На слици 3.2 су дате зависности координата x и z од времена добијене употребом дискретног аналитичког и пуног аналитичког алгоритма за услове назначене у опису слике. Израчунате вредности координата се слажу у сваком временском кораку.

Анализа облика путања у паралелној/антипаралелној и ортогоналној конфигурацији електричног и магнетног поља је показала да у овим случајевима долази до извесних одступања од очекиваних трајекторија. У паралелној/антипаралелној конфигурацији поља, по поласку електрона из координатног почетка у правцу дејства електричног поља магнетно поље нема утицаја на кретање електрона, због чега би требало да несметано настави кретање у истом правцу. Међутим, употребом једначина (3.1 - 3.6) није добијена права линија (слика 3.3 а). Ако електрон креће из координатног почетка у правцу дејства електричног поља, на које је магнетно поље нормално, очекивана путања је циклоида у равни XZ . Под датим условима уочен је благи дрифт дуж y -осе (слика 3.3 б).



Слика 3.2 Временске зависности x и z координата електрона у ортогоналној конфигурацији електричног и магнетног поља ($\theta = \varphi = 0^\circ, E_k = 10 \text{ eV}, \frac{E}{N} = 500 \text{ Td}, \frac{B}{N} = 1000 \text{ Hx}, \beta = 90^\circ$) добијене уз помоћ дискретног аналитичког (Δt) и пуног аналитичког алгоритма (t).

Нађено је да су узрок ових девијација нумеричке грешке које се јављају приликом рачунања синусних и косинусних чланова у једначинама кретања. Наиме, функције за добијање синуса и косинуса које садржи пакет C++ програма рачунају Маклоренов развој у ред за одређени број чланова у развоју. Колико год био велики број чланова резултат је нека приближна, а не тачна вредност. Ефекат оваквог рачуна није долазио до изражаја у тестовима излазних величина симулације али је, као што је показано на сликама 3.3 а) и 3.3 б), испољен у облицима путања електрона на крајевима интервала синуса, односно косинуса. Како је утврђено да се за специјалан случај кад је магнетно поље постављено нормално на електрично поље ($\vec{B} = B\vec{e}_y$), за који је израчунат највећи број резултата представљен у овом раду, јавља нумеричка грешка при рачунању чланова $\sin\beta$ и $\cos\beta$, у део алгоритма који рачуна једначине кретања додате су једначине за ортогоналну конфигурацију поља:

$$x = x_0 + \frac{v_{0z}}{\omega} (1 - \cos\omega t) + \frac{1}{\omega} \left(v_{0x} - \frac{\alpha}{\omega} \right) \sin\omega t + \frac{\alpha t}{\omega} , \quad (3.8)$$

$$y = y_0 + v_{0y} t , \quad (3.9)$$

$$z = z_0 + \frac{v_{0z}}{\omega} \sin\omega t + \frac{1}{\omega} \left(v_{0x} - \frac{\alpha}{\omega} \right) (\cos\omega t - 1) , \quad (3.10)$$

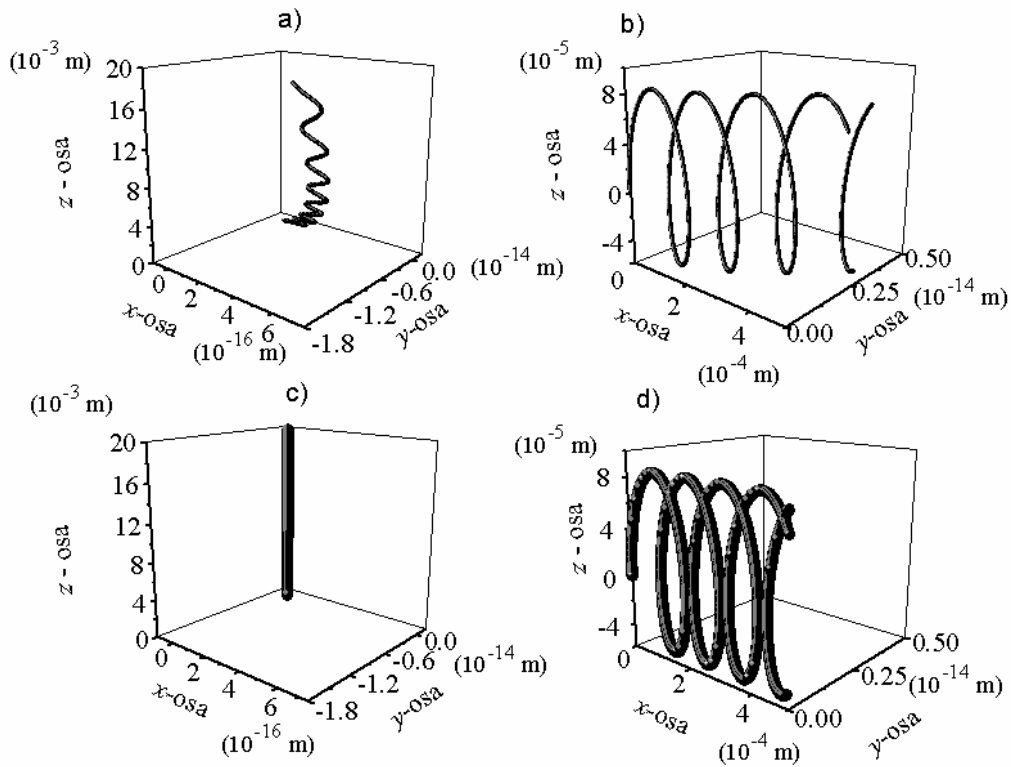
$$v_x = v_{0z} \sin\omega t + \left(v_{0x} - \frac{\alpha}{\omega} \right) \cos\omega t + \frac{\alpha}{\omega} , \quad (3.11)$$

$$v_y = \text{const} = v_{0y} , \quad (3.12)$$

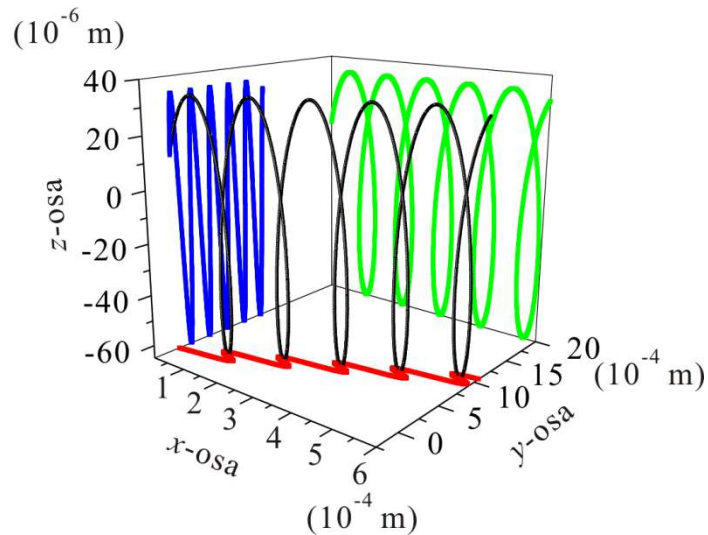
$$v_z = v_{0z} \cos\omega t + \left(\frac{\alpha}{\omega} - v_{0x} \right) \sin\omega t . \quad (3.13)$$

Слично, када су поља паралелна програм рачуна положаје и брзине према одговарајућим готовим једначинама кретања.

Путање добијене након ове корекције приказане су на примеру поласка електрона у позитивном смеру z-осе у простору деловања паралелних/антипаралелних поља (слика 3.3 с) и у ортогоналној конфигурацији електричног и магнетног поља (слика 3.3 d).



Слика 3.3 Путања електрона ($\theta = \varphi = 0^\circ, E_k = 10 \text{ eV}, \frac{E}{N} = 500 \text{ Td}, \frac{B}{N} = 1000 \text{ Hx}$) са нумеричким рачунањем синусних и косинусних чланова за а) $\beta = 0,180^\circ$, б) $\beta = 90^\circ$ и без рачунања синусних и косинусних чланова с) $\beta = 0,180^\circ$ д) $\beta = 90^\circ$.



Слика 3.4 Путања електрона са ненултом почетном брзином у ортогоналној конфигурацији електричног и магнетног поља ($\theta = \varphi = 45^\circ, E_k = 10 \text{ eV}, \frac{E}{N} = 500 \text{ Td}, \frac{B}{N} = 1000 \text{ Hx}, \beta = 90^\circ$).

Добијени облици путање одговарају у потпуности теоријским предвиђањима. Такође, уношењем ове корекције време рада симулације је приметно скраћено.

За ненулте компоненте почетне брзине ($\theta = \varphi = 45^\circ$), у ортогоналној конфигурацији поља ($\vec{E} = -E\vec{e}_z$, $\vec{B} = B_y\vec{e}_y$) добијена је трохоида, сходно очекивањима. На слици 3.4 је приказана путања електрона при овим условима са назначеним пројекцијама на равнима XZ и YZ .

Диференцијалне једначине другог реда (2.11-2.13) за угао $\beta = 90^\circ$ се свODE на диференцијалне једначине првог реда ако се запишу у следећем облику:

$$\frac{dv_x}{dt} = \omega v_z, \quad (3.14)$$

$$\frac{dv_y}{dt} = 0, \quad (3.15)$$

$$\frac{dv_z}{dt} = \alpha - \omega v_x. \quad (3.16)$$

Притом је

$$x(t_0) = x_0; y(t_0) = y_0; z(t_0) = z_0; v_x(t_0) = v_{0x}; v_y(t_0) = v_{0y}; v_z(t_0) = v_{0z}.$$

Дати систем једначина може се решавати нумерички уз помоћ тзв. Рунге-Кута методе (Press et al. 1992). Поступак који се користи у овом приступу се своди на итеративно добијање решења на основу нагиба функције унутар кратког временског интервала. Рунге-Кута првог реда (познатији као Ојлерова метода) рачуна нагиб на почетку интервала. Грешка добијеног резултата може се смањити методом вишег реда, односно поновним рачунањем нагиба на половини интервала.

У програм је имплементирана опција рачунања диференцијалних једначина кретања Рунге-Кута методом 4. реда. У овој методи се у оквиру истог временског корака Δt извод рачуна четири пута. Због тога се ова метода може сматрати прецизном (уколико је корак довољно мали) и њеном применом не долази до проблема наведеног код стандардних нумеричких прорачуна. Корак Δt је једнак разлици времена на крају и на почетку временског интервала:

$$\Delta t = t_{n+1} - t_n \quad (3.17)$$

и укупно време је једнако збиру временских корака.

Ако се са k_i означе увећања на основу коефицијената праваца, где $i = 1,2,3,4$ онда се може записати:

$$v_x(\Delta t) : k_1 = \omega v_z(t_n), \quad (3.18)$$

$$k_2 = \omega(v_z(t_n) + \Delta t k_1/2), \quad (3.19)$$

$$k_3 = \omega(v_z(t_n) + \Delta t k_2/2), \quad (3.20)$$

$$k_4 = \omega(v_z(t_n) + \Delta t k_3), \quad (3.21)$$

$$v_x(\Delta t) = \Delta t(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4)/6, \quad (3.22)$$

$$v_x(t_{n+1}) = v_x(t_n) + v_x(\Delta t). \quad (3.23)$$

На сличан начин се рачунају компоненте v_y и v_z . На основу добијене вредности v_x решава се диференцијална једначина:

$$\frac{dx}{dt} = v_x, \quad (3.24)$$

како би се добила x координата:

$$x(\Delta t) : k_1 = v_x(t_n), \quad (3.25)$$

$$k_2 = v_x(t_n) + \Delta t k_1/2, \quad (3.26)$$

$$k_3 = v_x(t_n) + \Delta t k_2/2, \quad (3.27)$$

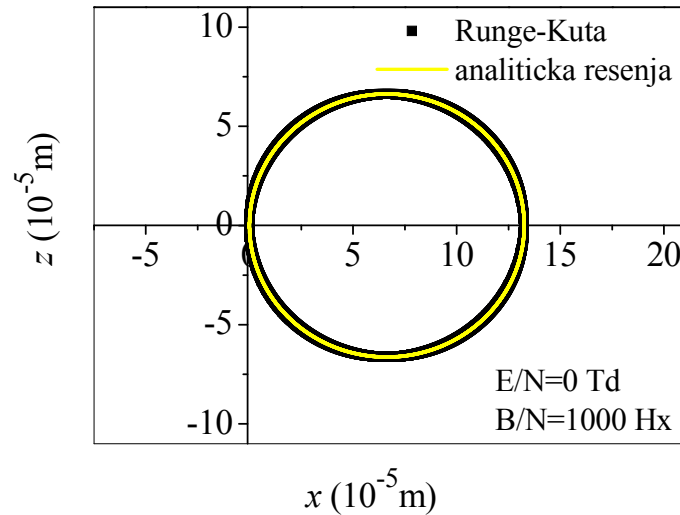
$$k_4 = v_x(t_n) + \Delta t k_3, \quad (3.28)$$

$$x(\Delta t) = \Delta t(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4)/6, \quad (3.29)$$

$$x(t_{n+1}) = x(t_n) + x(\Delta t). \quad (3.30)$$

Слично се добијају координате y и z .

На слици 3.5 су приказане путање електрона добијених уз помоћ Рунге-Кута методе и аналитичких решења за вредности $B/N=1000$ Hx, $E/N=0$ Td, $\theta = \varphi = 0^\circ$.



Слика 3.5 Путања електрона који почиње да се креће из координатног почетка под утицајем магнетног поља (1000 Hx) за временски корак $3.1 \cdot 10^{-13}$ s.

Поређења резултата добијених коришћењем готових аналитичких једначина кретања и Рунге-Кута методе су дала задовољавајућа слагања за разне услове. Добијено слагање три различита приступа потврђује валидност алгоритма за рачунање путање и показује да се наведене методе могу користити равноправно у датом моделу симулације. Предност се наравно даје аналитичким једначинама кретања. Пун аналитички приступ има додатну карактеристику да, уколико је потребно, омогућава директно добијање координата и брзина за произвољно удаљен број корака за разлику од дискретног аналитичког који је везан за корак. У циљу добијања резултата одабрана је метода која садржи аналитичка решења једначина кретања у зависности од времена протеклог између два судара. Метода са аналитичким решењима у зависности од дискретног временског корака је задржана ради тестова. Рунге-Кута метода је осим за тестове корисна за услове у којима аналитичка решења нису најбољи избор.

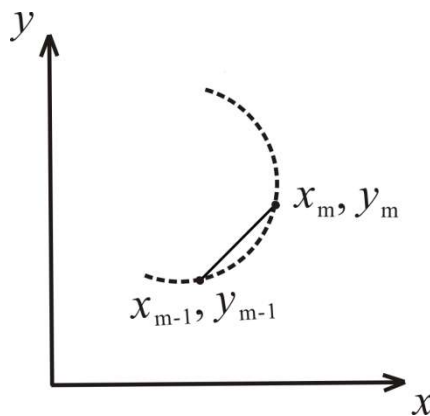
3.4 Пређени пут и одређивање врсте сударног процеса

Разлике координата при преласку електрона из тачке простора $(x_{m-1}, y_{m-1}, z_{m-1})$ у којој се налазио у тренутку t_{m-1} у другу тачку простора (x_m, y_m, z_m) у коју је стигао за време $t_m = t_{m-1} + \Delta t$ су потребне за израчунавање елементарног пређеног пута:

$$\Delta s = \sqrt{(x_m - x_{m-1})^2 + (y_m - y_{m-1})^2 + (z_m - z_{m-1})^2} \quad (3.31)$$

На основу пређеног пута Δs за време Δt и ефективних пресека у функцији упадне енергије електрона учитаних из фајлова, рачуна се вероватноћа за i -ту врсту сударног процеса према формули (1.10). Учитани пресеци се динамички интерполишу за тренутну вредност кинетичке енергије.

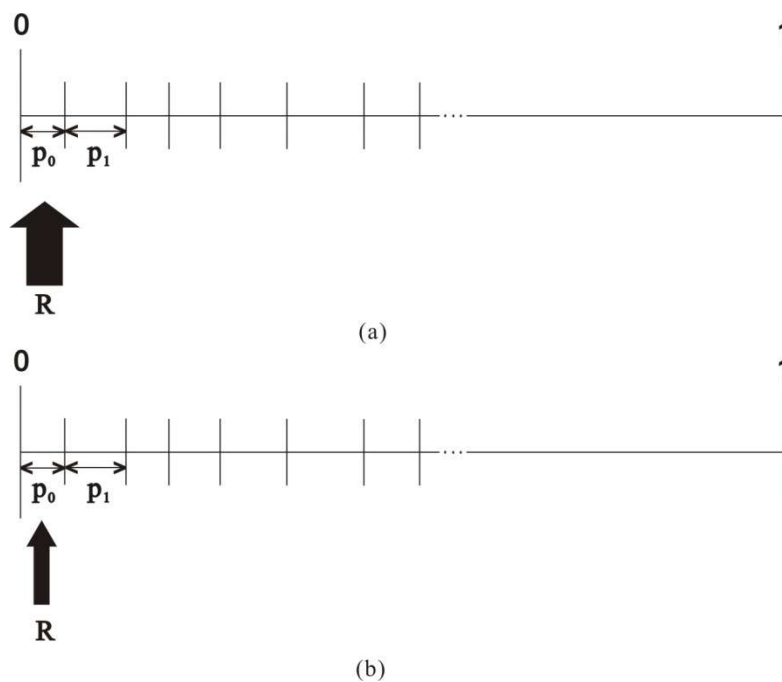
Елемент пута рачунат према (3.31) описује праволинијско кретање што, у општем случају када је укључено магнетно поље, не одговара реалности. На слици 3.6 је илустрован део реалне путање електрона (испрекидана линија) и пређени пут за један временски корак.



Слика 3.6 Путања електрона у равни XY.

Путања ће утолико бити боље описана уколико је корак мањи. Самим тим, вероватноћа за судар ће бити тачније одређена и ова апроксимација се не би неповољно одразила на егзактност симулације. Осим тога, за исувише велики временски корак би постојала могућности двоструког судара, што би довело до занемаривања другог судара. Дакле, овај временски интервал мора да буде веома мали због боље дефинисаности пута и добијања што тачнијег описа путање, као и

због искључења могућности занемаривања двоструког судара. Ипак, постоји доња граница испод које не би требало смањивати корак да не би ушао у дискретност генератора случајних бројева. Генератор случајних догађаја има коначну ширину одређену неким бројем децимала. Ако је Δt мање од те ширине мање је и ΔS , а самим тим и вероватноћа судара. У том случају генератор не би могао да погоди област вероватноће (слика 3.7 а), што би се испољило као одсуство дате врсте судара у симулацији. На слици 3.7 б је приказано како би требало да буду распоређени интервали вероватноћа у односу на ширину генератора случајних бројева (која је иста у оба случаја али је одабран дати приказ због боље прегледности). Вероватноће флукутирају у зависности од енергије. За дату енергију нека вероватноћа се повећа, а за ту исту енергију ће нека друга да се смањи, док је њихов збир током тих флукутација од 1% до 5%.



Слика 3.7: (а) случај исувише малог временског корака (б) случај добро одабраног временског корака p_0, p_1 -вероватноће за одређене процесе, R – генерисани случајни број.

Начин на који се испитује да ли је дошло до одређеног процеса је следећи: генерише се случајни број R у опсегу од 0 до 1, затим се одређује врста процеса у чији интервал вредности улази дати број. Ако $R \in (\sum_{i=0}^{n-1} P_i, \sum_{i=0}^n P_i]$ дошло је до n -тог сударног процеса. Уколико је генератор изабрао област за коју није

дефинисана никаква вероватноћа, до судара није дошло и електрон наставља да се креће, а његова еволуција се и даље прати. Уколико је одабрана област захвата престаје праћење еволуције датог електрона и прелази се на следећи.

3.5 Одређивање положаја, брзине и енергије електрона током судара

Догађаји судара су посебни моменти у симулацији. Када се генерисањем случајних бројева утврди да је дошло до одређеног типа судара, неопходно је утврдити нове параметре за даље кретање електрона. Осим дефинисања координата у тренутку судара као почетних услова, потребно је одредити преосталу енергију електрона, углове расејања и нове почетне компоненте брзине на основу прорачуна. Начин одређивања ових параметара се своди на примену једначина изведених из дефиниција за дате физичке процесе и на извлачење случајних бројева из експериментално одређене или из униформне расподеле.

3.5.1 Углови под којим долази до судара

Углови под којим се електрон судара са молекулом у односу на лабораторијски координатни систем одређују се употребом следећих израза (Ristić 2011):

$$\theta_1 = \arccos \frac{v_z}{\sqrt{v_x^2 + v_y^2 + v_z^2}}, \quad (3.32)$$

$$\varphi_1 = \arctg \left(\frac{v_y}{v_x} \right), \quad (3.33)$$

при чему је θ_1 зенитни угао (угао који вектор брзине заклапа са позитивним смером z - осе), док је φ_1 – азимутни угао (угао који пројекција вектора брзине заклапа са x - осом).

Ипак, у одређеним ситуацијама се ове релације не могу употребити:

Ако је $v = 0$ израз за θ_1 неће бити дефинисан и узима се да је $\theta_1 = 0$, док се вредности φ_1 додељује вредност случајног броја у интервалу $[0, 2\pi]$.

Ако је $v_x = 0$ израз за φ_1 неће бити дефинисан и за ненулту компоненту v_z могу се размотрити следећи случајеви:

- $v_x = 0$ и $v_y = 0$;

Према (3.32) у овом случају $\theta_1 = 0$, док се φ_1 одређује генерисањем случајног броја у интервалу $[0, 2\pi]$.

- $v_x = 0$ и $v_y > 0$;

У овом случају електрон се након расејања креће у првом или четвртном квадранту равни YZ , те је стога угао $\varphi_1 = \pi/2$.

- $v_x = 0$ и $v_y < 0$;

Електрон се након расејања креће у другом или трећем квадранту равни YZ , тако да је $\varphi_1 = 3\pi/2$.

Поред ових, потребно је издвојити још пар случајева када се φ_1 не одређује директно према формули (3.33) :

- $v_x > 0$ и $v_y < 0$ када је

$$\varphi_1 = 2\pi + \operatorname{arctg}\left(\frac{v_y}{v_x}\right) \quad (3.34)$$

- $v_x < 0$ и $v_y > 0$ када је

$$\varphi_1 = \operatorname{arctg}\left(-\frac{v_y}{v_x} + \frac{\pi}{2}\right) \quad (3.35)$$

- $v_x < 0$ и $v_y < 0$ када је

$$\varphi_1 = \pi + \operatorname{arctg}\left(\frac{v_y}{v_x}\right) \quad (3.36)$$

3.5.2 Прерасподела енергије у случају судара

Након сваког корака рачунају се нове компоненте брзине електрона и на основу тих вредности одређује се кинетичка енергија електрона.

При нееластичном судару кинетичка енергија електрона се умањује за део предат молекулу у износу енергије прага за одговарајући нееластични процес.

Приликом јонизације настаје нови електрон и долази до прерасподеле енергије између електрона – пројектила и новонасталог електрона. Енергија коју ће поделити међу собом је једнака разлици енергије коју је први електрон имао пре судара, E_{ki} , и енергије прага за јонизацију. Појединачни удео те енергије се одређује уз помоћ случајног броја $G \in [0,1]$. Ако се губитак кинетичке енергије примарног електрона на процес јонизације означи са ΔE , енергија електрона насталог у процесу јонизације је:

$$E_{kj} = (E_{ki} - \Delta E) \cdot G \quad (3.37)$$

док је енергија примарног електрона:

$$E_k = E_{ki} - \Delta E - E_{kj} \quad (3.38)$$

Електрон губи део кинетичке енергије и на узмак молекула. Енергија електрона се умањује за део кинетичке енергије предате молекулу масе M , који се налази у стању мировања. Кинетичка енергија се множи коефицијентом узмака електрона, изведеном из закона одржања импулса, који је једнак односу кинетичке енергије после и пре расејања. Коначан облик коефицијента узмака може се наћи у магистарској тези (Ristić 2007).

3.5.3 Правац расејања електрона после судара

Електрон се расејава на молекулу под угловима θ_2 и φ_2 у односу на локални координатни систем чија је z -оса оријентисана у смеру од електрона ка молекулу на коме се расејава приликом судара. Сматра се да је расподела по

азимутном углу увек изотропна, због чега се вредност азимутног угла одређује генерисањем случајног броја који припада интервалу $[0, 2\pi)$.

Расејање електрона по зенитном углу није изотропно због сложене интеракције између електрона и молекула у току судара. Због тога је за одређивање угла θ_2 потребно познавање функције расподеле расејања електрона по зенитном углу. Уколико није познат аналитички облик ове расподеле проистекао из теорије, у базу података се уносе коефицијенти добијени фитовањем експериментално измерених вредности апроксимативним Лежандровим полиномом 4. степена по $\cos\theta_2$ – општи облик полинома:

$$f(\theta_2) = a(E) + b(E)\cos\theta_2 + c(E)\cos^2\theta_2 + d(E)\cos^3\theta_2 + e(E)\cos^4\theta_2 \quad (3.39)$$

где су a , b , c , d и e коефицијенти добијени фитовањем експерименталних резултата. Овај полином је одређен методом најмањих квадрата за сваку енергију електрона помоћу експериментално одређених пресека на одређеним угловима. Уколико не постоје експериментална мерења расподеле електрона по углу θ_2 за неки сударни процес, рачуна се да је изотропна. За произвољну енергију E коефицијенти се одређују линеарном интерполацијом два позната суседна (по енергији) полинома.

Функција расподеле електрона по углу θ_2 мора бити униформна по површини замишљене сфере око центра расејања електрона на молекулу. Без обзира на то да ли је расподела по углу θ_2 униформна, да би се спречило нагомилавање електрона расејаних на половима сфере због просторног фактора у сферним координатама потребно је помножити расподелу (3.39) са $\sin\theta_2$. Тако добијена расподела се нормира на 1, а затим се генеришу два случајна броја R_1 из униформне расподеле на интервалу $[0, 1]$, који има физички смисао вероватноће и $R_2 \in [0, \pi]$, који има физички смисао угла. Испитује се да ли тачка одређена овим координатама лежи испод функције расподеле. Ако се утврди да је то случај прогласи се да је $\theta_2 = R_2$; ако не лежи испод функције расподеле генеришу се нови бројеви R_1 и R_2 за које се врши исто испитивање све док се не добије тачка која лежи испод функције расподеле, кад се вредности θ_2 додељује извучен број R_2 .

3.5.4 Брзина кретања електрона након судара

Након судара одређује се интензитет брзине на основу преостале кинетичке енергије електрона:

$$v = \sqrt{\frac{2E_k}{m_e}} \quad (3.40)$$

Компоненте брзине које електрон има након судара се рачунају преко добијеног интензитета брзине електрона, углова вектора брзине електрона пре судара у лабораторијском референтном систему (θ_1 и φ_1) и углова вектора брзине електрона након судара у локалном референтном систему (θ_2 и φ_2) формулама (Ristić 2011):

$$v_x = v(\sin\theta_2 \cos\varphi_2 \cos\theta_1 \cos\varphi_1 - \sin\theta_2 \sin\varphi_2 \sin\varphi_1 + \cos\theta_2 \sin\theta_1 \cos\varphi_1) \quad (3.41)$$

$$v_y = v(\sin\theta_2 \cos\varphi_2 \cos\theta_1 \sin\varphi_1 - \sin\theta_2 \sin\varphi_2 \cos\varphi_1 + \cos\theta_2 \sin\theta_1 \sin\varphi_1) \quad (3.42)$$

$$v_z = v(-\sin\theta_2 \cos\varphi_2 \sin\theta_1 + \cos\theta_2 \cos\theta_1) \quad (3.43)$$

3.5.5 Третирање секундарних електрона насталих јонизацијом

Уколико дође до процеса јонизације, прати се нова генерација електрона. Ако би се примарни млаз електрона назвао нултом генерацијом, електрони настали јонизацијом молекула нултом генерацијом електрона би се могли назвати првом генерацијом, електрони настали након друге јонизације молекула електронима прве генерације другом генерацијом итд. Електронима насталим у n -тој јонизацији се додељују координате и енергија који су меморисани у тренутку њиховог настанка у $(n - 1)$. генерацији као почетни параметри. Генерације се симулирају једна за другом, односно кад се заврши еволуција нулте генерације прелази се на еволуцију прве генерације итд.

3.6 Узорковање функције расподеле и одређивање транспортних параметара

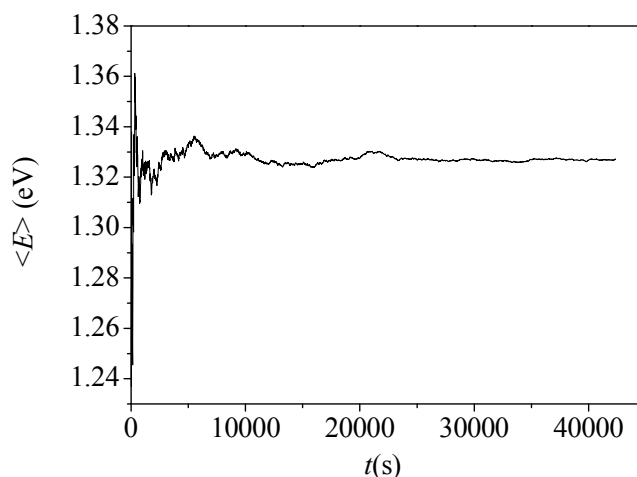
Транспорт електрона кроз гас карактерише се одређеним физичким параметрима. Од велике је важности тачно одређивање њихових вредности, што подразумева добро дефинисане услове да би се вршило њихово узорковање. Транспортне карактеристике ансамбла електрона су временски променљиве све до постизања стабилног стања, након чега се устале око неке средње вредности. Стабилност ансамбла се у овом смислу односи на успостављање равнотеже између енергије којом поље константно снабдева електроне и губитка утрошеног на процесе нееластичног побуђивања молекула гаса. Систем у ово стање улази након одређеног броја временских корака (од пар хиљада до неколико десетина хиљада у зависности од услова). У симулацији се потом врши узорковање функције расподеле електрона по енергијама. Резултат је удео електрона са вредношћу енергије у интервалу ширине 0.01 eV у целој области енергија од 0 eV до 100 eV. Програм записује у фајл функцију расподеле нормирану на 1.

Број корака до равнотеже N_r се бира након неколико пробних симулација на вредност када почиње стабилизација транспортних величина. Егзактна симулација захтевала би да се након уласка у равнотежу после N_r временских корака, узорковање изврши за сваки од N_k електрона, који се састоји од укупног броја електрона појединачно пуштених и од електрона насталих јонизацијом. Да би се постигла одговарајућа статистичка тачност, број N_k електрона мора да буде велики. Рад програма за тако велики број електрона би због извршавања великог броја рачунских операција могао да траје и по неколико дана. Уместо тога примењена је следећа апроксимација: након $N_r + 1$. корака по једном пуштеном електрону узоркује се кинетичка енергија, а затим се после $N_r + r$. корака, где је r случајни број у интервалу од 200 до 300, поново узоркује кинетичка енергија, али се исти електрон третира као да је у питању неки други. Поступак се понавља док оригинални електрон не пређе пар хиљада корака у области равнотеже. На овај начин уштеђено је доста времена рада програма и знатно је увећан број електрона. Описана апроксимација у одређеној мери нарушава независност електрона јер “нови“ електрони имају сличну прошлост. Међутим, показало се да добијени

результати занемарљиво мало одступају (у оквиру статистичке грешке) од резултата добијених егзактном методом, чиме је оправдана примењена техника.

Стабилизација транспортних особина електрона током рада симулације се постиже већим бројем пуштених електрона, који се задаје у зависности од одабраних радних услова. На слици 3.8 је приказана промена средње енергије електрона који се крећу кроз гас азота у току времена рада симулације.

Поред функције расподеле и кинетичке енергије у области равнотеже се узоркују и величине које се добијају у експериментима са ројевима¹ електрона - брзина дрифта електрона и дифузиони коефицијенти. У ширем смислу брзина дрифта представља брзину кретања ансамбла електрона, док се дифузиони коефицијенти могу схватити као мера брзине ширења ансамбла електрона у одређеном правцу.



Слика 3.8: Средња енергија електрона при транспорту кроз гас азота у зависности од времена рада симулације за $\beta = 90$, $E/N= 100$ Td, $B/N=1000$ Нх.

У литератури се јављају две врсте ових транспортних параметара, такозвани балк и флуks брзина дрифта, односно дифузиони коефицијенти.

¹ Рој се дефинише као статистички ансамбл међусобно независних наелектрисаних честица које се крећу кроз простор испуњен неутралним гасом. Метода ројева је посебна техника за одређивање ефективних пресека која представља итеративни поступак подешавања скупа ефективних пресека при прорачуну транспортних параметара док се не постигне слагање резултата са вредностима добијеним у експериментима са ројевима (Huxley and Crompton 1974).

Утврђено је (Dujko et al. 2008) да се приликом моделовања мора правити разлика између ове две врсте параметара при њиховом одабиру као улазних података. Балк вредности се односе на случај неконзервативних сударних процеса, тј. када долази до јонизације и/или захвата електрона за разлику од флукс вредности које одговарају случају конзервативних процеса, када се број електрона одржава. Стога балк вредности више одговарају реалним условима и углавном се те вредности добијају експерименталним путем. У Монте Карло симулацијама се могу добити и балк и флукс транспортни параметри. Флукс вредности се користе за тестирање кода, али су драгоцене и за утврђивање тежине неконзервативних процеса поређењем са балк резултатима (Rasporović 1999). Рачунање балк вредности, осим што омогућава тестирање алгоритма за неконзервативне сударе, такође служи проналажењу оптималне базе ефективних пресека за судар са одређеном врстом мете (атома, молекула) усклађивањем балк резултата симулације са експерименталним подацима. Из ових разлога у програм је додато рачунање балк параметара, поред постојећег алгоритма који је рачунао флукс параметре. По први пут извршени су тестови наше симулације за случај реалних гасова поређењем са експериментално добијеним вредностима нађеним у литератури. Резултати ових поређења биће приказани у поглављу 4.2.

Кинетичка енергија и транспортни параметри одређени су за ансамбл електрона усредњавањем датих величина.

Средња енергија електрона једнака је збиру кинетичких енергија свих електрона, подељеним са укупним бројем електрона N_k :

$$\langle E_k \rangle = \frac{1}{N_k} \sum_{i=1}^{N_k} E_k(t_i) \quad (3.44)$$

Балк брзина дрефта се дефинише као брзина кретања центра масе ансамбла електрона. Како електрони имају исту масу, брзина центра масе се своди на брзину промене средњег положаја ансамбла електрона. Дакле, балк брзина дрефта ансамбла електрона је према дефиницији, први извод усредњеног вектора положаја по времену:

$$W_B = \frac{d \langle \vec{r} \rangle}{dt} \quad (3.45)$$

Балк вредност дифузионог коефицијента дефинисана је следећим изразом:

$$D_B = \frac{1}{2} \frac{d(\langle \vec{r}^2 \rangle - \langle \vec{r} \rangle^2)}{dt} \quad (3.46)$$

У случају неконзервативних сударних процеса број електрона у изразу (3.44) се мења током времена. Да би се одредили изводи по времену у изразима (3.45) и (3.46), потребно је наћи средњи положај електрона у два одабрана блиска временска тренутка. У сваком од та два тренутка збир положаја електрона, односно збир квадрата положаја је подељен укупним бројем електрона у узорку. У програму је временски тренутак дефинисан као интервал времена који чини одређени број временских корака. Први тренутак (t_1) је првих неколико корака у равнотежи, док се други (t_2) може произвољно одабрати унутар области равнотеже. Нумерички се ове вредности, нпр. z -компоненти добијају коришћењем формула:

$$W_{zB} = \frac{\frac{1}{N_2} \sum_{i=1}^{i=N_2} z_{2i} - \frac{1}{N_1} \sum_{i=1}^{i=N_1} z_{1i}}{t_2 - t_1}, \quad (3.47)$$

$$D_{zB} = \frac{\left[\frac{1}{N_2} \sum_{i=1}^{i=N_2} z_{2i}^2 - \left(\frac{1}{N_2} \sum_{i=1}^{i=N_2} z_{2i} \right)^2 \right] \left[\frac{1}{N_1} \sum_{i=1}^{i=N_1} z_{1i}^2 - \left(\frac{1}{N_1} \sum_{i=1}^{i=N_1} z_{1i} \right)^2 \right]}{2(t_2 - t_1)}. \quad (3.48)$$

При чему су N_1 и N_2 једнаки збиру свих електрона у t_1 , односно другом тренутку времена t_2 по свим генерацијама p :

$$N_1 = \sum_p N_1(p), \quad N_2 = \sum_p N_2(p), \quad (3.49)$$

z_{1i} и z_{2i} су компоненте положаја i -тог електрона у t_1 , односно t_2 . На исти начин се добијају све друге компоненте брзине дрефта и дифузионог коефицијента.

Флукс вредности транспортних параметара се одређују за константан број електрона. У случају *флукс брзине дрефта* укупан број електрона може изаћи

испред првог извода, при чему се одређивање компоненти брзине дрефта своди на рачунање средње брзине дрефта у датом правцу (x , y или z):

$$W_{Fj} = \langle W_j \rangle, \quad (3.50)$$

где се ознака j односи на дату осу Декартовог координатног система ($j = x, y, z$).

Флукс компоненте дифузионих коефицијената се одређују формулом:

$$D_{Fj} = \frac{[\sum_{i=1}^N j_{2i}^2 - (\sum_{i=1}^N j_{2i})^2] [\sum_{i=1}^N j_{1i}^2 - (\sum_{i=1}^N j_{1i})^2]}{2N(t_2 - t_1)}, \quad (3.51)$$

при чему је N укупан број симулираних електрона.

Симулација рачуна још и величину која карактерише степен неконзервативних сударних процеса - коефицијент јонизације, односно захвата електрона који је дефинисан изразом:

$$\alpha = \frac{d(\ln N(t))}{dt}, \quad (3.52)$$

а нумерички се рачуна употребом формуле:

$$\alpha = \frac{\ln(N_2) - \ln(N_1)}{t_2 - t_1}. \quad (3.53)$$

Предзнак овог коефицијента је различит за јонизацију и захват обзиром да број електрона у току времена експоненцијално расте, односно опада, редом:

$$N(t) = N_0 \exp(\pm \alpha t). \quad (3.54)$$

4. Тестирање симулације

4.1 Поређење транспортних параметара за моделне гасове

Пре примене симулације за добијање нових резултата неопходно је извршити тестирање алгоритма. У ту сврху врше се стандардни тестови на тзв. моделним гасовима, са аналитички дефинисаним пресецима приписаним неком фиктивном гасу, поређењем резултата са познатим референтним вредностима. Величине које се пореде су транспортни параметри, дефинисани у претходном поглављу.

Провере рачуна транспортних коефицијената наше симулације су извршене у константним електричним и магнетним пољима за различите ситуације у погледу утицаја датог типа судара на број електрона. Конзервативни судари тестирани су 1) *Реидовим моделом рампе* (енг. Reid's ramp model), описаним у раду (White et al. 1997); процеси јонизације гаса испитани су уз помоћ 2) *Лукас-Сејли* (енг. Lucas-Saelee) модела (Nolan et al. 1997); процеси захвата електрона, при којима се смањује број електрона проверени су коришћењем 3) *Нес-Робсоновог* (енг. Ness-Robson) модела (Nolan et al. 1997).

1) Реидов моделни гас

Ефективни пресек Реидовог моделног гаса за еластични судар је константан за све вредности енергије и износи $6 \cdot 10^{-20} \text{ m}^2$. Зависност ефективног пресека за нееластичан процес од енергије је линеарна са енергијом прага 0.2 eV:

$$\sigma_n = \begin{cases} 0, & E \leq 0.2 \text{ eV} \\ (E - 0.2) \cdot 10^{-15} \text{ cm}^2, & E > 0.2 \text{ eV} \end{cases} \quad (4.1)$$

при чему је E кинетичка енергија електрона у eV.

Зависност тоталног ефективног пресека од енергије је, као збир претходних функција зависности, такође линеарна са енергијом прага 0.2 eV и почетном вредношћу једнаком енергији прага пресека за еластични процес; на 0.8 eV пресеци су једнаки за еластичан и нееластичан процес.

Број честица у систему се не мења, односно нису укључени неконзервативни процеси, као што су захват и јонизација. Расподела расејаних електрона по просторном углу је равномерна за све врсте расејања (расејање је изотропно). Молекули гаса се налазе у основном стању ($T_0 = 0 K$). Маса молекула Реидовог моделног гаса једнака је маси атома Хелијума ($m = 4 a_j m$).

У табели 4.1 су приказани резултати добијени за транспорт електрона кроз Реидов моделни гас у електричним и магнетним пољима, укрштеним под различитим угловима, при вредности редукованог електричног поља од 12 Td и редукованог магнетног поља од а) 50 Нх и б) 200 Нх и вредности које су нумеричким прорачуном добили Вајт и сарадници (White et al. 1999). Добијено је задовољавајуће слагање свих величина за све овде испитиване услове. Супротан предзнак x компоненте брзине дрифта у табели проистиче из чињенице да су Вајт и сарадници одабрали позитиван смер z -осе за оријентацију електричног поља, док је у нашој симулацији електрично поље оријентисано у супротном смеру, тако да се електрони у ова два случаја крећу у супротним странама.

2) Моделни гас Лукас-Сејли

У моделу Лукас-Сејли број честица се увећава у току времена због процеса јонизације молекула за које је ефективни пресек

$$\sigma_j = \begin{cases} 0, & E \leq 15.6 \text{ eV} \\ F \cdot (E - 15.6) \cdot 10^{-17} \text{ cm}^2, & E > 15.6 \text{ eV} \end{cases} \quad (4.2)$$

где је E енергија електрона у eV , а F број којим се одређује степен учешћа јонизације у симулацији и може да има вредности 0, 0.5 и 1. $F = 0$ је случај када

Табела 4.1: Поређење транспортних параметара наше симулације и резултата које су добили Вајт и сарадници решавањем Болцманове једначине (White et al. 1999) у Реидовом моделном гасу (концентрација неутралног гаса $n = 10^{23} \text{m}^{-3}$) у електричним и магнетним пољима постављеним под углом од 0° , 30° , 60° и 90° за $E/N = 12 \text{ Td}$ и вредностима B/N од 50 Hx а) и б) 200 Hx (d-слагање).

а) $B/N = 50 \text{ Hx}$

β ($^\circ$)	autori	$\langle E \rangle$ (eV)	W_x (10^4 m/s)	W_y (10^4 m/s)	W_z (10^4 m/s)	nD_x (10^{24} 1/ms)	nD_y (10^{24} 1/ms)	nD_z (10^{24} 1/ms)
0	наши	0.269	0.014	-0.018	6.781	0.971	1.089	0.569
	White et al.	0.269	0	0	6.838	1.011	1.011	0.569
	d (%)	<i>100</i>	/	/	<i>99.17</i>	<i>96.04</i>	<i>107.7</i>	<i>100</i>
30	наши	0.267	0.935	0.254	6.660	1.016	1.038	0.575
	White et al.	0.267	-0.956	0.265	6.737	1.026	1.039	0.565
	d (%)	<i>100</i>	/	<i>95.85</i>	<i>98.86</i>	<i>99</i>	<i>99.9</i>	<i>101.7</i>
45	наши	0.267	1.360	0.379	6.560	1.106	1.055	0.555
	White et al.	0.265	-1.374	0.316	6.632	1.044	1.068	0.561
	d (%)	<i>100.8</i>	/	<i>119.9</i>	<i>98.9</i>	<i>105.9</i>	<i>98.8</i>	<i>98.9</i>
60	наши	0.264	1.656	0.332	6.430	0.984	1.072	0.527
	White et al.	0.264	-1.714	0.284	6.520	1.065	1.101	0.558
	d (%)	<i>100</i>	/	<i>116.9</i>	<i>98.62</i>	<i>92.39</i>	<i>97.36</i>	<i>94.4</i>
90	наши	0.262	2.051	-0.041	6.330	1.089	1.092	0.557
	White et al.	0.262	-2.020	0	6.401	1.093	1.137	0.555
	d (%)	<i>100</i>	/	/	<i>98.9</i>	<i>99.6</i>	<i>96</i>	<i>100.4</i>

б) $B/N = 200$ Hz

β (°)	autori	$\langle E \rangle$ (eV)	W_x (10^4 m/s)	W_y (10^4 m/s)	W_z (10^4 m/s)	nD_x (10^{24} 1/ms)	nD_y (10^{24} 1/ms)	nD_z (10^{24} 1/ms)
0	наши	0.269	0.0277	0.0024	6.786	0.378	0.333	0.578
	White et al.	0.269	0	0	6.838	0.383	0.383	0.569
	d (%)	100	/	/	99.24	98.7	86.9	101.6
30	наши	0.257	1.678	1.873	6.042	0.366	0.461	0.531
	White et al.	0.257	-1.699	1.872	6.109	0.369	0.472	0.517
	d (%)	100	/	100.1	98.9	99.2	97.6	102.7
45	наши	0.243	2.477	2.423	5.229	0.358	0.610	0.477
	White et al.	0.242	-2.517	2.423	5.253	0.353	0.584	0.459
	d (%)	100.4	/	100	99.5	101.4	104.4	103.9
60	наши	0.221	3.264	2.422	4.121	0.352	0.744	0.341
	White et al.	0.221	-3.277	2.465	4.186	0.330	0.741	0.392
	d (%)	100	/	98.2	98.4	106.6	100.4	87
90	наши	0.181	4.177	0.0003	2.545	0.315	1.115	0.318
	White et al.	0.181	-4.208	0	2.573	0.295	1.129	0.323
	d (%)	100.1	/	/	98.9	106.7	98.8	98.5

нема процеса јонизације, односно када су урачунати само конзервативни процеси – еластични судари и побуђивање. У случају $F = 0.5$ ефективни пресек за јонизацију и ексцитацију су једнаки, а ако је $F = 1$ нема процеса ексцитације.

Ефективни пресек за еластично расејање је обрнуто пропорционалан квадратном корену енергије електрона:

$$\sigma_e = 4E^{-1/2} \cdot 10^{-16} \text{ cm}^2 . \quad (4.3)$$

Процеси нееластичног расејања су дефинисани пресеком:

$$\sigma_n = \begin{cases} 0, & E \leq 15.6 \text{ eV} \\ (1 - F)(E - 15.6) \cdot 10^{-17} \text{ cm}^2, & E > 15.6 \text{ eV} \end{cases} \quad (4.4)$$

Као и за Реидов моделни гас, расејање електрона на молекулима гаса, који су у непобуђеном стању, је изотропно. Однос масе електрона и молекула Лукас-Сејлијевог гаса је $\frac{m}{M} = 0.001$.

У табели 4.2 су приказани резултати наше симулације за транспорт електрона кроз Лукас-Сејлијев гас за редуковано електрично поље од 10 Td који су упоређени са вредностима које су добили Нолан и сарадници (Nolan et al. 1997) употребом Монте Карло симулације. Нолан и сарадници су показали да се њихови резултати одлично слажу са резултатима које су Нес и Робсон добили решавањем Болцманове једначине (Ness and Robson 1986).

Поређење транспортних величина у присуству магнетног поља за различите вредности угла између електричног и магнетног поља са вредностима у раду (Dujko et al. 2010) су дата графичким приказима у прилогу А.

3) Модел захвата електрона (Нес-Робсон модел)

За тестирање процеса захвата електрона од стране молекула коришћен је модификована верзија (Nolan et al. 1997) Нес-Робсоновог модела, која поред оригиналних карактеристика садржи ефективне пресеке за нееластичне сударне процесе и јонизационе процесе. Својства овог гаса су следећа:

- број честица у систему се не одржава
- однос масе електрона и молекула Ness-Robson - овог гаса $\frac{m}{M} = 0.001$
- ефективни пресек за еластично расејање:

$$\sigma_e = 4E^{-1/2} \cdot 10^{-16} \text{ cm}^2 ; \quad (4.5)$$

- ефективни пресек за нееластично расејање и ефективни пресек за јонизацију:

$$\sigma_n = \begin{cases} 0, & E < 15.6 \text{ eV} \\ 0.1 \cdot (1 - F)(E - 15.6) \cdot 10^{-16} \text{ cm}^2, & E \geq 15.6 \text{ eV} \end{cases}, \quad (4.6)$$

Табела 4.2: Поређење транспортних параметара наше симулације и резултата добијених симулацијом (Nolan et al. 1997; Raspovović et al. 1999) у Лукас – Сејлијевом гасу у електричном пољу за $E/N = 10 \text{ Td}$, за почетну енергију електрона од 10 eV и концентрацију неутралног гаса од $n = 10^{20} \text{ m}^{-3}$.

F	autori	$\langle E \rangle$ (eV)	W_{zf} (10^4 m/s)	W_{zB} (10^4 m/s)	D_{TF} (10^5 m^2/s)	D_{TB} (10^5 m^2/s)	D_{LF} (10^5 m^2/s)	D_{LB} (10^5 m^2/s)	α (10^3 1/s)
0	наши	5.62	7.26	7.26	2.74	2.75	2.61	2.62	0
	Nolan et al.	5.57	7.32	7.32	2.72	2.72	2.66	2.66	0
	d(%)	100.9	99.2	99.2	100.7	101.1	98.1	98.5	100
	Rasp. et al.	5.57	7.28	7.32	2.71	2.73	2.65	2.64	0
d(%)	100.9	99.7	99.2	101.1	100.7	98.5	99.2	100	
0.5	наши	5.25	7.36	8.55	2.58	2.74	2.56	2.90	1.35
	Nolan et al.	5.22	7.32	8.58	2.55	2.73	2.50	2.87	1.33
	d(%)	100.6	100.5	99.7	101.2	100.4	102.4	101	101.5
	Rasp. et al.	5.22	7.31	8.58	2.56	2.73	2.49	2.85	1.33
d(%)	100.6	100.7	99.7	100.8	100.4	102.8	101.8	101.5	
1	наши	4.95	7.30	9.35	2.40	2.70	2.33	3.06	2.43
	Nolan et al.	4.97	7.32	9.47	2.43	2.72	2.38	2.94	2.42
	d(%)	99.6	99.7	98.7	98.8	99.3	97.9	104.1	100.4
	Rasp. et al.	4.97	7.30	9.51	2.42	2.72	2.37	2.93	2.43
d(%)	99.6	99.7	98.3	99.2	99.3	98.3	104.4	100	

$$\sigma_j = \begin{cases} 0, & E < 15.6 \text{ eV} \\ 0.1 \cdot F \cdot (E - 15.6) \cdot 10^{-16} \text{ cm}^2, & E \geq 15.6 \text{ eV} \end{cases} \quad (4.7)$$

$$\sigma_a = aE^p \cdot 10^{-16} \text{ cm}^2, \quad (4.8)$$

где је поново F број којим се одређује степен учешћа јонизације у симулацији. Тестови захвата нису укључивали јонизацију, тако да је за све случајеве који ће бити приказани $F = 0$. σ_a је ефективни пресек за захват електрона, који зависи од варијабилних параметара a , чији је смисао амплитуда пресека за захват и од параметра p . Задавањем параметра p одређује се начин зависности пресека од кинетичке енергије електрона. У упоредним тестовима укључени су следећи случајеви:

I) $a = 5 \cdot 10^{-4}, p = 0.5$

II) $a = 2 \cdot 10^{-3}, p = -0.5$

III) $a = 8 \cdot 10^{-3}, p = -1$.

У табели 4.3 су приказани резултати добијени за транспорт електрона кроз Нес-Робсонов гас у електричном пољу од 10 Td који су упоређени са вредностима које су добили Нолан и сарадници (Nolan et al. 1997) Монте Карло симулацијом. Нолан и сарадници су показали добро слагање њихових резултата симулације са резултатима добијеним решавањем Болцманове једначине. Као и са претходним моделним гасовима, добијено је слагање резултата са одступањем у оквиру статистичке грешке. Овим тестовима верификовани су делови алгоритма који се користе независно од врсте гаса (било реални или моделни). Тип гаса у програму карактерише се масом молекула у свом саставу, вероватноћама за расејање електрона на тим молекулима и угаоним расподелама расејаних електрона. Испитивање резултата симулације за одређени тип гаса је посебан део тестова, о чему ће бити речи у следећем поглављу.

Табела 4.3: Поређење транспортних параметара за Нес-Робсонов гас у електричном пољу за $E/N = 10 \text{ Td}$, за почетну енергију електрона од 10 eV и концентрацију неутралног гаса од $n = 10^{20} \text{ m}^{-3}$ наше симулације и резултата представљених у радовима (Nolan et al. 1997), (Rasporović et al. 1999) и (Rasporović 1999), добијеним Монте Карло симулацијом.

	аутори	$\langle E \rangle$ (eV)	Wz (10^4 m/s)	WzB (10^4 m/s)	D_{TF} (10^5 m^2/s)	D_{TB} (10^5 m^2/s)	D_{LF} (10^5 m^2/s)	D_{LB} (10^5 m^2/s)	α (10^3 1/s)
I	наши	5.44	7.30	7.00	2.65	2.62	2.57	2.68	-1.65
	Nolan et al.	5.44	7.32	7.02	2.67	2.61	2.61	2.64	-1.62
	d(%)	<i>100</i>	<i>99.7</i>	<i>99.7</i>	<i>99.3</i>	<i>100.4</i>	<i>98.5</i>	<i>101.5</i>	<i>101.9</i>
	Raspor. et al.	5.45	7.30	7.01	2.67	2.63	2.60	2.66	-1.60
	d(%)	<i>99.8</i>	<i>100</i>	<i>99.9</i>	<i>99.3</i>	<i>99.6</i>	<i>98.8</i>	<i>100.8</i>	<i>103.1</i>
II	наши	5.57	7.27	7.24	2.66	2.71	2.78	2.67	-1.23
	Nolan et al.	5.56	7.32	7.32	2.73	2.73	2.66	2.66	-1.19
	d(%)	<i>100.2</i>	<i>99.3</i>	<i>98.9</i>	<i>97.4</i>	<i>99.3</i>	<i>104.5</i>	<i>100.4</i>	<i>103.4</i>
	Raspor. et al.	5.57	7.29	7.34	2.72	2.74	2.65	2.64	-1.17
	d(%)	<i>100</i>	<i>99.7</i>	<i>98.6</i>	<i>97.8</i>	<i>98.9</i>	<i>104.9</i>	<i>101.1</i>	<i>105.1</i>
III	наши	5.75	7.32	7.55	2.74	2.70	2.47	2.27	-2.67
	Nolan et al.	5.73	7.32	7.55	2.79	2.86	2.73	2.64	-2.60
	d(%)	<i>100.3</i>	<i>100</i>	<i>100</i>	<i>98.2</i>	<i>94.4</i>	<i>90.5</i>	<i>86</i>	<i>102.7</i>
	Rasporović	5.73	7.24	7.53	2.78	2.85	2.70	2.64	-2.60
	d(%)	<i>100.3</i>	<i>101.1</i>	<i>100.3</i>	<i>98.6</i>	<i>94.7</i>	<i>91.5</i>	<i>86</i>	<i>102.7</i>

4.2 Поређење симулацијом прорачунатих транспортних параметара електрона у реалним гасовима са експерименталним мерењима

Посебан део пакета програма чини база са скупом ефективних пресека за све релевантне процесе електрон-молекулских судара. Од велике је важности да модел са селектованим скупом пресека добро описује експерименталне услове због чега је неопходно проверити да ли је то случај пре примене програма. У том циљу извршена су поређења добијених резултата зависности одређених транспортних параметара од E/N у атмосфери угљен-моносида, односно азота, са расположивим подацима експерименталних мерења. Величине за које је извршено поређење су *брзина дрифта електрона W , однос лонгитудиналног, односно трансверзалног дифузионог коефицијента и мобилности електрона (D_L/μ , D_T/μ)*. Такође су извршена поређења са експерименталним подацима за *однос првог Таузендовог јонизационог коефицијента и бројчане концентрације молекула гаса α_T/N* , дефинисаног у овом поглављу. Прорачун ових параметара је извршен на основу добијених коефицијената брзине јонизације и резултати ових поређења биће приказани и дискутовани у глави 5.

На овом месту је потребно истаћи да постоје различите врсте теоријских брзина дрифта које се јављају у литератури, чије разлике долазе до изражаја у присуству јонизације и/или захвата. Брзине дрифта су класификоване према одговарајућој експерименталној методи за коју се рачунају, најмање на три врсте: средњу брзину дрифта, брзину дрифта центра масе и брзину дрифта средњег времена пристизања електрона. Наведене брзине дрифта могу се измерити у различитим експериментима.

Средња брзина дрифта је брзина добијена једноставним усредњавањем брзине дрифта електрона у ансамблу:

$$W_v = \left\langle \frac{z}{t} \right\rangle, \quad (4.9)$$

где је z растојање у правцу електричног поља, које је прешао електрон за време t . Добија се мерењима у РТ (енг. Pulse Townsend) типу експеримента у ком се мери

струја између паралелних плоча у функцији времена (Sakai et al. 1977). Вредности које се добијају мерењем W_v одговарају брзини дрефта изолованог ансамбла када се број електрона одржава без обзира на то да ли је присутна јонизација или захват.

Брзина дрефта центра масе W_r (балк брзина дрефта):

$$W_r = \frac{d \langle z \rangle}{dt}, \quad (4.10)$$

добија се као резултат експеримента који користи методу времена прелета, односно у TOF (енг. time-of-flight) типу експеримента (Sakai et al. 1977).

Брзина дрефта средњег времена пристизања електрона W_m , једнака је односу разлике између два положаја у правцу поља и разлике између средњих времена пристизања електрона у те положаје (Tagashira et al. 1977) тј.

$$W_m = \frac{dz}{d \langle t \rangle}. \quad (4.11)$$

Јавља се као резултат експеримента као што је употреба електрода које се састоје од два пара паралелних решетки у простору дрефта електрона (енг. double shutter drift tube). Брзина дрефта се добија из анализе спектра времена пристизања електрона, ATS (енг. arrival time spectra). Иста апаратура са ATS може да се користи за добијање брзине W_r уколико се систем електрода помера да би се забележила просторна расподела у правцу дејства електричног поља (Hasegawa et al. 2009). Величина W_m је повезана са брзином W_r следећом теоријском формулом (Kawaguchi et al. 2014):

$$W_m = W_r - 2(\alpha - \eta)D_l + 3(\alpha - \eta)^2D_3 - \dots, \quad (4.12),$$

где је W_r брзина дрефта центра масе, α – јонизациони коефицијент, η – коефицијент захвата електрона, D_l – лонгитудинални дифузиони коефицијент, D_3 - лонгитудинални дифузиони коефицијент трећег реда:

$$D_3 = \frac{d(\langle z^3 \rangle - 3 \langle z \rangle \langle z^2 \rangle + 2 \langle z \rangle^3)}{6dt}. \quad (4.13)$$

Коришћењем формуле (4.12) са коефицијентима у развоју добијених симулацијом у овом раду прорачунате су брзине W_m .

Уколико нема ни процеса јонизације ни захвата електрона све наведене брзине су једнаке што се може видети из једначине (4.12), $W_m = W_r (= W_v)$. Разлике се јављају кад се број електрона у изолованом ансамблу не одржава. Разлог зашто је са појавом јонизације брзина W_r већа од брзине W_v је у томе што је средња енергија већа на челу ансамбла, где је због тога већа јонизација, што доводи до померања центра масе ансамбла напред (Sakai et al. 1977). Ова промена средњег положаја се не бележи при мерењу W_v , али се манифестује у TOF експерименту. При мерењима вредности W_m се бележи промена која се јавља у средњем времену пристизања електрона.

Такође се могу наћи у разним студијама и друге врсте брзине дрифта, као што су средња брзина у SST (енг. Steady state Townsend) врсти експеримента (W_d), Шлумбомова брзина дрифта (W_{SC}), Фромолдова брзина дрифта (W_{FD}) о којима овде неће бити речи.

Параметри D_L/μ и D_T/μ , где је:

$$\mu = \frac{W}{E} , \quad (4.14)$$

су лонгитудинални дифузни коефицијент (који одговара правцу електричног поља) и трансверзални дифузни коефицијент (у правцу нормалном на електрично поље) редуковани на мобилност електрона μ , добијени у овом раду коришћењем формула:

$$\frac{D_L}{\mu} = \frac{ND_{zB}}{W_{zB}} \cdot \frac{E}{N} \cdot 10^{-21} [V] , \quad (4.15)$$

$$\frac{D_T}{\mu} = \frac{ND_{xB}}{W_{zB}} \cdot \frac{E}{N} \cdot 10^{-21} [V] . \quad (4.16)$$

Величина α_T/N заправо представља однос коефицијента брзине јонизације и брзине дрефта електрона. Наиме, први Таузендов јонизациони коефицијент представља однос сударне фреквенције, ν и брзине дрефта електрона:

$$\alpha_T = \frac{\nu}{W_{zB}} . \quad (4.17)$$

Са друге стране, коефицијент брзине реакције се карактерише као сударна фреквенција по бројчаној концентрацији:

$$k = \frac{\nu}{N} , \quad (4.18)$$

из чега следи:

$$\frac{\alpha_T}{N} = \frac{1}{N} \cdot \frac{\nu}{W_{zB}} , \quad (4.19)$$

односно:

$$\frac{\alpha_T}{N} = \frac{k}{W_{zB}} . \quad (4.20)$$

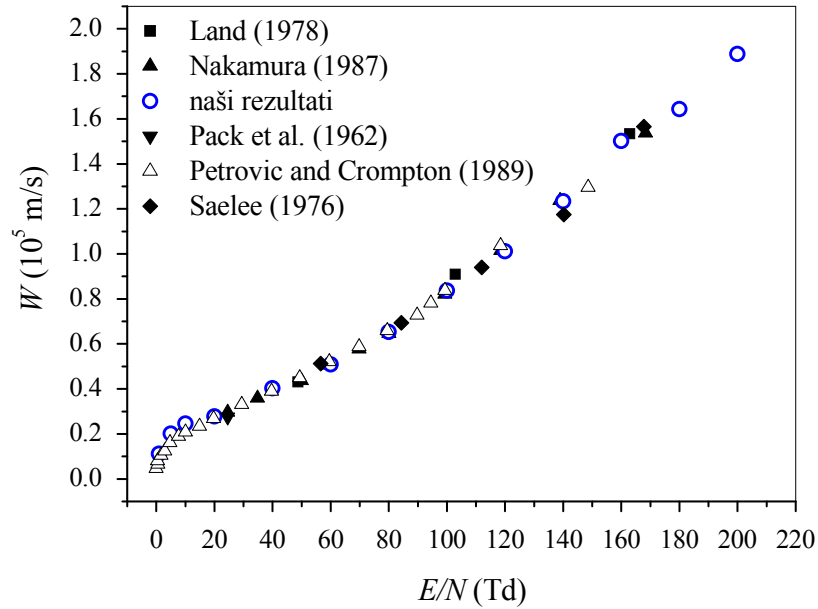
На овај начин добијени су резултати приказани на сликама које следе у 5. глави. Јединица за величину α_T/N је $[m^2]$.

4.2.1 Резултати поређења за угљен-моноксид

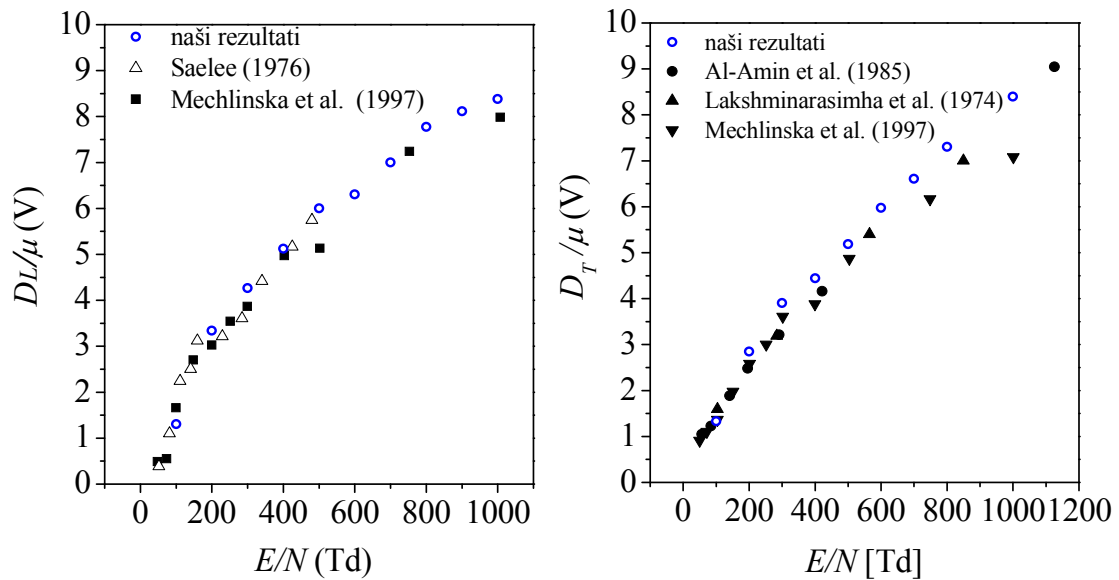
Премда симулација дозвољава рачунање транспортних параметара када је поред електричног присутно и магнетно поље, нису пронађени експериментални подаци за транспорт електрона кроз гас СО у литератури за ове услове, стога су поређења извршена за случај када је присутно само константно електрично поље.

На слици 4.1 приказано је поређење добијених резултата брзине дрефта са експерименталним мерењима у области ниских вредности редукованог електричног поља. Према нашим сазнањима, доступни су експериментални резултати само у области редукованог електричног поља где нема значајног ефекта јонизације. Из тог разлога су за овај гас брзине дрефта на графику означене једноставно са W . На слици 4.2 дата су поређења за величине D_L/μ и

D_T/μ у целом опсегу E/N . Може се видети да је добијено добро слагање са експерименталним резултатима свих аутора.



Слика 4.1: Брзине дрифта електрона као функција E/N за CO гас (Vojnović et al. 2013).



Слика 4.2: Однос лонгитудиналног (лево), односно трансверзалног (десно) дифузионог коефицијента и мобилности електрона у зависности од E/N за CO гас.

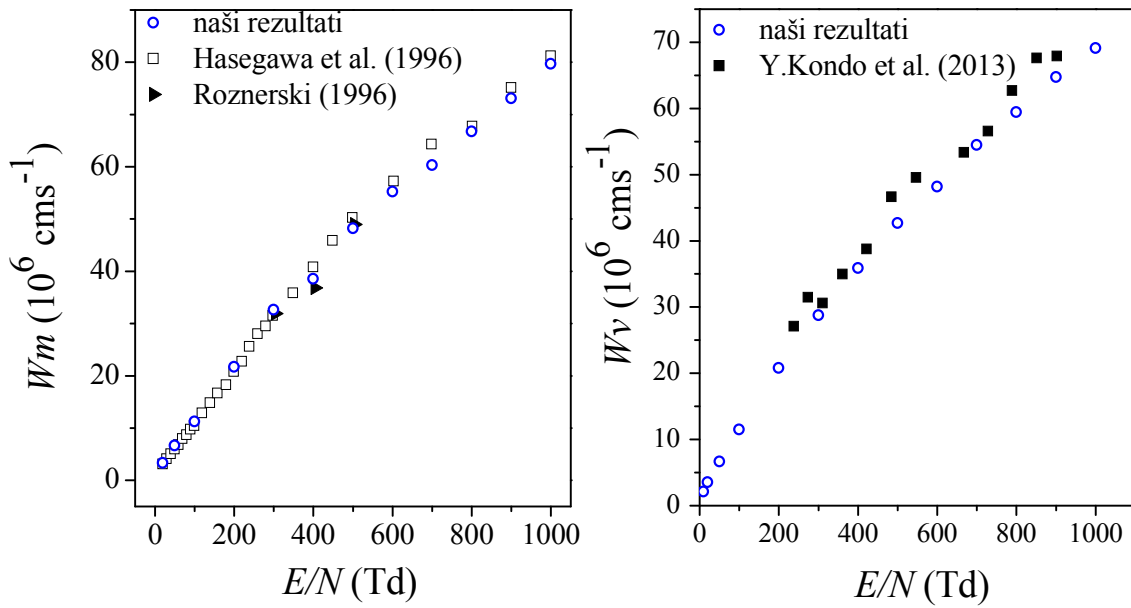
4.2.2 Резултати поређења за азот

За разлику од CO гаса, мноштво експерименталних мерења транспортних параметара је извршено са гасом N_2 . Добијене су брзине дрифта и у области високих вредности E/N у сва три типа експеримената описаних у 4.2. Такође су извршене експерименталне студије у укрштеним електричним и магнетним пољима (Brennan and Garvie 1990; Heylen and Dargan 1973).

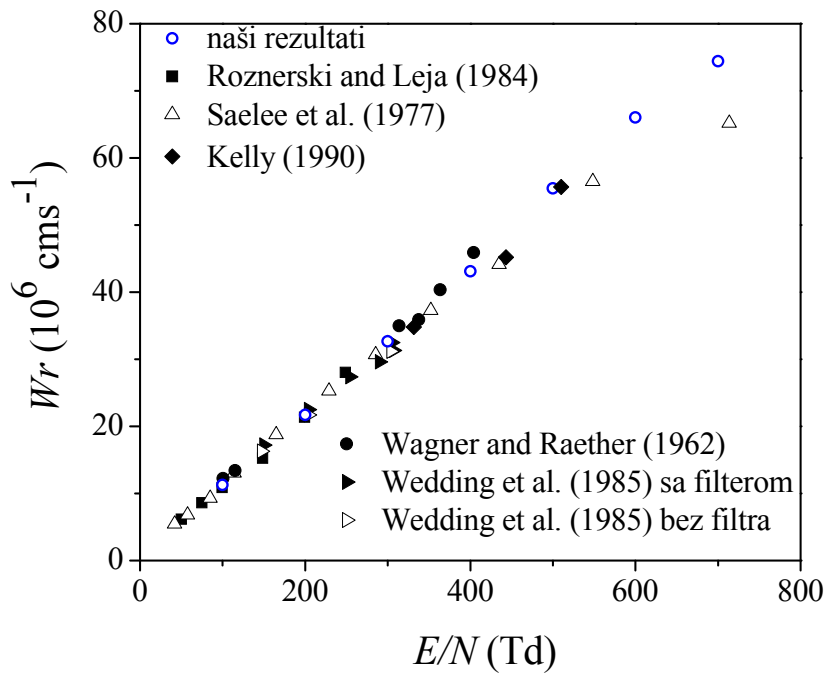
На слици 4.3 су приказани резултати поређења прорачунатих брзина дрифта електрона W_m и W_v у зависности од E/N у интервалу од 10 Td до 1000 Td са подацима W_m из радова (Hasegawa et al. 1996 ; Roznerski 1996) и W_v из РТ експеримента (Kondo et al. 2013). У целом интервалу E/N је упечатљиво добро слагање резултата, нарочито са брзинама W_m које су мерили Хасегава и сарадници. На овим графицима је уочљива разлика у брзинама дрифта које се добијају када се одигравају лавински ефекти. Слика 4.4 приказује поређења брзине дрифта центра масе W_r са резултатима шест различитих експеримената који користе TOF методу, на скали E/N до 800 Td. Слагање са експерименталним подацима је изузетно добро, осим на крају интервала, где одступање са резултатом (Saelee et al. 1977) износи 13%.

Изразито добро слагање је добијено и при поређењу D_L/μ са четири скупа резултата експерименталних мерења (слика 4.5). Добијене вредности за D_T/μ се такође добро слажу са резултатима експерименталних мерења (слика 4.5), изузев у поређењу са вредностима које је добио Рознерски (Roznerski 1996) на високим вредностима E/N , које су за 20 % мање од наших.

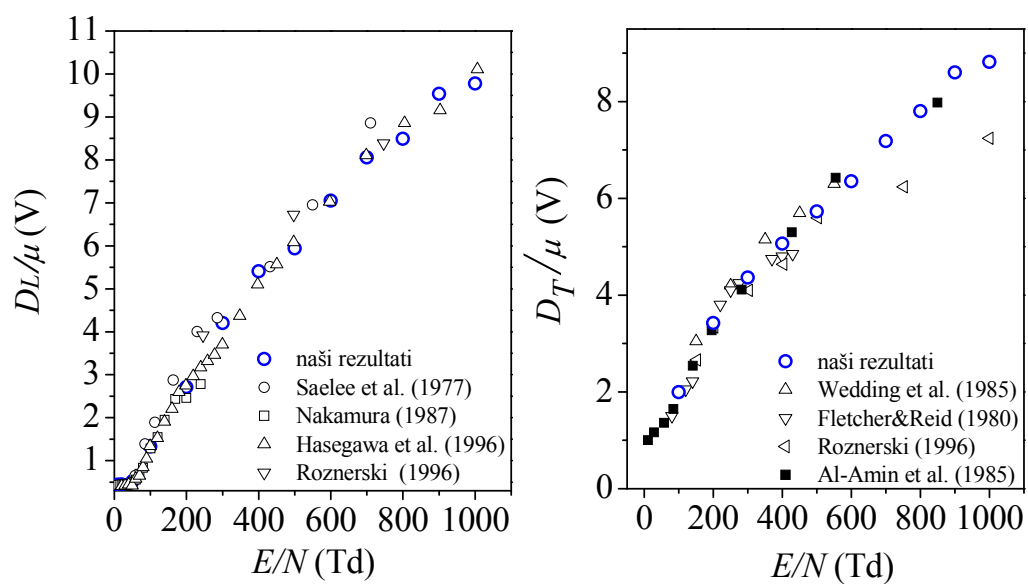
Приказани резултати показују конзистентност наших резултата транспортних параметара са доступним експерименталним подацима за обе врсте гаса, што показује да се са одабраним скупом пресека добија амбијент који одговара реалним условима.



Слика 4.3: Брзине дрифта електрона W_m и W_v у азоту као функција E/N .



Слика 4.4: Брзине дрифта електрона W_r у азоту као функција E/N .



Слика 4.5: Однос лонгитудиналног (лево) и трансверзалног (десно) дифузионог коефицијента и мобилности електрона у зависности од E/N за N_2 гас.

5. Резултати симулације и дискусија

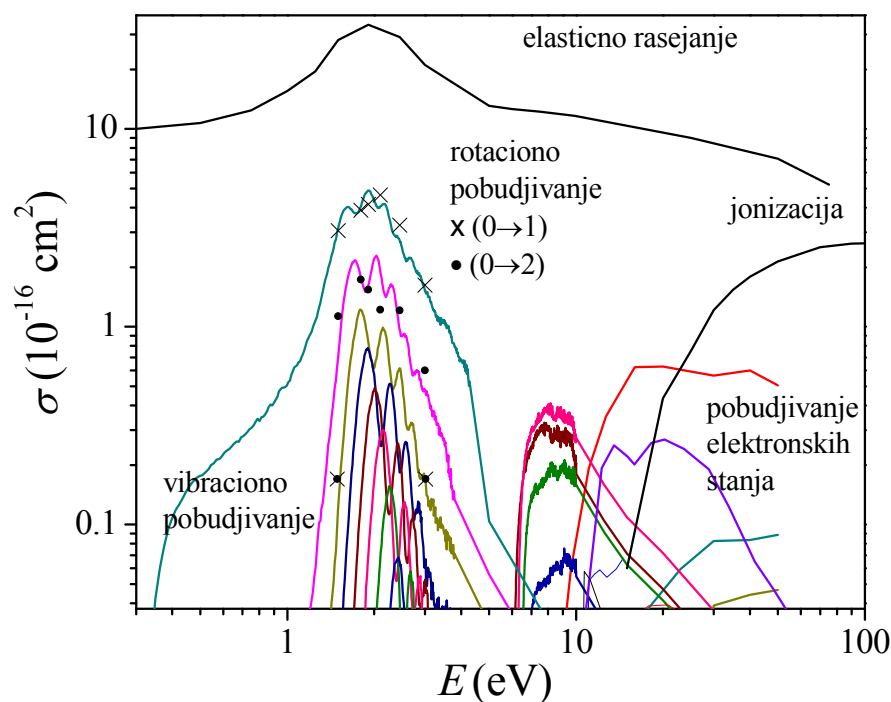
5.1 Молекула угљен-моноксида (CO)

Молекула угљен-моноксида присутан је у атмосфери Земље, Марса и Венере (Barth et al. 1971; Campbell and Brunger 2008; Campbell et al. 2011), али је такође откривен и изван Сунчевог система (Sitko et al. 2008). Значај истраживања судара електрона са молекулима угљен-моноксида се осим у астрофизици налази и у домену технологије плазме, изради и оптимизацији CO гасних ласера и хемијских детектора (Pearson and Hall 1989). Коефицијенти брзине побуђивања и јонизације CO молекула при сударима са електронима у електричним и магнетним пољима налазе примену у моделовању магнетно конфинираних CO гасних ласера (Mao and Chen 1995) и транспорта електрона у астрофизичким плазмама у присуству магнетног поља (Ayres and Rabin 1996).

Последњих година публиковани су и други резултати прорачуна коефицијената брзине побуђивања молекула CO електронима. У истраживању описаном у раду (Riahi et al. 2010) су коришћењем теоријског прорачуна добијени пресеци за електронско побуђивање CO електронима и коефицијенти брзине побуђивања за Максвел-Болцманову расподелу електрона по енергијама. Такође теоријским прорачуном, Лапорта и сарадници (Laporta et al. 2012) су добили резонантне вибрационе и ротационо-вибрационе ефективне пресеке за побуђивање CO електронима и на основу њих одредили коефицијенте брзине вибрационог и резонантног вибрационог (Celibreto et al. 2014) побуђивања угљен-моноксида за Максвел-Болцманову расподелу. За неравнотежан случај, када је присутно само хомогено електрично поље, уз помоћ Монте Карло симулације Ристић и Попарић са сарадницима (Ristić et al. 2007, Poparić et al. 2008) одредили су неравнотежне функције расподеле електрона и коефицијенте брзине побуђивања првих десет вибрационих нивоа молекула CO електронима за ограничену област енергије електрона од 0 eV до 5 eV. На сличан начин је извршен прорачун за побуђивање вибрационог нивоа првог побуђеног електронског стања CO, $a^3\Pi$ стања (Ristić et al. 2012).

Комплетан скуп коефицијената брзине јонизације и коефицијената брзине побуђивања угљен-моноксида електронима у вибрациона, ротациона и електронска стања (синглетна и трилетна) у присуству електричног и магнетног поља израчунат је у опсегу средњих енергија (0 - 17) eV за вредности редукованог електричног E/N и магнетног поља B/N од 20 Td до 1000 Td и од 500 Nх до 3000 Nх, редом (Vojnović et al. 2013). Рачун је извршен и за Максвел-Болцманову и за неравнотежну расподелу електрона по енергијама. Процеси који су третирану у симулацији су еластични судари, нееластични судари, који укључују побуђивање у ротационе, вибрационе и електронске нивое молекула угљен-моноксида и јонизација.

Ефективни пресеци за побуђивање и јонизацију молекула CO у функцији упадне енергије електрона, који су коришћени у овој симулацији и при рачунању коефицијената брзине реакције, приказани су графички (слика 5.1) у интервалу енергије од 0 eV до 100 eV са изворима података у табели 5.1.



Слика 5.1 : Ефективни пресеци за еластично расејање, ротационо, вибрационо, електронско побудживање и јонизацију молекула CO у зависности од енергије електрона.

Табела 5.1: Извори података ефективних пресека за еластичне и нееластичне сударне процесе.

Процес расејања	Побуђено стање	енергија прага (eV)	референце
Еластично расејање	/	0	Allan (2010), Gibson et al. (1996), Gote, Ehrhardt (1995)
Ротационо побуђивање	J=1, J=2	0.00048	Randell et al. (1996), Jung et al. (1982)
Вибрационо побуђивање	$v=k$, $1 \leq k \leq 11$	0.26	Poparić et al. (2006), Allan (2010), Chutijan, Tanaka (1980)
Побуђивање у синглетна електронска стања	$A^1\Pi$	8.03	Liu, Victor (1994), Kato et al. (2007), Anzai et al. (2012)
	$C^1\Sigma^+$ (+ $c^3\Pi$)	11.40	Liu, Victor (1994), Anzai et al. (2012), Kawahara et al. (2008)
	$E^1\Pi$	11.52	Liu, Victor (1994), Anzai et al. (2012), Kawahara et al. (2008)
	$I^1\Sigma^-$	8.00	Liu, Victor (1994)
	$D^1\Delta$	8.11	Liu, Victor (1994)
	$B^1\Sigma^+$	10.78	Poparić (2001)
Побуђивање у триплетна електронска стања	$a^3\Pi$	6.00	Ristić et al. (2011), Zetner et al. (1998), Middleton et al. (1993)
	$b^3\Sigma^+$ (+ $c^3\Pi$)	10.39	Poparić (2001)
	$a^3\Sigma^+$	6.86	Liu, Victor (1994)
	$d^3\Delta$	7.52	Liu, Victor (1994)
	$e^3\Sigma^-$	7.82	Liu, Victor (1994)
јонизација	/	15.00	Mangan et al. (2000)

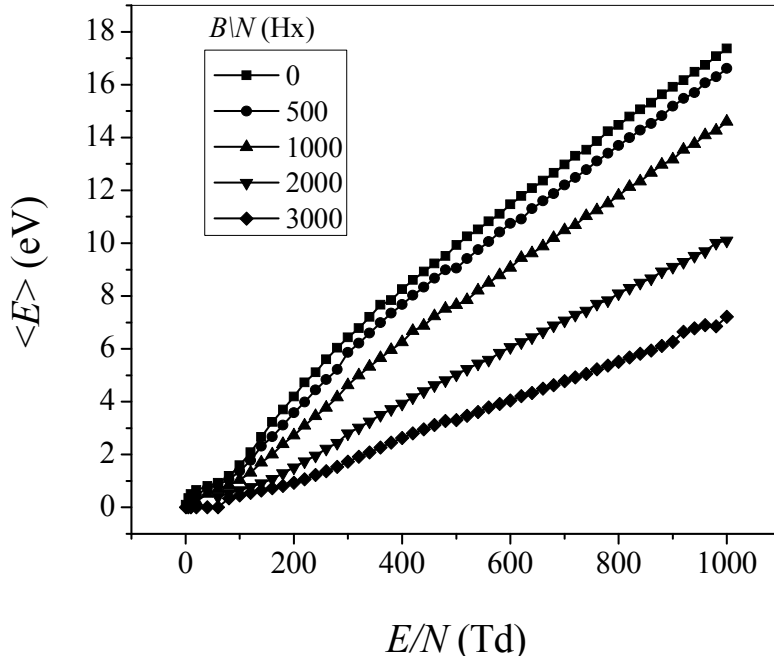
За еластично расејање узети су подаци од Алана (Allan 2010) у области од 0 eV до 5 eV, Гибсона и сарадника (Gibson et al. 1996) у области од 5 eV до 10 eV, док су за енергије веће од 10 eV искоришћени резултати које су одредили Готе и Ерхарт (Gote and Erhardt 1995). Области енергија за које су узети пресеци за остале процесе и методе коришћене за њихово одређивање биће наведени у наредним подобластима.

5.1.1 Средње енергије и функције расподеле електрона по енергијама за молекул угљен-мооксида

График приказан на слици 5.2 показује како се мења средња енергија електрона за различит однос редукованог електричног и магнетног поља. Са порастом вредности јачине електричног поља електрони добијају све већу кинетичку енергију на путу између два судара и средња енергија расте готово линеарно са порастом вредности E/N . Магнетно поље у садејству са електричним пољем на које је ортогонално, чини да се електрон креће по циклоиди. Такво кретање електрона у гасној средини повећава учесталост електрон-молекулских судара. Осим тога, заробљеност електрона линијама силе магнетног поља онемогућава несметано убрзавање електрона под дејством електричног поља што умањује количину енергије коју електрон добија. Овај ефекат познат је под именом „феномен магнетног хлађења“ (White et al. 1999, Dujko et al. 2006). Већа дисипација енергије електрона и успоравање електрона доводе до смањења средње енергије електрона у односу на случај одсуства магнетног поља. Са порастом интензитета магнетног поља овај ефекат је све израженији и као последица средња енергија електрона опада са порастом вредности B/N .

Графици на слици 5.3 приказују промену функције расподеле енергије електрона ЕЕДФ (енг. electron energy distribution function) за различите вредности B/N и E/N . Што је веће магнетно поље све је више спорих електрона, максимум расподеле се помера ка све нижим енергијама у све ужем енергијском интервалу.

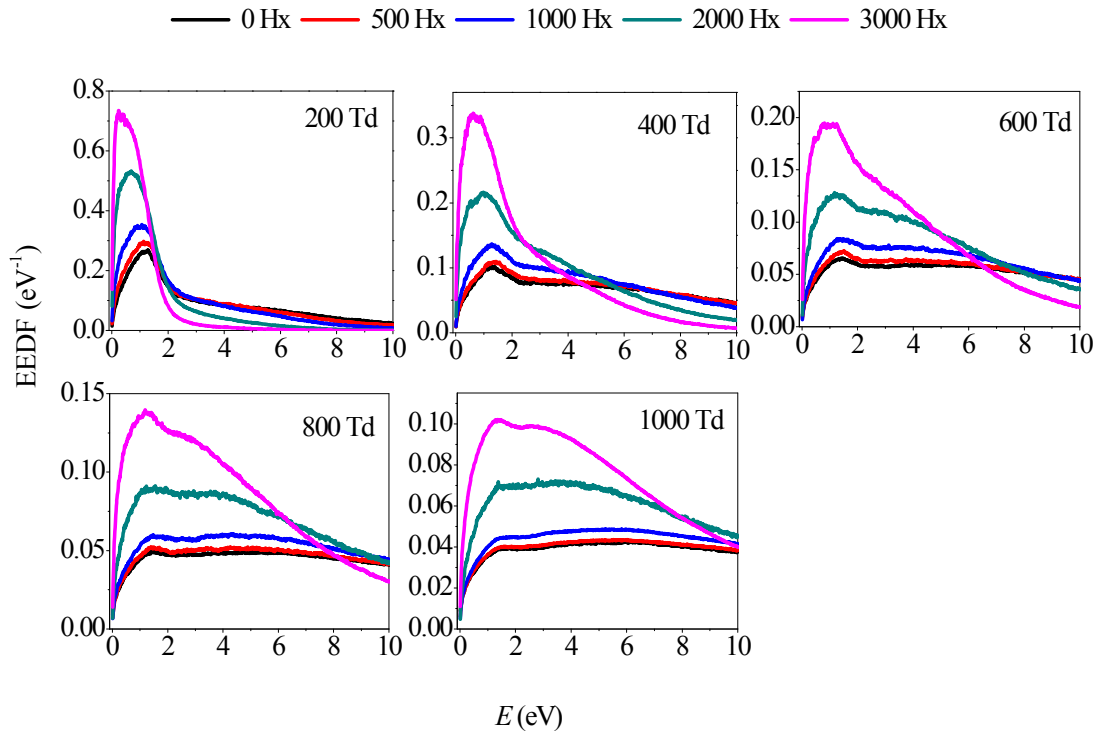
У исто време је све мањи број електрона са високом енергијом, тако да на 200 Td и 3000 Нх скоро да нема електрона са вредношћу енергије већом од 5 eV.



Слика 5.2: Средње енергије електрона у функцији E/N за различито B/N (Vojnović et al. 2013).

Пораст E/N доводи до све већег удела брзих, односно високоенергијских електрона. Уочава се јасно ширење расподеле са порастом вредности E/N . Такво понашање произилази из чињенице да је са порастом средње енергије електрона укључено све више процеса, а тиме електрони након судара остају са различитим вредностима енергије.

На енергијама око 2 eV се у облику функција расподеле јавља удубљење. Ова област енергија одговара енергијама електрона при којим долази до формирања резонанце (Poračić et al. 2008) где је пресек за вибрационо побуђивање велики због чега долази до губитка електрона енергија у том интервалу.



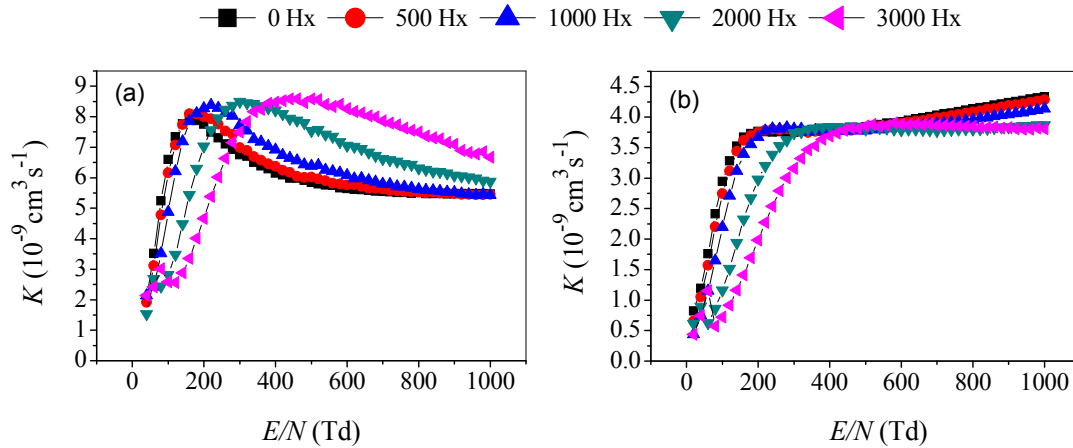
Слика 5.3: Функције расподеле електрона на 200, 400, 600, 800 и 1000 Td у зависности од енергије електрона за различито B/N .

5.1.2 Коефицијенти брзине ротационог побуђивања молекула угљен-моноксида

Ради одређивања коефицијената брзине ротационог побуђивања употребљени су интегрални пресеци за побуђивање молекула CO електронима из основног нивоа у први ротациони ниво у интервалу упадних енергија електрона од 2 meV до 100 meV (Randell et al. 1996), као и у околини формирања резонанце одређених из експеримента са сноповима (Jung et al. 1982) и у други ротациони ниво у околини резонанце (Jung et al. 1982).

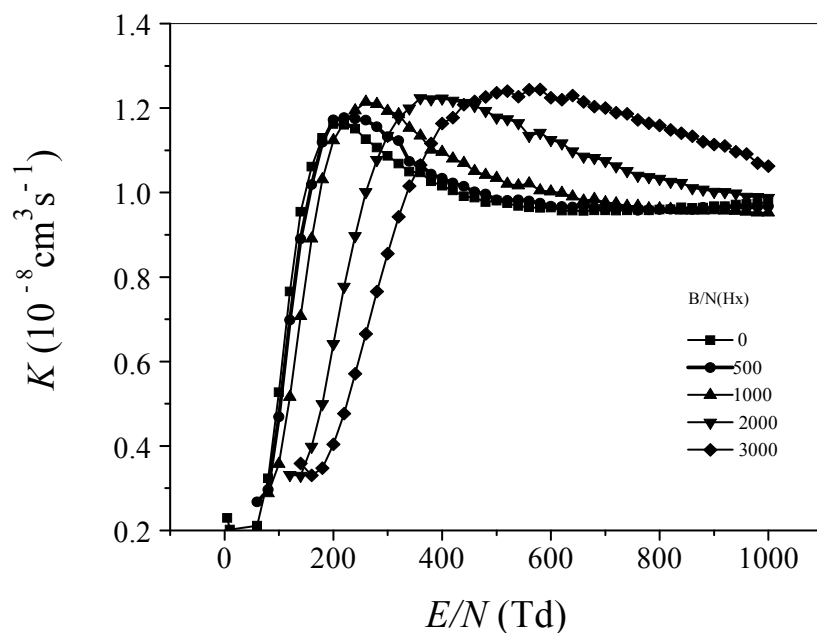
Коефицијенти брзине побуђивања из основног у први и други ротациони ниво су приказани на сликама 5.4 а) и 5.4 б) редом, у зависности од редуковане вредности електричног E/N поља за различите вредности редукованог магнетног поља B/N . На слици 5.4 а) се уочава благи пораст висине и ширине максимума криве, који се помера ка већим вредностима E/N како расте B/N . На слици 5.4 б) се такође истиче померање центра криве ка већим вредностима E/N , односно пад

кофицијената брзине овог процеса побуђивања са порастом B/N до 400 Td, када сви коефицијенти постају приближних вредности све до 600 Td. У даљем смеру пораста E/N коефицијенти брзине побуђивања на 2000 Hx и 3000 Hx остају константне и приближно једнаке, док за остале вредности редукованог магнетног поља расту са смањењем B/N .



Слика 5.4: Коефицијенти брзине побуђивања из $J = 0$ ротационог нивоа у $J = 1$ (а) и у $J = 2$ (б) за различито B/N .

Сабирањем парцијалних коефицијената брзине ротације за ова два процеса добијени су тотални коефицијенти брзине ротације. Њихова зависност од E/N на различитим вредностима B/N је приказана на слици 5.5. Уочава се доминантан допринос побуђивања првог ротационог нивоа у виду померања и пораста максимума са растом B/N . Узрок овом померању је пад средње енергије електрона због повећања магнетног поља, због чега се исте средње енергије за веће вредности B/N постижу на већим вредностима E/N . Максимуми се јављају у области енергија око 2 eV које одговарају процесима побуђивања преко $^2\Pi$ резонанце. Ширење максимума се јавља услед ширења области E/N у којој електрони имају средњу енергију која одговара интервалу енергија за резонантно побуђивање, у присуству магнетног поља. Постепени пораст максимума са порастом B/N произилази из облика функције расподеле електрона – иако је средња енергија скоро иста, популација електрона са енергијама у области максималних интегралних ефективних пресека је већа на већим вредностима B/N .



Слика 5.5: Тотални коефицијенти брзине ротационог побуђивања у зависности од E/N за различито B/N (Vojnović et al. 2013).

5.1.3 Коефицијенти брзине вибрационог побуђивања молекула угљен-моноксида

Попарић и сарадници (Poparić et al. 2006) су измерили функције ексцитације првих 10 вибрационих нивоа унутар основног електронског стања молекула угљен-моноксида преко $^2\Pi$ резонанце. Мерења су извршена на двоструком трохлоидном електронском спектрометру (Vičić et al. 1996) у области енергија електрона од 0 eV до 5 eV. Релативни диференцијални пресеци на 0° и 180° су нормирани на апсолутне пресеке фитовањем података које су добили Гибсон et al. (Gibson et al. 1996) и Попарић и др. (Poparić et al. 2006). Уз помоћ познатих угаоних расподела одредили су интегралне пресеке за вибрационо побуђивање (слика 5.6). Скуп ових пресека је употпуњен новијим резултатима Алана (Allan 2010), који је измерио и интегралне пресеке за побуђивање 11. вибрационог нивоа CO. Интегрални пресеци на већим вредностима енергије електрона су узети из рада (Chutjian and Tanaka 1980). Овај скуп пресека је употребљен за одређивање коефицијената брзине вибрационог побуђивања. У

табели 5.2 су дати прагови за побуђивање првих 11 вибрационих нивоа молекула CO.

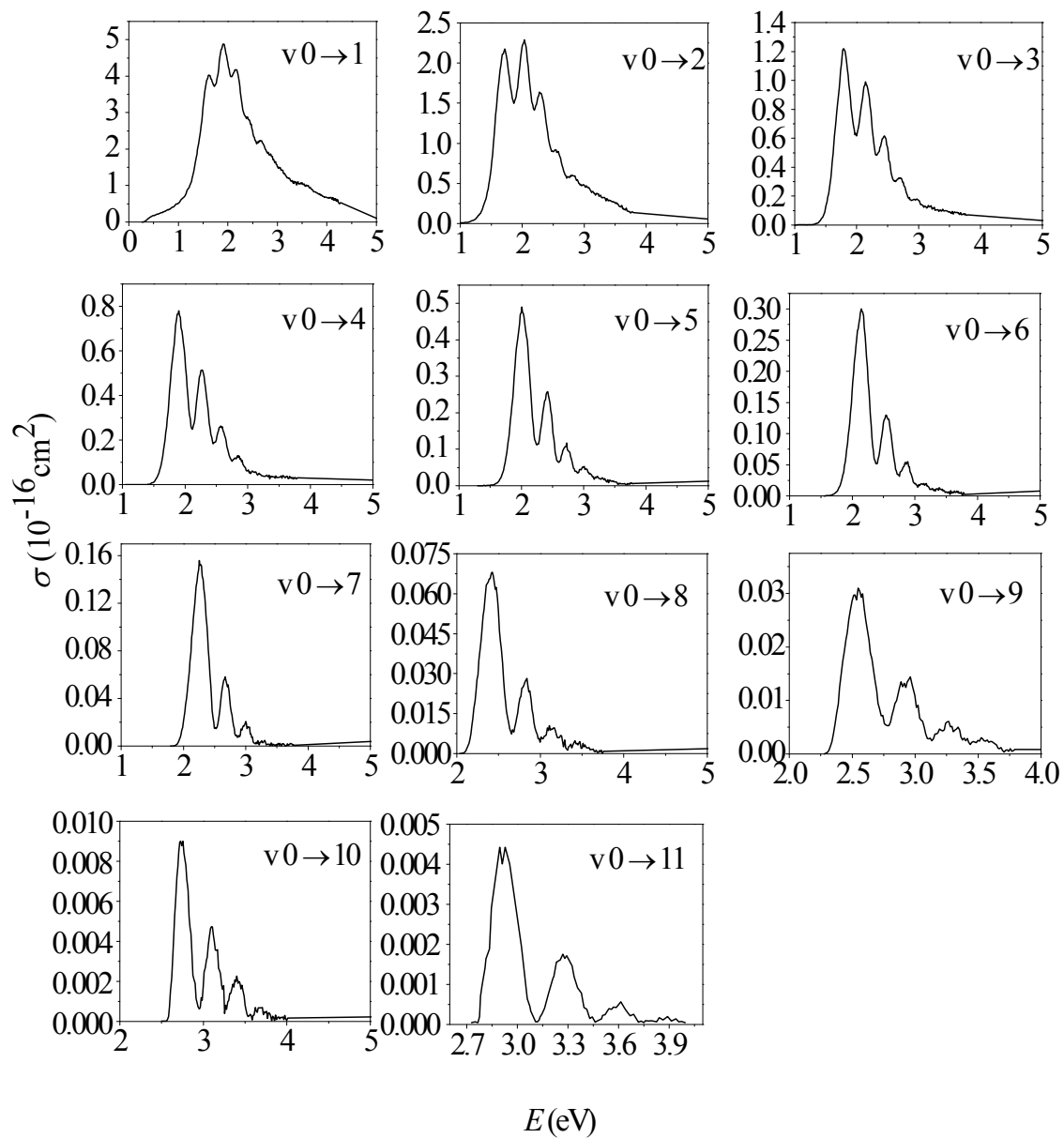
Табела 5.2: Енергије прагова за побуђивање првих 11 нивоа угљен-монооксида.

процес вибрационог побуђивања	енергија прага (eV)	процес вибрационог побуђивања	енергија прага (eV)
$v = 0 \rightarrow v = 1$	0.26428	$v = 0 \rightarrow v = 7$	1.79016
$v = 0 \rightarrow v = 2$	0.52063	$v = 0 \rightarrow v = 8$	2.03430
$v = 0 \rightarrow v = 3$	0.78918	$v = 0 \rightarrow v = 9$	2.27844
$v = 0 \rightarrow v = 4$	1.04553	$v = 0 \rightarrow v = 10$	2.49816
$v = 0 \rightarrow v = 5$	1.29967	$v = 0 \rightarrow v = 11$	2.72853
$v = 0 \rightarrow v = 6$	1.54602	/	/

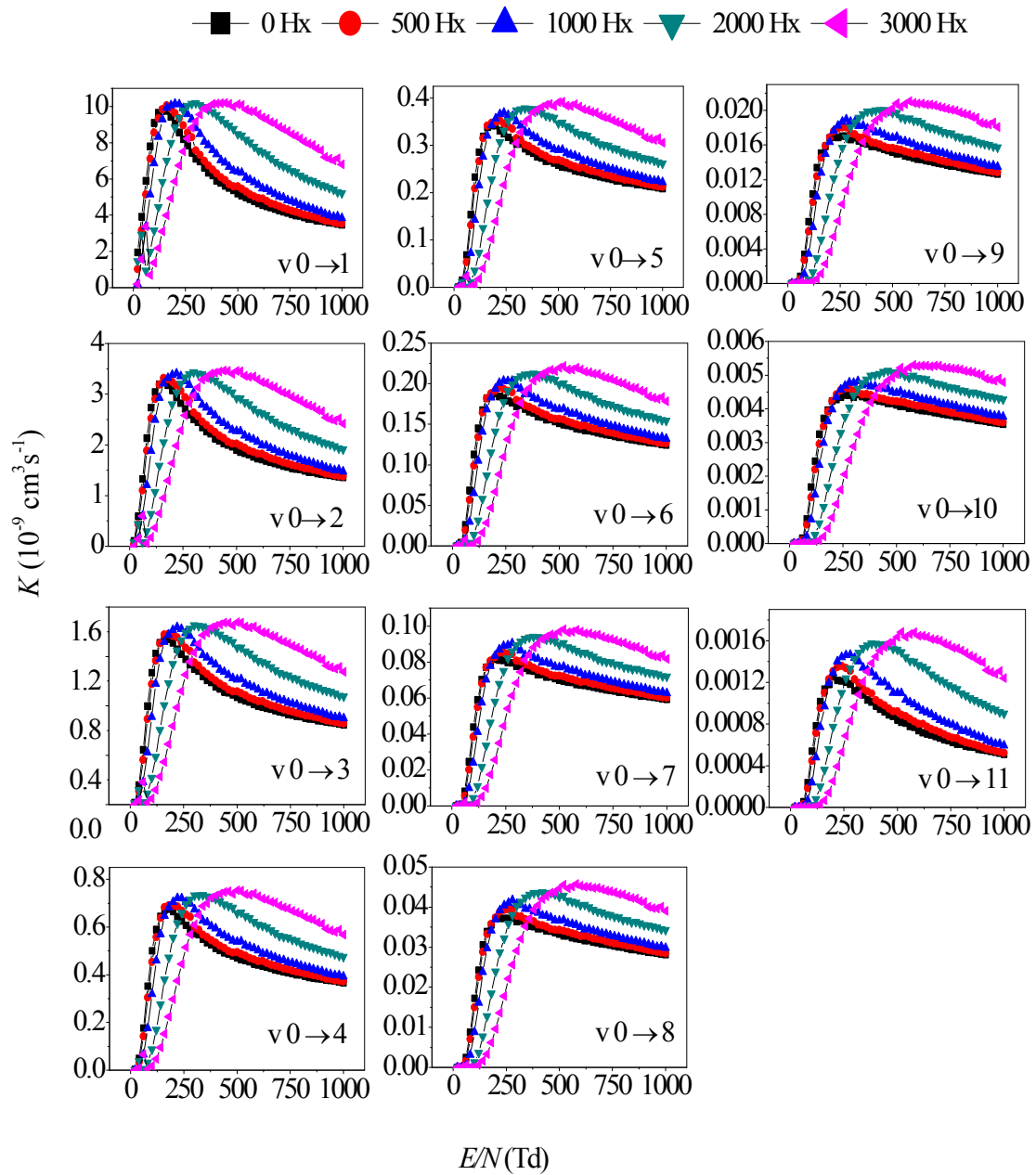
Тотални коефицијенти брзине вибрационог побуђивања су дати у зависности од E/N на различитим вредностима B/N на слици 5.8.

Датом одабиру редукованог електричног и редукованог магнетног поља одговара одређена вредност средње енергије електрона, те се стога ова зависност може свести на зависност коефицијената брзине вибрационог побуђивања од средње енергије електрона. За разлику од функције расподеле електрона по енергијама ефективни пресеци не зависе од средње енергије електрона због чега се добијају глатке криве функције коефицијената брзине побуђивања од средње енергије електрона.

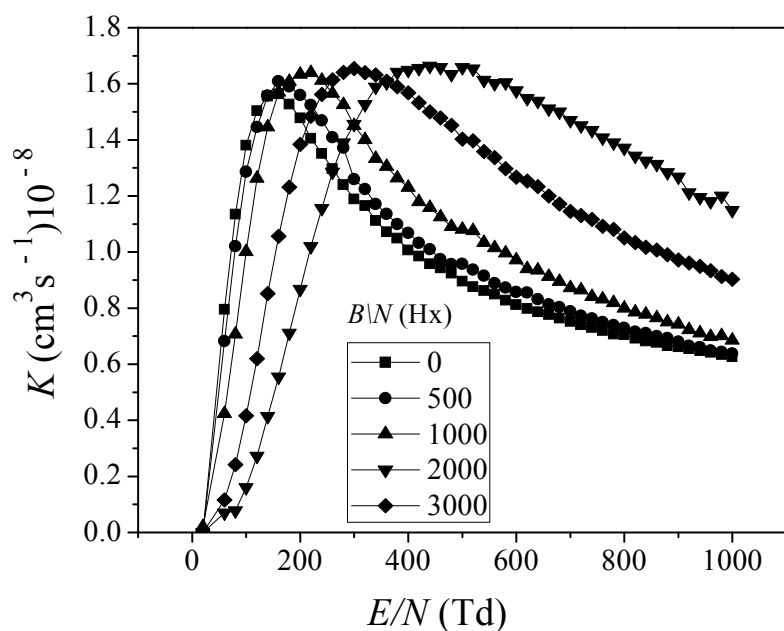
Померање максимума парцијалних коефицијената брзине побуђивања (слика 5.7) се пресликава на тоталне коефицијенте брзине побуђивања. Максимуми се јављају у области енергија око 2 eV које одговарају процесима побуђивања преко 2P резонанце. Као и код ротације, јавља се ширење и постепени пораст максимума из истих разлога.



Слика 5.6: Интегрални ефективни пресеци за вибрационо побуђивање угљен-монооксида (Poparić et al. 2006, Allan 2010).



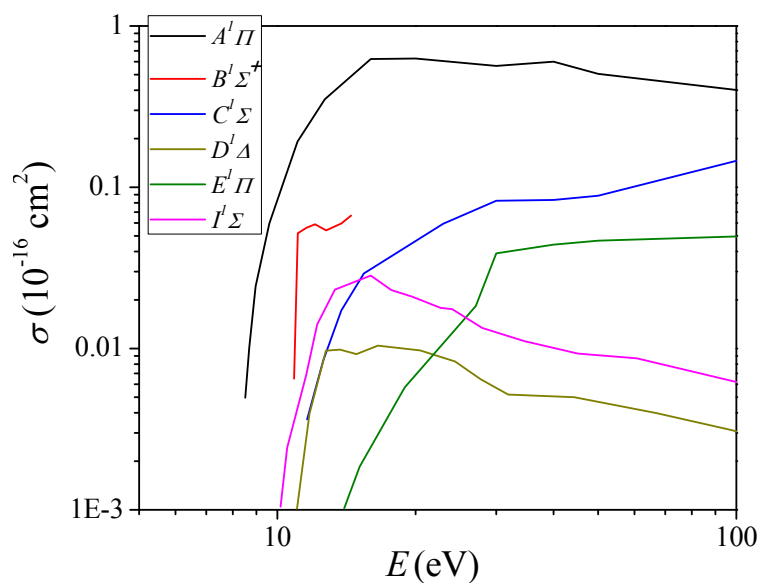
Слика 5.7: Парцијални коефицијенти брзине побуђивања из $v = 0$ вибрационог нивоа у првих 11 вибрационих нивоа у функцији E/N за различито B/N .



Слика 5.8: Тотални коефицијенти брзине вибрационог побуђивања у функцији E/N за различито B/N (Vojnović et al. 2013).

5.1.4 Коефицијенти брзине побуђивања у синглетна електронска стања молекула угљен-моноксида

Пресеци за побуђивање у синглетна електронска стања (слика 5.9) $A^1\Pi$, $C^1\Sigma^+$, $E^1\Pi$, $I^1\Sigma^-$ и $D^1\Delta$ узети из ревијалног рада (Brunger 2002) потичу из извора (Liu and Victor 1994). Пресеци за стање $B^1\Sigma^+$ су измерени на двоструком трохонидном електронском спектрометру (Porarić 2001). За енергије електрона изнад 30 eV узети су новији интегрални пресеци за $A^1\Pi$ стање, које су измерили Като и сарадници (Kato et al. 2007) и за $C^1\Sigma^+$ и $E^1\Pi$ стања од исте групе аутора (Kawahara et al. 2008). Утврђено је (Kawahara et al. 2008) да унутар пресека за стање $C^1\Sigma^+$ постоји допринос триплетног електронског стања $c^3\Pi$. Ова стања због скоро истих енергија аутори нису могли да раздвоје због недовољне раздвојне моћи уређаја. Пресеци за $A^1\Pi$, $C^1\Sigma^+$ и $E^1\Pi$ стања су употпуњени новијим скупом података, који су нађени у раду (Anzai et al. 2012).

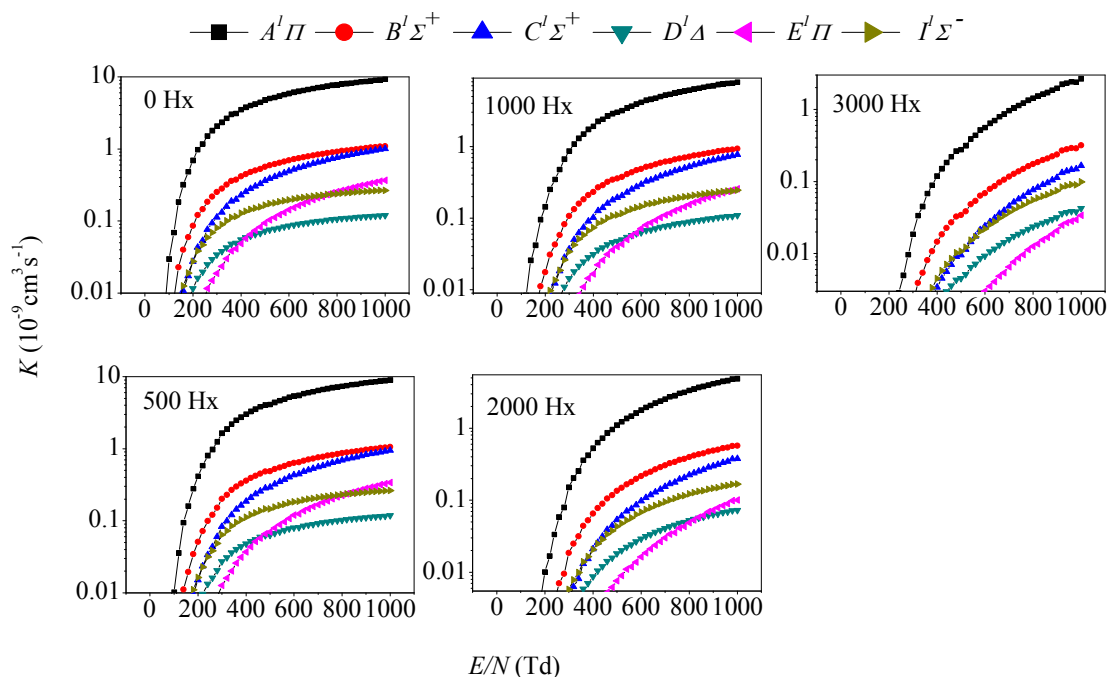


Слика 5.9: Ефективни пресеци за побуђивање у синглетна електронска стања.

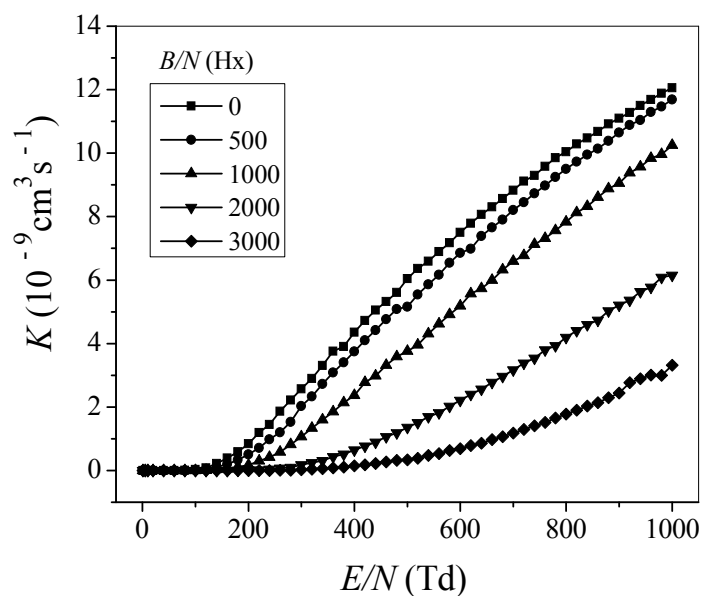
На слици 5.10 приказани су графици коефицијената брзине побуђивања молекула угљен-моноксида у синглетна електронска стања у зависности од E/N и B/N . Ради пружања јаснијег увида у динамику ових процеса, коефицијенти брзине побуђивања су приказани на логаритамској скали. На свим вредностима B/N најдоминантнији је процес побуђивања у $A^1\Pi$ стање, за који је и пресек највећи. Следећи преовлађујући процеси су побуђивање у $B^1\Sigma^+$ стање, за којим следи допринос побуђивања $C^1\Sigma^+$ стања. Тотални коефицијенти брзине ексцитације синглетних електронских стања у зависности од E/N и B/N приказани су на слици 5.11. Приметан је веома брз пад коефицијената са порастом B/N , јер све мањи број електрона има довољну енергију за праг процеса побуђивања синглетних електронских стања, који износи 8.03 eV.

За разлику од коефицијената ротационог и вибрационог побуђивања молекула CO, код коефицијената брзине побуђивања синглетних електронских стања нема појаве максимума. Прагови за ротационо и вибрационо побуђивање су веома ниски (0.00048 eV и 0.26 eV, редом) док процеси побуђивања синглетних електронских стања почињу на вредности енергије упадног електрона од 8 eV. Област пресека обухваћена је највише високоенергијским репом расподеле који је

утолико већи што је већа вредност редукованог електричног поља. Исто важи за све остале процесе који ће бити разматрани у следећим поглављима.



Слика 5.10: Парцијални коефицијенти брзине побуђивања у синглетна електронска стања $A^1\Pi$, $B^1\Sigma^+$, $C^1\Sigma^+$, D^1d , $E^1\Pi$, $I^1\Sigma^-$ у функцији E/N за различито B/N .



Слика 5.11: Тотални коефицијенти брзине побуђивања у синглетна електронска стања у функцији E/N за различито B/N (Vojnović et al. 2013).

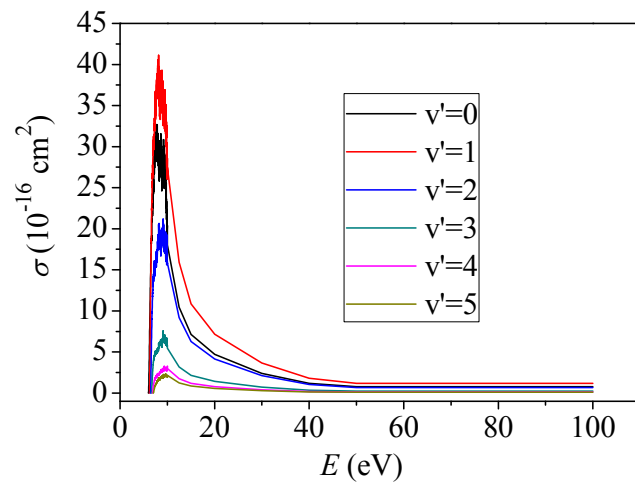
5.1.5 Коефицијенти брзине побуђивања у триплетна електронска стања молекула угљен-моноксида

Уз помоћ експериментално измерених функција ексцитације првих пет вибрационих нивоа најнижег електронског стања угљен-моноксида, a^3P стања, на трохоидном електронском спектрометру (Vičić et al. 1998), Ристић и сарадници (Ristić et al. 2012) су одредили апсолутне вредности интегралних ефективних пресека за побуђивање сваког од ових вибрационих нивоа a^3P стања за енергије електрона од 0 eV до 10 eV. Експериментално измерене вредности тоталних интегралних пресека за вредности енергије електрона од 12.5 eV и 15 eV су преузете из рада (Zetner et al. 1998), док су за енергије електрона од 20, 30, 40 и 50 eV употребљени интегрални пресеци добијени преко измерених диференцијалних пресека из рада (Middleton et al. 1993). Ови тотални интегрални пресеци за побуђивање a^3P стања су раздвојени у парцијалне доприносе за побуђивање сваког од вибрационих нивоа (слика 5.12).

У табели 5.3 су дати прагови за побуђивање сваког од шест вибрационих нивоа a^3P стања.

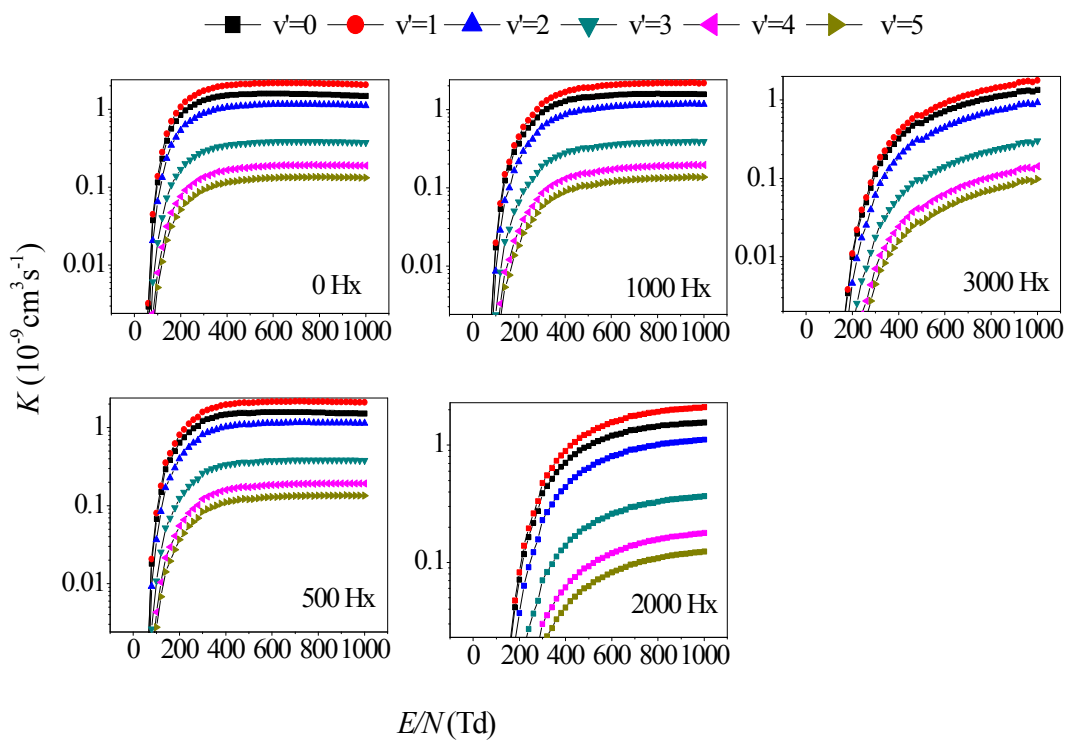
Табела 5.3: Енергије прагова за побуђивање шест вибрационих нивоа триплетног електронског стања угљен-моноксида.

стање	енергија прага (eV)
$v^{\prime}=0$	6.00195
$v^{\prime}=1$	6.21385
$v^{\prime}=2$	6.42195
$v^{\prime}=3$	6.62695
$v^{\prime}=4$	6.82795
$v^{\prime}=5$	7.02595



Слика 5.12: Ефективни пресеци за побуђивање $a^3\Pi$ стања молекула угљен-монооксида.

Парцијални коефицијенти брзине ексцитације вибрационих нивоа $a^3\Pi$ стања у функцији E/N на различитим вредностима B/N су приказани на слици 5.13.

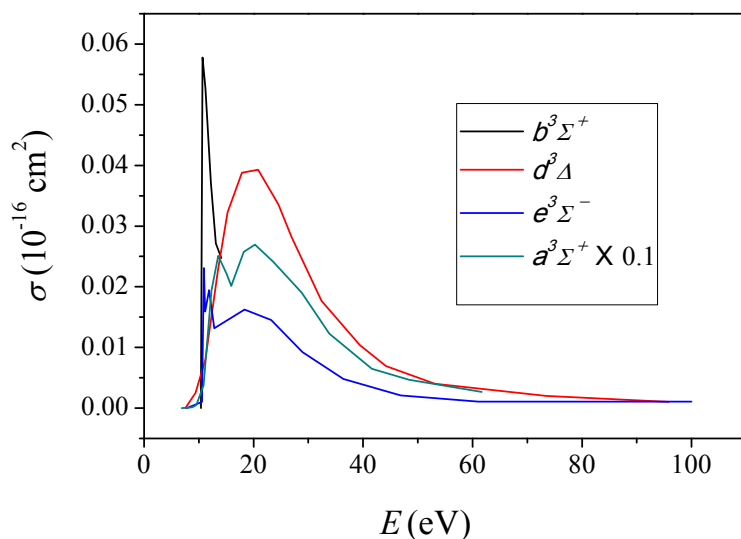


Слика 5.13: Парцијални коефицијенти брзине побуђивања у триплетна електронска стања $a^3\Pi_1$, $a^3\Pi_2$, $a^3\Pi_3$, $a^3\Pi_4$, $a^3\Pi_5$, $a^3\Pi_6$ у функцији E/N за различито B/N .

Већи допринос побуђивања првог од нултог $a^3\Pi$ стања произилази из већег пресека за побуђивање првог стања (слика 5.12). Ово је директна последица Франк-Кондоновог принципа. Редослед доприноса побуђивања осталих вибрационих нивоа креће од другог нивоа ка последњем, петом вибрационом нивоу.

Интегрални пресеци (слика 5.14) за $b^3\Sigma^+$ стање су узети из докторске дисертације (Роратић 2001). Подаци за стања $a^3\Sigma^+$, $d^3\Delta$ и $e^3\Sigma^-$ која потичу из (Liu and Victor 1994) су преузета из ревијалног рада (Brunger 2002).

На слици 5.15 су дати коефицијенти брзине побуђивања ових стања заједно са тоталним коефицијентима брзине ексцитације $a^3\Pi$ стања (добијеним сабирањем коефицијената брзине побуђивања за све појединачне вибрационе нивое овог електронског стања) у функцији E/N на различитим вредностима B/N .

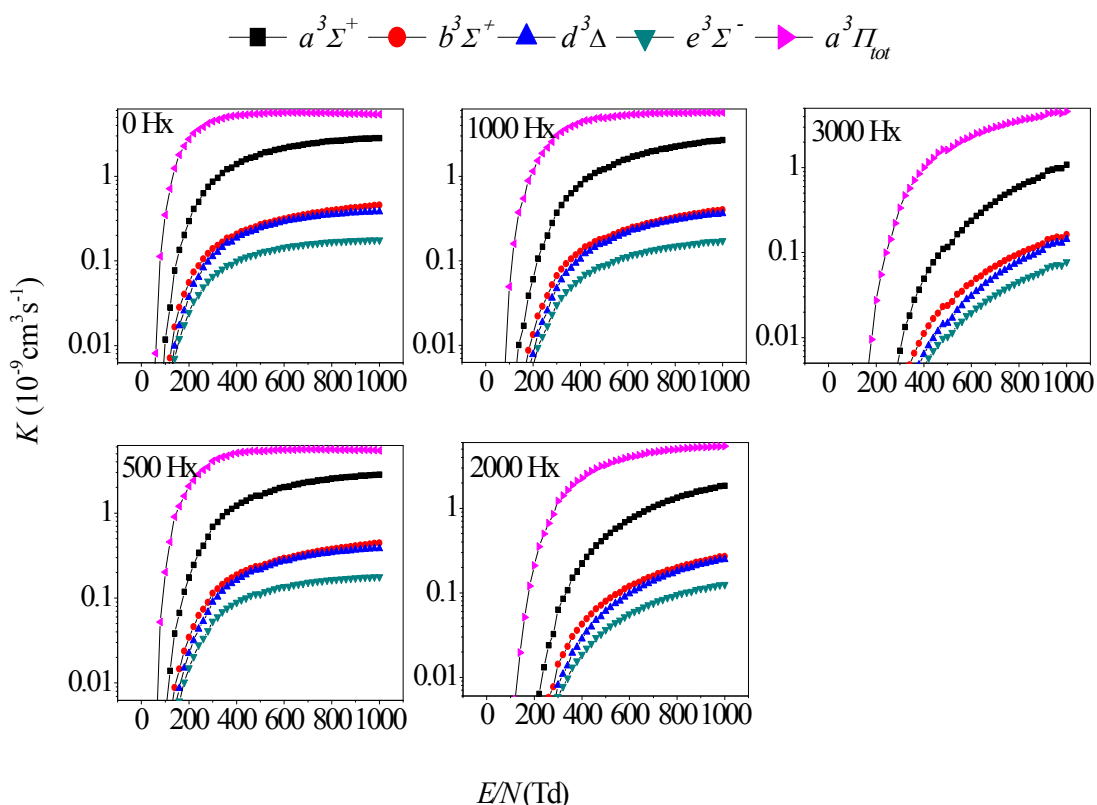


Слика 5.14: Ефективни пресеци за побуђивање у триплетна електронска стања ($a^3\Sigma^+$, $d^3\Delta$ и $e^3\Sigma^-$, $b^3\Sigma^+$).

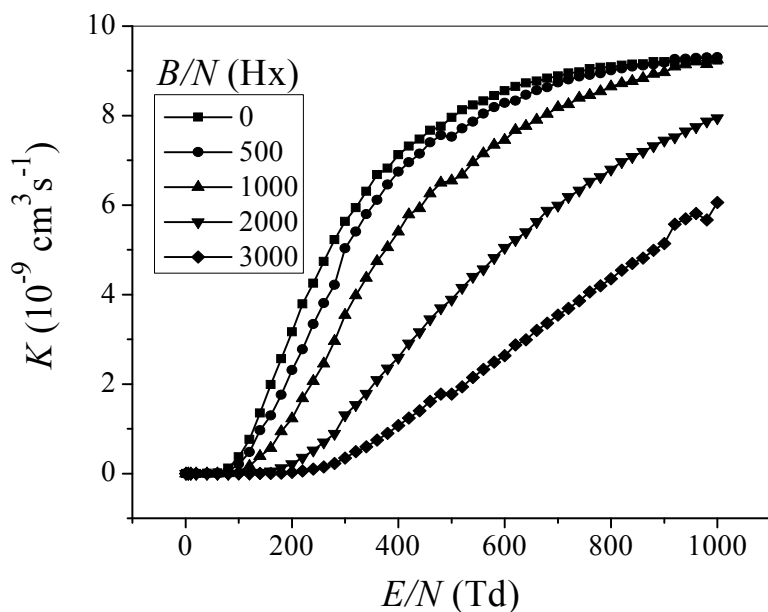
Највећи допринос побуђивању триплетних електронских стања молекула угљен-моноксида има $a^3\Pi$ стање, које има највећи интегрални пресек и најнижу енергију прага. Следи побуђивање $a^3\Sigma^+$ стања, затим слабији и скоро подједнак допринос ексцитације $b^3\Sigma^+$ и $d^3\Delta$ стања, док најмањи учинак има побуђивање $e^3\Sigma^-$ стања. Са повећањем утицаја магнетног поља коефицијенти брзине ексцитације опадају, а почетак одигравања побуђивања се помера ка већим

вредностима E/N , тако да на 3000 Hx побуђивање стања са највећим доприносом почиње тек на 200 Td.

Збир свих коефицијената брзине екситације наведених триплетних електронских стања резултује тоталним коефицијентима брзине побуђивања молекула CO у триплетна стања. Зависност ових тоталних коефицијената брзине екситације од E/N на различитим вредностима B/N је дата на слици 5.16. Као и код синглетних електронских стања, вредности коефицијената брзине побуђивања брзо опадају са повећањем B/N јер све мањи број електрона има довољну енергију за праг процеса побуђивања триплетних електронских стања, који је на 6 eV. Укључење магнетног поља ($B/N = 500$ Hx) има слаб утицај на промене вредности коефицијената брзине побуђивања у односу на случај када је присутно само електрично поље на већим вредностима E/N .



Слика 5.15: Парцијални коефицијенти брзине реакције побуђивања у триплетна електронска стања $a^3\Sigma^+$, $b^3\Sigma^+$ ($+c^3\Pi$), $d^3\Delta$, $e^3\Sigma^-$, $a^3\Pi_{tot}$ у функцији E/N за различито B/N .



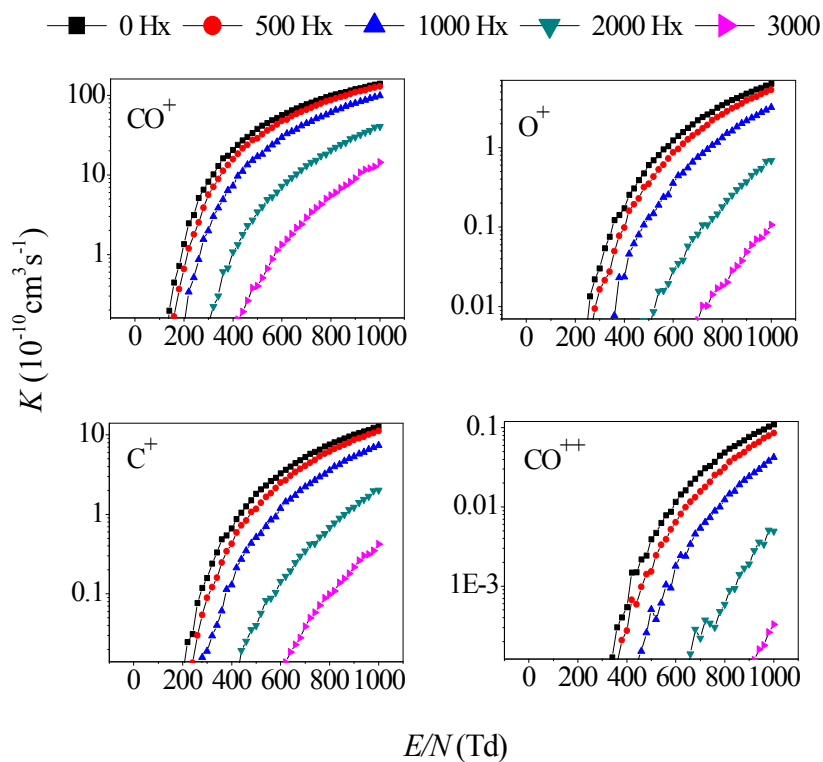
Слика 5.16: Тотални коефицијенти брзине побуђивања у триплетна електронска стања у функцији E/N за различито B/N (Vojnović et al. 2013).

5.1.6 Коефицијенти брзине јонизације молекула угљен-моноксида

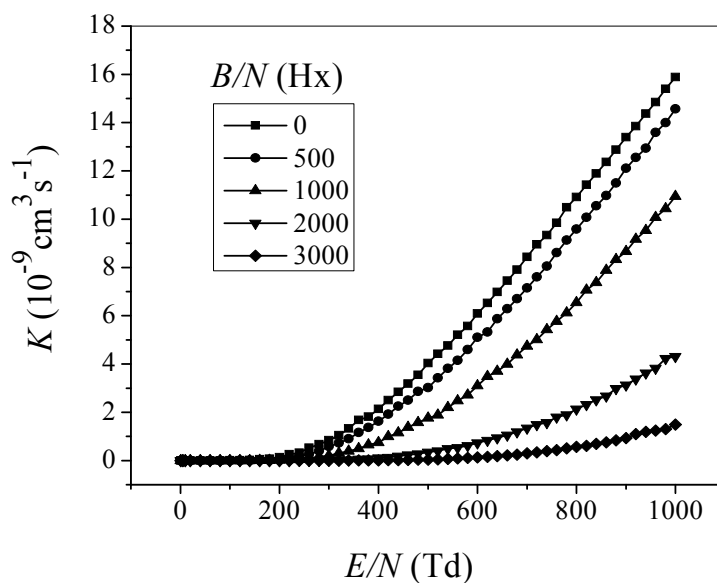
Парцијални и тотални интегрални пресеци за јонизацију угљен-моноксида електронима су узети из рада (Mangan et al. 2000). Манган и сарадници су одредили ове пресеке директним мерењем свих потребних величина за одређивање апсолутних парцијалних пресека за стварање CO^+ , C^+ , O^+ и CO^{2+} јона, на енергијама упадних електрона од прага до 1000 eV, са масеним спектрометром који користи технику времена прелета и детектором са великом ефикасношћу детекције.

На слици 5.17 су представљени коефицијенти брзине стварања наведених јона у зависности од E/N и B/N . Парцијални доприноси су представљени на логаритамској скали ради боље видљивости најмање заступљених процеса. Преовлађујући процес је стварање CO^+ , који је праћен стварањем C^+ и O^+ јона, док је процес стварања CO^{2+} јона готово занемарљив. Доприност свих процеса опада са порастом B/N . Почетак одигравања процеса јонизације се у односу на све претходно размотрене процесе помера најдаље на скали E/N јер је енергија прага упадних електрона за јонизацију већа од прагова за ротациону, вибрациону и

електронску екситацију. График тоталне зависности коефицијента брзине јонизације од E/N (слика 5.18) показује драстичан пад са повећањем B/N . У одсуству магнетног поља процес јонизације почиње на 200 Td, док се за највећу



Слика 5.17: Парцијални коефицијенти брзине јонизације у функцији E/N за различито B/N

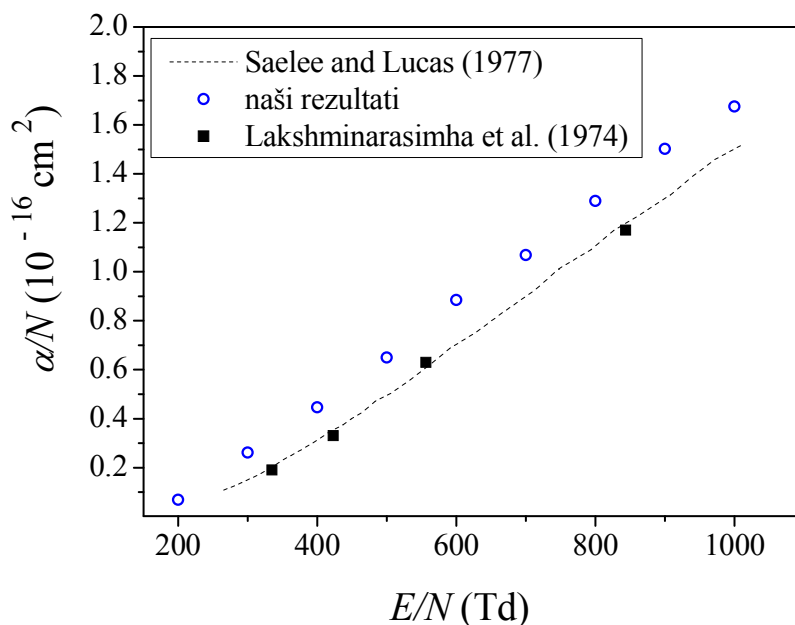


Слика 5.18: Тотални коефицијенти брзине јонизације у функцији E/N за различито B/N (Vojnović et al. 2013).

вредност магнетног поља почетак одигравања овог процеса помера на 600 Td.

Прорачуном односа тоталних коефицијената брзине јонизације и брзине дрифта електрона W_T , приказаних у 4.2.2, израчунат је однос јонизационих коефицијената и бројчане концентрације молекула угљен-моноксида $\frac{\alpha_T}{N}$. Добијени резултати су упоређени са експериментално измереним вредностима које су добили Лакшминарасима и сарадници (Lakshminarasimha et al. 1974) и са вредностима које су Сејли и Лукас (Saelee and Lucas 1977) добили симулацијом. Резултати поређења су приказани функцији E/N на слици 5.19.

Наше вредности јонизационих коефицијената су приметно веће од вредности које су добиле ове две групе аутора у целом опсегу редукованог електричног поља. Процењена неодређеност прорачуна наше симулације од 3%



Слика 5.19: Однос јонизационог коефицијента и бројчане концентрације као функција E/N за CO гас.

не може да стоји иза неслагања са подацима ових аутора. Слагања брзине дрифта електрона и дифузионих коефицијената са експерименталним резултатима су потврдила поузданост скупа пресека коришћених у симулацији. Са друге стране, скуп пресека који су користили Сејли и Лукас је садржао само део раније измерених вредности, док је део чинио скуп семиемпиријских пресека, који су

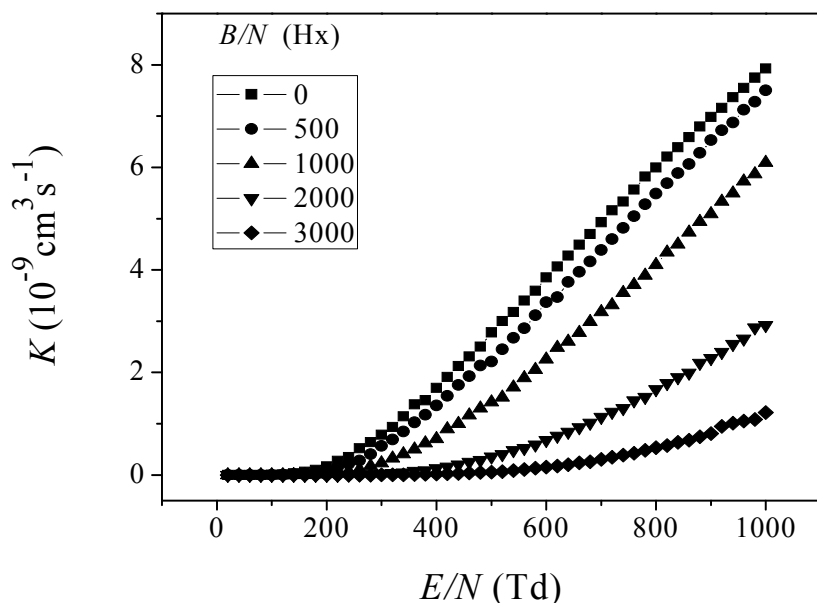
процењивани тако да би се добило слагање зависности односа $\frac{\alpha_T}{N}$ од E/N са експерименталним резултатима Лакшминарасима и сарадника.

Метода коју су користили Лакшминарасима и сарадници за мерење јонизационих коефицијената састојао се у експерименталном одређивању радијалне расподеле анодне струје и појачања струје. Овај приступ се доста разликује од приступа који је овде примењен за одређивање јонизационих коефицијената због чега би се добијено одступање могло сматрати прихватљивим (Voјnoviћ et al. 2013). У литератури нису пронађени други подаци јонизационог коефицијента са којима би се приложени подаци упоредили.

5.1.7 Коефицијенти брзине дисоцијације молекула угљен-моноксида

Апсолутни пресеци за тоталну дисоцијацију молекула угљен-моноксида преузети су из рада (Cosby 1993 а). Пресеци су добијени у експерименту са укрштеним сноповима и укључују доприносе побуђивања електронских стања.

Слика 5.20 показује зависност коефицијената брзине дисоцијације од E/N за различито B/N добијених на основу ових пресека.

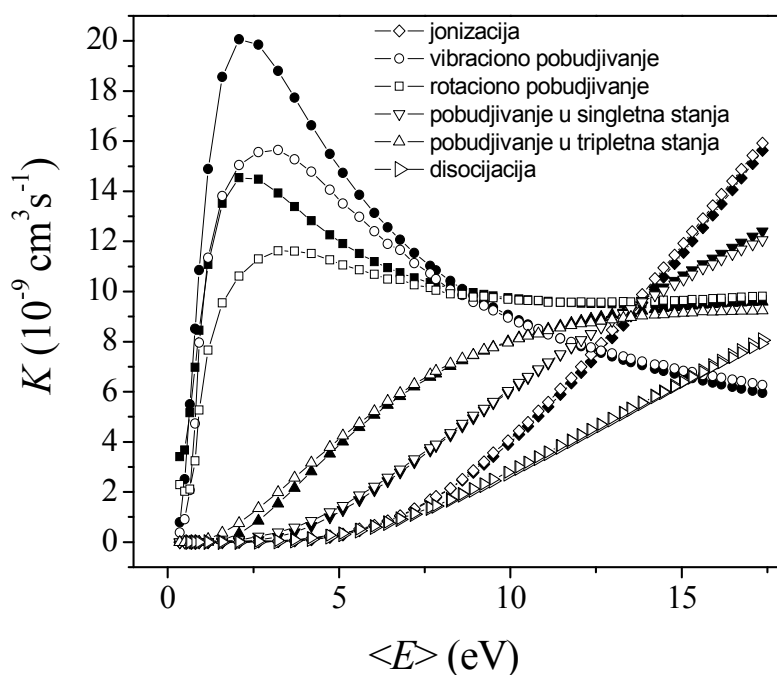


Слика 5.20: Коефицијенти брзине дисоцијације молекула угљен-моноксида у зависности од E/N за различите вредности B/N .

5.1.8 Поређење неравнотежних и равнотежних коефицијената брзине реакције за молекулу угљен-моноксида

Тотални неравнотежни коефицијенти брзине свих размотрених процеса у присуству само електричног поља су упоређени међусобно и са Максвеловим коефицијентима брзине реакције (слика 5.21). Овим поређењем може се стећи увид у динамику сударних процеса у угљен-моноксиду на различитим вредностима средњих енергија електрона, што је важно за анализу трансфера енергије електрона молекулама.

На ниским вредностима средњих енергија електрона преовлађују процеси побуђивања вибрационих и ротационих нивоа, при чему је вибрациона ексцитација доминантнија. Коефицијенти брзине јонизације и побуђивања у синглетна и триплетна стања постепено расту да би на већим средњим енергијама (од 14 eV) ови процеси преузели водећу улогу у сударима електрона са молекулама CO.



Слика 5.21: Поређење зависности тоталних Максвелових и неравнотежних коефицијената брзине јонизације, дисоцијације, ротационог, вибрационог и електронског побуђивања молекула CO од средње енергије електрона.

Коефицијенти брзине побуђивања у равнотежним условима су већи него у неравнотежним условима на ниским енергијама за побуђивање вибрационих и ротационих нивоа, док су у случају електронског побуђивања, дисоцијације и јонизације скоро исти на свим вредностима средње енергије електрона. Приметна разлика у случају вибрационих и ротационих побуђивања проистиче из разлике у облику Максвелових и неравнотежних функција расподеле, нарочито у области ниских енергија. Узрок је у чињеници да у неравнотежним условима нееластични судари који се одигравају у области енергија резонанце, утичу на облик функције расподеле електрона по енергијама (Ristić 2011) у којима се јавља удубљење, о ком је већ било речи. На Максвелове ЕЕДФ, са друге стране, овај ефекат нема утицаја због чега су веће од неравнотежних ЕЕДФ у интервалу енергија резонанце. Услед тога су и равнотежни коефицијенти брзине побуђивања већи од неравнотежних. На већим вредностима E/N су веће средње енергије електрона, од којих је мали број са енергијом у интервалу резонанце и мањи је утицај нееластичних судара на облик функције расподеле, које су све сличније Максвел-Болцмановим функцијама расподеле. Као последица, на већим енергијама су вредности Максвелових и неравнотежних коефицијената брзине побуђивања приближно исте. Имајући у виду да су прагови за побуђивање синглетних и триплетних електронских стања, дисоцијацију и јонизацију на већим вредностима енергије и да су репови неравнотежних и равнотежних ЕЕДФ скоро исти, јасно је да ће неравнотежни и Максвелови коефицијенти брзине реакције за ове процесе бити веома слични.

5.2 Молекул азота (N_2)

Молекул азота, као најзаступљенији молекул у Земљиној атмосфери је често подложен сударима са електронима у горњим деловима атмосфере, где ти судари играју веома значајну улогу у феноменима који се дешавају у јоносфери (Itikawa 2005). Осим у Земљиној атмосфери, молекул азота у гасовитој фази може се наћи и у атмосферама Титана, Тритона, Плутона и у малим количинама у атмосферама Марса и Венере, а такође је присутан у реповима комета. У овим

срединама сударни процеси се одигравају у присуству магнетног поља, које потиче од планета (само магнетно поље Земље, магнетна поља Сатурна и Нептуна којима су изложени њихови сателити Титан и Тритон, редом) и од Сунца (Campbell et al. 2010). Значај испитивања динамике сударних процеса електрона са молекулом азота у присуству електричних и магнетних поља је зато велики за атмосферска и астрофизичка истраживања. Коефицијенти брзине побуђивања и јонизације су важни параметри за моделовање поменутих атмосфера (Winkler and Notholt 2014; Campbell et al. 2013, Morrill and Benesch 1996).

Интерес за ова истраживања шири се у област развоја и унапређивања технологија које се заснивају на пражњењу у гасу, као што је гравирање плазмом (Lai et al. 1995), полимеризација плазмом (Sato et al. 1989; Hanuš et al. 2012), прекидачи на бази гасног пражњења (Romheld et al. 1999) које користе магнетно поље за конфинирање плазме. Уређаји као што су магнетрони, који се користе за депозицију танких филмова распршивачем (Borah 2013), раде у условима ортогоналних електричних и магнетних поља због боље ефикасности депозиције.

Досадашње студије коефицијената брзине процеса судара електрона са молекулом азота су углавном извршене за Максвел-Болцманову функцију расподеле електрона по енергијама (Slinker and Ali 1982; Riahi et al. 2010; Laporta 2012; Celibreto 2014). Недавно су објављени резултати коефицијената брзине за резонантно вибрационо побуђивање у присуству електричног поља (Ristić et al. 2007) али само за вредности упадне енергије електрона до 5 eV.

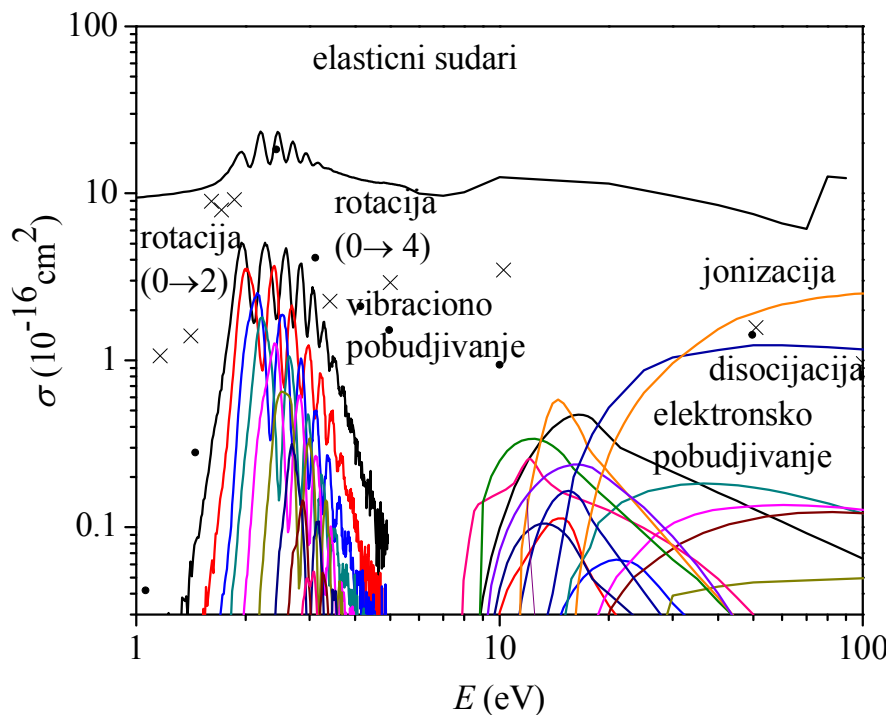
У оквиру рада на овом докторату, посредством Монте Карло симулације израчунати су коефицијенти брзине судара електрона са молекулима азота у присуству хомогених електричних и магнетних поља. Део резултата добијених за ортогоналну конфигурацију поља у интервалу редукованог електричног поља од 20 до 1000 Td и редукованог магнетног поља од 0 Hx до 3000 Hx (што одговара интервалу средњих енергија електрона од 0.76 eV до 18 eV) објављен је у раду (Vojnović et al. 2015). Прорачунати су подаци за процесе јонизације, дисоцијације и побуђивање ротационих, вибрационих и електронских стања електронима.

За потребе рачунања вероватноћа одређених процеса судара електрона и молекула азота и одређивања правца расејања након судара, коришћена је база података која садржи експерименталне резултате мерења интегралних и

диференцијалних пресека у функцији енергије. У ове пресеке спадају пресеци за еластични судар, вибрационо побуђивање, побуђивање у електронска стања и јонизација молекула. Пресеци за дисоцијацију молекула азота у два неутрална атома (Cosby 1993 b) садрже доминантан допринос побуђивања јако предисоцијативних синглетних стања који су већ урачунати у симулацију због чега нису коришћени као улазни подаци. Као што је већ речено, пресеци за дисоцијацију угљен-моноксида (Cosby 1993 a) такође садрже удео побуђивања електронских стања. Управо због доприноса, за које пресеци могу већ бити присутни у бази података, препоручљиво је избегавање употребе пресека за дисоцијацију молекула. Пресеци за дисоцијацију се у сличним симулацијама обично у великој мери смањују (Brennan and Garvie 1990) или се претпоставља да се дисоцијација одиграва кроз побуђивање предисоцијативних стања (Phelps and Pitchford 1985; Senian and Chernukho 2003) као што је код нас случај. Поузданост резултата Монте Карло симулације транспорта електрона кроз гас се строго заснива на добром слагању транспортних параметара са резултатима експеримената ројева. У том циљу се често у сличним студијама врши корекција оригиналних података док се не постигну задовољавајући резултати. У овој докторској тези је већ показано одлично слагање резултата симулације у чијој су бази оригинални пресеци са експерименталним вредностима. Осим тога, добијено је и одлично слагање функције расподеле електрона по енергијама са расподелом добијеном прецизном теоријском методом и расподелама које су резултат Монте Карло симулације (Janda et al. 2005) у којој је коришћена база пресека за коју је постигнуто слагање са експериментално измереним вредностима транспортних параметара, чиме је поново несумњиво потврђена оправданост нашег избора пресека.

Списак података употребљених за симулацију и за рачунање коефицијената брзине реакције, као и прагови за одређени процес су дати у табели 5.4. Ефективни пресеци за еластичне сударе преузети су од следећих аутора: за област енергија од 0 eV до 5.5 eV (Allan 2005), од 6 eV до 10 eV (Sun et al. 1995), од 10 eV до 70 eV (Gote and Ehrhardt 1995) и од 70 eV до 90 eV (Nickel et al. 1988). Пресеци за остале процесе су углавном преузети из ревијалног чланка (Itikawa 2006) у ком се препоручују дати ефективни пресеци за сударе електрона

са молекулом азота. Ефективни пресеци пресеци за поменуте процесе дати су у функцији упадне енергије електрона на слици 5.22.



Слика 5.22 : Пресеци за еластично расејање, ротациону, вибрациону и електронску ексцитацију, јонизацију и дисоцијацију молекула азота.

Табела 5.4: Извори података ефективних пресека за еластичне и нееластичне сударне процесе.

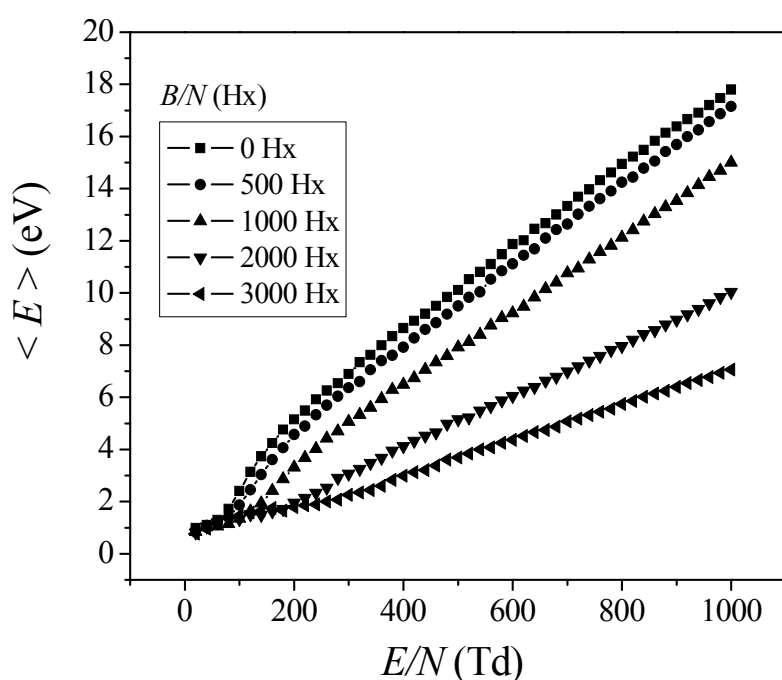
	Побуђено стање	енергија прага (eV)	референце
Еластично расејање	/	0	Allan (2005), Sun et al. (1995), Gote, Ehrhardt (1995), Nickel et al.(1988))
Ротационо побуђивање	J=2, J=4	0.00148	Itikawa and Mason (2005), Kutz, Meyer (1995), Telega et al. (2004)
Вибрационо побуђивање	v=k, 1<=k<=10	0.28	Ristić et al. (2007)

Побуђивање у синглетна електронска стања	$a^1 \Sigma_u^-$	8.39	Itikawa (2006), Brugner (2003)
	$a^1 \Pi_g$	8.55	Itikawa (2006), Brugner (2003)
	$w^1 \Delta_u$	8.89	Itikawa (2006), Brugner (2003)
	$a'^1 \Sigma_g^+$	12.25	Itikawa (2006), Brugner (2003)
	$b^1 \Pi_u$	12.50	James et al. (1990)
	$c'^4 \Sigma_u^{1+}, b^1 \Sigma_u^+$	12.94, 12.85	Ajello et al. (1989)
	$c_3^1 \Pi_u, o_3^1 \Pi_u$	13.05, 13.34	Malone et al. (2012)
Побуђивање у триплетна електронска стања	$A^3 \Sigma_u^+$	6.17	Itikawa (2006), Brugner (2003)
	$B^3 \Pi_g$	7.35	Itikawa (2006), Brugner (2003)
	$W^3 \Delta_u$	7.36	Itikawa (2006), Brugner (2003)
	$B^3 \Sigma_u^-$	8.16	Itikawa (2006), Brugner (2003)
	$C^3 \Pi_u$	11.03	Itikawa (2006), Poparić (1999)
	$E^3 \Sigma_g^+$	11.88	Itikawa (2006), Poparić (2002)
	$F^3 \Pi_u, G^3 \Pi_u$	12.76, 12.82	Malone et al. (2012)
јонизација	/	15.60	Lindsay, Mangan (2003)
дисоцијација	/	10.0	Cosby (1993 b)

5.2.1 Средње енергије и функције расподеле електрона по енергијама за молекула азота

Као што се може видети са слике 5.23, средња енергија електрона расте са повећањем E/N , а опада са порастом B/N због убрзавајућег, односно успоравајућег дејства ових поља на електроне, као и код молекула CO. Промена вредности

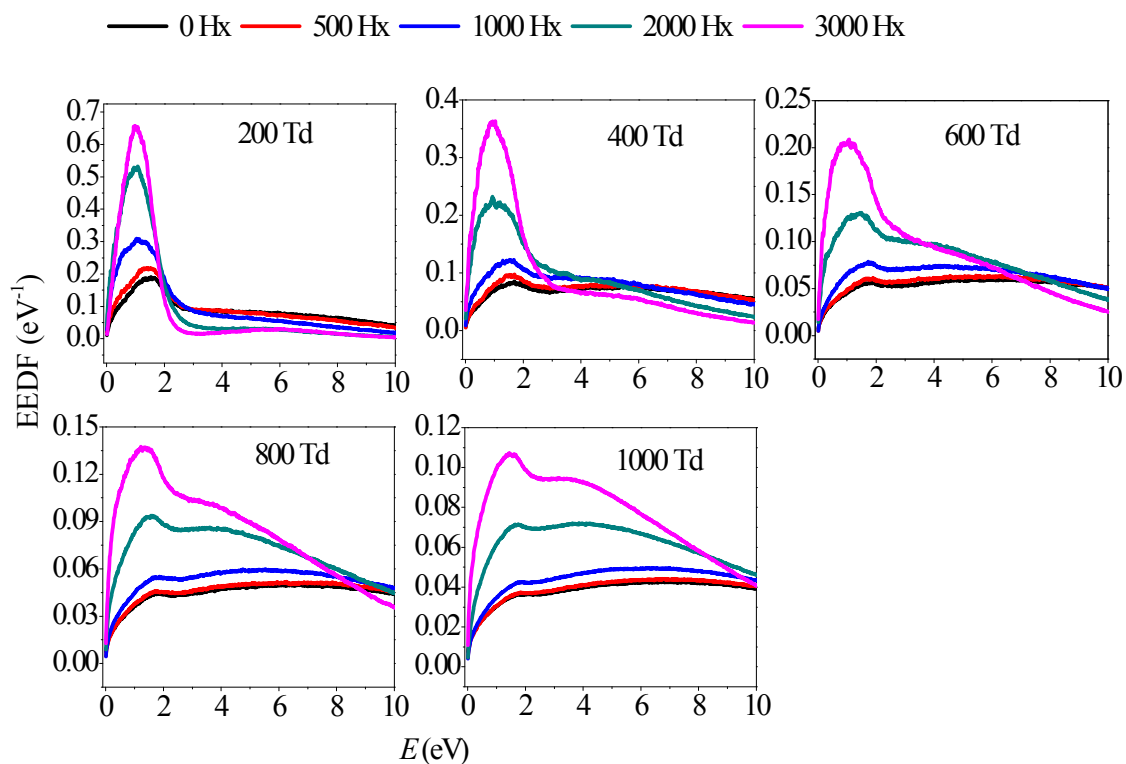
редукованих поља E/N и B/N одражава се и на функцију расподеле електрона по енергијама (слика 5.24). Повећање редукованог магнетног поља (за исту вредност E/N) помера максимум функције расподеле ка све мањим вредностима енергије. Са порастом магнетног поља све је више спорих електрона и све мање високоенергијских електрона. Промена јачине електричног поља видно утиче на ширину расподеле. Са порастом E/N расте енергија електрона и учешће процеса чији је праг на вишим енергијама и интервал енергија којим располажу електрони је све већи.



Слика 5.23: Средња енергија електрона у зависности од E/N на различитим вредностима B/N (Vojnović et al. 2015).

На 1000 Td интензитет јачине електричног поља је довољно велики да укључење магнетног поља ($B/N = 500$ Hx) готово нема утицаја на облик функције расподеле. Као и код угљен-моноксида, у облику функције расподеле јавља се удубљење у енергијском опсегу $^2\Pi_g$ резонанце. Узрок је такође дисипација енергије електрона на резонантно побуђивање. Удубљење у облику функције расподеле код молекула азота је више истакнуто него код угљен-моноксида и обухвата већи интервал енергија. Област формирања $^2\Pi_g$ резонанце приликом

побуђивања молекула азота електронима је у интервалу енергија електрона од 2 eV до 5 eV (Schulz 1964).



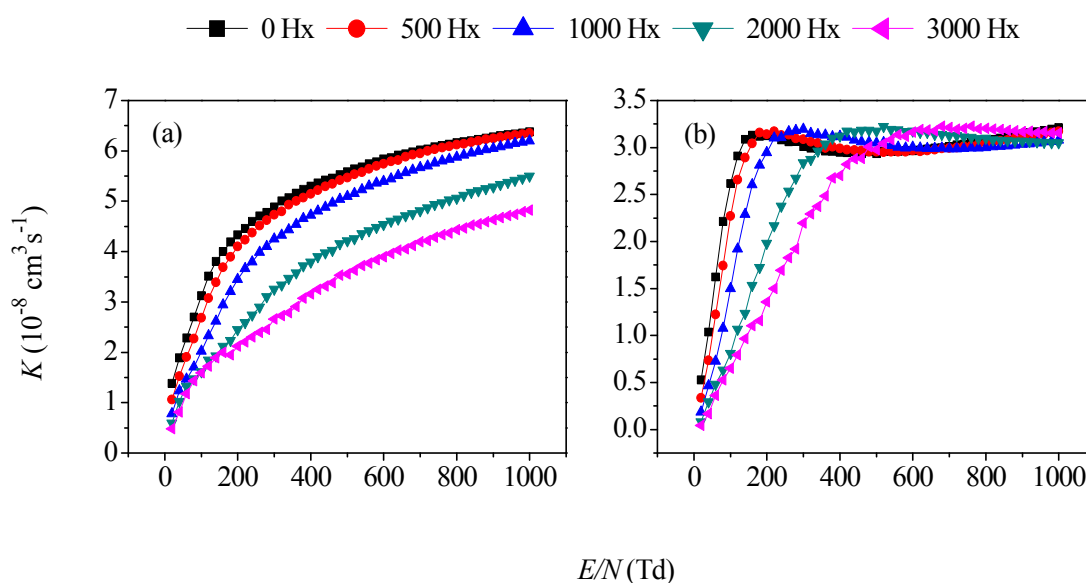
Слика 5.24: Функције расподеле електрона на 200, 400, 600, 800 и 1000 Td за различите вредности B/N .

5.2.2 Коэффициенти брзине ротационог побуђивања молекула азота

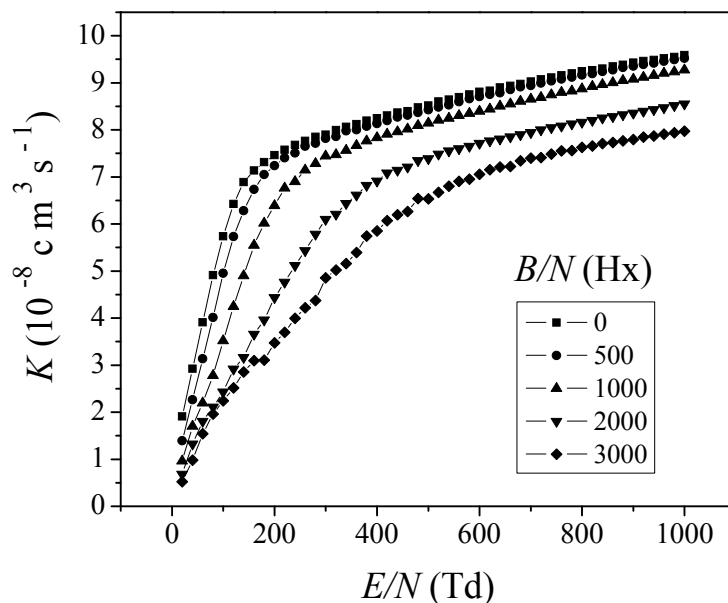
У раду из 2005. године (Itikawa and Mason 2005) Итикава и Масон дали су интегралне пресеке за процес ексцитације из основног ротационог нивоа у други и четврти ротациони ниво, које су одредили Куц и Мајер (Kutz and Mayer 1995) и Телега et al. (Telega et al. 2004) теоријским путем. Ови пресеци у интервалу енергије од 0.0048 eV до 100 eV за прелаз $J = 0 \rightarrow J = 2$ и од 0.00493 eV до 100 eV за прелаз $J = 0 \rightarrow J = 4$ употребљени су за рачунање парцијалних коефицијената брзине ротације (Telega et al. 2004 у области енергије око прага и Kutz and Mayer 1995 у интервалу од 1 eV до 100 eV), чија је зависност од E/N за различите

вредности B/N приказана на слици 5.25. Слика 5.25 а) одговара процесу побуђивања из основног ротационог нивоа у други ротациони ниво. Пораст коефицијената брзине побуђивања другог ротационог нивоа са повећањем E/N је постепен. Слика 5.25 б) се односи на побуђивање из основног ротационог нивоа у четврти ротациони ниво. Ширење максимума, који су приближно истих висина, са порастом B/N је веома изражено. Такође је уочљиво померање максимума ка већим вредностима E/N са порастом магнетног поља, које је већ раније објашњено.

Тотални коефицијенти ротационог побуђивања (слика 5.26) су добијени сабирањем коефицијената брзине побуђивања из основног у други и четврти ротациони ниво ($J = 0 \rightarrow J = 2$ и $J = 0 \rightarrow J = 4$). Коефицијенти брзине ротационог побуђивања молекула N_2 су и до 9 пута већи од коефицијената брзине ротационог побуђивања CO , што је изненађујуће имајући у виду да молекула CO због своје поларности поседује диполни момент, осим тога поседује и квадруполни момент већи него код N_2 . Дугодометна диполна интеракција код молекула CO доминира у процесу ротационог побуђивања на малим енергијама електрона, близу прага за ротацију, услед чега се јавља интензиван пик у пресеку за прелаз $J = 0 \rightarrow 1$ у уском интервалу енергија електрона од енергије прага до 0.1 eV.



Слика 5.25: Парцијални коефицијенти брзине побуђивања из основног у а) други и б) четврти ротациони ниво у функцији E/N на различитим вредностима B/N .



Слика 5.26: Тотални коефицијенти брзине ротационог побуђивања функцији E/N на различитим вредностима B/N (Vojnović et al. 2015).

Максимуми функција расподеле у нашим прорачунима су далеко од максимума пресека који одговара диполној интеракцији, стога ефекат диполне интеракције скоро и да није обухваћен нашим резултатима. На већим енергијама учешће у ротационом побуђивању узимају краткодометне интеракције. Великим вредностима коефицијената код молекула азота највише доприносе велике вредности ефективних пресека на високоенергијском делу зависности $\sigma(E)$. Итикава (Itikawa 2006) истиче да су у области великих енергија упадног електрона теоријски прорачуни ових аутора конзистентни са теоријским резултатима других аутора и са експерименталним резултатима пресека за еластични судар од 5 eV до 20 eV. Са друге стране, према нашим сазнањима, не постоје подаци пресека за ротацију молекула CO у области високих енергија. Осим тога, подаци са којима располажемо не упућују на евентуални пораст пресека. Уместо закључка на овом месту остаје само да се ово питање остави отвореним са надом да ће се тиме позабавити будућа теоријска и експериментална истраживања.

5.2.3 Коефицијенти брзине вибрационог побуђивања молекула азота

Интегралне пресеке за ексцитацију из основног вибрационог нивоа у више вибрационе нивое ($v = 0 \rightarrow n$, $n = 0, \dots, 10$) експериментално су измерили Ристић и сарадници (Ristić et al. 2007) на двоструком трохонидном електронском спектрометру (Vičić et al. 1998). Добијени релативни диференцијални пресеци калибрисани су на апсолутне пресеке који су дати у раду (Allan 2005). Интеграцијом нормиране угаоне расподеле коју је Алан дао у овом раду су израчунати интегрални пресеци за процес вибрационог побуђивања (слика 5.27). У табели 5.5 дати су прагови за сваки од процеса побуђивања из основног у првих десет вибрационих нивоа молекула азота.

На слици 5.28 су приказане зависности парцијалних коефицијената за вибрационо побуђивање од E/N . За сваки тип вибрационог побуђивања упоређени су коефицијенти брзине побуђивања за различите вредности B/N . На сваком од графика види се да повећање B/N доводи до померања максимума ка већим вредностима E/N . Уочава се промена односа висине максимума за различите процесе вибрационог побуђивања. За побуђивање из основног вибрационог нивоа у прва четири вибрациона нивоа повећање B/N доводи до смањења висине максимума, док су висине скоро изједначене за побуду $v = 0 \rightarrow v = 4$ и почињу да расту са порастом вибрационог нивоа у који се врши побуда. Што је већи финални вибрациони ниво коефицијент брзине побуђивања је мањи, односно учешће одређеног процеса побуђивања из основног вибрационог нивоа. Пажљивим анализирањем пресека за појединачне процесе и функција расподеле може се објаснити однос максимума парцијалних коефицијената брзине вибрационог побуђивања.

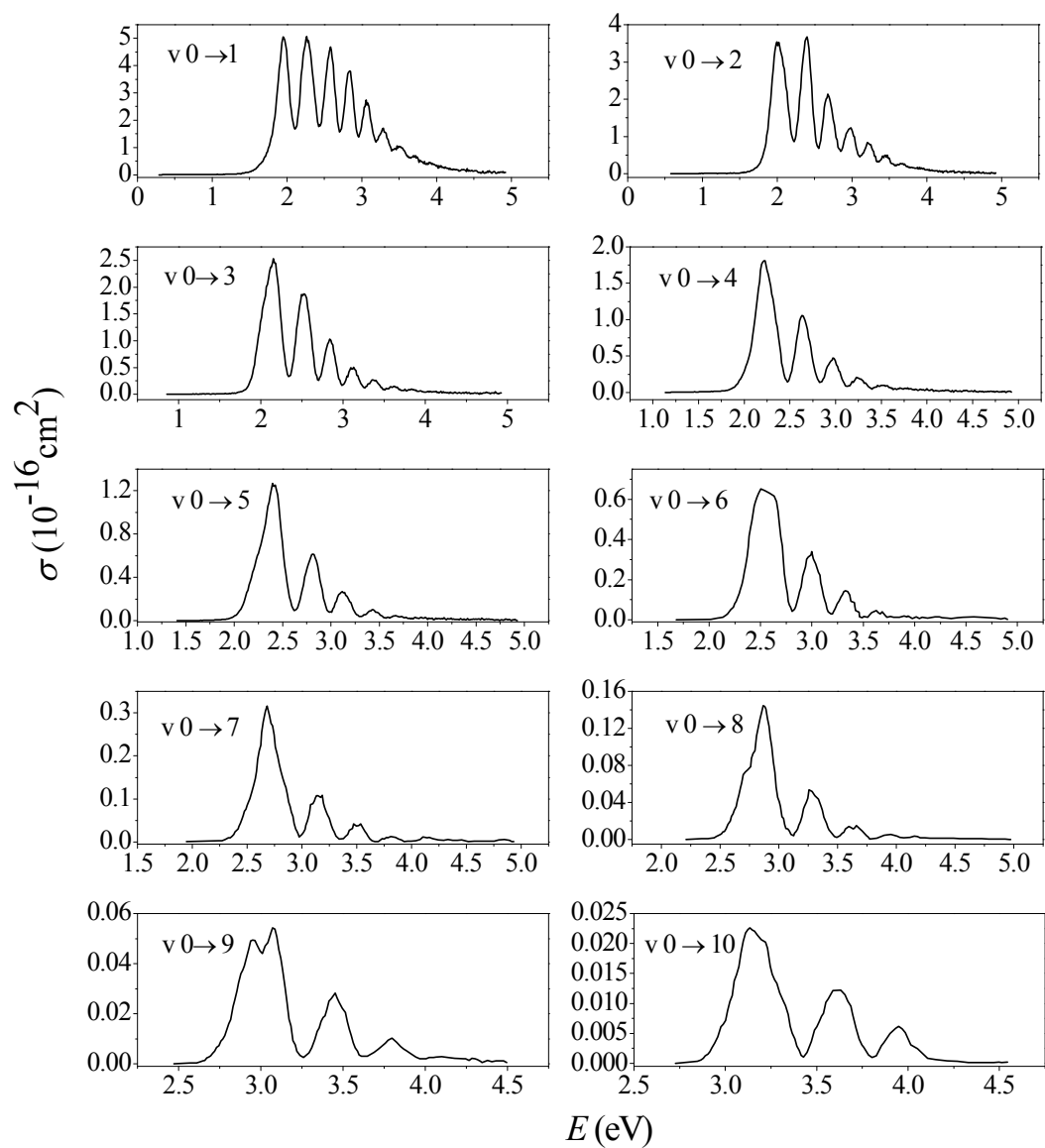
Сабирањем парцијалних коефицијената брзине побуђивања добијени су тотални коефицијенти брзине вибрационог побуђивања, који су приказани у функцији E/N за различите вредности B/N на слици 5.29. Коефицијенти брзине вибрационог побуђивања N_2 су нешто мањи од вредности за CO због мањих пресека, али облици зависности су веома слични. Максимуми коефицијената брзине побуђивања постепено опадају након 1000 Нх , померајући се ка већим вредностима E/N и постају шири са повећањем вредности B/N . Узрок опадања

максимума је већа популација електрона са енергијама у интервалу максималних интегралних пресека на мањим вредностима B/N , за разлику од ситуације код молекула CO, где је у интервалу максималних пресека већа популисаност на већим вредностима B/N што доводи до постепеног пораста максимума коефицијената са порастом магнетног поља.

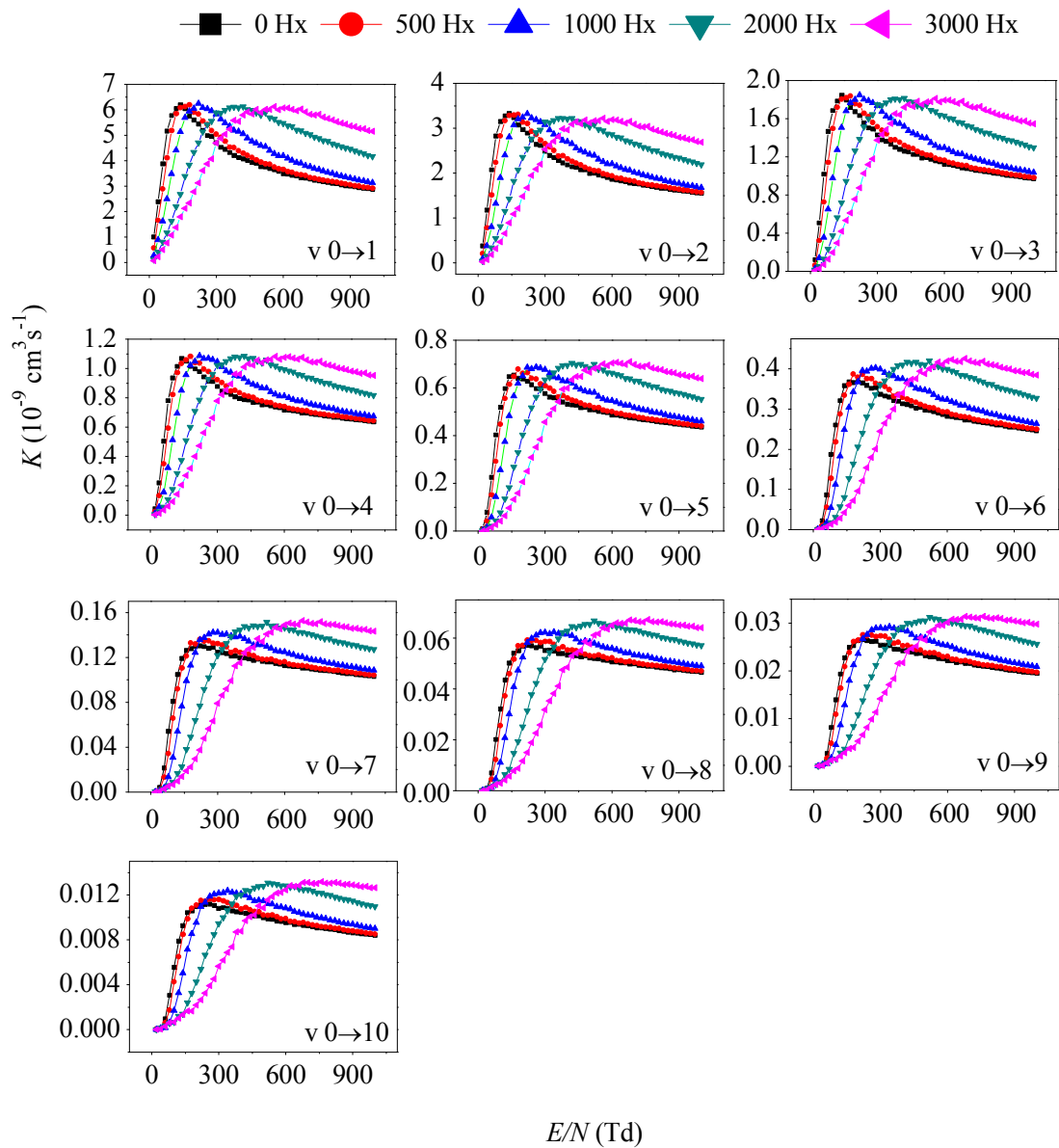
Максимуми код молекула N_2 су мало померени ка већим вредностима E/N у односу на максимуме код молекула CO, што постаје уочљиво са повећањем B/N . Положај максимума је одређен положајем пресека на скали енергије, а како пресеци за вибрационо побуђивање молекула CO имају мањи праг очекивано је да се максимуми за исте вредности редукованог магнетног поља појаве пре него код молекула N_2 . ЕЕДФ ових молекула су веома сличне, као што се може видети поређењем слика 5.3 и 5.24. Међутим, област резонанце $^2\Pi_g$ код молекула N_2 (где се и јављају максимуми) се у односу на CO (са положајем резонанце на око 2 eV) налази у ширем интервалу енергија (2-5 eV), те су стога и максимуми мало шири.

Табела 5.5: Процеси ексцитације из нултог у више вибрационе нивое и прагови за дату ексцитацију.

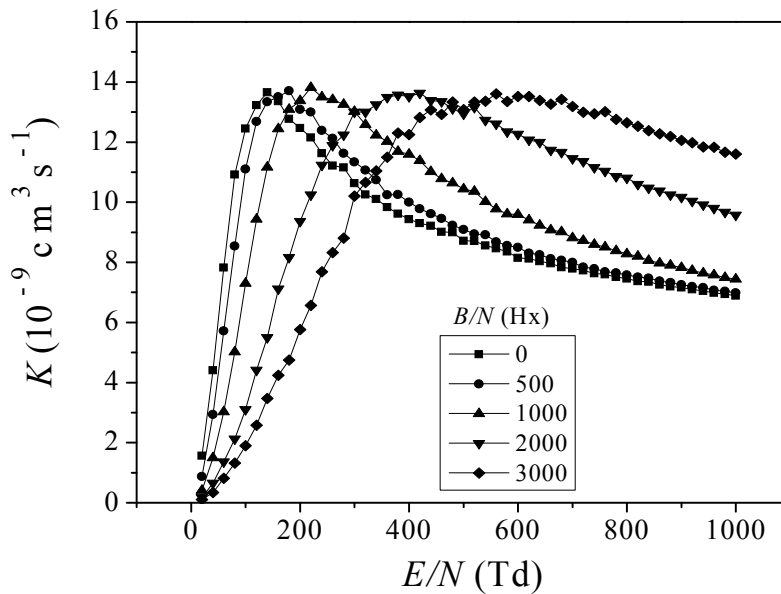
процес вибрационог побуђивања	енергија прага (eV)	процес вибрационог побуђивања	праг (eV)
$v = 0 \rightarrow v = 1$	0.288869	$v = 0 \rightarrow v = 6$	1.679464
$v = 0 \rightarrow v = 2$	0.574155	$v = 0 \rightarrow v = 7$	1.946832
$v = 0 \rightarrow v = 3$	0.855857	$v = 0 \rightarrow v = 8$	2.210618
$v = 0 \rightarrow v = 4$	1.133976	$v = 0 \rightarrow v = 9$	2.470820
$v = 0 \rightarrow v = 5$	1.408511	$v = 0 \rightarrow v=10$	2.727438



Слика 5.27: Интегрални ефективни пресеци за вибрационо побуђивање молекула азота (Vičić et al. 1996).



Слика 5.28: Парцијални коефицијенти брзине побуђивања у вибрациона стања у функцији E/N на различитим вредностима B/N .



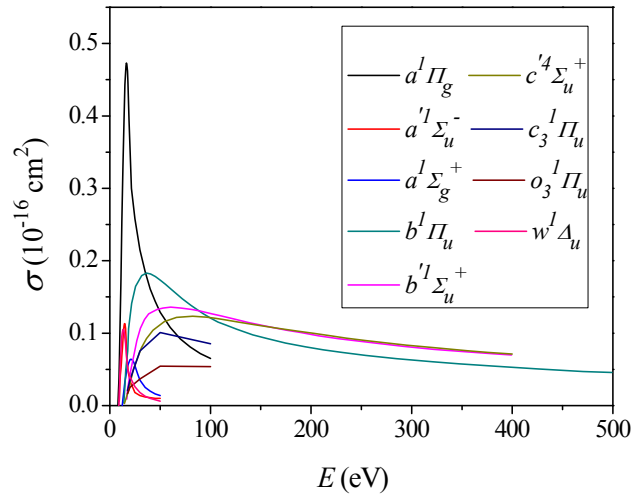
Слика 5.29: Тотални коефицијенти брзине побуђивања у вибрационе нивое у функцији E/N на различитим вредностима B/N (Vojnović et al. 2015).

5.2.4 Коефицијенти брзине побуђивања у синглетна електронска стања молекула азота

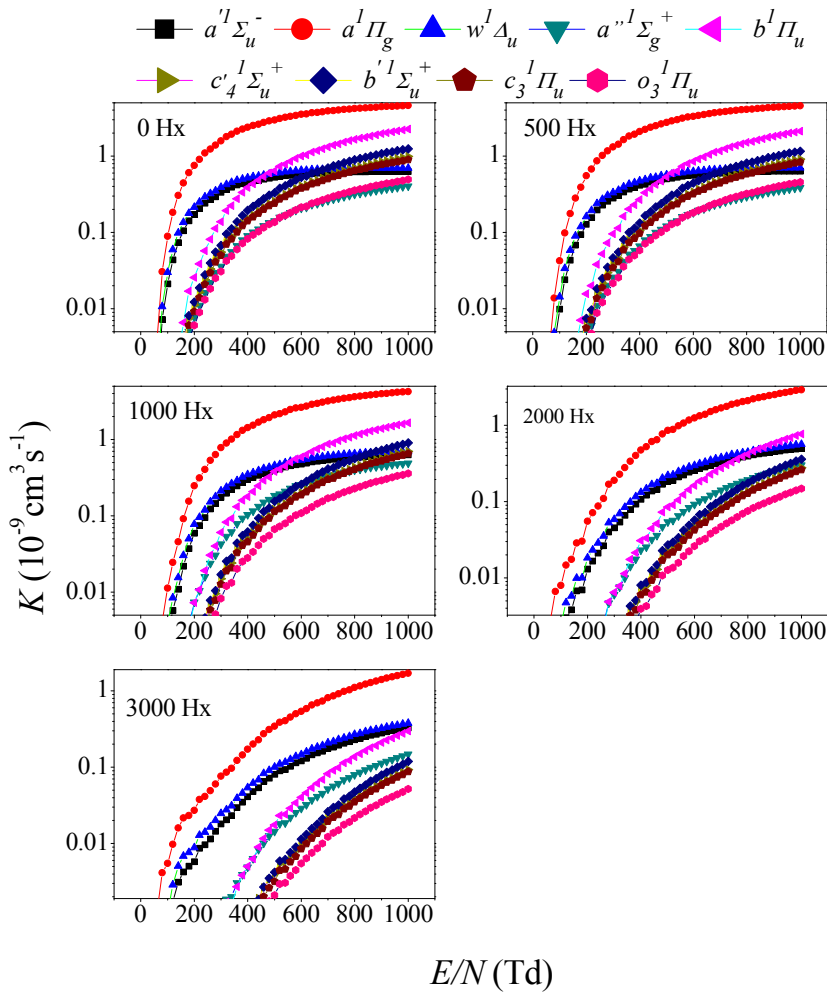
За ексцитацију у синглетна електронска стања Итикава (Itikawa 2006) је приложио резултате ефективних пресека за побуђивање у стања $a'^1\Sigma_u^-$, $w^1\Delta_u$, $a''^1\Sigma_g^+$, $a^1\Pi_g$ који су дати у раду Бругнера и сарадника (Brugner et al. 2003). Пресеци за побуђивање $c^1\Pi_u$ и $o^1\Pi_u$ стања су преузети из недавно објављеног рада (Malone et al. 2012). Подаци за стање $b^1\Pi_u$ потичу из емисионих мерења (James et al. 1990). Ови пресеци су заједно са пресецима за побуђивање у $c'^4\Sigma_u^+$ и стање $b'^1\Sigma_u^+$ (Ajello et al. 1989), приказани на слици 5.30.

Са променом B/N мења се и редослед степена учешћа ових процеса у различитим интервалима E/N , изузев $a^1\Pi_g$ стања (слика 5.31).

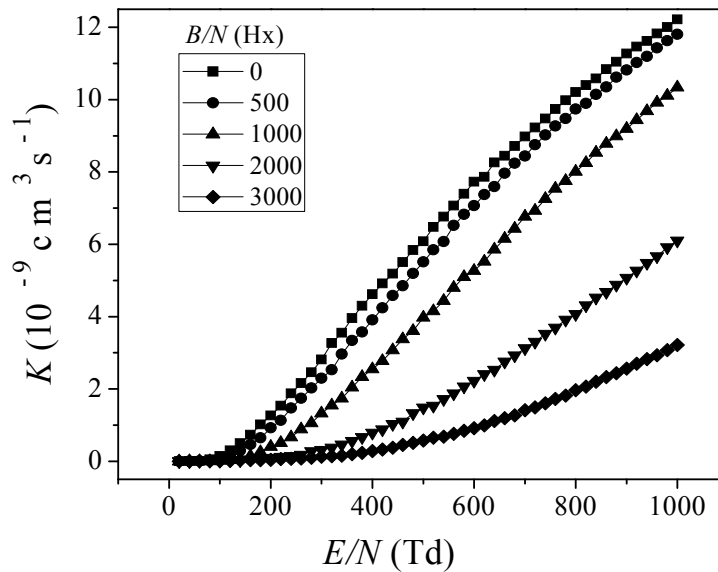
Тотални коефицијенти брзине синглетног електронског побуђивања дати су у зависности од редукованих поља E/N и B/N на слици 5.32.



Слика 5.30: Ефективни пресеци за електронско побуђивање у синглетна стања $a'^1\Sigma_u^-$, $w^1\Delta_u$, $a'^1\Sigma_g^+$, $a^1\Pi_g$, $b^1\Pi_u$, $c'^4\Sigma_u^+$, $b'^1\Sigma_u^+$, $c_3^1\Pi_u$ и $o_3^1\Pi_u$.



Слика 5.31: Парцијални коефицијенти брзине побуђивања у синглетна електронска стања у функцији E/N на различитим вредностима B/N .



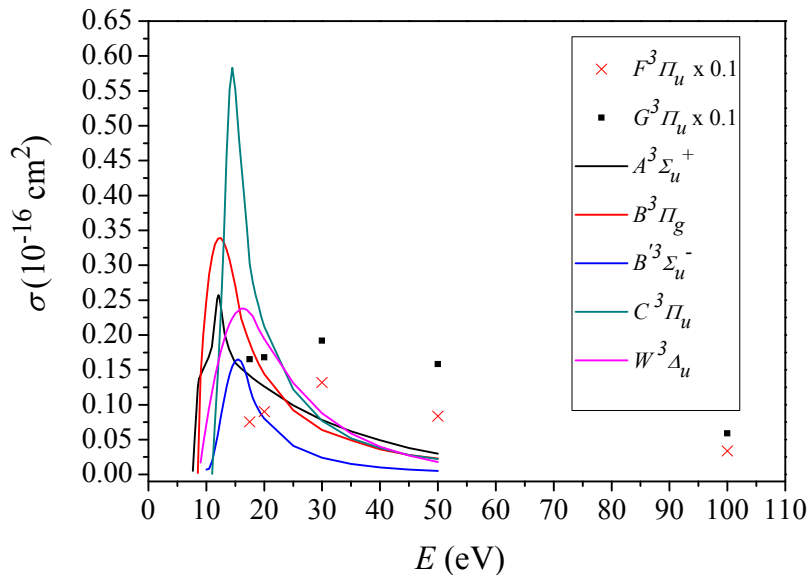
Слика 5.32: Тотални коефицијенти брзине ексцитације у синглетна електронска стања у функцији E/N на различитим вредностима B/N (Vojnović et al. 2015).

Тотални коефицијенти брзине синглетног побуђивања веома брзо опадају са порастом B/N , јер све мањи број електрона има довољну енергију за праг процеса побуђивања синглетних електронских стања, који је на 8.39 eV .

5.2.5 Коефицијенти брзине побуђивања у триплетна електронска стања молекула азота

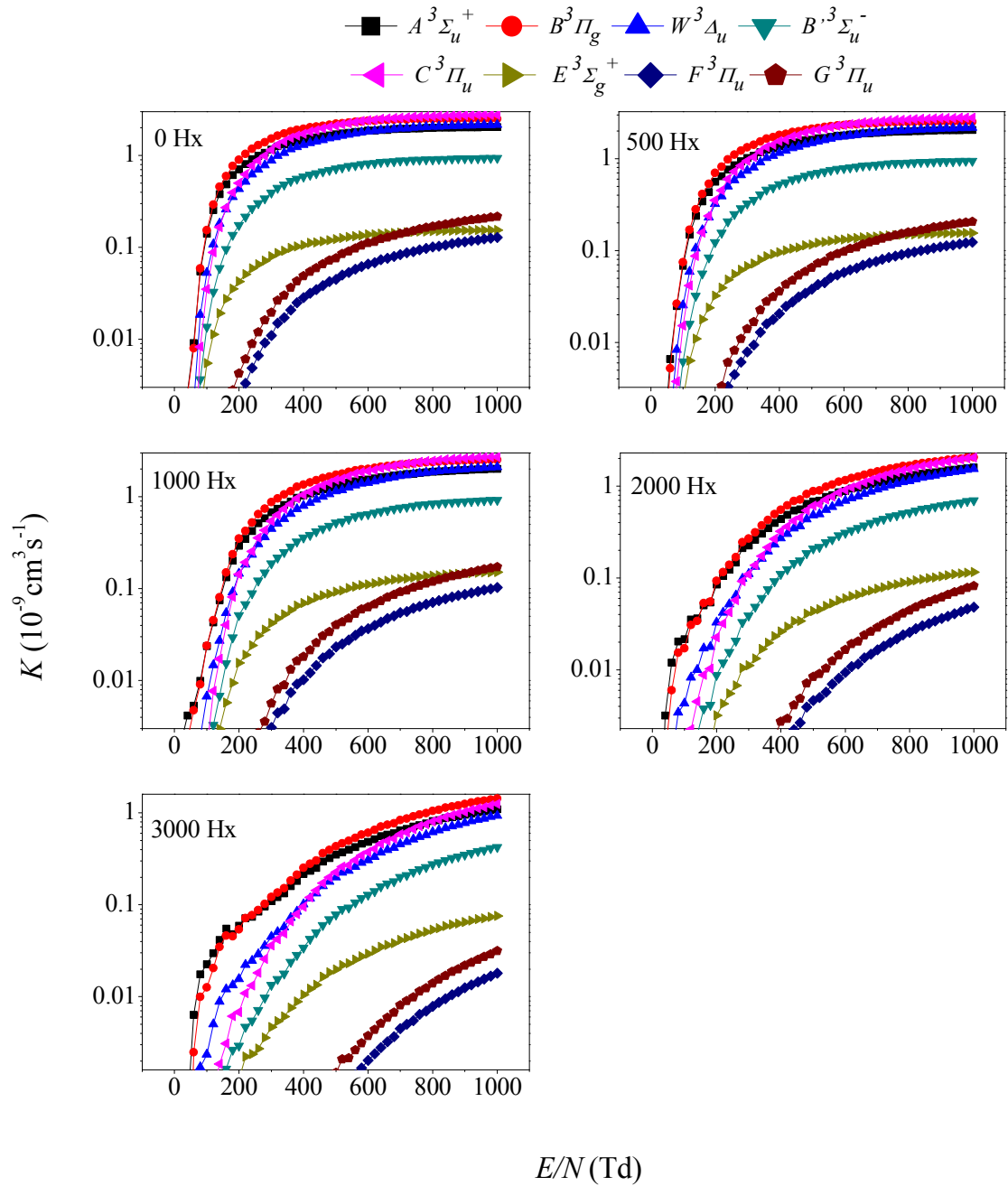
Итикава (Itikawa 2006) је у свом раду приказао парцијалне пресеке за побуђивање триплетних електронских стања $A^3\Sigma_u^+$, $B^3\Pi_g$, $W^3\Delta_u$, $B'^3\Sigma_u^-$, $C^3\Pi_u$ и $E^3\Sigma_g^+$ молекула азота. Пресеци за стања $A^3\Sigma_u^+$, $B^3\Pi_g$, $W^3\Delta_u$ и $B'^3\Sigma_u^-$ су одређени на основу комбинације експерименталних резултата са сноповима (Трајмар et al. 1983, Campbell et al. 2001) и ројевима електрона (Ohmori et al. 1988) и теоријских (Gillan et al. 1996) резултата, који су са процењеним грешкама препоручени у раду Бругнера и сарадника (Brugner et al. 2003), са неколико додатих експериментално измерених пресека. Попарић и сарадници су одредили пресеке за побуђивање

$C^3\Pi_u$ стања (Porarić et al. 1999) и $E^3\Sigma_g^+$ стања (Porarić et al. 1999, porarić et al. 2002), на трохоидном електронском спектрометру. Пресеци за побуђивање $G^3\Pi_u$ и $F^3\Pi_u$ стања су преузети из рада (Malone et al. 2012). Наведени пресеци су графички представљени (слика 5.33) у функцији упадне енергије електрона у интервалу од енергије прага до 50 eV, односно 100 eV за стања $G^3\Pi_u$ и $F^3\Pi_u$.



Слика 5.33: Ефективни пресеци за побуђивање триплетних електронских стања $A^3\Sigma_u^+$, $B^3\Pi_g$, $W^3\Delta_u$, $B^3\Sigma_u^-$, $C^3\Pi_u$ и $E^3\Sigma_g^+$ у молекулу азота у зависности од упадне енергије електрона.

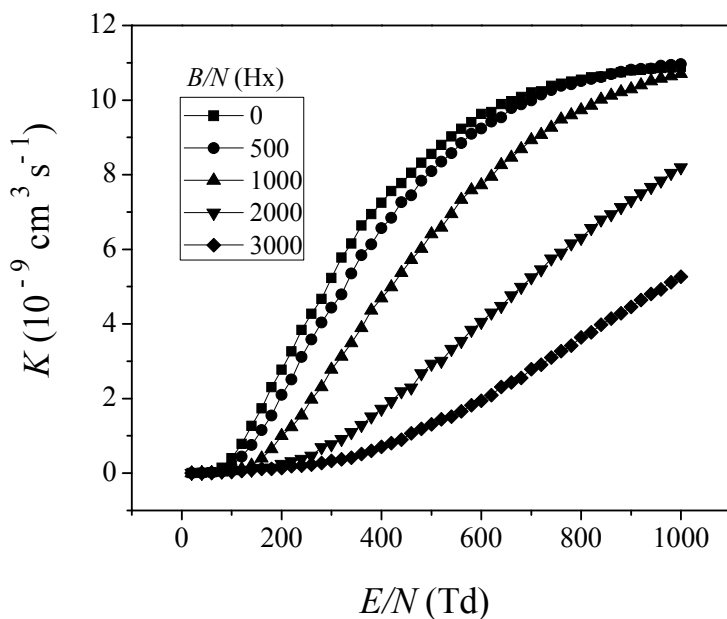
За сва дата триплетна електронска стања израчунати су коефицијенти брзине побуђивања у зависности од E/N , на вредностима B/N од 0, 500, 1000, 2000 и 3000 Нх. Резултати су приказани на слици 5.34. Уочава се да је готово занемарљив допринос побуђивања $F^3\Pi_u$ стања у целом опсегу E/N , на свим вредностима B/N . Од осталих стања, најмањи допринос има ексцитација $G^3\Pi_u$ стања. Коефицијенти брзине побуђивања у стања $B^3\Pi_g$ и $C^3\Pi_u$ имају исте вредности у интервалу средњих и високих вредности E/N за свако B/N , осим за 3000 Нх. Побуда стања $B^3\Pi_g$ преовлађује над побудом стања $C^3\Pi_u$ све до тачке пресека функција. Слично важи и за стања $A^3\Sigma_u^+$ и $W^3\Delta_u$, где побуда стања $A^3\Sigma_u^+$ преовлађује до пресека ових функција. На 2000 и 3000 Нх је приметно опадање коефицијената брзине побуђивања.



Слика 5.34: Парцијални коефицијенти брзине побуђивања у триплетна електронска стања у функцији E/N на различитим вредностима B/N .

На слици 5.35 је дата зависност тоталних коефицијената брзине побуђивања триплетних електронских стања од E/N за различите вредности редукованог магнетног поља. Вредности коефицијената брзо опадају са порастом B/N и расту са порастом E/N . Коефицијенти за 0 Hx и 500 Hx се преклапају у

интервалу од 700 Td до 1000 Td (у истом интервалу се ови коефицијенти споро мењају са порастом E/N).

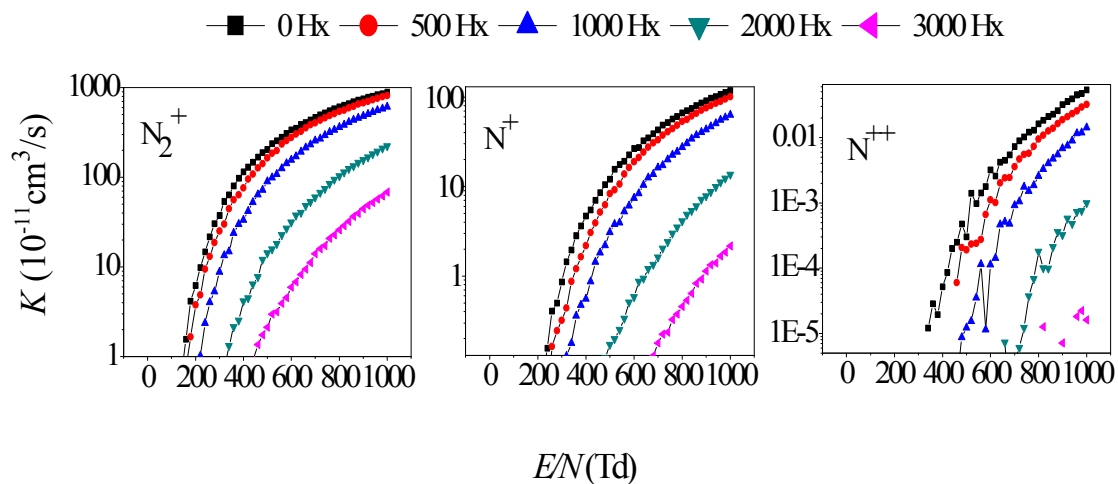


Слика 5.35: Тотални коефицијенти брзине екситације у триплетна електронска стања у функцији E/N на различитим вредностима B/N (Vojnović et al. 2015).

5.2.6 Коефицијенти брзине јонизације молекула азота

Скуп пресека за парцијалну и тоталну јонизацију је узет из рада (Itikawa 2006). Ови пресеци, који су преузети из (Lindsay and Mangan 2003) су у мањој мери измењене оригиналне вредности апсолутних пресека (Straub et al. 1996), одређених уз помоћ ТОФ масеног спектрометра. Измерени су пресеци за стварање јона добијених директном јонизацијом (N_2^+) и дисоцијативном јонизацијом (N^+ , N^{++}). Доприноси стварања N^+ и N_2^{++} нису могли да се раздвоје у овом експерименту јер ова два јона имају исти однос масе и наелектрисања и самим тим исто време прелета у ТОФ масеном спектрометру. Уз помоћ ових пресека израчунати су коефицијенти брзине сваког од наведених канала јонизације.

Резултати су приказани у зависности од E/N за различите вредности B/N на слици 5.36.

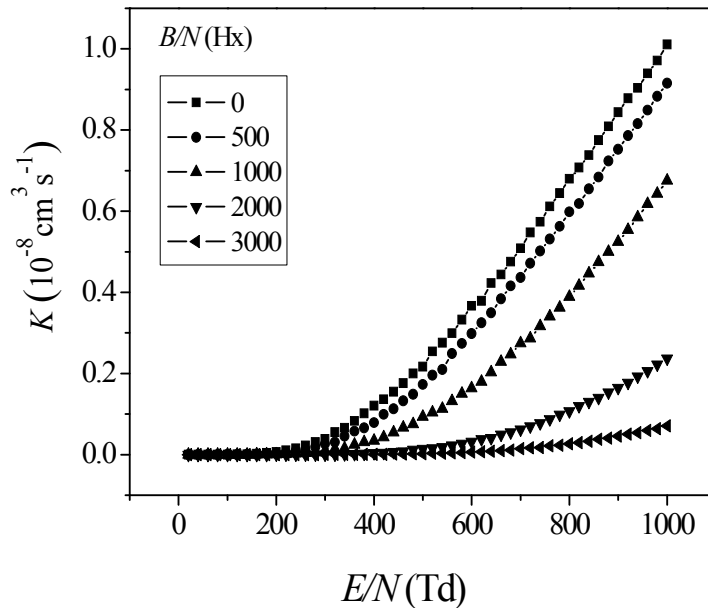


Слика 5.36: Парцијални коефицијенти брзине јонизације у функцији E/N на различитим вредностима B/N .

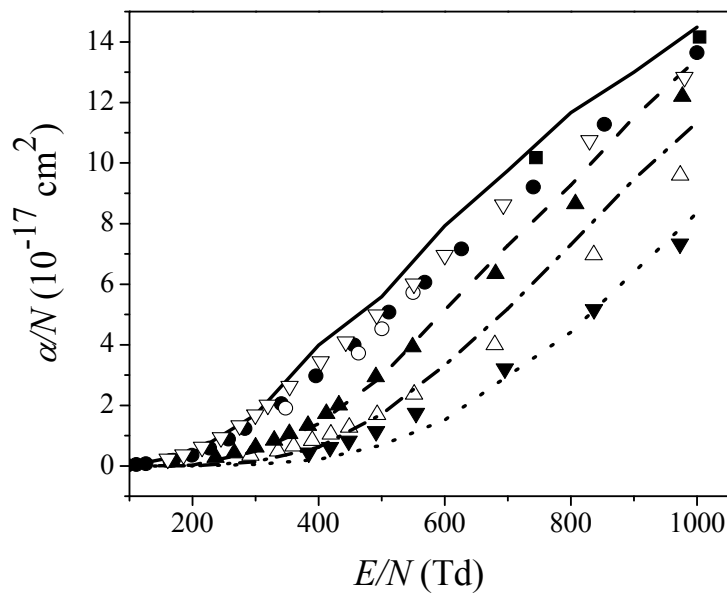
Са ових графика се види да је најдоминантнији процес стварања N_2^+ јона, следи стварање N^+ јона, док су најмање вероватни N^{++} јони као продукти јонизације молекула азота електронима. Са повећањем магнетног поља добијање ових јона азота је све мање. Ово је највише изражено за јон N^{++} за који коефицијент брзине јонизације најбрже пада како расте B/N и сасвим опадне на 3000 Hz.

График зависности тоталних коефицијента брзине јонизације молекула азота од E/N (слика 5.37) показује драстичан пад са повећањем B/N .

Резултати односа јонизационог коефицијента и бројчане концентрације молекула азота у зависности од E/N за различите вредности B/N (1500 Hz, 2100 Hz и 3000 Hz) добијени симулацијом су упоређени са експерименталним вредностима (Heylen and Dargan 1973) у целом опсегу E/N (слика 5.38). Такође су приказани резултати симулације у одсуству магнетног поља заједно са експерименталним подацима (Haydon and Williams 1976; Brennan and Garvie 1990; Kelly 1990; Heylen and Dargan 1973). Показано је да се наши резултати добро слажу са експерименталним мерењима.



Слика 5.37: Тотални коефицијенти брзине јонизације у функцији E/N на различитим вредностима B/N (Vojnović et al. 2015).

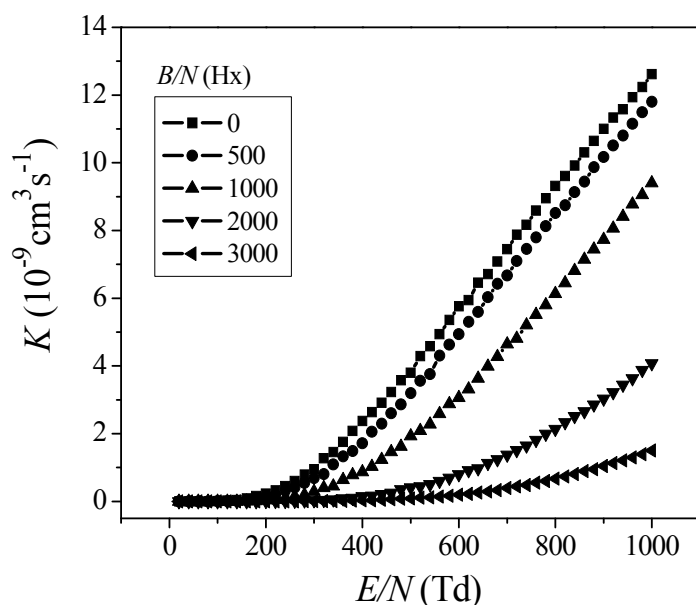


Слика 5.38: Однос јонизационог коефицијента и бројчане концентрације као функција E/N за N_2 гас - 0 Hx : ———— симулација, \circ - (Brennan and Garvie 1990), ∇ - (Heylen and Dargan 1973), \bullet - (Haydon and Williams 1976), \blacksquare - (Kelly 1990); 1500 Hx : - - - - - симулација, \blacktriangle - (Heylen and Dargan 1973) ; 2100 Hx : - · - · - · симулација, \triangle - (Heylen and Dargan 1973); 3000 Hx: ······ симулација, \blacktriangledown - (Heylen and Dargan 1973).

5.2.7 Коефицијенти брзине дисоцијације молекула азота

Пресеци за тоталну дисоцијацију молекула азота у два атома азота преузети су из рада (Itikawa 2006). Апсолутни пресеци су добијени у експерименту са укрштеним сноповима (Cosby 1993 b).

Слика 5.39 показује зависност коефицијената брзине дисоцијације од E/N за различито B/N .

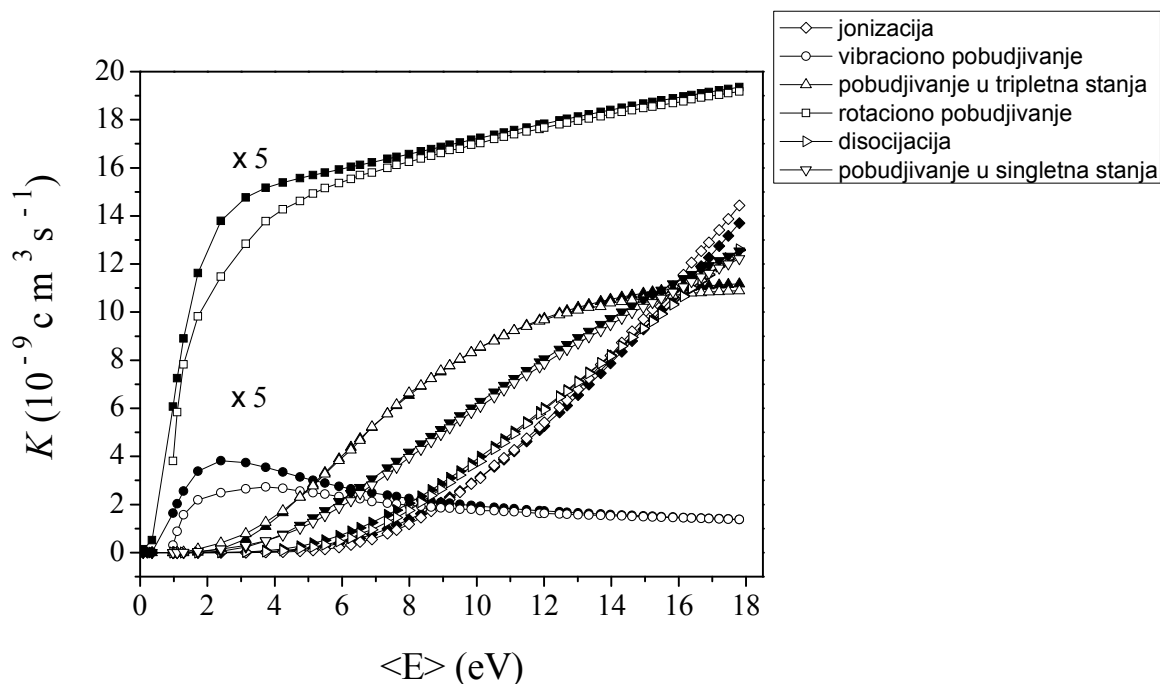


Слика 5.39: Коефицијенти брзине дисоцијације молекула азота у зависности од E/N за различите вредности B/N (Vojnović et al. 2015).

5.2.8 Поређење тоталних неравнотежних и равнотежних коефицијената брзине реакције за молекула азота

Добијени тотални неравнотежни коефицијенти брзине јонизације, дисоцијације и побуђивања ротационих, вибрационих и електронских (синглетних и триплетних) стања азота у случају када је присутно само електрично поље су

упоређени међусобно и са Максвеловим коефицијентима брзине реакције (слика 5.40). Предоминантност ротационог побуђивања у целом интервалу средњих енергија је веома изражена. Максвелови и неравнотежни коефицијенти брзине електронског побуђивања, јонизације и дисоцијације су веома слични у целој области енергија електрона.



Слика 5.40: Поређење тоталних Максвелових (пуни симболи) и неравнотежних (празни симболи) коефицијената брзине реакције у функцији средње енергије за $B/N = 0$ Нх (Vojnović et al. 2015).

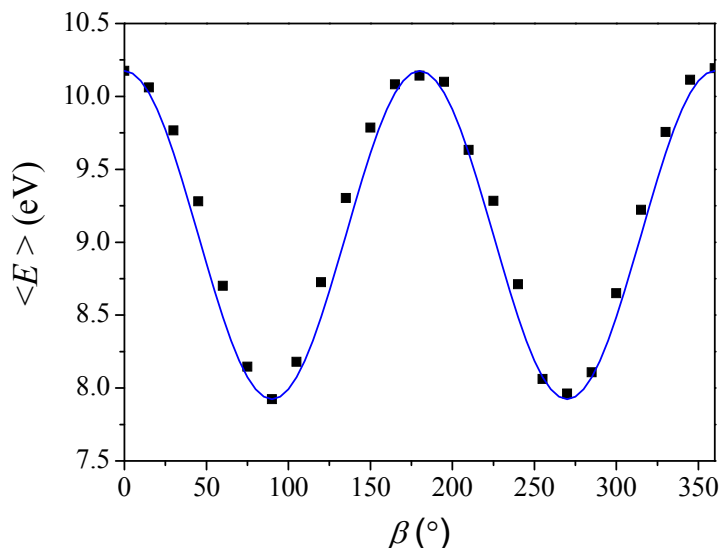
У случају ротационих и вибрационих побуђивања истиче се приметна разлика равнотежних и неравнотежних коефицијената брзине реакције у области ниских енергија. Ова разлика, као и код угљен-моноксида, може да се објасни утицајем нееластичних сударних процеса у области формирања резонанце на функцију расподеле електрона по енергијама у случају када је присутно електрично поље.

5.3 Транспорт електрона кроз гас азота у електричним и магнетним пољима укрштеним под произвољним угловима

Ефекат магнетног хлађења електрона, претходно објашњен на случају опадања средње енергије електрона са порастом интензитета редукованог магнетног поља, испољава се и при условима када се вредност B/N држи константном, док се мења угао између вектора \vec{E} и \vec{B} , односно угао β између вектора магнетне индукције и позитивног дела z-осе. Повећањем угла β од 0° до 90° (слика 5.41) и, наравно због симетрије, у интервалу од 180° до 270° средња енергија електрона опада. У преосталим интервалима промене угла долази до пораста средње енергије. Овај ефекат не зависи од врсте гаса, са изузетком аномалног понашања примећеног код O_2 и Ar (White et al. 1999) и овде ће бити анализиран на примеру молекула азота за вредности редукованих поља од $E/N = 500 \text{ Td}$ и $B/N = 1000 \text{ Hx}$.

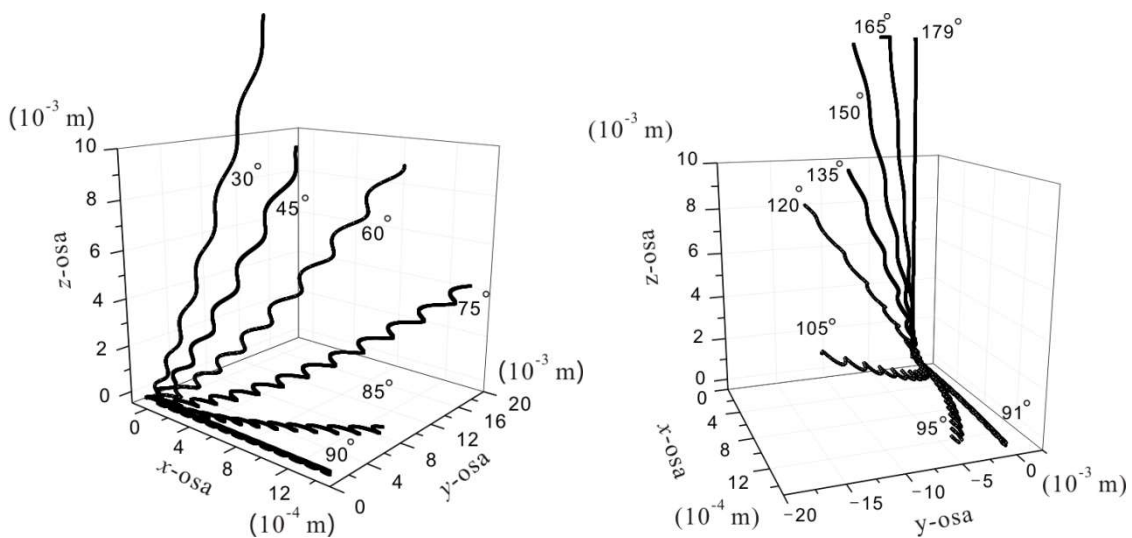
Правилна периодичност средње енергије би се могла објаснити на следећи начин. Нека електрон полази под дејством силе електричног поља из координатног почетка у ком је био у стању мировања. У специјалном случају антипаралелних вектора \vec{E} и \vec{B} ($\beta = 0^\circ$) магнетно поље нема никаквог утицаја на средњу енергију јер нема утицаја на кретање електрона у правцу свог деловања, због чега се електрони крећу у правцу електричног поља, које их несметано снабдева енергијом без обзира на интензитет B/N (у прилогу Б је показано да укључивање магнетног поља при $\beta = 0^\circ$ или 180° не мења средњу енергију ни ЕЕДФ за било који правац и интензитет почетне брзине електрона). Са појавом угла β јавља се Лоренцова сила и започиње кружење електрона. Вектор магнетне индукције стиче компоненте B_y и B_z . Ефекат магнетног хлађења се повећава сразмерно са порастом интензитета компоненте B_y (White et al. 1999) која је нормална на правац вектора \vec{E} . Променом угла β од 0° до 90° компонента B_y постепено расте док не достигне максимални интензитет за $\vec{E} \perp \vec{B}$, када електрони добијају најмање убрзања од електричног поља. Компонента B_z у средњем не поспешује значајно смањење енергије електрона јер не тера електроне да се крећу

супротно тежњи силе електричног поља. На основу наведеног следи да је доминантност доприноса магнетног, односно електричног поља промени енергије електрона условљена углом који формирају њихови вектори.



Слика 5.41: Средња енергија електрона у функцији угла β за $E/N = 500$ Td и $B/N = 1000$ Нх.

На слици 5.42 су приказане путање електрона добијене симулацијом за углове β од 0° до 180° .

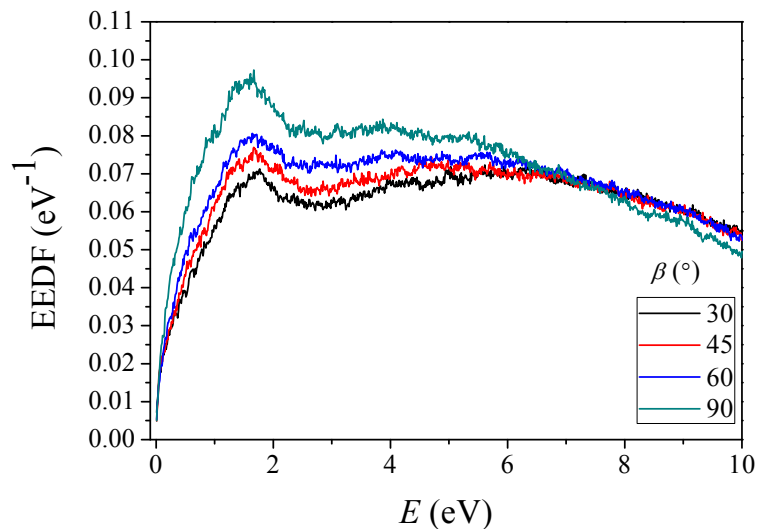


Слика 5.42: Путања електрона који креће из координатног почетка за вредности угла β од 30 до 90° (лево) и од 91 до 179° (десно) за $E/N = 500$ Td и $B/N = 1000$ Нх.

Утицај магнетног поља постепено расте до максималне вредности када су поља ортогонална, сходно повећању $\sin\beta$, а затим у даљем смеру пораста угла β опада, заробљеност електрона линијама силе магнетног поља је све слабија док се потпуно не изгуби за паралелан положај поља, који је еквивалентан случају антипаралелних поља само са супротним смером ротације електрона, што нема никакву последицу на учесталост судара.

Чињеница да је заробљавање електрона највеће када су поља \vec{E} и \vec{B} ортогонална је искоришћена у дизајнирању уређаја код којих је потребно ефикасно заробљавање електрона, тако да пражњење може да се одржава и на веома ниским притисцима (Abolmasov 2012).

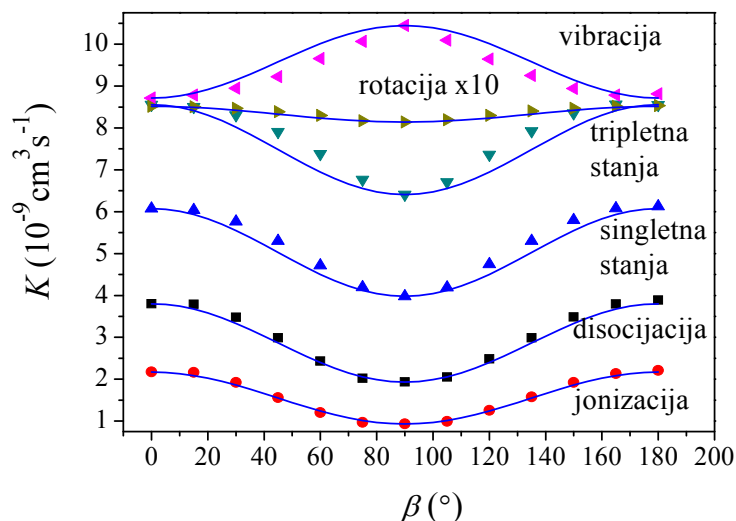
Функција расподеле електрона по енергијама за различите вредности β на слици 5.43 такође указује на одређену сличност са понашањем функције расподеле у конфигурацији ортогоналних електричних и магнетних поља за различите вредности B/N . Пораст угла β од 0 rad до $\pi/2 \text{ rad}$ за константно B/N има исти утицај на функцију расподеле енергије у смислу постепеног пораста ЕЕДФ у области ниских енергија електрона као и повећање B/N за константан угао између електричног и магнетног поља.



Слика 5.43: Функције расподеле електрона по енергијама за вредности β од $30^\circ, 45^\circ, 60^\circ$ и 90° за $E/N = 500 \text{ Td}$ и $B/N = 1000 \text{ Hx}$.

Периодичност средње енергије електрона природно упућује на могућност периодичне промене коефицијената брзине реакције са углом β и намеће

претпоставку да се употребом те зависности резултати претходно представљени у овом раду могу уопштити за произвољне углове између електричног и магнетног поља.



Слика 5.44: Коефицијенти брзине побуђивања, јонизације и дисоцијације молекула азота у два неутрална атома у зависности од угла β за $E/N = 500$ Td и $B/N = 1000$ Hx; симболи – резултати симулације, пуна линија – криве добијене фитовањем.

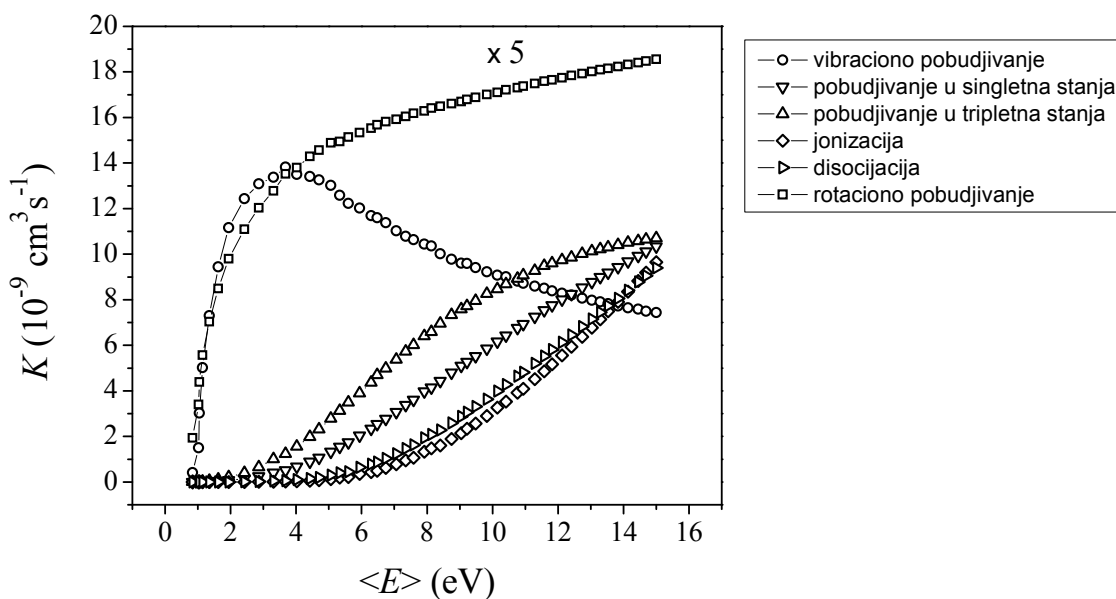
Коефицијенти брзине различитих процеса за дате услове ($E/N = 500$ Td и $B/N = 1000$ Hx) су израчунати посредством симулације за вредности угла β од 0° до 180° у корацима од 15° . Резултати су приказани на слици 5.44. Примећује се да коефицијенти брзине свих процеса прате исти тренд промене са углом β , осим коефицијената брзине вибрационог побуђивања. Промена угла β за вредности редукованог електричног поља од 500 Td и редукованог магнетног поља од 1000 Hx доводи до пораста или опадања средње енергије у области од приближно 7.92 eV до 10 eV (слика 5.39). Фазно кашњење коефицијената брзине вибрационог побуђивања у односу на коефицијенте брзине осталих процеса у овом интервалу средње енергије може се разумети посматрањем слике 5.45. Са повећањем угла β од 0° до 90° , односно падом средње енергије од 10 eV до 7.92 eV, расте вероватноћа, односно учешће вибрационог побуђивања молекула, док истовремено удео одигравања других процеса опада. Максимуму доприноса

вибрационог побуђивања на слици 5.44 одговара минимална вредност средње енергије када доприноси других процеса достижу минимум.

Резултати су фитовани функцијом облика:

$$K_{\beta} = \frac{K_0 + K_{90}}{2} + \frac{K_0 - K_{90}}{2} \cos(2\beta), \quad (5.1)$$

где су K_0 и K_{90} коефицијенти брзине реакције на 0° и 90° . Максимално одступање вредности добијених употребом израза (5.1) од прорачуна симулације приказаних на слици 5.41 износи око 5%. Формула (5.1) омогућава прорачун коефицијената брзине реакције (за дато E/N и B/N) за све углове између електричног и магнетног поља на основу познатих коефицијената брзине реакције на 90° и коефицијената добијених за $B/N = 0$ Нх (који истовремено представљају коефицијенте на 0°), помоћу којих се могу одредити равнотежни положај и амплитуда периодичне функције. Сличном функцијом у којој фигуришу средња енергија на 0° и 90° су фитовани прорачуни средње енергије на слици 5.41.



Слика 5.45: Тотални коефицијенти брзине реакције у функцији средње енергије за $B/N = 1000$ Нх.

Уколико функција $K(\langle E \rangle)$ у одређеном интервалу средње енергије мења карактер (из растуће прелази у опадајућу или обрнуто, као у случају коефицијента вибрационог побуђивања на слици 5.45) у тој области формула (5.1) више није егзактна и даје грубљи опис. У специјалном случају, ако је максимум функције на половини интервала од 0° до 90° коефицијент који множи β у формули (5.1) износи 3.

6. Развој спектрометра за мерење ефективних пресека за јонизацију молекула електронима уз детекцију фрагмената јона техником времена прелета

Коефицијенти брзине ексцитације неких од електронских стања, као и за ексцитацију у првих 11, односно 10 вибрационих нивоа молекула CO и N₂ израчунати су коришћењем ефективних пресека добијених у Лабораторији за физику атомских сударних процеса у Београду. Ови пресеци су измерени на двоструком трохлоидном електронском спектрометру (анализатору) који раздваја доприносе напред и назад расејаних електрона коришћењем технике времена прелета, ТОФ (енг. time-of-flight), у пулсном режиму рада. Детаљни опис овог експерименталног уређаја и принцип рада могу се наћи у раду (Vičić et al. 1998) и у докторским дисертацијама (Poparić 2001) и (Ristić 2011).

За потребе одређивања ефективних пресека за јонизацију, који се у будућем раду у овој лабораторији планирају и за примену у одређивању коефицијената брзине јонизације, развијен је експериментални уређај са високом резолуцијом који омогућава мерење ефективних пресека за јонизацију молекула и који употребом технике времена прелета раздваја јонске фрагменте по маси. У свету је у употреби још неколико сличних система, видети нпр. (Živanov et al. 2003; Markelj et al. 2008). У овој глави биће представљена шема уз детаљан опис и принцип рада овог уређаја, као и добијени прелиминарни резултати.

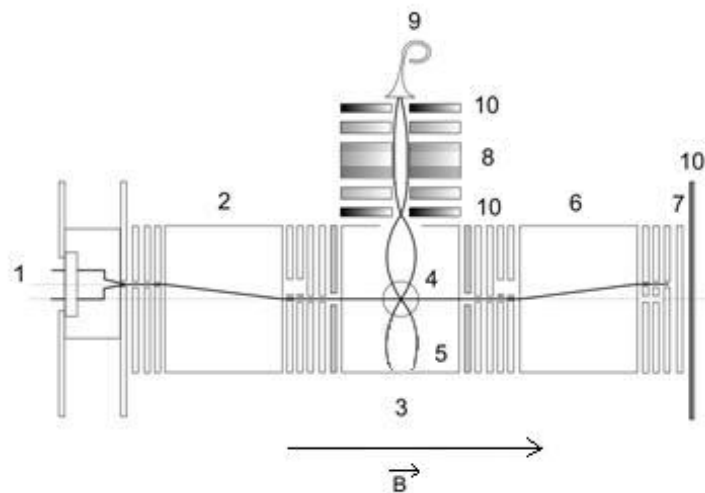
6.1 Опис експерименталног уређаја

Инструмент се састоји од електронског спектрометра, сличног дизајна као двоструки трохлоидни анализатор, и масеног анализатора јона који чине електроде за транспорт јона и детектор.

Систем је постављен у вакуумску комору окружену Хелмхолцовим калемовима, чија је улога магнетна колимација млаза електрона као и да омогући рад трохоидног електронског монохроматора. Хелмхолцови калемови производе хомогено магнетно поље са линијама силе у правцу и смеру почетне брзине електрона. Шема и фотографија инструмента су приказане на сликама 6.1 и 6.2.

Електронски спектрометар чини систем електрода за колимацију, убрзавање, монохроматизацију и анализу енергије млаза електрона. У саставу спектрометра су такође и парови електрода таквог облика да генеришу поље које избацује електроне расејане и избачене из млаза у процесу монохроматизације из система, као и електроде које формирају сударну запремину. Према улози ових елемената, спектрометар се може поделити на монохроматор, сударну запремину, анализатор и фокусирајуће електроде.

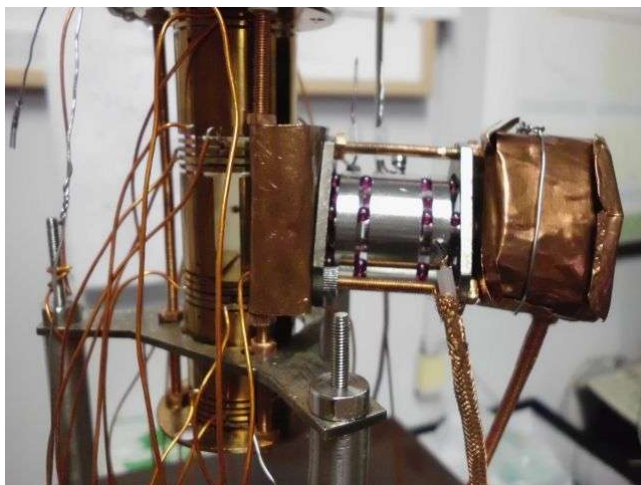
Све електроде електронског спектрометра су направљене од легуре берилијум-бронзе, која је позната по погодности за примену у вакууму, постојаности на корозију и одсуству магнетизације. Дебљине фокусирајућих електрода су 1 mm. Спољашњи дијаметар свих електрода је 2.5 cm. Електроде су међусобно изоловане куглицама од рубина, које их раздвајају на растојање од 0.6 mm.



Слика 6.1: Шема електронског спектрометра са масеним анализатором јона- Катода (1), монохроматор и електроде за електронску оптику (2), сударна комора (3), увод гаса (4), електрода сударне коморе (5), анализатор и електроде за електронску оптику (6), колектујућа електрода (7), јонско сочиво (8), ченелтрон (9), носачи (10). (Трајекторије млаза електрона и јона су означене пуним линијама.)

Монохроматор чине две полуцилиндричне електроде чија је оса паралелна оси електронског спектрометра. Сударну комору чине уземљене електроде V_1 и V_2 (слика 6.3) и две полуцилиндричне електроде.

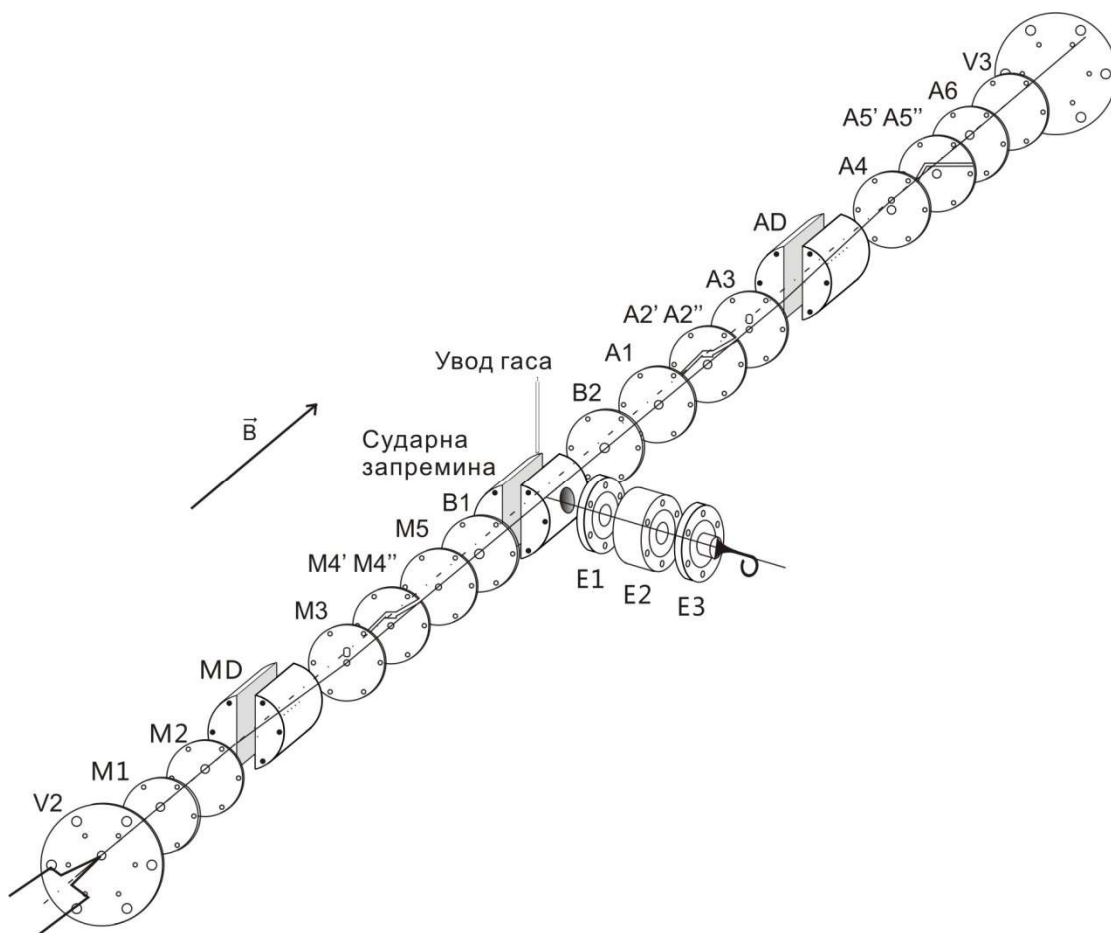
Јони доспевају у масени анализатор састављен од три електроде направљене од прохрома. Електрода E_1 је кружног облика и служи за екстракцију електрона. Средишња електрода E_2 је облика цилиндра дужине 1 cm. Електрода E_3 се састоји од два цилиндра, спољашњег, дужине 4 mm и другог, унутрашњег цилиндра на његовој оси, дужине 1.2 cm и унутрашњег пречника од 6 mm. Дужина електроде E_1 је 4 mm. Спољашњи дијаметар свих електрода је 2.5 cm. Подешавањем потенцијала који се доводе на електроде електростатичког сочива на одговарајуће вредности врши се колимација јона, односно јонских фрагмената како би се избегли губици. Растојање између електрода је дефинисано изолаторским Рубинским куглицама, и износи 2 mm.



Слика 6.2: Изглед електронског спектрометра са масеним анализатором јона.

6.2 Принцип рада електронског и масеног спектрометра

Електрони се емитују термоелектронском емисијом са загрејане катоде од Волфрамове нити. Врх катоде се налази у центру отвора електроде V_2 (слика 6.3), чији негативни потенцијал дефинише потенцијал електрона емитованих са катоде.



Слика 6.3: Систем електрода

Наредна електрода, M_1 , служи као екстракциона електрода која својим позитивнијим потенцијалом привлачи електроне у монохроматор. У монохроматору се врши дисперзија електрона по енергији чиме се постиже просторно и енергијски дефинисан млаз. Када је монохроматор искључен, односно када су потенцијали његових електрода једнаки по апсолутној вредности, млаз електрона наставља право до већег отвора на електроди M_3 . Када се доведе напон између електрода монохроматора, кроз већи отвор електроди M_3 ће проћи само брзи електрони са енергијом која се разликује од енергије селектованих електрона. Ови електрони бивају елиминисани карактеристичним електричним пољем које формирају електроди M_4' и M_4'' , како би се спречила њихова рефлексија од површине електроди M_5 и повратак у сударну комору. Вектор јачине електричног поља које се формира између електрода монохроматора је

усмерен нормално на правац кретања упадних електрона, односно на правац вектора магнетне индукције. Електрони се у овој области крећу под утицајем силе електричног поља и Лоренцове силе описујући трохоидну путању (2. глава) тако да се центар круга који описују електрони у току спираљења креће са константном брзином дрефта \vec{v}_d дефинисаном релацијом:

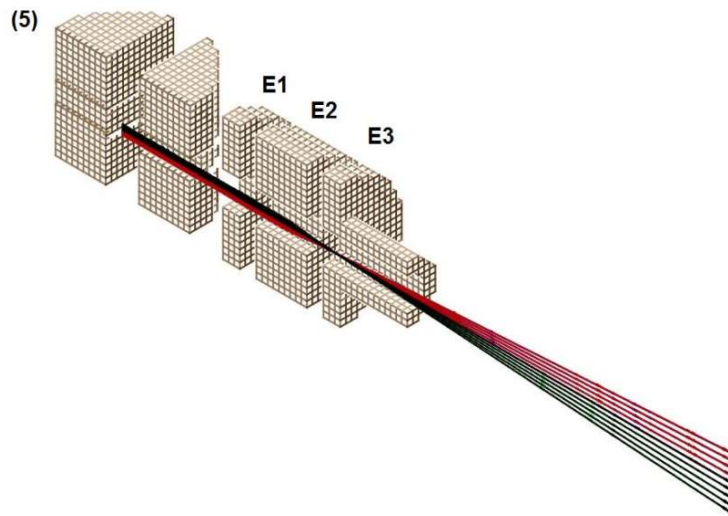
$$\vec{v}_d = \frac{\vec{E} \times \vec{B}}{B^2} \quad (6.1)$$

Брзина дрефта се јавља у равни нормалној на раван коју формирају вектори \vec{E} и \vec{B} , тако да се путања електрона савија ка доњем отвору, мањег дијаметра, на електроди M_3 , као што је приказано на слици 6.3. Кроз тај отвор ће проћи само електрони са енергијом у уском интервалу. Овај моноенергетизован млаз се даље убрзава ка области сударне коморе. У сударну комору се капиларом уводи гас нормално на правац кретања млаза електрона. Област интеракције електрона и молекула се стога своди на запремину пресека укрштених млазева. На овај начин су избегнути проблеми судара честица са зидовима коморе али и губици због дифузије молекула гаса у околној области нижег притиска, који се јављају у експериментима са гасним коморама. Електрони се сударају са молекулима гаса при чему долази до јонизације и дисоцијативне јонизације уз стварање јонских фрагмената. У току кратког временског интервала Δt , реда неколико десетина ns, млаз електрона се пропушта кроз сударну комору, а затим се прекида довођењем негативног потенцијала на електроду M_4' , који ствара потенцијалну баријеру за пролазак електрона. За то време потенцијал од +300 V се доводи на електроду сударне коморе (означену са (5) на слици 6.1), да би се формирали позитивни јони и јонски фрагменти упутили у масени анализатор (слика 6.4). Електрони настављају пут ка анализатору електронског спектрометра вођени магнетним пољем. Анализатор се у овој поставци користи као Фарадејев кавез. Захваљујући систему електрода од којих се састоји, могућа је провера резолуције млаза електрона и спречавање евентуалне рефлексije електрона од колектора и повратка у сударну комору применом одређене расподеле потенцијала на саставне електроде. Јони настали након судара електрона са молекулима гаса пролазе кроз електростатичко сочиво и фокусирани стижу у

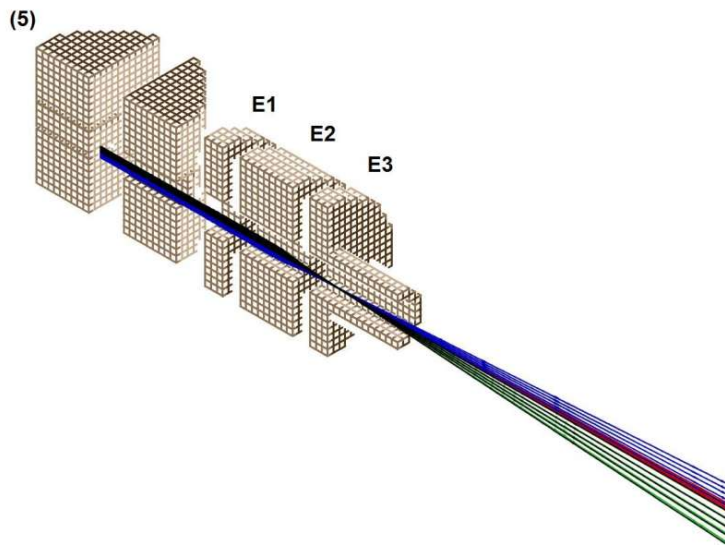
детектор. На сликама 6.5 и 6.6 су приказане путање јона, добијене уз помоћ програма SIMION, за потенцијале електрода сочива датим у опису слике и за потенцијал елемента сударне запремине (5) од +300 V. За детекцију се користи канални електронски мултипликатор (ченелтрон). Улаз ченелтрона је смештен унутар мањег цилиндра електроде E_3 , додирујући његове зидове (слика 6.3). Тиме је потенцијал улаза ченелтрона дефинисан потенцијалом електроде E_3 . Како је потенцијал на улазу ченелтрона веома висок, за довођење овог високог потенцијала се користи коаксијални кабал. Мерени временски интервал између почетка постављања репулзивног потенцијала на электроду (5) и детекције јона по стизању на детектор конвертује се у аналогни напонски пулс уз помоћ ТАС (енг. time-to-amplitude converter) уређаја. Затим се тај напонски пулс доводи до мултиканалног анализатора (МСА) где се анализира по висини (РНА, енг. pulse height analyser) и складишти, чиме се формира ТОФ спектар. Пикови у ТОФ спектру се доводе у везу са одређеним фрагментима јона на основу њихове масе и наелектрисања. Интеграли испод пикова представљају релативне доприносе одговарајућих фрагмената јона.



Слика 6.4 Масени анализатор јона и канални електронски мултипликатор.



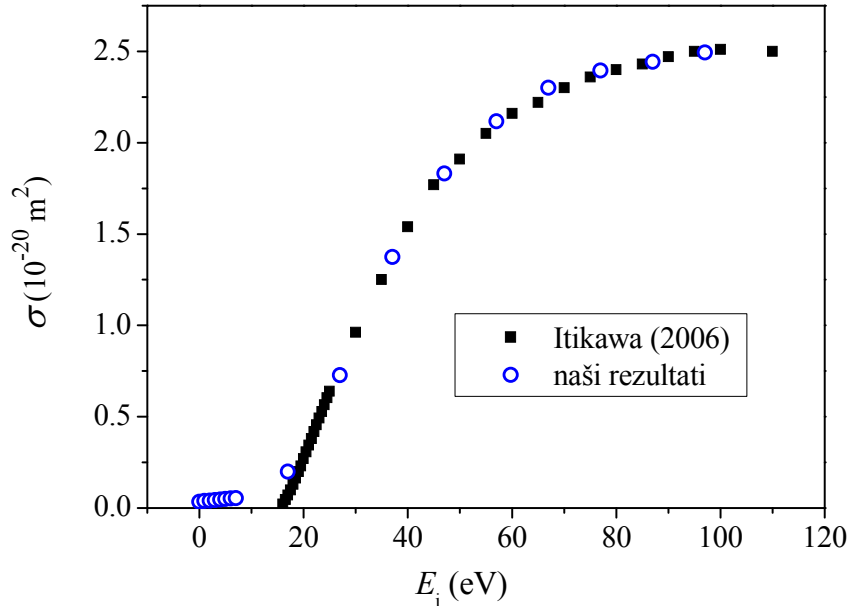
Слика 6. 5: Симулирано фокусирање јона азота за потенцијале на електродама E_1 , E_2 и E_3 од 0V, 0V и -3 kV редом.



Слика 6. 6: Симулирано фокусирање јона азота за потенцијале на електродама E_1 , E_2 и E_3 од -100V, -500V и -3 kV редом.

6.3 Прелиминарни резултати мерења тоталних пресека за јонизацију и ТОФ спектра

Прва мерења добијена уз помоћ описаног система извршена су за молекула азота. Пажљивим прегледом литературе утврђено је да се јонизацијом овог молекула електронима добијају детектабилни позитивни јони. Измерен је одброј на детектору у функцији упадне енергије електрона у континуалном режиму. На овај начин колектовани су истовремено молекулски јони и јонски фрагменти који су настали приликом интеракције молекула са електронима. Добијени резултати су калибрисани на енергију и на пресек нормирањем на апсолутну вредност тоталног ефективног пресека на 100 eV дату у ревијалном раду Итикаве (Itikawa 2006 - више детаља о овим пресецима је дато у 5.2.6). Поређење тако добијених резултата са препорученим пресецима (Itikawa 2006) показало је изузетно добро слагање (слика 6.7).

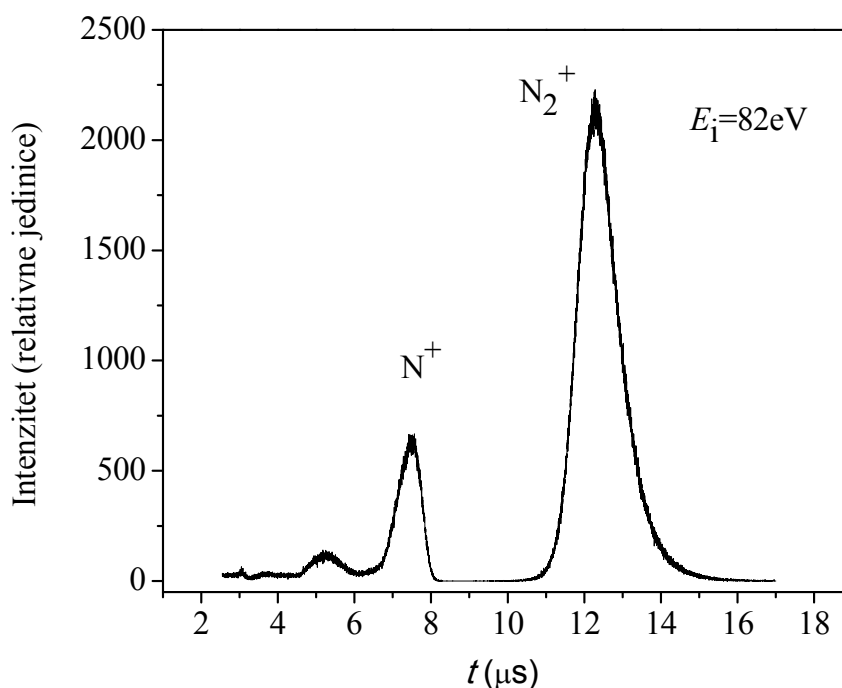


Слика 6. 7: Експериментално измерени пресеци за укупну јонизацију молекула азота електронима на енергијама од енергије прага до 100 eV.

Вредности које су добијене пре области прага могу се приписати шуму и грубој резолуцији електронског спектрометра – иако је полуширина сигнала свега 1 eV, укупна ширина је око 4 eV.

Као продукте јонизације молекула азота електронима можемо да очекујемо следеће позитивне јоне: молекулски јон N_2^+ , који настаје директном јонизацијом, и фрагменте N^+ , N_2^{++} и N^{++} , који настају у процесу дисоцијативне јонизације. Процес директне јонизације има најнижи енергијски праг од приближно 15 eV. Највиши енергијски праг има процес стварања N^{++} јона, чија је вредност око 70 eV.

На слици 6.8 приказан је спектар добијен применом ТОФ технике у пулсном режиму за фреквенцију од 5 kHz, довођењем потенцијала на елемент сударне запремине од +300 V за одбијање и усмеравање јона у масени анализатор. Приликом детекције није вршено чоповање млаза електрона, због чега није избегнут шум позадинског гаса. Спектар је добијен при упадној енергији електрона од 82 eV.



Слика 6. 8: ТОФ спектар фрагмената насталих јонизацијом молекула азота при упадној енергији електрона од 82 eV.

У зависности од односа масе и наелектрисања (m/z), јони у различито време стижу у детектор. Једнострукто јонизован молекул (N_2^+) последњи стиже до детектора и има највећи допринос. Јон N^{++} , са најнижом вредношћу m/z , први стиже у детектор. Вероватноћа настајања овог јона је најмања. Допринос N^{++} јона је занемарљив у односу на допринос N_2^+ јона. Осим тога, покривен је позадинским шумом у измереном спектру па се не може се уочити на слици 6.8. Други пик одговара јонима N^+ и N_2^{++} , чији се доприноси не могу раздвојити у овом експерименту због истог односа m/z .

Интеграција у области пикова у спектру омогућава раздвајање доприноса појединачних јона за одређене вредности упадне енергије електрона у мереном опсегу, што омогућава прорачун парцијалних пресека за јонизацију датог молекула.

Закључак

Предмет истраживања ове докторске дисертације је испитивање динамике сударних процеса (одређивањем коефицијената брзине ексцитације и јонизације) електрона и гасних молекула азота и угљен-мооксида у равнотежним условима и у условима присуства електричног и магнетног поља. Резултати за неравнотежне услове су добијени употребом Монте Карло симулације.

Пре примене за добијање нових резултата, симулација је успешно тестирана на више начина. Поузданост алгоритма за праћење кретања електрона је утврђена поређењем излазних података добијених уз помоћ три методе одређивања положаја и брзине електрона. Провера валидности процедуре у коду независне од врсте гаса је извршена поређењем макроскопских параметара добијених симулацијом за три моделна гаса. Да би се испитали неконзервативни сударни процеси додат је прорачун (балк) транспортних параметара зависних од промене броја електрона у току времена. Прорачун неконзервативних транспортних параметара је био од велике важности и за поређење са експерименталним подацима из литературе за пражњење у гасовима од интереса у целом опсегу редукованог електричног поља разматраном у овој студији због неизбежних јонизационих ефеката.

Извршени су прорачуни парцијалних и тоталних коефицијената брзине побуђивања и јонизације молекула CO и N₂ у опсегу вредности редукованог електричног поља од 20 до 1000 Td и редукованог магнетног поља од 0, 500, 1000, 2000 и 3000 Hx, којима одговара промена средње енергије електрона у интервалу од приближно 0 до 18 eV. Добијени резултати су систематски класификовани и дискутовани.

Утврђено је да коефицијенти брзине побуђивања и јонизације испитиваних молекула електронима испољавају међусобно веома сличан облик зависности од редукованог електричног поља за процесе јонизације и побуђивања, изузев ротационог побуђивања услед великих разлика у пресецима. Побуђивање преко стварања резонанце се одражава на карактеристике коефицијената вибрационог побуђивања (и ротационог код CO молекула) у виду појаве интензивних

максимума у области формирања резонанце. Енергије прагова за друге процесе ексцитације су више од области енергије у којој се одигравају резонантни процеси ексцитације и коефицијенти брзине ових процеса постепено расту без јасно изражених максимума.

Упоредна анализа зависности тоталних коефицијената брзине свих процеса од средње енергије електрона у равнотежним и неравнотежним условима је показала да механизам резонантног побуђивања молекула значајно утиче на неравнотежне коефицијенте брзине побуђивања у интервалу енергија електрона карактеристичних за ову појаву. Будући да је обухваћен само неравнотежним функцијама расподеле, овај ефекат одговоран је за мање вредности неравнотежних од Максвелових коефицијената брзине ротационог и вибрационог побуђивања у интервалу средњих енергија који одговара појави $^2\Pi$, односно $^2\Pi_g$ резонанце. Установљено је да су разлике Максвелових и неравнотежних коефицијената брзине других процеса незнатне у испитиваном интервалу средњих енергија. Утврђена је упечатљива доминантност ротационог и вибрационог побуђивања, нарочито на малим вредностима средњих енергија карактеристичних за електрична пражњења. Од осталих процеса највеће учешће имају процеси побуђивања триплетних стања све до високих средњих енергија када примат преузима јонизација молекула.

Резултати спроведеног истраживања показују у великој мери манифестацију магнетног хлађења кроз опадање коефицијената брзине реакције са порастом B/N , односно код ротационог и вибрационог побуђивања померање структура ка већим E/N са порастом B/N , без индикација аномалног понашања у целој размотреној области.

Проучавања понашања коефицијената брзине реакције за произвољне углове између електричног и магнетног поља на примеру молекула азота су указала на периодичну промену коефицијената са углом. Добијена зависност потврдила је претпоставку да се на основу прорачуна коефицијената брзине реакције за ортогоналну конфигурацију поља и коефицијената добијених у условима када је присутно само електрично поље могу добити резултати за било који угао између поља.

Допринос спроведеног истраживања има тежиште у примени добијених резултата у моделовању плазми. Коефицијенти брзине реакције су неопходни улазни подаци за флуидно моделовање плазми. Опис стања плазме који се добија моделовањем пружа информације потребне за разумевање комплексне динамике неравнотежне астрофизичке или лабораторијске плазме. Поред тога, моделовање плазме формиране у уређајима за примену плазме у технологији помаже у проналажењу оптималних радних услова за контролу плазме и повећање ефикасности инструмента, или у дизајнирању нових уређаја.

Истраживање представљено у овој докторској дисертацији се може наставити у више праваца. Пре свега, модел симулације се може употребити за прорачуне за друге врсте гаса. Због тога је за нас посебно важно да употпунимо базе пресека мерењима у нашој лабораторији. У том смислу развој спектрометра за мерење пресека за јонизацију молекула електронима и ТОФ масеног спектрометра за јоне представља велики корак у добијању резултата за парцијалне и тоталне пресеке за јонизацију разних молекула у зависности од упадне енергије електрона. Будући експериментални резултати овог уређаја ће осим интереса у фундаменталном изучавању механизма јонизације разноврсних гасних молекула користити за процену степена учешћа јонизације датих молекула у односу на допринос других канала интеракције под условима у којима се могу наћи у природи или у уређајима који се заснивају на пражњењу у плазми. Други правци даљег истраживања односе се на промену услова у симулацији, који могу бити бројни. Један од њих могао би да буде адаптација симулације за случај веома ниских вредности редукованог електричног поља када се не могу занемарити термално кретање честичне мете и супереластични сударни процеси. Надамо се да ће се кроз унапређење симулације и експеримента научни допринос нашег истраживања многоструко увећати.

Литература:

- Abolmasov S. N, *Plasma Sources Sci. Technol.* 21 (2012) 035006.
- Ajello J. M, James G. K, Franklin B. O, Shemansky D. E, *Phys. Rev. A* 40 (1989) 3524.
- Al-Amin S. A. J, Lucas J, Kucukarpaci H. N, *J. Phys. D: Appl. Phys.* 18 (1985) 2007.
- Allan M, *Phys. Rev. A* 81 (2010) 042706.
- Allan M, *J. Phys B: At. Mol. Opt. Phys.* 38 (2005) 3655.
- Anzai K, Kato H, Hoshino M, Tanaka H, Itikawa Y, Campbell L, Brunger M. J, Backman S, Cho H, Blanco F, Garsia G, Limão-Vieira P, Ingólfsson O, *Eur. Phys. J. D* 66 (2012) 36.
- Ayres T and Rabin D, *Astrophys. J.* 460 (1996) 1042.
- Barth C. A, Hord C. W, Pearce J. B, Kelly K. K, Andreson G. P, Stewart A. I, *J. Geophys. Res.* 76 (1971) 2213.
- Borah S. M, *J. Materials* 2013 (2013) 852859.
- Brennan M. J and Garvie A. M, *Aust. J. Phys.* 43 (1990) 765.
- Brunger M. J and Buckman S. J, *Phys. Rep.* 357 (2002) 215.
- Brunger M. J, Buckman S. J, Elford M. T, *Photon and electron interactions with atoms, molecules and ions*, Landolt-Börnsten Vol.I/17, Subvolume C, edited by Y. Itikawa (Springer, New York, 2003.)
- Campbell L and Brugner M. J, *PMC Phys. B* 1 (2008) 3.
- Campbell L, Allan M, Brugner M. J, *J. Geophys. Res.* 116 (2011) A09321.
- Campbell L, Brunger M. J, Nolan A. M, Kelly L. J, Wedding A. B, Harrison J, Teubner P. J. O, Cartwright D. C, McLaughlin B, *J. Phys. B* 34 (2001) 1185.
- Campbell L, Kato H, Brunger M. J, Bradshaw M. D, *J. Geophys. Res.* 115 (2010) A09320.

- Campbell L, Brunger M. J, *Plasma Sources Sci. Technol.* 22 (2013) 013002.
- Carbone E. A. D, Hübner S, Jimenez-Diaz M, Palomares J. M, Iordanova E, Graef W. A. A. D, Gamero A, J. J. A. M. van der Mullen, *J. Phys. D: Appl. Phys.*, 45 (2012) 475202.
- Celibreto R, Laporta V, Laricchiuta A, Tennyson J, Wadehra J. M, *The Open Plasma Physics Journal*, 7 (2014) 33.
- Cenian A and Chernukho A, *Radiation Physics and Chemistry*, 68 (2003) 103.
- Chutjian A and Tanaka H, *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* 13 (1980) 1901.
- Cosby P. C, *J. Chem. Phys.* 98 (1993 a) 7804.
- Cosby P. C, *J. Chem. Phys.* 98 (1993 b) 9544.
- Dujko S, White R. D, Petrović Z. Lj, Robson R. E, *Phys. Rev. E* 81 (2010) 046403.
- Dujko S, Raspopović Z. M, Petrović Z. Lj, *J. Phys. D: Appl. Phys.* 38 (2005) 2952-2966.
- Dujko S, White R. D, Ness K. F, Petrović Z. Lj, Robson R. E, *J. Phys. D: Appl. Phys.* 39 (2006) 4788-4798.
- Dujko S, White R. D, Petrović Z. Lj, *FACTA UNIVERSITATIS, Series: Physics, Chemistry and Technology*, 6 (2008) 57.
- Esler K. P, Kim J, Ceperley D. M, *Journal of Physics: Conference Series* 125 (2008) 012057.
- Fletcher J and Reid I. D, *J. Phys. D: Appl. Phys.* 13 (1980) 2275.
- Gibson J. C, Morgan L. A, Gulley R. J, Brunger M. J, Bundschu C. T, Buckman S. J, *J. Phys. B* 29 (1996) 3197.
- Gillan C. J, Tennyson J, McLaughlin B. M, Burke P. G, *J. Phys B* 29 (1996) 1531.
- Gote M and Ehrhardt H, *J. Phys. B* 28 (1995) 3957.
- Hanuš J, Ceccone G, François Rossi, *Plasma Processes and Polymers*, 9 (2012) 371.

- Hasegawa H, Date H, Shimozuma M, Yoshida K, Tagashira H, *J. Phys. D: Appl. Phys.* 29 (1996) 2664–2667.
- Hasegawa H, Date H, Yoshida K, Shimozuma M, *J. Appl. Phys.* 105 (2009) 113308.
- Haydon S. C and Williams O. M, *J. Phys. D: Appl. Phys.*, 9 (1976) 523-536.
- Heylen A. E. D and Dargan C. L, *Int. J. Electron.* 35 (1973) 433.
- Huxley L. G. H. and Crompton R. W, *The diffusion and drift of electrons in gases* (1974) Wiley, New York.
- Isola L. M, Gomez B. J, Guerra V, *J. Phys. D: Appl. Phys.*, 43 (2010) 015202.
- Itikawa Y. and Mason N., *Phys. Rep.* 414 (2005) 1.
- Itikawa Y, *J. Phys. Chem. Ref. Data* 35 (2006) 31.
- James G. K, Ajello J. M, Franklin B, Shemansky D. E, *J. Phys B* 23 (1990) 2055.
- Janda M, Machala Z, Morvová M, Franček V, Lukáč P, *Acta Physica Slovaca* 55 (2005) 507.
- Jung K, Antoni T, Muller R, Kochem K. H, Ehrhardt H, *J. Phys. B* 15 (1982) 3535.
- Kato H, Kawahara H, Hoshino M, Tanaka H, Brunger M. J, Kim Y. K, *J. Chem. Phys.* 126 (2007) 064307.
- Kawahara H, Kato H, Hoshino M, Tanaka H, Brunger M. J, *Phys. Rev. A* 77 (2008) 012713.
- Kawaguchi S, Satoh K, Itoh H, *Eur. Phys. Journal D*, 68 (2014) 1.
- Kelly L. J, PhD Thesis Flinders University of South Australia (1990).
- Kondo Y, Sekiya Y, El-Mohandes M. Th, *J. Emerg. Technol. Adv. Eng.* 3 (2013) 309.
- Kutz H and Meyer H. D, *Phys. Rev. A* 51 (1995) 3819.
- Lagarde T, Arnal Y, Lacoste A, *Plasma Sources Sci. Technol.* 10 (2001) br. 2
- Lai C, Brunmeier B, R. Claude Woods, *J. Vac. Sci. Technol. A*, 13 (1995) 2086.
- Lakshminarasimha C. S, Lucas J, Kontoleon N, *J. Phys. D: Appl. Phys.* 7 (1974) 2545.

- Land J. E, *J. Appl. Phys.* 49 (1978) 5716.
- Laporta V, Celiberto R, Wadehra J. M, *Plasma Sources Sci. Technol.* 21 (2012) 055018.
- Laporta V, Cassidy C. M, Tennyson J, Celiberto R, *Plasma Sources Sci. Technol.* 21 (2012) 045005 (7pp).
- Lindsay B. G and Mangan M. A, *Photon and Electron Interactions with Atoms, Molecules and Ions*, Landolt-Börnstein Vol.I/17, Subvolume C, edited by Y. Itikawa (Springer, New York, 2003).
- Liu W and Victor G. A, Report Series No. 3872, Harvard-Smithsonian Centre for Astrophysics, 1994.
- Malone C. P, Johnson P. V, Liu X, Ajdari B, Kanik I, Khakoo M. A, *Phys. Rev. A* 85 (2012) 062704.
- Mangan M. A, Lindsay B. G, Stebbings R. F, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* 33 (2000) 3225.
- Mao D. S and Chen Q. M, *J. Phys. D: Appl. Phys.* 28 (1995) 1111.
- Markelj S, Rupnik Z, Čadež I, *International Journal of Mass Spectrometry* 275 (2008) 64.
- Mechlińska-Drewko J, Roznerski W, Karwasz G. P, Petrović Z. Lj, *Jpn. J. Appl. Phys.* 36 (1997) 4733.
- Middleton A. G, Brunger M. J, Teubner P. J. O, *J. Phys. B* 26 (1993) 1743.
- Morrill J. S and Benesch W. M, *J. Geophys. Res.* 101 (1996) 261.
- Nakamura Y, *J. Phys. D: Appl. Phys.* 20 (1987) 933–8.
- Nickel J. C, Mott C, Kanik I, McCollum D. C, *J. Phys B*, 21 (1988) 1867.
- Ness K. F and Robson R. E, *Phys. Rev. A* 34 (1986) 2185.
- Nolan A. M, Brennan M. J, Ness K. F, Wedding A. B, *J. Phys. D: Appl. Phys.* 30 (1997) 2865-2871.

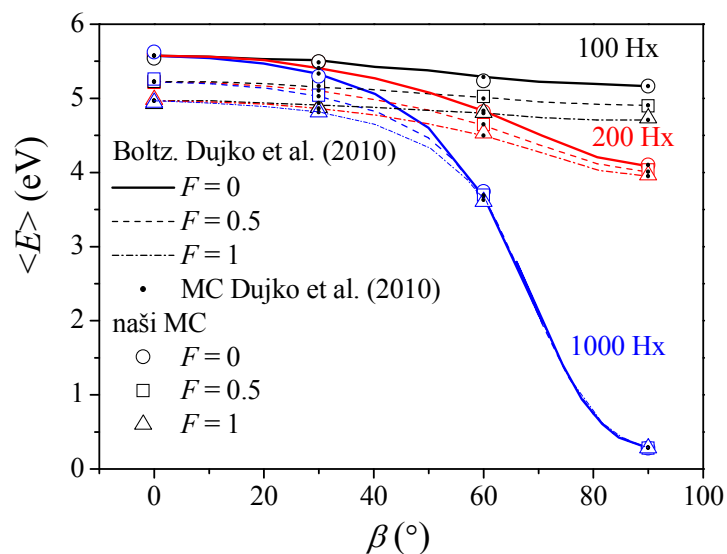
- Ohmori Y, Shimosuma M, Tagashira H, *J. Phys D* 21 (1988) 724.
- Pack J. L, Voshall R. E, Phelps A. V, *Phys. Rev.* 127 (1962) 2084.
- Pearson G. N and Hall D. R, *J. Phys. D: Appl. Phys.* 22 (1989) 1102.
- Petrović Z. Lj. and Crompton R. W, *Aust. J. Phys.* 42 (1989) 609.
- Phelps A. V and Pitchford L. C, *Phys. Rev. A* 31 (1985) 2932.
- Poparić G, Vičić M, Belić D. S, *Chem. Phys.* 240 (1999) 283.
- Poparić G, Vičić M, Belić D. S, *Phys. Rev. A* 60 (1999) 4542.
- Poparić G. B, Doktorska disertacija, Univerzitet u Beogradu (2001).
- Poparić G, Vičić M, Belić D. S, *Phys. Rev. A* 66 (2002) 022711.
- Poparić G. B, Belić D. S, Vičić M. D, *Phys. Rev. A* 73 (2006) 062713.
- Poparić G. B, Ristić M, Belić D. S, *J. Phys. Chem. A* 112 (2008) 12296.
- Popov Tsv. K, Dimitrova M, Dias F. M, Tsaneva V. N, Stelmashenko N. A, Blamire M. G, Barber Z. H, *J. Phys.: Conf. ser.* 44 (2006) 60-69.
- Press W. H, Teukolsky S. A, Vetterling W. T, Flannery B. P, *Numerical Recipes in C*, 2nd edition (1992) Cambridge university press.
- Randell J, Gulley J. R, Lunt S. L, Ziesel J. P, Field D, *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* 29 (1996) 2049.
- Raspopović Z. M, Doktorska disertacija, Univerzitet u Beogradu (1999).
- Raspopović Z. M, Sakadžić S, Bzenić S. A, Petrović Z. Lj, *IEE Trans. Plasma Sci.* 27 (1999) 1241.
- Riahi R, Teulet P, Jaidane N, Gleizes A, *Eur. Phys. J.* 56 (2010) 67.
- Ristić M, Poparić G. B, Belić D. S, *Chem. Phys.* 336 (2007) 58.
- Ristić M. M. Magistarski rad, Univerzitet u Beogradu (2007).

- Ristić M. M. Doktorska disertacija, Univerzitet u Beogradu (2011).
- Ristić M. M, Poparić G. B, Belić D. S, *Phys. Rev. A* 83 (2011) 042714.
- Ristić M. M, Vojnović M. M, Poparić G. B, Belić D. S, *Chem. Phys.* 405 (2012) 16.
- Ristić M, Poparić G. B, Belić D. S, *Chem. Phys.* 331 (2007) 410.
- Romheld M, Teichmann J, Hartmann W, *Plasma Science, IEEE Transactions on* 27 (1999) 1001.
- Roznerski W, *J. Phys. D: Appl. Phys.* 29 (1996) 614–7.
- Roznerski W and Leja K, *J. Phys. D: Appl. Phys.* 17 (1984) 279.
- Saelee H. T, PhD theses, University of Liverpool (1976).
- Saelee H. T and Lucas J, *J. Phys. D: Appl. Phys.* 10 (1977) 343.
- Saelee H. T, Lucas J, Limbeek J. W, *Solid State Electron Dev.* 1 (4) (1977) 111–5.
- Sakai Y, Tagashira H, Sakamoto S, *J. Phys. D: Appl. Phys.* 10 (1977) 1035.
- Sato K, Iriyama Y, Cho D. L, Yashuda H, *J. Vac. Sci. Technol. A* 7 (1989) 195.
- Schulz G. J, *Phys. Rev.* 135 (1964) A988.
- Sree Harsha K. S, *Principles of Vapour Deposition of Thin Films* (2006), Oxford, UK.
- Sitko M. L, Bernstein L. S, Glinski R. J, *Astrophys. J.* 680 (2008) 1426.
- Slinker S. L and Ali A. W, *Electron Excitation and Ionization Rate Coefficients for N₂, O₂, NO, N and O*, Naval Research Laboratory Memorandum Report 4756, Washington, DC (1982).
- Straub H. C, Renault P, Lindsay B. G, Smith K. A, Stebbings R. F, *Phys. Rev. A* 54 (1996) 2146.
- Sun W, Morrison M. A, Isaacs W. A, Trail W. K, Alle D. T, Gulley R. J, Brennan M. J, Buckman S. J, *Phys. Rev. A* 52 (1995) 1229.
- Tagashira H, Sakai Y, Sakamoto S, *J. Phys. D* 10 (1977) 1051.

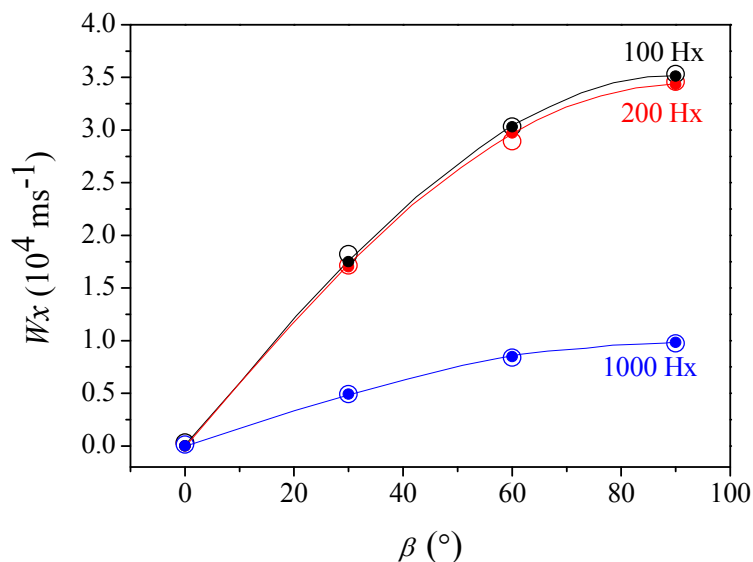
- Telega S, Bodo E, Gianturco F. A, *Eur. Phys. J. D* 29 (2004) 357.
- Trajmar S, Register D. F, Chutijan A, *Phys. Rep.* 97 (1983) 219.
- Vičić M. D, Poparić G. B, Belić D. S, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* 29 (1996) 1273.
- Vičić M. D, Poparić G. B, Belić D. S, *Rev. Sci. Instrum.* 69 (1998) 1996.
- Vojnović M, Popović M, Ristić M. M, Vičić M. D, Poparić G. B, *Chem. Phys.* 423 (2013) 1-8.
- Vojnović M, Popović M, Ristić M. M, Vičić M. D, Poparić G. B, *Chem. Phys.* 463 (2015) 38.
- Vojnović M and Belić D. S, *27th Summer School and International Symposium on the Physics of Ionized Gases (SPIG) Belgrade 2014.*
- Wagner K. H and Raether H, *Z. Phys.* 170 (1962) 540.
- Wannier G. H, *Am. J. Phys.* 39 (1971) 281.
- Washeski R. L, Meyer E. J, King L. B, *Rev. Sci. Instrum.*, 84 (2013) 105101.
- Wedding A. B, Blevin H. A, J. Fletcher, *J. Phys. D: Appl. Phys.* 18 (1985) 2361.
- White R. D, Ness K. F, Robson R. E, Li B, *Phys. Rev. E* 60 (1999) 2231.
- White R. D, Brennan M. J, Ness K. F, *J. Phys. D* 30 (1997) 810.
- Winkler H and Notholt J, *Atmos. Chem. Phys.* 14 (2014) 3545.
- Živanov S, Čížek M, Horáček, Allan M, *J. Phys B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, 36 (2003) 3513.
- Zetner P. W, Kanik I, Trajmar S, *J. Phys. B* 31 (1998) 2395.

Прилози

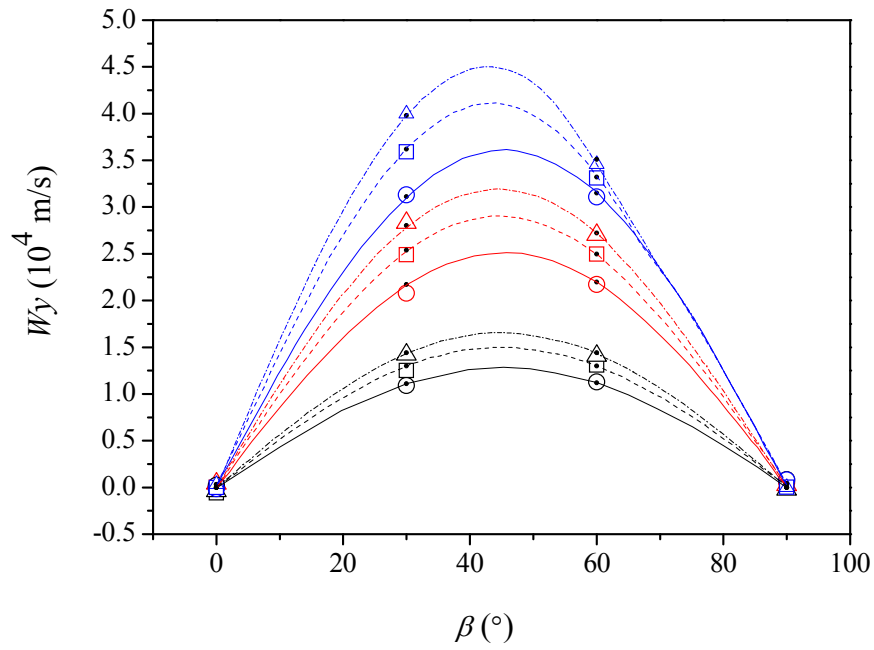
Прилог А: Тестови транспортних параметара у моделном гасу Лукас-Сејли за произвољне углове између електричног и магнетног поља



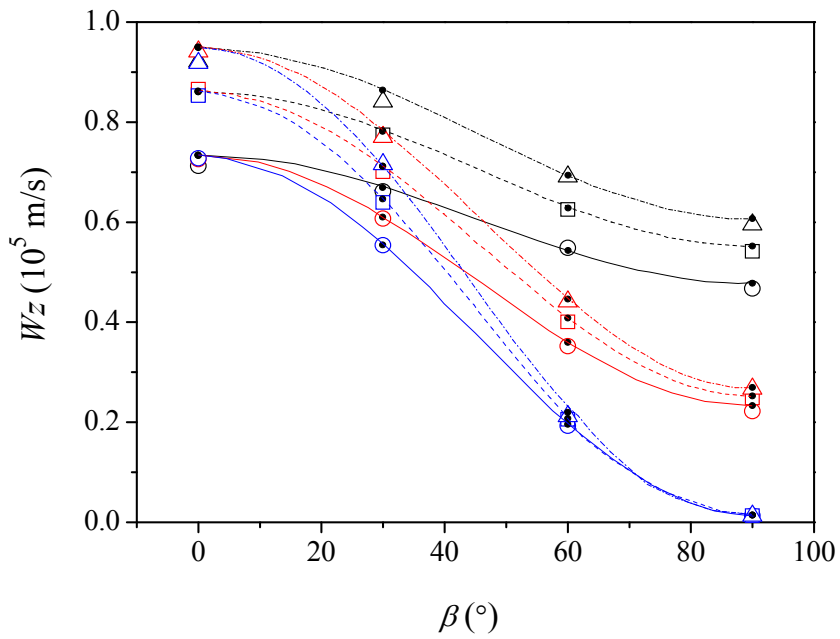
Слика 1. Средња енергија у функцији угла β : тачкасти симболи - (Dujko et al. 2010) MC симулација, линије - (Dujko et al. 2010) теоријски резултати, празни симболи - наши резултати.



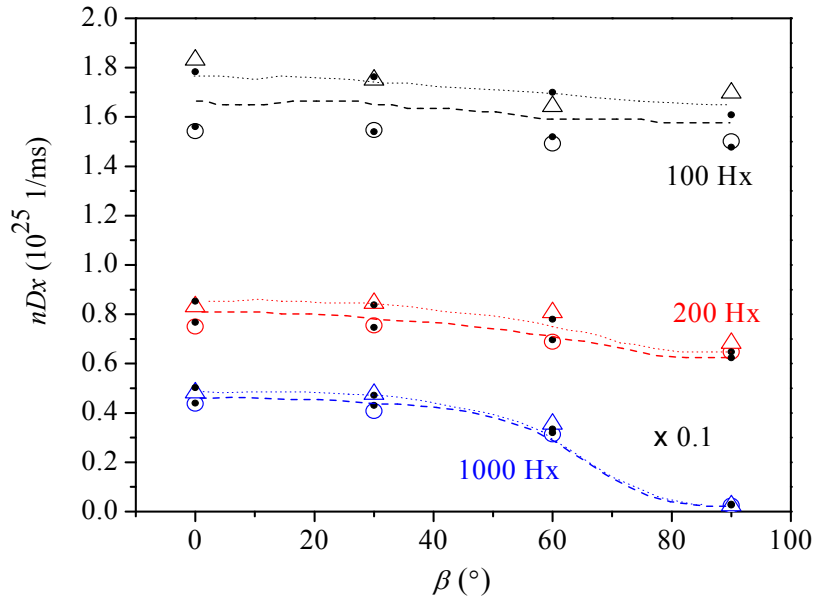
Слика 2. Зависност x компоненте брзине дрифта од угла β за $F=0$: пуна линија - теоријски резултати (Dujko et al. 2010), пуни симболи - MC симулација (Dujko et al. 2010), празни симболи - наши резултати.



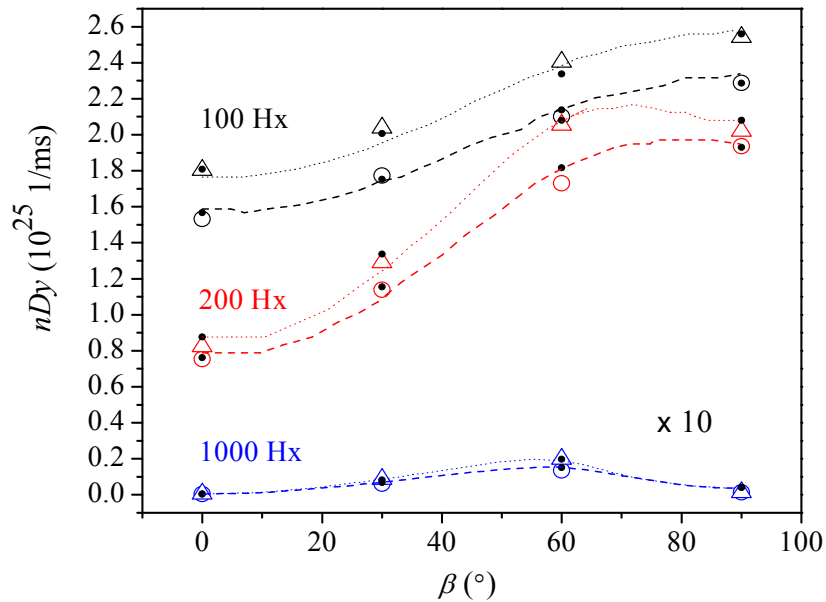
Слика 3. Зависност у компоненте брзине дрифта од угла β са истим ознакама као на слици 1.



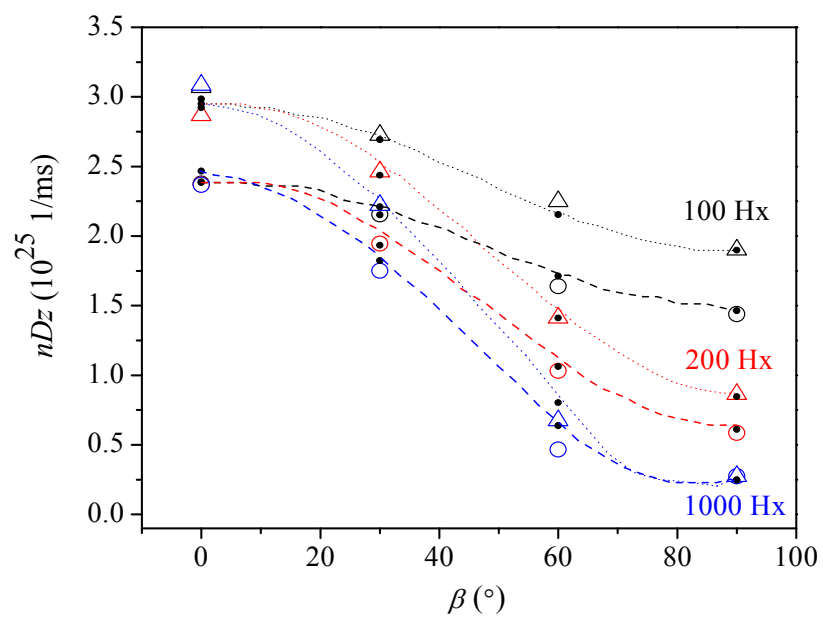
Слика 4. Зависност z компоненте брзине дрифта од угла β са истим ознакама као на слици 1.



Слика 5. Зависност x компоненте коефицијента дифузије од угла β за $F = 1$: тачкаста линија - теоријски резултати, балк (Dujko et al. 2010); испрекидана линија - теоријски резултати, флуks (Dujko et al. 2010); тачке - MC симулација (Dujko et al. 2010); троуглови - наши резултати, балк; кружићи - наши резултати, флуks; облик симбола – исто као на слици 1.



Слика 6. Зависност y компоненте коефицијента дифузије од угла β за $F = 1$ са истим ознакама као на слици 5.



Слика 7. Зависност z компоненте коефицијента дифузије од угла β за $F = 1$ са истим ознакама као на слици 5.

Прилог Б: Истоветност услова паралелних електричних и магнетних поља и одсуства магнетног поља

У анализи представљеној у глави 5 претпостављено је да електрон почиње да се креће у правцу вектора јачине електричног поља. Једноставним рачуном се може показати да истоветност услова паралелних поља и одсуства магнетног поља важи и у општем случају. Наиме, ако електрон улази са одређеном вредношћу почетне брзине у произвољном правцу у област деловања електричног поља, односно паралелних електричних и магнетних поља, трајекторије у ова два случаја неће бити исте. Међутим, вероватноћа сударних процеса не зависи од трајекторије, већ од укупног пређеног пута. Уколико је пређени пут исти и средња енергија и коефицијенти брзине реакције ће бити исти. Како је пређени пут

$$S = \int_0^t \sqrt{v_x^2 + v_y^2 + v_z^2} dt, \quad (1)$$

да би се испитала једнакост $(S)_{\beta=0} = (S)_{B=0} = (S)_{\beta=\pi}$ довољно је испитати једнакост подинтегралних функција, односно збира квадрата компонената брзина.

За паралелна поља ($\beta = 0$) из једначина (2.14-2.16) се добија:

$$v_x = -v_{0y} \sin \omega t + v_{0x} \cos \omega t, \quad (2)$$

$$v_y = v_{0y} \cos \omega t + v_{0x} \sin \omega t, \quad (3)$$

$$v_z = v_{0z} + at. \quad (4)$$

За $B = 0$ компоненте брзине су:

$$v_x = v_{0x}, \quad (5)$$

$$v_y = v_{0y}, \quad (6)$$

$$v_z = v_{0z} + at. \quad (7)$$

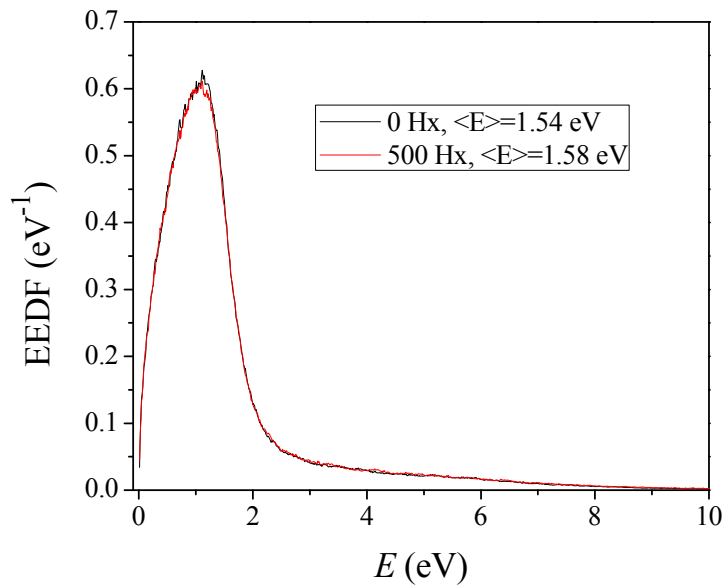
За антипаралелна поља ($\beta = \pi$) се добија:

$$v_x = v_{0y} \sin \omega t + v_{0x} \cos \omega t, \quad (8)$$

$$v_y = v_{0y} \cos \omega t - v_{0x} \sin \omega t, \quad (9)$$

$$v_z = v_{0z} + \alpha t. \quad (10)$$

Када се саберу квадрати компонената брзина за сваки систем једначина (2-4), (5-7) и (8-10) се добија исти резултат. Тиме је математички показано да, када су вектори \vec{E} и \vec{B} паралелни, односно антипаралелни, нема утицаја магнетног поља на укупан пређени пут електрона. То значи да ће средња енергија и функција расподеле електрона по енергијама (а тиме и коефицијенти брзине побуђивања и јонизације) бити скоро исте као и без магнетног поља. Резултати симулације на примеру кретања електрона кроз гас угљен-моноксида са вектором почетне брзине усмереним под угловима $\theta_1 = \varphi_1 = 45^\circ$ (слика 1) потврђују дати закључак.



Слика 1: Функције расподеле електрона по енергијама за $\beta = 0^\circ$, $E/N=100 \text{ Td}$ и $\theta_1 = \varphi_1 = 45^\circ$ у присуству магнетног поља (анти)паралелног електричном и у одсуству магнетног поља.

Биографија:

Мирјана Војновић рођена је 19. 04. 1984. године у Београду. Основну школу и гимназију завршила је у Београду. Дипломирала је на Физичком факултету Универзитета у Београду 10. 05. 2010. године на смеру Општа физика са просечном оценом 8,37 (оцена дипломског рада 10). Докторске студије на Физичком факултету на смеру Физика атома и молекула уписала је школске 2010/2011. године, под менторством проф. др Горана Попарића. Предвиђене испите положила је са просечном оценом 10. У току докторских студија била је ангажована у извођењу наставе за студенте основних и мастер студија Физичког факултета.

Мирјана Војновић је од јануара 2011. године запослена на Физичком факултету у оквиру пројекта Министарства Науке Републике Србије „Атомски сударни процеси и фотоакустичка спектроскопија молекула и чврстих тела“ (ев. бр. 171016), чији је руководилац проф. др Драгољуб Белић. Научна активност кандидата води се у два правца: рад на Монте Карло симулацији транспорта електрона кроз гас молекула у присуству електричних и магнетних поља и развој електронског спектрометра са “time-of-flight” масеним спектрометром за детекцију јонских фрагмената. Објавила је 4 рада у међународним часописима (2 из категорије М22 и 2 из категорије М23 у години публикавања). Учествовала је на једној националној и на две међународне конференције.

Списак публикација:

Радови у међународним часописима:

1. M. M. Ristić, M. Vojnović, G. B. Poparić, D. S. Belić, *Rate coefficients for electron impact excitation of the $\alpha^3\Pi$ state of CO*, Chemical Physics, (2012, IF = 1.96), vol. 405,16-21.
2. Vojnović M, Popović M, Ristić M. M, Vičić M. D, Poparić G. B, *Rate coefficients for electron impact excitation of CO*, Chem. Phys. 423 (2013, IF = 2.0) 1-8.
3. M. P. Popović, M. M. Vojnović, M. M. Aoneas, M. M. Ristić, M. D. Vičić, G. B. Poparić, *Ionization of N_2 in radio-frequent electric field*, Physics of Plasmas, (2014, IF = 2.14), vol. 21, 063504.
4. Vojnović M, Popović M, Ristić M. M, Vičić M. D, Poparić G. B, *Rate coefficients for electron impact excitation of N_2* , Chem. Phys. vol. 463 (2015, IF = 1.65) 38.

Радови у зборницима међународних конференција :

1. M. Vojnović, M. Popović, M. M. Ristić, M. Vičić, G. B. Poparić, *Rate coefficients in crossed E and B fields in CO*, SPIG, Zrenjanin, 2012.
2. M. Popović, M. Vojnović, M. M. Ristić, M. Vičić, G. B. Poparić, *Rate coefficients for electron impact ionization in RF electric field in Nitrogen*, SPIG, Zrenjanin, 2012.
3. M. M. Vojnović and D. S. Belić, *Rate coefficients for electron-impact dissociation of O_3^+* , SPIG, Beograd, 2014.
4. M. M. Aoneas, M. M. Vojnović, M. M. Ristić, M. D. Vičić, G. B. Poparić, *Electron impact ionization of CO in RF electric field*, SPIG, Beograd, 2014.

Радови у зборницима националних конференција :

1. M. M. Vojnović, M. Popović, M. M. Ristić, and G. B. Poparić, *Development of electron ionization time-of-flight mass spectrometer*, CEAMPP, Beograd, 2013.
2. M. M. Vojnović, M. M. Ristić, M. D. Vičić and G. B. Poparić, *Monte Carlo simulation of electron transport in N₂*, CEAMPP, Beograd, 2013.

Прилог 1.

Изјава о ауторству

Потписани-а Мирјана Војновић

број уписа D-23/2010

Изјављујем

да је докторска дисертација под насловом

Коефицијенти брзине повућивања и јонизације молекула CO и N₂ електронима у присуству електричних и магнетних поља

- резултат сопственог истраживачког рада,
- да предложена дисертација у целини ни у деловима није била предложена за добијање било које дипломе према студијским програмима других високошколских установа,
- да су резултати коректно наведени и
- да нисам кршио/ла ауторска права и користио интелектуалну својину других лица.

Потпис докторанда

У Београду, 18.1.2016.

Мирјана Војновић

Прилог 2.

Изјава о истоветности штампане и електронске верзије докторског рада

Име и презиме аутора Мирјана Војновић

Број уписа D-23/2010

Студијски програм физика атома и молекула

Наслов рада Коефицијенти брзине побуђивања и јонизације молекула CO и N₂ електронима у присуству електричних и магнетних поља

Ментор Проф. др Горан Попарић

Потписани Мирјана Војновић

изјављујем да је штампана верзија мог докторског рада истоветна електронској верзији коју сам предао/ла за објављивање на порталу Дигиталног репозиторијума Универзитета у Београду.

Дозвољавам да се објаве моји лични подаци везани за добијање академског звања доктора наука, као што су име и презиме, година и место рођења и датум одбране рада.

Ови лични подаци могу се објавити на мрежним страницама дигиталне библиотеке, у електронском каталогу и у публикацијама Универзитета у Београду.

Потпис докторанда

У Београду, 18. 1. 2016.

Мирјана Војновић

Прилог 3.

Изјава о коришћењу

Овлашћујем Универзитетску библиотеку „Светозар Марковић“ да у Дигитални репозиторијум Универзитета у Београду унесе моју докторску дисертацију под насловом:

Коефицијенти брзине побуђивања и јонизације молекула CO и N₂ електроцима у присуству електричних и магнетних поља

која је моје ауторско дело.

Дисертацију са свим прилозима предао/ла сам у електронском формату погодном за трајно архивирање.

Моју докторску дисертацију похрањену у Дигитални репозиторијум Универзитета у Београду могу да користе сви који поштују одредбе садржане у одабраном типу лиценце Креативне заједнице (Creative Commons) за коју сам се одлучио/ла.

1. Ауторство
2. Ауторство - некомерцијално
3. Ауторство – некомерцијално – без прераде
4. Ауторство – некомерцијално – делити под истим условима
5. Ауторство – без прераде
6. Ауторство – делити под истим условима

(Молимо да заокружите само једну од шест понуђених лиценци, кратак опис лиценци дат је на полеђини листа).

Потпис докторанда

У Београду, 18. 1. 2016.

Мирјана Војновић

1. Ауторство - Дозвољавате умножавање, дистрибуцију и јавно саопштавање дела, и прераде, ако се наведе име аутора на начин одређен од стране аутора или даваоца лиценце, чак и у комерцијалне сврхе. Ово је најслободнија од свих лиценци.

2. Ауторство – некомерцијално. Дозвољавате умножавање, дистрибуцију и јавно саопштавање дела, и прераде, ако се наведе име аутора на начин одређен од стране аутора или даваоца лиценце. Ова лиценца не дозвољава комерцијалну употребу дела.

3. Ауторство - некомерцијално – без прераде. Дозвољавате умножавање, дистрибуцију и јавно саопштавање дела, без промена, преобликовања или употребе дела у свом делу, ако се наведе име аутора на начин одређен од стране аутора или даваоца лиценце. Ова лиценца не дозвољава комерцијалну употребу дела. У односу на све остале лиценце, овом лиценцом се ограничава највећи обим права коришћења дела.

4. Ауторство - некомерцијално – делити под истим условима. Дозвољавате умножавање, дистрибуцију и јавно саопштавање дела, и прераде, ако се наведе име аутора на начин одређен од стране аутора или даваоца лиценце и ако се прерада дистрибуира под истом или сличном лиценцом. Ова лиценца не дозвољава комерцијалну употребу дела и прерада.

5. Ауторство – без прераде. Дозвољавате умножавање, дистрибуцију и јавно саопштавање дела, без промена, преобликовања или употребе дела у свом делу, ако се наведе име аутора на начин одређен од стране аутора или даваоца лиценце. Ова лиценца дозвољава комерцијалну употребу дела.

6. Ауторство - делити под истим условима. Дозвољавате умножавање, дистрибуцију и јавно саопштавање дела, и прераде, ако се наведе име аутора на начин одређен од стране аутора или даваоца лиценце и ако се прерада дистрибуира под истом или сличном лиценцом. Ова лиценца дозвољава комерцијалну употребу дела и прерада. Слична је софтверским лиценцама, односно лиценцама отвореног кода.