

Univerzitet u Beogradu

Elektrotehnički fakultet

Srđan D. Marjanović

Monte Karlo simulacija transporta pozitrona u
realnim sistemima ispunjenim gasom

Doktorska disertacija

Beograd, 2016

University of Belgrade
School of Electrical Engineering

Srđan D. Marjanović

Monte Carlo simulation of positron transport
in realistic gas filled systems

Doctoral Dissertation

Belgrade, 2016

Mentori:

akademik dr Zoran Lj. Petrović, naučni savetnik, Institut za fiziku u Beogradu

dr Jovan Cvetić, redovni profesor, Elektrotehnički fakultet, Univerzitet u Beogradu

Članovi komisije:

akademik dr Zoran Lj. Petrović, naučni savetnik, Institut za fiziku u Beogradu

dr Jovan Cvetić, redovni profesor, Elektrotehnički fakultet u Beogradu,

dr Branko Kolundžija, redovni profesor, Elektrotehnički fakultet u Beogradu

dr Bratislav Iričanin, docent, Elektrotehnički fakultet u Beogradu

Datum odbrane:

Doktorska disertacija pod nazivom "**Monte Karlo simulacija transporta pozitrona u realnim sistemima ispunjenim gasom**" je urađena u Laboratoriji za gasnu elektroniku Instituta za fiziku u Beogradu, pod rukovodstvom mentora prof. dr Zorana Lj. Petrovića i prof. dr Jovana Cvetića. Prof. Petrović je rukovodio izradom disertacije, odabirom teme, predmeta i metode izučavanja, kao i fizičkim tumačenjem rezultata.

Veliku zahvalnost dugujem prof. dr Zoranu Petroviću na činjenici da me je uveo u svet nauke, pozitronske fizike i fizike naelektrisanih čestica, na obezbeđivanju uslova za rad, definisanju teme istraživanja, korisnim savetima i prenetom iskustvu i znanju.

Zahvaljujem prof. dr Jovanu Cvetiću na strpljenju i uloženom trudu da se disertacija finalizuje i odbrani.

Zahvaljujem se i

dr Milovanu Šuvakovu koji je rukovodio razvojem inicijalnog računarskog koda korišćenog za simulacije trapova prikazane u disertaciji.

dr Ani Banković na radu na finalizovanju setova preseka kao i, zajedno sa dr Sašom Dujkom, saradnji i diskusiji na više tema koje su obrađene u ovoj disertaciji.

dr Cassidy David-u sa University College London na pruženoj prilici da se obave eksperimentalna merenja trapovanja pozitrona u konfiguraciji koja je predložena u ovoj disertaciji. Takođe zahvaljujem se i dr Deller Adam-u i dr Cooper Ben-u na saradnji i pomoći u laboratoriji.

dr Joan Marler i dr Gordani Malović na radu pri sastavljanju setova preseka za interakciju pozitrona sa proučavanim gasovima.

Kolege iz oblasti fizike pozitrona: Prof. Clifford Surko, Prof. Michael Charlton, Prof. Gustavo Garcia, Prof. Stephen Buckman, dali su značajan doprinos kroz razmenu ideja i davanje niza sugestija i na tome im iskazujem veliku zahvalnost.

Mariji Savić, dr Neveni Puač i dr Nikoli Škoru na pomoći i diskusiji uz kafu.

Svim kolegama iz Laboratorije za Gasnu elektroniku na svakodnevnom druženju i podršci.

Porodici i prijateljima na strpljenju, razumevanju i podršci.

Beograd, 2016.

Srđan Marjanović

Naslov disertacije: "Monte Karlo simulacija transporta pozitrona u realnim sistemima ispunjenim gasom"

Rezime:

Napredak uređaja za akumulaciju i skladištenje pozitrona omogućava sve preciznija merenja preseka za interakciju pozitrona sa atomima i molekulima. Nedavno kompletirani setovi sudarnih podataka za molekule koji se najčešće javljaju u pozitronskim uređajima i primenama (najpre N_2 , CF_4 i H_2O ali i drugi) omogućili su detaljne simulacije transporta pozitrona u takvim sredinama, kao i detaljan opis uređaja koji se na njima baziraju. Osnovni cilj ove disertacije jeste da na osnovu izmerenih sudarnih podataka, pomoću računarskih Monte Karlo simulacija, detaljno analizira realne uređaje i sisteme ispunjene gasom koji svoju funkciju baziraju na elementarnim procesima u kojima učestvuju pozitroni. Disertacija se fokusira na tri konkretna sistema: pozitronski trap, kompresiju snopa pozitrona rotirajućim poljem i termalizaciju pozitrona u biološki relevantnoj sredini.

Otkriće i razvoj pozitronskog (Surko) trapa početkom devedesetih godina, predstavlja prekretnicu u polju fizike niskoenergijskih pozitrona i dovelo je do velikog napretka u razumevanju interakcije niskoenergijskih pozitrona sa atomima i molekulima. Trapovi su omogućili akumulaciju velikog broja pozitrona (10^6 - 10^8), niske energije sa energijskom raspodelom koja odgovara sobnoj temperaturi (<50 meV) što omogućava formiranje intenzivnih snopova pozitrona sa precizno definisanom energijom. Kao takvi, pozitronski trapovi predstavljaju osnovi alat u brojnim eksperimentima poput merenja preseka za interakciju, proizvodnje antivodonika, proizvodnje i proučavanja pozitronijuma, pozitronske anihilacione spektroskopije i slično. Od trenutka kada je prvi put primenjen, princip rada i dizajn pozitronskog trapa se nije značajnije menjao i standardno je obezbeđivao efikasnost trapovanja od 10-20%. U zavisnosti od konkretne primene trapa, kroz empirijske pokušaje su optimizovani različiti parametri rada, kao što su: efikasnost trapovanja, vreme života akumuliranih pozitrona, maksimalna koncentracija pozitrona ili broj emitovanih sporih pozitrona u sekundi. U disertaciji koristimo preseke koji su izmereni zahvaljujući ovakvim trapovima, kako bismo kroz simulaciju analizirali njihov rad, identifikovali procese koji utiču na performanse trapa i našli način da se performanse optimizuju. Ujedno, simulacija omogućava lakše menjanje osobina trapa koje nije lako promeniti u eksperimentu, kao što su geometrija trapa, ili sastav gasa. Kako simulacija identifikuje proces formiranja pozitronijuma na molekulima N_2 kao glavni ograničavajući faktor za ostvarivanje veće efikasnosti, predložen je model, i urađena je detaljna simulacija alternativnog načina trapovanja pozitrona koja kao glavni radni gas umesto N_2 , za trapovanje koristi vibracione eksitacije molekula CF_4 , u energijskom opsegu daleko ispod praga za formiranje pozitronijuma. U saradnji sa kolegama sa University College London, iz Grupe za atomsku, molekulsku, optičku i pozitronsku fiziku, pokušana je konverzija

standardnog pozitronskog trapa u predloženu CF₄ konfiguraciju i utvrđeni su, kroz eksperiment i simulaciju, konstrukcijski nedostaci koji onemogućavaju konverziju najvećeg broja postojećih trapova, kao i aspekti koji bi trebalo da se uzmu u obzir prilikom konstrukcije budućih trapova.

Pozitroni akumulirani u trapu se, u najvećem broju modernih trapova, komprimuju primenom rotirajućeg električnog polja. Na taj način se sprečava difuzija pozitrona ka zidovima naprave i značajno produžava vreme života, postiže veća prostorna rezolucija izlaznog snopa i povećava koncentracija pozitrona u snopu. Dipolno ili kvadrupolno električno polje se ostvaruje segmentiranjem jedne od elektroda akumulacionog stepena trapa i primenom adekvatno fazno pomerenog sinusnog napona. Iako se rotirajuće polje odavno koristi za kompresiju jednokomponentnih plazmi, nedavno je pokazano da se na sličan način može komprimovati i oblak pozitrona u tzv. *jednočestičnom* režimu, kada gustina pozitrona nije dovoljna da se formira plazma, ali princip kompresije u ovom režimu nije bio do kraja objašnjen. U disertaciji je, kroz simulaciju, pokazano da je efekat kompresije u *jednočestičnom* režimu posledica kompleksne trajektorije pozitrona u uslovima rotirajućeg polja u trapu i oblika i veličine neelastičnih preseka, pre svih, preseka za vibracionu eksitaciju. Analiziran je uticaj jačine i frekvencije primenjenog električnog polja kao i doprinos pojedinih sudarnih procesa brzini kompresije. Prikazana je veza jačine primenjenog električnog polja, brzine kompresije i neizbežnog gubitka pozitrona kroz proces formiranja pozitronijuma usled grejanja roja.

Jedna od najbitnijih oblasti primene pozitrona jeste medicinska primena, najpre u okviru PET dijagnostike. U ovoj disertaciji, kroz Monte Karlo simulaciju, analizirana je krajnja faza trajektorije pri termalizaciji visokoenergijskih pozitrona u vodenoj pari i jednostavnom modelu biološke sredine kao zamenama za tkivo, koristeći setove preseka bazirane na eksperimentalnim merenjima pozitronske interakcije sa molekulom H₂O. Disertacija ukazuje na potrebu postojanja pozitronskih eksperimenata sa rojevima u vodenoj pari, kojima bi se ovakvi setovi normirali i validirali, i u tu svrhu predlaže nekoliko usrednjenih veličina poput vremena termalizacije, energije predate u sudarima sa gasom, ili domet pozitrona, koje bi mogle biti merene i iskorišćene za normalizaciju preseka. Takođe formulisan je jednostavan model u kojem je vodenoj pari dodata organska komponenta, kroz presek za disocijaciju molekula CH₄ kao zamenu za proces oštećenja na DNK. Analizirane su trajektorije pozitrona u takvoj sredini, kao i učestanost i prostorna raspodela različitih sudarnih procesa u toku termalizacije. Kroz analizu prostornog profila energije predate sredini, i prostorne raspodele pojedinačnih događaja disocijacije CH₄ utvrđeno je da ne postoji nužno korelacija između predate energije i pojedinačnih događaja oštećenja biološkog materijala što ukazuje na potrebu da se unaprede dozimetrijski modeli kako bi se uzela u obzir stohastička priroda procesa oštećenja molekula DNK.

Ključne reči: Pozitroni, Monte Carlo, Pozitronski trap, Formiranje pozitronijuma, Azot, Karbon tetrafluorid, Vodena para, Simulacija

Naučna oblast: Elektrotehnika

Uža naučna oblast: Fizika pozitrona, Kinetička teorija i simulacije transporta pozitrona u gasovima, Atomska i molekularna fizika

UDK broj: 621.3 (043.3)

Title: "Monte Carlo simulation of positron transport in realistic gas filled systems"

Abstract:

Development and advancement of positron accumulation and storage devices has enabled increasingly accurate measurements of cross-sections for positron interaction with atoms and molecules. Recently assembled cross-section sets for molecules that most commonly occur in positron devices and applications (N_2 , CF_4 , H_2O and others) have enabled detailed simulations of positron transport in such environments, and also for realistic geometries of devices that utilize such environments. Prime goal of this dissertation is to provide detailed analysis, through use of measured collision data and Monte Carlo simulations, of realistic devices and systems filled with gas, that base their operation on elementary processes involving positrons. Dissertation is focused on three systems in particular: positron buffer gas trap, positron cloud compression by rotating electric field and positron thermalization in biologically relevant environments.

Discovery and development of positron (Surko) traps in the early 90's was a milestone in field of low-energy positron physics, and has led to significant advancement in understanding of low-energy positron interaction with atoms and molecules. Buffer gas positron traps have enabled accumulation of large numbers of low-energy positrons (10^6 - 10^8), with room temperature energy distribution (<50 meV), and allowed formation of intense positron beams with finely controlled beam energy. As such, positron traps are the primary tool in numerous experiments such as cross-section measurements, antihydrogen production, production and study of positronium, positron annihilation spectroscopy etc. From their first application, the operating principles and basic design of positron traps has not changed significantly as it has regularly provided 10-20% trapping efficiency. Through empirical developments, depending on the particular trap application, people have been able to optimize different operation parameters, such as trapping efficiency, lifetime of accumulated positrons, maximum number density of accumulated positrons or number of slow positrons emitted per second. In this dissertation we use the cross-section data that was measured through use of such positron traps in a computer simulation, in order to analyze their operation, identify processes that govern their performance, and find a way to optimize it. At the same time, the simulation gives the benefit of easily modifying trap properties that are not easy to change in the experimental device, such as trap geometry or gas composition. As the simulation identifies the process of positronium formation on N_2 molecule as the major limiting factor in achieving higher trapping efficiency, a model is proposed, and the detailed simulation is presented on an alternate scheme of trapping positrons, that exploits vibrational excitation of CF_4 molecule, on the scales of energies well below the positronium formation threshold. In collaboration with the colleagues from the Atomic, Molecular, Optical and Positron Physics Group, University College London,

we have attempted to convert a standard positron trap to the newly proposed CF_4 configuration, and have determined, through both experiment and simulation, problems in current trap designs, that make conversion of most positron traps very difficult, as well as the aspects that should be considered in construction of future traps.

In most modern traps, positron clouds that are accumulated are compressed using a rotating electric field. By doing so, diffusion of positrons to the walls of the device is negated which allows for a much longer positron lifetimes, higher spatial resolution of an outgoing positron beam as well as increased positron number density. Dipole or quadruple electric field is produced by segmenting one of the electrodes at the accumulation stage of the trap, and by application of adequately phase-shifted sine voltages. Even though the rotating field has been used for compression of single component plasmas for a long time, it has been shown recently that it is possible to, similarly, compress a cloud of positrons, in a so called *single particle regime* where positron number density is too low to form a plasma. However the origin of the compression effect has not been completely understood. This dissertation demonstrates through simulation that the compression effect in a *single particle regime* is a result of complex positron trajectory (in rotating field conditions inside the trap) coupled with the shape and magnitude of the cross-sections for inelastic collisions, first and foremost vibrational excitation collisions. Also presented is the analysis that the magnitude and frequency of the applied electric field, as well as the contribution of individual collision processes, have on the compression rate. Correlation of electric field magnitude, rate of compression and the inevitable loss of positrons through positronium formation (due to the heating of the swarm) is also analyzed.

One of the most important fields of positron application is in the field medicine, primarily in the PET diagnostic technique. This dissertation studies, through Monte Carlo computer simulation, the final stages of positron trajectories during thermalization from high energies in water vapor and in a simple model of biological environment as a surrogate for tissue, by using cross-section sets based primarily on measured data for positron interaction with H_2O molecule. The dissertation stresses the necessity of positron swarm experiments, which are currently lacking, that could be used to normalize and validate such cross-section sets and for that purpose proposes several averaged quantities such as thermalization times, energy transferred in collisions with gas or positron range, which can be measured and used to for normalization. Also, a simple model is described that adds an organic component to the water vapor, through the cross-section for CH_4 dissociation as a proxy for damage to DNA molecules. Trajectories in such an environment are analyzed as well as the rates and spatial distribution of different collisions during thermalization. By analyzing the spatial profile of energy deposited to the medium and the spatial distribution of individual CH_4 dissociation events, it can be concluded that the correlation between the deposited energy and the individual events of damage to biological

material does not necessarily exist, which indicates the need to improve upon the current dosimetry models in order to fully take into account the stochastic nature of DNA damage.

Key words: Positrons, Monte Carlo, Positron trap, Positronium formation, Nitrogen, Carbon tetrafluoride, Water vapor, Simulation

Major field: Electrical Engineering

Specific fields: Positron physics, Kinetic theory and simulations of positron swarms in gasses, Atomic and molecular physics

UDK number: 621.3 (043.3)

Sadržaj:

1. Uvod	1
1.1 Istorija istraživanja pozitrona	1
1.2 Izvori pozitrona	3
1.3 Anihilacija	5
1.4 Pozitronijum	6
1.5 Moderatori pozitronskih snopova	8
1.6 Pozitronski trapovi	12
1.6.1 Pozitronski trap sa rotirajućim poljem	16
1.7 Pozitroni u primeni i istraživanju	17
1.7.1 Osnovna istraživanja	17
1.7.2 Ispitivanje materijala	18
1.7.3 Pozitronska emisiona tomografija	20
1.8 Sadržaj teze	21
2. Metoda - Monte Karlo simulacija	23
2.1 Monte Karlo kod za opis transporta pozitrona u gasovima	23
2.2 Pojam "roja" čestica	24
2.3 Opis Monte Karlo koda	26
2.3.1 Određivanje trenutka sudara	27
2.3.2 Određivanje tipa sudara	30
2.3.3 Termalni efekti	30
2.3.4 Rešavanje rasejanja kod elastičnih i neelastičnih sudara	35
2.3.5 Nekonzervativni sudari	36
2.3.6 Testiranje računarskog koda	37
3. Podaci o sudarnim presecima	40
3.1 Set sudarnih preseka za interakciju e^+-N_2	42
3.2 Set sudarnih preseka za interakciju e^+-CF_4	43

3.3 Set sudarnih preseka za interakciju e^+ -H ₂ O	44
4. Modelovanje Surko trapa	47
4.1 Opis rada Surko trapa	48
4.2 Model Surko trapa	52
4.3 Rezultati simulacija Surko trapa	54
4.3.1 Optimizacija pritiska u prvom stepenu	61
4.3.2 Optimizacija električnog potencijala na elektrodama	62
4.3.3 Simulacija dvostepenog pozitronskog Surko trapa	68
4.4 Zaključak	73
5. Optimizacija Surko trapa	75
5.1 Model CF ₄ pozitronskog trapa	75
5.2 Rezultati simulacija CF ₄ pozitronskog trapa	78
5.3 Modeli diferencijalnog preseka	83
5.4 Trapovanje pomoću CF ₄ u postojećoj N ₂ napravi	85
5.5 Zaključak	95
6. Kompresija snopa pozitrona rotirajućim električnim poljem	98
6.1 Opis električnog i magnetskog polja i rešavanje trajektorije čestice	100
6.2 Simulacija transporta u uslovima rotirajućeg električnog polja	107
6.3 Rezultati simulacija	108
6.4 Zaključak	117
7. Transport pozitrona u biološkoj sredini	120
7.1 Modelovanje uticaja pozitronskog zračenja	120
7.2 Potreba i mogućnost eksperimenata sa pozitronskim rojevima	126
7.3 Simulacija termalizacije pozitrona i sekundarnih elektrona u tkivu	131
7.3.1 Putanje pozitrona u smeši "organske" vode	133

7.3.2 Prostorno energijski profili i usrednjene vrednosti za sudare pozitrona i sekundarnih elektrona	136
7.4 Zaključak	139
8. Zaključak i pregled naučnih doprinosa	142
9. Literatura	145
Dodatak A – Test Proračuni	154
Dodatak B – Podaci o sudarnim presecima	157
Dodatak C – Računarski kod	168

1. Uvod

1.1 Istorija istraživanja pozitrona

Istraživanje pozitrona počinje 1930. godine radom Pola Diraka, u kojem, u okviru svoje teorije o elektronu, uviđa da rešenja sa negativnim rešenjima kinetičke energije imaju fizičko značenje (Dirac, 1930). Postulirao je da ta negativna rešenja odgovaraju, do tada jedinim poznatim česticama sa pozitivnim naelektrisanjem, protonima, konstatujući, pak, da simetrija koja proizilazi iz Dirakove jednačine nije ono što se opaža u prirodi. Ubrzo zatim, Karl Anderson je u svojim istraživanjima kosmičkog zračenja uspeo da snimi, u eksperimentima sa Vilsonovom (ili oblak) komorom, trag čestice koja po obliku trajektorije odgovara čestici sa odnosom mase i naelektrisanja bliskom elektronu ali sa suprotnim znakom naelektrisanja (Anderson, 1933). I drugi autori su snimili zakrivljene trajektorije lakih čestica ali je Anderson bio prvi koji je pomoću olovne folije usporio čestice i tako pokazao smer kretanja, a samim tim pokazao i da snimljena čestica ne može biti elektron. Takva čestica je, kako bi se skratio naziv "pozitivni elektron", nazvana *pozitron* i dobija oznaku e^+ .

Otkriće nove čestice pobudilo je interes astrofizičara. Godine 1934. Mohorovičić je postulirao postojanje vezanog stanja elektrona i pozitrona u nameri da objasni određene osobine spektra emitovanog zračenja sa pojedinih zvezda (Mohorovičić, 1934) i takav kvazi-atom nazvao *elektrum*. Iako su se Mohorovičićeve pretpostavke u vezi spektra kasnije pokazale pogrešnim, postojanje takvog vezanog stanja je potvrđeno u eksperimentu (Deutsch, 1951), a za naziv je usvojen pojam *pozitronijum* i ustanovljena hemijska oznaka Ps (Ruark, 1945).

U međuvremenu ispitivani su različiti modovi anihilacije pozitrona u prisustvu elektrona, anihilacija bez zračenja, jednofotonska, dvofotonska i trofotonska anihilacija, kojom prilikom se emituje jedan, dva ili tri γ -zraka respektivno. Značajna otkrića dogodila su se 1949. godine. DeBenedeti sa kolegama, je otkrio da γ -zruci emitovani kroz dvofotonsku anihilaciju u različitim čvrstim materijalima odstupaju od savršene kolinearnosti, tj. ugao između fotona nije 180° , kao što bi se očekivalo od anihilacije para

elektron-pozitron u mirovanju (DeBenedetti, 1949). Izmereni ugao je bio tek nekoliko miliradijana i interpretiran je, a kasnije se ispostavilo, ispravno, kao posledica kretanja vezanih elektrona u materijalu. DuMond sa kolegama je napravio precizna merenja energija i širine linije emitovanog γ -zračenja (DuMond et al. 1949) i ustanovio da je širina emitovanog zračenja veća od nesigurnosti koju unosi rezolucija instrumenta, te da je ona posledica Doplerovog širenja, prvenstveno usled kretanja elektrona. Ovi rezultati su postavili osnove u istraživanju interakcije pozitrona sa čvrstim materijalima i omogućili razvoj snopova pozitrona niskih energija.

Pored pozitronijuma, postojala su teorijska predviđanja novih stabilnih sistema sa više od jednog elektrona (Wheeler, 1946). Viler je zaključio da je negativni jon pozitronijuma ($e^-e^+e^-$) takođe stabilan sistem (Ps^-), iako nije eksperimentalno uočen sve do 1981. (Mills, 1981).

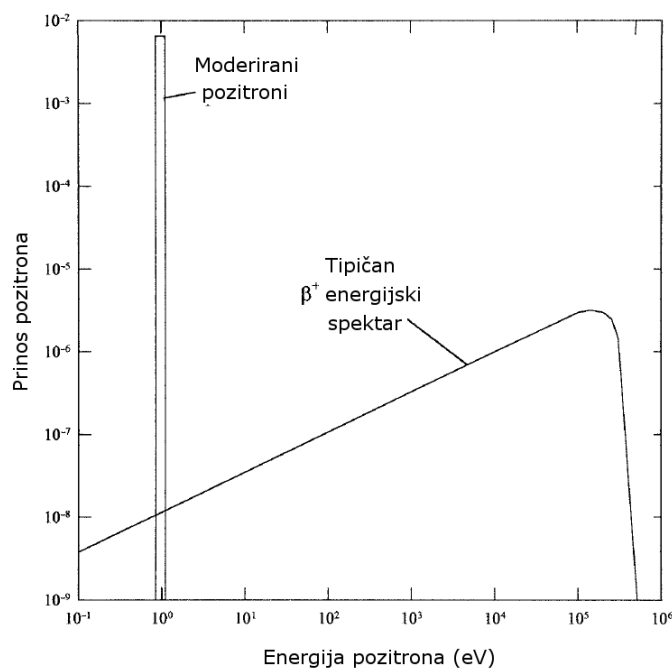
Posebne zasluge za nagli napredak fizike sporih pozitrona ima otkriće moderatora. 1958. godine Čeri (Cherry, 1958) je proizveo prvi moderator pozitronskog snopa u obliku sloja hroma na liskunu koji je dao značajno veći broj pozitrona u opsegu energija od 0-5 eV u odnosu na nemoderiran snop iz Cu^{64} izvora. Ipak efikasnost konverzije je bila veoma mala, tek 10^{-8} . Tek 1972. godine se dogodio značajan proboj na polju moderatora. Kanter sa kolegama je uspeo da poboljša efikasnost moderacije na $\sim 3 \times 10^{-5}$ pomoću moderatora od naparenog MgO (Canter et al. 1972). Kako je napredovalo razumevanje procesa reemisiije pozitrona sa različitih površina tako je rasla i efikasnost moderacije pozitronskih snopova. Hronološki, sledeći važan tip moderatora jeste volframski moderator (Vehanen et al. 1983), koji se ponegde koristi i danas u različitim geometrijama (Shultz and Lynn, 1988). Ipak, tip moderatora koji je danas dominantan i u pojedinim implementacijama dostiže efikasnost moderacije čak $\sim 10^{-2}$ jeste moderator od čvrstog neona koji su prvo primenili Mills i Galikson (Mills and Gullikson, 1986).

Paralelno, i u analogiji sa pozitronom predviđeno je i postojanje antiprotona, što je i potvrđeno 1956. godine od strane Čemberlena i kolega (Chamberlain et al. 1956). Ovo otkriće dovelo je i do, relativno nedavnog, uspešnog pokušaja proizvodnje relativističkog

antivodonika (Baur et al. 1996), odnosno proizvodnje niskoenergijskog antivodonika u okviru ALPHA eksperimenta u CERN-u (Andresen et al. 2010), što treba da omogući detaljna spektroskopska istraživanja ovog elementa.

1.2 Izvori pozitrona

U prirodi, pozitroni se najčešće javljaju kao proizvod β^+ raspada, prilikom kojeg se atomski broj radioaktivnog jezgra smanjuje za jedan, uz emisiju elektronskog neutrina. Ovakvi pozitroni imaju kinetičku energiju i po nekoliko stotina keV (slika 1.1). U eksperimentima se kao izvor koriste radioaktivni izotopi, koji su komercijalno dostupni, ^{22}Na ili ^{58}Co proizvedeni procesom spalacije u akceleratorima. Danas je najzastupljeniji ^{22}Na zbog dužeg vremena poluživota ($\tau \sim 2.6$ god) u odnosu na Co^{58} ($\tau \sim 70$ d) iako su dostupni ^{58}Co izvori značajno, i do 5-10, puta snažniji (500mCi). U tabeli 1.1 prikazane su osobine radioizotopa koji se najčešće koriste za dobijanje snopova pozitrona.



Slika 1.1 Energijski spektar pozitrona nastalih β^+ raspadom pre i nakon moderacije (Charlton and Humberston, 2000).

Tabela 1.1 Osobine radioizotopa najčešće korišćenih kao izvor elektrona

Izotop	Verovatnoća β^+ raspada (%)	Maksimalna energija (MeV)	Vreme poluživota	Tipičan mehanizam proizvodnje
^{22}Na	91	0.54	2.6 god.	$^{22}\text{Mg}(\text{d},\alpha)$
^{58}Co	15	0.47	70.8 d.	$^{58}\text{Ni}(\text{n},\text{p})$
^{64}Cu	19	0.65	12.7 sat.	$^{63}\text{Cu}(\text{n},\gamma)$
^{11}C	99	0.96	20.4 min.	$^{11}\text{B}(\text{p},\text{n})$

Drugi proces koji dovodi do pojave pozitrona jeste proces proizvodnje parova. Iako fotoni visoke energije mogu da proizvedu različite parove čestica-antičestica, pojam "proizvodnja parova" se najčešće upotrebljava za proces stvaranja para elektron-pozitron. Fotoni energije veće od 1.022 MeV, koliko iznosi zbir energija mirovanja elektrona i pozitrona, imaju veliku verovatnoću da u interakciji sa jezgrom nekog atoma, proizvedu par elektron pozitron, uz mali uzmak atomskog jezgra, koji je neophodan, kako bi se istovremeno, zadovoljili zakoni održanja energije i impulsa. Takođe, održani su i svi kvantni brojevi (Heitler, 1954).

Proizvodnja parova je mehanizam dobijanja pozitrona iz akceleratora, gde se usled interakcije ubrzanih elektrona sa materijom, putem zakočnog zračenja stvaraju gama-fotoni sposobni da naprave par elektron-pozitron (Bossart et al. 1990). Moguće je dobiti snopove pozitrona bombardovanjem različitih materijala (najčešće zlata) laserima visoke snage (Gahn et al. 2000). Takođe, primećeno je postojanje pozitrona u višim slojevima Zemljine atmosfere, koji su nastali na zemlji, i čija pojava koincidira sa pojavom oluja u atmosferi. To je bio povod da se razmotri uloga pozitrona u mehanizmu formiranja lavinskih proboja oblak-zemlja (Dwyer, 2003). Pored ovih pozitrona, proizvedenih na Zemlji, primećeni su i pozitroni iz kosmičkog zračenja sa energijama i do 500 eV. Iako je njihov udeo u kosmičkom zračenju izuzetno mali, nedavno su, na Međunarodnoj svemirskoj stanici izvršena i precizna merenja energijskog spektra (Accardo et al. 2014).

1.3 Anihilacija

Trenutno prihvaćena teorija predviđa da je pozitron, u vakuumu, stabilna čestica, što podržavaju i eksperimentalni rezultati, koji pokazuju da se jedan pozitron u odgovarajućim uslovima može skladištiti i do tri meseca (Van Dyck et al. 1987). Ukoliko bismo se pozvali na teoremu "simetrije naelektrisanja, parnosti i reverzibilnosti vremena" (eng. *Charge Conjugation, Parity and Time Reversal Symmetry Theorem - CPT*) (Schwinger, 1951) vreme života slobodnog pozitrona bi trebalo da je jednako vremenu života elektrona, preko 4×10^{23} godine, što je eksperimentalna granica u ispitivanju stabilnosti elektrona (Aharonov et al. 1995).

Vreme života pozitrona u kontaktu sa materijom je obrnuto proporcionalno lokalnoj gustini elektrona. Postoje različiti mehanizmi anihilacije i neki od njih su prikazani na slici 1.2 (redom: anihilacija bez zračenja, jedno-, dvo- i tro-fotonska anihilacija). Takođe, pozitron može anihilirati i sa elektronom sa unutrašnje ljuske, gde novonastali foton eksituje jezgro atoma (Saigusa and Shimizu, 1994). Proces anihilacije sa najvećom verovatnoćom je dvo-fotonska anihilacija, kada su elektron i pozitron u singletnom stanju kojom prilikom se emituju dva gama fotona energije 511keV. Verovatnoća za ovaj proces je proporcionalna preseku koji je izveo Dirac (Dirac, 1930)

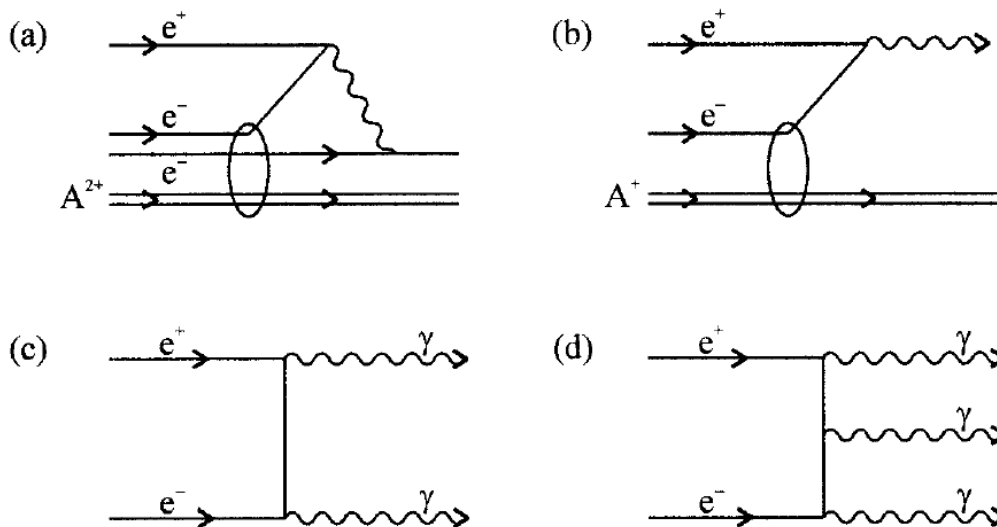
$$\sigma_{2\gamma} = \frac{4\pi r_0^2}{\gamma + 1} \left[\frac{\gamma^2 + 4\gamma + 1}{\gamma^2 - 1} \ln \left(\gamma + \sqrt{\gamma^2 - 1} \right) + \sqrt{\gamma^2 - 1} - \frac{\gamma + 3}{\sqrt{\gamma^2 - 1}} \right]$$

gde je r_0 klasični radijus elektrona , $\gamma = \frac{1}{\sqrt{1-\beta^2}}$ je Lorencov faktor, a v je relativna brzina pozitrona u odnosu na elektron. U nerelativističkom limitu, na malim energijama izraz za presek za anihilaciju se pojednostavljuje na

$$\sigma_{2\gamma} = \frac{4\pi r_0^2 c}{v}.$$

Ore i Pael su izračunali da je odnos događaja tro- i dvo-fotonske anihilacije $\sim 1/370$ (Ore and Powel, 1949), a procesi višeg reda, kao što je četiri-fotonska anihilacija, su dalje prigušeni za sličan red veličine (Adachi et al. 1994).

Poslednja dva procesa, prikazana na slici 1.2 su, redom, anihilacija bez zračenja i jedno-fotonska anihilacija. Oba procesa, kako bi se zadovoljili zakoni održanja energije i impulsa, zahtevaju učešće atomskog jezgra i kao takvi daleko su manje verovatni nego prethodno opisani procesi (Charlton and Humberston, 2000).

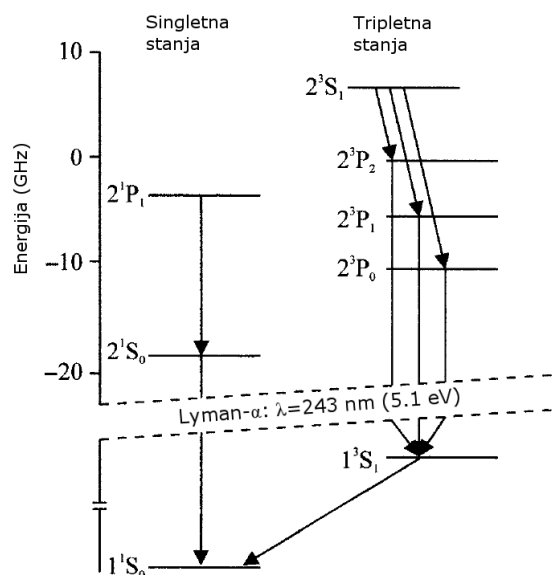


Slika 1.2 Fejnmanov dijagram za najniže redove kanala za pozitronsku anihilaciju (a) bez-zračenja, (b) jednofotonska, (c) dvofotonska, (d) trofotonska anihilacija. A^{2+} i A^+ označavaju promenu naelektrisanja na jonu.

1.4 Pozitronijum

Kako je već pomenuto, pozitronijum (Ps) predstavlja kvazi-stabilno, neutralno, vezano stanje elektrona i pozitrona. Kao kvazi-element sa jednim valentnim elektronom, po elektronskoj strukturi najbližnji je atomu vodonika, s tim da, usled redukovane mase $m/2$, vrednost energijskih nivoa je duplo manja nego kod atoma vodonika.

U zavisnosti od spina čestica, pozitronijum se može javiti u singletnom stanju ($S=0$), kada se naziva para-pozitronijum (p-Ps) i u tripletnom stanju ($S=1$) koje se naziva orto-pozitronijum (o-Ps). U zavisnosti od stanja spina, razlikovaće se vreme života pozitronijuma i njegova elektronska struktura (slika 1.3).



Slika 1.3 Energijski dijagram osnovnog i prvog pobuđenog stanja pozitronijuma. Za pobuđeno stanje prikazano je i cepanje stanja.

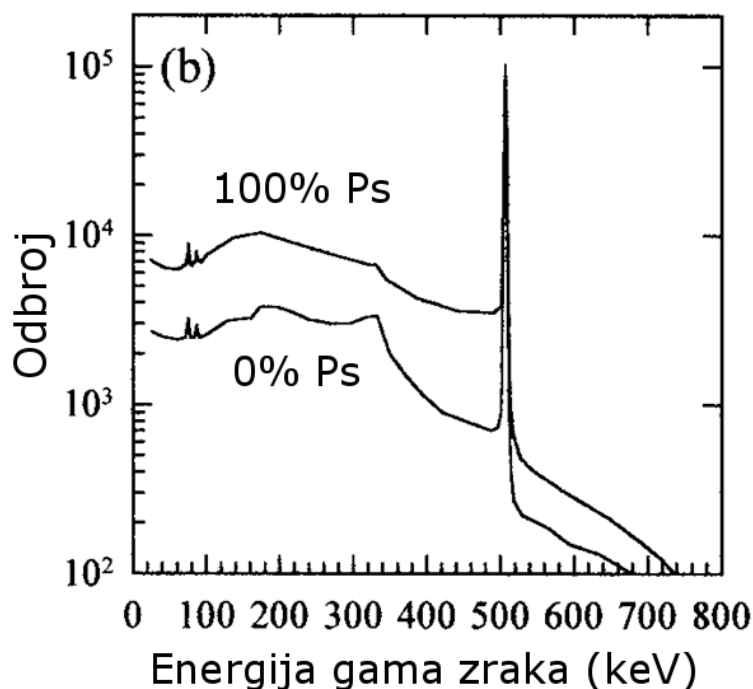
Usled održanja ugaonog momenta i invarijantnosti na izmenu naelektrisanja i prostornih koordinata, pozitronijum spina S i orbitalnog ugaonog momenta L može anihilirati u n_γ gama fotona (Yang, 1950, Wolfenstein and Ravenhall, 1952) pri čemu je

$$(-1)^{n_\gamma} = (-1)^{L+S}.$$

Ovo selekciono pravilo, očigledno ne isključuje anihilaciju bez zračenja ili jednofotonsku anihilaciju, ali kao i u prethodnom odeljku, ovi procesi nisu dozvoljeni za slobodni pozitronijum, tj. bez učešća treće čestice.

Vidimo da iz osnovnog stanja pozitronijuma ($L=0$) singletna stanja (1^1S_0) mogu anihilirati samo putem parnog broja γ -fotona, a tripletna (1^3S_0) preko neparnog broja γ -fotona. Iako su procesi najnižeg reda (dvo-fotonska anihilacija za p-Ps, odnosno tro-fotonska anihilacija za o-Ps) daleko dominantniji, mogu se opaziti i procesi višeg reda (Matsumoto et al. 1996). Statistika spina ukazuje da je odnos orto- i para- pozitronijuma koji se stvara u slobodnom prostoru 3:1, te je zato tro-fotonska anihilacija mnogo češća iz stanja pozitronijuma nego putem anihilacije slobodnog pozitrona. Na slici 1.4 prikazan je

spektar emitovanih γ -zraka na kome se jasno vidi pik na 511keV koji odgovara dvofotonskoj anihilaciji. Vremena života osnovnih stanja su obrnuto proporcionalna brzini anihilacije i izračunata su (Ore and Powell, 1949) da iznose 140ns za osnovno stanje orto-pozitronijuma odnosno 125 ps za osnovno stanje para-pozitronijuma. Pobuđena stanja pozitronijuma imaju drugačija vremena života. Na primer vreme života pozitronijuma u 2R stanju iznosi preko 0.1 ms, ali prelaz 2P-1S ima mnogo kraće vreme života, 3.2 ns pa je verovatnoća da pozitronijum anihilira iz pobuđenog stanja, manja nego verovatnoća da se deeksituje u osnovno stanje pa onda anihilira. Za više detalja pogledati (Charlton and Humberston, 2000; Rich,1981)



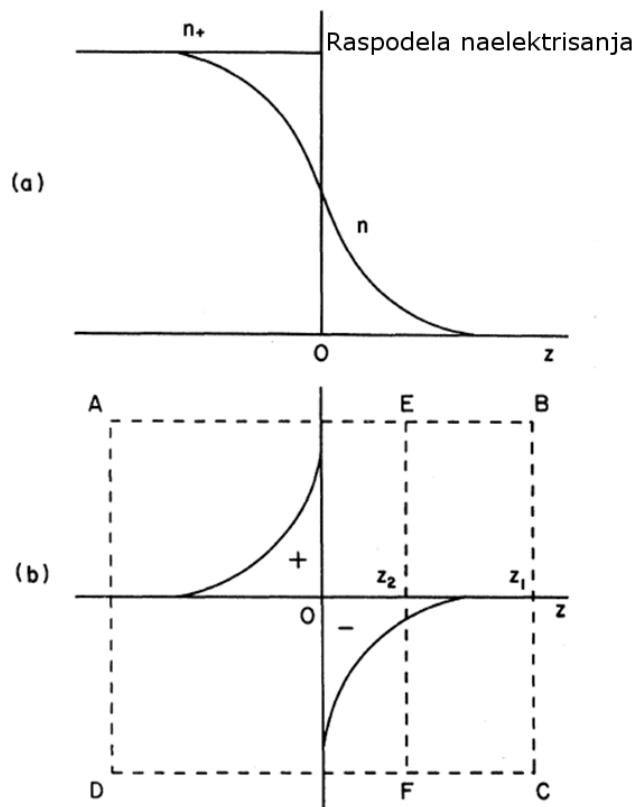
Slika 1.4 Spektar γ -zraka, snimljen detektorom visoke rezolucije pod uslovima gde se anihilacija dešava iz stanja pozitronijuma sa udelom od 0% odnosno 100% (Lahtinen et al. 1986).

1.5 Moderatori pozitronskih snopova

Kako je već pomenuto, pozitroni koji se dobijaju iz izvora β^+ raspadom imaju energije do nekoliko stotina keV, te, da bi se ispitivale njihove osobine na niskim energijama, moraju biti značajno usporeni. Za te namene koriste se moderatori različitih

geometrija, od različitih materijala i pripremljeni na poseban način. U tom smislu razlikuju se dva tipa moderatora: moderatori od metala sa negativnom radnom funkcijom za pozitronu (npr. volfram) kod kojih se pozitroni emituju sa površine, ili emisija pozitrona sa epitermalnim energijama iz materijala sa pozitivnom radnom funkcijom, kao što je smrznuti neon.

Prvi korišćeni moderatora bili su različiti dielektrici presvučeni slojem metala (hrom, zlato i sl.) (Cherry, 1958). Princip rada ovakvih, i sličnih moderatora sa negativnom radnom funkcijom (Costelo et al. 1972; Coleman et al. 1972) je relativno jednostavan. Sam pozitron koji prodire u materijal moderatora, u metalu jako brzo termalizuje, i konačno biva emitovan sa površine sa malom

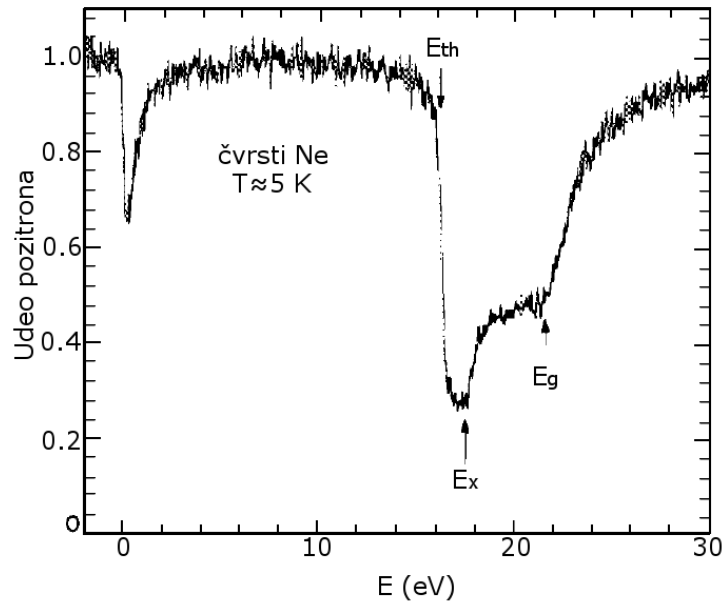


Slika 1.5 (a) Raspodela naelektrisanja na površini beskonačnog metala u modelu uniformnog elektronskog gasa. Površina se nalazi na $z=0$, n_+ je pozitivna pozadina, a n je gustina elektrona. (b) Dvostruki sloj. Polje na z_1 je nula zato što je ukupno naelektrisanje unutar kutije ABCD $q=0$ kada je $z_1 \gg 0$. U tački z_2 blizu same površine ukupno naelektrisanje "unutar kutije" je pozitivno (Tong, 1972).

kinetičkom energijom koja je jedan ili dva reda veličine veća od termalne ($\sim 25\text{meV}$). Dakle pozitron primi energiju od metala pri emisiji, te se zato uzima da je radna funkcija metala pozitivna. Ovaj fenomen je jednostavno razumeti ako se pođe od modela uniformnog elektronskog gasa, za elektrone u metalu, gde se elektroni, koji zauzimaju uniformno čitav prostor metala, na samoj površini malo prelivaju izvan domena koji zauzima pozitivna rešetka metala (Tong, 1972). Na taj način stvara se dvostruki sloj od nekoliko Å pozitivnog naelektrisanja koji čine joni metalne rešetke i negativnog naelektrisanja koje čine elektroni (slika 1.5). Ukupno, to čini ovaj dvostruku sloj repulzivnim za pozitronu blizu površine a atraktivnim za elektrone. Energija koju ima nakon izbacivanja sa površine zavisi od strukture samog metala.

Kao najbolji se pokazao volfram (W) zbog dobrih osobina u dva najvažnija aspekta: mala širina energijske raspodele izlaznog snopa ($\sim 75\text{meV}$) i dobra efikasnost moderacije. Efikasnost moderacije se definiše kao odnos broja nisko-energijskih pozitrona i pozitrona emitovanih sa izvora koji dolaze iz izvora sa visokom energijom. Takođe efikasnost moderacije zavisi i od geometrije samog moderatora i pokazalo se da se najveća efikasnost (0.14%) dobija za volframski moderator u kupa geometriji (Lynn et al. 1989). Kako bi se postigla najbolja efikasnost, volframski moderator mora biti prethodno pripremljen, odgrevanjem na $2100\text{ }^\circ\text{C}$ u uslovima visokog vakuuma (10^{-7} Torr).

Drugi značajan tip moderatora su moderatori od čvrstih plemenitih gasova. Ponašanje visokoenergijskih pozitrona u ovakvim sredinama su detaljno objasnili Galikson i Mils (Gullikson and Mills, 1986) i pritom uvideli značajne prednosti čvrstog neona nad svim do tada korišćenim tipovima moderatora. Pozitroni koji uđu u sloj neona sa velikom energijom najpre izgube veći deo energije kroz jonizujuće sudare. Kako je energijski procep širok, postoji minimalna kinetička energija, E_{th} ispod koje je jedini mehanizam za gubitak energije emisija fonona. Na slici 1.6 prikazana je verovatnoća za reemisiju pozitrona u funkciji energije implantacije za metu od smrznutog neona na $\sim 5\text{ K}$. Verovatnoća reemisije ima lokalni minimum na jako malim energijama $\sim 1\text{ eV}$, zatim je približno jednaka 1 na energijama 2-10 eV a potom naglo opada posle energije $E_{th} = 16\text{ eV}$,



Slika 1.6 Verovatnoća za reemisiju sporih pozitrona u funkciji energije implantacije za debeo uzorak čvrstog neona. Naznačene su vrednosti neelastičnog praga E_{th} , ekscitonskog praga E_x i vrednost energijskog procepa E_g (Mills and Gullikson, 1986).

da bi ponovo porasla u tačkama $E_x = 17.5$ eV i $E_g = 21.5$ eV. Energije E_x i E_g prepoznajemo kao energije incidencije iznad koje pozitron može pobeći iz materijala, ostavljajući iza sebe par elektron-šupljina ili eksiton. Stoga, E_g je energijski procep čvrstog neona a E_x je manje od procepa za energiju veze eksitona. Prag za neelastične sudare, E_{th} je energija iznad koje postaje moguć proces formiranja pozitronijuma. Za energije implantacije niže od te energije, brzina gubitka energije je mala, dok je dužina difuzije velika, te stoga pozitron ima veliku verovatnoću reemisije. Na jako niskim energijama postoji verovatnoća da pozitron bude zarobljen ili u nekom defektu u materijalu ili na samoj površini.

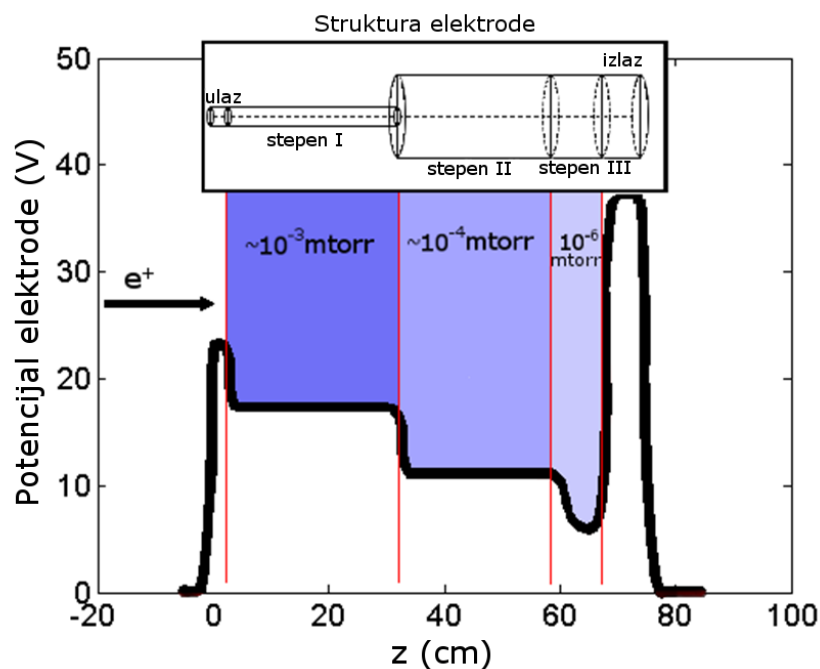
U konačnom, ukupna efikasnost moderatora zavisi debljine sloja neona koji se nanese, kao i geometrije koju usvojimo. Neonski moderatora su danas prihvaćeni kao standard u većini implementiranih pozitronskih linija zbog superiorne efikasnosti koje je i do dva reda veličine veća od volframskih moderatora, uprkos značajno većoj širini energijske raspodele pozitronskog snopa (Shultz and Lynn, 1988).

1.6 Pozitronski trapovi

Iako je otkriće moderatora omogućilo eksperimente sa pozitronima na niskim energijama, relativno mala efikasnost volframskih moderatora sa jedne strane, odnosno izlazna energija čestica znatno veća od termalne (nekoliko eV), kod moderatora sa čvrstim neonom, nije dozvoljavala eksperimente sa velikim brojem pozitrona, odnosno sa velikom energijskom rezolucijom (Shultz and Lynn, 1988). Snopovi pozitrona koji se dobijaju iz radioaktivnih izvora dostižu struje i do 1 pA (tj. 10^7 e⁺/s) međutim za čitav spektar eksperimenata, nedostatak intenzivnijih snopova pozitrona, čija se energija može fino kontrolisati, je predstavljao ograničavajući faktor.

To se promenilo 1989. godine razvojem pozitronskog trapa kada je Kliford Surko dizajnirao napravu po uzoru na Pening-Malmberg trap (Surko et al. 1989). Uloga trapa jeste da sakupi pozitrone koji dolaze iz radioaktivnog izvora kao moderiran snop, ohladi ih na što nižu (sobnu) temperaturu, i zadrži ih duži vremenski period, kako bi se mogao akumulirati veći broj čestica. U zavisnosti od uslova i potreba eksperimenta vreme skladištenja pozitrona može biti od nekoliko stotina milisekundi do par stotina sekundi (Danielson et al. 2015).

Suprotno očekivanjima, da je za sakupljanje i skladištenje pozitrona potreban visoki vakuum, Surko je pokazao da je, zapravo, interakcija pozitrona sa gasom unutar trapa ključna i neophodna. Zahvaljujući moderatoru, pozitroni koji dolaze iz radioaktivnih izvora imaju energije reda veličine ~eV i kroz interakciju sa molekulima gasa unutar trapa kroz različite eksitacione procese mogu efikasno da predaju pozadinskom gasu višak energije. Na slici 1.7 data je skica strukture, i profil električnog potencijala duž ose trapa. Na ulazu u trap, postoji tzv "ulazna" elektroda koja se može koristiti za podešavanje srednje energije snopa pre interakcije sa gasom. Nakon što pojedinačni pozitron unutar trapa doživi jedan ili više sudara i izgubi dovoljno energije, više nije u stanju da preskoči potencijal "ulazne" elektrode i ostaje zarobljen unutar strukture trapa u okviru koje dalje termalizuje.



Slika 1.7 Šematski prikaz trapa. Kriva predstavlja električni potencijal duž ose, uz naznačen pritisak u različitim stepenima trapa. Na umetnutoj slici je prikazana skica strukture elektroda.

Sam trap sastavljen je od cilindričnih elektroda različitog prečnika. Diferencijalnim pumpanjem gasa na oba kraja trapa, kao i različitim prečnicima elektroda, postiže se gradijent pritiska pozadinskog gasa, pa je tako ceo trap, efektivno, podeljen u tri stepena. Svakom od tri stepena odgovara i nivo električnog potencijala. Uloga prvog stepena, koji ima najviši pritisak gasa ($\sim 1 \times 10^{-3}$ torr) jeste da obezbedi potreban sudar u kojem će pozitron izgubiti dovoljno energije kako bi ostao zarobljen u potencijalnoj jami. Sa druge strane, treći (akumulacioni) stepen je na najnižem pritisku ($\sim 1 \times 10^{-6}$ torr), kako bi se obezbedilo dugačko vreme života akumuliranim pozitronima. Oko trapa su postavljeni Helmholtcovi kalemovi koji obezbeđuju aksijalno magnetsko polje, orijentisano duž ose cilindra trapa. Jačina magnetskog polja od ~ 500 Gauss sprečava radijalni transport pozitrona, tj. sprečava pozitrona da dođu do zidova naprave i tako anihiliraju u interakciji sa elektronima u metalu i istovremeno obezbeđuje da oblak pozitrona ostane centriran na osi trapa.

Kao najbolji, odnosno trenutno jedini koji je uspešno primenjen, pozadinski gas izdvojio se molekularni azot, zbog svoje veoma značajne osobine, da ima energijski prag za $a^1\Pi$ elektronsku eksitaciju (~ 8.6 eV) niži od praga za proces formiranja pozitronijuma. Ovo omogućava pozitronima, koji imaju kinetičku energiju malo veću od praga za elektronsku eksitaciju, da predaju deo energije molekulu azota, uz veoma male šanse da formiraju kratkoživeći pozitronijum i tako se izgube. Ipak, presek za proces formiranja pozitronijuma već oko 11.4 eV počinje da dominira nad elektronskom eksitacijom što ostavlja energijski prozor za efikasno trapovanje od samo ~ 2.8 eV (o sudarnim presecima pozitrona sa gasovima detaljnije u poglavlju 3). Kako je energijska zona za trapovanje relativno uska, neophodno je fino podesiti kinetičku energiju pozitrona na ulazu u prvi stepen trapa. To se postiže podešavanjem napona na "ulaznoj" elektrodi i elektrodi prvog stepena, u odnosu na prednapon na kojem se nalazi izvor. Ciljana vrednost kinetičke energije pozitrona na kojoj se dobija optimalna efikasnost je ~ 10 eV. Pozitroni koji dožive jednu elektronsku eksitaciju molekula azota u prvom stepenu, gube ~ 8.6 eV kinetičke energije i ne mogu preskočiti potencijalnu barijeru koju čini "ulazna" elektroda, ali i dalje je neophodno prebaciti ih i zadržati u poslednjem stepenu gde je najniži pritisak. Zato se potencijal elektroda koje čine drugi stepen postavlja ~ 8.6 V ispod potencijala prvog stepena kako bi se nadomestila izgubljena kinetička energija i kako bi se pozitroni na isti način mogli prebaciti iz prvog stepena dalje u trap. Naravno na isti način se podešava i potencijal elektroda trećeg stepena. Konkretno vrednosti potencijala se donekle razlikuju u zavisnosti od konkretne konstrukcije trapa, a optimalne vrednosti se dobijaju skeniranjem, tj. ručnim podešavanjem u blizini ovih teorijskih vrednosti. Jednom kada se pronađu optimalni potencijali elektroda, oni se ne menjaju u toku rada sa trapom tj. eksperiment ima dobru ponovljivost.

Kada pozitron ostane zarobljen u trećem, "akumulacionom", stepenu više nema mogućnosti da se vrati u prethodne stepene. U akumulacionom stepenu pozitroni moraju da predaju preostalu energiju, i da se ohlade na sobnu temperaturu. Kako bi se pospešilo hlađenje u energijskoj oblasti 0.5-2 eV u trećem stepenu se dodaje ugljenik-tetrafluorid (CF_4) ili sumpor-heksafluorid (SF_6) koji, zahvaljujući velikom preseku za vibracionu

eksitaciju (o sudarnim presecima za pozitrone više u poglavlju 3), veoma efikasno termalizuju pozitrone u navedenom energijskom opsegu. Za poslednju fazu termalizacije pozitrona, na energije koje odgovaraju sobnoj temperaturi, najzaslužniji su sudari koji pobuđuju vibracione nivoe molekula azota. Kao rezultat, dobija se termalizovan oblak pozitrona u trećem stepenu, srednje energije $\sim 40\text{meV}$ koja praktički odgovara sobnoj temperaturi i u zavisnosti od namene trapa i vremena akumulacije, može imati i do 10^6 - 10^7 pozitrona. Takav oblak pozitrona može se ubrzati na proizvoljnu energiju koja je potrebna za eksperiment, sa energijskom rezolucijom od samo $\sim 50\text{ meV}$. Upravo ova činjenica, da je moguće proizvesti intenzivne snopove pozitrona sa proizvoljnom energijom, i jako uskom, praktično monoenergijskom, raspodelom je ono što je dovelo do naglog razvoja fizike pozitrona, istraživanja pozitronijuma, proizvodnje antivodonika, merenja sudarnih preseka na niskim energijama i drugih dostignuća. Za oblak pozitrona često se kaže da je takozvana ne-neutralna (eng. *non-neutral*) plazma jer je kvazi neutralnost jedan od uslova da se nešto okarakterise kao plazma. Sličnost je posledica toga što se ovde radi o jako spregnutom sistemu kroz Coulombovsku silu.

Ukoliko je potrebno za eksperiment, mogu se realizovati trapovi koji su u stanju da akumuliraju jako veliki broj čestica, pa čak i da stvore pozitronsku plazmu (Greaves and Surko, 2002), ili pak trapovi sa kratkim vremenom termalizacije, koji rade u impulsnom režimu, i izbacuju i po desetine paketa pozitrona u sekundi (Sullivan et al. 2008, Cooper et al. 2015). Tokom godina realizovane su različite varijante trapa u velikom broju laboratorija u originalnom obliku sa tri stepena (Murphy and Surko, 1992) ili u sve češće korišćenom, kompaktnijem dizajnu sa dva stepena koji su prvi predložili Grivs i Moxsom (Greaves and Moxom, 2003; Clarke et al. 2006; Cassidy et al. 2006; Sullivan et al. 2008;).

Postignuta efikasnost trapovanja navedenih uređaja dostiže $\sim 20\%$ (gde se efikasnost trapovanja definiše kao odnos broja trapovanih i ukupnog broja pozitrona koji se emituju sa moderatora) pri čemu ograničavajući faktor predstavlja činjenica da iako postoji energijski prozor (8.6 - 11.4 eV) u kojem je trapovanje čestica relativno efikasno, $a^1\Pi$ elektronska eksitacija i proces formiranja pozitronijuma na molekulu N_2 su i dalje konkurentni procesi

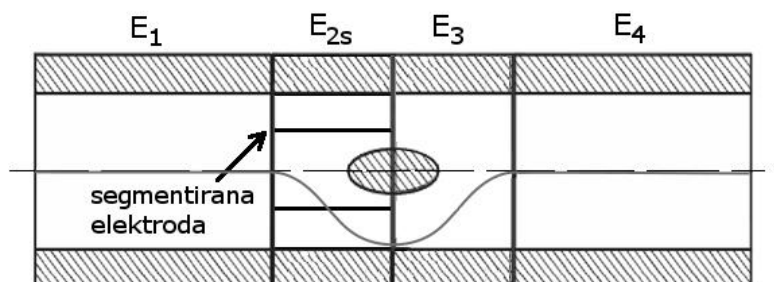
tako da najveći broj čestica ipak bude izgubljen kroz proces formiranja pozitronijuma. Detaljan pregled i analiza svih procesa gubitka biće dat u poglavlju 4.

Poslednji važan parametar rada pozitronskog trapa, pored efikasnosti trapovanja i vremena termalizacije jeste i prečnik dobijenog snopa pozitrona. Snop pozitrona koji dolaze sa moderatora, najčešće, je svega 2-3 mm, dok nakon termalizacije, i interakcije sa molekulima pozadinskog gasa, oblak čestica, u zavisnosti od vremena akumulacije, može biti i do deset puta širi. Sprečavanje ovog širenja, sa jedne strane, je važno zbog dužeg vremena života pozitrona u akumulacionom stepenu trapa, jer se usporava dolazak čestica na zidove. Sa druge strane, većina eksperimenata (kao što je merenje sudarnih preseka, proizvodnja antivodonika, ispitivanje pozitronijuma i sl.) zahteva što je moguće uži snop na izlazu trapa. Kako bi se to postiglo, primenjena je metoda kompresije rotirajućim električnim poljem, koja je prethodno korišćena za kompresiju elektronskih plazmi (Danielson et al. 2007). Kesidi sa saradnicima (Cassidy et al. 2006) je prvi primenio ovaj metod na pozitronskim snopovima, a potom su Grivs i Moksom (Greaves and Moxom, 2008) pokazali da kompresija funkcioniše i u tzv. "jednočestičnom modelu", tj. i pri malim gustinama pozitrona kada ne dolazi do formiranja pozitronske plazme što je fenomen koji nije objašnjen i kojim ćemo se baviti u poglavlju 6.

1.6.1 Pozitronski trap sa rotirajućim poljem

Rotirajuće polje u eksperimentima je realizovano tako što je elektroda koja čini treći, akumulacioni, stepen trapa podeljena na dve elektrode (slika 1.8) od kojih je jedna azimutalno segmentirana u 4 ili 8 elektroda (u zavisnosti od toga da li se primenjuje dipolno ili kvadrupolno električno polje, respektivno). Obe elektrode se nalaze na istom prednaponu koji je neophodan za rad akumulacionog stepena, dok se pojedinačni segmenti izdeljene elektrode dodatno napajaju radio-frekventnim signalom, koji je, od segmenta do segmenta, fazno pomeren za $\pi/2$ radijana (u slučaju dipolnog polja i četiri segmenta). Takvo napajanje stvara rotirajuće električno polje unutar segmentirane elektrode. Kako su pozitroni konfinirani u sredini akumulacionog stepena, a samo jedna od dve elektrode je napajana RF signalom, pozitroni "vide" asimetrično primenjeno rotirajuće električno polje

duž ose trapa koje dovodi do transporta čestica ka osi i kompresije oblaka pozitrona. Tako snop koji nastane ubrzavanjem pozitrona iz akumulacionog stepena, može imati prečnik manji i od početnog snopa koji je došao sa moderatora.



Slika 1.8 Šematski prikaz elektroda trećeg stepena kada se primenjuje metoda kompresije snopa pozitrona rotirajućim električnim poljem. Leva elektroda je segmentirana, a svaki od segmenata se zasebno napaja RF signalima koji su međusobno pomereni za odgovarajuću faznu razliku. Prikazan je i aksijalni profil potencijala koji konfinira pozitronski oblak u središtu elektroda.

1.7 Pozitroni u primeni i istraživanju

1.7.1 Osnovna istraživanja

Od otkrića pozitrona prošlo je više od osamdeset godina, i iako je urađeno mnogo istraživanja, pogotovo na interakciji pozitrona sa materijom, i dalje se veliki napor i sredstva posvećuju pitanjima fundamentalnim za fiziku čestica. Aktuelne teorije predviđaju simetriju između čestica i antičestica koje su u trenutku velikog praska morale biti stvorene u jednakim količinama, pa pitanje, zašto je poznati univerzum, skoro potpuno, sačinjen od materije, ostaje neodgovoreno, ali isto tako u fokusu velikih kolaboracija, i akceleratorских instalacija poput "CERN", "SLAC" "Fermilab" ili "KEK" u kojima se izvode eksperimenti sa česticama visokih energija.

Takođe se izvode i eksperimenti na niskim energijama u okviru ATHENA i ATRAP kolaboracija, sa ciljem da se od antiprotona i pozitrona formiraju atomi antivodonika (Amoretti et al. 2002; Gabrielse et al. 2002; Andersen et al. 2011). Antivodonik, je najjednostavnija stabilna neutralna antičestica, i očekuje se da ispitivanje

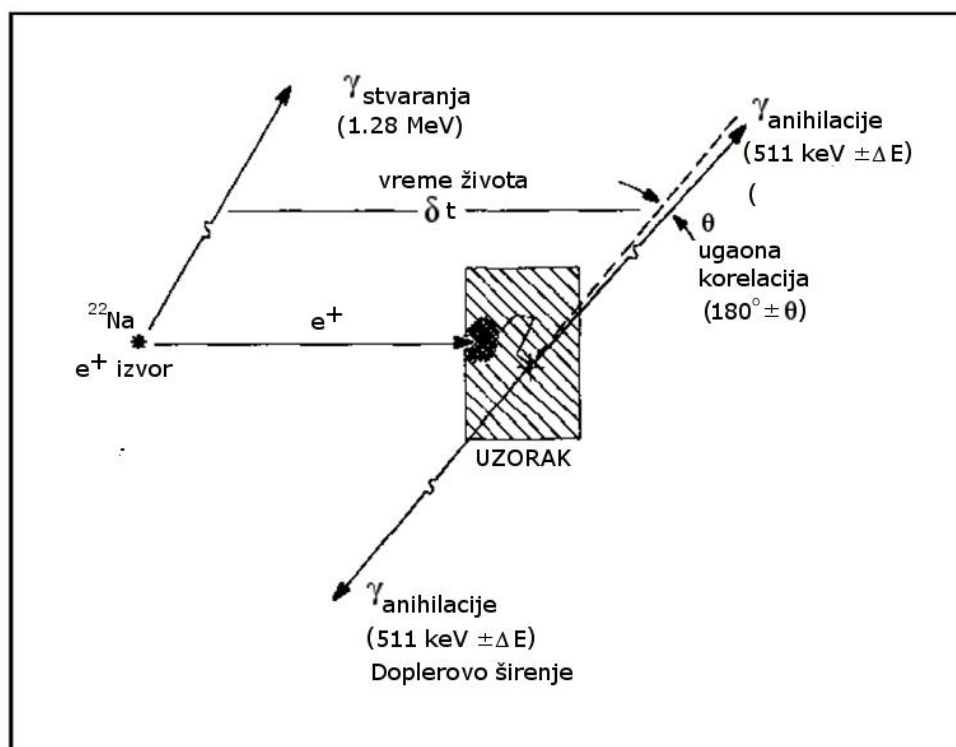
njegovih osobina, odnosno poređenje sa atomom vodonika posluži kao test određenih principa, kao što je CPT (*engl. Charge Conjugation, Parity and Time Reversal*) simetrija. Za stvaranje antivodonika potrebne su plazme pozitrona i antiprotona, koje su formirane u odgovarajućim trapovima. Zatim se oba tipa čestica hlade evaporativnim hlađenjem, da bi se antiprotoni vrlo polako provukli kroz pozitronsku plazmu. Cilj je da se stvore što hladniji atomi antivodonika koji se lakše trapuju. Optičkom spektroskopijom se može ispitati elektronska struktura antivodonika i uporediti sa atomom vodonika, ili miktrotalasnom rezonancom uporediti njihove magnetne momente. Ukoliko se uoče neslaganja, može se dobiti odgovor na pitanje o poreklu narušene ravnoteže.

Pored istraživanja antivodonika, pozitron je neophodan za istraživanje pozitronijuma, kao i nekih egzotičnijih stanja. Teorijski predviđena vezana stanja Ps (Ruark, 1945) i Ps^- (Wheeler, 1946), su detektovali Dojč (Deutsch, 1951) i Mills (Mills, 1981) respektivno, a najduže se čekalo na potvrdu stanja koje je najbližnje molekulu pozitronijuma (Hylleraas and Ore, 1947), sve do 2005. godine kada su ga konačno detektovali Cassidy i Mills (Cassidy et al. 2005; Cassidy and Mills, 2007).

1.7.2 Ispitivanje materijala

Pored osnovnih istraživanja pozitron je našao primenu i u fizici materijala, kao sonda kojom se može ispitivati sastav i poroznost metala, poluprovodnika ili izolatora, u formi tankih slojeva ili u masivnom uzorku (Siegel, 1980). Na slici 1.9 dat je šematski prikaz tri različita principa koji se koriste u pozitronskoj anihilacionoj spektroskopiji (PAS) : merenje vremena života, ugaone korelacije i Doplerovog širenja. Princip pozitronske spektroskopije najjednostavnije je objasniti na primeru metala. Kada se pozitron iz radioaktivnog izvora ubaci u čvrsti uzorak, on se brzo termalizuje kroz niz jonizacionih sudara, eksitacija plazmona, i fononsku interakciju. Ovo dovodi do toga da se pozitron u rešetci nalazi u periodično izduženom stanju, sličnom Blohovom. Gustina mu je najveća u intersticijalnim oblastima jer pozitivno naelektrisan jezgra atoma odbijaju pozitivno naelektrisan pozitron.

Nakon vremena δt (vrednosti 0-100 ps) nakon što se pozitron injektuje u metal, doći će do anihilacije sa elektronom, kojom prilikom će se emitovati, skoro svaki put, dva γ zraka. Anihilacije putem jednog odnosno tri γ zraka su daleko ređe. Iz spektra vremena do anihilacije, koji se snimi kao raspodela vrednosti δt , mogu se dobiti informacije o gustini elektrona u oblasti anihilacije zato što je brzina anihilacije pozitrona, λ , koja je recipročna vremenu života, srazmerna integralu preklapanja gustine elektrona i pozitrona. Vreme života slobodnih pozitrona u većini metala je reda veličine 100-250 ps. U prisustvu defekata u metalu ili leguri, u kojima su pozitroni trapovani, ovo vreme života je veće u odnosu na slobodan pozitron, kao posledica smanjenja gustine elektrona u oblasti gde je pozitron zarobljen.



Slika 1.9 Šematski prikaz anihilacije pozitrona koji prikazuje osnove tri tehnike koje se koriste u pozitronskoj anihilacionoj spektroskopiji: merenje vremena života, ugaone korelacije i Doplerovog širenje. (Siegel, 1980)

Sa druge strane, pozitron koji je injektovan u čvrstu molekularnu metu, ili na površinu, može zahvatiti elektron i formirati pozitronijum u jednom od dva osnovna stanja, orto- i para-pozitronijuma, odnosno singletnom i tripletnom, respektivno. Vreme života

para-pozitronijuma do anihilacije je 125 ps, dok za orto-pozitronijum iznosi čak 142 ns. Kako su energija i impuls očuvani pri anihilaciji, dva gama fotona koja obično nastanu imaju energiju jednaku energiji mirovanja elektrona uz mali energijski pomeraj $\pm\Delta E$. Dva γ zraka se emituju u suprotnim smerovima, uz malo ugaono odstupanje θ (slika 1.9). Odstupanja ΔE i θ nastaju kao posledica održanja ukupnog impulsa (u laboratorijskom referentnom sistemu). Kako pozitron pre anihilacije ima energiju blisku termalnoj, vrednosti odstupanja ΔE i θ odgovaraju impulsu anihilirajućeg elektrona, bilo valentnog ili bližeg jezgru. Elektroni bliži jezgru imaju veći impuls, i samim tim pri anihilaciji značajno više doprinose vrednostima ΔE i θ . Stoga kriva ugaone korelacije ($N(\theta)$) i spektar Doplerovog širenja ($P(\Delta E)$) imaju oštrije pikove ukoliko metal sadrži defekte koji bi trapevali pozitrone, pošto na mestu defekta pozitron uglavnom interaguje sa valentnim elektronima.

Sličnom analizom, mogu se pomoću snimljenih spektara Doplerovog širenja i ugaone korelacije, kao i spektra vremena života, odrediti karakteristike, veličina, koncentracija i tip defekata i u drugim materijalima, kao što su poluprovodnici ili dielektrici, bilo u balku mete ili na površini, pomoću snopova sa varijabilnom energijom (Siegel, 1980; I. Procházka, 2001).

1.7.3 Pozitronska emisiona tomografija

Možda i najznačajnija primena pozitrona jeste u svrhe medicinske dijagnostike kao što je pozitronska emisiona tomografija (*engl. positron emission tomography* (PET)). PET je tehnika akvizicije medicinske slike koja se danas standardno upotrebljava za dijagnostiku tumora kao i za izučavanje metabolizma i funkcije mozga (Wahl, 2002; Muehllehner and Karp, 2006).

Slika se dobija snimanjem γ zraka koji nastaju iz dvofotonske anihilacije pozitrona koji se emituju sa aktivnog molekula. U krvotok pacijenta se ubrizga biološki aktivan molekul, najčešće šećer fluoro-deoksiglukoza (FDG), kojem je jedna hidroksi grupa zamenjena radioaktivnim kratkoživućim izotopom fluora ^{18}F (^{18}F -FDG). Nakon nekog vremena, molekuli ^{18}F -FDG bivaju metabolisani u ćeliji i pretvoreni u ^{18}F -FDG-fosfat koji

ne učestvuje dalje u metabolizmu. Tako se radioaktivni fluor, koji emituje pozitrone, akumulira u predelu pojačane metaboličke aktivnosti. Pozitroni koje radioizotop emituje termalizuju na putanji reda dužine 1mm, izgube kinetičku energiju i u interakciji sa elektronom anihiliraju. Oko pacijenta, nalazi se čitav set detektora, koji koincidentno, pomoću scintilatora i fotomultiplikatora detektuju anihilacione γ fotone i paru detektovanih fotona pridružuju odgovarajući voksel (*engl. voxel* - diskretizovana jedinica prostora analogna terminu *pixel* kod dvodimenzionog prikaza) porekla. Na taj način stvara se čitava trodimenziona mapa lokalizovanog aktivnog molekula. Moderni uređaji, paralelno sa PET snimkom rade i kompjutersku tomografiju (PET/CT) i kako bi se dobio dodatni sloj informacija i kompletnija medicinska slika, koju kasnije tumači radiolog.

Otkrivanje oblasti pojačane metaboličke aktivnosti se koristi u ranoj dijagnostici različitih tipova tumora, ali adekvatnim odabirom aktivnog molekula može se pratiti struktura i funkcija različitih organa ili tkiva. Poznata je primena PET tehnike za praćenje aktivnih zona mozga pri različitim stimulacijama i stanjima. Jedna od primena PET tehnike je i u okviru boronske terapije (*eng. boron neutron capture - BNC therapy*) (Beddoe, 1997), a razmatraju se i mogućnosti primene pozitrona u tretmanu i terapiji maligniteta (Moadel et al. 2003). Detaljniji pregled primene pozitrona u medicini može se naći u doktorskoj disertaciji dr Banković (Banković, 2012).

1.8 Sadržaj teze

Ova doktorska disertacija bavi se primenom numeričkih Monte Karlo simulacija, dobro poznate metode fizike rojeva naelektrisanih čestica, na probleme transporta pozitrona u gasovima i primenu u realnim sistemima. Za potrebe istraživanja, i izradu ove disertacije, razvijen je numerički Monte Karlo kod prilagođen trima specifičnim sistemima, koji simuliraju rad **pozitronskog trapa**, metodu **kompresije snopa pozitrona rotirajućim električnim poljem** i analizu **transporta pozitrona u sredini analognoj biološkom tkivu**.

U prvom poglavlju dat je kratak pregled istorije istraživanja pozitrona gde su naznačeni najznačajniji doprinosi koji su omogućili prodor u ovoj grani fizike, kao i kratak pregled trenutnog stanja u oblasti i širokog spektra primene pozitrona. Zatim se u drugom

poglavljju opisuje Monte Karlo kod, naznačavaju se specifičnosti koje su bile neophodne za simulacije, poput detaljnog tretmana termalnih sudara, specifičnih oblika električnog polja, kao i načina uzorkovanja fizičkih veličina neophodnih za opis simuliranih sistema. U trećem poglavljju, dat je pregled sudarnih preseka pozitrona sa svim gasovima od značaja, koji su korišćeni u simulacijama kao i način na koji su sakupljeni podaci i formiran **kompletan set**. U četvrtom poglavljju je opisana simulacija standardnog Surko pozitronskog trapa, definisani su parametri dizajna uređaja koje možemo menjati u simulaciji, kao i izlazni parametri odnosno performanse trapa. U petom poglavljju analiziramo različite varijacije dizajna trapa, uticaj pojedinih parametara kao što su geometrija trapa, primenjeni naponi, promena pritiska i sastav gasa, na performanse naprave. Analiziraju se doprinosi različitih modova gubitka pozitrona i ograničenja koja oni predstavljaju na ukupnu efikasnost. Posebna pažnja, u šestom poglavljju, posvećena je dizajnu trapa koji umesto molekularnog azota, za trapovanje pozitrona koristi CF_4 i prednostima koje se mogu ostvariti takvim dizajnom. Pokazano je da se prelaskom na trapovanje pomoću CF_4 gasa može u potpunosti izbeći gubitak pozitrona kroz proces formiranja pozitronijuma i ostvariti daleko veća efikasnost trapovanja. Sedmo poglavlje posvećeno je modelovanju i simulaciji metode kompresije snopa pozitrona u "jednočestičnom režimu" pomoću rotirajućeg električnog polja. Objasnjen je mehanizam kompresije i ispitano je koji tipovi sudara su dominantno učestvuju u kompresiji. Osmo poglavlje bavi se transportom pozitrona u biološkoj sredini. Tačnije u vodenoj pari, kao zameni za tkivo, uz dodatak procesa koji opisuje oštećenja na organskim molekulima. Za razliku od ustaljene prakse, da se za dozimetrijske analize u primeni pozitrona koriste, široko dostupni, elektronski podaci za sudarne preseke, u ovoj disertaciji korišćeni su od nedavno dostupni setovi preseka za pozitrone. Analizirana je korelacija deponovane energije i potencijalnog oštećenja organskog molekula kroz proces disocijacije. Upoređena je šteta koju može da načini primarni pozitron sa štetom koju čine sekundarni elektroni nastali jonizacijom vode. U devetom poglavljju izvedeni su zaključci i data je lista naučnih doprinosa.

2. Metoda - Monte Karlo simulacija

2.1 Monte Karlo kod za opis transporta pozitrona u gasovima

Monte Karlo (MC) tehnika je jedan od glavnih metoda kompjuterskih simulacija u oblasti statističke i plazma fizike i u mogućnosti je da rešava širok spektar fizičkih problema i tako se nadoveže i na analitičku teoriju i na eksperiment. Glavna odlika Monte Karlo pristupa jeste stohastičnost. Nezavisno od konkretne primene metode, formira se stohastički model u kojem je očekivana vrednost određene, nasumične, promenljive ekvivalentna vrednosti fizičke veličine koju želimo da odredimo. Zatim se ta očekivana vrednost procenjuje usrednjavanjem velikog broja nezavisnih uzoraka. Za stvaranje statistički nezavisnih uzoraka koristi se niz nasumično (slučajno) generisanih brojeva. U praksi ovaj niz nije potpuno nasumičan, već je to niz "pseudo nasumičnih" brojeva koje kompjuter određuje determinističkom procedurom iz numeričkog "semena" (eng. *seed*) koje mu je dodeljeno po pokretanju programa.

Sam termin "Monte Karlo" simulacije, koji nalazi inspiraciju u domenu igara na sreću, su prvi uveli Nojman i Ulam, sa idejom da se u proračunu determinističkih veličina koriste nasumični brojevi (Forsythe and Leibler, 1950; von Neumann, 1951) za potrebe višedimenzione integracije i inverzije matrica. U oblasti transporta naelektrisanih čestica u gasovima, Monte Karlo su prvi primenili Itoh i Muša (Itoh and Musha, 1960) kako bi procenili jonizacioni koeficijent α/p_0 i brzinu drifta elektrona W za različite vrednosti redukovano električnog polja E/p_0 u helijumu. Važan trenutak bio je i razvoj tzv. "*null collision*" metode (Skullerud, 1968) koju je predložio Skullerud. U ovakvom pristupu, uvodi se pojam "ništavnog" (*null*) sudara između naelektrisane čestice i molekula gasa, u kojem se brzina naelektrisane čestice ne menja. Na ovaj način, adekvatnim odabirom verovatnoće za proces "ništavnog" sudara, možemo postići da naelektrisana čestica u električnom polju, koje joj menja energiju, ima konstantnu ukupnu sudarnu frekvencu, sa tim da određeni procenat sudara, zapravo nema efekat. Ova modifikacija dozvoljava analitički proračun verovatnoće za sudar i značajno ubrzava proračun, što je za vreme u koje je razvijena i dostupnost računarskih resursa predstavljalo veliki napredak. Istovremeno, međutim, treba

izbeći i preteran broj ništavnih sudara jer je moguće da se usled prevelikog broja ništavnih sudara kod uspori više no što je ubrzan primenom ove tehnike. Ipak, performanse računara danas dozvoljavaju primenu fleksibilnijih kodova koji nemaju ograničenja koja poseduje "null collision" tehnika.

Računarski kod koji je korišćen za potrebe ove disertacije je pisan u potpunosti ali se značajno oslanja na iskustvo i kodove koji su razvijani na Institutu za Fiziku u Beogradu u okviru Grupe za gasnu elektroniku gde postoji tradicija primene Monte Karlo simulacija na čitav spektar problema. Monte Karlo kod je korišćen za ispitivanje transporta elektrona na visokim vrednostima E/n_0 (Stojanović and Petrović, 1998) gde je, u pražnjenju, značajan efekat "runaway" elektrona i graničnih uslova. Isti kod je korišćen i za modelovanje prostorne raspodele eksitacija, kada eksitacija teškim česticama dominira nad elektronskim eksitacijama (Stojanovic et al. (1997); Petrović and Stojanović (1998)). Dalje, ispitivan je efekat negativne mobilnosti elektrona u jednosmernim (Dyatko et al. 2000) i radio-frekventnim (RF) poljima (Dujko et al. 2003), zatim kinetički fenomeni u RF poljima kao što je anomalna anizotropna difuzija (Maeda et al. 1997) i vremenski razložena negativna diferencijalna provodnost (Bzenić et al. 1999), vremenska relaksacija funkcije raspodele u RF poljima (Bzenić et al. 1999a), kao i test proračuni (*eng. benchmark*) u jednosmernim i RF poljima (Raspopović et al. 1999) i slično. Ono što je od dodatne relevantnosti za ovu disertaciju, jeste primena Monte Karlo koda u slučaju nekonzervativnog transporta pozitrona u gasovima (Šuvakov et. al., 2008; Banković et al. 2008). Takođe, kako u sva tri razmatrana sistema pozitroni relaksiraju do termalne energije, bilo je neophodno u simulaciju uključiti i efekte termalnih sudara na način na koji su predložili Ristivojević i Petrović (Ristivojević and Petrović, 2012) o čemu će biti više detalja u poglavlju 2.3.

2.2 Pojam "roja" čestica

Pre opisa samog računarskog koda trebalo bi definisati termin "roj" (*eng. swarm*) čestica. U domenu kinetičke teorije, roj predstavlja skup nezavisnih naelektrisanih čestica koje se kreću u neutralnom pozadinskom gasu. Na kretanje čestica utiču samo spoljno

električno i magnetsko polje i sudari sa pozadinskim gasom. Dakle jedan roj je sačinjen od velikog broja nezavisnih, identično prepariranih sistema koji se sastoje od jedne test-čestice i pozadinskog gasa. Stoga, za matematičku predstavu roja koristimo jednočestičnu šestodimenzionu funkciju raspodele u faznom prostoru $f(\mathbf{r}, \mathbf{c}, t)$, gde \mathbf{r} i \mathbf{c} predstavljaju koordinate konfiguracionom i brzinskom prostoru. Za opis kretanja roja, u spoljašnjem prostorno homogenom i vremenski nezavisnom električnom i magnetskom polju može se koristiti Bolcmanova (Boltzmann) jednačina:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{c} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} + \frac{q}{m} [\mathbf{E} + \mathbf{c} \times \mathbf{B}] \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{c}} = -J(f, f_0) \quad (1)$$

Konstante q i m predstavljaju naelektrisanje i masu čestice roja. Prvi član jednačine predstavlja eksplicitnu promenu fazne funkcije raspodele u vremenu. Drugi član je posledica gradijenta u konfiguracionom prostoru, a treći gradijenta u brzinskom prostoru, usled delovanja spoljašnje sile. Sa desne strane nalazi se linearni kolizioni operator $J(f, f_0)$ koji opisuje sudare naelektrisanih čestica sa neutralnim molekulima (ili atomima) pozadinskog gasa. Ti sudari mogu biti elastični, neelastični (uključujući i superelastične) kao i nekonzervativni (broj čestica nije održan). U okviru kolizionog operatera zanemareni su međusobni sudari naelektrisanih čestica. Funkcija raspodele pozadinskog gasa je data kao f_0 i u najvećem broju implementacija, kako je pozadinski gas u ravnoteži predstavlja Maksvel-Bolcmanovu raspodelu na zadatoj temperaturi. Rešavanjem Bolcmanove jednačine, dolazi se do jednočestične fazne funkcije raspodele $f(\mathbf{r}, \mathbf{c}, t)$ u kojoj su sadržane sve informacije o osobinama i ponašanju roja. Ipak, u eksperimentima nije moguće direktno meriti funkciju raspodele, već se u najvećem broju eksperimenata meri gustina struje naelektrisanih čestica koje dolaze na elektrodu. Ukoliko je zadovoljen uslov da se roj čestica nalazi u beskonačnom prostoru (u praksi to znači daleko od elektroda i zidova suda), daleko od izvora čestica tj. oblasti u kojima čestice intenzivno nastaju ili nestaju i ako se električno i magnetsko polje "sporo" menja u vremenu i prostoru, te dozvoljava da se uspostavi ravnoteža između energije koju čestica dobija od polja i energije koju čestica predaje u sudarima kažemo da se roj nalazi u *hidrodinamičkom režimu*. U hidrodinamičkom režimu mogu se definisati prostorni i vremenski nezavisni *transportni*

koeficijenti koji predstavljaju osobine roja, direktno proizlaze iz fazne funkcije raspodele i mogu se odrediti eksperimentalno iz izmerene električne struje.

Kako su sva tri sistema koja razmatra ova disertacija (poglavlja 4-8) izrazito nehidrodinamička, nećemo se detaljnije baviti različitim načinima rešavanja Bolcmanove jednačine u hidrodinamičkom režimu (za više detalja o rešavanju Bolcmanove jednačine u hidrodinamičkom i nehidrodinamičkom režimu pogledati doktorsku disertaciju Saše Dujka (Dujko, 2009)). Pored nehidrodinamičnosti, dodatno otežava situaciju ograničena i netrivialna geometrija problema, brzo promenljivo i komplikovano električno polje u slučaju kompresije rotirajućim poljem, kao i potreba da se prati vremenski razvoj osobina ansambla pozitrona. Takođe, izražena je i nekonzervativnost u transportu, odnosno značajan gubitak pozitrona, što kroz procese formiranja pozitronijuma i anihilacije, što kroz gubitke na elektrodama. Zbog ovoga je za simulacije transporta u sistemima koje obrađuje ova disertacija odabrana Monte Karlo tehnika, koja prethodno navedene probleme relativno lako zaobilazi. Proračun transporta naelektrisanih čestica pomoću Monte Karlo tehnike, koji je baziran na klasičnim trajektorijama čestica, možemo smatrati egzaktnim ukoliko poznajemo preseke za sudarne procese iz razloga što je vreme koje protekne između dva uzastopna sudara mnogo duže od trajanja samog sudarnog procesa tako da su preko sudarnih preseka opisani svi kvantni fenomeni. Glavni nedostatak Monte Karlo tehnike u odnosu na konkurentne metode jesu veći zahtevi u pogledu računarskih resursa, vremena izvršavanja koda, i neizvesnost koju može da uvede gruba prostorna mreža za proračun ili prevelik vremenski korak u evoluciji čestice u odnosu na relevantne procese.

2.3 Opis Monte Karlo koda

Kod koji je razvijen za potrebe realizacije ove disertacije napisan je u programskom jeziku C++, gde je ista osnovna verzija koda korišćena za simulaciju sva tri razmatrana sistema, uz male modifikacije, specifične za datu primenu, uglavnom u proračunu trajektorije u različitim tipovima polja, i uzorkovanju veličina koje su od interesa. Na slici 2.1 prikazan je osnovni algoritam programa i detaljnije prikazana procedura za evoluciju roja čestica u vremenu i određivanje trenutka sudara. Takođe u svakom Monte Karlo kodu

neophodan je i algoritam za generisanje nasumičnih brojeva. U slučaju našeg koda, korišćen je *ran3* algoritam (Vetterling, 2002) kojem se pri svakom pokretanju dodeljuje drugačije "seme" iz sistemskog časovnika.

2.3.1 Određivanje trenutka sudara

U osnovi koda nalazi se procedura za proračun trenutka sudara. Vremenska gustina verovatnoće da se sudar dogodi je data jednačinom:

$$p(t) = v(\varepsilon(t))e^{-\int_{t_0}^t v(\varepsilon(t'))dt'} \quad , \quad (2.1)$$

gde je v koliziorna frekvencija za pojedinačni sudar data sa:

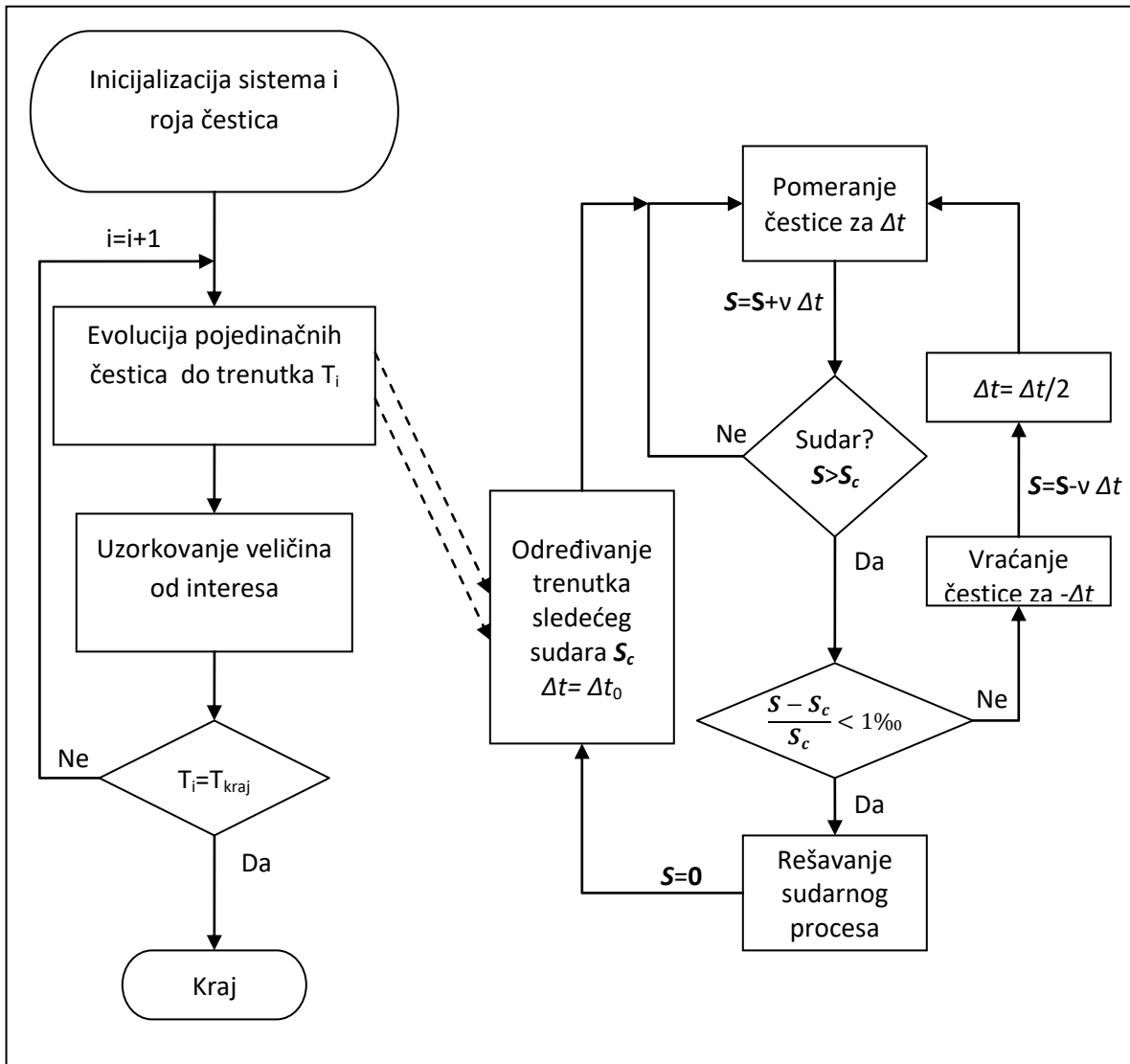
$$v_i(\varepsilon(t)) = n\sigma_i(\varepsilon(t))v(t) \quad . \quad (2.2)$$

ε je kinetička energija čestice, v je brzina čestice, n je koncentracija čestica pozadinskog gasa a σ_i jeste presek za pojedinačni sudar. Izraz (2.2) je aproksimacija (zarad jednostavnijeg objašnjenja) koja važi za čestice sa energijom daleko većom od termalne energije, odnosno pretpostavlja da je pozadinski gas nepokretan. Eksplicitan izraz (koji je korišćen u kodu) dat je u poglavlju 2.3.5.

Totalna koliziorna frekvencija jeste suma pojedinačnih kolizionih frekvencija za svaki sudarni događaj:

$$v_t(v) = \sum_i v_i(v) \quad . \quad (2.3)$$

Takođe, ukoliko se pozadina sastoji od smeše gasova, svaki od pojedinačnih sudarnih procesa se uzima otežinjen udelom odgovarajućeg činioca smeše. Kako bismo odredili



Slika 2.1 Šematski prikaz osnovnog algoritma i procedura za evoluciju roja čestica u vremenu i određivanje trenutka sudara.

trenutak sudara, neophodno je da iz raspodele koja je data u (2.1) generišemo slučajan broj na intervalu $(t_0, +\infty)$ koji će predstavljati trenutak sudara t_c . Pomoću generatora slučajnih brojeva, odabiramo slučajan broj r iz uniformne raspodele na intervalu $(0,1)$ za koji važi:

$$r = \int_{t_0}^{t_c} p(t) dt \quad , \quad (2.4)$$

odakle zamenom iz (2.1) dobijamo:

$$1 - r = e^{-\int_{t_0}^{t_c} v_t(\varepsilon(t)) dt} \quad , \quad (2.5)$$

Logaritmovanjem obe strane jednačine konačno dolazimo do:

$$-\ln(1 - r) = \int_{t_0}^{t_c} v_t(\varepsilon(t)) dt \quad . \quad (2.6)$$

U opštem slučaju, jednačina (2.6) nije rešiva analitički. Stoga se mora primeniti numerički metod za određivanje t_c . U našem kodu, korišćen je pristup *sudarne sume*.

Za svaku česticu pojedinačno, na početku simulacije i nakon svakog sudara, odredi se ciljana vrednost sudarne sume kao:

$$S_0 = -\ln(r) \quad . \quad (2.7)$$

a zatim se vrednost integrala iz (2.6) aproksimira sumom $S = \sum v_t(t)\Delta t$ tako što se vreme podeli na male intervale Δt . U kodu se čestica pomera za konačno, malo vreme Δt dok se ne dobije $S_0 = S$. Kako nije moguće apsolutno zadovoljiti ovu jednakost, u praksi se koristi metoda polovljenja, prikazana na slici 2.1, kako bi se što preciznije odredio trenutak sudara. U iteraciji u kojoj vrednost sudarne sume premaši ciljanu vrednost S_0 , čestica se vraća jedan korak unazad a vremenski korak Δt se prepolovi. Ovaj postupak se ponavlja sve dok se vrednost sudarne sume dovoljno ne približi ciljanjoj vrednosti, i u tom trenutku se prelazi na obradu sudara a sudarna suma za datu česticu se resetuje na nultu vrednost kako bi se pripremila za proračun sledećeg sudara.

2.3.2 Određivanje tipa sudara

Kada znamo da je došlo do sudara, relativno jednostavno možemo odrediti koji tip sudara se dogodio. Verovatnoća za pojedinačni sudar proporcionalna je kolizionoj frekvenci za taj sudar. Kako je totalna koliziona frekvenca, prema jednačini (2.3), suma kolizionih frekvenci za sve moguće procese, tada je verovatnoća za pojedinačni, i -ti sudar data sa $P_i = v_i(\varepsilon)/v_t(\varepsilon)$. Samim tim zadovoljena je relacija $\sum_i P_i = 1$. Odabirom nasumičnog broja r , određujemo da se dogodio proces k ako je zadovoljena relacija:

$$\sum_{j=1}^{k-1} P_j < r < \sum_{j=1}^k P_j \quad (2.8)$$

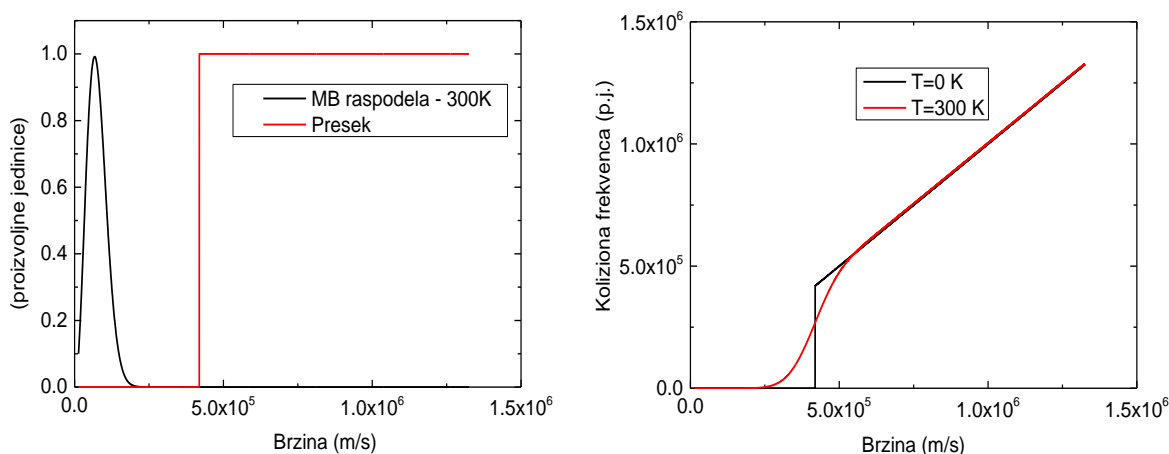
2.3.3 Termalni efekti

Već je napomenuto, da je za razmatrane sisteme neophodno pratiti razvoj roja sve do termalizacije, odnosno dok roj pozitrona ne postigne termodinamičku ravnotežu sa atomima/molekulima pozadinskog gasa na sobnoj temperaturi. Većina simulacija transporta naelektrisanih čestica koje koriste Monte Karlo pristup ne razmatraju rojeve na tako niskim energijama, te se termalni efekti najčešće mogu zanemariti. Izuzetak su simulacije koje obrađuju transport teških čestica (npr. jona). Joni obično imaju veoma velike preseke za rasejanje sa "roditeljskim" gasom pa imaju relativno male srednje energije i na visokim E/N . Stoga su joni u termodinamičkoj ravnoteži u širem opsegu E/N i termalni efekti su bitni u širem opsegu polja. Upravo za potrebe simulacije transporta jona, Ristivojević i Petrović (Ristivojević and Petrović, 2012) su razvili metod kojim se sudari na niskim energijama obrađuju bez aproksimacije. Da bismo razumeli potrebu za takvim pristupom razmotrimo dva moguća slučaja, kada se meta i projektil kreću jednakim brzinama u istom smeru i slučaj kada se meta i projektil kreću brzinama jednakog intenziteta ali u suprotnom smeru. Jasno je da u prvom slučaju ne može doći do sudara, dok u drugom slučaju postoji velika verovatnoća. Razmatrajući izraz (2.2) jasno je da se, kako koliziona frekvenca ne zavisi od brzine mete, za oba ova slučaja dobija ista koliziona frekvenca, tj. verovatnoća

sudara. Dakle potrebno je izraz (2.2) modifikovati tako da adekvatno uzme u obzir raspodelu brzina čestica pozadinskog gasa i prointegrirali kroz ceo prostor mogućih relativnih brzina. Ristivojević i Petrović su dali izraz za kolizionu frekvencu u funkciji brzine čestice projektila kao:

$$v_i(v) = n \iiint \sigma_i(|\vec{v} - \vec{u}|) |\vec{v} - \vec{u}| F(\vec{u}) d\vec{u} \quad (2.9)$$

gde je $F(\vec{u})$ funkcija raspodele čestica gasa po brzinama a $\sigma_i(|\vec{v} - \vec{u}|)$ je presek za konkretan događaj. Primer proračunate kolizione frekvence za proizvoljan modalni presek za neelastičan sudar sa pragom je prikazan na slici 2.2. Data je koliziona frekvencija proračunata za nultu kao i za sobnu temperaturu pozadinskog gasa. Efekat temperature pozadinskog gasa je najvidljiviji u oblasti blizu praga za sudarni proces.



Slika 2.2 Prikaz proizvoljnog preseka za sudarni proces sa pragom i ravnotežna raspodela brzina čestica pozadinskog gasa na sobnoj temperaturi (slika levo). Prikaz odgovarajuće kolizione frekvence proračunate za temperaturu pozadinskog gasa od 0 K pomoću jednačine 2.2, odnosno za temperaturu gasa 300 K izračunate pomoću jednačine (2.9)

Kada se utvrdi da se dogodio sudar, i kada je prema jednačini (2.8) određen tip sudara neophodno je odrediti brzinu čestice pozadinskog gasa koja učestvuje u sudaru. U simulacijama gde postoji električno polje i gde je ravnotežna energija čestica roja značajno veća od termalne energije, dobra je aproksimacija pretpostaviti Maksvel-Bolcmanovu

raspodelu atoma/molekula pozadinskog gasa i iz nje nasumce izabrati parametre mete, zato što čestice pozadinskog gasa, koje zadovoljavaju Maksvel-Bolcmanovu raspodelu, imaju značajno manju brzinu od projektila pa je relativna brzina projektil-meta približna brzini projektila. Međutim ako želimo da pratimo razvoj energijske raspodele do termalnih energija, iz jednačine (2.9) vidimo da za relativno niske energije projektila kod izbora brzine mete, neophodno uzeti u obzir i brzinu mete i brzinu projektila. Da bi se ova konstatacija bolje razumela razmotrićemo hipotetičku situaciju da čestica ima brzinu koja odgovara energiji malo ispod energije praga za dati proces. Prema obliku koliziona frekvence na slici 2.2-desno, jasno je da postoji konačna verovatnoća da se takav proces dogodi. Ipak ukoliko se takav proces dogodio, nedostajuću energiju, do energije praga mora da nadomesti meta. Dakle nije svaka brzina iz Maksvel-Bolcmanove raspodele dozvoljena već se raspodela otežinjava u skladu sa trenutnom vrzinom projektila. Izraz za gustinu verovatnoće sudara po jedinici vremena (Ristivojević and Petrović, 2012) je dat kao:

$$p(\vec{v}, \vec{u}) = \frac{n\sigma(|\vec{v} - \vec{u}|)|\vec{v} - \vec{u}|F(\vec{u})}{v(v)} \quad (2.10)$$

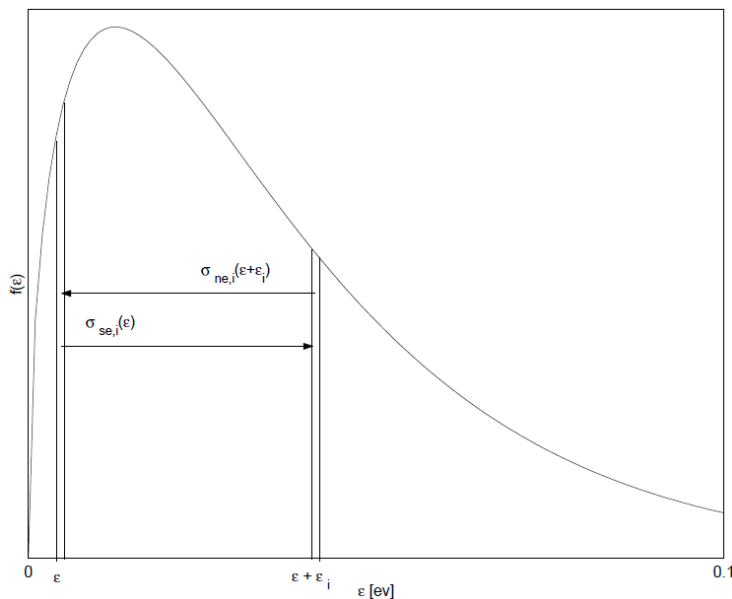
gde $F(\vec{u})$ predstavlja funkciju raspodele čestica pozadinskog gasa po brzinama, $\sigma(|\vec{v} - \vec{u}|)$ je presek za događaj koji razmatramo u funkciji relativne brzine, a $v(v)$ je koliziona frekvencija za dati događaj u funkciji brzine projektila. Dakle ovaj izraz predstavlja uslovnu verovatnoću kada poznajemo brzinu čestice projektila. Kako bismo iz ovog izraza pomoću generatora nasumičnih brojeva dobili brzinu mete koristimo metodu odbacivanja, na sledeći način (Ristivojević and Petrović, 2012): neka je q_{max} maksimum izraza $\sigma(|\vec{v} - \vec{u}|)|\vec{v} - \vec{u}|$ za sve dozvoljene brzine \vec{v} i \vec{u} . Prihvat ćemo nasumično izabranu brzinu \vec{u}' iz Maksvel-Bolcmanove raspodele ukoliko je zadovoljena relacija:

$$\sigma(|\vec{v} - \vec{u}'|)|\vec{v} - \vec{u}'| > r q_{max} \quad (2.11)$$

gde je $r \in (0,1]$ nasumično izabran broj. U suprotnom, bira se nova brzina \vec{u}' sve dok se ne odaberu vrednosti koje zadovoljavaju jednačinu (2.11). Kod primene ovog metoda treba biti oprezan kada je oblik krive $\sigma(|\vec{v} - \vec{u}'|)|\vec{v} - \vec{u}'|$ izrazito šiljat, jer postoji opasnost da

metod postane neefikasan, u pogledu vremena izvršavanja, usled prevelikog broja neuspešnih petlji. Srećom, priroda sudarnih procesa, odnosno oblik relevantnih preseka u izradi ove disertacije nam nije zadavao poteškoće.

Poslednje što treba uzeti u obzir pri obradi termalnih sudara jesu superelastični procesi, odnosno sudari projektila sa česticama gasa koje se nalaze u pobuđenom stanju, pri čemu se deeksituju i predaju energiju projektilu. Preseke za superelastičan proces je teško izmeriti ili izračunati, ali se mogu zadovoljavajuće proceniti kotisteći se principima detaljne ravnoteže (Makabe and Petrović, 2006). Da bismo razumeli princip detaljne ravnoteže, razmatrajmo sistem čestica i projektila koji je u stanju termodinamičke ravnoteže (slika 2.3).



Slika 2.3 Maksvelova funkcija raspodele i prikazani uravnoteženi procesi: neelastični (čiji je presek označen sa $\sigma_{ne,i}$) i superelastični proces ($\sigma_{se,i}$).

Raspodela energija u termodinamičkoj ravnoteži, kako projektila, tako i meta je Maksvelijan:

$$f(\varepsilon) = C_1 \sqrt{\varepsilon} e^{-\frac{\varepsilon}{kT}}, \quad (2.12)$$

gde je C_1 konstanta normiranja, a T temperatura pozadinskog gasa. Obeležimo sa N_i koncentraciju čestica gasa u i -tom kvantnom stanju. Tada važi:

$$N_i = C_2 \omega_i e^{-\frac{\varepsilon_i}{kT}}, \quad (2.13)$$

gde je C_2 konstanta normiranja a ω_i degeneracija i -tog stanja.

Princip detaljne ravnoteže koristi osnovnu osobinu da u slučaju termodinamičke ravnoteže, za svaki neelastični proces, postoji inverzni, superelastični proces kojim je prvi uravnotežen. To u slučaju prikazanom na slici 2.3 znači da za neelastični proces sa presekom $\sigma_{ne,i}$ koji elektronima oduzima energiju ε_i (pri eksitaciji molekula gasa sa nultog na i -to pobuđeno stanje) postoji inverzan superelastičan proces $\sigma_{se,i}$ koji pri deeksitaciji molekula gasa sa i -tog na nulto stanje istu energiju vraća elektronu. Kako bi se održala ravnoteža, neophodno je da ova dva procesa imaju jednake brzine odnosno da broj neelastičnih sudara u jedinici vremena na energiji $\varepsilon + \varepsilon_i$ bude jednak broju odgovarajućih superelastičnih sudara na energiji ε :

$$N_0 v(\varepsilon + \varepsilon_i) \sigma_{ne,i}(\varepsilon + \varepsilon_i) f(\varepsilon + \varepsilon_i) d\varepsilon = N_i v(\varepsilon) \sigma_{se,i}(\varepsilon) f(\varepsilon) d\varepsilon, \quad (2.14)$$

gde je $v(\varepsilon)$ brzine čestice projektila:

$$v(\varepsilon) = \sqrt{\frac{2\varepsilon}{m}}. \quad (2.15)$$

Kada jednačine (2.12), (2.13) i (2.15) zamenimo u jednakost (2.14) dobijamo:

$$\omega_0 \sqrt{\varepsilon + \varepsilon_i} \sigma_{ne,i}(\varepsilon + \varepsilon_i) \sqrt{\varepsilon + \varepsilon_i} e^{-\frac{\varepsilon + \varepsilon_i}{kT}} = \omega_i e^{-\frac{\varepsilon_i}{kT}} \sqrt{\varepsilon} \sigma_{se,i}(\varepsilon) \sqrt{\varepsilon} e^{-\frac{\varepsilon}{kT}}, \quad (2.14)$$

što daje izraz za presek za superelastični proces (Makabe and Petrović, 2006):

$$\sigma_{se,i}(\varepsilon) = \frac{\omega_0}{\omega_i} \frac{\varepsilon + \varepsilon_i}{\varepsilon} \sigma_{ne,i}(\varepsilon + \varepsilon_i), \quad (2.15)$$

Primetimo da za ovako izračunat presek koncentracija meta koje odgovaraju procesu jeste zapravo definisana izrazom (2.13) te bi ovaj izraz trebalo i da figuriše u izrazima (2.9, 2.10 i slično). Kako bi se pojednostavio proračun, odnosno u pomenutim izrazima koristila samo totalna koncentracija pozadinskog gasa (direktno povezana sa pritiskom i temperaturom

gasa) u samoj implementaciji presek za superelastičan proces se normira na ukupnu koncentraciju molekula gasa odnosno izraz (2.15) se modifikuje:

$$\sigma_{se,i}(\varepsilon) = \frac{\varepsilon + \varepsilon_i}{\varepsilon} \sigma_{ne,i}(\varepsilon + \varepsilon_i) e^{-\frac{\varepsilon_i}{kT}}, \quad (2.16)$$

Na ovaj način u svim izrazima za proračun kolizione frekvence kao koncentracija gasa figuriše ista veličina.

Kod većine procesa ne postoji značajna populacija pobuđenih stanja (osim ako se radi o značajnoj perturbaciji gasa od strane plazme). Međutim rotaciona stanja imaju prag od oko jedan do nekoliko meV. Samim time će na sobnoj temperaturi biti pobuđeno i više desetina rotacionih nivoa.

2.3.4 Rešavanje rasejanja kod elastičnih i neelastičnih sudara

Sada kada su poznate brzine i projektila i mete, dobijene na način koji je opisan u prethodnim odeljcima, neophodno je rešiti sudar, odnosno odrediti brzine čestica nakon sudara. U slučaju konzervativnih sudara, moguće je odrediti brzine nakon sudara iz zakona održanja energije i impulsa. Neka su sa \vec{v} i m date brzina i masa čestice projektila, a sa \vec{V} i M brzina i masa čestice mete. Neka je \vec{v}_{cm} brzina centra mase ovakvog sistema a $\underline{\vec{v}} = \vec{v} - \vec{v}_{cm}$ i $\underline{\vec{V}} = \vec{V} - \vec{v}_{cm}$ brzine projektila i mete respektivno definisane u sistemu centra mase. Definišimo i brzine \vec{v}' i \vec{V}' koje predstavljaju brzine projektila i mete nakon sudara definisane u sistemu centra mase. Kako je impuls unutar sistema centra mase jednak nuli, imamo da je $m\underline{\vec{v}} + M\underline{\vec{V}} = 0$, odnosno:

$$m|\underline{\vec{v}}| = M|\underline{\vec{V}}|. \quad (2.17)$$

Ukupna energija pre i posle sudara je održana:

$$\frac{1}{2} \left[M|\vec{v}_{cm}|^2 + m|\underline{\vec{v}}|^2 + M|\underline{\vec{V}}|^2 \right] = \frac{1}{2} \left[M|\vec{v}_{cm}|^2 + m|\vec{v}'|^2 + M|\vec{V}'|^2 \right] + \Delta E \quad (2.18)$$

gde je $\underline{M} = m + M$ ukupna masa sistema a ΔE energija praga za posmatrani proces. Kako trenutno govorimo o konzervativnim sudarima, ukupna masa ostaje jednaka pre i posle sudara, kao i brzina centra mase, te se izraz (2.18) pojednostavljuje:

$$m|\underline{v}|^2 + M|\underline{V}|^2 = m|\underline{v}'|^2 + M|\underline{V}'|^2 + 2\Delta E. \quad (2.19)$$

Ukoliko izraz (2.17) uvrstimo u (2.19) pre i posle sudara dobijemo konačan izraz za intenzitet brzine čestice projektila nakon sudara u sistemu centra mase:

$$|\underline{v}'| = \sqrt{|\underline{v}|^2 - \frac{\mu}{m^2} 2\Delta E}. \quad (2.20)$$

Izraz se ne menja ni u slučaju superelastičnih procesa, osim što se menja znak energije ΔE . Kada znamo intenzitet brzine u sistemu centra mase, neophodno je odrediti i smer vektora. Ugao pod kojim se čestica rasejava definisan je pomoću diferencijalnog preseka za proces $\sigma(v, \theta, \varphi)$ koji predstavlja verovatnoću da se čestica raseje u jedinični prostorni ugao i povezan je sa presekom za sudar kao:

$$\sigma_0(v) = \iint \sigma(v, \theta, \varphi) \sin\theta d\theta d\varphi. \quad (2.21)$$

Kako je rasejanje po azimutalnom uglu uniformno, izraz (2.21) se redukuje:

$$\sigma_0(v) = 2\pi \int \sigma(v, \theta) \sin\theta d\theta. \quad (2.23)$$

Nasumičnim izborom ugla θ iz raspodele definisane diferencijalnim presekom i izborom ugla $\varphi \in (0, 2\pi)$ uniformno, dobijamo jedinični ort vektor \vec{i} za brzinu rasejane čestice u sistemu centra mase. Konačno brzina projektila je data kao:

$$\vec{v}' = \vec{v}_{cm} + \vec{i}|\underline{v}'|. \quad (2.24)$$

2.3.5 Nekonzervativni sudari

Nekonzervativni sudari su sudari u kojima nije održan broj čestica, odnosno sudari u kojima nastaju nove čestice, ili postojeće čestice nestaju. U slučaju pozitrona, to su procesi formiranja pozitronijuma i anihilacija u kojima se gube pozitroni, dok se elektroni mogu izgubiti u procesu elektronskog zahvata, ali i umnožiti kroz proces jonizacije. Obrada sudara u kojima se gube čestice je relativno jednostavna, jer izgubljena čestica više ne

učestvuje u simulaciji i prosto se izbacuje. Sa druge strane, obrada jonizacije, kao tročestičnog procesa, je dosta komplikovanija, jer pored veličine preseka za događaj zahteva dodatno poznavanje fizike samog procesa, opisane kroz podatke kao što je trodiferencijalni presek koji definiše uglove rasejanja projektila i sekundarnog elektrona i preraspodelu energije između njih. O problemu obrade procesa jonizacije bavićemo se u poglavlju 8 gde se bavimo temom transporta pozitrona i elektrona u biološkoj sredini.

2.3.6 Testiranje računarskog koda

Kako bismo ispitali validnost programirane Monte Karlo procedure, neophodno je da kod zadovolji osnovne benčmark (eng. *benchmark*) testove dizajnirane da ispituju različite aspekte. U tu svrhu, primenili smo Ridov model sa nagibom (Reid, 1979), jonizacioni model Lukasa i Siliija (Lucas and Saelee, 1975) kao i model zahvata Nesa i Robsona (Ness and Robson, 1986). Prednost testa Monte Karlo kodova na ovakvim modalnim presecima, u analitičkoj formi, ogleda se u mogućnosti poređenja računarskog koda, čija je greška u ovom slučaju određena isključivo statistikom, sa analitičkim rešenjima koja su dobro poznata.

U nadgradnji Ridovog modela izračunati su transportnu koeficijenti za uslove transporta u električnom i magnetskom polju pod proizvoljnim uglom (White et al. 1999). Modalni presek Ridovog modela dat je kao:

$$\begin{aligned}\sigma_m(\epsilon) &= 6\text{\AA}^2 \\ \sigma_{nel}(\epsilon) &= \begin{cases} 10(\epsilon - 0.2)\text{\AA}^2, & \epsilon \geq 0.2 \text{ eV} \\ 0, & \epsilon < 0.2 \text{ eV} \end{cases} \\ m_0 &= 4 \text{ amu} \\ T_0 &= 0 \text{ K}\end{aligned}\tag{2.25}$$

gde su m_0 i T_0 masa i temperatura neutralne čestice pozadinskog gasa a energija ϵ je data u jedinicama eV. σ_m je presek za prenos impulsa, a kako je svo rasejanje uniformno, to je zapravo konstantan elastičan presek. Presek za neelastičan proces σ_{nel} je dat kao linearna

funkcija, za energije preko praga od 0.2 eV. Na ovaj način Ridov model testira transport u električnom i magnetskom polju u uslovima gde koliziona frekvencija zavisi od energije.

Proces jonizacije testiran je primenom modela Lukas-Sili (Lucas and Saelee, 1975) čiji su detalji dati sa:

$$\begin{aligned}
 \sigma_{el}(\epsilon) &= 4\epsilon^{-\frac{1}{2}}\text{\AA}^2 \\
 \sigma_{nel}(\epsilon) &= \begin{cases} 0.1(1-F)(\epsilon - 15.6)\text{\AA}^2, & \epsilon \geq 15.6 \text{ eV} \\ 0, & \epsilon < 15.6 \text{ eV} \end{cases} \\
 \sigma_I(\epsilon) &= \begin{cases} 0.1F(\epsilon - 15.6)\text{\AA}^2, & \epsilon \geq 15.6 \text{ eV} \\ 0, & \epsilon < 15.6 \text{ eV} \end{cases} \quad (2.26) \\
 P(q, \epsilon') &= 1 \\
 m/m_0 &= 10^{-3} \\
 T_0 &= 0 \text{ K}
 \end{aligned}$$

gde je σ_{el} elastičan presek, σ_{nel} presek za neelastičan proces a σ_I presek za jonizaciju. Energija ϵ je data u jedinicama eV, m_0 i T_0 masa i temperatura neutralne čestice pozadinskog gasa a m je masa simulirane čestice roja. Parametrom F kontroliše se veličina neelastičnog, odnosno preseka za jonizaciju. Podrazumeva se da su svi procesi izotropni. Funkcija particije energije pri jonizaciji $P(q, \epsilon')$ je postavljena na 1 što podrazumeva da je svaki odnos $0 \leq q \leq 1$ jednako verovatan. q predstavlja odnos preostale energije, nakon jonizacije, koju dobija primarni, odnosno sekundarni elektron, a ϵ' je energija incidentne čestice.

Za testiranje procesa nestanka čestica, u našem slučaju procesa formiranja pozitronijuma i elektronskog zahvata, koristili smo model zahvata Nesa i Robsona (Ness and Robson, (1986)). Model je opisan sa:

$$\begin{aligned}
 \sigma_{el}(\epsilon) &= 4\epsilon^{-\frac{1}{2}}\text{\AA}^2 \\
 \sigma_{nel}(\epsilon) &= \begin{cases} 0.1(1-F)(\epsilon - 15.6)\text{\AA}^2, & \epsilon \geq 15.6 \text{ eV} \\ 0, & \epsilon < 15.6 \text{ eV} \end{cases} \quad (2.26) \\
 \sigma_a(\epsilon) &= a\epsilon^p \\
 m/m_0 &= 10^{-3}
 \end{aligned}$$

$$T_0 = 0 K$$

Parametar a određuje veličinu preseka za zahvat, dok p određuje energijsku zavisnost odnosno oblik preseka za zahvat.

Prolazeći kroz ova tri benčmark testa potvrdili smo valjanost naše Monte Karlo procedure u uslovima gde postoji električno i magnetsko polje, kada zaklapaju proizvoljan ugao, kao i kada dominiraju nekonzervativni sudari, pogotovo u slučaju nestanka čestica koji je dominantan kod transporta pozitrona.

3. Podaci o sudarnim presecima

Pouzdanost Monte Carlo simulacije, koju smo testirali benčmark preseccima nam garantuje valjanost rezultata, pod uslovom da su sudarni presecc koji koristimo kao ulazni podatak takođe valjani. Takođe, neophodno je da setovi preseca budu *kompletni*, što podrazumeva da su u set uključeni svi značajni procesi kako bi se obezbedio balans broja čestica, impulsa i energije. Postoji veliki broj eksperimentalno izmerenih elektronskih preseca za različite gasove, kao i formiranih kompletnih setova preseca za elektrone. Za pozitrone, sa druge strane, iako su presecc za neke značajne procese na gasovima od interesa izmereni, formiranje kompletnog seta u nekim slučajevima podrazumeva neku vrstu snalaženja, od preuzimanje preseca za pojedine procese iz setova kompatibilnih atoma i molekula, do korišćenja nekih preseca za elektrone u specijalnim slučajevima.

Kako je naelektrisanje pozitrona suprotnog znaka u odnosu na elektron, uvek se razlikuje od svakog elektrona u meti, što za posledicu ima odsustvo izmenske interakcije. Takozvana statička, tj. Kulonova interakcija pozitrona sa jezgrom atoma je iste jačine kao i statička interakcija elektrona, ali je suprotnog znaka odnosno, repulzivna. Polarizacioni potencijal, kojim se modeluje polarizacija elektronskog oblaka atoma usled nadolazeće, naelektrisane čestice projektila, je privlačnog karaktera i iste jačine i za elektrone i za pozitrone. Ova dva tipa interakcije za pozitrone se potiru, i kao rezultat, interakcija pozitrona sa atomima je manje privlačna nego kod elektrona. Ovo je razlog zbog kojeg je, na niskim energijama, gde je polarizacioni efekat dominantan, presek za pozitrone, uglavnom, značajno manji od preseca za elektrone (Hoffman et al. 1982).

Na višim energijama, gde postaje moguć proces formiranja pozitronijuma, teorijsko razmatranje se značajno komplikuje. Formiranje pozitronijuma je izuzetno jak sudarni proces, i mora biti uključen u bilo kakav proračun koji bi dao razumne rezultate. Problem kod takvih proračuna jeste što je konačno stanje više-centrično (atom i pozitronijum), i samim tim izuzetno komplikovano za egzaktan opis. Tek nekoliko modela je bilo donekle uspešno u ovim proračunima, koristeći pristup spregnutih kanala (npr. Mitroy et al. 1994; Kernoghan et al. 1995).

Na izuzetno visokim energijama, preko 1 keV, polarizaciona i izmenska interakcija postaju zanemarive, te statička interakcija postaje dominantan činilac. Kako je statička interakcija identična za elektrone i pozitrone, tako i preseki postaju praktično identični, i vrednosti se mogu razumno izračunati prvom Bornovom aproksimacijom (Makochekanwa et al. 2007). Nedostatak izmenske interakcije kod pozitrona naizgled olakšava teorijsko razmatranje, ali pažljivom analizom, zaključićemo da između elektrona mete i projektila, odnosno pozitrona postoje jaki korelacioni efekti koji se moraju uzeti u obzir. Ovi efekti su posledica privlačne elektrostatičke interakcije i mogu se tretirati kao realna ili virtuelna stanja pozitronijuma. Uloga koju imaju je mnogo značajnija nego uloga elektron-elektron korelacija u rasejanju elektrona.

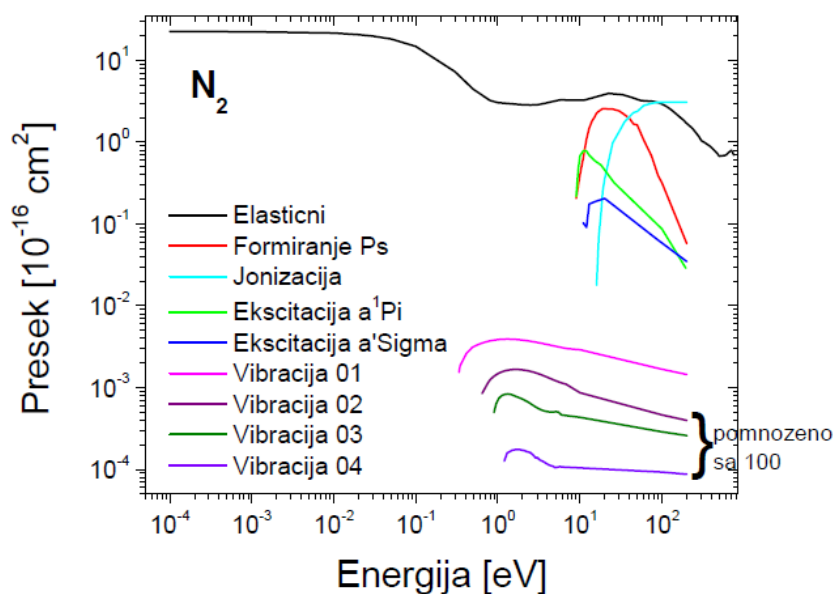
Na jako niskim energijama, jedini otvoreni kanali interakciju su anihilacija i elastično rasejanje. Kako se povećava energija pozitrona otvaraju se i neelastični kanali: formiranje pozitronijuma, eksitacija atomskih nivoa i jonizacija. Pozitronijum može biti formiran u osnovnom stanju ili nekom od dozvoljenih pobuđenih stanja, dok su pobuđena stanja mete ograničena na ona stanja koja ne zahtevaju promenu spina, pošto izmenska interakcija nije moguća, a spin-orbitna interakcija za pozitrone se pokazala zanemarivom, čak i u sistemima sa teškim atomima. Direktna anihilacija je moguća, na svim energijama pozitrona, ali je presek za ovaj proces, obično, daleko manji od svih ostalih. Kod složenih molekula, međutim, moguće su rezonance pri anihilaciji. Poneke imaju maksimume i nekoliko redova veće od nerezonantnog preseka. Neophodni uslov za formiranje pozitronijuma jeste da je energija pozitrona veća od razlike praga za jonizaciju, i energije veze pozitronijuma (6.8 eV). Ukoliko meta (atom ili molekul) imaju jonizacionu energiju ispod 6.8 eV, pozitronijum mogu formirati čak i pozitroni sa nultom energijom.

U smislu analize roja pozitrona, proces formiranja pozitronijuma (Ps) predstavlja nekonzervativan proces koji dovodi do smanjenja broja pozitrona, i na neki način je analogan procesu elektronskog zahvata. Direktna jonizacija, sa druge strane, ne uvećava broj čestica roja, već za pozitrone predstavlja konzervativan, neelastičan proces. Novonastali elektron, kao što je urađeno u poglavlju 7, može biti član novog roja koji je predmet zasebne analize.

U narednim odeljcima, biće predstavljeni setovi preseka korišćeni u izradi disertacije za gasove N_2 , CF_4 (Petrović et al. 2013) i H_2O (Banković et al. 2012a) a tabelirani podaci su dostupni u dodatku.

3.1 Set sudarnih preseka za interakciju e^+-N_2

Na slici 3.1 prikazan je predložen set podataka za molekul azota (Banković et al. 2008). Totalni presek je preuzet iz merenja Hofmana i saradnika (Hoffman et al. 1982) i proširen je na energije ispod 1 eV koristeći izračunat presek Karvalja i saradnika (Carvalho et al. 2000). Preseci za vibracionu eksitaciju su preuzeti iz teorijskog rada Đanturka i Mukherdžija (Gianturco and Mukherjee, 1997), pošto ne postoje dovoljno detaljni eksperimentalni podaci. Preseci za formiranje pozitronijuma i za direktnu jonizaciju su preuzeti od Maler i Surko (Marler and Surko, 2005), a presek za direktnu anihilaciju je



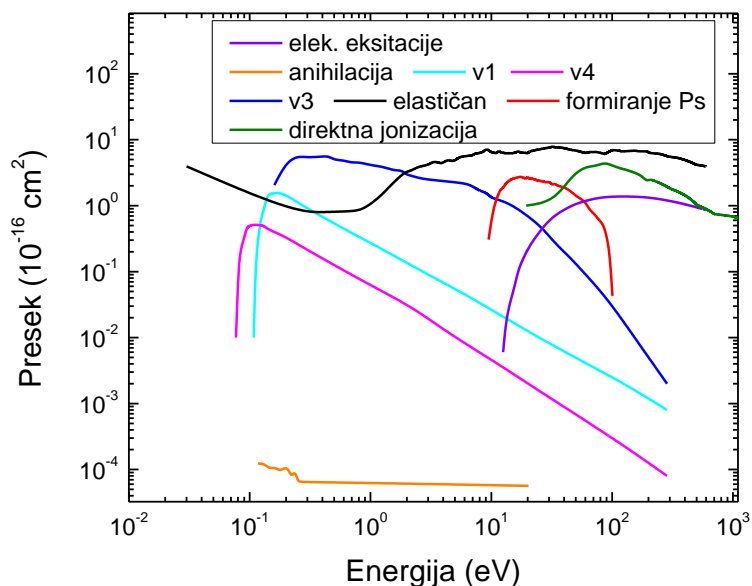
Slika 3.1 Preseci za rasejanje pozitrona na molekulu azota (Banković et al. 2008).

preuzet iz seta za CF_4 (Barnes et al. 2003). Sam presek za anihilaciju je daleko ispod svih drugih procesa, a po vrednosti korišćeni presek za CF_4 odgovara teorijskim predviđanjima i malom broju eksperimentalnih merenja prikazanih u (Darewych, 1982) te je nesigurnost uneta izborom ovog preseka zanemariva. Presek za elektronske eksitacije je preuzet iz

(Marler and Surko, 2005). Rotaciona eksitacija uključena je pomoću teorijskih preseka za elektrone (Gerjuoy and Stein, 1955), uzimajući u obzir samo eksitaciju u singletna stanja, zbog izostanka izmenske interakcije. Elastični presek dobijen je tako što su od totalnog preseka oduzeti svi neelastični preseci.

3.2 Set sudarnih preseka za interakciju e^+ -CF₄

Set za rasejanje pozitrona na tetrafluorometanu (CF₄) je dat na slici 3.2. U razmatranju ovog seta treba biti obazriv, jer se ovaj set ne može smatrati *kompletnim setom*. Neki od procesa nisu dostupni ni u formi izmerenih preseka, niti izračunati kroz teorijsko razmatranje. Ipak, kako se tetrafluorometan koristi pri termalizaciji na najnižim energijama,



Slika 3.2 Preseci za rasejanje pozitrona na tetrafluorometanu. (Petrović et al. 2013)

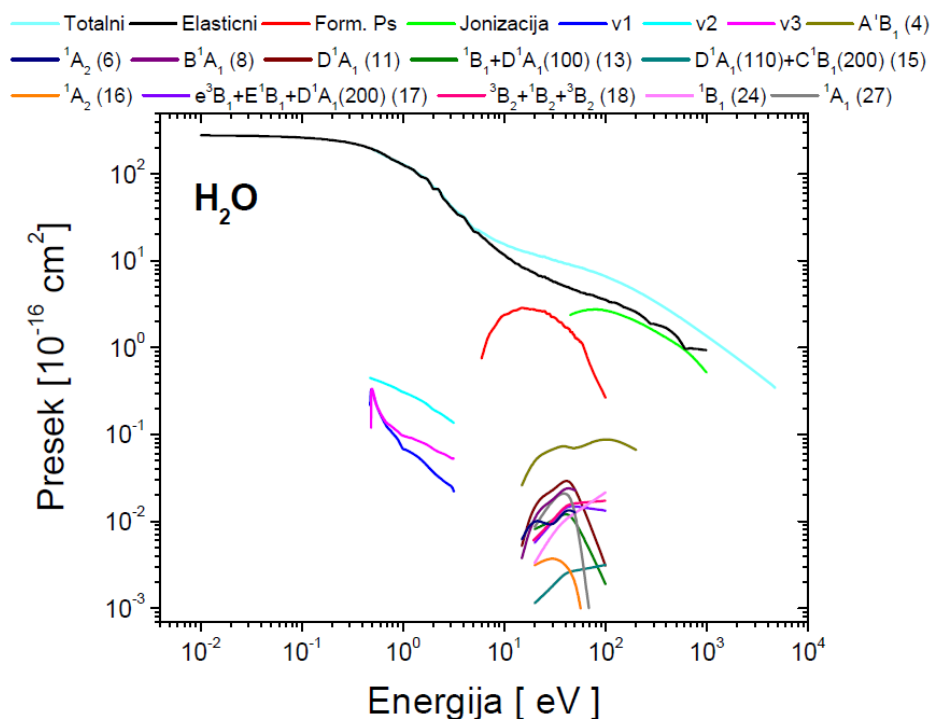
i najznačajniji doprinos ove disertacije razmatra interakciju pozitrona sa CF₄ na energijama ispod 5 eV, činjenica da ne postoje dostupni podaci za proces formiranja pozitronijuma ili elektronsku eksitaciju, čiji su pragovi na višim energijama, ne sprečava nas da ovaj set smatramo kompletnim u opsegu energija koji ova disertacija obrađuje. Ipak, set je popunjen podacima za nedostajuće procese na obazriv i razuman način.

Ovaj set uključuje preseke za elastične sudare, formiranje pozitronijuma, i neelastične procese, odnosno vibracione eksitacije i jonizaciju. Totalni presek je preuzet iz eksperimenta Makočekanve i saradnika (Makočekanwa et al. 2007) i on pokriva energije 0.2-1000 eV. Elastičan presek je izračunat tako što su od totalnog oduzeti svi neelastični preseci. Totalni presek je ekstrapoliran do nulte energije koristeći teoriju Nišimure i Đanturka (Nishimura and Gianturco, 2004). Presek za direktnu jonizaciju preuzet je iz eksperimenta Moksoma i saradnika (Moxom et al. 2000). Preseci za formiranje pozitronijuma nisu dostupni u literaturi, te je za popunu seta iskorišćen presek za formiranje pozitronijuma na argonu (Marler et al. 2005) pomeren za razliku energije praga za ovaj proces kod Ar i CF₄. Ovaj postupak je donekle opravdan, zbog činjenice da su preseci za jonizaciju kod Ar i CF₄ veoma slični, i u obliku i u veličini. Prag za formiranje pozitronijuma na argonu iznosi 8.955 eV (Marler et al. 2005) a na CF₄ je 9.45 eV (Makočekanwa et al. 2007) tako da je konačni oblik preseka za formiranje pozitronijuma dobijen tako što je na energijsku osu argonskog preseka dodata vrednost od 0.495 eV. U ovaj set preseka su uključene tri od četiri vibracione eksitacije (Marler and Surko, 2005): v1 ($E_{\text{praga}} = 0.113$ eV), v3 ($E_{\text{praga}} = 0.159$ eV), v4 ($E_{\text{praga}} = 0.078$ eV). Presek za vibracionu eksitaciju, v2 ($E_{\text{praga}} = 0.054$ eV) je izostavljen jer ne postoje ni teorijski ni eksperimentalni podaci. Opseg energija koji je relevantan za ovaj proces, nije moguće razlučiti sa postojećim eksperimentima. Presek za v3 je izmeren u grupu iz San Dijega, u opsegu energija 0.1 - 2 eV (Marler and Surko, 2005). Elektronski presek za vibracionu eksitaciju v3 molekula CF₄ je takođe izmeren u istom opsegu, pomoću iste aparature. Eksperiment je pokazao da su preseci za vibracionu eksitaciju CF₄, za elektrone i pozitrone, jako slični i oblikom i veličinom, a to je potvrđeno i proračunima baziranim na Bornovoj aproksimaciji. Sa tim u vidu, preseci za vibracioni mod v3 su ekstrapolirani pomoću rezultata za elektrone, dobijenih metodom rojeva (Kurihara et al. 2000). Kako ne postoje pozitronski podaci za vibracione modove v1 i v4, iskorišćeni su elektronski podaci (Kurihara et al. 2000).

3.3 Set sudarnih preseka za interakciju e⁺-H₂O

Set preseka za rasejanje pozitrona na molekulima vodene pare dat je na slici 3.3. Kompletan set preseka prvi put je sastavljen i objavljen u disertaciji dr. Ane Banković,

urađenoj na Univerzitetu u Beogradu (Banković, 2012) i kao i prethodni setovi dobijen je na osnovu izmerenog totalnog preseka za rasejanje, od kojeg su oduzeti (izmereni ili proračunati) preseki za najznačajnije neelastične i nekonzervativne procese. Totalni presek preuzet je iz eksperimenta (Makochekanwa et al. 2009) gde je izmeren u intervalu energija od 0.5 do 60 eV, a zatim ekstrapoliran na više energije, koristeći teorijska predviđanja (Baluja and Jain, 1992) koja su normalizovana na eksperimentalne vrednosti. Takođe, urađena je korekcija izmerenog preseka za gubitke na malim uglovima, korišćenjem teorijskih predviđanja za diferencijalne preseke koje je izračunao Tenison (Tennyson, 2009). Presek za proces formiranja pozitronijuma je izmeren od energije praga (5.821 eV)



Slika 3.3 Preseci za rasejanje pozitrona na molekulu H₂O (Banković, 2012)

do 60 eV, i ekstrapoliran je na više energije pomoću rezultata Murtaga i saradnika (Murtagh et al. 2006).

Za direktnu jonizaciju, preuzet je teorijski presek Tota i saradnika (Tóth et al. 2010) u nedostatku bilo kojih drugih publikovanih rezultata. Kako su u pomenutom radu su

predložena tri preseka proračunata različitim pristupom, no kako je u prošlosti "*electron screening*" (ES) pristup davao najbolja slaganja sa eksperimentom (Tóth et al. 2006; 2009; Campeanu, 2009), konačno je usvojen presek dobijen ES metodom. Razlog više za odabir ES modela jeste sličnost ovog preseka za jonizaciju vode sa presekom za jonizaciju argona (Marler et al. 2005) po obliku, i položaju maksimuma, što se poklapa sa očekivanjima, jer su i preseci za proces formiranja pozitronijuma na H₂O i Ar takođe jako slični.

Preseci za vibracione eksitacije su preuzeti iz teorijskog proračuna Nišimure i Đanturka (Nishimura and Gianturco, 2005). U nedostatku preseka u literaturi, i u nedostatku bolje alternative, za elektronske eksitacije molekula vode iskorišćeni su elektronski preseci, i to samo eksitacije u singletna stanja (Thorn et al. 2009) i pri tome su iz preseka uklonjene strukture koje odgovaraju rezonancama, te su te rezonance praktično "ispeglane".

Za diferencijalne preseke, korišćeni su teorijski izračunati preseci (Tennyson, 2009).

4. Modelovanje Surko trapa

Od razvoja prvih pozitronskih snopova (Canter et al. 1972) ostvarena su značajna tehnološka unapređenja (Shultz and Lynn, 1988; Coleman, 2000). Trenutno najbolji izvori pozitrona omogućavaju struje niskoenergijskih pozitrona reda veličine 10^7 e⁺/s (tj. ~ 1 pA) pomoću moderatora od čvrstog neona (Mills and Gullikson, 1986). Iako se sa takvim snopovima može uraditi široka lepeza eksperimenata, količina raspoloživih pozitrona je i dalje ograničavajući faktor u mnogim oblastima. Na primer, napravljeno je dosta pomaka u eksperimentima rasejanja pozitrona sa atoma i molekula (Charlton and Humberston, 2000) ali elektronski eksperimenti takvog tipa su daleko ispred (Crompton, 1994), delimično zahvaljujući i visoko kvalitetnim snopovima sa strujama reda veličine μ A ili više koji se mogu jednostavno proizvesti, kao i zbog mogućnosti realizacije eksperimenata sa rojevima elektrona radi normalizacije setova preseka.

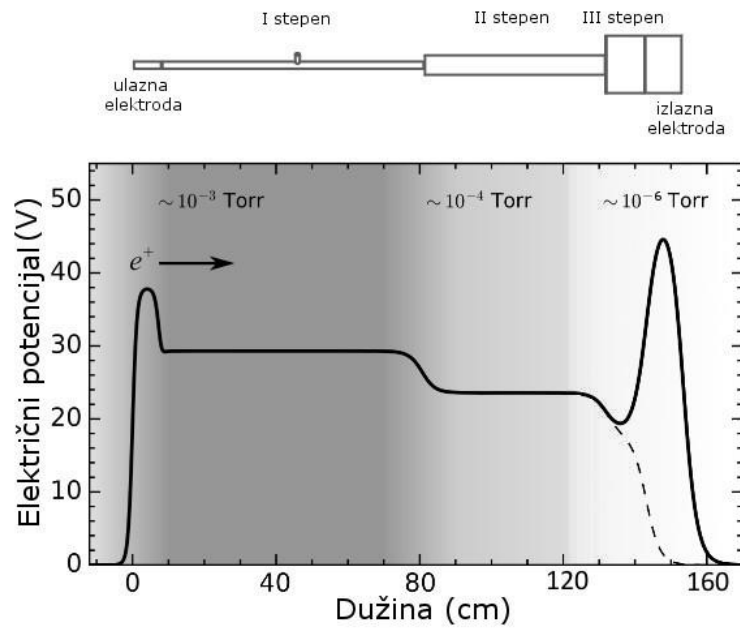
Razvoj pozitronskih trapova sa pozadinskim gasom od strane Surka i saradnika (Surko et al. 1989; Danielson et al. 2015) je značajno unapredio polje niskoenergijske pozitronske fizike. Različite varijante uređaja koje su realizovane poslednjih godina (Murphy and Surko, 1992; Surko and Greaves, 2004; Clarke et al. 2006, Sullivan et al. 2008; Cassidy et al. 2006) omogućile su nove eksperimente sa, na primer, pozitronima visoke energijske rezolucije (<50 meV), ili stvaranje intenzivnih impulsa pozitrona sa strujama i do 10 mA. Na taj način su omogućeni i eksperimenti preciznog merenja preseka za interakciju pozitrona o kojima je pisano u poglavlju 3, kao i proizvodnja molekula pozitronijuma (Cassidy et al. 2012), formiranje spin-polarizovanih atoma pozitronijuma (Cassidy et al. 2010a), stvaranje atoma antivodonika (Andersen et al. 2010; Amoreti et al. 2002; Gabrielse et al. 2002) ili lasersku spektroskopiju pozitronijuma (Cassidy et al. 2010b) što u konačnom može dovesti do stvaranja Ps Boze-Ajnštajn kondenzata (Platzman and Mills, 1994). Sa ovim razvojem trapova i kontrole snopova, mogu se povezati i primene pozitrona za neinvazivnu analizu unutrašnje strukture materijala, eksperimente sa ne-neutralnim (*eng. non-neutral*) plazmama i niz zanimljivih primena iz domena nauke i fizike materijala.

Podaci o rasejanju pozitrona i teorijski proračuni preseka za interakciju su omogućili simulacije rojeva pozitrona i proračun transportnih koeficijenata u različitim gasovima (Banković et al. 2012a; Banković et al. 2009; Šuvakov et al. 2008; Banković et al. 2008, Banković et al. 2012b; Petrović et al. 2014) na osnovu kojih je i formirana simulacija rada pozitronskog trapa (opisana u ovom i narednom poglavlju) koja je omogućila uvid u mehanizme trapovanja, kao i potencijalne načine na koje bi se mogla poboljšati efikasnost, vreme termalizacije i kompresija snopa. Naš rad u domenu modelovanja trapova čvrsto je vezan za izučavanje rojeva pozitrona i sakupljanje podataka o relevantnim presecima.

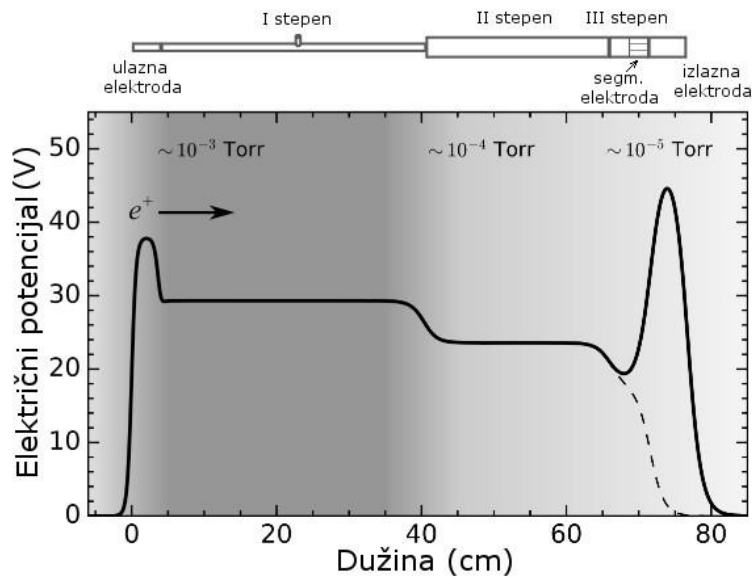
4.1 Opis rada Surko trapa

Pozitronski Surko trap je u suštini Peningov (ili Pening-Malmberg) trap: aksijalno, naelektrisane čestice su konfinirane pomoću minimuma električnog potencijala duž ose, koja je koaksijalna sa vektorom magnetskog polja. Jako magnetsko polje se primenjuje radi konfiniranja naelektrisanih čestica u radijalnom pravcu. Gas se upušta između elektroda, koje su cilindrične geometrije, sa različitim prečnicima i dužinama. Uz diferencijalno pumpanje sa obe strane trapa, i geometriju elektroda, duž ose trapa, se postiže gradijent pritiska koji može da varira nekoliko redova veličina. U originalnom dizajnu, gradijent pritiska je bio takav da su se mogla razlikovati tri regiona ili stepena. Prvi stepen, koji služi za trapovanje, je na najvišem pritisku od oko 10^{-3} Torr, dok je pritisak u trećem, akumulacionom stepenu tipično 10^{-5} - 10^{-6} Torr. Duž elektroda je primenjen električni potencijal tako da pozitroni imaju pred sobom sve dublju potencijalnu jamu kako se hlade i postepeno pomeraju ka akumulacionom stepenu u zadnjem delu trapa. Na slici 4.1 je dat šematski prikaz klasičnog Surko trapa koji se sastoji od tri stepena (Murphy and Surko, 1992) i može je da akumulira veliki broj pozitrona ($> 10^8 e^+$).

U poslednje vreme često se koristi i kompaktnija varijanta u vidu dvostepenog trapa (Clarke et al. 2006; Greaves and Moxom, 2003), prikazana na slici 4.2, zbog manjih dimenzija i manje cene. Iako je maksimalni broj pozitrona po ciklusu kod dvostepenih trapova ograničen na $\sim 10^6 e^+$ to je sasvim dovoljno za veliki broj različitih eksperimenata.



Slika 4.1 Šematski prikaz klasičnog trostepenog Surko trapa sa prikazanim pritiskom i sastavom gasa u svakom stepenu. Isprekidana linija označava potencijal izlazne elektrode pri ekstrakciji pozitrona iz trapa.



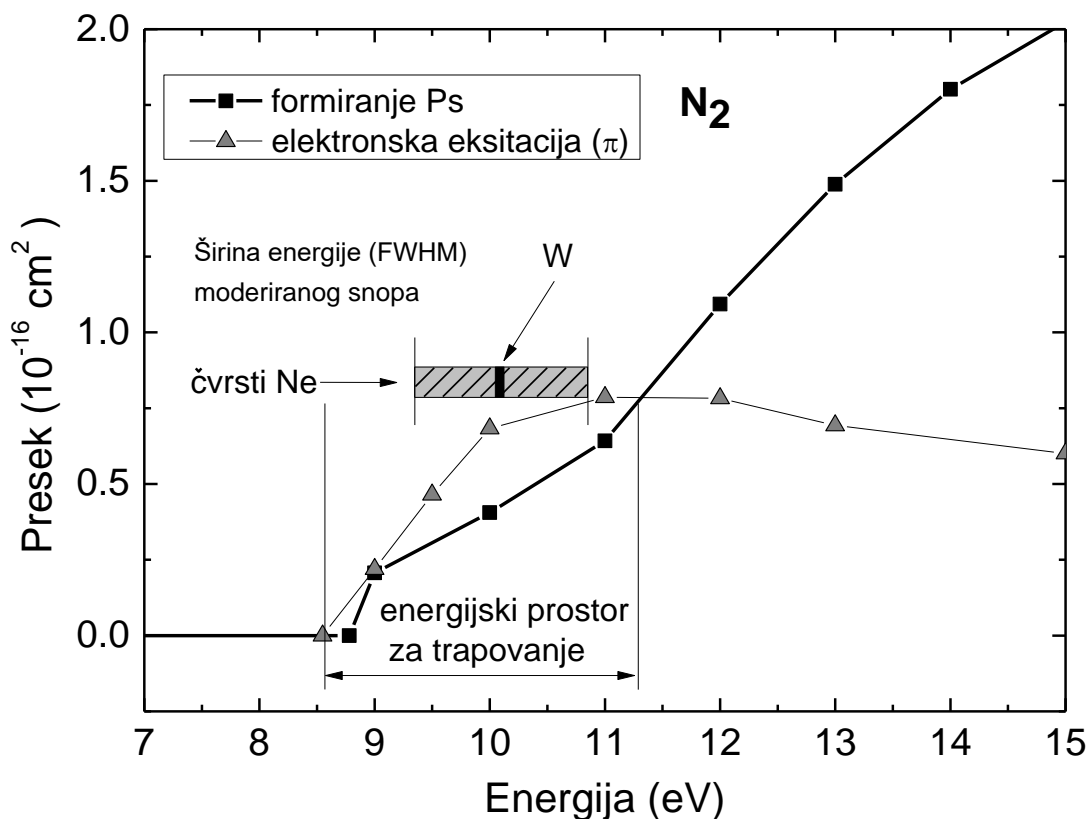
Slika 4.2 Šematski prikaz dvostepenog (u smislu prečnika elektroda) Surko trapa sa prikazanim pritiskom i sastavom gasa u svakom stepenu. Označena je i segmentirana elektroda u akumulacionom stepenu za primenu rotirajućeg električnog polja pri kompresiji snopa pozitrona. Isprekidana linija označava potencijal izlazne elektrode pri ekstrakciji pozitrona iz trapa.

Primetimo da se ovde "dva stepena" odnose na dimenzije elektroda i samim tim i pritiske pozadinskog gasa u trapu, dok električni potencijal i dalje formira tri različite dubine jame, što se vidi sa slika 4.1 i 4.2. Tu donekle postoji dvosmislenost u literaturi gde nekada autori stepene trapa vezuju za prečnik elektroda a nekada za oblik potencijala. U tom smisu u ovoj disertaciji termin "stepen trapa" ćemo vezivati za oblik potencijala.

U ovom trenutku najveći broj trapova (mada ne i svi; Oshima et al. 2004; Estrada et al. 2000) za trapovanje koriste pobuđivanje $a^1\Pi$ elektronske eksitacije molekula N_2 pozitronom. Ovaj proces ima prag na 8.5 eV, što je najmanja energija koju jedan pozitron može da izgubi prilikom pobuđivanja ovog stanja. Nakon jedne pobude $a^1\Pi$ stanja unutar trapa, pozitron više nema dovoljno kinetičke energije da izađe preko ulazne elektrode i aksijalno je trapovan unutar električnog potencijala. Značajna poteškoća pri ovakvom načinu trapovanja je to što je prag za $a^1\Pi$ eksitaciju jako blizu praga za formiranja pozitronijuma (slika 4.3) te postoji gotovo podjednaka šansa kod azota da se dese ta dva procesa dok kod ostalih gasova formacija pozitronijuma (Ps) daleko prevazilazi verovatnoću za elektronsku eksitaciju. Naravno, formiranje pozitronijuma gotovo uvek eventualno dovodi do gubitka pozitrona kroz proces anihilacije. Pad potencijala, odnosno, energija koju pozitron dobija pri prelasku u naredni stepen je dovoljna da omogući novu $a^1\Pi$ eksitaciju kako bi se ubrzao transport ka akumulacionom stepenu. U trećem, akumulacionom stepenu najčešće se dodaje gas sa velikim presekom za vibracione eksitacije (poput SF_6 ili CF_4) kako bi se ubrzala termalizacija pozitrona. Konačno, poslednji deo termalizacije, do sobne temperature se odvija preko rotacionih eksitacija molekula N_2 (Marjanović et al. 2012; Natisin et al. 2014; Banković et al. 2014; Natisin et al. 2016).

Molekularni azot se koristi kao primarni gas kod trapovanja jer je to jedini poznati molekul koji ima prag za elektronsku eksitaciju (~ 8.5 eV) ispod praga za proces formiranja pozitronijuma. Kako je prikazano na slici 4.3 proces formiranja pozitronijuma ima prag ~ 8.8 eV a sam presek ostaje niži od preseka za $a^1\Pi$ elektronsku eksitaciju sve do ~ 11.5 eV. To ostavlja prostor energija za trapovanje u opsegu energija 8.5 - 11.5 eV u kojem se gubitak energije kroz proces elektronske eksitacije (trapovanje) uspešno nadmeće sa procesom formiranja pozitronijuma. Zbog položaja, oblika i veličine pomenutih preseka,

kao i širine energijske raspodele snopa koji dolazi sa moderatora od čvrstog neona, postoji ~50% verovatnoća da će pozitron biti trapovan, a ne izgubljen kroz proces formiranja pozitronijuma. Ovo ograničenje dovodi do maksimalne efikasnosti trapovanja od $\leq 25\%$ dok je uobičajena efikasnost (u zavisnosti od implementacije) 10-15% (Murphy and Surko, 1992; Clarke et al. 2006; Cassidy et al. 2006; Sullivan et al. 2008; Cooper et al. 2015).



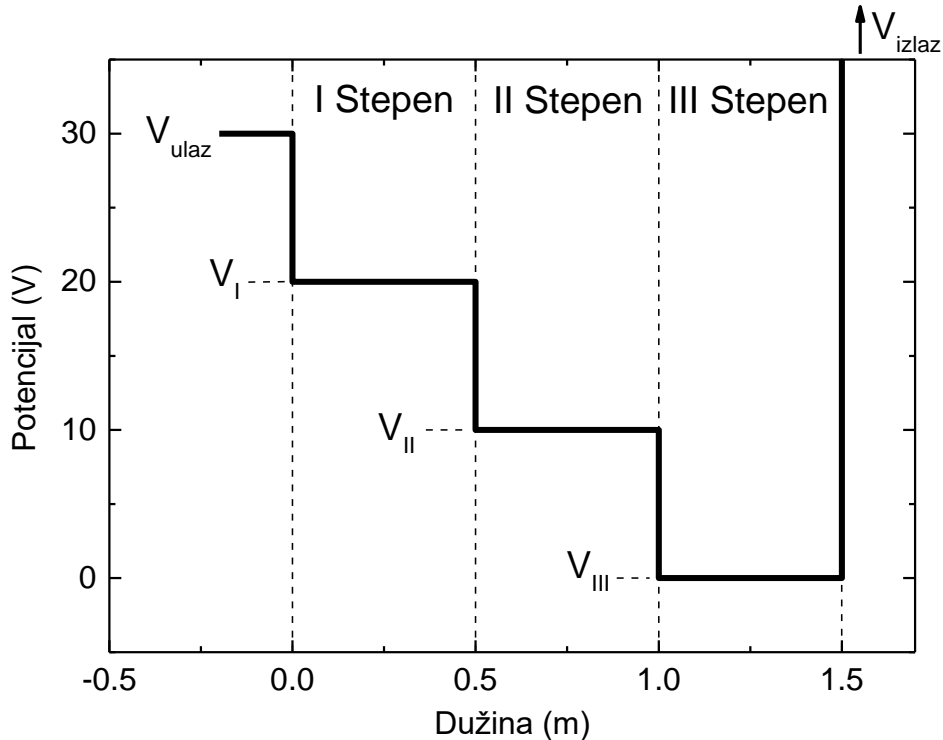
Slika 4.3 Izmerene vrednosti preseka za elektronsku eksitaciju i proces formiranja pozitronijuma za interakciju pozitrona sa molekulom N_2 (Marler and Surko, 2005). Prikazane su i približne širine energijske raspodele za snopove pozitrona iz volframskih (pun crni pravougaonik) i moderatora od čvrstog neona (sivi šrafirani pravougaonik). Ć

U poslednje dve godine predložen je i CO kao dobar gas za trapovanje, jer je usled izraženih nerezonantnih rotacionih procesa, kao i nezanemarljivih vibracionih eksitacija, termalizacija u CO brza u širem opsegu energija u odnosu na N_2 ili CF_4 pojedinačno (Natisin et al. 2014).

Niskoenergijski pozitroni koji se emituju sa neonskog moderatora, ili drugih moderatora od čvrstog plemenitog gasa (Mills and Gullikson, 1986) su epitermalni, te imaju relativno široku energijsku raspodelu (~ 1.5 eV). Moderatori sa negativnim izlaznim radom za pozitrone, poput volframa (Shult and Lynn, 1988) imaju značajno manje širine energijske raspodele (~ 75 meV) (Fischer et al. 1986). Uža energijska raspodela omogućava da se mnogo lakše i preciznije optimizuje odnos elektronskih eksitacija i formiranja pozitronijuma i tako ostvari značajno veća efikasnost (i do 30% (Murphy and Surko, 1992)), ali pošto moderatori od čvrstog neona imaju red veličine veće efikasnosti od volframskih, i dalje je efikasnije koristiti neon.

4.2 Model Surko trapa

Formirali smo model trapa tako što je cela naprava podeljena na tri cilindrična segmenta, koji odgovaraju stepenima trapa. Svaki od segmenata ima definisane svoje dimenzije, dužinu cilindra i poluprečnik, kao i pritisak i sastav pozadinskog gasa, jačinu magnetskog polja i napon na elektrodi tog segmenta, odnosno nivo električnog potencijala. Takođe, za prvi i poslednji segment, definisani su naponi, odnosno visina potencijalne barijere, kojom se modeluje napon na ulaznoj elektrodi, koji sprečava pozitrone da izađu iz trapa, nazad ka moderatoru, i napon na izlaznoj elektrodi (slika 4.4). Tipično, potencijal ulazne elektrode postavljen je ispod energije dolaznog snopa, a izlazne elektrode značajno iznad. Unutar jednog segmenta postoji samo aksijalno magnetsko polje. Prilikom prelaska pozitrona iz segmenta u segment, aksijalna brzina pozitrona se uveća ili umanja za iznos koji odgovara aksijalnoj energiji koju pozitron dobije ili izgubi usled razlike potencijala u segmentima. Ova trenutna promena energije je aproksimacija, koja je opravdana činjenicom da su prelazni delovi u kojima postoji aksijalno električno polje mnogo kraći od samih segmenata, i da je verovatnoća da se u tim oblastima dogodi sudar zanemariva, jer je pritisak u trapu i dizajniran tako da, u segmentu sa najvećim pritiskom, pozitron doživi tek nekoliko sudara. Ukoliko pozitron nema dovoljno aksijalne energije da prevaziđe potencijalnu barijeru između segmenata on se reflektuje elastično.



Slika 4.4 Opšti model trostepenog Surko trapa sa profilom električnog potencijala

U okviru jednog segmenta, pozitron između sudara prati ciklotronsku trajektoriju koja je određena primenjenim magnetskim poljem. Pomoću Monte Karlo procedure opisane u drugom poglavlju modelovana je interakcija pozitrona sa pozadinskim gasom odnosno određuje se trenutak i tip sudara. Pozitroni koji dožive proces formiranja pozitronijuma ili direktnu anihilaciju se uklanjaju iz simulacije, kao i pozitroni koji usled radijalnog transporta, koji je posledica sudara sa česticama pozadinskog gasa, dođu na zidove segmenta odnosno elektrode. Takođe, pozitroni koji ne dožive dovoljno sudara, i nakon odbitka od potencijala izlazne elektrode i dalje imaju energiju da "preskoče" potencijal ulazne elektrode se uklanjaju iz simulacije i na graficima su označeni kao "netrapovani". U istu grupu spadaju i pozitroni koji se reflektuju od molekula gasa i pređu ulaznu elektrodu, bez da su uspeli da stignu do izlazne elektrode (takozvani proces povratne difuzije (*eng. back-difusion*) u opisu inkorporacije sekundarnih elektrona u gasnim pražnjenjima).

Energija čestica u ulaznom snopu je modelovana na sledeći način: pretpostavljena je trougaona energijska raspodela širine 1.5 eV FWHM (eng. *full width at half maximum*) koja je očekivana iz neonskog moderatora. Vektor brzine je uniformno raspoređen u prostornom uglu 2π sr, pri čemu je $v_z > 0$. Na ovu brzinu se dodaje konstantna aksijalna komponenta koja odgovara energiji koju pozitron dobije usled prednapona na izvoru. Tipično pozitroni iz izvora se ubrzavaju kako bi se njihova energijska raspodela što bolje preklopila sa opsegom energija za trapovanje (vidi sliku 4.3). Inicijalna prostorna raspodela pozitrona se smatra uniformnom sa 3mm u prečniku.

U modelima standardnog Surko trapa, podrazumevan je čisti molekularni azot u prvom i drugom segmentu, dok je u poslednjem segmentu, odnosno akumulacionom stepenu, podrazumevana smeša N_2 i CF_4 . Podrazumeva se da je gas na sobnoj temperaturi (300K), mada je lako izvršiti precizne proračune za bilo koju temperaturu.

U jednoj simulaciji prati se od 10^4 - 10^6 pozitrona, i u zavisnosti od uslova, simulacija može trajati nekoliko sati ili par dana. Pored kolektivnih osobina čitavog roja pozitrona kao što je srednja energija, ili širina roja, mogu se pratiti i osobine roja u pojedinim segmentima ili statistika različitih tipova sudara ili događaja (gubici na zidovima, odlazak "netrapovanih" pozitrona i slično).

4.3 Rezultati simulacija Surko trapa

Kako bismo ispitali osobine roja pozitrona u toku termalizacije, kao i doprinos različitih načina gubitka čestica, prvo smo ispitali generički trap sa parametrima koji su dati u tabeli 4.1. Glavna karakteristika ovog trapa jeste da svaki od segmenata ima dubinu potencijalne jame 10 V. Parametri geometrije i potencijala iz tabele 4.1 odgovaraju slici 4.4. Treba napomenuti, da, kako je pritisak u okviru jednog segmenta konstantan, broj sudara u segmentu odgovara proizvodu pritiska i dužine $pd = const$. Zato je za sve tri dužine segmenta odabrana ista dužina 0.5 m (ukupna dužina trapa od 1-1.5 m odgovara uslovima realnih eksperimenata) a po potrebi rezultati se mogu skalirati na proizvoljno zadatu dužinu segmenta promenom vrednosti pritiska. Odabrana vrednost pada električnog potencijala od 10 V svakako nije optimalna u pogledu ukupne efikasnosti trapa. Ona je odabrana kao

generički pristup modelu trostepenog trapa, u kojem u svakom stepenu pozitroni imaju dovoljno energije da pobude elektronsko stanje N₂ molekula, a takav pristup će nam dozvoliti da ispitamo koje procese gubitka možemo minimizirati kako bismo optimizovali trap. Takođe, dozvoljava nam i da izvedemo uopštene zaključke o ponašanju pozitrona u trapu koji bi u optimalnom slučaju mogli biti maskirani.

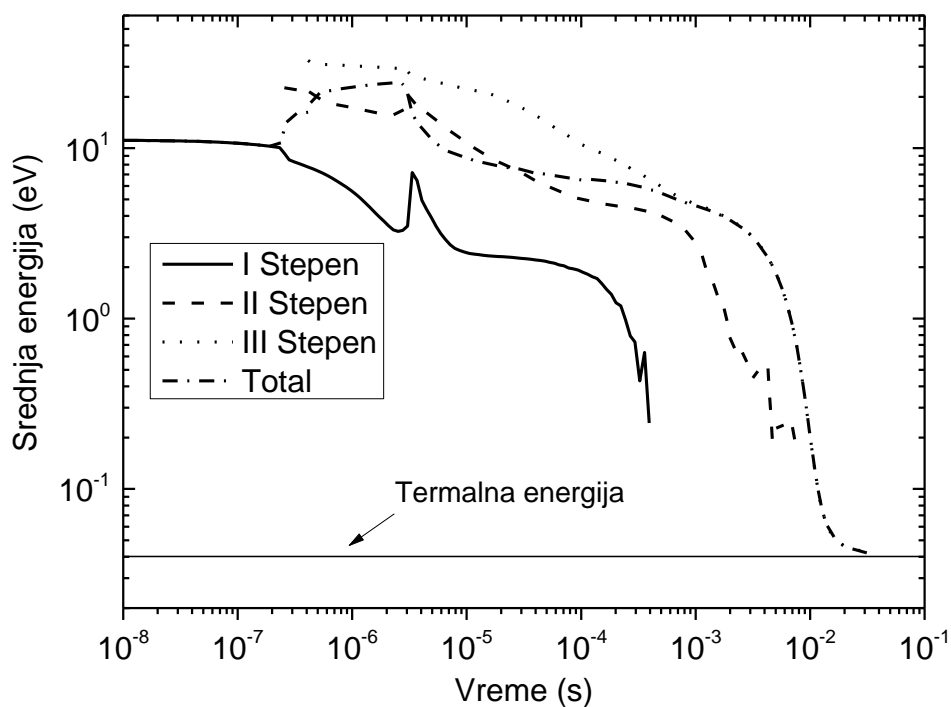
Širina početne energijske raspodele je odabrana da odgovara pozitronima koji dolaze sa moderatora od čvrstog neona uz dodatak od 0.1 eV u aksijalnom pravcu koji potiče od prednapona izvora. Optimizacija koja je rađena u ovom poglavlju (odjeljak 4.3.2, 4.3.3 i 4.3.4) odnosi se na ove uslove moderatora kojima odgovaraju dobijene optimizovane vrednosti pojedinih parametara. U eksperimentima, u zavisnosti od osobina izvora i konstrukcije trapa, dobiće se različite optimalne vrednosti pritiska ili profila električnog potencijala, ali će optimizacija biti sprovedene na sličan način (Murphy and Surko, 1992).

Tabela 4.1 Parametri simulacije generičkog pozitronskog Surko trapa

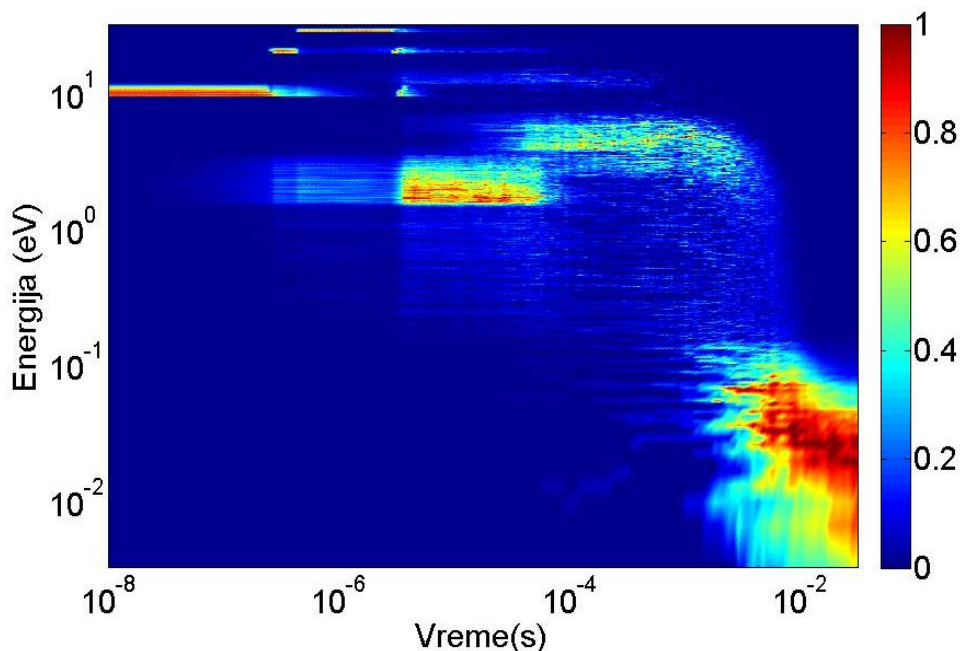
Parametri	Stepen I	Stepen II	Stepen III
Radijus (mm)	5	20	20
Dužina (m)	0.5	0.5	0.5
Pritisak (Torr)	10 ⁻³	10 ⁻⁴	10 ⁻⁵
Pozadinski gas	N ₂	N ₂	N ₂ ^{0.5} + CF ₄ ^{0.5}
Mag. polje (G)	530	530	530
Napon (V)	20	10	0
Početni uslovi - parametri			
Potencijal ulazne elektrode (V)		30	
Prednapon izvora (V)		0.1	
Širina (FWHM) energijske raspodele (eV)		1.5	

Rezultati simulacije generičkog trapa sa parametrima iz tabele 4.1 prikazani su na slikama 4.5-4.9. Na slici 4.5 prikazana je promena srednje kinetičke energije roja pozitrona u vremenu. Prikazane su istovremeno srednje energije u okviru pojedinačnog segmenta,

kao i srednja kinetička energija svih pozitrona u trapu. Pozitroni koji iz prvog segmenta prelaze u drugi u trenutku $\sim 2 \times 10^{-7}$ s dobijaju 10 eV energije usled razlike potencijala na elektrodama, kao i pri prelasku iz drugog segmenta u treći. Zato maksimalna energija u drugom, odnosno trećem stepenu, iznosi ~ 20 eV odnosno ~ 30 eV respektivno. Pik koji se javlja u energiji pozitrona u prvom segmentu nastaje kao posledica povratka pozitrona iz drugog segmenta, koji su se reflektovali o potencijal izlazne elektrode, ali i dalje nisu doživeli ni jednu elektronsku eksitaciju N_2 molekula. Postepeno, sve čestice prelaze u treći stepen i od trenutka ~ 1 ms praktično srednja energija čestica u trećem stepenu jeste srednja energija celog roja, iako i dalje postoje pozitroni u drugom stepenu, ali je njihov broj relativno mali. Do trenutka ~ 50 ms ceo roj se termalizovao u trećem stepenu kroz vibracione eksitacije CF_4 i rotacione eksitacije N_2 .



Slika 4.5 Simulirana srednja kinetička energija roja pozitrona u generičkom modelu Surko trapa, za parametre simulacije date u tabeli 4.1. Prikazana je srednja kinetička energija za svaki pojedinačan segment trapa, kao i srednja energija svih pozitrona u trapu.



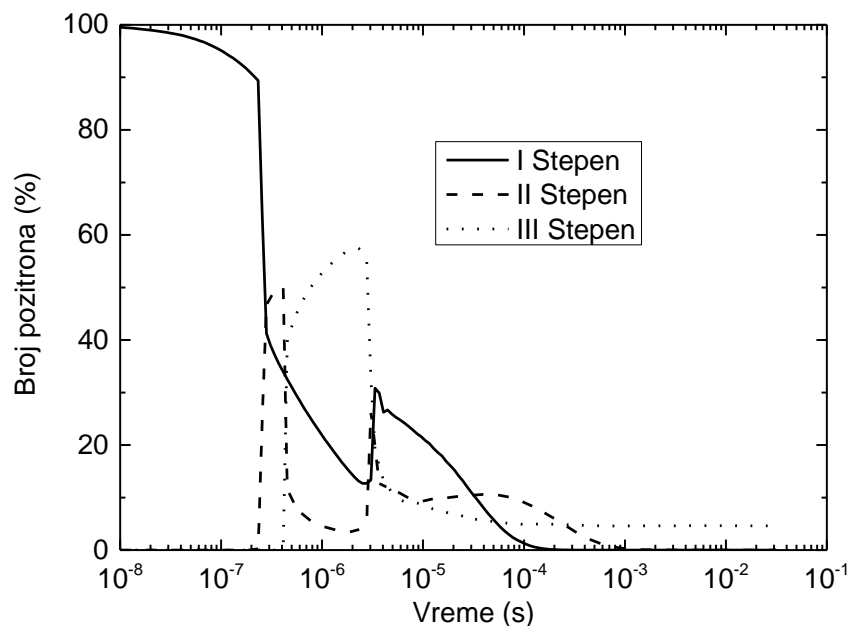
Slika 4.6 Razvoj energijske raspodele pozitrona u vremenu u simulaciji generičkog modela Surko trapa.

Na slici 4.6 prikazana je evolucija raspodele kinetičke energije pozitrona u trapu, u vremenu. Prilikom svakog samplovanja, za jedan trenutak t , energijska raspodela je normalizovana tako da maksimum raspodele bude 1 (razlog za ovakvu normalizaciju jeste jednaka vidljivost raspodele na širokom opsegu redova veličine maksimalnih vrednosti funkcije i energija). Na početku, pozitroni su u obliku snopa, energije 10 eV , sa definisanom širinom. Nakon što neki pozitroni dožive elektronsku eksitaciju i izgube $\sim 8.5 \text{ eV}$ energije, oni polako formiraju drugi snop na energiji od nekoliko eV (mada je upitno koliko je opravdano koristiti reč *snop* jer je energijska širina ovog *snopa* praktično jednaka njegovoj srednjoj energiji). Nakon što oba snopa pređu u drugi segment, oni se ubrzavaju i dobijaju 10 eV energije, dok ponovo, neke od čestica doživljavaju sudare, elektronske eksitacije molekula N_2 , i padaju na niže energije formirajući treći snop. Slično se ponavlja i u trećem segmentu dalje diferencirajući inicijalni snop na grupe čestica koje su proživele jednu, dve odnosno tri elektronske eksitacije molekula N_2 . Jasno je da se već u ovom trenutku koncept monoenergijskih snopova koji je korišćen pri objašnjavanju rada pozitronskih trapova sa gasom, raspada. Situaciju dodatno "zamućuju" elastični i drugi neelastični sudari koji za to vreme dodatno šire energijsku raspodelu snopova. Konačno,

kompletan roj termalizuje u trećem segmentu i relaksira u Maksvel-Bolcmanovu raspodelu kako je i očekivano.

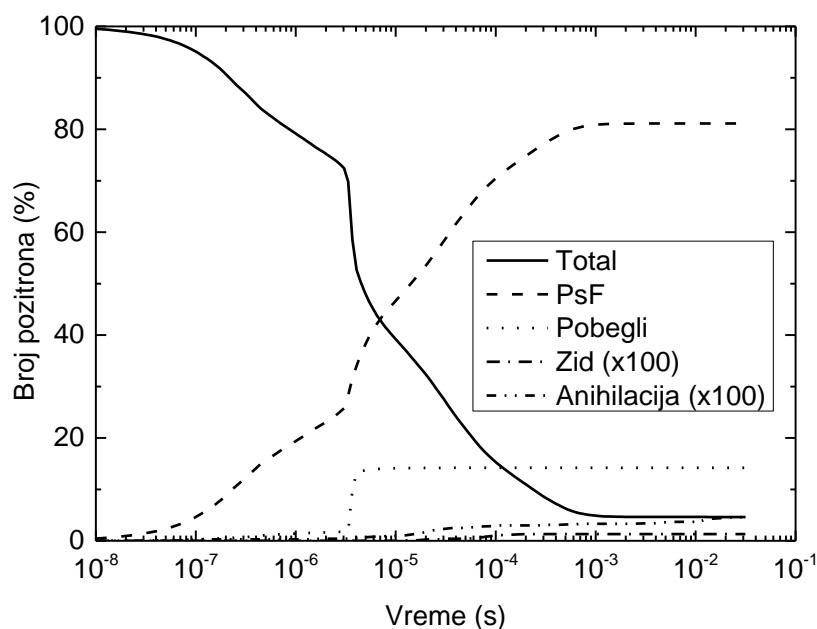
Ovo demonstrira da je odabrani Monte Karlo metod najadekvatnija tehnika za opis transporta pozitrona u trapu, zato što je u stanju da eksplicitno prati roj čestica sa kompleksnim energijskim raspodelama bez pretpostavki ili aproksimacija svojstvenih drugim tehnikama kao što je analiza pomoću monoenergijkih snopova, ili aproksimacijama sa jednom, dve, tri ili više temperatura uz primenu Maxwell Boltzmannove funkcije raspodele.

Slika 4.7 prikazuje broj pozitrona u pojedinačnim segmentima u toku termalizacije u trapu normiran na ukupan broj čestica na početku simulacije. Pozitroni dolaze do drugog stepena nakon $\sim 2 \times 10^{-7}$ s dok im za ceo put do izlazne elektrode i nazad treba $\sim 1 \times 10^{-6}$ s. Vreme koje je potrebno pozitronima da konačno napuste prvi, odnosno drugi segment je ~ 0.1 ms i ~ 1 ms što odgovara odnosu pritiska pozadinskog N_2 gasa u segmentima. Konačan broj pozitrona akumuliranih u trećem stepenu je nešto ispod 5% od svih primarno simuliranih pozitrona.



Slika 4.7 Broj pozitrona u pojedinačnim stepenima trapa u toku vremena u odnosu na broj inicijalnih pozitrona

Jasno je da u realnim trapovima pozitroni ne ulaze u napravu svi od jednom već je frekvencija sa kojom pozitroni pune trap $\sim 10^6 e^+/s$. To znači da osim u trećem stepenu, gde se pozitroni akumuliraju, u jednom trenutku u svakom segmentu nema više od nekoliko stotina pozitrona. Čak i u trećem segmentu u kojem je moguće sakupiti desetine miliona pozitrona, osim u retkim eksperimentima, gde je veliki broj pozitrona kompresovan da napravi jednokomponentnu plazmu, gustina čestica je ispod limita gde je pozitron-pozitron interakcija relevantna (Greaves and Moxom, 2008). Ovo je još jedno opravdanje za primenu metode rojeva i Monte Karlo pristup kakav mi koristimo.

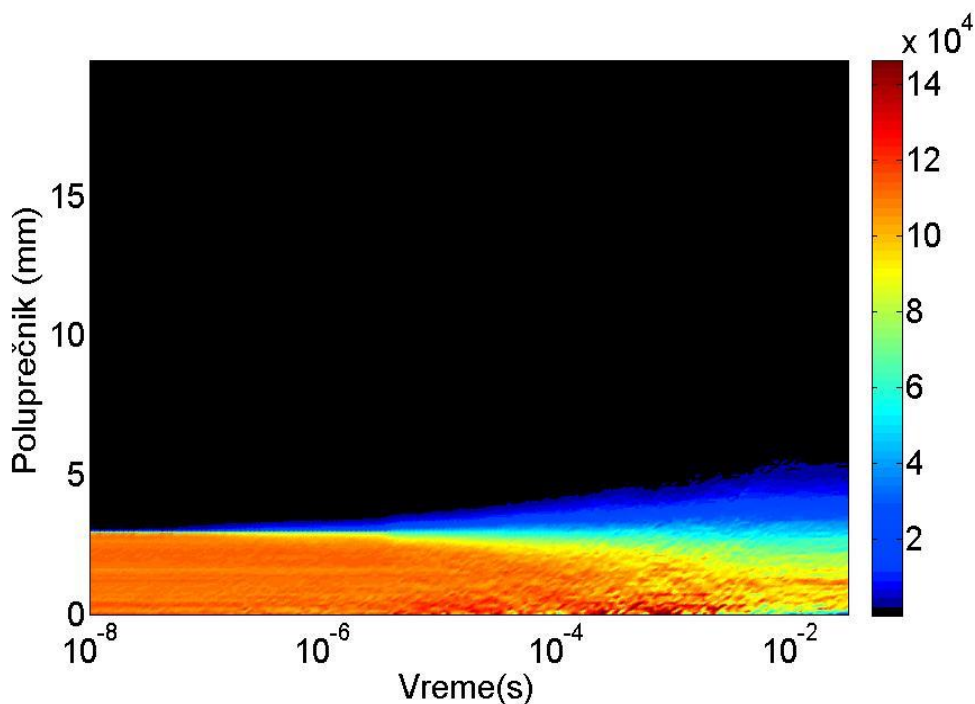


Slika 4.8 Ukupan broj pozitrona u simulaciji i pojedinačni procesi gubitka u vremenu, normirani na ukupan broj iniciranih pozitrona. (PsF) - udeo pozitrona izgubljenih kroz proces formiranja pozitronijuma; (Pobjegli) - udeo pozitrona koji su izašli preko ulazne elektrode; (Zid) - udeo pozitrona koji je izgubljen na zidovima uređaja; (Anihilacija) - udeo pozitrona izgubljen kroz proces anihilacije. Gubici na zidovima i anihilacija su pomnoženi sa 100 kako bi bili vidljivi na grafiku.

Različiti procesi koji dovode do gubitka pozitrona u simulaciji su prikazani na slici 4.8. Najznačajniji proces jeste formiranja pozitronijuma (Ps) koji je odgovoran za $\sim 80\%$ gubitaka. Pozitroni koji su nakon refleksije od izlazne elektrode došli do ulazne elektrode, sa dovoljnom energijom da preskoče njen potencijal, takođe su uklonjeni iz simulacije i označeni su kao "pobjegli". Pozitroni koji kroz sudare difunduju na zidove komore se

uklanjaju iz simulacije kao i pozitroni koji dožive proces anihilacije ali je njihov broj veoma mali, te je, da bi bili vidljivi na slici 4.8, udeo ovih procesa uvećan 100 puta.

Ukupna efikasnost simuliranog trapa je $\sim 5\%$. Daleko najveći doprinos gubicima daje proces formiranja pozitronijuma. Na ovaj proces može se uticati adekvatnim odabirom potencijala na elektrodama, kako bi se energijska raspodela podesila da što optimalnije odgovara "prozoru" energija za trapovanje prikazanom na slici 4.3. Povećanje pritiska u prvom stepenu trapa neće uticati na udeo procesa formiranja pozitronijuma u odnosu na proces elektronske eksitacije N_2 ali hoće povećati šansu da pozitron interaguje sa molekulom azota i smanjiti broj "pobeglih" pozitrona.



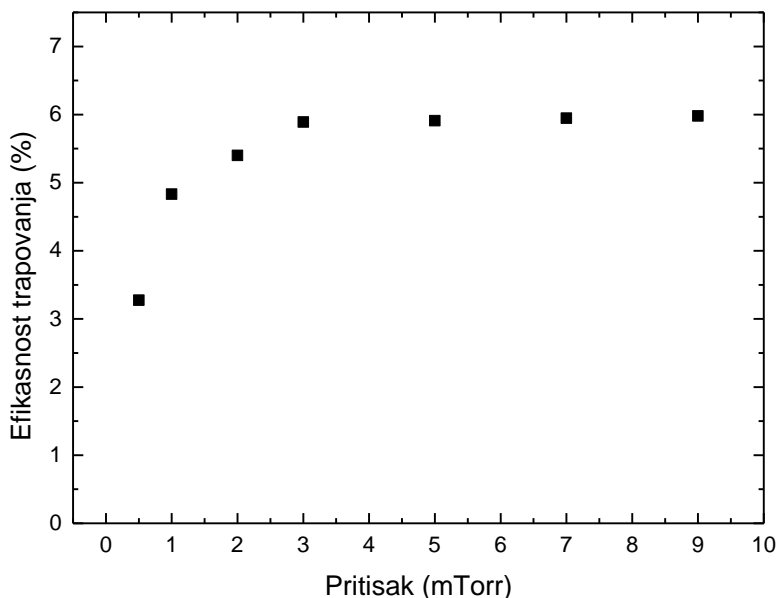
Slika 4.9 Evolucija prostorne raspodele roja pozitrona u simulaciji generičkog modela Surko trapa.

Slika 4.9 prikazuje razvoj prostorne raspodele roja pozitrona u vremenu. Poluprečnici elektroda koji se koriste u eksperimentu, a i u ovoj simulaciji, su određeni potrebnim pritiscima gasa u pojedinačnim segmentima odnosno diferencijalnim pumpanjem. Tako definisani poluprečnici elektroda su očigledno dobro određeni i skoro da i ne doprinose gubicima na simuliranoj vremenskoj skali. Difuzija pri dužim vremenima

akumulacije može dovesti do značajnijeg širenja roja pozitrona, ali danas se za suprotstavljanje ovom širenju uveliko koristi tehnika kompresije roja pozitrona rotirajućim električnim poljem, o čemu će biti više reči u poglavlju 6.

4.3.1 Optimizacija pritiska u prvom stepenu

Prvi parametar koji ćemo optimizovati pomoću simulacije jeste pritisak azota u prvom stepenu, što bi trebalo da doprinese smanjenju broja pozitrona koji mogu da pobegnu. Iako se u literaturi redovno navodi primenjeni pritisak u prvom segmentu kao 1 *mTorr* ili "reda veličine *mTorr*", treba napomenuti da vrednost pritiska ni u jednoj implementaciji trapa nije merena, već ekstrapolirana iz podataka o snazi pumpanja i protoka gasa. Eventualno se meri pritisak u trećem stepenu pa se iz te vrednosti ekstrapolira vrednost pritiska u prvom. Tako određen pritisak ima veliku mernu nesigurnost i navedenu vrednost pritiska treba uzeti pre kao procenu. U eksperimentu, pritisak se optimizuje povećavajući protok azota koji se upumpava u prvi segment trapa dok broj trapovanih pozitrona u sekundi ne dođe u zasićenje. Na sličan način je pritisak optimizovan i u simulaciji.



Slika 4.10 Simulirana efikasnost trapovanja u funkciji pritiska azota u prvom stepenu trapa za parametre simulacije date u tabeli 4.1.

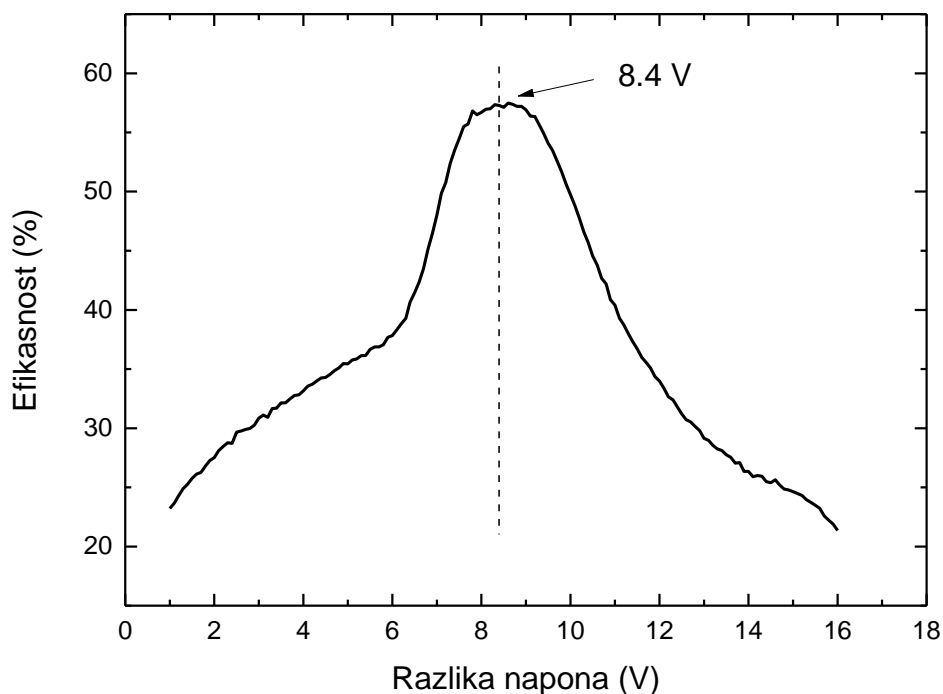
Urađen je niz simulacija sa parametrima iz tabele 4.1 izuzev vrednosti pritiska azota u prvom segmentu koja je menjana u opsegu od 0.5 - 9 *mTorr*. Rezultati simulacija su prikazani na slici 4.10. Do zasićenja dolazi za vrednosti pritiska azota preko 3 *mTorr* što predstavlja pritisak pri kojem će svi pozitroni koji uđu u trap doživeti ili elektronsku eksitaciju ili formiranje pozitronijuma u prvom segmentu, te daljim povećavanjem pritiska nije moguće povećati efikasnost trapovanja

4.3.2 Optimizacija električnog potencijala na elektrodama

Nakon što je određena optimalna vrednost pritiska azota u prvom segmentu potrebno je optimizovati i vrednosti napona na elektrodama kako bi se popravio odnos pozitrona koji u sudaru sa molekulom azota dožive elektronsku eksitaciju umesto formiranja pozitronijuma. U simulaciji je to urađeno na sličan način kao što se radi u eksperimentu (Murphy and Surko, 1992).

Prvo optimizujemo vrednost napona na prvoj elektrodi u odnosu na vrednost napona na ulaznoj elektrodi. Za pritisak azota u prvom segmentu je usvojena prethodno utvrđena optimalna vrednost 3 *mTorr*, a osobine dolaznog snopa (širina energijske raspodele i prednapon izvora) su zadržane. Prednost simulacije u odnosu na eksperiment jeste u tome što nam omogućava da izolujemo samo osobinu koja nas trenutno zanima. U ovom slučaju, to je urađeno tako što je vrednost potencijala druge elektrode fiksirana na vrednost izlazne elektrode, čime je praktično cela simulacija ograničena samo na prvi segment. Urađene su simulacije za niz vrednosti razlike napona ulazne i prve elektrode a efikasnost je definisana kao broj pozitrona koji je zadržan u prvom segmentu trapa nakon što su svi pozitroni, koji su bili u stanju, napustili trap ili nestali kroz proces formiranja pozitronijuma. Rezultati simulacija su dati na slici 4.11. Kao optimalna vrednost pada napona od ulazne do prve elektrode dobija se vrednost 8.4 V. Za manje vrednosti napona, pozitroni nemaju dovoljno energije da pobude elektronsku eksitaciju azota, dok za veće vrednosti napona pozitroni imaju previše energije i energijska raspodela se ne preklapa efikasno sa "prozorom" energija za efikasno trapovanje, već se značajno povećava udeo formiranja pozitronijuma. Ostvaren optimalan broj trapovanih pozitrona pri jednom stepenu je 57 %, što je direktna

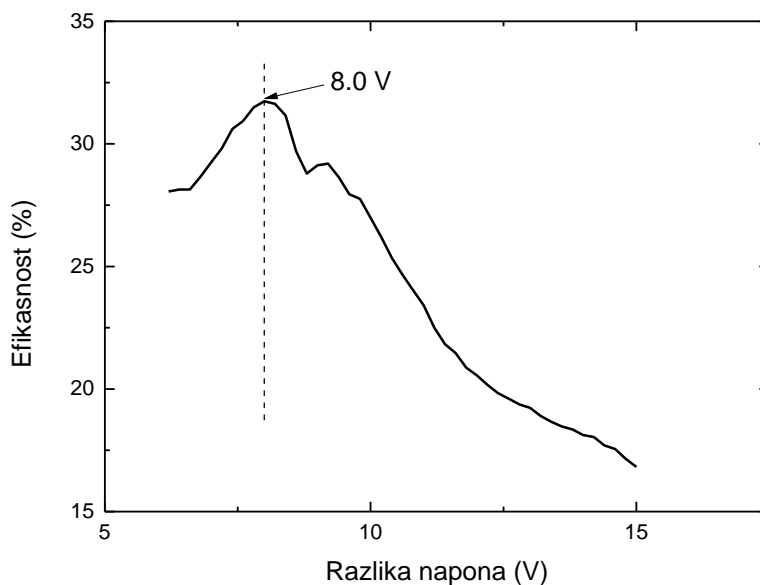
posledica oblika preseka za $a^1\Pi$ elektronsku eksitaciju i proces formiranja pozitronijuma sa jedne i širine energijske raspodele moderiranog snopa pozitrona sa druge strane.



Slika 4.11 Simulirana efikasnost trapovanja u prvom segmentu u funkciji razlike napona ulazne i prve elektrode.

Za optimizaciju napona na drugoj elektrodi primenjen je sličan princip kao i pri optimizaciji prve. Fiksirane su vrednosti napona na ulaznoj i prvoj elektrodi koje odgovaraju utvrđenoj optimalnoj razlici napona 8.4 V, kao i potencijal treće elektrode koji postavljen na visoku vrednost izlazne elektrode. U nizu simulacija menjana je vrednost potencijala druge elektrode, i izračunat broj pozitrona zadržanih u drugom segmentu. Rezultati ovih simulacija prikazani su na slici 4.12 kao efikasnost trapovanja u drugom segmentu u funkciji razlike napona prve i druge elektrode. Optimalna vrednost pada napona od prve do druge elektrode utvrđena na ovaj način iznosi 8 V. Ovako dobijena efikasnost trapovanja u drugom segmentu iznosi 33%. Vidimo da pri svakom optimizovanom padu

napona koje je dovoljan da obezbedi novu elektronsku eksitaciju možemo očekivati ~57 % efikasnosti što za trostepeni trap iznosi ~18%.



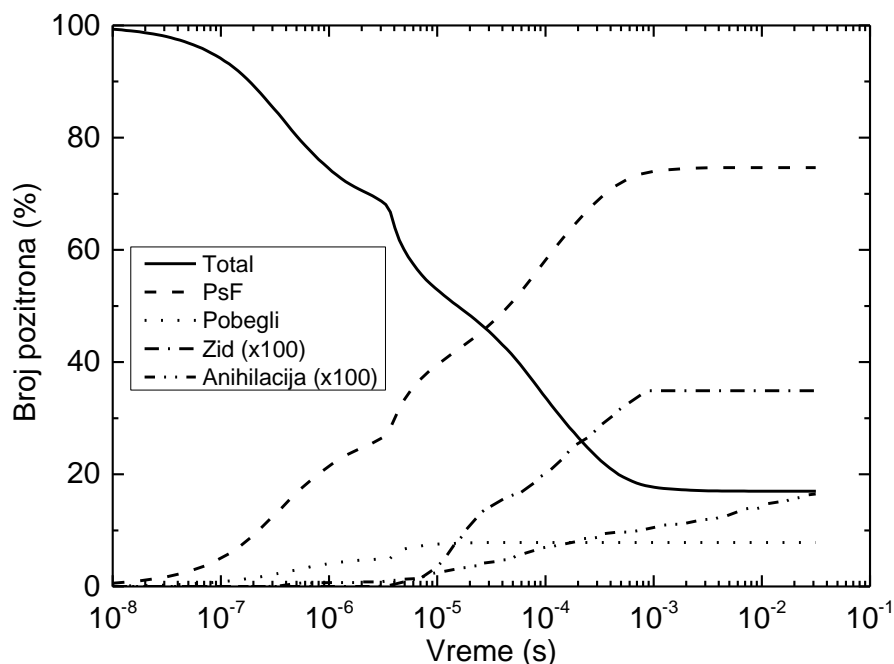
Slika 4.12 Simulirana efikasnost trapovanja u drugom segmentu u funkciji razlike napona prve i druge elektrode.

Tabela 4.2 Parametri simulacije optimizovanog trostepenog pozitronskog Surko trapa

Parametri	Stepen I	Stepen II	Stepen III
Radijus (mm)	5	20	20
Dužina (m)	0.5	0.5	0.5
Pritisak (Torr)	3×10^{-3}	10^{-4}	10^{-5}
Pozadinski gas	N ₂	N ₂	N ₂ ^{0.5} + CF ₄ ^{0.5}
Mag. polje (G)	530	530	530
Napon (V)	16	8	0
Početni uslovi - parametri			
Potencijal ulazne elektrode (V)	24.4		
Prednapon izvora (V)	0.1		
Širina (FWHM) energijske raspodele (eV)	1.5		

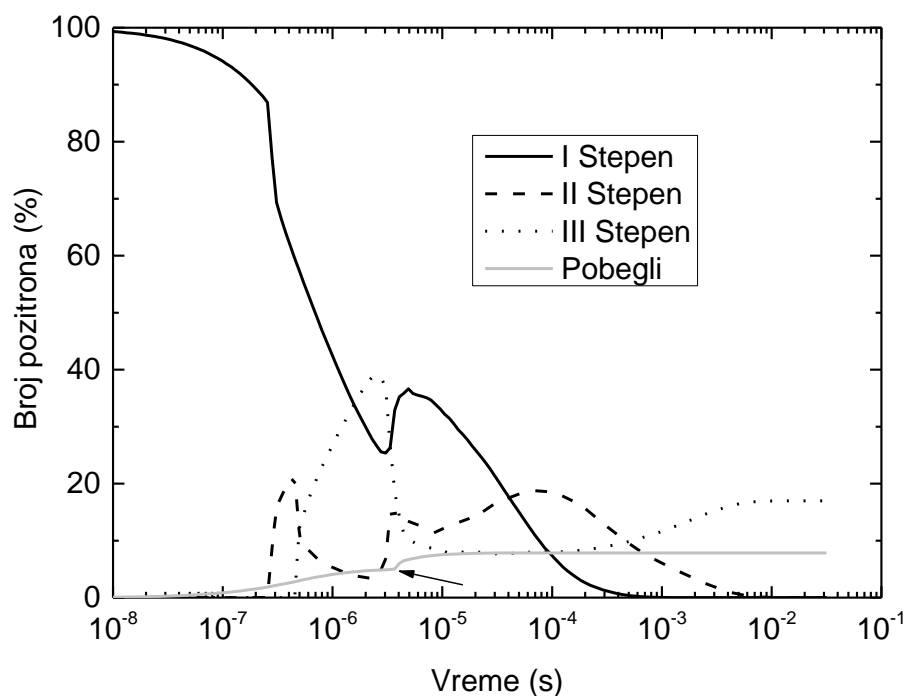
U tabeli 4.2 dati su parametri simulacije trostepenog trapa, koji odgovaraju optimizovanim vrednostima pritiska i potencijala na elektrodama a rezultati ove simulacije dati su na slikama 4.13 - 4.15.

Na slici 4.13 prikazana je efikasnost i procesi koji dovode do gubitka pozitrona. Sama efikasnost trapa je značajno povećana u odnosu na generički trap od kojeg je započeta optimizacija. Dobijena vrednost od ~17 % efikasnosti dobro odgovara objavljenoj maksimalno ostvarenoj efikasnosti od ~20 % (Surko and Greaves, 2004). I dalje proces formiranja pozitronijuma predstavlja najznačajniji gubitak pozitrona od čak 75 %. Nažalost, u trostepenim trapovima ovaj broj nije moguće smanjiti jer je on predstavlja posledicu osobina molekula azota, odnosno njegovih preseka za interakciju sa pozitronom.



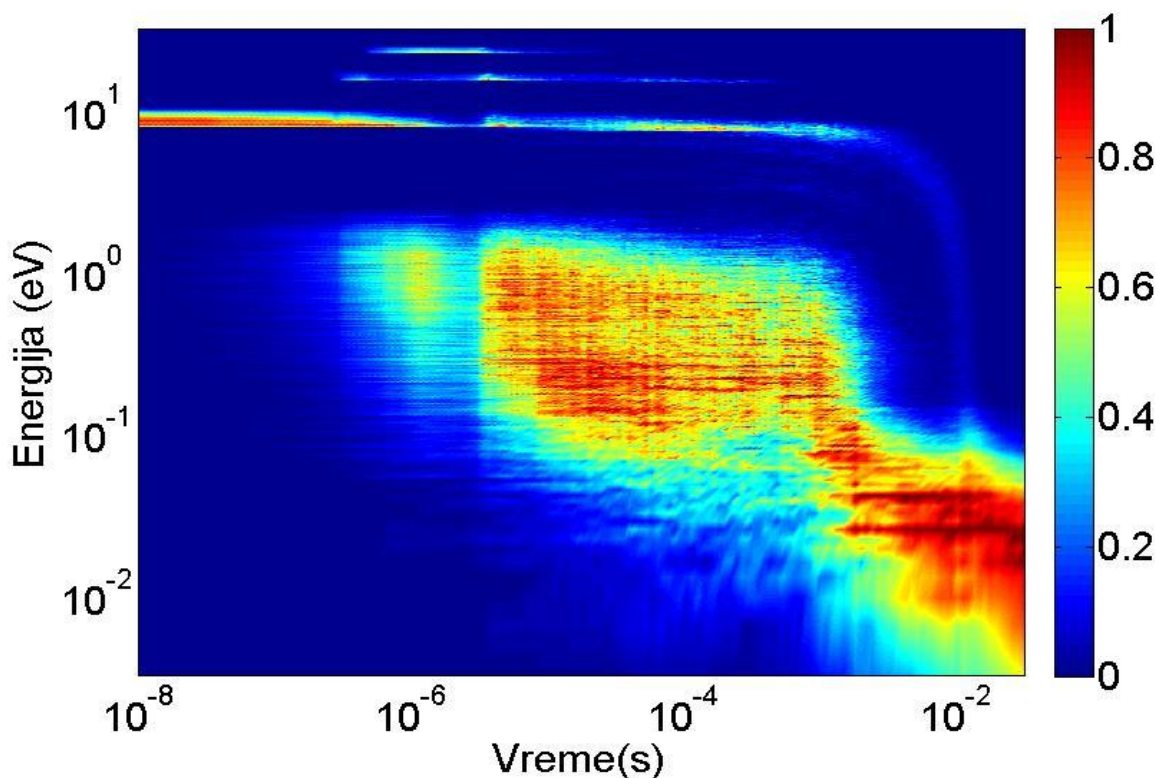
Slika 4.13 Ukupan broj pozitrona u simulaciji optimizovanog trapa pojedinačni procesi gubitka u vremenu, normirani na ukupan broj iniciranih pozitrona. (PsF) - udeo pozitrona izgubljenih kroz proces formiranja pozitronijuma; (Pbegli) - udeo pozitrona koji su izašli preko ulazne elektrode; (Zid) - udeo pozitrona koji je izgubljen na zidovima uređaja; (Anihilacija) - udeo pozitrona izgubljen kroz proces anihilacije. Gubici na zidovima i anihilacija su pomnoženi sa 100 kako bi bili vidljivi na grafiku.

Sa slike 4.13 vidimo da i pored optimizacije pritiska u prvom segmentu opisanoj u odeljku 4.3.1 pobjegli pozitroni i dalje predstavljaju značajan gubitak od ~8 %. Kako bismo objasnili zašto nije moguće, za date osobine incidentnog snopa pozitrona, dalje smanjiti ove gubitke treba pogledati sliku 4.14 na kojoj je prikazana evolucija broja čestica u pojedinačnim segmentima kao i broj pobjeglih pozitrona u vremenu. Vidimo da čak i prenego što prvi pozitroni stignu do drugog segmenta određeni broj čestica je već napustio trap. Ovi pozitroni su se zapravo rasejali od molekula azota unazad prema ulaznoj elektrodi bez značajnog gubitka energije, bez da su uopšte i stigli (većina) do drugog segmenta. Trenutak u kome pozitroni koji su se reflektovali o izlaznu elektrodu uspevaju da napuste trap je na grafiku označen strelicom. Dalje povećanje pritiska bi dovelo do smanjenja broja pozitrona koji izlaze iz trapa nakon refleksije od izlazne elektrode, ali bi povećalo broj pozitrona koji se raseju unazad u prvom stepenu. Ova dva procesa u ravnoteži dovode do zasićenja pri vrednosti pritiska od 3 *mTorr*.



Slika 4.14 Broj pozitrona u pojedinačnim stepenima trapa u toku vremena u odnosu na broj inicijalnih pozitrona kao i broj pobjeglih pozitrona u vremenu. Strelica označava trenutak u kojem pozitroni reflektovani o izlaznu elektrodu napuštaju trap.

Evolicija raspodele kinetičke energije pozitrona, samplovana na isti način kao i na slici 4.6, za slučaj optimizovanog trapa prikazana je na slici 4.15. Ponovo se može videti kako se inicijalni snop pozitrona, usled prelaska iz stepena u stepen i gubitka energije pri elektronskoj eksitaciji molekula azota, razlaže u nekoliko rojeva sa različitim energijama, pre nego što svi pozitroni konačno relaksiraju u Maksvel Bolcmanovu raspodelu na sobnoj temperaturi. U poređenju sa slikom 4.6 situacija na slici 4.15 je značajno "čistija" što je posledica dobre usklađenosti padova potencijala na elektrodama sa energijom praga $a^1\Pi$ elektronske eksitacije pa dolazi do manjeg širenja energijske raspodele pojedinačnih snopova, te je i njihova energija nešto bolje definisana. I pored toga, značajan deo pozitrona, ispod energije 1 eV, ima široku energijsku raspodelu što podrazumeva da je tretman problema tehnikom rojeva naelektrisanih čestica neophodan.



Slika 4.15 Razvoj energijske raspodele pozitrona u vremenu u simulaciji optimizovanog trapa.

4.3.3 Simulacija dvostepenog pozitronskog Surko trapa

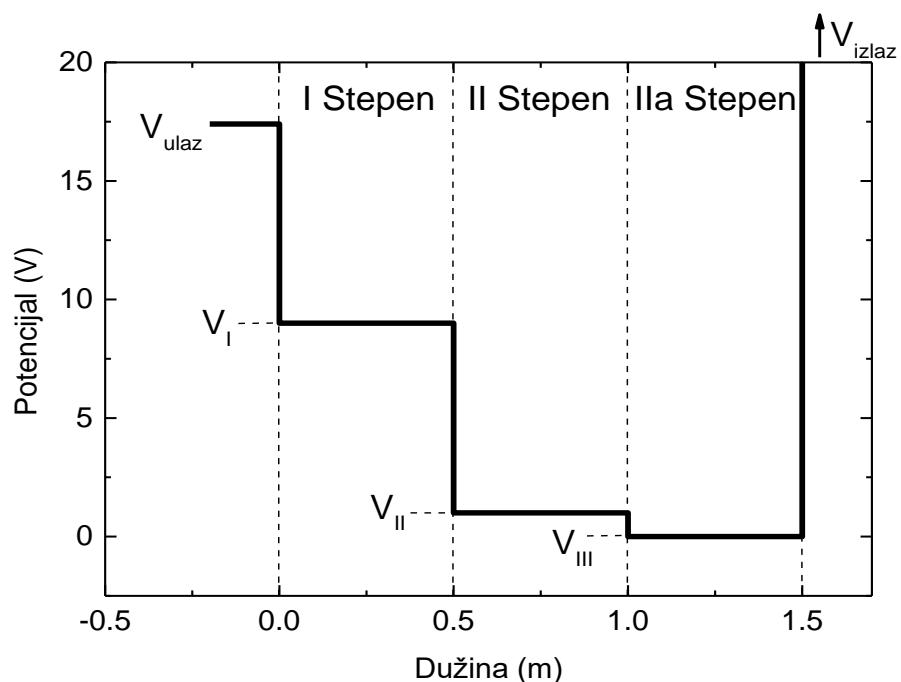
Iz rezultata simulacija koji su predstavljeni u prethodnim odeljcima zaključili smo da proces formiranja pozitronijuma predstavlja najveći ograničavajući faktor, i da je efikasnost trapovanja ograničena na 57 % po jednom stepenu trapa. Ukoliko bi se pak pad napona u trećem stepenu smanjio na daleko manju vrednost, recimo 1V, koja je, sa jedne strane dovoljna da aksijalno konfinira termalizovan roj pozitrona, a sa druge strane dovoljno mala da ne indukuje još jedan proces elektronske eksitacije azota odnosno formiranje pozitronijuma. Na taj način ono, što je bilo treći stepen praktično postaje akumulacioni deo drugog stepena. U ovom delu trapa, pozitroni bi gubili energiju kroz procese vibracione eksitacije molekula CF_4 i rotacione eksitacije molekula N_2 . Pitanje se postavlja, da li je pritisak u poslednjem stepenu dovoljno velik da omogući efikasnu termalizaciju pozitrona u poslednji stepen i tako spreči da se ono što je uštedeno izbegavajući proces formiranja pozitronijuma izgubi na zidovima i kroz proces anihilacije usled dužeg boravka pozitrona

Tabela 4.3. Parametri simulacije dvostepenog N_2 pozitronskog trapa

Parametri	Stepen I	Stepen II	Stepen IIa
Radius (mm)	5	20	20
Dužina (m)	0.5	0.5	0.5
Pritisak (Torr)	3×10^{-3}	10^{-4}	10^{-5}
Pozadinski gas	N_2	N_2	$N_2^{0.5} + CF_4^{0.5}$
Mag. polje (G)	530	530	530
Napon (V)	9	1	0
Početni uslovi - parametri			
Potencijal ulazne elektrode (V)		17.4	
Prednapon izvora (V)		0.1	
Širina (FWHM) energijske raspodele (eV)		1.5	

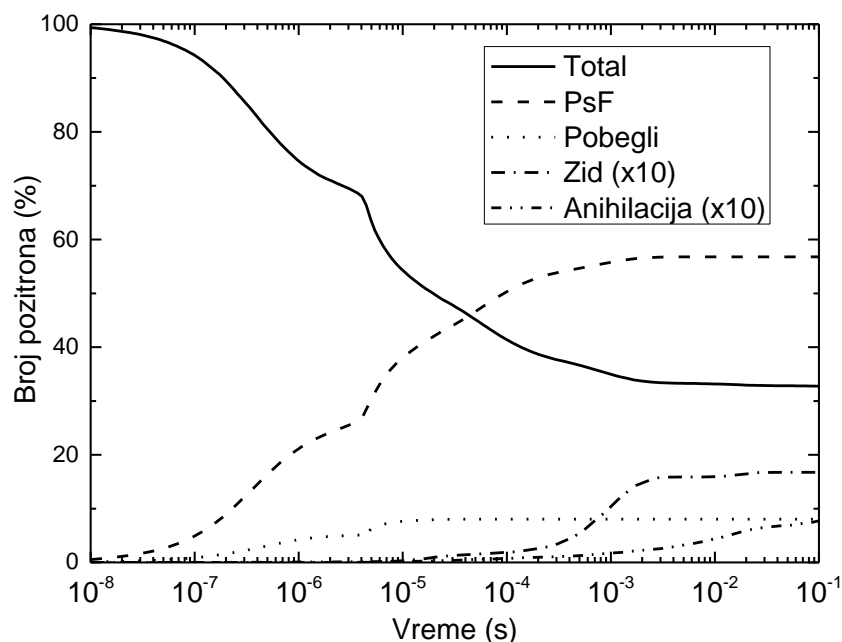
na višem pritisku koji je prisutan u drugom stepenu. To će najviše zavisiti od procesa vibracionih eksitacija CF_4 molekula odnosno energije koja se na taj način izgubi. U tabeli

4.3 su dati parametri simulacije dvostepenog trapa koji su u svemu identični simulaciji optimizovanog trapa osim što je pad napona na trećem (II a) stepenu svega 1V. Prikaz potencijala koji odgovara ovim parametrima simulacije dat je na slici 4.16.



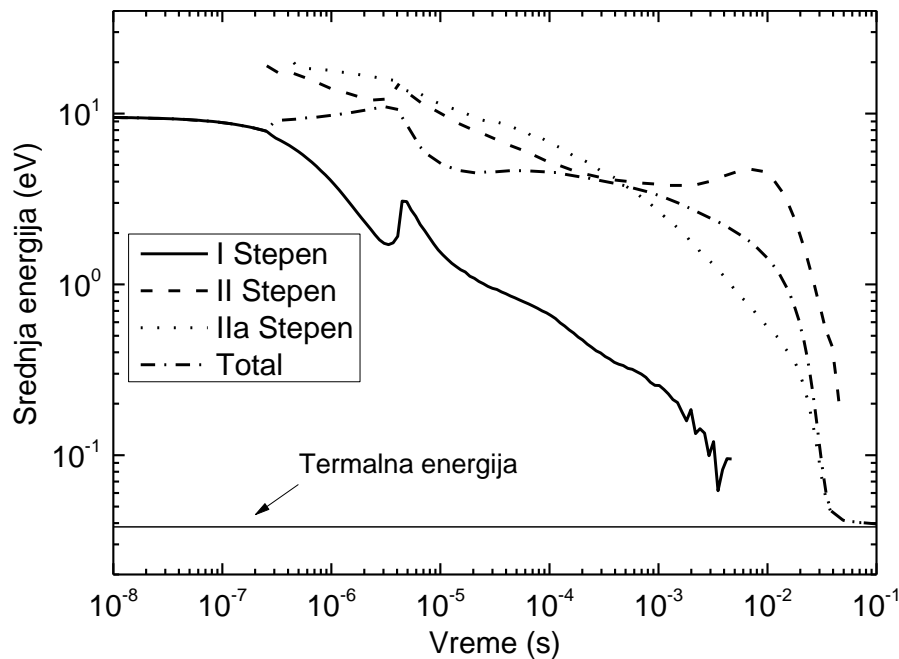
Slika 4.16 Profil električnog potencijala na elektrodama u modelu dvostepenog pozitronskog trapa.

Na slici 4.17 prikazani su rezultati simulacije koji prikazuju procese gubitka pozitrona kao i ukupan broj trapovanih čestica na kraju termalizacije. Broj pobeglih čestica se ne razlikuje od slučaja optimizovanog trostepenog trapa, jer njihov broj primarno zavisi od pritiska gasa u prvom stepenu i od podešavanja potencijala ulazne i prve elektrode u odnosu na osobine dolaznog snopa pozitrona. Ostvareno poboljšanje u efikasnosti trapovanja ostvareno je nauštrb procesa formiranja pozitronijuma u trećem stepenu gde je ukupan broj pozitrona izgubljenih na ovaj način ispod 60 %. Na ovaj način ostvarena je efikasnost trapovanja od 33 % svih čestica koje su ušle u trap. Gubitak pozitrona na zidovima i kroz proces anihilacije je očekivano veći u dvostepenom trapu (na slici 4.17 krive koje odgovaraju ovim procesima su pomnožene sa deset) zbog dužeg vremena koje pozitroni provode u drugom stepenu trapa gde je pritisak veći, ali i dalje oba procesa ne učestvuju u gubicima više od nekoliko procenata.



Slika 4.17 Ukupan broj pozitrona u simulaciji i pojedinačni procesi gubitka u vremenu, normirani na ukupan broj iniciranih pozitrona. (PsF) - udeo pozitrona izgubljenih kroz proces formiranja pozitronijuma; (Pbegli) - udeo pozitrona koji su izašli preko ulazne elektrode; (Zid) - udeo pozitrona koji je izgubljen na zidovima uređaja; (Anihilacija) - udeo pozitrona izgubljen kroz proces anihilacije. Gubici na zidovima i anihilacija su pomnoženi sa 10 kako bi bili vidljivi na grafiku.

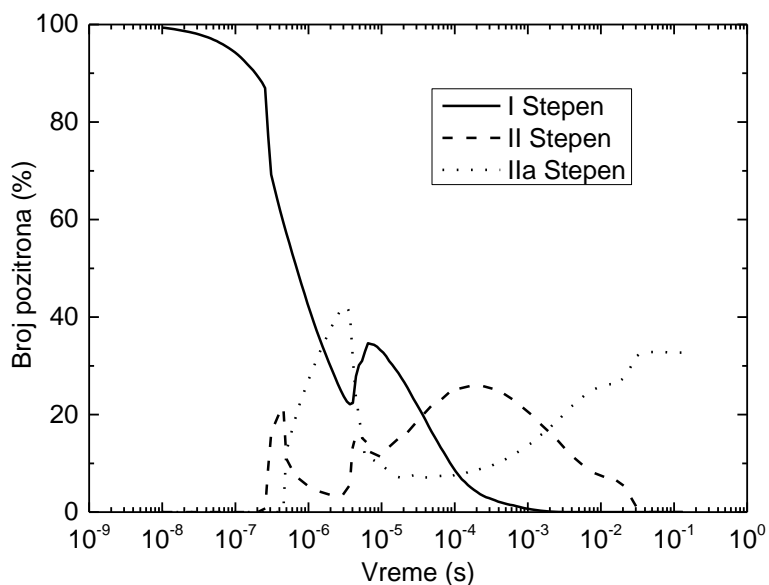
Termalizacija pozitrona i dalje se odvija na istoj vremenskoj skali (slika 4.18) ali se pozitroni duže zadržavaju u drugom stepenu trapa jer je dinamika punjenja akumulacionog stepena (IIa) značajno promenjena u odnosu na trostepene trapove (slike 4.7 i 4.14). Razlog za to je velika razlika u veličini i prirodi preseka za elektronsku $a^1\Pi$ eksitaciju molekula azota i vibracionim eksitacijama molekula CF_4 koji ima glavnu ulogu u termalizaciji pri energijama od par eV . Gubitak energije pri jednoj elektronskoj eksitaciji N_2 iznosi $\sim 8.5 eV$ dok je gubitak energije pri jednoj vibracionoj eksitaciji molekula CF_4 $\sim 150 meV$. Očigledno je da je samo jedna elektronska eksitacija N_2 dovoljna da pozitron izgubi dovoljno energije i ostane konfiniran u datom stepenu trapa, dok je u slučaju dvostepenog trapa, neophodno desetine sudara kako bi pozitroni izgubili nekoliko eV koliko imaju nakon što su konfinirani u drugom segmentu (slika 4.19). O poređenju ova dva preseka biće više reči u poglavlju 5.



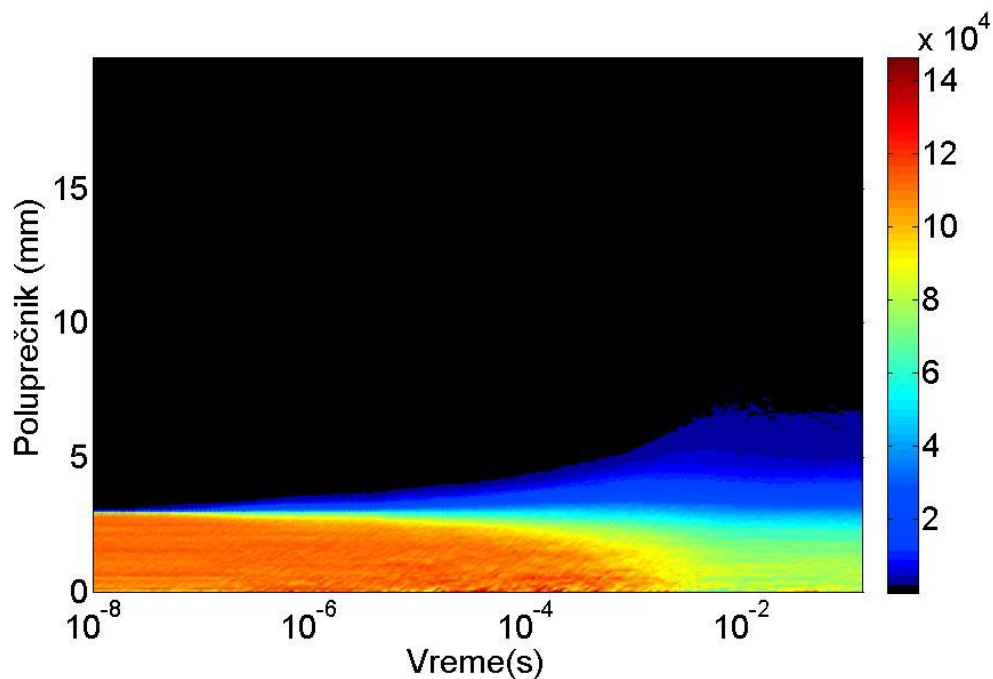
Slika 4.18 Srednja energija pozitrona u pojedinačnom stepenu i srednja energija kompletnog roja pozitrona u simulaciji dvostepenog trapa.

Činjenica da pozitroni u slučaju dvostepenog trapa u drugom segmentu gde je pritisak azota 0.1 mTorr provode čak šest puta više vremena dovodi do nešto šire prostorne raspodele na kraju termalizacije u odnosu na trostepene trapove što se može videti na slici 4.20. U isto vreme ovo je i odgovor zašto se ovakav pristup ne primenjuje često. Marfi i Surko su ispitivali eksperimentalno efikasnost trapovanja u, kako su ga nazvali, "režimu plitke jame" koji je koristio sličan princip kao što je opisan u ovom poglavlju (Murphy and Surko, 1992). Zaključili su da je trap u ovom režimu znatno osetljiviji na nesavršenosti u poravnanju magnetskog polja sa poljem elektroda. Ukoliko postoji neki ugao između vektora magnetskog i električnog polja (koji bi idealno bili kolinearni), u kratkoj oblasti između elektroda gde postoji električno polje, prilikom jednog preleta pozitrona kroz tu oblast putanja pozitrona ne bi značajno odstupala od putanje koja je predviđena u idealnom slučaju (pa i u ovoj simulaciji). Ipak, kako se u slučaju dvostepenog trapa akumulacioni stepen znatno sporije puni nego u slučaju trostepenog, to podrazumeva da će pozitron imati znatno veći broj preleta kroz ovu oblast. Prilikom svakog preleta ugao između magnetskog i električnog polja će indukovati mali drift koji u konačnom može dovesti do transporta

pozitrona na zidove elektroda i samim tim do njihovog nestanka. Naš računarski kod, za sada, nije u stanju da simulira ove nesavršenosti u poravnanju te ovi gubici nisu uključeni u prikazanim rezultatima.



Slika 4.19 Broj pozitrona u pojedinačnim stepenima trapa u toku vremena u odnosu na broj inicijalnih pozitrona



Slika 4.20 Evolucija prostorne raspodele roja pozitrona u simulaciji dvostepenog modela pozitronskog trapa.

4.4 Zaključak

U ovom poglavlju, formulisali smo model pozitronskog trapa u kojem su nam dostupni parametri geometrije (dužina i poluprečnik segmenta), pritiska i sastava gasa u segmentu, vrednost aksijalnog magnetskog polja i električni potencijal cilindričnih elektroda trapa. Takođe, možemo proizvoljno da podešavamo prostornu i energijsku raspodelu incidentnog snopa pozitrona koji dolazi sa moderatora. Koristeći Monte Karlo proračun, opisan u poglavlju 2, pomoću oformljenog modela, urađene su simulacije rada pozitronskih Surko trapova.

Pomoću simulacije generičkog modela trostepenog trapa koji, kao što je Surko inicijalno predložio, koristi azot za trapovanje pozitrona, identifikovani su procesi koji mogu dovesti do gubitka pozitrona i utvrđeno je da najveći deo pozitrona odlazi kroz proces formiranja pozitronijuma. Značajan deo pozitrona je izgubljen i usled nedovoljnog broja sudara, najpre u prvom segmentu koji jeste na najvišem pritisku, i koji je odgovoran za inicijalno trapovanje pozitrona. Analizom evolucije energijske raspodele u vremenu, pokazano je da koncept monoenergijskih snopova koji je korišćen za objašnjenje rada trapova nije održiv zbog činjenice da se početni snop pozitrona nakon nekoliko sudara i usled prelaska iz segmenta u segment deli u nekoliko "snopova" od kojih oni na nižim energijama mogu imati jako široke energijske raspodele.

Kroz postupak koji je sličan postupcima koji se koriste u eksperimentu, pomoću simulacije su određene optimalne vrednosti za parametre pritiska u prvom stepenu trapa, i profila električnog potencijala elektroda. Tako optimizovan trap postigao je efikasnost trapovanja od 17 % što je blisko maksimalno prijavljenoj efikasnosti ~20 % (Surko and Greaves, 1992). Takođe, identifikovan je i proces gubitaka pozitrona kroz rasejanje unazad u prvom segmentu koji nije moguće izbeći.

Konačno, kako bi se umanjili gubici usled procesa formiranja pozitronijuma predložen je model dvostepenog trapa, koji bi u poslednjem segmentu imao pad potencijala od samo 1 V i tako pozitronima onemogućio treću šansu da dožive proces formiranja pozitronijuma. Cena koja se plaća ovakvim profilom električnog potencijala jeste duži

boravak pozitrona u drugom segmentu trapa koji je na višem pritisku što može dovesti do povećanih gubitaka putem direktne anihilacije i transporta na zidove. Simulacija pokazuje da efikasnost u ovako dizajniranom trapu, u kojem bi aksijalno magnetsko polje bilo dobro poravnato sa elektrodama, može dostići vrednost i do 33 %.

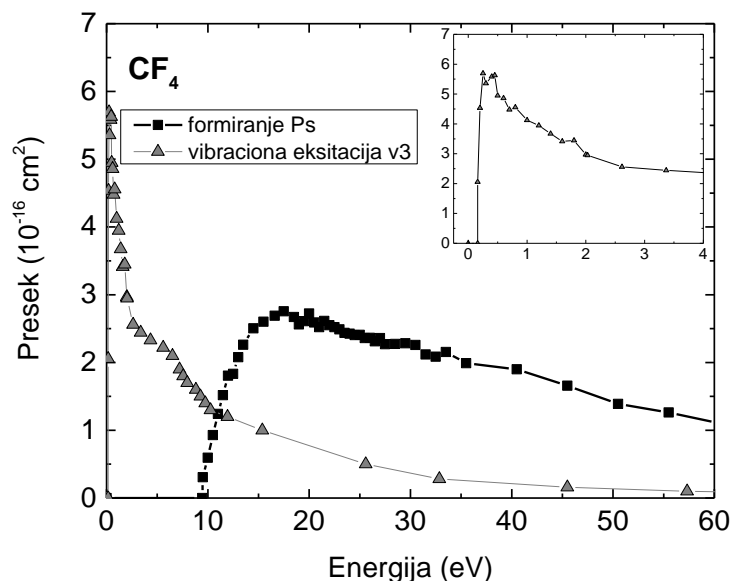
5. Optimizacija Surko trapa

U prethodnom poglavlju opisan je proces trapovanja pozitrona i identifikovana su fundamentalna ograničenja u trapovanju kroz proces $a^1\Pi$ elektronske eksitacije molekula azota. Jasno je da proces formiranja pozitronijuma na molekulu azota postavlja fizičku granicu na $\sim 30\%$ (u slučaju uskoenergijskih snopova sa volframskog moderatora) te da bi dalje poboljšanje efikasnosti trapovanja zahtevalo promenu principa na kojem se pozitroni trapuju. U ovom poglavlju, razmatramo mogućnost za prevazilaženje ovog ograničenja korišćenjem CF_4 gasa kao primarnog pozadinskog gasa u prvom segmentu. Izmerene su velike vrednosti preseka za vibracionu eksitaciju CF_4 pozitronima (Marler and Surko, 2005a; Kurihara et al. 2000), što nas je motivisalo da ispitamo da li je moguće ostvariti efikasno trapovanje pomoću vibracionih gubitaka na CF_4 . Ovi procesi su dominantni u energijskom opsegu od 0.2 - 2 eV, što je daleko ispod energijskog praga za formiranje pozitronijuma (slika 5.1) ali se nalazi u domenu energija pozitrona koji napuštaju moderator. Ipak, kako je prag za proces vibracije, odnosno gubitak energije pri jednom sudaru (0.159 eV za najsnažniji vibracioni kanal CF_4) daleko manji od praga elektronske eksitacije N_2 (8.5 eV) da bi jedan pozitron izgubio dovoljno energije da ostane trapovan, mora da doživi daleko veći broj sudara. Maksimalna vrednost preseka za vibracionu eksitaciju CF_4 je približno sedam puta veća od maksimalne vrednosti elektronske eksitacije N_2 (slike 4.4 i 5.1) dok je energijski gubitak oko 50 puta manji. Grubom računicom, očekujemo da je za funkcionisanje trapa potreban pritisak CF_4 gasa veći skoro sedam puta.

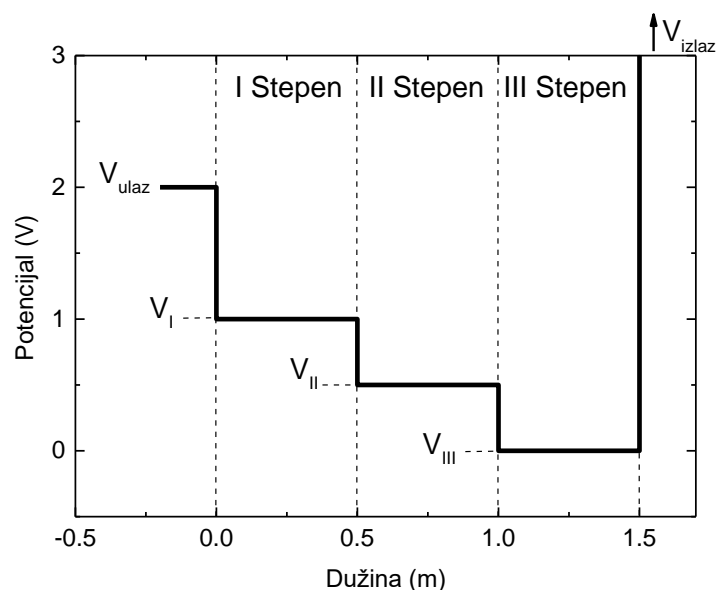
5.1 Model CF_4 pozitronskog trapa

Kako bismo testirali predloženi metod trapovanja, primenili smo naš model trapa na tradicionalni, trostepeni Surko trap. Svaki stepen ima definisan sastav i pritisak gasa, aksijalno magnetsko polje, električni potencijal elektrode, kao i poluprečnik i dužinu elektrode. Takođe je definisan i potencijal ulazne elektrode koji je postavljen nešto ispod energije dolaznog snopa, kao i izlazne elektrode, slično kao u simulacijama u prethodnom poglavlju. Na slici 5.2 dat je model električnog potencijala koji odgovara predloženom načinu trapovanja. Primetimo da je razlika potencijala od stepena do stepena 0.5 - 1 V,

kako bi se formirale potencijalne jame koje obezbeđuju akumulaciju pozitrona u trećem stepenu, a u isto vreme ne dodaju značajnu energiju, te se time pozitroni čuvaju na energijama daleko ispod praga za formiranje pozitronijuma. Zadržane su iste vrednosti pritiska gasa u stepenima kao u standardnom Surko trapu, uz zamenu gasa N_2 sa CF_4 . Predlaže se da se u akumulacionom stepenu i dalje se koristi 1:1 smeša N_2 i CF_4 zarad brže termalizacije, ispod 100 meV pomoću rotacione eksitacije molekula azota. Pojedinačni parametri simulacije dati u tabeli 5.1. i korišćeni su u svim simulacijama u okviru ovog poglavlja, osim gde je eksplicitno navedeno drugačije. Odabrane vrednosti (osim sastava gasa i napona elektroda) generalno odgovaraju različitim implementacijama trapova (Surko and Greaves, 2004; Clarke et al. 2006; Sullivan et al. 2008; Cassidy et al. 2006). Parametar koji ima najveći uticaj na efikasnost trapovanja jeste proizvod pritiska i dužine prvog stepena, jer to određuje broj sudara pozitrona sa pozadinskim gasom u prvom prolazu kroz trap.



Slika 5.1 Izmereni presek za najснаžнији канал vibracione eksitacije (Marler and Surko, 2005a) i presek za proces formiranja pozitronijuma kod CF_4 . Umetnuti grafik predstavlja uvećan deo preseka za vibracionu eksitaciju na niskim energijama. Eksperimentalni podaci za proces formiranja pozitronijuma za CF_4 nisu dostupni pa su prikazani podaci za formiranje pozitronijuma u argonu, skalirani na način koji je opisan u poglavlju 3 (Petrović et al. 2013).



Slika 5.2 Model trostepenog električnog potencijala za CF₄ pozitronski trap.

Tabela 5.1. Parametri simulacije CF₄ pozitronskog trapa

Parametri	Stepen I	Stepen II	Stepen III
Radijus (mm)	5	20	20
Dužina (m)	0.5	0.5	0.5
Pritisak (Torr)	10 ⁻³	10 ⁻⁴	10 ⁻⁵
Pozadinski gas	CF ₄	CF ₄	N ₂ + CF ₄
Mag. polje (G)	530	530	530
Napon (V)	1.0	0.5	0
Početni uslovi - parametri			
Potencijal ulazne elektrode (V)	2		
Prednapon izvora (V)	0.1		
Širina (FWHM) energijske raspodele (eV)	1.5		

Napomenimo da je u prvom i drugom segmentu korišćen čist CF₄ gas, za koji su preseći dati u poglavlju 3, ali kako nisu mereni diferencijalni preseći, podrazumevano je da je rasejanje izotropno u sistemu centra mase za sve tipove sudara.

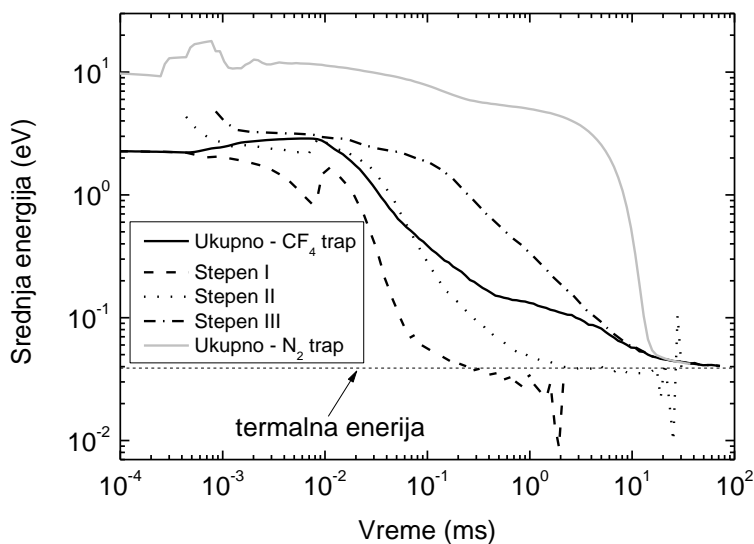
5.2 Rezultati simulacija CF₄ pozitronskog trapa

Važnost pojedinih osobina pozitronskog trapa će zavistveno od njegove namene. Na primer, za generisanje intenzivnih impulsa koji će biti sažeti i implantirani u Ps-konverter (Cassidy et al. 2006) temperatura pozitrona nije kritičan parametar, ali veličina snopa jeste. Sa druge strane, za proizvodnju snopova visoke rezolucije (Danielson et al. 2015), neophodno je izbeći zagrevanje pozitrona, a veličina pozitronske plazme je manje važna. Uopšteno, najvažniji parametri su (1) efikasnost trapovanja, (2) veličina snopa i (3) temperatura pozitrona. Stoga smo ove parametre uzorkovali iz simulacija.

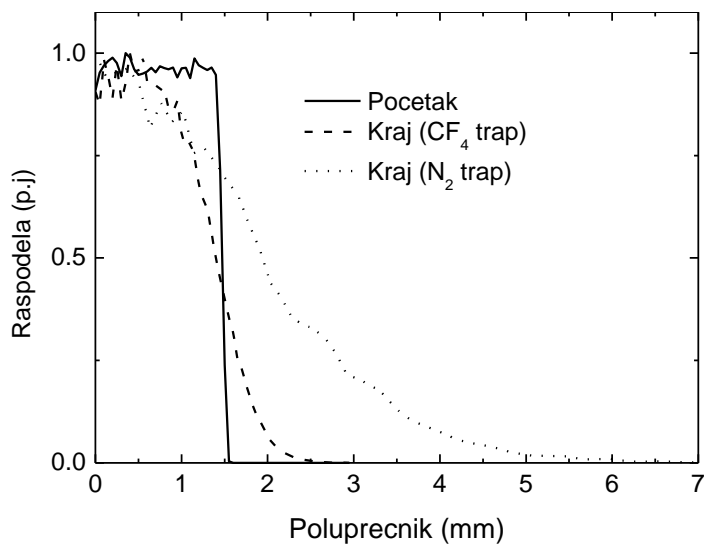
Srednja kinetička energija u simuliranim napravama (i N₂ i CF₄ trap) je određena za svaki pojedinačan stepen, kao i za kompletan trap, u funkciji od vremena (slika 5.3). Ovi podaci ukazuju da je proces termalizacije značajno drugačiji u CF₄ trapu u poređenju sa klasičnim Surko trapom. Glavni razlog tome je činjenica da pozitroni ulaze u trap sa daleko manjom energijom, i provode više vremena u prvom i drugom segmentu trapa gde je pritisak viši. Ipak, i u jednom i u drugom slučaju, pozitroni prilaze termalnim energijama na približno istoj vremenskoj skali. Napomenimo da je na slici 5.3 prikazana srednja kinetička energija, tako da činjenica da u kasnijim trenucima energije u prvom i drugom stepenu padaju ispod termalne samo pokazuje da je u tim segmentima ostao mali broj čestica, te srednja energija kao parametar, gubi svoju statističku važnost.

Snop visoke energije koji ulazi u trap ispunjen gasom ima tendenciju da se širi radijalno, prvenstveno usled elastičnih sudara na višim energijama. U CF₄ trapu, energija incidentnih pozitrona je nekoliko eV, što je dosta manje do ~10 eV koliko iznosi u standardnom N₂ trapu (Murhpy and Surko, 1992). Samim tim manje energije će biti preorjentisano radijalno kroz sudare i konačni trapovan roj čestica će biti uži. Dodatno, usled drugačije dinamike termalizacije, čestice provode manje vremena u trećem stepenu trapa, i imaju manje vremena da difunduju dok se roj ne termalizuje. Zbog toga, ovaj metod trapovanja je naročito pogodan za impulsnu primenu trapa, sa brzim ciklusima, kao što se koriste u npr. eksperimentima za merenje preseka za rasejanje pozitrona. Ovaj efekat se vidi na slici 5.4 koja prikazuje simulirane radijalne raspodele pozitrona u CF₄ i N₂

trapovima sa istom geometrijom i pritiscima gasa. U praksi, snopovi pozitrona se često kompresuju pomoću vremenski promenljivog električnog polja (tehnika rotirajućeg električnog polja (Cassidy et al. 2006; Greaves and Moxom, 2008)). Ova tehnika nije uključena u simulacije predstavljene u ovom poglavlju već će o njoj biti više reči u narednom (poglavlje 6). Ovde ćemo samo napomenuti da prelazak na trapovanje pomoću CF_4 gasa ne utiče na efikasnost kompresije rotirajućim poljem, zato što je sastav i pritisak gasa u akumulacionom stepenu identičan kao i u standardnom N_2 trapu.



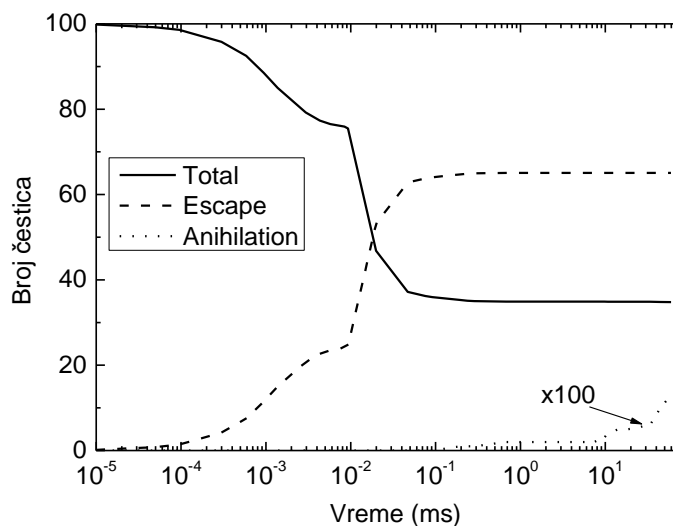
Slika 5.3 Srednja kinetička energija pozitrona u svakom pojedinačnom stepenu CF_4 trapa u funkciji vremena i srednja energija svih čestica u CF_4 i N_2 trapu.



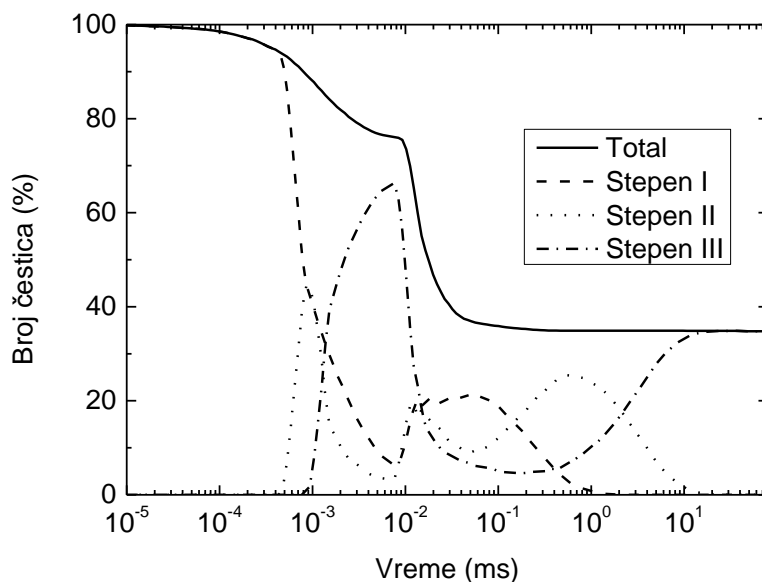
Slika 5.4 Simulirana radijalna raspodela pozitrona pri ulasku u trap (start) i nakon termalizacije (kraj) u CF_4 i N_2 trapu.

Ukupna efikasnost pozitronskog trapa zavisi od brzine trapovanja čestica i različitih mehanizama gubitaka koji mogu postojati. Primarni gubici u simuliranom trapu nastaju usled nedovoljnog broja neelastičnih sudara koje čestice dožive u jednom putu od ulazne do izlazne elektrode i nazad. Takve čestice imaju dovoljno energije da preskoče potencijal ulazne elektrode i pobegnu iz trapa. Formiranje pozitronijuma, transport na zidove elektroda i direktna anihilacija su takođe uključene u simulaciju, ali su, u idealnom CF₄ trapu, potpuno zanemarivi. Simulirana efikasnost trapovanja i mehanizmi gubitaka u trapu su prikazani na slici 5.5. Efikasnost trapovanja smo definisali kao broj čestica koji je trapovan u trenutku kada je roj pozitrona termalizovao u odnosu na broj pozitrona koji su ušli u trap. Međutim treba biti obazriv kod definisanja trenutka kada je roj termalizovan jer se radi o asimptotskom prilazu. U ranijim izučavanjima termalizacije kao oštrije definisan trenutak uziman je prolaz kroz tačku koja je ili 50% ili 10% iznad termalne energije.

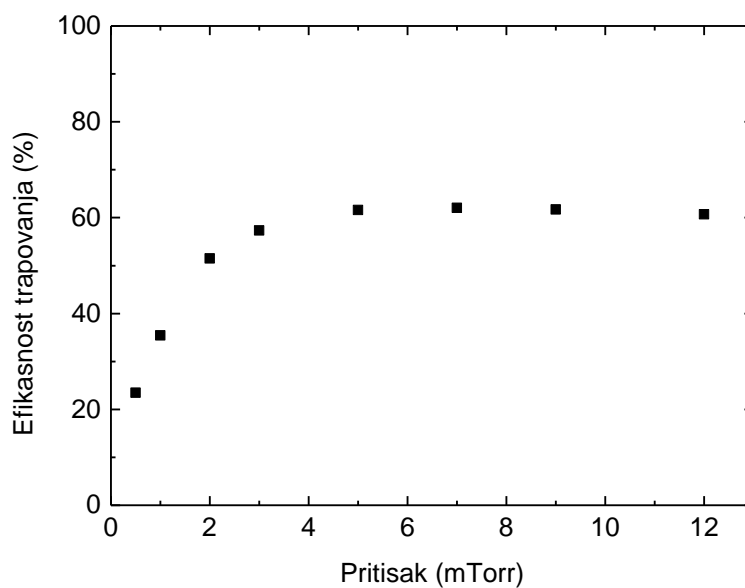
Slika 5.6 prikazuje simuliranu raspodelu pozitrona u različitim stepenima trapa tokom procesa termalizacije. Primetimo da približno 5% pozitrona napusti trap pre nego što snop stigne do drugog stepena. Ove čestice su rasejane unazad u sudarima sa molekulima gasa u prvom stepenu, i napuštaju trap. Ovaj broj od 5% treba uzeti sa rezervom jer je usled nedostatka dostupnih diferencijalnih preseka pretpostavljeno uniformno rasejanje. Implikacije ove pretpostavke će biti analizirane u sledećem potpoglavlju.



Slika 5.5 Procenat čestica koji je ostao u trapu u funkciji vremena i procesi gubitaka.



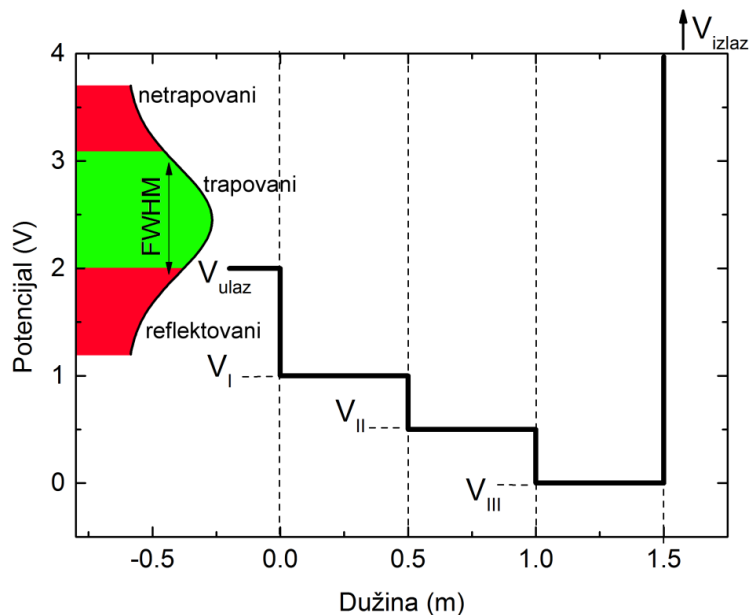
Slika 5.6 Ukupan i broj pozitrona u različitim stepenima trapa u toku procesa termalizacije



Slika 5.7 Simulirana efikasnost trapa u funkciji pritiska CF_4 u prvom stepenu.

Rezultati prikazani na slici 5.6 su dobijeni za vrednost pritiska u prvom stepenu od 1 mTorr što grubo odgovara pritisku u prvom stepenu N_2 trapa. Kako je pokazano na slici 5.7, viši pritisci dovode do povećane efikasnosti. Ovi rezultati prikazuju simuliranu efikasnost za različite pritiske CF_4 u prvom stepenu trapa, sa saturiranom efikasnošću od

~60 % na 5 mTorr-a. Ovo je istovremeno i maksimalna vrednost jer dalje efikasnost opada zbog rasta rasejanja unazad. Nije moguće dalje poboljšati efikasnost, čak ni sa većim pritiscima jer dolazi do zasićenja kako pozitroni iskuse dovoljno sudara da ili budu trapovani, ili budu rasejani unazad preko ulazne elektrode. Pri takvom zasićenju približno 40% čestica je rasejano unazad.



Slika 5.8 Prikaz uticaja širine energijske raspodele i ulaznog potencijala na efikasnost trapovanja.

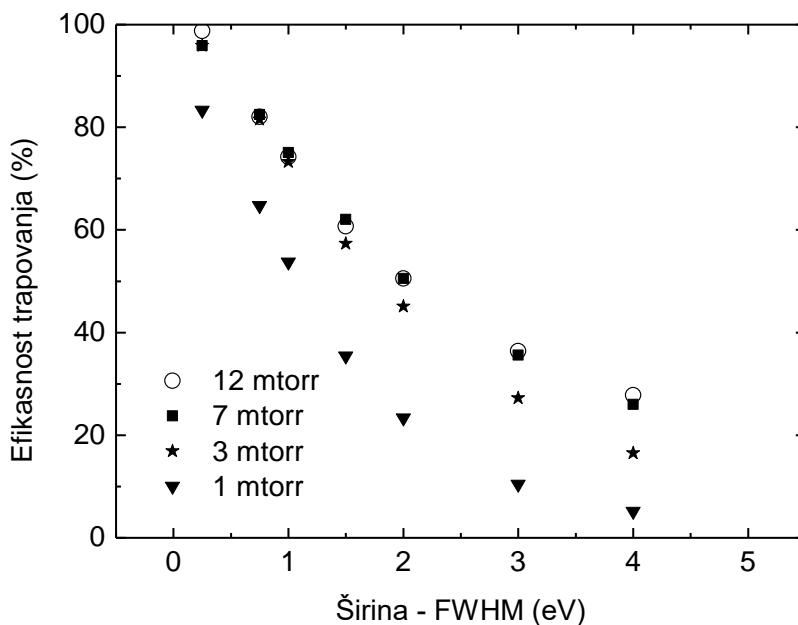
Reflektovani pozitroni nemaju dovoljno energije da uđu u trap, a netrapovani imaju previše energije koju ne stignu da predaju za vreme prolaska kroz trap.

Različite implementacije trapova širom sveta (Clarke et al. 2006; Sullivan et al. 2008; Cooper et al. 2015; Greaves and Surko, 2002) imaju različite osobine, uključujući i parametre dolaznog snopa. Najčešće, širina energijske raspodele snopa određena je osobinama moderatora i nije je jednostavno menjati. U standardnim Surko trapovima koji koriste N_2 za trapovanje pozitrona, širina energijske raspodele nije kritičan parametar jer je energijski opseg relativno širok (slika 4.3) te ne utiče kritično na efikasnost. Sa druge strane, kod CF_4 trapova to nije slučaj jer širina energijske raspodele, naročito aksijalne energijske raspodele snopa sa moderatora, određuje sa jedne strane broj pozitrona koji mogu da uđu u trap (u odnosu na ulaznu elektrodu), a sa druge, broj pozitrona koji je

moguće trapovati (slika 5.8). Na slici 5.9 prikazana je simulirana efikasnost CF_4 trapa za različite širine energijske raspodele incidentnog snopa pozitrona, i za različite pritiske CF_4 u prvom stepenu. Kako je i očekivano, velika širina energijske raspodele značajno umanjuje efikasnost trapa.

5.3 Modeli diferencijalnog preseka

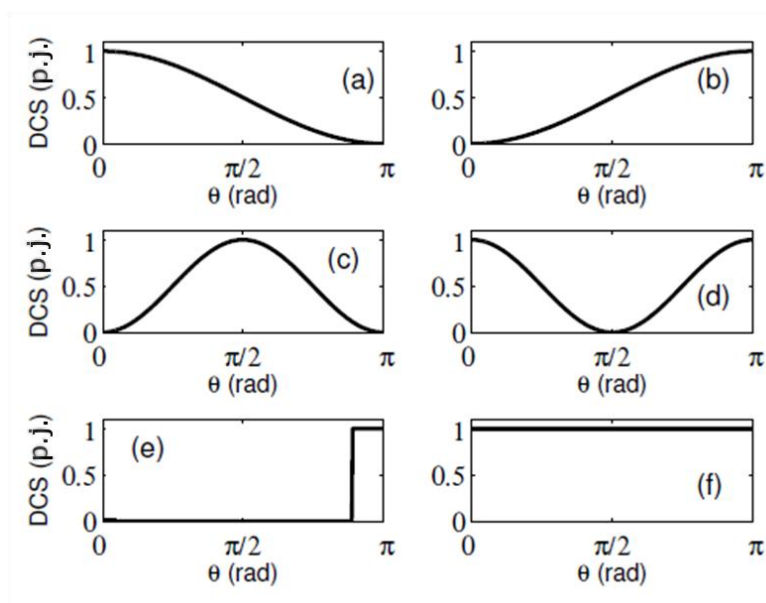
Kako smo napomenuli u prethodnom odeljku, visok pritisak pozadinskog gasa koji je neophodan za efikasno trapovanje u napravama baziranim na CF_4 gasu dovodi do većeg rasejanja čestica na molekulima gasa. Pogotovo je značajno rasejanje unazad koje može dovesti do toga da čestice napuste trap preko ulazne elektrode nakon samo nekoliko sudara što postaje primarni mehanizam gubitka čestica. Kako bi se pravilno modelovao ovaj



Slika 5.9 Simulirana efikasnost trapovanja za različite širine energijske raspodele incidentnog snopa i različite pritiske CF_4 u prvom stepenu trapa

proces neophodno je poznavanje kompletnog seta diferencijalnih preseka, koji u ovom trenutku nije dostupan. Dok ne postoje eksperimenti direktnog merenja diferencijalnih preseka za interakciju pozitron- CF_4 , u eksperimentima se može primetiti da je vibraciono

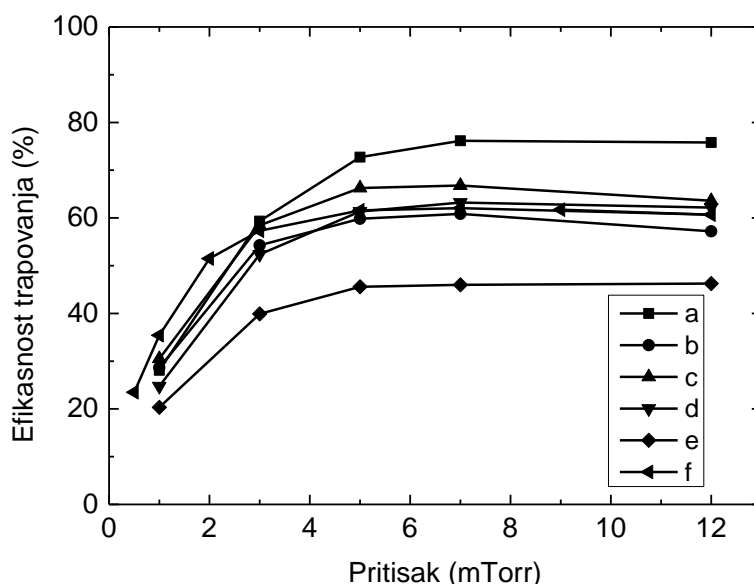
rasejanje pozitrona na molekulu CF_4 na energijama do nekoliko eV uglavnom usmereno unapred. Takođe postoje poređenja između rasejanja elektrona i pozitrona na CF_4 , i zaključeno je da Bornova aproksimacija prilično dobro odgovara pozitronima na niskim energijama (Marler et al. 2006). Nažalost, slično poređenje elektrona i pozitrona za elastično rasejanje nije moguće. Kako bismo ispitali osetljivost našeg modela na različite tipove diferencijalnih preseka, koristili smo Bornovu aproksimaciju dipola (Mann and Linder, 1992) kao diferencijalni presek za vibracionu eksitaciju, dok smo za elastično rasejanje konstruisali nekoliko modalnih preseka: (a) "unapred", (b) "unazad", (c) "napred-nazad", (d) "90 stepeni", i kao najgori slučaj (e) "strogo unazad". Izotropno rasejanje (f) je uključeno zarad lakšeg poređenja sa prethodnim podacima. Ovi modalni preseki su prikazani na slici 5.10. Iako postoji pregršt empirijskih pokazatelja koji sugerišu da je realni diferencijalni presek bliži slučaju (a) nego bilo kojem drugom, u odsustvu izmerenih preseka, zarad kompletности ispitali smo sve slučajeve.



Slika 5.10 Različiti modeli diferencijalnog preseka za elastično rasejanje pozitrona na CF_4 .

Urađene su simulacije trapovanja za sve modalne diferencijalne preseke prikazane na slici 5.10. i rezultati efikasnosti u funkciji od preseka CF_4 u prvom stepenu su prikazani na slici 5.11. Vidimo da za sve modele, efikasnost dostiže zasićenje na pritisku gasa ~ 7

mTorr u prvom stepenu. Čak i u malo verovatnom, najgorem slučaju (e), za pritiske preko 7 mTorr postiže se efikasnost ~40%. Kako se vidi sa slike 5.11, efikasnost će zavisiti od oblika diferencijalnog preseka za elastično rasejanje. Za slučaj rasejanja unapred, koje je najverovatnije blisko realnosti, efikasnost trapovanja mogla bi biti čak 75% za set početnih vrednosti i ostalih parametara kakav je uzet u simulaciji. Zanimljivo je primetiti da kod graničnih slučajeva a) i e) posle saturacije na oko 7 mTorr nema daljeg opadanja efikasnosti do u drugim slučajevima ono postoji i dosta zavisi od oblika diferencijalnog preseka. Usled daljeg opadanja efikasnost ima maksimum u takvim slučajevima na 6 mTorr

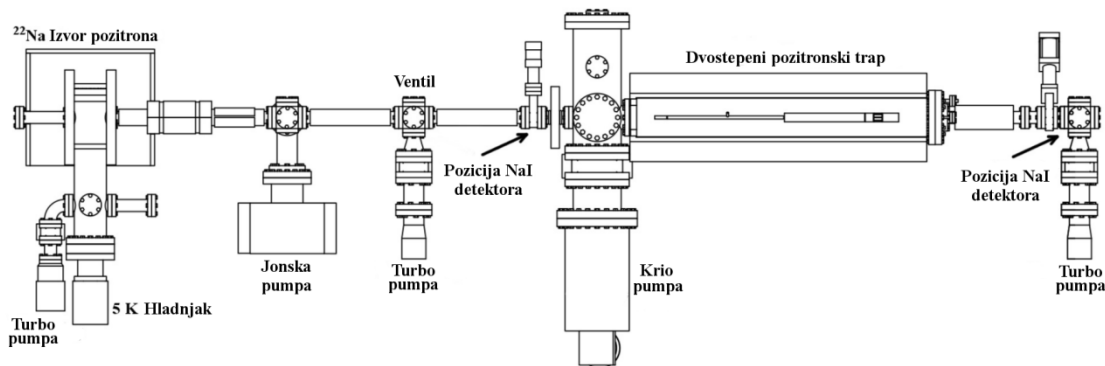


Slika 5.11 Efikasnost predloženog dizajna trapa u funkciji pritiska CF_4 u prvom stepenu za različite modele diferencijalnog preseka za elastično rasejanje pozitrona na CF_4 . Oznake u legendi odgovaraju modelima diferencijalnog preseka prikazanim na slici 5.10.

5.4 Trapovanje pomoću CF_4 u postojećoj N_2 napravi

Prikazane simulacije CF_4 trapa ukazuju da je moguće dostići bolje performanse u odnosu na postojeće N_2 trapove. Posebno je poželjno povećanje efikasnosti trapovanja, ako se uzme u obzir cena proizvodnje pozitronskih snopova. Povećanje broja dostupnih pozitrona je takođe važno za veliki broj eksperimenata, ali izvori sa jačinama preko 50 $m\text{Ci}$ (1.85 GBq) nisu dostupni trenutno. Stoga, kako bi se povećao broj pozitrona u eksperimentima

koji koriste trapove, jedine mogućnosti su (1) izvođenje eksperimenta u postrojenjima sa visokim fluksevima pozitrona, kao što je reaktorsko postrojenje u Minhenu (Hugenschmidt et al. 2012), (2) konstrukcija višestrukih snopova iz različitih izvora i njihovo spajanje u jedan trap, (3) povećati efikasnost primarnog moderatora, ili (4) povećati efikasnost trapa. Opcije 1-3 generalno nisu zadovoljavajuće: vreme rada na snopu koje se dodeljuje korisnicima u velikim postrojenjima je uvek ograničeno, što otežava dugoročno izvođenje istraživanja; konstrukcija višestrukih snopova iz različitih izvora bi bila izuzetno skupa; uprkos brojnim pokušajima (npr. Brandes et al. 1997), tokom prethodnih trideset godina, efikasnost moderatora od čvrstog neona nije prevaziđena. Stoga, jasno je da bi povećanje efikasnosti trapovanja bilo od velike koristi. Takođe, ostvarivanje manjih i hladnijih snopova su takođe primamljive mogućnosti koje potencijalno nude trapovi bazirani na CF₄. Ipak, postoje neke eksperimentalne prepreke koje je neophodno prevazići pre nego što se takve naprave realizuju.



Slika 5.12 Šematski prikaz UCL pozitronskog snopa i trapa. Naznačene su pozicije dva NaI detektora, koja se koriste za praćenje intenziteta snopa pre (levo) i nakon (desno) što prođe kroz elektrode trapa. Magnetsko polje u oblasti izvora je 75 G, a unutar trapa je 565 G.

Jedna od glavnih prepreka u implementaciji CF₄ trapa jeste činjenica da je energijski gubitak pri jednoj vibracionoj eksitaciji (~ 160 meV) značajno manji od energijske širine snopa (1.5 eV). Stoga, kako bi se trapovali i pozitroni sa najvećom energijom, neophodno je desetak sudara u prvom prolazu kroz trap. Povratak na moderator od volframa sa suženjem raspodele bi olakšao ovaj problem ali bi nas vratio u domen znatno manje efikasnosti moderatora. Poređenja radi, kod N₂ gde je gubitak energije veliki

(8.5 eV) potrebna je samo jedna elektronska eksitacija. Štaviše, zbog tako velikog gubitka energije u jednom sudaru, N₂ trapovi su mnogo manje osetljivi na širinu energijske raspodele dolaznog snopa pozitrona i mogu da tolerišu veliku razliku u jačini magnetskog polja u trapu i oblasti izvora. Ovo je važno, zato što jače magnetsko polje na ulasku u trap dovodi do transfera energije iz paralelne (aksijalne) u transverzalnu (a samim tim i veću širinu energijske raspodele) usled održanja $\frac{E_t}{B}$, gde je E_t transverzalna (radijalna) energija pozitrona a B magnetsko polje (longitudinalno) u odgovarajućem delu naprave. Kako je paralelna energija pozitrona ta od koje zavisi da li pozitron može da prevaziđe potencijal ulazne elektrode ili ne, povećanje širine raspodele paralelne energije na ovaj način uslovljava snižavanje potencijala ulazne elektrode, a samim time, neophodno je da pozitroni dožive više sudara kako bi bili trapovani u jednom prolazu.

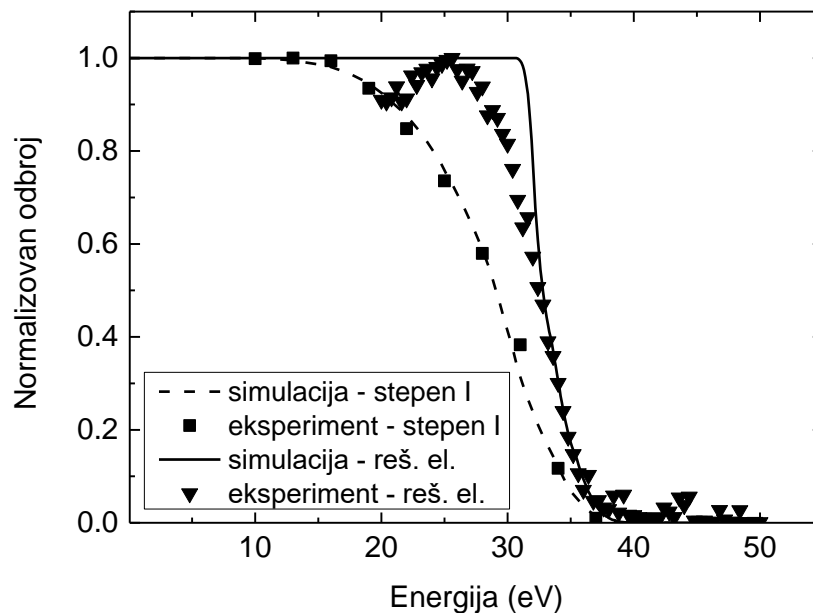
Kako su N₂ trapovi relativno neosetljivi na posledice povećanja transverzalne energije, postojeće naprave su uglavnom dizajnirane sa značajnom razlikom u jačini magnetskog polja između izvora i trapa (sa odnosom 5 ili više uglavnom) (Danielson et al. 2015). To smanjuje cenu i omogućava skretanje snopa pomoću smaknutog otvora, što čini zaštitu od zračenja kompaktnijom. Ipak, to nije pravi način na koji bi trebalo koristiti trap na bazi CF₄, jer u ovom slučaju, energija snopa se mora držati ispod praga za formiranje pozitronijuma (videti sliku 5.1) a povećanje širine raspodele paralelne energije zahteva veći broj sudara za kompletno trapovanje. I pored toga, pokušali smo da prilagodimo postojeću napravu koja je radila kao standardan Surko trap za rad sa CF₄ kao glavnim gasom za trapovanje. Ovaj eksperiment je rađen u laboratoriji na University College London i za te potrebe korišćen je njihov dvostepeni Surko trap (Cooper et al. 2015) čiji je šematski prikaz dat na slici 5.12. Prilagođenje na rad sa CF₄ gasom je izvedeno jednostavnom zamenom boca gasa koje se uvode na prednjem odnosno zadnjem ventilu tako da je u prvom i drugom stepenu dominantno CF₄ a u trećem smeša N₂ i CF₄, uz podešavanje potencijala na elektrodama po uzoru na model prikazan na slici 5.2.

Simulacije ove postavke trapa (uključujući i razliku u jačini magnetskog polja, kao i prstenasti oblik moderiranog snopa) predviđaju trećinu efikasnosti koja je ostvariva u N₂ režimu (slika 5.14). Uprkos tome, eksperiment nije ostvario merljivo trapovanje kada je

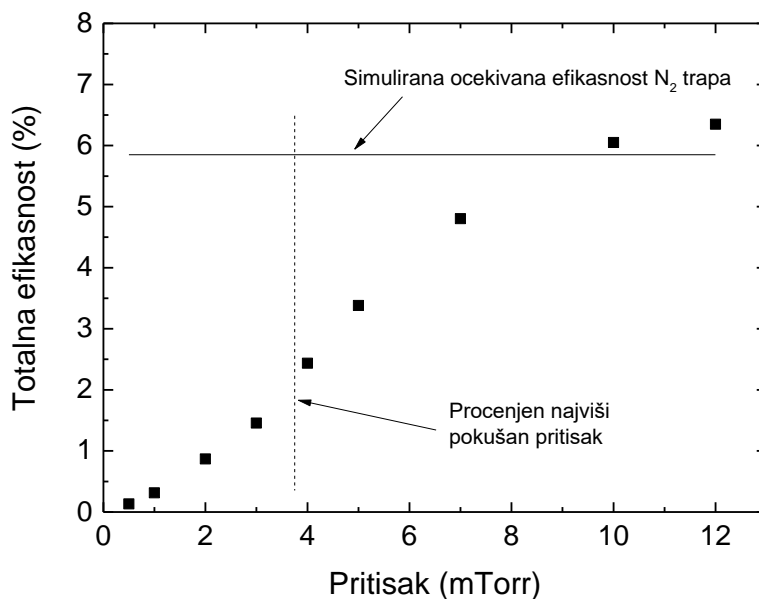
podešen da radi kao CF_4 trap. To može biti posledica povećane osetljivosti na nesavršenosti u poravnanju ili slične fizičke nedostatke, ili može ukazati na neki dodatni mehanizam gubitka pozitrona koji smo prevideli. Kako bismo ispitali razloge za nedostatak trapovanja, izvršili smo niz merenja, osmišljenih tako da potvrde ili opovrgnu određene aspekte simulacije.

Kako bismo utvrdili raspodelu paralelne energije incidentnog snopa pozitrona, urađena su dva seta merenja metodom smanjivanja potencijala. Intenzitet snopa pozitrona je meren na izlazu dok se jedna od elektroda koristi kao analizator. Dobijeni profil predstavlja mereni intenzitet snopa u funkciji napona na analizatoru. Za prvi set merenja korišćena je elektroda prvog stepena kao analizator, koja se nalazi u oblasti trapa u kojoj je magnetsko polje ~ 565 Gauss. Za drugi set merenja kao analizator je korišćena rešetkasta elektroda, postavljena posle izlazne elektrode, u magnetskom polju od ~ 110 Gauss. U oba merenja, energija snopa (prednapon izvora) je bila 32 eV, a magnetsko polje na izvoru je ~ 75 Gauss. Sve elektrode (osim analizatora) su uzemljene, a u sistemu nema gasa. Rezultati merenja i odgovarajućih simulacija su prikazani na slici 5.13 i pokazuju zadovoljavajuće slaganje. U okviru simulacije fitovana je raspodela energije pozitrona sa moderatora, tako da istovremeno zadovolji oba merenja, u dva različita magnetska polja. Na taj način pouzdano znamo da su i paralelna i transverzalna energija dobro fitovane.

Ova fitovana energijska raspodela je korišćena u simulacijama trapa koje uzimaju u obzir razlike u magnetskim poljima, transport pozitrona u sam trap, kao i sam proces trapovanja, sa parametrima koji odgovaraju eksperimentalnoj postavci. Stoga, dok simulacije opisane u prethodnim poglavljima razmatraju samo pozitrone koji su ušli u trap, simulacije predstavljene na slici 5.14 normalizuju totalnu efikasnost na ukupan broj pozitrona emitovanih sa izvora. Slika 5.14 predstavlja simuliranu očekivanu efikasnost korišćenjem predložene CF_4 metode za različite vrednosti pritiska CF_4 u prvom stepenu. Horizontalna linija predstavlja simuliranu efikasnost standardnog N_2 trapa i odgovara broju čestica koji se svakodnevno meri na ovom uređaju. Vertikalna isprekidana linija označava maksimalan pritisak koji je pokušao u eksperimentu (radom na većem pritisku rizikuje se



Slika 5.13 Izmereni i simulirani profili intenziteta snopa dobijeni smanjenjem potencijala, dobijeni pomoću elektrode prvog stepena u polju od 565 Gauss i pomoću rešetkaste elektrode postavljene na izlazu iz trapa u polju od 110 Gauss.

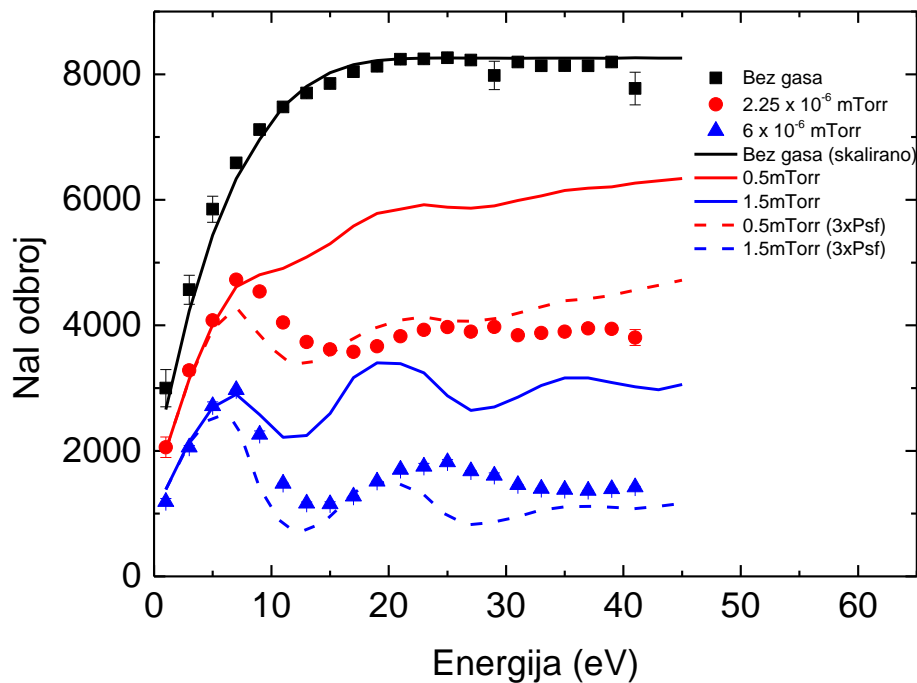


Slika 5.14 Simulirana ukupna efikasnost trapovanja u funkciji pritiska CF₄ u prvom stepenu. Simulacija uključuje fitovanu energijsku raspodelu snopa prikazanu na slici 5.13 i efekte očuvanja $\frac{E_t}{B}$. Horizontalna linija označava simuliranu očekivanu efikasnost N₂ trapa za realne parametre sistema.

oštećenje moderatora). Mala očekivana efikasnost je rezultat izuzetno široke raspodele paralelne energije (slika 5.13) što dovodi do toga da se ~70% pozitrona reflektuje od ulazne elektrode, dok ostale čestice imaju previše energije kako bi bile efikasno trapovane. Simulacije nagoveštavaju da bi se povećanjem pritiska mogla dostići efikasnost N₂ trapa čak i za veoma široke energijske raspodele. Ipak, za najvišu vrednost pritiska CF₄ koja je isprobana, gde simulacija predviđa 1/3 od broja pozitrona koji se inače meri, nije primećeno trapovanje.

Kako bismo ispitali slabljenje snopa usled interakcije sa CF₄, deo pozitrona koji prođe kroz trap je snimljen pomoću NaI detektora, postavljenog na izlazu trapa (videti sliku 5.12) dok su sve elektrode uzemljene. Intenzitet je snimljen u funkciji energije snopa (prednapon izvora) za različite pritiske gasa u prvom stepenu, što je prikazano na slici 5.15. Merenja izvršena bez gasa, pokazuju da postoji minimalna energija (~20 eV) koja je potrebna da se efikasno transportuje snop od izvora do trapa. Kada se doda gas, vidimo veliko slabljenje intenziteta snopa. Ipak, očigledno je iz rezultata da slabljenje koincidira sa očekivanim pragom za formiranje pozitronijuma (~9.45 eV). Navedeni pritisci su mereni u trećem stepenu trapa, iznad krio-pumpe, dok vrednost pritiska u prvom stepenu mora biti procenjena iz diferencijalnog pumpanja između dva ventila i geometrije trapa. Procenjeno je da je mereni pritisak ~500 puta manji od pritiska u prvom stepenu.

Na slici 5.15 su dati i rezultati simulacije slabljenja pozitronskog snopa, kada je dodat gas u trap, za dva različita pritiska. U simulaciji, gubici su posledica rasejanja unazad, transporta na zidove, ili procesa formiranja pozitronijuma. Simulacija bez gasa je normalizovana na odgovarajuće izmerene vrednosti. Pretpostavljajući uniformno diferencijalno rasejanje, pomoću simulacije, odredili smo vrednosti pritiska koje daju dobar fit (pune linije) za podatke na niskim vrednostima prednapona izvora gde su dominantni gubici rasejanje unazad i gubici na zidovima. Pritisci dobijeni na takav način (0.5 *mTorr* i 1.5 *mTorr*) su manji od vrednosti očekvanih (1.1 *mTorr* i 3 *mTorr*) na osnovu faktora skaliranja 500 koji je procenjen iz diferencijalnog pumpanja, što ukazuje da je rasejanje moguće više usmereno unapred nego što je pretpostavljeno.

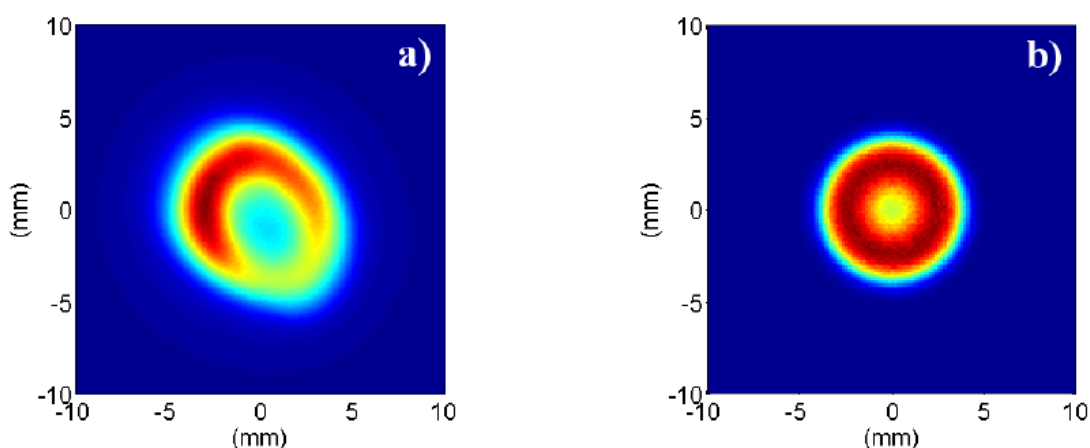


Slika 5.15 Izmereni transport snopa kroz uzemljene elektrode trapa bez i sa CF_4 na pritisku prikazanom u legendi. Pune linje predstavljaju simulacije transporta koristeći set preseka opisan u poglavlju 3. Isprekidane linije predstavljaju simulacije transporta u kojima je presek za formiranje Ps uvećan tri puta.

U oformljenom setu preseka samo totalni presek i presek za jonizaciju su mereni na visokim energijama (npr. preko 10 eV), dok je presek za formiranje Ps aproksimiran argonskim, uz pomeranje po energiji za razliku vrednosti energija praga. Loše slaganje simulacija i eksperimenta na energijama preko $\sim 10 \text{ eV}$ nagoveštava da simulirani gubici usled formiranja pozitronijuma nisu dovoljno jaki. Slika 5.15 prikazuje simulacije (isprekidana linija) u kojima je presek za formiranje pozitronijuma uvećan tri puta, koje se mnogo bolje poklapaju sa merenjima.

Jasno je i iz eksperimenata i iz simulacija, da je transport snopa unutar trapa na niskim vrednostima prednapona izvora daleko lošiji na energijama koje su potrebne za trapovanje na CF_4 ($\sim 2 \text{ eV}$) nego na standardnim naponima koji se koriste, usled razlike u jačini magnetskog polja. Dodatak gasa dalje pogoršava punjenje trapa slabeći snop kroz proces rasejanja unazad.

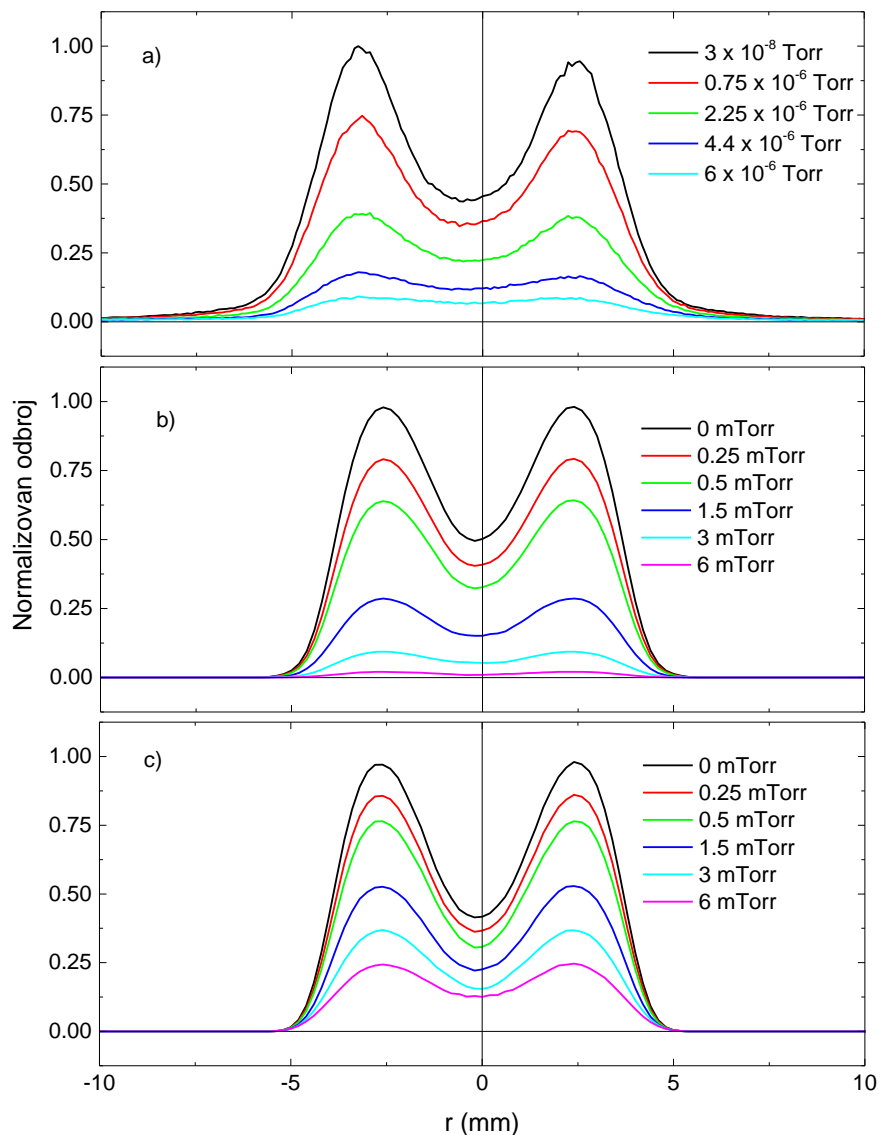
Prostorni profil direktno sprovedenog snopa je snimljen mikrokanalnim pločastim detektorom (*eng. microchannel plate detector*) i CCD kamerom. Snimljeni profil se razlikuje od uniformnog snopa koji je korišćen u simulacijama u odeljku 5.3, što je prikazano na slici 5.16 (a). Ovo je posledica kupaste geometrije supstrata moderatora, što daje snop toroidalnog profila spoljnog prečnika ~ 8 mm (Cooper et al. 2015). Izmereni profil snopa je blago iskrivljen usled nesavršenosti u poravnanju solenoida koji daju magnetsko polje u trapu i izvan trapa. Ne smatramo da je iskrivljenje na slici reprezent realnog izgleda snopa u samom trapu pa je u simulaciji pretpostavljen idealan toroidalni profil (slika 5.16(b)).



Slika 5.16 2D profil izmerenog (a) i simuliranog (b) direktno sprovedenog snopa. Nesavršenost u izmerenom profilu je posledica poravnanja magnetskog polja između oblasti trapa i detektora.

Usled široke raspodele paralelne energije snopa (slika 5.13) nije bilo moguće uraditi ova merenja sa potencijalom elektroda konfigurisanim za trapovanje sa CF_4 , jer ovakav potencijal reflektuje najveći deo snopa. Umesto toga, prednapon izvora i ulazna elektroda su postavljene na potencijal 50 V i 39 V respektivno, tako da proces formiranja pozitronijuma nije izbegnut. Koristeći dijagonalu $x=y$, sa slike 5.16, snimljeni su linijski profili prostorne raspodele za različite pritiske CF_4 što je prikazano na slici 5.17(a); odgovarajuće simulacije (koje koriste identične potencijale elektroda) su prikazane na slici 5.17(b). Simulacije na slici 5.17(c) odgovaraju naponima izvora i ulazne elektrode od 41 i

39 V respektivno, što su naponi koji odgovaraju trapovanju pomoću CF_4 . Sva merenja i simulacije su normalizovane na odgovarajuće vrednosti u uslovima bez gasa.



Slika 5.17 Izmeren (a) i simuliran (b,c) linijski profil direktno sprovedenog pozitronskog snopa za različite pritiske CF_4 u prvom stepenu. U (a) i (b), potencijali izvor/ulazne elektrode iznose 50/39 V dok su ostale elektrode podešene za trapovanje na CF_4 (slično kao na slici 5.2). U (c) potencijali izvor/ulazne elektrode su 41/39 V što je pogodno za trapovanje pomoću CF_4 .

I u merenjima i u simulacijama, vidimo značajan gubitak intenziteta snopa, i inicijalni profil se pretvara u unifomniju raspodelu. Centralni region se ispunjava kako se povećava pritisak gasa, ali ukupna širina snopa se ne povećava. Simulacije na najvišem pritisku (slika 5.17(b)), gde je skoro kompletan snop izgubljen (preko 97%), otkrivaju da je 73% gubitaka usled formiranja pozitronijuma, 20% su rasejani unazad preko ulazne elektrode, a manje od 7% ih je rasejano u zidove elektroda. Simulacije za energiju dolaznog snopa od 11 eV se dobro slažu sa merenim podacima, koristeći faktor skaliranja pritiska 500. Korišćenje snopa koji ima više Gausijanski prostorni profil bi smanjilo rasejanje ka zidovima. Toroidalni profil je rezultat specifičnog dizajna moderatora, koji se koristi zato što konični supstrat daje bolju efikasnost (Khatri et al. 1990). Sa druge strane, moguće je zamrznuti neon direktno na kapsulu ^{22}Na izvora, uz blago smanjenje intenziteta snopa.

Takođe su urađene simulacije koristeći konfiguraciju elektroda (izvor/ulazna elektroda na 41/39 V) koja je optimalna za CF_4 trap i ti rezultati su prikazani na slici 5.17(c). Ove simulacije odgovaraju tačkama na grafiku 5.15 za vrednosti prednapona izvora ispod 8 V. U ovom slučaju, nalazimo da je pad intenziteta (u odnosu na simulaciju bez gasa) usled povećanja pritiska skoro potpuno uzrokovan rasejanjem u prvom segmentu. Na pritisku od 6 mTorr koji je potreban za efikasno trapovanje, ukupni gubici su skoro 70% originalnog intenziteta snopa, a 85% tih gubitaka su pozitroni rasejani unazad, dok je ostalih 15% rasejano na zidove. Prečnik snopa od 8 mm je blizak prečniku elektrode prvog stepena od 10 mm, što povećava verovatnoću da će rasejanje u prvom stepenu dovesti do gubitaka na zidovima elektroda. Ova simulacija, koja isključuje proces formiranja pozitronijuma, ukazuje da visok pritisak CF_4 koji je potreban za efikasan gubitak energije pozitrona, dovodi do dodatnih gubitaka kada je geometrija elektroda prilagođena za trapovanje pomoću N_2 .

5.5 Zaključak

Predložili smo model pozitronskog trapa koji kao primarni gas za trapovanje koristi CF_4 . Ideja iza modela je konceptualno jednostavna, trapovati čestice koristeći vibracione eksitacije CF_4 molekula umesto elektronskih eksitacija N_2 i time izbeći gubitke usled proces formiranja pozitronijuma. Implementacija ove ideje je donekle otežana činjenicom da je energijski gubitak prilikom jedne vibracione pobude molekula CF_4 relativno mali (~ 160 meV) te da simulacije pokazuju da je za efikasno trapovanje potreban nekoliko puta veći pritisak nego kod standardnih Surko trapova koji koriste N_2 . Takođe efikasnost trapovanja je vrlo osetljiva na širinu energijske raspodele dolaznog snopa pozitrona, znatno više nego kod standardnih trapova. Ipak, simulacije predviđaju da se primenom ovog pristupa mogu omogućiti efikasnosti trapovanja i do 60%. Ovo je značajno ako se uzme u obzir da je usled bliskosti preseka za elektronsku eksitaciju i proces formiranja pozitronijuma u N_2 efikasnost standardnih trapova ograničena na $\sim 25\%$.

Efikasnost CF_4 trapa će biti ograničena usled rasejanja unazad preko ulazne elektrode što je izraženo usled visokog pritiska koji je potreban za trapovanje. Ovaj efekat je očigledan sa slike 5.11 i ograničava efikasnost trapovanja na 45 - 75%. Druga eventualna ograničenja mogu se prevazići adekvatnim dizajniranjem naprave, optimizacijom pritiska gasa, radijusa elektroda i primenjenih napona. Rad realnog trapa će zavisiti i od osobina dolaznog snopa pozitrona u većoj meri nego što je to slučaj kod N_2 trapova i dizajn naprave to mora uzeti u obzir. Jedna od osobina postojećih trapova koja otežava redizajn i primenu sa CF_4 u prvom stepenu jeste to da je magnetsko polje u izvoru/moderatoru ~ 75 Gauss što je skoro sedam puta manje nego u samom trapu. To dovodi do toga da usled održanja magnetskog momenta deo aksijalne energije pozitrona pređe u transverzalnu prilikom ulaska pozitrona u trap ($\frac{E_{\perp}}{B} = \text{const}$). Time se efektivno deo aksijalne energijske raspodele pomera ka nižim energijama, a samim tim i širi, a široka energijska raspodela otežava podešavanje potencijala ulazne elektrode (slika 5.8). Postavljanje potencijala ulazne elektrode prenisko smanjuje efikasnost trapovanja jer pozitroni imaju više energije koju moraju da izgube, dok postavljanje potencijala ulazne elektrode previsoko dovodi do reflektovanja dela snopa sa nižim energijama.

Dakle, kako bi CF₄ trap radio efikasno, potrebno je da magnetsko polje u izvoru/moderatoru i samom trapu bude adekvatno usklađeno. Ovo se, generalno ne radi kod N₂ trapova iz prostog razloga što nije neophodno. Ovaj problem nije teško rešiti ukoliko se dizajnira novi sistem, ali prepravka postojećih trapova kako bi se koristili kao CF₄ trap bila bi veoma skupa. Ipak, u suštini to je problem inženjeringa trapa a ne fizičko ograničenje, dok su gubici kroz formiranje pozitronijuma u N₂ fizički proces koji se ne može zaobići.

Tabela 5.2. Procenjena ukupna efikasnost trapovanja za različite moderatore i simulirane efikasnosti trapovanja

Moderator & trap	ε_{mod} (%)	$\Delta E(eV)$	ε_{trap} (%)	ε_{total} (%)	e^+/s^a
Ne ^b & CF ₄ trap	0.7	1.5	~60	0.42	7.0×10^6
Ne ^b & N ₂ trap ^c	0.7	1.5	~20	0.14	2.3×10^6
W konus ^d & CF ₄ trap	0.15	75×10^{-3}	>90	0.135	2.2×10^6
W listići ^e & CF ₄ trap	0.07	75×10^{-3}	>90	0.063	1.0×10^6
W (100) folija ^f & CF ₄ trap	0.06	75×10^{-3}	>90	0.054	0.9×10^6
W konus ^d & N ₂ trap ^g	0.15	75×10^{-3}	~30	0.045	7.5×10^5
W folija ^h & CF ₄ trap	0.026	75×10^{-3}	>90	0.0234	3.9×10^5

^a Procenjen broj trapovanih pozitrona po sekundi za pretpostavljeni Na²² izvor pozitrona jačine 50mCi

^b Mills and Gullikson, 1986

^c Surko and Greaves, 2004

^d Lynn et al. 1989

^e Dale et al. 1980

^f Lynn et al., 1985

^g Murphy and Surko, 1992

^h Gramsch et al. 1987

Čak i u napravi koja je savršeno dizajnirana za trapovanje sa CF₄, moguće je postići određeni napredak koristeći volframski moderator, koji daje znatno užu energijsku raspodelu (Shultz and Lynn, 1988, Fischer et al. 1986, Lynn et al. 1989) od neona. Na ovaj način, povećanje efikasnosti trapovanja, koje je posledica uže energijske raspodele, dolazi nauštrb intenziteta dolaznog snopa pa u razmatranju takve mogućnosti valja voditi računa o nekoliko parametara istovremeno. Simulacije pokazuju da se sa uskom energijskom raspodelom, koja je svojstvena volframskim moderatorima, mogu ostvariti efikasnosti i preko 90% (slika 5.9). Dodatno, volframski moderator ne zahtevaju kriogene temperature (koje su potrebne za čvrsti neon) pa su samim tim i daleko jeftiniji i lakši za implementaciju. U nekim slučajevima je poželjno smanjenje cene i kompleksnosti sistema, uz što veći broj trapovanih pozitrona u sekundi. U tabeli 5.2 data je procena ukupnog broja

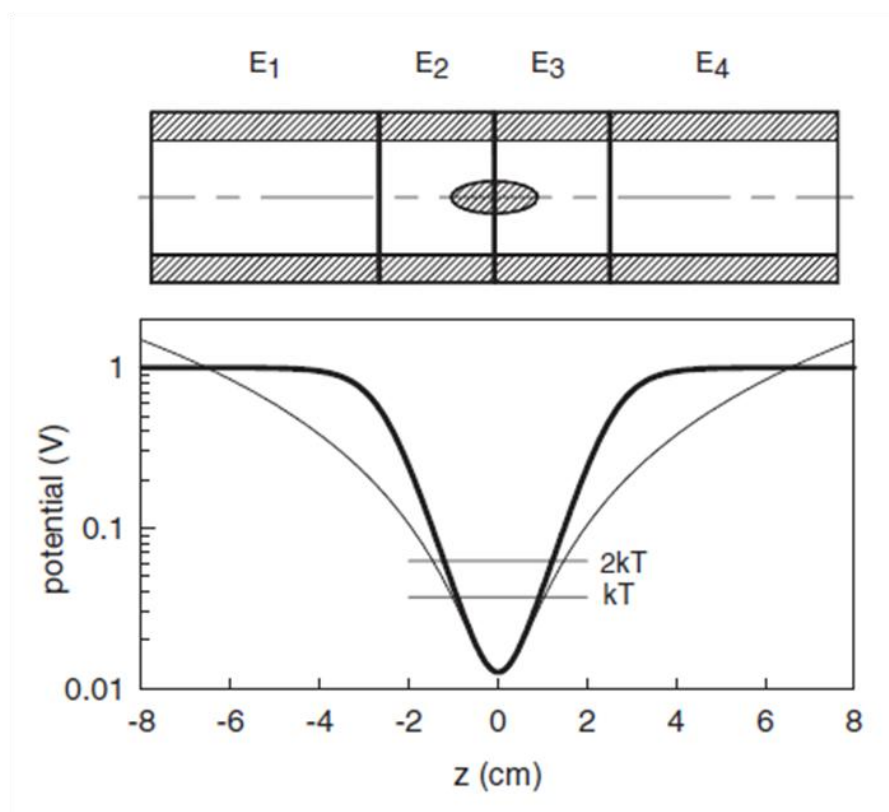
akumuliranih pozitrona u sekundi za različite kombinacije moderatora i vrste trapa, na osnovu vrednosti dostupnih u literaturi i rezultata simulacija prikazanih u ovom poglavlju. Vidimo da je u smislu maksimalnog broja akumuliranih pozitrona najbolji pristup CF₄ trapa sa neonskim moderatorom, ali da i sa volframskim moderatorom CF₄ trap može da ostvari performanse koje su na nivou standardnih N₂ trapova, ako i nešto slabije, ali sa značajnim uštedama pri konstrukciji moderatora.

Bez obzira da li se postignu optimalni uslovi u različitim konfiguracijama, jasno je da je predloženi Monte Carlo model Surko trapa najbolji način da se koncepti provere pre skupe izgradnje kao i da se postojeći uređaji optimizuju.

6. Kompresija snopa pozitrona rotirajućim električnim poljem

Nakon što su pozitroni akumulirani u trećem stepenu trapa, u najvećem broju eksperimenata poželjno je da izlazni snop pozitrona bude što uži, bilo da se radi o eksperimentima u kojima se mere preseki za binarne sudare (Sullivan et al. 2008) pa je poželjno da oblast interakcije bude što manja, ili npr. eksperimenti u kojima se meri Ps-Ps interakcija (Cooper et al. 2015), pa je poželjno da gustina pozitrona u snopu bude što veća. Tehnika koja se dugo primenjivala kod jednodimenzionalnih plazmi (Hollmann et al. 2000; Danielson et al. 2007) primenjena je i u slučaju pozitronskih plazmi (Greaves and Surko, 2002; Jørgensen et al. 2005). Ipak, realizovati napravu (trap) koja je u stanju da ostvari potrebnu gustinu čestica kako bi se formirala pozitronska plazma je prilično skup i težak zadatak. Pored efikasnog trapa, neophodno je obezbediti akumulator pod ultra visokim vakuumom, koji je u stanju da obezbedi dugo vreme života pozitrona, kao i efikasan način prebacivanja pozitrona iz trapa u akumulator (Surko and Greaves, 2003). Sa druge strane pozitronski trapovi skromnijih performansi (mahom dvostepeni) znatno su jednostavniji i jeftiniji za realizaciju, jer ne zahtevaju tako visok vakuum. Ipak, pokazalo se da kompresija snopa pozitrona rotirajućim električnim poljem može da da rezultat čak i kada gustina pozitrona nije dovoljna da se formira plazma. Prvi put efekat je primećen u radu Kesidija i saradnika (Cassidy et al. 2006) gde je primećena značajno brža kompresija (~10 ms) kada je broj čestica daleko ispod plazma limita, u odnosu na kompresiju u plazma režimu gde kompresija snopa traje nekoliko sekundi. Nedugo zatim Grivs i Moxom (Greaves and Moxom, 2008) su napravili detaljnu studiju efekta kompresije pozitronskog snopa rotirajućim električnim poljem u tzv. "jednočestičnom" režimu, za različite primenjene napone odnosno jačinu električnog polja, magnetskog polja i frekvence rotirajućeg polja ali nisu definitivno utvrdili poreklo efekta kompresije. Ipak, jesu utvrđeni uslovi u kojima dolazi do kompresije. Utvrđeno je da je kompresija moguća jedino ako je rotirajuće polje primenjeno asimetrično na roj termalizovanih pozitrona (samo elektroda E_3 je segmentirana i napajana naizmeničnim signalom koji stvara rotirajuće polje, slika 6.1) i ako pozadinski gas ima izražene vibracione gubitke (Greaves and Surko, 2000) kao na primer SF_6 (koji se najčešće koristi), CF_4 ili CO_2 . Kompresija je prikazana korišćenjem i dipolnog i

kvadrupolnog rotirajućeg polja, bez značajne razlike u kvalitativnim osobinama procesa kompresije.



Slika 6.1 (Gore) Šematski prikaz strukture elektroda, sa prikazane dve krajnje elektrode E_1 i E_4 , dve prstenaste elektrode E_2 i E_3 . Elektroda E_3 je azimutalno segmentirana, kako bi se pogodno fazno pomerenim signalima ostvarilo rotirajuće električno polje. (Dole) Deblja linija predstavlja izračunato elektrostatičko polje duž ose cilindra za dubinu potencijala 1V. Tanka linija predstavlja fit kvadratnim potencijalom blizu centra potencijalne jame. Termalni pozitroni su konfinirani na dnu potencijalne jame ($\varphi < 2kT$) gde je potencijal približno harmoničan. Slika je preuzeta iz (Greaves and Moxom, 2008)

Sledeći pokušaj da se objasni poreklo efekta kompresije u jednočestičnom režimu bio je teorijski rad Izaka i saradnika (Isaac et al. 2011) u kojem su merenja brzine kompresije fitovana prikazanim teorijskim opisom. Ovaj rad se odvijao paralelno sa našim bavljenjem ovom tematikom. Problem sa teorijom Izaka i saradnika jeste što kompletnu interakciju pozitrona sa pozadinskim gasom opisuje preko koeficijenta viskoznog otpora, ne razlikujući različite sudarne procese, posebno ne neelastične procese. Takođe, pomenuti

koeficijent se koristi kao faktor za fitovanje, pri čemu se fitovana vrednost značajno razlikuje u različitim uslovima kompresije i pri različitim primenjenim naponima. Istovremeno, nije obraćana pažnja da li se vrednost viskoznosti za koju se postiže najbolje fitovanje slaže ili, značajno odstupa od vrednosti koje su očekivane za korišćene pritiske gasova i energiju čestica (iz teorije rojeva, poznato je da viskozni koeficijent odgovara kolizionoj frekvenci). Jednostavnom proverom vidi se da koeficijent viskoznosti u ovome radu odstupa i nekoliko redova veličine od realnih, merenih vrednosti (za elektrone) odnosno proračunatih vrednosti i za elektrone i za pozitrone. Ipak u pomenutom radu dat je analitički opis električnog i magnetskog polja koji su potrebni da bi se postigao efekat kompresije. U tom smislu rad prikazan u ovoj disertaciji se naslanja na rad Izaka i saradnika (Isaac et al. 2011) gde je preuzeta zavisnost električnog i magnetskog polja, dok su sudarni procesi modelovani pomoću već prikazanog, standardnog Monte Karlo pristupa bez ikakvih aproksimacija i fitovanja, pomoću prethodno kompletiranih setova, pretežno merenih, sudarnih preseka. Iako su i Izak i saradnici, kao i Grivs i Moksom (Isaac et al. 2011; Greaves and Moxom, 2008) u svojim analizama i eksperimentima koristili SF₆ kao pozadinski gas, u literaturi ne postoji dovoljno podataka o sudarnim procesima pozitrona sa SF₆ kako bi se napravio kompletan set. Stoga je u našim simulacijama za pozadinski gas korišćen CF₄, za koji je prikazan kompletan set preseka, a koji je takođe demonstrirao mogućnost kompresije (Greaves and Surko, 2000).

6.1 Opis električnog i magnetskog polja i rešavanje trajektorije čestice

Kako je prethodno navedeno, prateći opis polja Izaka i saradnika (Isaac et al. 2011), pretpostavili smo asimetrično, dipolno, rotirajuće električno polje, superponirano na statički potencijal idealnog Peningovog trapa i aksijalno primenjeno magnetsko polje. Jednačina koja daje oblik električnog potencijala ima oblik:

$$V(r, z, t, \theta) = \frac{m \omega_z^2}{q} \frac{z^2}{2} \left(z^2 - \frac{r^2}{2} \right) + V_r \frac{r}{r_0} \frac{z}{z_0} \cos(\theta + \omega_r t) \quad (6.1)$$

gde je ω_z ugaona frekvencija aksijalnih oscilacija u harmonijskom potencijalu, V_r je potencijal primenjen na segmentiranu elektrodu, a r_0 i z_0 su geometrijski faktori, koji zavise

od dimenzija elektroda. ω_r je ugaona učestanost rotacije električnog polja. Ovakav oblik potencijala, zajedno sa aksijalnim magnetskim poljem daje sledeće jednačine kretanja za naelektrisanu česticu:

$$\begin{aligned}\ddot{x} &= \frac{\omega_z^2}{2}x - az\cos(\omega_r t) + \Omega\dot{y} \\ \ddot{y} &= \frac{\omega_z^2}{2}y + az\sin(\omega_r t) + \Omega\dot{x}\end{aligned}\tag{6.2}$$

$$\ddot{z} = -\omega_z^2 z - a(x\cos(\omega_r t) + y\sin(\omega_r t))$$

gde konstanta a skraćeni zapis $a = \frac{q}{m}V_r \frac{1}{r_0 z_0}$, a $\Omega = \frac{qB}{m}$ ciklotronsta frekvencija pozitrona u magnetskom polju. Ukoliko sistem posmatramo iz rotirajućeg referentnog sistema i zamenimo:

$$\begin{aligned}x &= \alpha\cos(\omega_r t) + \beta\sin(\omega_r t) \\ y &= \beta\cos(\omega_r t) - \alpha\sin(\omega_r t)\end{aligned}\tag{6.3}$$

dobija se sistem jednačina koji ima analitička rešenja. Zarad bolje čitljivosti, uvešće se nekoliko konstanti:

$$\begin{aligned}b &= \frac{\omega_z^2}{2} - \omega_r\Omega + \omega_r^2 \\ c &= \omega_z^2 \\ d &= \Omega - 2\omega_r\end{aligned}\tag{6.4}$$

Korišćenjem smena iz (6.4), i transformacije (6.3) u jednačini (6.2) dobija se sistem jednačina:

$$\begin{aligned}\ddot{\alpha} &= b\alpha + d\dot{\beta} - az \\ \ddot{\beta} &= -d\dot{\alpha} + d\beta \\ \ddot{z} &= -a\alpha - cz\end{aligned}\tag{6.5}$$

Ovakav sistem je linearan, i može se iskazati u formi:

$$\dot{X} = M \cdot X\tag{6.6}$$

Odnosno eksplicitno:

$$\begin{bmatrix} \dot{\alpha} \\ \dot{\beta} \\ \dot{z} \\ \ddot{\alpha} \\ \ddot{\beta} \\ \ddot{z} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ b & 0 & -a & 0 & d & 0 \\ 0 & b & 0 & -d & 0 & 0 \\ -a & 0 & -c & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \alpha \\ \beta \\ z \\ \dot{\alpha} \\ \dot{\beta} \\ \dot{z} \end{bmatrix} \quad (6.7)$$

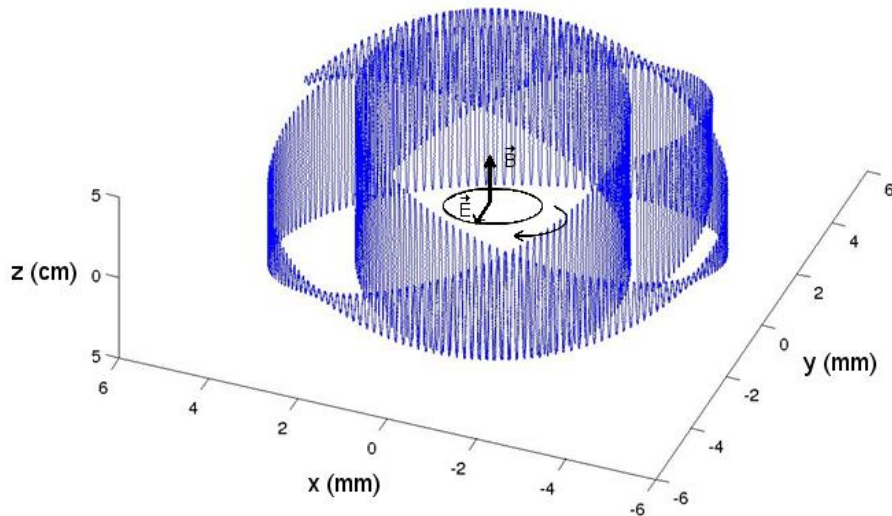
Sopstvene vrednosti ovakvog sistema, date su jednačinom:

$$\lambda^6 + \lambda^4(d^2 + c - 2b) + \lambda^2(-a^2 + b^2 - 2bc + cd^2) - (b^2c + a^2b) = 0 \quad (6.8)$$

koja ima šest korena $\lambda_{1..6}$ koji se mogu odrediti nekim od numeričkih paketa za linearnu algebru (u kodu je korišćena otvorena biblioteka GNU Scientific Library - GSL za C++ kompajler). Konačno, rešenje za jednačine kretanja ima oblik:

$$\varphi = \sum_{i=1}^6 C_{\varphi i} e^{\lambda_i t}; \quad \varphi \in \{\alpha, \beta, z\} \quad (6.9)$$

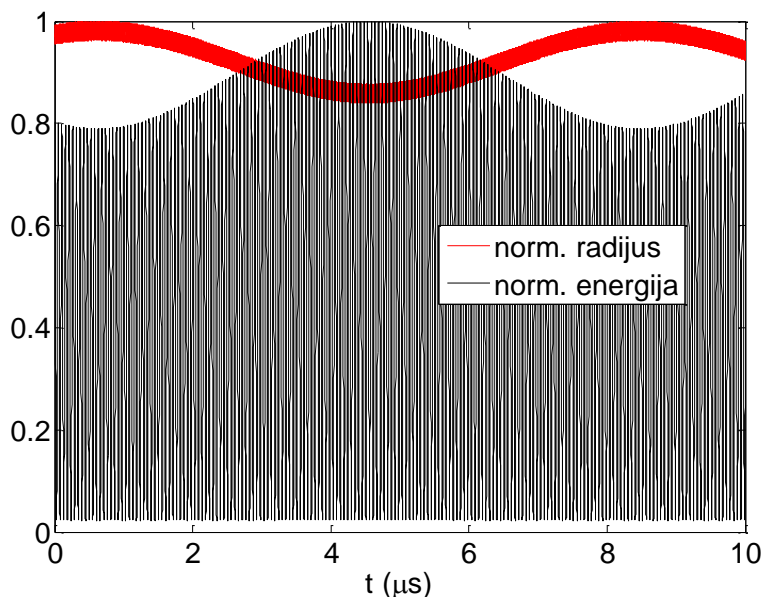
Konstante $C_{\varphi i}$ se mogu odrediti iz početnih uslova korišćenjem solvera iz standardnih numeričkih biblioteka. Za realne, odnosno uslove koji postoje u eksperimentu sve sopstvene vrednosti su imaginarne što kao rezultat ima kompleksno oscilatorno kretanje poput onog prikazano na slici 6.2 u zavisnosti od uslova.



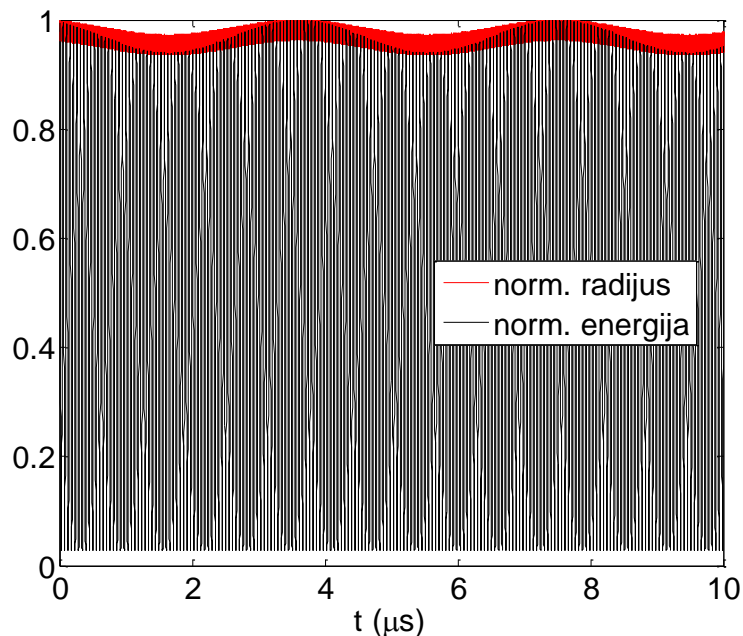
Slika 6.2 Primer trajektorije pozitrona u rotirajućem električnom polju. Smer magnetskog polja, i rotirajućeg električnog polja je ilustrovan odgovarajućim vektorima.

Analizirajući orbite čestica u uslovima rezonance (učestanost rotirajućeg polja je bliska učestanosti aksijalnih oscilacija čestice u harmonijskom potencijalu, $\omega_r \approx \omega_z$) za ko-rotirajući odnosno kontra-rotirajući režim možemo objasniti poreklo efekta kompresije. Kažemo da je režim korotirajući, kada se smer rotacije električnog polja poklapa sa smerom rotacije pozitrona u ciklotronskom kretanju oko linija magnetskog polja. U eksperimentima je pokazano (Greaves and Moxom, 2008) da se kompresija postiže samo u ko-rotirajućem režimu, blizu rezonantnih učestanosti, dok promena smera rotacije električnog polja dovodi do nagle ekspanzije. Na slici 6.3 prikazani su rastojanje čestice od ose i ukupna kinetička energija čestice. Obe veličine su normirane. Konkretno vrednosti energije, i pozicije čestice će zavisiti od zadatih početnih uslova, jačine primenjenog električnog polja, odnosno napona V_r i geometrijskih parametara r_0 i z_0 (jednačina (6.1)) ali ono što ostaje nepromenjeno, jeste struktura trajektorije koja je prikazana na slici 6.3. Prva upečatljiva karakteristika jeste oscilatorno kretanje čija frekvencija po redu veličine odgovara frekvenciji aksijalnih oscilacija (\sim MHz) pri čemu maksimumu rastojanja od ose odgovaraju (crvena linija) tačke u kojima važi $z = 0$. Sa istom frekvencom osciluje i envelopea ukupne kinetičke energije pozitrona, ali u okviru jednog perioda envelope, sama energija osciluje sa mnogo većom frekvencijom (\sim 1GHz). Ono što je upadljivo jeste da se maksimum envelope energije poklapa sa minimumom rastojanja od ose i obrnuto minimum envelope energija koincidira sa maksimumom rastojanja od ose (slika 6.3). To sugeriše da je efekat kompresije posledica *rezonantnog asimetričnog transporta*, odnosno činjenice da kako je na većoj energiji, koliziona frekvenca veća (po pravilu; izuzetak su slučajevi sa naglim padom u totalnom preseku, ili preseci na veoma visokim energijama) povećava se verovatnoća da se dogodi sudar bliže osi. Ukoliko je sudar neelastičan pozitron će izgubiti deo energije, i samim tim se prebaciti na nižu orbitu. Na slici 6.4 prikazani su isti parametri trajektorije, ali za slučaj kontra-rotirajućeg električnog polja, za koje eksperiment demonstrira ekspanziju roja pozitrona. Kako u ovom slučaju, maksimum envelope ukupne kinetičke energije odgovara maksimumu rastojanja od ose, za očekivati je da u sudarima na višim energijama pozitroni pređu na višu orbitu, odnosno da se kroz uzastopne sudare postepeno udaljavaju od ose. U simulacijama koje su prikazane u kasnijem poglavlju,

ovakvo ponašanje je demonstrirano kroz kompresiju, za slučaj ko-rotirajućeg polja odnosno brzu ekspanziju za slučaj kontra-rotirajućeg polja.

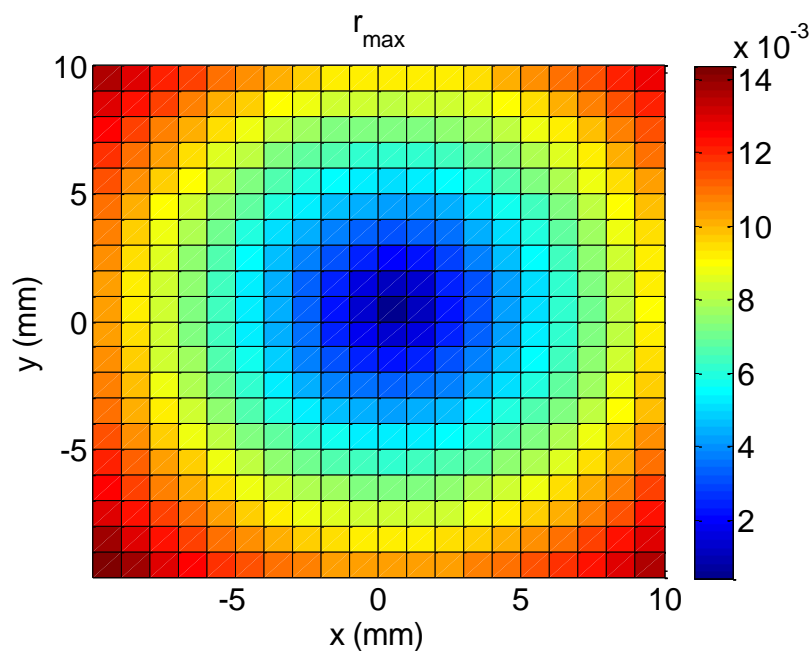


Slika 6.3 Normirane vrednosti rastojanja od ose (crvena linija), i energije čestice (crna linija) za rezonantne uslove kada je učestanost rotirajućeg polja približno jednaka frekvenci aksijalnih oscilacija u ko-rotirajućem režimu.

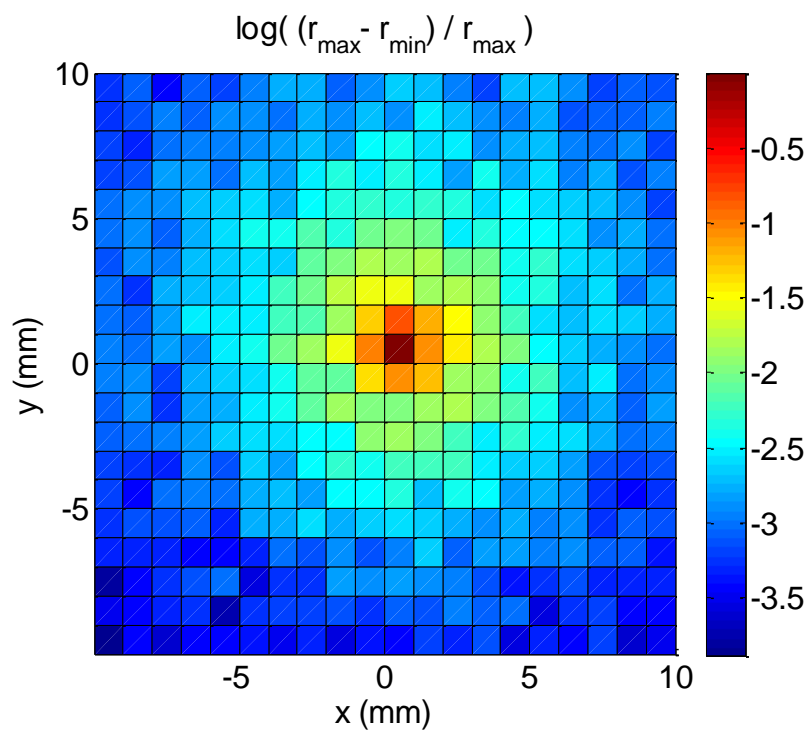


Slika 6.4 Normirane vrednosti rastojanja od ose (crvena linija), i energije čestice (crna linija) za rezonantne uslove kada je učestanost rotirajućeg polja približno jednaka frekvenci aksijalnih oscilacija u kontra-rotirajućem režimu

Na slici 6.5 prikazano je kako se maksimalno rastojanje od ose menja u zavisnosti od početnih koordinata (x,y) , dok je početna brzina dodeljena nasumično iz termalne raspodele na 300K. Iste osobine pokazuje i slučaj kada čestice imaju i značajno veću energiju od termalne. Primetno je da čestice, čije orbite kreću bliže osi, imaju manje maksimalno rastojanje od čestica koje kreću dalje od ose. U isto vreme rastojanje od ose u okviru oscilacija (kao na slici 6.3) osciluje sa značajno većom amplitudom što je čestica bliža osi, što se može videti na slici 6.6 gde je prikazan logaritam relativne amplitude odnosno veličina $\log\left(\frac{r_{max}-r_{min}}{r_{max}}\right)$. Činjenica da je u centru, odnosno blizu ose, ova veličina bliska nuli, znači da je minimalno rastojanje od ose približno nuli, odnosno da je amplituda oscilacija maksimalna. Što je veća amplituda ovih oscilacija, verovatnoća da čestica nakon sudara pređe na nižu orbitu, odnosno ima manje maksimalno rastojanje od ose, je veća. Na taj način su zapravo čestice u blizini ose trapovane, a čestice dalje od ose, iz sudara u sudar prilaze bliže osi. Pri svakom sudaru čestica se može rasejati u različitim pravcima, i sa različitim brzinama, a i trenutak sudara može biti "nepovoljan" odnosno u delu trajektorije koji odgovara maksimumu rastojanja od ose, ali verovatnoća da se sudar dogodi u zoni minimuma rastojanja (i maksimuma energije) je veća. Samim tim, pozitroni se preferentno potiskuju ka osi. Za slike 6.3-6.6 parametri koji su korišćeni za proračun trajektorija su: $\omega_r = 59.6 \times 10^6 \frac{rad}{s}$; $\omega_z = 60.8 \times 10^6 \frac{rad}{s}$; $V_r = 0.5V$; $B = 0.03T$; $r_0 = 2.28cm$; $z_0 = 6cm$ koji su realni i u okviru uslova eksperimenata prikazanih u radovima Izaka i saradnika (Isaac et al. 2011), kao i Grivsa i Moksoma (Greaves and Moxom, 2008) u kojima je kompresija ostvarena u jednočestičnom režimu.



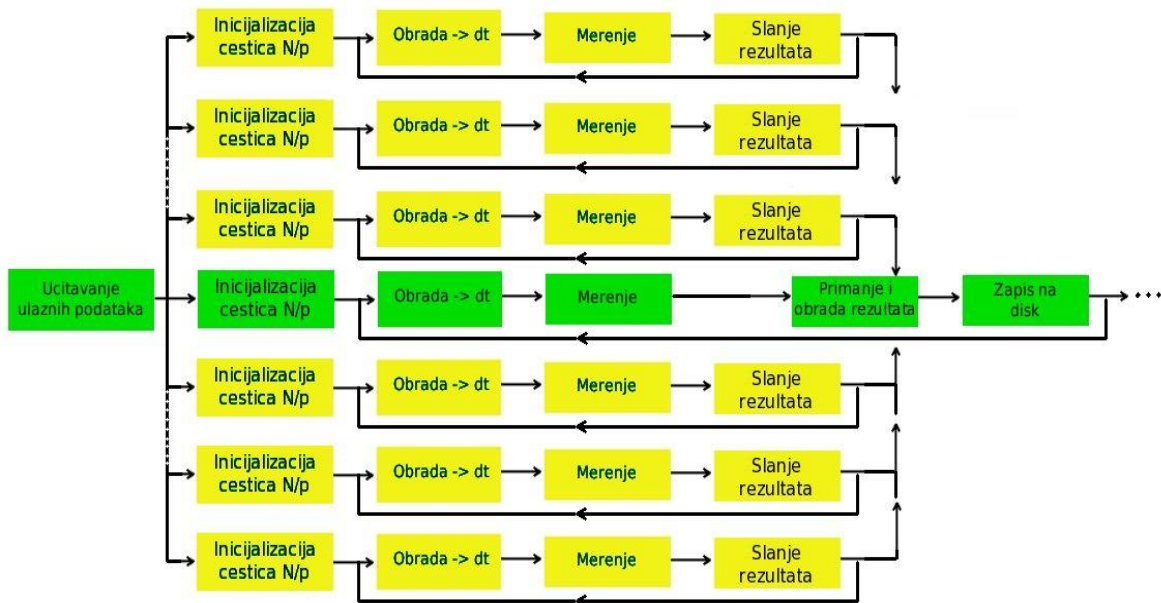
Slika 6.5 Maksimalno rastojanje od ose, za različite početne uslove x_0, y_0 mapirane na x-y mreži. Čestice za različite trajektorije su inicirane sa nasumičnim brzinama iz termalne raspodele na 300K.



Slika 6.6 Logaritam relativne amplitude oscilacija rastojanja čestice od ose, za trajektorije započete za različite početne uslove x_0, y_0 i početnim brzinama odabranim nasumično iz termalne raspodele na 300K.

6.2 Simulacija transporta u uslovima rotirajućeg električnog polja

Na opisani način analitički je rešeno kretanje čestica između dva sudara. Ipak, kako rotirajuće polje (u zavisnosti od uslova) zagreva čestice i energija (tj. brzina) čestice znatno osciluje, vremenski korak za integraciju kolizijske frekvence zavisi i mora biti značajno manji od karakterističnog perioda najbržeg oscilatornog kretanja što za uslove eksperimenta iznosi ~ 1 ns. Usvojena vrednost, odnosno dovoljno mali vremenski korak, za koji rezultati konvergiraju je 1 ps. Istovremeno, izbegnuto je nagomilavanje numeričke greške, pošto se od sudara do sudara *sudarna suma*, odnosno pomenuti integral kolizijske frekvence, resetuje. Kako je vreme posle kojeg je vidljiv efekat kompresije nekoliko desetina milisekundi, potrebno je da svaka čestica u toku simulacije prođe kroz $\sim 10^{10}$ iteracija, a da bi se postigla dobra statistika, neophodno je pratiti hiljade čestica. Dakle jasno je da ovakva simulacija zahteva izuzetno dugačko vreme izvršavanja. Kako bismo obezbedili razumno vreme izvršavanja bilo je neophodno paralelizovati računarski kod kako bi se simulacija izvršavala istovremeno na većem broju procesora. Usled činjenice da su u Monte Karlo pristupu sve čestice posmatranog roja nezavisne, odnosno da kolektivne osobine roja čestica predstavljaju usrednjene osobine pojedinačnih čestica, dok pritom pojedinačne čestice ne utiču na ponašanje ostalih u roju, relativno je jednostavno podeliti posao između različitih procesora, tako što će svaki obrađivati nezavisan ansambl čestica. Zapravo Monte Karlo kodovi generalno su vrlo zahvalni kada je u pitanju paralelizacija, odnosno distribuirani proračun, jer je jednostavno "pravedno" raspodeliti teret. U našem slučaju svaki pojedinačan procesor obrađuje podjednak broj čestica i nakon jedne iteracije javlja stanje roja primarnom procesu radi obrade rezultata. Pošto je broj raspoređenih čestica jednak, svakom procesoru treba približno jednako vreme za obradu, te je vreme čekanja malo, odnosno stepen paralelizacije veliki. U praksi, najčešće je korišćeno 100 procesora, od kojih je svaki obrađivao 100 različitih čestica. Za realizaciju paralelnog koda korišćen je Message Passing Interface (MPI) implementiran u C++ jeziku.



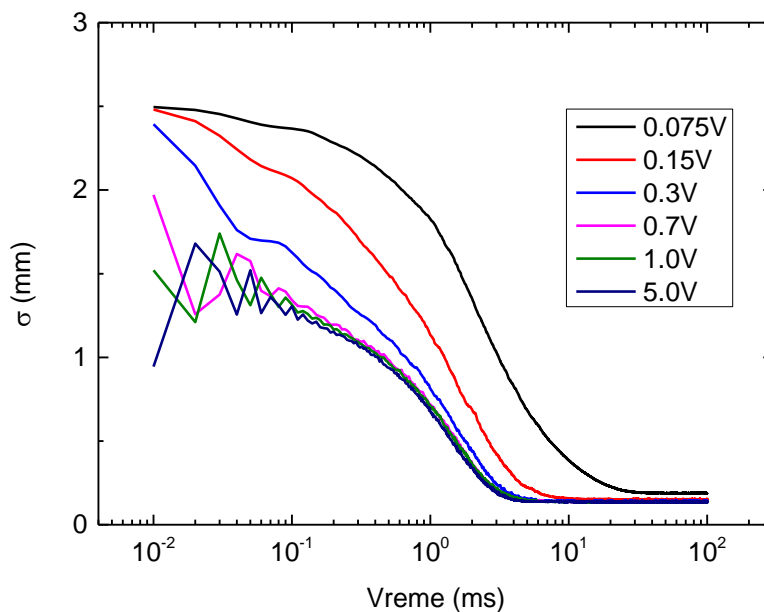
Slika 6.7 Šematski prikaz paralelizacije Monte Carlo simulacije

6.3 Rezultati simulacija

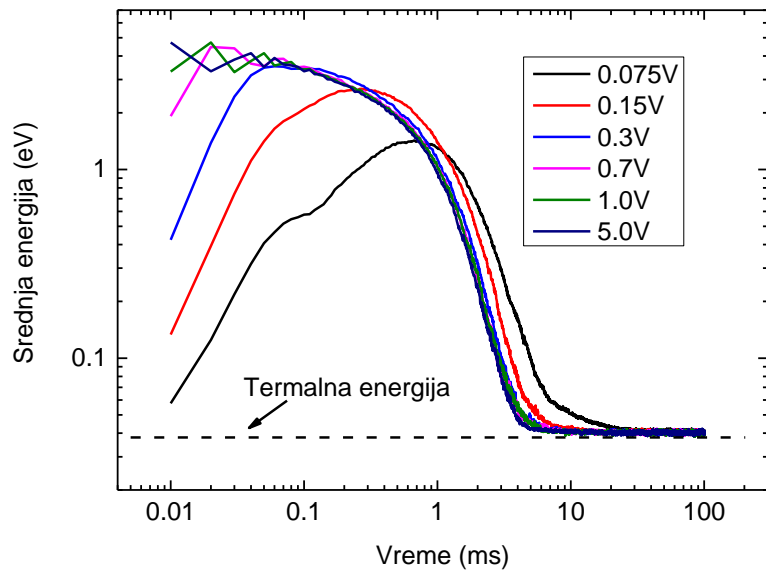
Parametri simulacije su odabrani kako bi što bolje odgovarali uslovima eksperimenta Izaka i saradnika (Isaac et al. 2011), ne samo kako bi se koristile realne vrednosti već i kako bi se mogla napraviti direktna poređenja sa eksperimentom. Ipak, očekivana su određena kvantitativna neslaganja pošto se pozadinski gas u simulacijama (CF_4) razlikuje od gasa korišćenog u eksperimentu (SF_6 za koji jednostavno nema dovoljno podataka da bi se ostvarila simulacija). Pomenuti parametri koji se ponavljaju u simulacijama su: $\omega_z = 59.6 \times 10^6 \frac{\text{rad}}{\text{s}}$; $B = 0.025T$; $r_0 = 2.8\text{cm}$; $z_0 = 6\text{cm}$. U trenutku inicijalizacije, širina roja je $\sigma = 2.5\text{mm}$.

Testirali smo postojanje kompresije za različite vrednosti primenjenog napona V_r i frekvencijom rotacije vektora rotirajućeg polja u blizini ω_z , frekvencije aksijalnih oscilacija sa vrednošću $\omega_r = 60.8 \times 10^6 \text{s}^{-1}$. Na slici 6.8 prikazana je simulirana vremenska zavisnost širine oblaka pozitrona u vremenu, u zavisnosti od primenjenog napona na segmentirane elektrode. Kao što je očekivano i primećeno u eksperimentu, povećavanje

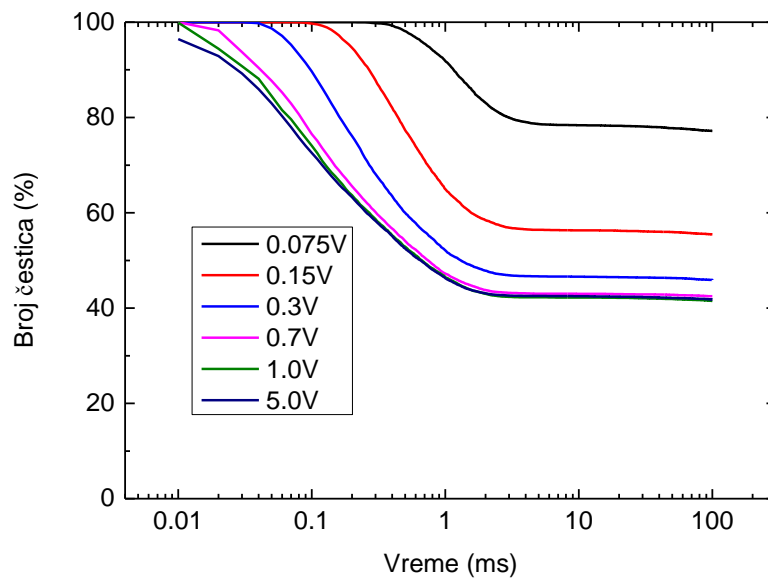
primenjenog napona povećava brzinu kompresije, pri čemu čak i jako mali primenjeni napon od 150mV dovodi do kompresije u na vremenskoj skali koja je primenjiva u eksperimentima, odnosno trapovima sa vremenima akumulacije od 0.5s . Na slici 6.9 prikazana je srednja energija roja pozitrona u toku kompresije, za različite vrednosti napona na segmentiranoj elektrodi, odnosno različite jačine električnog polja. Kako je na početku simulacije svaki roj inicijalizovan sa istom, termalnom energijskom raspodelom, evidentno je da primenjeno rotirajuće električno polje inicijalno zagreva roj. U zavisnosti od primenjenog napona, roj se može zagrejati i do srednje energije od nekoliko eV. Samim tim deo čestica ima dovoljnu energiju da u interakciji sa molekulima pozadinskog gasa (CF_4) formira pozitronijum i izgubi se iz roja. Ovo je prikazano na slici 6.10 koja prikazuje broj čestica u roju u toku kompresije gde se jasno pokazuje da usled jačeg primenjenog električnog polja dolazi do gubitka čestica usled procesa formiranja pozitronijuma, i to u inicijalnom delu kompresije, gde čestice dobijaju energiju. Nakon nekoliko milisekundi, srednja energija opada, odnosno roj počinje da ulazi u ravnotežu sa poljem (energija koju čestice dobijaju od polja se izjednačava sa energijom koju čestice predaju kroz sudare) i srednja energija roja opada, odnosno pojedinačni pozitroni više nemaju energiju dovoljnu da formiraju pozitronijum na molekulima CF_4 .



Slika 6.8 Širina oblaka pozitrona u vremenu za različite vrednosti primenjenog napona na segmentiranu elektrodu



Slika 6.9 Srednja energija čestica tokom kompresije, za različite vrednosti primenjenog napona na segmentiranu elektrodu. Na početku simulacije roj pozitrona ima termalnu raspodelu energija koja odgovara sobnoj temperaturi.

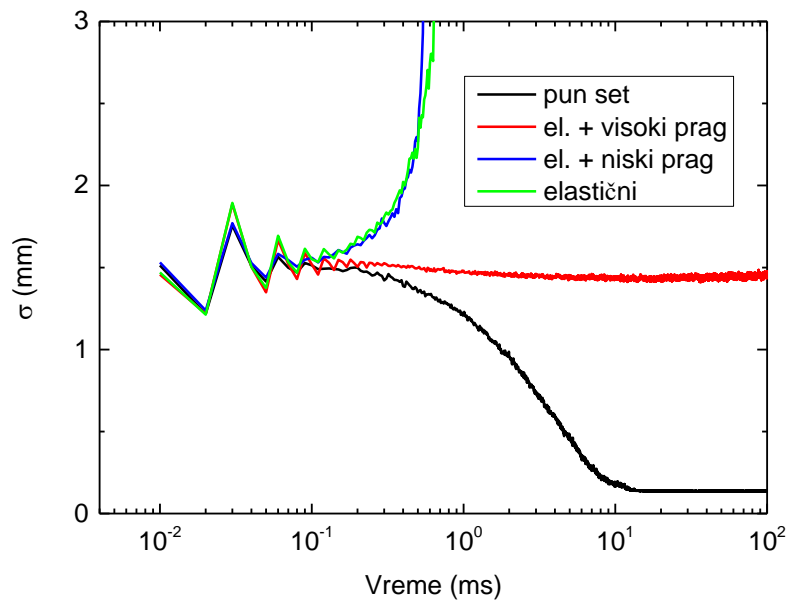


Slika 6.10 Broj čestica tokom kompresije, za različite vrednosti primenjenog napona na segmentiranu elektrodu.

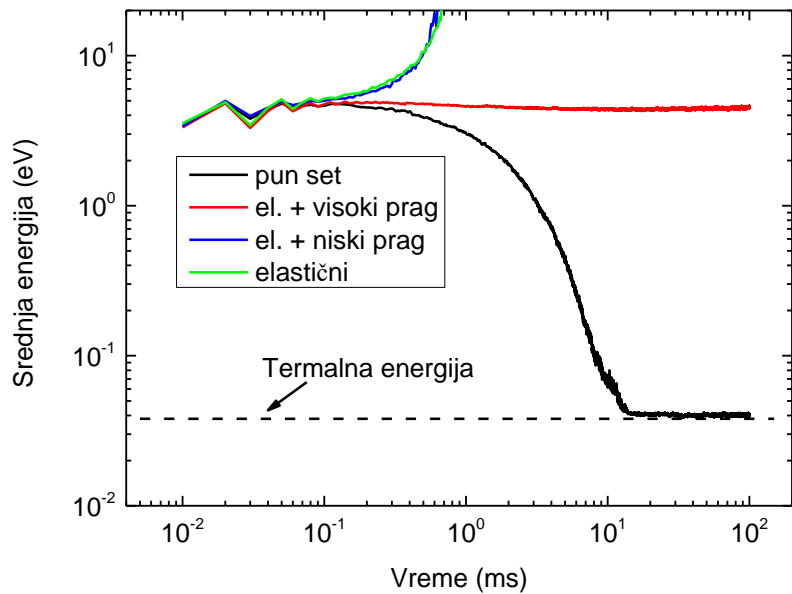
Kako bi se ispitalo koji sudarni procesi su odgovorni, odnosno neophodni i imaju značajniju ulogu u procesu kompresije u jednočestičnom režimu, postojeći set preseka za

interakciju pozitrona sa CF_4 smo modifikovali na različite načine. Eksitacione procese smo podelili u kategorije sa "malim" pragom, gde spadaju sve vibracione eksitacije sa pragom od nekoliko stotina meV , i "velikim" pragom, gde spadaju jonizacija elektronske eksitacije i proces formiranja pozitronijuma sa pragom od $\sim 10eV$. Ipak, kako bi se proverilo da li je prikazana kompresija posledica selektivnog uklanjanja visokoenergijskih čestica, koje su dalje od ose, iz roja, a ne realan radijalni transport, za simulacije prikazane na slici 6.11 iz svih setova preseka je izbačen proces formiranja pozitronijuma. Iz rezultata se vidi da samo elastični sudari nisu dovoljni da dovedu do kompresije, bez obzira na efektivni viskozni otpor. Takođe, dodatak samo vibracionih eksitacija sa "niskim" pragom nije dovoljan da se suprotstavi zagrevanju i ekspanziji do kojih dovodi rotirajuće polje. Elastični sudari u kombinaciji sa procesima sa "visokim" pragom mogu da zaustave širenje roja, ali ne i da ga ohlade do termalnih energija (slika 6.12) i dovedu do kompletne kompresije. Napomenimo još jednom da u ovim simulacijama ne figuriše proces formiranja pozitronijuma, te da bi uz taj dodatni proces, ovi uslovi doveli do nestanka najvećeg dela čestica. Konačno, potpuna kompresija je moguća je samo uz prisustvo i procesa sa "visokim" pragom koji bi zaustavili inicijalno zagrevanje i ekspanziju pozitrona, kao i procesa sa "niskim" pragom koji bi spustili energiju čestica daleko od energije praga procesa formiranja pozitronijuma. Takođe, postojanje kompresije u slučaju kompletnog preseka pokazuje da model zapravo predviđa postojanje radijalnog transporta čestica ka osi, a ne selektivno uklanjanje čestica kroz proces formiranja pozitronijuma.

Iz prethodno prikazanih rezultata (slike 6.8 - 6.10) možemo razlikovati dva "moda" kompresije u zavisnosti od primenjenog napona na segmentiranim elektrodama: "snažnu" kompresiju za više vrednosti napona, i "blagu" kompresiju za niže vrednosti napona. Vidimo da za vrednosti napona preko $1V$ brzina kompresije i relaksacije energije se ne menjaju značajno, a dalje povećanje napona samo povećava gubitke. Zato je za razmatranje procesa koji dovode do kompresije u režimu "snažne" kompresije odabrana vrednost napona $V_r = 1V$. Sa druge strane za analizu u režimu "blage" kompresije odabrana je vrednost napona $V_r = 0.15V$ jer su gubici čestica relativno mali, dok je brzina kompresije i dalje značajna, odnosno vreme kompresije do krajnje širine je manje od $10 \mu s$.



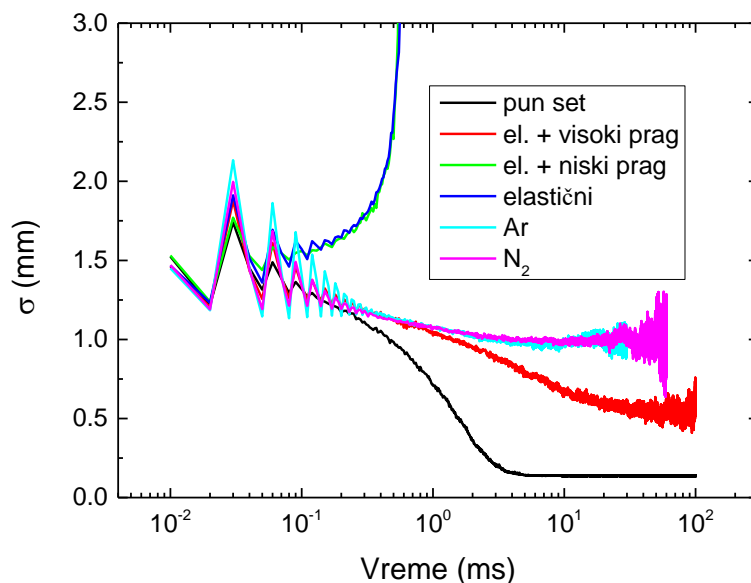
Slika 6.11 Širina roja pozitrona za različite setove preseka bez procesa formiranja pozitronijuma: crna linija - pun set preseka; zelena linija - elastični presek; crvena linija - elastični i preseci sa "visokim" pragom; plava linija - elastični i preseci sa "niskim" pragom.



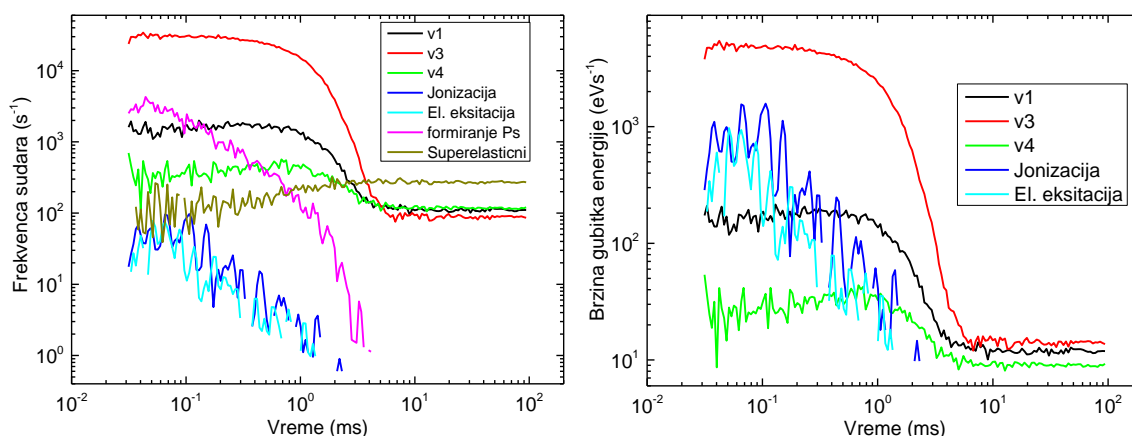
Slika 6.12 Srednja energija roja pozitrona za različite setove preseka bez procesa formiranja pozitronijuma: crna linija - pun set preseka; zelena linija - elastični presek; crvena linija - elastični i preseci sa "visokim" pragom; plava linija - elastični i preseci sa "niskim" pragom.

Rezultati simulacija u režimima "snažne" i "blage" kompresije prikazani su na slikama 6.13 - 6.16. Pored prethodno opisanih modifikovanih setova preseka za CF_4 , pri čemu kompletni set preseka, kao i presek sa presecima sa "visokim" pragom uključuje i proces formiranja pozitronijuma, na slikama su prikazani i rezultati simulacija kompresije (odnosno nedostatka iste) u argonu (Petrović et al. 2013) i azotu. Kao i u prethodno opisanim simulacijama, elastični sudari i vibracione eksitacije nisu dovoljne da ohlade roj pozitrona i spreče ekspanziju. Interesantno je primetiti sličnost između kompresije u azotu, argonu i CF_4 u varijanti sa presecima sa "visokim" pragom (slika 6.13). U argonu ne postoji mogućnost neelastičnih sudara na malim energijama, dok u azotu postoji značajan kanal rotacionih eksitacija molekula. Ipak, kako su energijski gubici pri rotacionim eksitacijama nekoliko desetina meV , pri grejanju kojem je roj izložen rotacione eksitacije molekula azota ne doprinose značajno kompresiji. Oblik krive za ova tri slučaja je dominantno određen presecima za elektronske eksitacije, tj. tačnije položajem preseka za formiranje pozitronijuma u odnosu na presek za elektronske eksitacije. Najnepovoljnija situacija je kod argona, kod kojeg se neelastični preseki jonizacije i elektronske eksitacije značajnije javljaju tek nekoliko eV nakon preseka za formiranje pozitronijuma. Nepostojanje neelastičnih preseka na niskim energijama dovodi do velikog gubitka pozitrona što se na pomenute tri krive odražava u šumu u kasnijim vremenima koji je posledica loše statistike usled uklanjanja najvećeg dela pozitrona kroz proces formiranja pozitronijuma. Na slici 6.14 (levo) prikazana je frekvencija sudara u toku kompresije za različite neelastične sudarne procese pozitrona sa CF_4 u režimu "snažne" kompresije, u situaciji u kojoj su razmatrani svi procesi. Najučestaliji proces jeste vibraciona eksitacija v_3 , dok je sledeći relevantan proces, sa ~ 10 puta manjom učestanošću proces formiranja pozitronijuma. Proces formiranja pozitronijuma, ovde eksplicitno prikazan, je odgovoran za gubitak pozitrona koji je vidljiv na slici 6.10. Najmanje frekventni sudari jesu jonizacija i elektronska eksitacija. Ipak, da i ovi proces nisu nevažni vidi se na slici 6.14 (desno) na kojoj je prikazana brzina gubitaka energije za različite sudarne procese u CF_4 , u režimu "snažne" kompresije. Ovakve krive približno odgovaraju proizvodu frekvence sudara (broj sudara u jedinici vremena) i energiji praga neelastičnog procesa. Za vibracione procese energija praga iznosi $v_1: 107meV$; $v_3: 159meV$; $v_4: 77meV$; dok za jonizaciju iznosi $16.25eV$ a za elektronsku

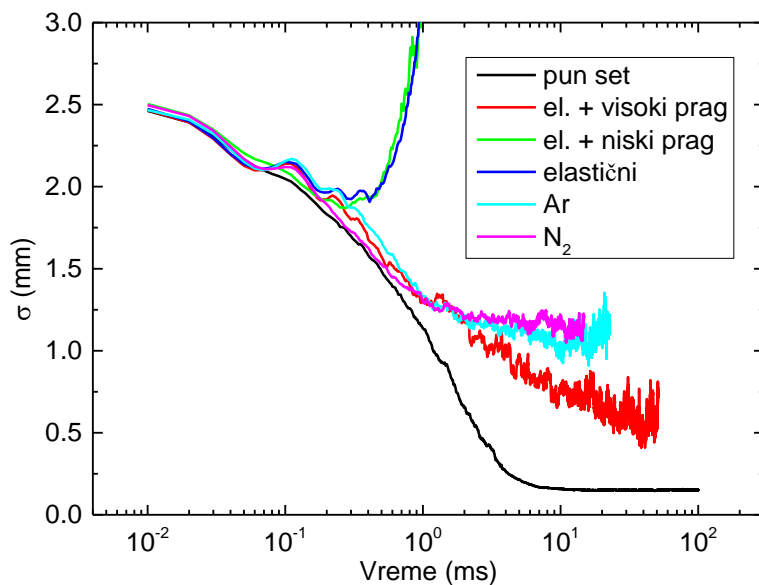
eksitaciju 12.5eV . Dakle gubitak energije pri jednoj jonizaciji je ~ 100 puta veći nego pri jednoj vibracionoj eksitaciji. Pokazuje se da su vibracioni gubici dominantni u potpunom toku kompresije, ali i da procesi jonizacije i elektronske eksitacije, usled velikog gubitka energije igraju značajnu ulogu u sprečavanju širenja roja, i smanjenju broja pozitrona koji su izgubljeni kroz proces formiranja pozitronijuma.



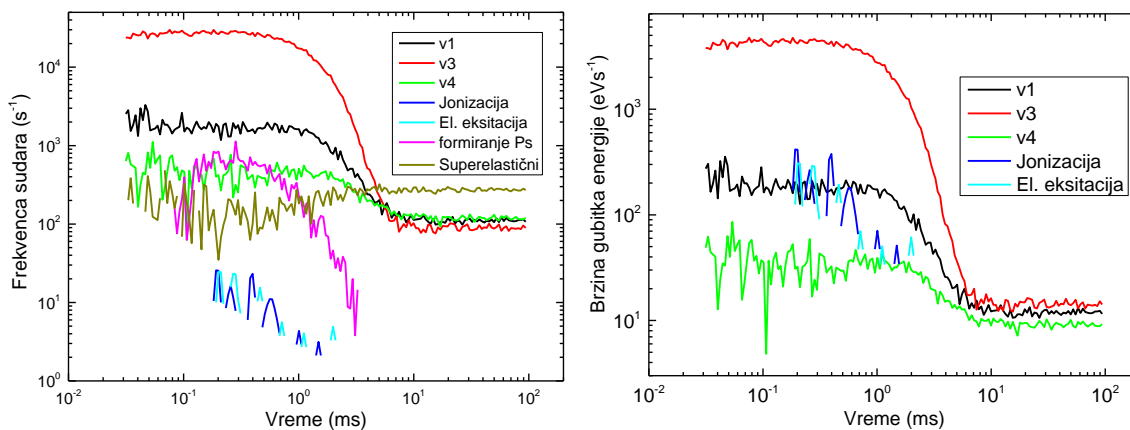
Slika 6.13 Širina oblaka pozitrona u vremenu za različite gasove i setove preseka u režimu "snažne" kompresije gde je $V_r = 1V$.



Slika 6.14 Frekvencija sudara za različite procese (levo) i brzina gubitka energije pozitrona (desno) kroz sudare sa molekulima pozadinskog CF_4 u režimu "snažne" kompresije.



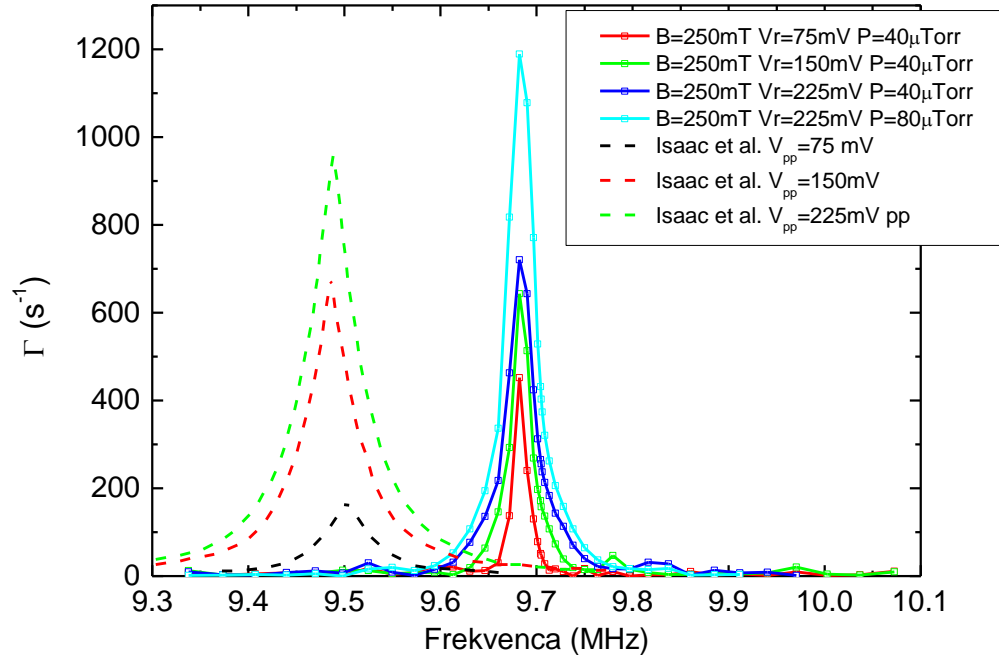
Slika 6.15 Širina oblaka pozitrona u vremenu za različite gasove i setove preseka u režimu "blage" kompresije gde je $V_r = 0.15V$.



Slika 6.16 Frekvencija sudara za različite procese (levo) i brzina gubitka energije pozitrona (desno) kroz sudare sa molekulima pozadinskog CF_4 u režimu "blage" kompresije.

Na slici 6.15 prikazane su simulacije za režim "blage" kompresije za već opisane modifikovane setove preseka (sa uključenim procesom formiranja pozitronijuma) kao i za pun set preseka za CF_4 . Ne postoji kvalitativna razlika u slučaju nedostatka kompresije za modifikovane setove preseka, ili za simulacije u argonu ili azotu, u poređenju sa režimom "snažne" kompresije, osim činjenice da ekspanzija roja počinje nešto kasnije, što je

posledica slabijeg zagrevanja roja, vidljivog na slici 6.9. Slično, kompresija u slučaju punog seta preseka je nekoliko milisekundi sporija. Sa slike 6.16 gde su prikazane frekvencija sudara, i brzina gubitka energije vidi se da procesi formiranja pozitronijuma, jonizacije i elektronske eksitacije i dalje igraju određenu ulogu ali je vibraciona eksitacija ν_3 u režimu "blage" kompresije daleko najdominantniji proces.



Slika 6.17 Frekvencijska zavisnost brzine kompresije za različite uslove primenjenog napona i pritiske gasa. Isprekidane krive predstavljaju fit eksperimentalnih rezultata iz rada (Isaac et al. 2011). Naponi u legendi uz eksperimentalne rezultate označavaju peak-to-peak napon primenjen na rotirajućoj elektrodi.

Na slici 6.17 data je zavisnost brzine kompresije u funkciji od frekvencije primenjenog rotirajućeg polja. Brzina kompresije je fitovana iz vremenske zavisnosti širine roja jednačinom (6.10) koju su predložili Izak i saradnici (Isaac et al. 2011)

$$\sigma(t) = \left(\sigma_0 - \frac{\gamma}{\Gamma} \right) e^{-\Gamma t} + \frac{\gamma}{\Gamma} \quad (6.10)$$

gde je σ_0 širina roja pre kompresije, a γ brzina širenja roja usled interakcije pozitrona sa gasom i električnim i magnetskim poljem. Na ovaj način smo u mogućnosti da uporedimo rezultate simulacija sa frekvencijskom zavisnošću izmerenom od strane Izaka i saradnika.

Naponi, navedeni u legendi uz fit eksperimentalnih rezultata iz rada Isaac et al. (2011), su dati kao peak-to-peak vrednosti primenjenog napona na segmentiranoj elektrodi, te stoga treba imati u vidu da vrednost simuliranog napona $V_r = 75 \text{ mV}$ odgovara eksperimentu sa $V_{pp} = 150 \text{ mV}$. U poređenju sa izmerenom frekvencijskom karakteristikom, u rezonanca se u simulacijama nalazi na višoj frekvenciji pri čemu važi $\omega_{rez} \approx 60.8 \times 10^6 \text{ rad/s}$. Iako je u simulaciji korišćena vrednost frekvencije aksijalnih oscilacija $\omega_z = 59.6 \times 10^6 \text{ rad/s}$, koja je data u pomenutom radu, treba imati u vidu da je ta vrednost aproksimacija, kao i da aksijalni potencijal koji postoji u eksperimentu nije savršeno harmoničan kako je pretpostavljeno u simulaciji, pogotovo za pozitrone na višim energijama gde aproksimacija harmoničnim potencijalom više ne važi. I pored toga, vrednost rezonantne frekvence dobijena simulacijom odstupa od izmerene za manje od 5%.

Činjenica da pozitroni u eksperimentu vide neharmoničan potencijal (odnosno pozitroni sa različitim energijama imaju različitu frekvenciju aksijalnih oscilacija) jeste razlog i zašto je frekvencijska karakteristika koju daje simulacija nešto uža od one dobijene eksperimentom. Takođe, gas koji je korišćen u eksperimentu (SF_6) se razlikuje od gasa koji je korišćen u simulaciji (CF_4) ali je i pored toga brzina kompresije koju daje simulacija uporediva sa eksperimentalno izmerenim vrednostima. Uz sve poteškoće da se u simulaciji detaljno reprezentuju eksperimentalni uslovi, simulacija daje dobro i kvalitativno i kvantitativno slaganje sa eksperimentom.

6.4 Zaključak

U ovom poglavlju predstavljena je simulacija koja opisuje kompresiju oblaka pozitrona u jednočestičnom režimu, odnosno pri gustinama pozitrona koje su daleko ispod plazma limita. U takvim uslovima Monte Karlo tehnika predstavlja dobar pristup. Oslanjajući se na opis potencijala koji su dali Izak sa saradnicima (Isaac et al. 2011) oformili smo Monte Karlo računarski kod koji je paralelizovan, tj. prilagođen radu na multiprocesorskom sistemu, što je neophodno za izvršavanje simulacije u razumnom

vremenu, usled prirode problema u kojem se posmatrani efekat događa na vremenskoj skali koja je veća od jedne iteracije 10^{10} puta.

Rezultati simulacija u kojima je iz seta preseka uklonjen proces formiranja pozitronijuma nedvosmisleno pokazuju da u uslovima za koje je simulacija izvršena, postoji preferentni transport ka osi cilindra koji dovodi kompresije, te da kompresija koju opažamo u simulacijama nije posledica selektivnog uklanjanja iz ansambla pozitrona onih čestica koje su dalje od ose. Ipak, u realnim sistemima proces formiranja pozitrona nije moguće izbeći i on dovodi do neminovnog gubitka određenog broja čestica (do ~60% za veće vrednosti jačine primenjenog rotirajućeg polja). Kako se rotirajuće polje u eksperimentalnim postavkama koristi zarad manje širine izlaznog snopa (veće gustine pozitrona u snopu) sa jedne, ali i kako bi se sprečilo širenje oblaka pozitrona, a samim tim značajno produžilo vreme života pozitrona u akumulacionom stepenu trapa (do vremena života do anihilacije) ovaj gubitak pozitrona nije primetan.

U zavisnosti od primenjenog napona na segmentiranim elektrodama zavisi brzina kompresije. Viši naponi za rezultat imaju bržu kompresiju, što odgovara ponašanju opaženom u eksperimentu, ali i dovode do većeg gubitka pozitrona, usled zagrevanja čitavog roja. Primenom jako niskih napona (150 mV za simuliranu geometriju i pritiske) moguće je minimizirati, ali ne i potpuno izbeći, gubitke kroz proces formiranja pozitronijuma. Analizom frekvence sudara za različite sudarne procese zaključujemo da je i u slučaju "snažne", kao i "blage" kompresije najdominantniji sudarni proces, koji oduzima najviše energije iz roja, vibraciona eksitacija v_3 , što odgovara ranijim eksperimentalnim opažanjima autora (Greaves and Surko, 2000; Greaves and Moxom, 2008) da je za kompresiju neophodan pozadinski gas sa izraženim presekom za vibracionu eksitaciju poput SF₆, CF₄ ili CO₂. Pored vibracione eksitacije, opažamo da su za sprečavanje širenja roja pozitrona neophodni i procesi sa višim pragom, poput jonizacije i elektronske eksitacije ili procesa formiranja pozitronijuma, pri čemu jonizacija i elektronska eksitacija sprečavaju širenje roja efikasnim oduzimanjem energije pozitronu, dok formiranje pozitronijuma uklanja pozitron iz ansambla čestica.

Konačno, kompletnu sliku dobijamo analizom frekvencijske karakteristike brzine kompresije i poređenjem sa eksperimentalnim rezultatima Izaka i saradnika (Isaac et al. 2011). Direktno kvantitativno poređenje je otežano usled činjenice da svi dostupni eksperimenti u prikazanim rezultatima koriste SF₆ kao pozadinski gas, dok su naše simulacije rađene sa CF₄ kao pozadinskim gasom. Takođe, ovi eksperimenti su sprovedeni u trapovima poput onih opisanih u prethodna dva poglavlja. Već smo napomenuli da uslovi pritiska u ovakvim napravama nisu dobro kvantitativno definisani, kao i da polje koje nastaje unutar realnih dimenzija elektroda ne odgovara u potpunosti idealizovanom obliku napona koji je usvojen u simulaciji. Stoga se opisana simulacija treba koristiti prvenstveno kao kvalitativni pokazatelj, koji nam otkriva mehanizme koji su zaslužni za postojanje kompresije u jednočestičnom režimu. Uz sve navedeno, rezultati dobijeni simulacijom vrlo dobro odgovaraju vrednostima dobijenim u eksperimentu: vrednost rezonantne učestanosti odstupa za manje od 5% a brzina kompresije daje uporedive vrednosti. Jedini parametar koji značajnije odstupa jeste širina frekvencijske karakteristike, koja je nešto šira u eksperimentima, prvenstveno iz razloga što je harmonijski aksijalni potencijal koji je usvojen u simulaciji aproksimacija realnog potencijala.

7. Transport pozitrona u biološkoj sredini

U ovom poglavlju, bavićemo se pozitronima koji se kreću, bez uticaja spoljašnjeg polja, kroz sredinu od biološkog značaja. Iako se, već duže vreme, voda koristi kao dobar model tkiva (npr. ljudskog), i pored evidentnog napretka kinetičke teorije u nastojanju da opiše transport naelektrisanih čestica u tečnoj sredini (White et al. 2014), ovaj problem ostaje otvoren. Takođe, eksperimentalni i teorijski dobijeni podaci koji opisuju interakciju pozitrona sa biološki relevantnim ugljovodonicima su retki i nepotpuni. Ipak, i pored dosta nepoznanica, pozitroni su našli široku, svakodnevnu i izuzetno značajnu ulogu u medicini. Rešenje pomenutih problema je izvan dometa ove disertacije. Ono čime se bavimo u ovom poglavlju jeste nastojanje da problem termalizacije pozitrona u tkivu opišemo koristeći primarno izmerene podatke za pozitrone, gde je dostupno, a zatim i da ukažemo na korelaciju, odnosno nepostojanje iste, između energije deponovane u tkivu i konkretnih događaja koji mogu predstavljati oštećenja na nivou molekula DNK. Iako dostupnost podataka nije na nivou da se može egzaktno modelovati oštećenje tkiva pri izloženosti pozitronskom zračenju, rezultati pokazuju da bi, uz dodatno poznavanje sudarnih procesa, proračun primljene doze trebalo upotpuniti kako bi se uzeli u obzir i pojedinačni događaji iz domena atomske i molekularne fizike, kao što su jednostruki i dvostruki prekid lanca DNK, koji predstavljaju rizik po pacijenta izloženog zračenju.

7.1 Modelovanje uticaja pozitronskog zračenja

U odeljku 1.7.4 je ukratko opisan princip na kojem se zasniva rad pozitronske emisije spektroskopije kao i napomenuli mogućnosti primene zračenja pozitronima i u terapiji. I u jednom i u drugom slučaju od izuzetne je važnosti detaljno poznavati put pozitrona od izvora (u slučaju PET-a to je ^{18}F -FDG) pa do trenutka anihilacije. Anihilaciji najčešće prethodi proces formiranja pozitronijuma, te je neophodno poznavati i interakciju pozitronijuma sa pozadinskim molekulima (Marjanović, 2009). U ovom trenutku prihvaćeni standardi zasnivaju se na proračunima koji podrazumevaju da se pozitroni ponašaju slično elektronima (ICRP, 1991;1998), a manjkavost takvog pristupa je već

demonstrirana (Banković, 2012). Za razmatranje uticaja zračenja na organizam definisane su i koriste se sledeće veličine (Podgorsak, 2005):

- *Dužina trajektorije* koju čestica pređe od izvora do krajnje tačke.
- *Domet*, koji odgovara rastojanju između izvora i krajnje tačke
- *Apsorbovana doza*, koja je definisana kao energija deponovana u tkivu po jedinici mase:

$$D = \frac{dE}{dm} \quad (7.1)$$

gde je dE apsorbovana energija a dm masa dela tkiva koje zauzima konačnu zapreminu V . Jedinica za izražavanje apsorbovane doze je grej, za koji važi $1\text{Gy} = 1 \frac{\text{J}}{\text{kg}}$.

- *Zaustavna moć* (eng. *stopping power*), koja je definisana kao:

$$\left(\frac{S}{\rho}\right)_{tot} = \frac{1}{\rho} \frac{dE_k}{dx} \quad (7.2)$$

i izražava se u jedinicama $\frac{\text{MeV}\cdot\text{cm}^2}{\text{g}}$. dE_k je promena kinetičke energije čestice na putu dx , a ρ je gustina biološke sredine. Veličina $\left(\frac{S}{\rho}\right)_{tot}$ može da se podeli na dve komponente. Jedna predstavlja gubitke energije u sudarima, a druga predstavlja radijativne gubitke:

$$\left(\frac{S}{\rho}\right)_{tot} = \left(\frac{S}{\rho}\right)_{col} + \left(\frac{S}{\rho}\right)_{rad} \quad (7.3)$$

Koliziona zaustavna moć može se izračunati kao (Munoz et al. 2007):

$$\left(\frac{S}{\rho}\right)_{col} = \frac{N_a}{M} \bar{E} \sigma_{inel} \quad (7.4)$$

gde je sa \bar{E} predstavljena srednja energija eksitacije, koja se može dobiti iz izmerenog spektra gubitka energije. σ_{inel} jeste ukupni presek za neelastične

sudare, M je molarna masa a N_a avogadrov broj. Može se pokazati direktna veza kolizione zaustavne moći i apsorbovane doze.

- *Izloženost* (eng. *exposure*) jeste količina naelektrisanja koja nastaje po jedinici mase:

$$X = \frac{dQ}{dm} \quad (7.5)$$

Izloženost se definiše u vazduhu, te dQ predstavlja ukupno naelektrisanje koje nastane u vazduhu pri potpunom zaustavljanju svih pozitrona i elektrona koji su nastali, ili su oslobođeni u masi vazduha dm . Nekada se za ovu veličinu koristila jedinica roentgen (R) no danas se izražava u $\frac{C}{kg}$ pri čemu važi $1R = 2.58 \cdot 10^{-4} \frac{C}{kg}$.

Jedan od alata koji se danas koristi u nuklearnoj medicini jesu Monte Karlo simulacije koje prate naelektrisane čestice dok termalizuju u biološkoj sredini. Ukratko ćemo predstaviti nekoliko računarskih kodova koji su se izdvojili i koji su najčešće u upotrebi.

EGS (Electron Gamma Shower) (Nelson et al. 1985) je Monte Karlo kod opšte namene u medicinskoj fizici. U mogućnosti je da simulira spregnuto kretanje elektrona i fotona, u proizvoljnoj geometriji na visokim energijama od keV do TeV. Sam kod je vrlo fleksibilan i poseduje generator preseka PEGS koji određuje ulazne podatke, kao što su pragovi za procese i preseki. Originalan kod je dopunjen kroz novu verziju, EGSnrc (Kawrakow, 2000a; 2000b) koja je u stanju da prati i čestice na niskim energijama i kao takav se koristi za modelovanje radijacione terapije i praćenje pozitrona u PET dijagnostici.

MCNO (Monte Carlo N-Particle) je računarski kod, čija je originalna namena bila proračun transporta neutrona i fotona u nuklearnim reaktorima (Brown, 2003) a koristi se i u nuklearnoj medicini (DeMarco et al. 1998).

GEANT4 (Geometry and tracking 4) (Agostinelli et al. 2003) je kod opšte namene, sa primenom u fizici čestica i sadrži skup alata za simuliranje prolaska različitih tipova čestica (neutrona, protona, piona, itd.) kroz materiju. Koristi se u proračunima vezanim za radioterapiju (Carrier et al. 2004; 2006), u nuklearnoj medicini, u simulacijama PET i SPECT dijagnostici (Jan et al. 2004). U okviru postojeće funkcionalnosti, može se definisati geometrija sistema, sastav materije u kojoj se odvija simulacija i sl. Posедуje i kodirane podatke o sudarnim procesima za različite čestice, kao i elektromagnetske, hadronske i optičke procese, ali ono što izdvaja ovaj kod od ostalih jeste izuzetna fleksibilnost koja dozvoljava modifikaciju pojedinačnih procesa, ili dodavanja novih, kako u smislu podataka (npr. drugačiji presek) tako i u smislu modelovanja procesa sa ciljem rešavanja nekog specifičnog problema.

PENELOPE (Penetration and energy loss of positrons and electrons) (Baró et al. 1995) je još jedan programski paket, na bazi Monte Karlo simulacija, koji sadrži detaljan tretman preseka za interakcije elektrona, pozitrona i fotona na relativno niskim energijama. U stanju je da opiše prolazak čestica kroz materiju od visokih početnih energija, reda 1 GeV do energija 100eV, ali ne i na nižim energijama.

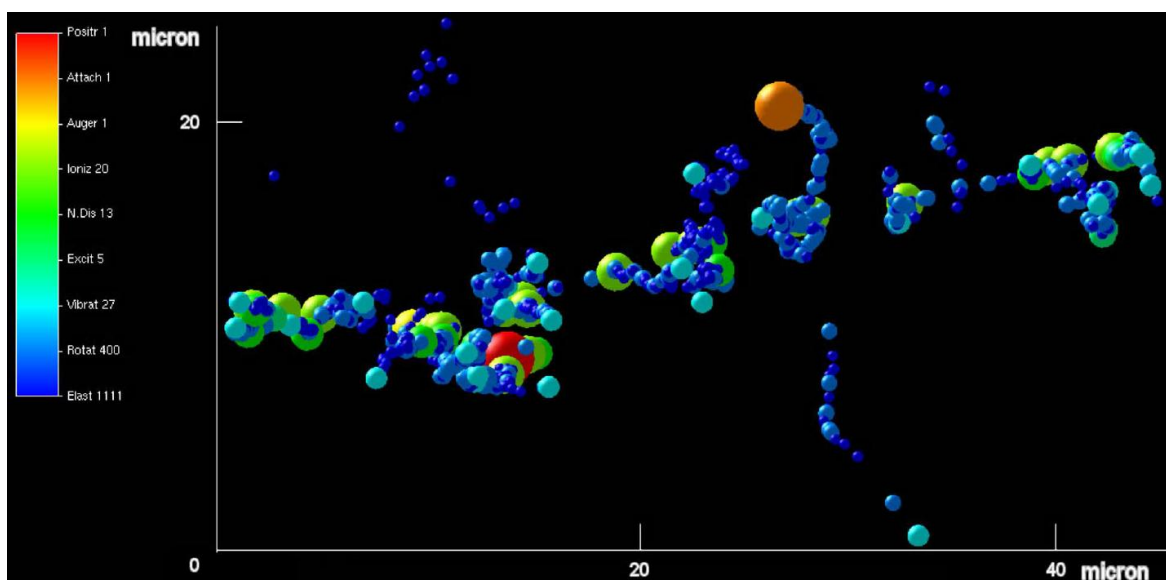
Na kraju ove liste pomenućemo i jedan od Monte Karlo kodova, koji nije baziran na prethodno navedenim programskim paketima. Champion i saradnici (Champion, 2003; Champion and Le Loirec, 2006; 2007) su razvili kod koji generiše putanje elektrona i pozitrona u tečnoj vodi. Treba biti oprezan pri upotrebi termina "tečnost". Ono što su Champion i saradnici uradili jeste da su zapravo koristili podatke za interakciju pozitrona i elektrona sa molekulima vode u gasovitoj fazi, a zatim rezultate skalirali pretpostavljajući gustinu tečne vode $\rho = 1g/cm^3$ (*liquid density* aproksimacija). Treba uzeti u obzir da pri gustinama koje odgovaraju tečnoj fazi, usled visoke koncentracije čestica meta, dolazi do koherentnog rasejanja, tj. rasejanja pozitrona/elektrona na više meta istovremeno. Takođe dolazi do hidratacije, odnosno do vezivanja pojedinačnog naelektrisanja sa nekoliko dipola molekula H₂O u stabilnu konfiguraciju. Ipak pokazano je da efekti koherentnog rasejanja i hidratacije nisu značajni na energijama iznad 5 eV (White et al. 2014), te pomenuta aproksimacija nije neopravdana pošto simulacija prati čestice od vrlo visokih do energije od

10 eV. U simulaciju su uključeni integralni i diferencijalni presek za elastično rasejanje i elektrona i pozitrona kao i preseki za elektronske eksitacije. Rotacione i vibracione eksitacije su zanemarene. Jonizacija i proces formiranja pozitronijuma su uključeni teorijski kroz kvantno mehanički pristup (metodom razvoja u parcijalne talase, u okviru prve Born-ove aproksimacije, bez izmenske interakcije). Na kraju, simulacija generiše trajektorije pozitrona i elektrona od momenta nastanka, sve dok im energija ne padne ispod zadate vrednosti (konkretno 12.63 i za elektrone i za pozitrone). Tada se preostala energija računa kao deponovana. Na osnovu dobijenih trajektorija, kod može da odredi zaustavnu moć za različite tipove čestica i procese, energijske gubitke, kvantitativne podatke o formiranju Ps, vreme koje protekne od emisije pozitrona do formiranja pozitronijuma, kao i dubinu prodora pozitronijuma u vodi. Ipak, kako se tretman poslednjeg dela trajektorije (ispod ~10 eV) ne obrađuje, kod nije u stanju da korektno opiše domet elektrona i pozitrona, kao i njihovu interakciju sa molekulima vode na niskim energijama.

Nedavno je, u eksperimentima sa tankim filmovima, pokazano da niskoenergijski elektroni, čak do energija 4-6 eV, mogu biti inicijatori ćelijskog oštećenja na molekularnom nivou (Huels et al. 2003) kroz disocijativni zahvat (formiranje i raspad molekularnih rezonanci) u komponentama DNK (baza, šećer i sl.). Takođe prisutna su i oštećenja i na energijama preko 15 eV kroz procese eksitacije, jonizacije, a naročito disocijacije neutrala, ili eksitovanih stanja pozitivnih jona. Indukovana oštećenja mogu biti u vidu jednostrukih i dvostrukih prekida veza (*eng. single/double strand break*) DNK kao i višestrukih dvostrukih prekida veza DNK, koji su znatno opasniji jer iako ćelija poseduje mehanizme kojima može da popravi jednostruke, pa čak i dvostruke prekide, popravka višestrukih prekida najčešće ima za posledicu brisanje velikog dela primarne DNK sekvence.

Jedan od najnovijih primera jesu simulacije Garsije i saradnika (rezultat prikazan na slici 7.1) u kojem su simulirane trajektorije pozitrona i sekundarnih elektrona u čistoj vodenoj pari koristeći poslednja merenja pozitronskih preseka dopunjena proračunima na bazi modela aditivnosti nezavisnih atoma uz korekciju usled efekta ekraniranja (Blanco and Garcia, 2004). Prikazan je završetak trajektorije pozitrona koji je emitovan sa energijom 10 keV. Pozitron koji se kreće sa desna na levo, na početku prikazanog segmenta trajektorije

ima energiju 670 eV. Nakon nekoliko sudara, u jonizaciji stvara se Ožeov elektron sa energijom ~500 eV, koji kroz nekoliko sudara stvara još elektrona da bi konačno bio zahvaćen na molekulu vode, koji potom disosuje (proces disocijativnog zahvata). Autori naglašavaju da su interakcije pozitrona na visokim energijama dobro poznate jer se procesi ne razlikuju značajno od elektronskih i mogu se dobro opisati standardnim formulama (Bornovskim) za gubitak energije naelektrisanih čestica, ali da je fundamentalno pogrešno ekstrapolirati preseke za procese na niske energije. Takođe naglašavaju da nije dobro koristiti elektronske preseke na niskim energijama jer je pokazano da eksplicitni efekti procesa formiranja pozitronijuma uzrokuju značajne razlike u transportu elektrona i pozitrona.



Slika 7.1 Nekoliko poslednjih pikosekundi života pozitrona energije 10 keV u vodi. Pozitron brzo termalizuje kroz sudare; na kolor-skali je okvirno dat gubitak energije po sudaru uz naznačen sudarni proces. Slika daje pojedini kraja trajektorije pozitrona koji se kreće sa leva na desno, sa gubitkom energije od 670 eV do ~1eV kroz nekoliko sudara do konačne anihilacije kroz proces formiranja pozitronijuma (crvena kugla). Jedan od sudara pre formiranja Ps stvara Ože-ov elektron (žuta kugla) sa energijom blizu 500eV. Ovaj sekundarni elektron jonizacijom stvara naredne elektrone do konačnog zahvata na molekulu vode gde stvara tranzijentni negativni jon vode, koji zatim disosuje(narandžasta kugla) (Garcia et al.2011)

Iz navedenog se može izvesti nekoliko zaključaka: (1) postojeće simulacije uglavnom se baziraju na jednostavnim teorijskim ili empirijskim podacima, (2)

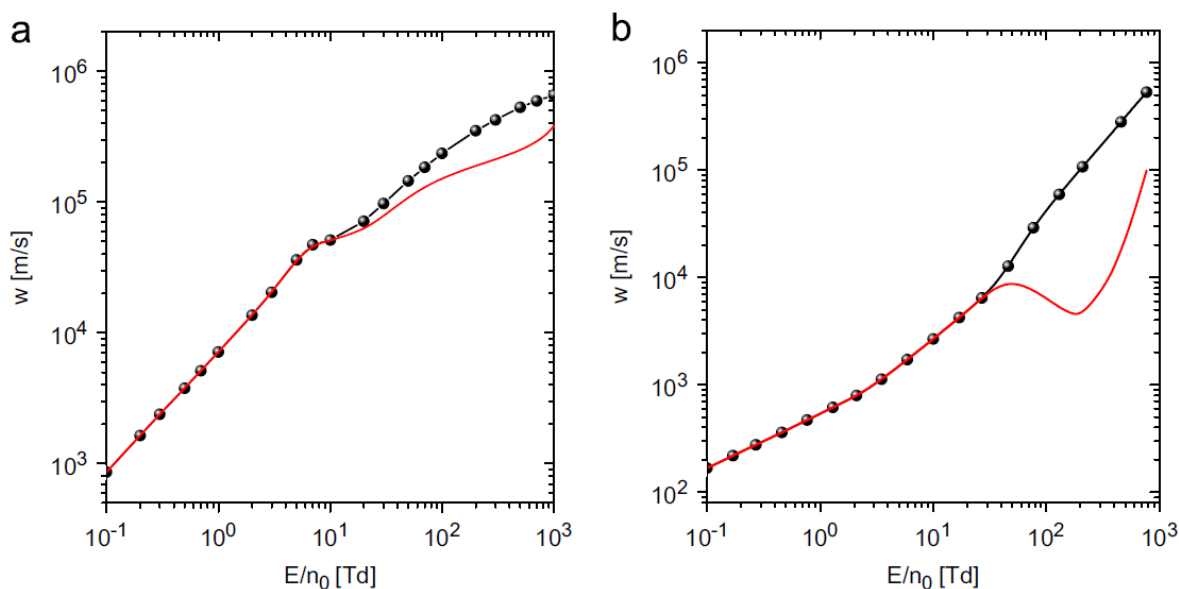
kvantifikacija uticaja zračenja se bazira isključivo na modelu deponovane energije, (3) simulacije ne prate čestice na niskim energijama, na kojima, pokazano je, postoji značajan doprinos procesima koji mogu biti štetni po molekule DNK. Stoga smo nastojali da u radu koji je predstavljen u disertaciji prikažemo jednostavan model transporta koji će se primarno bazirati na izmerenim ulaznim podacima, koji su od nedavno dostupni u značajnijoj meri, i koji će pratiti čestice do termalnih energija, kako bi se ispitala korelacija deponovane energije (u smislu količine energije i mesta gde je deponovana) sa potencijalnim mestima oštećenja bio-materije kroz pojedinačne procese stohastičke prirode.

7.2 Potreba i mogućnost eksperimenata sa pozitronskim rojevima

Pre nego se upustimo u opis simulacije termalizacije pozitrona i elektrona u tkivu, ukazaćemo na elemente u okviru razmatrane oblasti koji nedostaju. Pomoću tehnike rojeva, za koju su neophodni dobri eksperimentalni podaci o transportu u razmatranom gasu, moguće je izvršiti normiranje preseka kako bi se osiguralo da oformljeni set preseka daje adekvatan balans impulsa, energije i broja čestica. Naime, za elektrone postoje na široko mereni i računati setovi preseka, kao i setovi preciznih eksperimenata sa rojevima (Elford, 1972; Huxley and Crompton, 1974; Christophorou and Hunter, 1984), dok je za pozitrone bilo tek nekoliko pokušaja (Bose et al. 1981; Charlton and Larichia, 1990). Uprkos značajnim tehničkim poteškoćama u realizaciji takvih eksperimenata, jedan od osnovnih razloga neuspeha u tom trenutku mogao je biti i nedostatak razumevanja fenomena koji se javljaju prilikom nekonzervativnog transporta (poput negativne diferencijalne provodnosti (NDC) za balk brzinu drifta, koja nije bila opažena kod elektrona). Danas su ti fenomeni objašnjeni (Šuvakov et al. 2008; Marler et al. 2009; Banković et al. 2012a) i svakako se mogu iskoristiti kako bi se poboljšao kvalitet pozitronskih setova preseka.

Profili srednje energije, pored drugih interesantnih osobina, oslikavaju i energijsku zavisnost preseka za interakciju. Pokazano je da profili brzine drifta prikazuju veliku osetljivost na nekonzervativni proces formiranja pozitronijuma; razlika u fluks i balk komponentama brzine drifta u nekim slučajevima iznosi i dva reda veličine. U profilima balk brzine drifta za pozitrone u Ar, H₂ i H₂O je primećen veoma izražen efekat negativne

diferencijalne provodnosti (Šuvakov et al. 2008; Marler et al. 2009; Banković et al. 2009, 2012a, 2012b). Negativna diferencijalna provodnost je opažena i u transportu elektrona (Petrović et al. 1984; Robson, 1984; Vrhovac and Petrović, 1996), ali je priroda ovog fenomena u transportu pozitrona fundamentalno različita. Na primer, na slici 7.2 (Banković et al. 2012a) dato je poređenje brzine drifta u smeši N_2 i CF_4 gde se ne opaža NDC i u vodenoj pari, gde je NDC očigledna i daje razliku više od jednog reda veličine u komponentama brzine drifta. Poređenjem transportnih podataka za elektrone i pozitrone (na primer, kod elektrona, do sada, nije opažen NDC u balk komponenti brzine drifta) potvrđujemo da ne bi trebalo koristiti podatke o rasejanju elektrona za pozitrone, osim u specifičnim procesima.

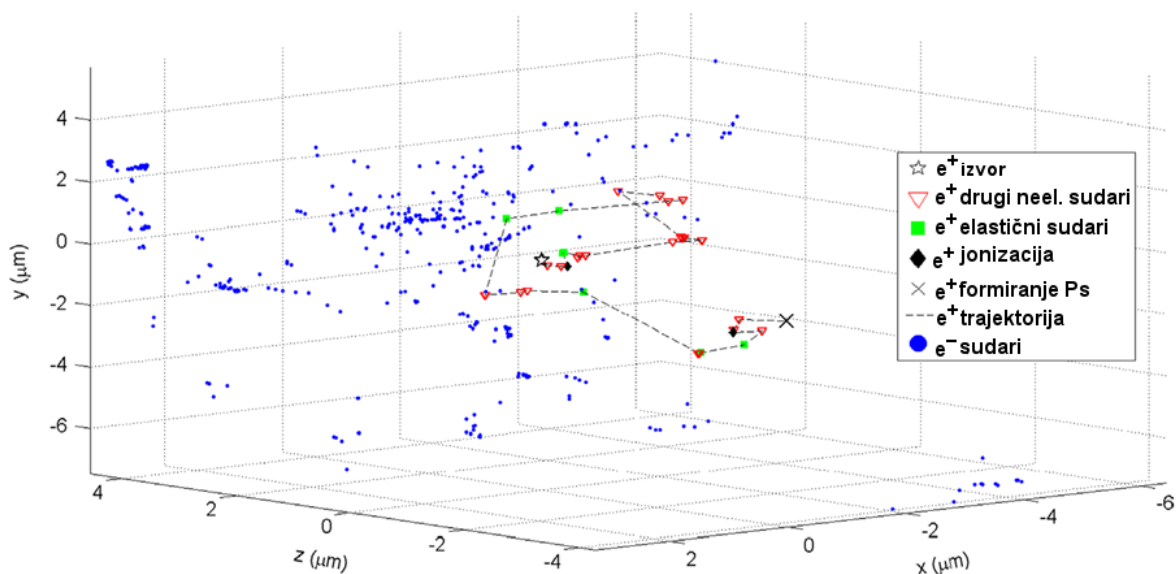


Slika 7.2 Promene balk (crvena linija) i fluks (crna linija sa simbolom) komponente brzine drifta sa E/n_0 (intenzitet električnog polja podeljen gustinom čestica pozadinskog gasa) u smeši N_2/CF_4 (90/10) (a) i vodenoj pari (b). Slika preuzeta iz (Petrović et al. 2014).

Iskustvo sa test proračunima (eng. *benchmark*) za elektrone daje poverenje u proračune transporta naelektrisanih čestica u gasu do proizvoljno visoke tačnosti. Štaviše, neki od setova preseka za realne gasove se mogu koristiti i testirati nasuprot eksperimenata. Na primer testovi za gasove (kao što su CF_4 i sl.) u DC poljima i odlična konzistencija

različitih pristupa za RF polja proširuje opseg pouzdanosti van DC eksperimenata sa rojevima i pruža motivaciju za razvoj novih eksperimenata sa rojevima u RF poljima.

Standardan (ne-roj) pristup "događaj po događaj" Monte Karlo simulacijama na koji se istraživači često oslanjaju u predstavljanju trajektorija čestica (Garcia et al. 2011). Jedan primer takve trajektorije dajemo na slici 7.3. Prikazuje i trajektoriju pozitrona, koji kreće sa energijom 1 keV, kao i lokacije sudara sekundarnih elektrona koje je napravio na svom putu. Ne bi bilo moguće razlučiti sve ove trajektorije, te su zato prikazane samo tačke u kojima dolazi do sudara, kako bi se opisao dodatni domet uticaja originalnog pozitrona kroz veliki broj sekundarnih elektrona.



Slika 7.3 Trajektorija jednog pozitrona kroz sredinu vodene pare na atmosferskom pritisku. Za pozitron su predstavljene tačke sudara za različite procese kao i tačke sudara za sve sekundarne elektrone.

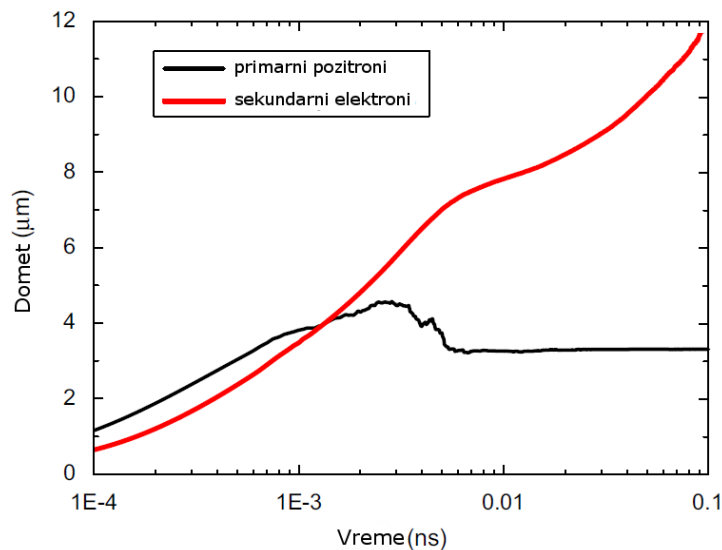
Iako je prikaz preko trajektorija vizuelno primamljiv i vrlo detaljan pristup, ne daje dobru osnovu za poređenje različitih modela rasejanja jer individualne trajektorije, usled stohastičke prirode rasejanja, mogu da se razlikuju više od "prosečne" (ili najreprezentativnije) trajektorije za različite modele. Na osnovu iskustva sa elektronima, predložili smo alternativni pristup koji koristi usrednjene vrednosti. Jedna od tih veličina

može biti adekvatno definisan domet čestica, koji daje dobru meru sudara za prenos impulsa, na sličan način kao i koeficijent difuzije. U prilog tome ide i činjenica da se može meriti. Na slici 7.4 dajemo jedan proračun tog tipa za set preseka za rasejanje vode (dat u poglavlju 3) uz pretpostavljeno izotropno rasejanje. Domet je izračunat kao srednje rastojanje, od početne tačke, svih preostalih pozitrona u simulaciji. U završnim delovima simulacije, preostaje samo nekoliko pozitrona i do tog trenutka, već su termalizovani. Domet pozitrona, za razliku od elektrona ne može dalje da raste i zapravo je manji nego maksimuma koji je dostignut u trenutku kada su pozitroni bili brojniji. Takođe, kako su pozitroni na sobnoj temperaturi, i pozitroni se kreću jako polako, domet više ne raste značajno, odnosno pozitroni se ne pomeraju značajno od svoje krajnje pozicije. Dakle, za pozitrona bi trebalo koristiti maksimalan domet, a ne kasniju, konstantnu vrednost. Takođe, prikazujemo i domet sekundarnih elektrona koji su napravljeni u sudarima pozitrona sa pozadinskim molekulima vode, što za posledicu ima znatno povećanje oblasti delovanja primarnih pozitrona, i ukazuje na mogućnost da oštećenja koja mogu indukovati čestice se dešavaju u znatno većoj zapremini. U vezi sa ovim, mogao bi se odrediti i koeficijent difuzije, koji bi se, doduše mnogo teže merio.

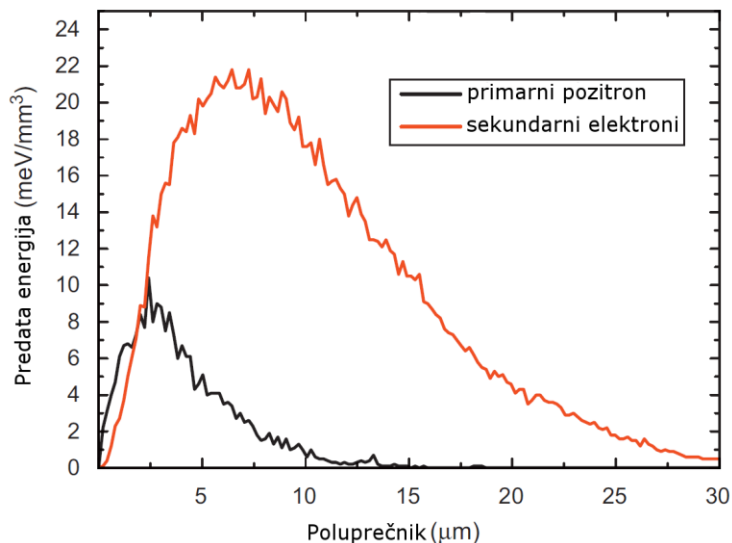
Pri svakom sudaru pozitrona sa pozadinskim gasom, uzorkujemo i energiju koja je predata molekulu H_2O . Ova energija se smatra predatom sredini. Takođe uzorkujemo i rastojanje ovih sudara od izvora pozitrona. Na ovaj način dobijamo prostorni profil energije koja je predata sredini. Ovaj tip podataka je ključan u određivanju doze koju primi pacijent u toku tretmana, kao i zapremine tretiranog tkiva. Tako je depozicija i transfer energije (gubitak energije u zapremini) zapravo još jedna od usrednjenih veličina koja se može koristiti za predstavljanje ansambla čestica, i kao test proračun. Rezultat za vodenu paru je prikazan na slici 7.5. Konačno, standardna usrednjena vrednost koja se često meri jeste i vreme termalizacije, a proračuni na bazi elementarnih sudarnih podataka su pokazali odlično slaganje sa postojećim eksperimentalnim rezultatima (Banković, 2012).

Zbog svega navedenog, u radu (Petrović et al. 2014) predložili smo pomenute veličine, kao što su domet čestica, energija predata u sudarima sa gasom ili vreme termalizacije, kao usrednjene veličine koje se mogu meriti, i koristiti kao test proračuni za

normalizaciju i validaciju sastavljenih setova preseka. Iako nisu jednako dobro definisane, kao precizno merene osobine rojeva elektrona, ove veličine mogu doprineti fizici pozitrona na isti način kao što je izučavanje rojeva elektrona doprinelo oblasti neravnotežnih plazmi.



Slika 7.4 Domet pozitrona i sekundarnih elektrona u vodenoj pari na atmosferskom pritisku.



Slika 7.5 Energija deponovana u sredini, i sfernoj ljuski poluprečnika r_i debljini dr po jednom pozitronu i njegovim sekundarnim elektronima. Energija predata nakon proces formiranja pozitronijuma nije uzeta u obzir. Većina energije pozitrona se daje elektronima u procesu jonizacije

7.3 Simulacija termalizacije pozitrona i sekundarnih elektrona u tkivu

Za simulaciju termalizacije pozitrona u tkivu, koristili smo Monte Karlo kod, koji je opisan u poglavlju 2, i koji je, uz nekoliko neophodnih modifikacija, u potpunosti u stanju da opiše život pozitrona od nastanka, preko termalizacije do formiranja pozitronijuma. Pri tome koristili smo pozitronski set preseka za vodu, opisan u poglavlju 3, koji je primarno baziran na izmerenim presecima.

Glavna promena u kodu koja je bila potrebna za ove simulacije jeste u prirodi procesa jonizacije. Do ovog trenutka proces jonizacije molekula pozitronom, posmatran je kao bilo koji drugi neelastičan sudar, što je bilo opravdano jer su se jonizacije dešavale na energijama neposredno iznad praga. U ovom slučaju pratimo pozitrone sa relativno visokih energija, od 800, eV gde proces jonizacije igra vrlo značajnu ulogu u termalizaciji, i gde sekundarni elektron može da preuzme značajan deo energije. Za potrebe opisa parcionisanja energije između primarne i sekundarne čestice korišćena je empirijska formula Opal-Piterson-Biti (Opal et al. 1971) koja je razvijena za jonizaciju elektronom, a mi smo je koristili i kod jonizacija pozitronom. Važno je napomenuti da su parametri te formule dobijeni fitovanjem eksperimentalnih trodimenzionih preseka za jonizaciju, te ona na jednostavan analitički način daje eksperimentalno bazirane predikcije particije energije. Takođe, neophodno je i detaljno pratiti evoluciju sekundarnih elektrona, te je svaki događaj jonizacije molekula H₂O značio dodavanje jednog elektrona u elektronski roj čija je dalja evolucija i termalizacija simulirana. Set preseka za rasejanje elektrona na vodi je dobro poznat set, preporučen od strane Hajašija (Hayashi, 2003).

Kako bismo precizno modelovali uticaj pojedinačnih događaja, kao što su jednostruki/dvostruki prekid veza u lancu DNK, neophodni su nam podaci o presecima. Iako u literaturi postoje podaci za pojedinačne molekule u ograničenom opsegu energija (na primer (Huels et al. 2003; Zecca et al. 2011)), detaljno modelovanje, usled kompleksnosti i raznolikosti organskih molekula u ćeliji sa jedne strane i nedostatka merenih podataka sa druge, u ovom trenutku nije izvodivo. Stoga smo se odlučili da uticaj svih tih različitih procesa, kao prvi korak, predstavimo kroz proces disocijativne eksitacije CH₄, kao

najjednostavnijeg organskog molekula. Ovaj proces zapravo predstavlja kidanje C-H veze (uz eksitaciju) od strane čestice dovoljne energije. Presek za ovaj proces (Motoshi et al. 1996; Shirai et al. 2002; Šašić et al. 2004) smo dodali u set preseka za vodu kako bismo dobili "organsku vodu". Pri tome isti presek je dodat i u pozitronski i u elektronski set. Na ovaj način, nesigurnost koju dodavanje ovog proces unosi u simulaciju će uticati samo na broj događaja, ali ukupni zaključak o relativnom doprinosu oba procesa (od strane pozitrona ili elektrona) se neće promeniti. Ideja jeste da se upoređi čista voda, sa "organskom" smešom, pri čemu je u smeši "organska voda" zastupljena sa 10% dok su ostali molekuli vode "čisti". Na taj način dodavanje preseka za disocijativnu eksitaciju ne utiče značajno na ukupan balans energije, impulsa i broja čestica, a u isto vreme daje nam meru oštećenja na molekulskom nivou. Dodavanje preseka za disocijaciju za 10% molekula vode u principu realno opisuje direktnu disocijaciju molekula u živom organizmu na energijama gde je ovaj presek značajan (20 - 300 eV), dakle iznad granične energije u kojoj je hidratacija problem za opis dinamike elektrona i pozitrona. Mnogo opasniji procesi za prekid molekula DNK su procesi disocijativnog zahvata (Huels et al. 2003) koji je proces koji do sada jeste konstatovan i izmeren, ali nije izvršen uspešan proračun efekta u živim sredinama. Zato smo u našim razmatranjima podelili efekte na disocijacije na niskim i visokim energijama. Dok su ove druge veoma precizno prikazane, prve su reprezentovane koeficijentima za procese sa niskim pragom, kao što su vibracione eksitacije. Tako možemo proceniti u kojoj su meri prisutni svi ovi događaji, kako su raspoređeni u prostoru, u kojoj meri su posledica primarnih pozitrona naspram sekundarnih elektrona i u kakvoj su korelaciji sa energijom koja je deponovana u tkivu.

Kako transport naelektrisanih čestica u tečnoj sredini, gde postoji efekat koherentnog rasejanja i hidratacije nije u potpunosti rešen kod polarnih molekula, kao što je voda, naša simulacija se i dalje bazira na binarnim sudarima pozitrona i elektrona sa molekulima vode, te je to i dalje gasna aproksimacija, pri čemu važi $pd = const$ skaliranje, što znači da su rastojanja između sudara inverzno proporcionalna, a brzina pojedinačnih procesa linearno proporcionalna pritisku (tj. koncentraciji čestica) pozadinskog gasa. Gasna aproksimacija je validna na energijama preko 5 eV gde efekti koherentnog rasejanja mogu

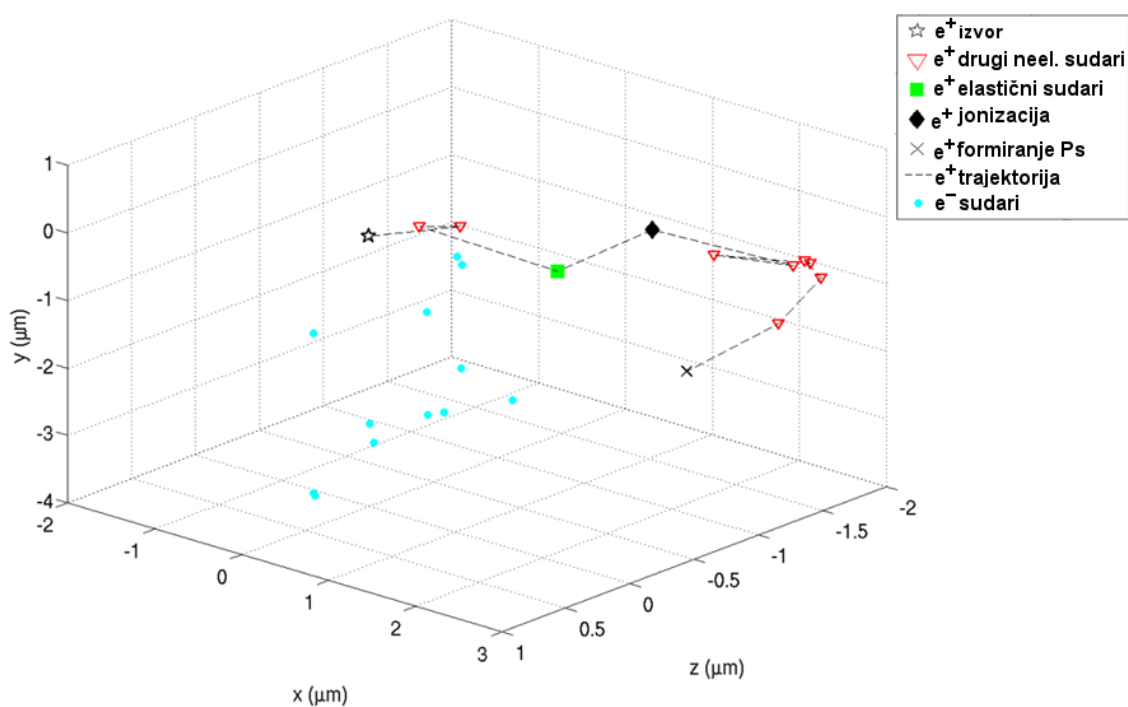
da se zanemare (White et al. 2014), dok je na nižim energijama, presek za elastično rasejanje, korigovan strukturnim faktorom, koji uzima u obzir koherentno rasejanje, je generalno manji nego u gasnoj fazi (White and Robson, 2009). Stoga je izvesno da kada energija čestica padne ispod ~ 5 eV naša simulacija precenjuje broj elastičnih sudara. Ipak neophodno je ispratiti čestice sve do termalnih energija, kako bi se odredio domet primarnih pozitrona odnosno sekundarnih elektrona, a i šteta koja se nanosi molekulima DNK, uz napomenu da je iz prethodno navedenih razloga taj domet najverovatnije potcenjen i da bi trebalo da je nešto veći. Iz istog razloga, iako postoje neki podaci za disocijativni zahvat na nekim komponentama DNK na energijama ispod 5 eV (Huels et al. 2003; Zecca et al. 2011), zarad jednostavnosti odlučili smo da se zadržimo samo na jednom procesu tj direktnoj disocijaciji molekula CH_4 .

Kod proračuna deponovane energije, potrebno je napomenuti nekoliko detalja. U slučaju elastičnog ili neelastičnog sudara, deponovana energija je zapravo razlika energije projektila pre i posle sudara, bilo da se radi o pozitronu ili elektronu. U slučaju procesa formiranja pozitronijuma, računa se da je sva energija izgubljena kroz proces anihilacije i emisiju gama fotona. Iako se sva energija računa kao izgubljena, ona nije nužno deponovana u tkivu, ali model depozicije energije pozitronijuma i rezultujućih gama fotona nije razmatran u ovoj tezi, a sam proces formiranja pozitronijuma na graficima je predstavljen samostalno i lako se može razlučiti od ostalih procesa. Najveću pažnju treba posvetiti procesu jonizacije. Prilikom jonizacije deponovana energija jeste razlika energije projektila pre sudara i ukupne energije rasejanog projektila i sekundarnog elektrona. Dakle u pitanju je kinetička energija koju je dobila teška čestica, uvećana za energiju praga za jonizaciju. To u suštini znači da se deo energije koju je dobio sekundarni elektron ne računa kao deponovana u procesu jonizacije, i da će ta energija biti deponovana kroz druge neelastične procese kako se sekundarni elektron termalizuje.

7.3.1 Putanje pozitrona u smeši "organske" vode

U nekoliko publikacija, prikazane su putanje pozitrona (i elektrona) kao predstave interakcije pozitrona sa pozadinskim gasom (Petrović et al. 2014). Posebno su praćene

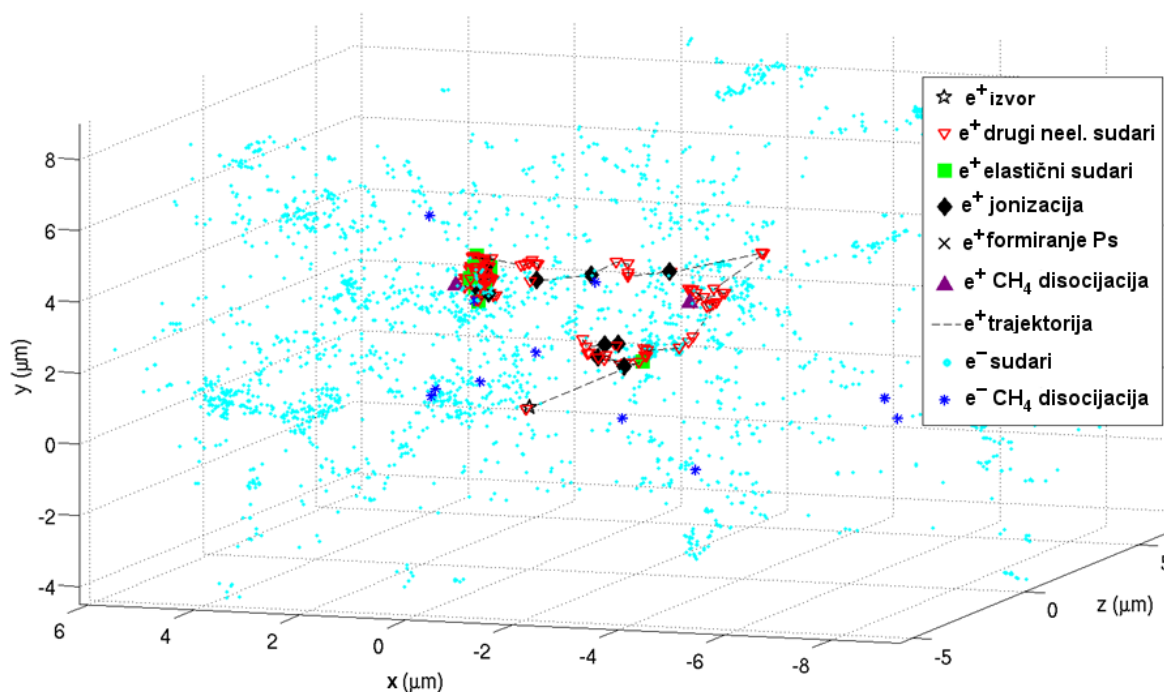
trajektorije u vodenoj pari (Champion and Loirec, 2006, Garcia et al. 2011; Fuss et al. 2014). Ovde će biti prikazane trajektorije pojedinačnog pozitrona, zajedno sa mestima sudara svih sekundarnih elektrona. Trajektorija pozitrona je povezana, počevši od tačke gde je emitovan (0,0,0) označene zvezdicom, pa do mesta gde se dogodio proces formiranja pozitronijuma, označenog krstom. Na slici 7.6 prikazan je primer jedne od trajektorija gde je napravljen samo jedan sekundarni elektron. Sudari sekundarnog elektrona su prikazani kao svetlo plave tačke i zbog bolje preglednosti nisu povezani. Ovakva trajektorija, gde se stvori samo jedan sekundarni elektron je malo verovatna. Češće, pozitron prođe kroz nekoliko jonizacija pre nego što stigne do energija gde je formiranje Ps dominantan proces.



Slika 7.6 Trajektorija pozitrona emitovanog sa energijom od 800 eV koji je doživeo proces formiranja pozitronijuma nakon desetak sudara. Na putanji je stvoren samo jedan sekundarni elektron, i ni jedna disocijacija.

Na slici 7.7 prikazana je mnogo kompleksnija trajektorija, koja je daleko verovatnija, sa velikim brojem sudara. Takođe, stvoreno je više elektrona (~10). Pored toga, vidimo da se dogodilo nekoliko disocijacija usled direktne interakcije pozitrona sa pozadinskim molekulima. Sa druge strane, vidimo da se elektroni prostiru sa mnogo većim

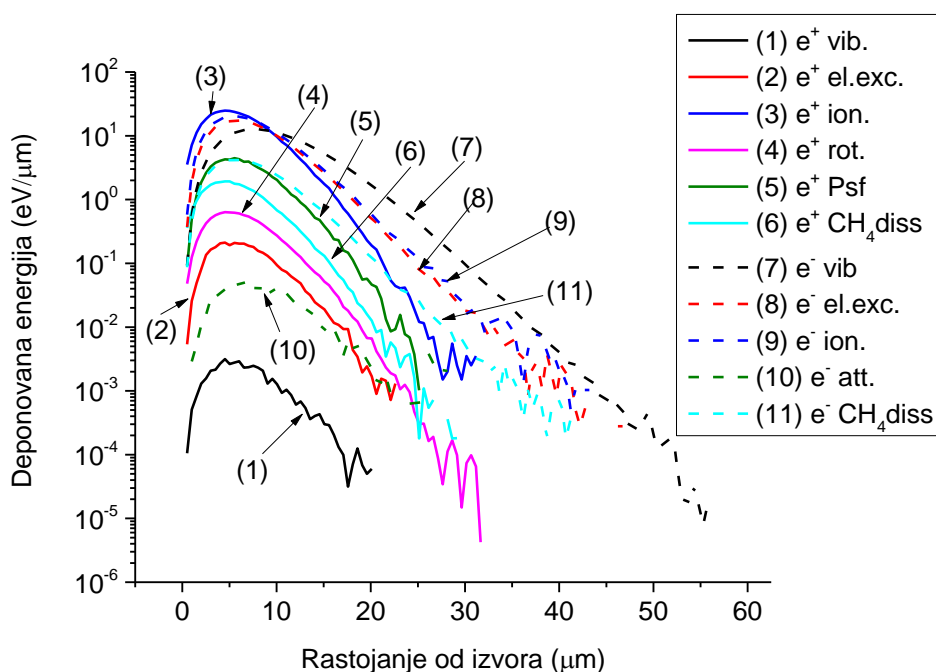
dometom i u većoj zapremini. Elektronski sudari su brojni, i pored toga što pojedinačno predaju manje količine energije, i dalje mogu da naprave značajan broj oštećenja. Ovo se vidi kroz veći broj disocijacija indukovanih elektronima (označene kao plave zvezdice) koji značajno prevazilazi broj disocijacija direktno indukovanih pozitronima. Takođe domet ovih događaja je veći za elektrone. Ipak, ovakvi efekti značajno variraju od trajektorije do trajektorije različitih pozitrona, i kao što je pokazano za neke trajektorije se mogu drastično razlikovati, iako su početni uslovi identični. Zato smatramo da su usrednjene vrednosti, po svim trajektorijama, daleko bolja predstava svih relevantnih procesa i veličina.



Slika 7.7 Trajektorija pozitrona emitovanog sa energijom od 800 eV tokom koje je stvoren veći broj sekundarnih elektrona pre nego što je došlo do formiranja pozitronijuma. Oko 10 sekundarnih elektrona, započinje svoje trajektorije, prikazane kroz veliki broj svetlo plavih tačaka koje predstavljaju sudare elektrona. Disocijativni sudari, indukovani od strane sekundarnih elektrona su prikazani kao tamno plave zvezde.

7.3.2 Prostorno energijski profili i usrednjene vrednosti za sudare pozitrona i sekundarnih elektrona

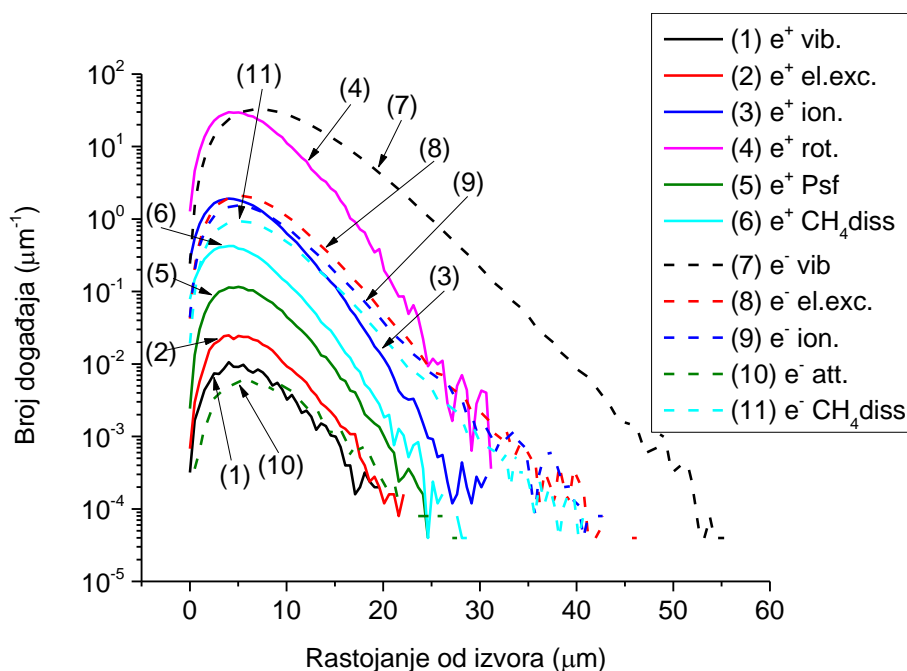
Kako bismo izveli generalne zaključke i napravili poređenja, simulirano je na hiljade trajektorija, čije su osobine usrednjene po različitim obzervablama. Uobičajena veličina jeste energija deponovana u tkivu. Na slici 7.8, prikazujemo energiju koja je deponovana, po jednom pozitronu u funkciji rastojanja od izvora. Monte Karlo tehnika nam dozvoljava da razdvojimo različite procese i njihov doprinos u funkciji rastojanja. Drugim rečima, ovaj grafik predstavlja prostorno razloženu raspodelu gubitka energije po svim različitim sudarnim procesima na različitim rastojanjima od izvora, normalizovanu ukupnim brojem simuliranih pozitrona po jedinici pređenog puta. U slučaju nekonzervativnog sudara, kakav je formiranje pozitronijuma, ukupna energija projektila je računata kao gubitak energije pošto se uklanja iz roja pozitrona i pretvara u par gama zraka.



Slika 7.8 Prostorna raspodela energije deponovane u sredini od strane pozitrona i sekundarnih elektrona, po jednom emitovanom pozitronu, za različite sudarne procese. Pune linije predstavljaju sudare pozitrona (1 - vibraciona eksitacija, 2 - elektronska eksitacija, 3 - jonizacija, 4 - rotaciona eksitacija, 5- formiranje Ps, 6 - CH₄ disocijacija). Isprekidane linije predstavljaju sudare elektrona (7 - vibraciona eksitacija, 8 - elektronska eksitacija, 9 - jonizacija, 10 - zahvat, 11 - CH₄ disocijacija).

Ovaj proces značajno doprinosi gubitku energije na malim i srednjim dometima (do $15\mu m$). U istom dometu, oko 10 puta veći doprinos čine jonizacije pozitronom i jonizacije i elektronske eksitacije elektronom. Disocijacija, kako je prethodno definisana, doprinosi približno koliko i proces formiranja pozitronijuma. Ipak, na većim rastojanjima, pozitroni ne doprinose značajno deponovanoj energiji, jer je njihov domet kraći od dometa elektrona. Prostorni profili za pozitrone i elektrone se razlikuju, jer pozitroni dostižu maksimum deponovane energije bliže izvoru dok elektroni imaju skoro dvostruko veći domet. Disocijativni procesi, koje indukuju pozitroni, prate profil drugih pozitronskih procesa, dok elektronske disocijacije, prate profil sekundarnih elektrona. U krajnjem, kinetička energija koja je predata (deponovana) sredini putem elektrona, nekoliko puta je veća od energije koju direktno deponuje elektron.

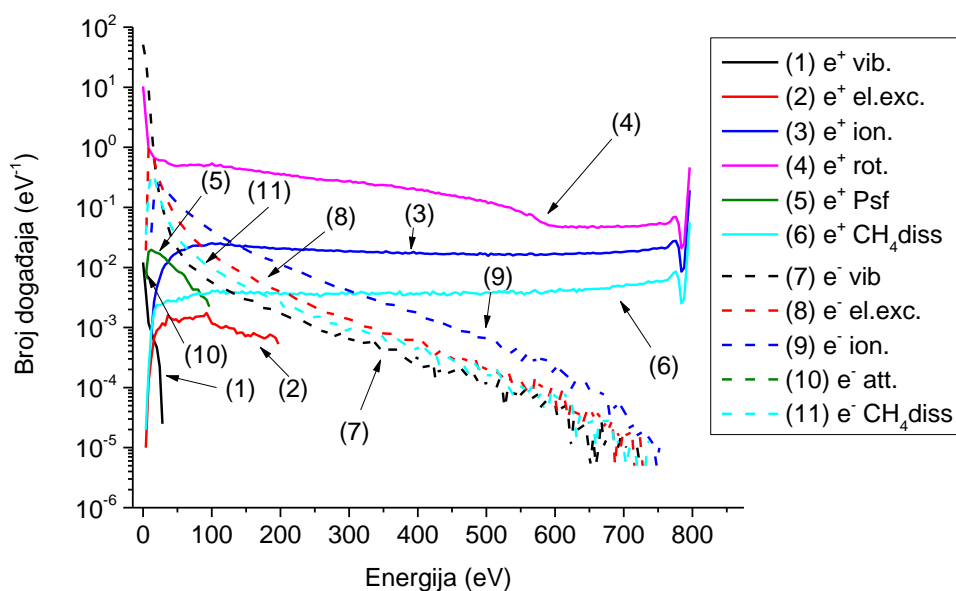
Na slici 7.9 predstavljena je prostorna raspodela sudarnih događaja po jedinici dužine, normalizovana na jedan početni pozitron. Uzorkovana je pozicija (rastojanje od



Slika 7.9 Raspodela sudarnih događaja u funkcije rastojanja od izvora. Pune linije predstavljaju sudare pozitrona (1 - vibraciona eksitacija, 2 - elektronska eksitacija, 3 - jonizacija, 4 - rotaciona eksitacija, 5 - formiranje Ps, 6 - CH₄ disocijacija). Isprekidane linije predstavljaju sudare elektrona (7 - vibraciona eksitacija, 8 - elektronska eksitacija, 9 - jonizacija, 10 - zahvat, 11 - CH₄ disocijacija).

izvora) svakog događaja, i povezana sa odgovarajućom raspodelom tipa sudara. Vidimo da rotacione eksitacije, indukovane pozitronom, i vibracione eksitacije indukovane elektronima, uprkos brojnim sudarima, daju jako malu deponovanu energiju (slika 7.8). Udeo sudara formiranja pozitronijuma i jonizacionih sudara je relativno mali u poređenju sa drugim procesima, ali oni definišu rast broja naelektrisanih čestica i kako se granaju putanje. Ponovo, procesi koje indukuju elektroni se prostiru dalje od izvora, i daleko su brojniji usled činjenice da se u proseku generiše oko 10 elektrona po jednom pozitronu koji krene iz izvora.

Slika 7.10 predstavlja raspodelu sudarnih događaja prema incidentnoj energiji čestice projektila (bilo elektrona ili pozitrona) u toku termalizacije pozitrona i sekundarnih elektrona. Incidentna kinetička energija se uzorkuje, povezuje sa odgovarajućom raspodelom vrste sudara za sve simulirane čestice i normalizuje na jedan početni pozitron. Pik prikazanih krivih na 800 eV odgovara činjenici da svi pozitroni kreću sa istom početnom energijom (800 eV) na kojoj naprave prvi sudar. Rupa u raspodeli odmah ispod



Slika 7.10 Raspodela sudarnih događaja u funkciji energije čestice projektila u toku termalizacije pozitrona i sekundarnih elektrona. Pune linije predstavljaju sudare pozitrona (1 - vibraciona eksitacija, 2 - elektronska eksitacija, 3 - jonizacija, 4 - rotaciona eksitacija, 5- formiranje Ps, 6 - CH₄ disocijacija). Isprekidane linije predstavljaju sudare elektrona (7 - vibraciona eksitacija, 8 - elektronska eksitacija, 9 - jonizacija, 10 - zahvat, 11 - CH₄ disocijacija).

800 eV na krivama za pozitrone jeste posledica gubitka energije, primarno u jonizacionim sudarima, gde pozitroni izgube dovoljno energije da "preskoče" ovu oblast, što rezultuje u manjem broju sudara. Dalji sudari dovode do širenja energijske raspodele elektrona te se takve strukture ne javljaju na nižim energijama. Primetno je da procesi koje indukuju elektroni dostižu maksimum na niskim energijama. Ovo proizlazi iz činjenice da sekundarni elektroni koji nastaju procesom jonizacije, imaju energiju pri nastanku daleko manju od početnih pozitrona.

7.4 Zaključak

Pokazali smo kako se ista tehnika kojom se opisuje transport, trapovanje i plazma hemija indukovana elektronima, može primeniti za simulaciju pozitrona u gasovima i modelima živog tkiva. Predstavljeni model opisuje disocijacije molekula, indukovane pozitronima visoke energije i sekundarnim elektronima. Dodatno, moguće je uključiti i presek za disocijativni zahvat niskoenergijskih elektrona (Resigno et al. 1994; Ptasińska and Sanche, 2007) kako bi se ispitalo kako pojedinačni događaji mogu uzrokovati oštećenja, kao i da se ispita stepen korelacije deponovane energije i oštećenja tkiva.

Iz prikazanih rezultata, može se zaključiti da su neki od manje frekventnih procesa, koji imaju velike energije praga, u pogledu radijativnih oštećenja, važniji od procesa na niskim energijama (što je slučaj kod elektrona u plazmi) pošto se originalni pozitroni emituju sa vrlo visokim energijama. Takođe, može se zaključiti da se domet ovih procesa prostire izvan dometa koji dostižu inicijalni pozitroni što je posledica činjenice, da neki sekundarni elektroni mogu dobiti značajne energije. Zaključuje se da je kritičan podatak, neophodan za popravku preciznosti modela transporta pozitrona u ljudskom tkivu raspodele energije prilikom procesa jonizacije molekula vode pozitronom (u ovom slučaju, korišćen je čisto elektronski model (Opal et al. 1971)).

Jasno je da postoji dosta prostora za unapređenje postojećeg modela, ali prikazani rezultati su dovoljni da naglase kako je polje biohemije indukovane pozitronima otvoreno za izučavanje koristeći iste alate korišćene u fizici jonizovanih gasova (posebno model rojeva), pogotovo uz sve veću dostupnost elementarnih podataka o binarnim sudarima

pozitrona. Za detaljnu predstavu organske materije neophodno je izmeriti brojne preseke za različite ugljovodonike kao i ovladati modelima transporta naelektrisanih čestica u polarnim tečnostima kao što je voda, što i dalje stoji kao otvoren problem.

U kojoj meri rezultati prikazani u okviru ovog poglavlja, kao i nedavna istraživanja drugih naučnih timova na ovu temu, mogu da utiču na promene preporuka i standarda u okviru dozimetrije i nuklearne medicine u ovom trenutku nije očigledno, ali je jasno da je neophodna dopuna trenutno prihvaćenih modela, kako dozimetrije usled pozitronskog zračenja (kao na primer kod PET dijagnostike) tako i dozimetrije jonizujućeg zračenja inače, koja bi uzela u obzir stohastičku prirodu procesa oštećenja DNK materijala. U svakom slučaju, ovakvi iskoraci su neophodni kako bi se ukazalo na to koji nedostajući podaci su od većeg značaja i u kom pravcu bi trebalo usmeriti eksperimente kako bi se pre došlo do konkretnih pomaka i u domenu dozimetrije i zaštite, ali i u domenu performansi samih uređaja u pogledu kvaliteta medicinske slike, rezolucije, vremena snimanja i slično.

8. Zaključak i pregled naučnih doprinosa

U okviru ove disertacije analizirali smo transport pozitrona u gasu, u uslovima koji se direktno odnose na postojeće sisteme i aktuelne probleme. U tom smislu, disertacija se može podeliti na tri dela, na osnovu konkretnog sistema koji se analizira: pozitronski trapovi, kompresija snopa pozitrona rotirajućim poljem i termalizacija pozitrona u biološki relevantnoj sredini. Za analizu pomenutih problema korišćena je Monte Karlo tehnika u računarskom kodu (kodovima) koji se, iako je za potrebe ove disertacije pisan u potpunosti, snažno naslanja na iskustvo i kodove "Laboratorije za gasnu elektroniku" Instituta za fiziku u Beogradu, u okviru koje se slični kodovi već skoro dve decenije koriste za analizu transporta elektrona, jona i u manjoj meri pozitrona u gasovima. Može se reći i kako je računarski kod koji je korišćen u ovoj disertaciji adaptacija postojećih kodova za rad u uslovima ograničene geometrije i specifičnih polja.

Za opis rada pozitronskih trapova tradicionalno se koristila terminologija monoenergijskih snopova i prvenstveno fenomenološki analizirala eksperimentalna opažanja. Iako su, kroz više od 25 godina eksperimentalnog rada i iskustva, performanse trapova prilično optimizovane, analiza predstavljena u ovoj disertaciji, u trenutku podnošenja na uvid, jeste jedina kvantitativna teorijska analiza rada trapa koja se bazira na fundamentalnim sudarnim procesima pozitrona sa molekulima. Pokazali smo da zbog relativno široke energijske raspodele, kao i stohastičke prirode sudarnih procesa u gasu, predstava oblaka pozitrona u vidu monoenergijskog snopa nije adekvatna, pogotovo za analizu parametara kao što je srednja energija pozitrona, ili vreme termalizacije. Formirani model, odnosno računarska simulacija, je u stanju da detaljno prati pozitrone od izlaska sa moderatora do konačne termalizacije. Kroz simulaciju je otkriven i jedan mod gubitka pozitrona, kroz proces rasejanja unazad unutar prvog stepena, koji do sada nije razmatran u literaturi. Utvrđeni su teorijski limiti efikasnosti trapovanja usled prirode molekulskih procesa elektronske eksitacije i formiranja pozitronijuma na molekulu azota, i predložen je novi metod trapovanja pomoću CF_4 kao pozadinskog gasa za koji simulacije predviđaju nekoliko puta veću efikasnost. Na standardnom pozitronskom trapu u laboratoriji na University College London je pokušana primena predloženog metoda trapovanja na CF_4 i

utvrđeno je da usled načina konstrukcije najveći broj pozitronskih trapova, koji su trenutno u upotrebi, nije pogodan za konverziju na novi način rada pomoću CF₄. Urađen je niz merenja, kojim su validirane simulacije i predložene su smernice kojih bi se trebalo pridržavati pri konstrukciji novih trapova kako bi bili pogodni za trapovanje na CF₄ i omogućili značajan napredak u efikasnosti.

Kompresija snopa pozitrona rotirajućim poljem se u praksi uspešno koristi kako bi se smanjio prečnik izlaznog snopa iz pozitronskog trapa, povećala gustina trapovanih pozitrona i produžilo vreme života pozitrona u akumulacionom stepenu trapa kroz sprečavanje difuzije pozitrona na zidove elektroda. Postojeća eksperimentalna istraživanja nisu u stanju da objasne poreklo efekta kompresije u uslovima kada je gustina pozitrona u akumulacionom stepenu daleko ispod plazma limita. Jedina postojeća teorijska analiza efekta kompresije (Isaac et al. 2011) daje dobar fit eksperimentalnih opažanja ali u samoj analizi efekta pribegava nefizičkom opisu interakcije pozitrona sa pozadinskim gasom, opisujući sve različite sudarne procese jednim faktorom viskoznog otpora. Pri tome vrednosti faktora viskoznog otpora nemaju utemeljenje u uslovima eksperimenta (pritisak gasa, energije pozitrona) već se koriste kao fitting parametar. Koristeći predloženi (Isaac et al. 2011), idealizovan, oblik potencijala u našoj simulaciji i analitičko rešenje trajektorije pozitrona, uz prethodno formiran set sudarnih preseka za interakciju pozitrona sa molekulima CF₄, bez ikakvih daljih pretpostavki i aproksimacija, demonstrirali smo postojanje kompresije u uslovima prethodno izvođenih eksperimenata. Kroz analizu strukture trajektorije, i frekvence različitih tipova sudara nedvosmisleno smo pokazali da je efekat kompresije snopa pozitrona u jednočestičnom, odnosno u režimu roja, posledica interakcije kompleksne prirode trajektorije pozitrona u asimetrično primenjenom rotirajućem polju i sudarnih procesa, na prvom mestu vibracionih eksitacija, koja dovodi do rezonantnog transporta pozitrona ka osi trapa.

U okviru analize termalizacije pozitrona u biološki relevantnoj sredini, urađena je analiza trajektorija pozitrona tokom termalizacije u sredinama vodene pare, kao i vodene pare sa organskim primesama kao modelom oštećenja DNK materijala u živom tkivu. Slične analize su rađene i ranije, ali su kao ulazni podaci skoro isključivo korišćeni

elektronski sudarni preseći. Dozimetrijski rezultati koji se koriste u zvaničnim preporukama zdravstvenih organizacija, takođe su ostvareni korišćenjem elektronskih preseka za interakciju sa vodom usled nedostatka boljih setova podataka u tom trenutku. U ovoj disertaciji korišćeni su prvenstveno eksperimentalno izmereni preseći za interakciju pozitrona sa H_2O a samo nedostajući podaci su popunjeni teorijskim proračunima ili elektronskim presecima gde je to opravdano. Ovakve setove preseka je neophodno normirati i validirati kroz eksperimente sa rojevima. Kako pozitronski eksperimenti sa rojevima u ovom trenutku praktično ne postoje u onom smislu u kojem se izvode sa elektronima, predložili smo usrednjene veličine poput vremena termalizacije, energije predate u sudarima sa gasom ili domet pozitrona kao merljive veličine koje se mogu iskoristiti za normiranje preseka. Takođe, formulisali smo i jednostavan model u kojem smo u vodenu sredinu dodali organske elemente kroz presek za disocijaciju molekula metana i uz profil energije predate sredini, analizirana je i raspodela pojedinačnih događaja disocijacije metana, kao procesa analognom oštećenju biološkog materijala. Identifikovan je proces jonizacije kao najvažniji proces kojem se treba posvetiti dodatna pažnja jer se ispostavilo da je raspodela energije prilikom procesa jonizacije molekula vode pozitronom ključni podatak koji nedostaje kako bi se popravila preciznost modela transporta pozitrona u tkivu zato što se najveći deo energije preda, a i najveći deo hemije odvija, preko sekundarnih elektrona koje pozitron napravi tokom termalizacije u tkivu. Utvrđeno je da ne postoji nužno korelacija između profila energije predate sredini i pojedinačnih događaja oštećenja biološkog materijala (bilo od strane primarnog pozitrona ili sekundarnih elektrona) što jasno ukazuje na potrebu da se dozimetrijski modeli unaprede kako bi se uzela u obzir stohastička priroda procesa oštećenja molekula DNK.

9. Literatura

- Amoretti M., et al., *Nature* **419** (2002) 456.
- Anderson C. D., *Phys. Rev.* **43** (1933) 491.
- Andresen G. B., et al., *Nature* **468** (2010) 673.
- Andresen G. B., et al., *Nature Phys.* **7** (2011) 558.
- Accardo L., et al., *Phys. Rev. Lett.* **113** (2014) 121101.
- Aharonov Y., Avignone F. T. III, Brodzinski R.L., Collar J. I., García E., Miley H. S., Morales A., Nussinov S., Ortiz de Solórzano A., Puimedón J., Reeves, J. H., Sáenz C., Salinas A., Sarsa M. L., Villar, J. A., *Phys. Rev. D* **52** (1995) 3785.
- Baluja K. L., Jain A., *Phys. Rev. A* **45** (1992) 7838.
- Banković A., Marler J. P., Šuvakov M., Malović G., Petrović Z. Lj., *Nucl. Instr. and Meth. B* **266** (2008) 462.
- Bankovic A., Petrovic Z. Lj., Robson R. E., Marler J. P., Dujko S., Malovic G., *Nucl. Instrum. Meth. B* **267** (2009) 350.
- Banković A., Dujko S., White R. D., Marler J. P., Buckman S. J., Marjanović S., Malović G., Garcia G., Petrović Z. Lj., *New J. Phys.* **14** (2012a) 035003.
- Bankovic A., Dujko S., White R. D., Buckman S. J., Petrovic Z. Lj., *Nucl. Instrum. Meth. B* **279** (2012b) 92
- Banković A., Doktorska disertacija "Sudari i transport pozitrona u gasovima: kinetički fenomeni i mogućnost primena u biomedicini" (2012) Univerzitet u Beogradu, Fizički Fakultet, Beograd, Srbija.
- Bankovic A., Dujko S., Marjanovic S., White R. D., Petrovic Z. Lj., *Eur. Phys. J. D* **68** (2014) 127.
- Barnes L. D., Gilbert S. J., Surko C. M., *Phys Rev A* **67** (2003) 032706.
- Baró J., Sempau J., Fernandez-Varea J. M., Salvat F., *Nucl. Instrum. Methods B* **100** (1995) 31.
- Baur, G., Boero G., Brauksiepe S., Buzzo A., Eyrich W., Geyer R., Grzonka D., Hauffe J., Kilian K., LoVetere M., Macri M., Moosburger M., Nellen R., Oelert W., Passagio S., Pozzo A., Röhrich K., Sachs K., Schepers G., Sefzick T., Simon R.S., Stratmann R., Stinzing F., Wolke M., *Phys. Lett. B* **368** (1996) 251.

Beddoe A. H., *The Brit. J. Radiol.* **70** (1997) 665.

Blanco F., García G. *Phys. Lett. A* **330** (2004) 230.

Bose N., Paul D. A. L., Tsai J.-S., *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* **14** (1981) L227.

Bossart R., et al., Report No. CERN-PS-90-56-LP (1990).

Brandes G. R., Canter K., Krupyshev A., Xie R., Mills A. P., *Mater. Sci. Forum* **255-257** (1997) 653.

Brown F. B., (ed) *MCNP—A General Monte Carlo N-Particle Transport Code, Version 5, Report LA-UR-03-1987* (Los Alamos, NM: Los Alamos National Laboratory) (2003).

Bzenić S., Petrović Z. Lj., Raspopović Z. M., Makabe T., *Jpn. J. Appl. Phys.* **38** (1999) 6077.

Bzenić S., Raspopović Z. R., Sakadžić S., Petrović Z. Lj., *IEEE Trans. Plasma Sci.* **27** (1999a) 78.

Carrier J. F., Archambault L., Beaulieu L., Roy R., *Med. Phys.* **31** (2004) 484.

Carrier J. F., Beaulieu L., Therriault-Proulx F., Roy R., *Med. Phys.* **33** (2006) 595.

Campeanu R. I., *Nucl. Instrum. Meth. B* **267** (2009) 239.

Canter K.F., Coleman P.G., Griffith T.C., Heyland G.R., *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* **5** (1972) L167.

de Carvalho C. R. C., do N. Varella M. T., Lima M. A. P., da Silva E. P., Germano J. S. E., *Nucl. Instr. Methods B* **171** (2000) 33.

Cassidy D. B., Deng S. H. M., Greaves R. G., Maruo T., Nishiyama N., Snyder J.B., Tanaka H. K. M, Mils Jr A. P., *Phys. Rev. Lett.* **95** (2005) 195006.

Cassidy D B, Deng S H M, Greaves R G, Mills A P, *Rev. Sci. Instrum.* **77** (2006) 073106.

Cassidy D. B., Mills Jr A. P., *Nature* **449** (2007) 195.

Cassidy D. B., Meline V. E., Mills A. P., *Phys. Rev. Lett.* **104** (2010a) 173401.

Cassidy D B, Crivelli P, Hisakado T H, Liskay L, Meline V E, Perez P, Tom H W K, Mills Jr A P, *Phys. Rev. A* **81** (2010b) 012715.

Chamberlain O., Segrè E., Wiegand C., Ypsilantis T., *Phys. Rev.* **100** (1956) 947.

Champion C., *Phys. Med. Biol.* **48** (2003) 2147.

Champion C., Le Loirec C., *Phys. Med. Biol.* **51** (2006) 1707.

Champion C., Le Loirec C., *Phys. Med. Biol.* **52** (2007) 6605.

Charlton M., Laricchia G., *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **23** (1990) 1045.

Charlton M., Humberston J., (2000) *Positron Physics*, New York: Cambridge University Press.

Cherry W. H., Ph.D. Dissertation "Secondary electron emission produced from surfaces by positron bombardment" (1958) Princeton University, Princeton, New Jersey, USA.

Christophorou L. G., Hunter S. R., (1984) In: Christophorou, L.G. (Ed.), *Electron Molecule Interactions and Their Applications*, vol. 2. Academic Press, New York, USA.

Clarke J., van der Werf D. P., Griffiths B., Beddows D. C. S., Charlton M., Telle H. H., Watkeys P. R., *Rev. Sci. Instrum.* **77** (2006) 063302.

Coleman P. G. (2000) *Positron Beams and Their Applications* (ed P G Coleman), Singapore: World Scientific.

Cooper B. S., Alonso A. M., Deller A., Wall T. E., Cassidy D. B., *Rev. Sci. Instrum.* **86** (2015) 103101

Costello D. G., Groce D. E., Herring D. F., McGowan J. W., *Phys. Rev. B* **5** (1972) 1433.

Crompton R. W., *Adv. At. Mol. Opt. Phys.* **33** (1994) 97.

Dale J. M., Hulett L. D., Pendyala S., *Surf. Interface Anal.* **2** (1980) 199.

Danielson J. R., Surko C. M., O'Neil T. M., *Phys. Rev. Lett.* **99** (2007) 135005.

Danielson J. R., Dubin D. H. E., Greaves R. G., Surko C. M., *Rev. Mod. Phys.* **87** (2015) 247.

Darewych J. W., *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* **15** (1982) L415.

Davidson R. C., (2001) *Physics of non-neutral plasmas*, London: Imperial College Press, Singapore: World Scientific Publishing

DeBenedetti S., Cowan C. E., Konneker W. E., *Phys. Rev.* **76** (1949) 440.

DeMarco J. J., Solberg T. D., Smathers J. B., *Med. Phys.* **25** (1998) 1.

Deutsch M., *Phys. Rev.* **82** (1951) 455.

Dirac P. A. M., *Proc. Roy. Soc. Lond. A* **126** (1930) 360.

Dujko S., Raspopović Z. M., Petrović Z. Lj., Makabe T., *IEEE Trans. Plasma Sci.* **31** (2003) 711.

Dujko S., Ph. D. Dissertation "The multi term Boltzmann equation analysis and Monte Carlo study of hydrodynamic and Non-hydrodynamic charged particle swarms" (2009)

School of Engineering and Physical Science, James Cook University, Townsville, Australia.

DuMond J. M. W., Lind D. A., Watson B. B., *Phys. Rev.* **75** (1949) 1226.

Dwyer J. R., *Geophys. Research Lett.* **30** (2003) 8.

Dyatko N. A., Napartovich A. P., Petrović Z. Lj., Raspopović Z. R., Sakadžić S., *J. Phys. D: Appl. Phys.* **33** (2000) 375.

Elford M. T., (1972) In: McDaniel, E.W., McDowell, M.R.C. (Eds.), *Case Studies in Atomic Collision Physics II*. North-Holland Publishing Co., Amsterdam, Holland.

Estrada J., Roach T., Tan J. N., Yesley P., Gabrielse G., *Phys. Rev. Lett.* **84** (2000) 859.

Fischer D. A., Lynn K. G., Gidley D. W. *Phys. Rev. B* **33** (1986) 4479.

Forsythe G. E., Leibler R. A., *Math. Tables Aids Comp.* 4 (1950) 127.

Fuss M. C., Sanz A. G., Muñoz A., Blanco F., Brunger M. J., Buckman S. J., Limão -Vieira P., García G., *Applied Radiation and Isotopes*, **83** (2014) 159.

Gabrielse G., Bowden N. S., Oxley P., Speck A., Storry C. H., Tan J. N., Wessels M., Grzonka D., Oelert W., Schepers G., Sefzick T., Walz J., Pittner H., Hänsch T. W., Hessels E. A., (ATRAP Collaboration), *Phys. Rev. Lett.* **89** (2002) 213401.

Gahn C., Tsakiris G. D., Pretzler G., Witte K. J., Delfin C., Wahlstrom C. G., Habs D., *Appl. Phys. Lett.* **77** (2000) 2662.

Garcia G., Petrović Z. Lj., White R., Buckman S., *IEEE Trans. Plasma Sci.* **39** (2011) 2962.

Gerjuoy E., Stein S., *Phys. Rev.* **97** (1995) 1671.

Gianturco F. A., Mukherjee T., *Phys. Rev. A* **55** (1997) 1044.

Gil T. J., Resigno T. N., McCurdy C. W., Lengsfeld B. H., *Phys. Rev. A* **49** (1994) 2642

Gramsch E., Throwe J., Lynn K. G., *Appl. Phys. Lett.* **51** (1987) 1862.

Greaves R. G., Surko C. M., *Phys. Rev. Lett.* **85** (2000) 1883.

Greaves R. G., Surko C. M., *Nucl. Instrum. Meth. B* **192** (2002) 90.

Greaves R. G., Moxom J., *AIP Conf. Proc.* **692** (2003) 140.

Greaves R. G., Moxom J. M., *Phys. Plasmas* **15** (2008) 072304.

Gullikson E. M., Mills, Jr. A. P., *Phys. Rev. Lett.* **57** (1986) 376.

Hayashi M., (2003) *Bibliography of Electron and Photon Cross Sections with Atoms and*

Molecules, in 20th Century–Water Vapour–NIFS–Data–81 National Institute for Fusion Science, Oroshi-cho, Toki, Japan.

Heitler W. (1954) *The Quantum Theory of Radiation*, Oxford University Press.

Hollmann E. M., Anderegg F., Driscoll C. F., *Phys. Plasmas* **7** (2000) 2776.

Hoffman K. R., Dababneh M. S., Hsieh Y. F., Kauppila W. E., Pol V., Smart J. H., Stein T. S., *Phys. Rev. A* **25** (1982) 1393.

Huels M. A., Boudai B., Cloutier P., Hunting D., Sanche L., *J. Am. Chem. Soc.* **125** (2003) 4467

Hugenschmidt C., Piochacz C., Reiner M., Schreckenbach K., *New J. Phys.* **14** (2012) 055027.

Huxley L. G. H., Crompton R. W., (1974) *The Diffusion and Drift of Electrons in Gases* Wiley-Interscience, New York, USA.

Hylleraas E. A., Ore A., *Phys. Rev.* **71** (1947) 493.

ICRP Publication 60, (1991) Annals of International Commission on Radiological Protection.

ICRP Publication 80, (1998) Annals of International Commission on Radiological Protection.

Isaac C. A., Baker C. J., Mortensen T., van der Werf D. P., Charlton M. *Phys. Rev. Lett.* **107** (2011) 033201.

Itoh T. Musha T., *J. Phys. Soc. Japan* **15** (1960) 1675.

Jan S. et al., *Phys. Med. Biol.* **49** (2004) 4543.

Jørgensen L. V. et al. (ATHENA Collaboration) *Phys. Rev. Lett.* **95** (2005) 025002.

Kawrakow I., *Med. Phys.* **27** (2000a) 485.

Kawrakow I., *Med. Phys.* **27** (2000b) 499.

Kernoghan A. A., McAlinden M. T., Walters H. R. J., *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **28** (1995) 1079

Khatri R., Charlton M., Sferlazzo P., Lynn K. G., Mills Jr. A. P., Roellig L. O. *Appl. Phys. Lett.* **57** (1990) 2374.

Kurihara M., Petrović Z. Lj., Makabe T., *J. Phys. D: Appl. Phys.* **33** (2000) 2146.

Lahtinen, J., Vehanen A., Huomo H., Mäkinen J., Huttunen P., Rytsölä K., Bentzon M., Hautojärvi P., *Nucl. Inst. Meth. B* **17** (1986) 73.

Lucas J., Saelee H. T., *J. Phys. D: Appl. Phys.* **8** (1975) 640.

Lüders G., *Dan. Mat. Fys. Medd.* **28** (1954) 1.

Lynn K. G., Nielsen B., Quateman J. H., *Appl. Phys. Lett.* **47** (1985) 239.

Lynn K. G., Gramsch E., Usmar S. G., Sferlazzo P., *Appl. Phys. Lett.* **55** (1989) 87.

Maeda K., Makabe T., Nakano N., Bzenić S., Petrović Z. Lj., *Phys. Rev. E* **55** (1997) 5901.

Makabe T., Petrović Z., (2006) *Plasma Electronics: Applications in Microelectronic Device Fabrication*, Taylor & Francis - CRC Press, Boca Raton, Florida, USA.

Makochekanwa C., Sueoka O., Kimura M., *J. Phys. Conf. Series* **80** (2007) 012012.

Makochekanwa C., Banković A., Tattersall W., Jones A., Caradonna P., Slaughter D. S., Sullivan J. P., Nixon K., Brunger M. J., Petrović Z. Lj., Buckman S. J., *New J. Phys.* **11** (2009) 103036.

Mann A., Linder F., *J. Phys. B: At. Mol. Opt.* **25** (1992) 545.

Marjanović S., Master rad "*Termalizacija pozitronijuma u helijumu*" (2009) Univerzitet u Beogradu, Elektrotehnički fakultet, Beograd, Srbija.

Marjanović S., Šuvakov M. and Petrović Z. Lj. (2012) in *proceedings of 26th Summer School and International Symposium on the Physics of Ionized Gases* 337.

Matsumoto T., Chiba M., Hamatsu R., Hirose T., Yang J., Yu J., *Phys. Rev. A* **54** (1996) 1947.

Marler J. P., Surko C. M., *Phys. Rev. A* **72** (2005) 062713.

Marler J. P., Surko C. M., *Phys. Rev. A* **72** (2005a) 062702.

Marler J. P., Sullivan J. P., Surko C. M., *Phys. Rev. A* **71** (2005) 022701.

Marler J. P., Gribakin G. F., Surko C. M., *Nucl. Instrum. Meth. B* **247** (2006) 87.

Marler J. P., Petrović Z. Lj., Banković A., Dujko S., Šuvakov M., Malović G., Buckman S. J., *Phys. Plasmas* **16** (2009) 057101.

Mills Jr. A. P., *Phys. Rev. Lett.* **46** (1981) 717.

Mills Jr. A. P., *Positron Solid State Physics*, Proc. Int. School of Physics "Enrico Fermi", Course 83, eds. W. Brandt and A. Dupasquier (North Holland) (1983) 432.

Mills Jr. A. P., Gullikson E. M., *Appl. Phys. Lett.* **49** (1986) 1121.

Mitroy J., Berge L., Stelbovics A. T., *Phys. Rev. Lett.* **73** (1994) 2966.

Moadel R. M., Nguyen A. V., Lin E. Y., Lu P., Mani J., Blaufox M. D., Pollard J. W., Dadacheva E., *Breast Cancer Res.* **5** (2003) 199.

Mohorovičić S., *Astron. Nachr.* **253** (1934) 93.

Motohashi K., Soshi H., Ukai M., Tsurubuchi S., *Chem. Phys.* 213 (1996) 369.

Moxom J., Schrader D. M., Laricchia G., Xu J., Hullet L. D., *Phys. Rev. A* **62** (2000) 052708.

Muehllehner G., Karp J. S., *Phys. Med. Biol.* **51** (2006) R117.

Muñoz A., Oller J. C., Blanco F., Gorfinkiel J. D., García G., *Chem. Phys. Lett.* **433** (2007) 253.

Murphy T. J., Surko C. M., *Phys. Rev. A* **46** (1992) 5696.

Murtagh D. J., Arcidiacono C., Pešić Z. D., Laricchia G., *Nucl. Instrum. Methods B* **24** (2006) 92.

Natisin M. R., Danielson J. R., Surko C. M., *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* **47** (2014) 225209.

Natisin M. R., Danielson J. R., Surko C. M., *Appl. Phys. Lett.* **108** (2016) 024102.

Nelson W. R., Hirayama H., Rogers D. W. O., *SLAC Report* **265** (1985).

Ness K. F., Robson R. E., *Transport Theor. Stat.* **14** (1986) 257

von Neumann J., *Us Natl. Bur. Stand. Appl. Meth. Series* **12** (1951) 36

Nishimura T., Gianturco F. A., *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **37** (2004) 215.

Nishimura T., Gianturco F. A., *Eur. Phys. J. D* **33** (2005) 221

Opal C. B., Peterson W. K., Beaty E. C., *J. Chem. Phys.* **55** (1971) 4100.

Ore A. and Powell J. L., *Phys. Rev.* **75** (1949) 1696.

Oshima N., Kojima T. M., Niigaki M., Mohri A., Komaki K., Yamazaki Y., *Phys. Rev. Lett.* **93** (2004) 195001.

Petrović Z. Lj., Crompton R. W., Haddad G.N., *Aust. J. Phys.* **37** (1984) 23.

Petrović Z. Lj., Stojanović V., *J. Vac. Sci. Technol. A* **16** (1998) 329.

Petrović Z. Lj., Banković A., Dujko S., Marjanović S., Malović G., Sullivan J. P., Buckman S. J., *AIP Conf. Proc.* 1545 (2013) 115.

Petrović Z. Lj., Marjanović S., Dujko S., Banković A., Malović G., Buckman S., Garcia G., White R., Brunger M., *Appl. Rad. Isotop.* **83** (2014) 148.

- Platzman P. M., Mills Jr. A. P., *Phys. Rev. B* **49** (1994) 454.
- Podgorsak E. B., e.d. (2005) *Radiation Oncology Physics: A Handbook for Teachers and Students*, International atomic energy agency, Vienna.
- Procházka I., *Materials Structure* **8** (2001) 55.
- Ptasińska S., Sanche L., *Phys. Rev. E* **75** (2007) 031915.
- Raspopović Z. R., Sakadžić S., Bzenić S., Petrović Z. Lj., *IEEE Trans. Plasma Sci.* **27** (1999) 1241.
- Reid I. D., *Aust. J. Phys.* **32** (1979) 231.
- Rich A., *Rev. Mod. Phys.* **53** (1981) 127.
- Ristivojevic Z., Petrovic Z. Lj., *Plasma Sources Sci. Technol.* **21** (2012) 035001.
- Robson R. E., *Aust. J. Phys.* **37** (1984) 35.
- Ruark A. E. *Phys. Rev.* **68** (1945) 278.
- Saigusa T., Shimizu S., *Hyperfine Interact.* **89** (1994) 445.
- Schwinger J., *Physical Review* **82** (1951) 914.
- Shirai T., Tabata T., Tawara H., Itikawa Y., *At. Data Nucl. Data Tables* **80** (2002) **147**
- Shultz P. J., Lynn K. G., *Rev. Mod. Phys.* **60** (1988) 701.
- Siegel R. W., *Annual Review of Materials Science* **10** (1980) 393.
- Stojanović V., Jelenković B. M., Petrović Z. Lj., *J. Appl. Phys.* **81** (1997) 1601.
- Stojanović V., Petrović Z. Lj., *J. Phys. D: Appl. Phys.* **31** (1998) 834.
- Surko C. M., Leventhal M., Passner A., *Phys. Rev. Lett.* **62** (1989) 901.
- Surko C. M., Greaves R. G., *Radiat. Phys. Chem.* **68** (2003) 419.
- Surko C. M., Greaves R. G., *Phys. Plasmas* **11** (2004) 2333.
- Sullivan J. P., Jones A., Caradonna P., Makochekanwa C., Buckman S. J., *Rev. Sci. Instrum.* **79** (2008) 113105.
- Šašić O., Malović G., Strinić A., Nikitović Ž., Petrović Z. Lj., *New J. Phys.* **6** (2004) 74.
- Šuvakov M., Diplomski rad "Anizotropija rasejanja i termalni sudari u Monte Karlo simulacijama transporta elektrona u gasu" (2004) Univerzitet u Beogradu, Fizički fakultet, Beograd, Srbija.
- Šuvakov M., Petrovic Z. Lj., Marler J. P., Buckman S. J., Robson R. E., Malovic G., *New J. Phys.* **10** (2008) 053034.

Tennyson J., Private communication (2009).

Thorn P., Campbell L., Brunger M., *PMC Physics B* **2** (2009) 1.

Tong B. Y., *Phys. Rev. B* **5** (1972) 1436.

Tóth I., Campeanu R. I., Chiş V., Nagy L., *Phys. Lett. A* **360** (2006) 131.

Tóth I., Campeanu R. I., Chiş V., Nagy L., *Nucl. Instrum. Meth. B* **267** (2009) 362.

Tóth I., Campeanu R. I., Chiş V., Nagy L., *J. Phys. Conf. Series* **199** (2010) 012018.

Van Dyck Jr. R. S., Schwinberg P. B., Dehmelt H. G., *Phys. Rev. Lett.* **59** (1987) 26.

Vasumathi D., Amarendra G., Canter K. F., Mills Jr. A. P. *Appl. Surf. Sci.* **85** (1995) 154

Vehanen A., Lynn K. G., Schultz P. J., Eldrup M., *Appl. Phys. A* **32** (1983) 163.

Vrhovac S. B., Petrović Z. Lj., *Phys. Rev. E* **53** (1996) 4012.

Wahl R. L., (2002) *Principles and Practice of Positron Emission Tomography* Lippincott, Williams and Wilkins, Philadelphia.

Wheeler J. A., *Ann. N.Y. Acad. Sci.* **48** (1946) 219.

White R. D., Ness K. F., Robson R. E., Li B., *Phys. Rev. E* **60** (1999) 2231.

White R. D., Robson R. E., *Phys. Rev. Lett.* **102** (2009) 230602.

White R. D., Tattersall W., Boyle G., Robson R. E., Dujko S., Petrovic Z. Lj., Bankovic A., Brunger M. J., Sullivan J. P., Buckman S. J., Garcia G., *Appl. Rad. Isotop.* **83** (2014) 77.

Vetterling W. T., (2002) *Numerical Recipes Example Book (C++): The Art of Scientific Computing*, Cambridge University Press, Cambridge, UNited Kingdom.

Wolfenstein L., Ravenhall, D. G., *Phys. Rev.* **88** (1952) 279.

Yang, C. N., *Phys. Rev.* **77** (1950) 242.

Zecca A., Chiari L., García G., Blanco F., Trainotti E., Brunger M. J., *New J. Phys.* **13** (2011) 063019.

Dodatak A

Test proračuni:

U tabeli A1 dati su rezultati test proračuna za Ridov model i upoređeni sa rezultatima Boltzmann (Multi-Term Boltzmann Equation Solver, BE) koda predstavljenim u disertaciji dr Saše Dujka (Dujko 2009) za parametre simulacije $E/n_0 = 12Td$ i vrednostima redukovanog magnetskog polja (B/n_0) 50 Hx i 200 Hx u paralelnoj konfiguraciji polja gde su električno i magnetsko polje usmereni duž z ose.

Tabela A1 Poređenje transportnih osobina za Ridov model

B/n_0 (Hx)	ε (eV)	Wz (10^4 m/s)	n_0D_{xx} (10^{24} m $^{-1}$ s $^{-1}$)	n_0D_{yy} (10^{24} m $^{-1}$ s $^{-1}$)	n_0D_{zz} (10^{24} m $^{-1}$ s $^{-1}$)	
50	MC	0.267	6.786	0.985	0.985	0.584
	BE	0.269	6.838	1.011	1.011	0.569
	Δ (%)	0.7	0.7	2.5	2.5	2.6
200	MC	0.267	6.807	0.373	0.373	0.572
	BE	0.269	6.838	0.383	0.383	0.569
	Δ (%)	0.7	0.5	2.6	2.6	0.5

U tabeli A2-A4 dati su rezultati test proračuna za Lukas-Sili model, za vrednosti parametra F : 0, 0.5 i 1, respektivno i upoređeni sa rezultatima Boltzmann (Multi-Term Boltzmann Equation Solver, BE) koda predstavljenim u disertaciji dr Saše Dujka (Dujko 2009) za parametre simulacije $E/n_0 = 30Td$ i vrednostima redukovanog magnetskog polja (B/n_0) 100 Hx, 200 Hx i 500 Hx u paralelnoj konfiguraciji polja gde su električno i magnetsko polje usmereni duž z ose.

Tabela A2 Poređenje transportnih osobina za Lukas-Sili model za parametar $F=0$

B/n_0 (Hx)		ε (eV)	R_i ($10^{-16}m^3s^{-1}$)	W_z (10^5 m/s)	W_z^* (10^5 m/s)	n_0D_{xx} ($10^{25}m^{-1}s^{-1}$)	$n_0D_{xx}^*$ ($10^{25}m^{-1}s^{-1}$)	n_0D_{zz} ($10^{25}m^{-1}s^{-1}$)	$n_0D_{zz}^*$ ($10^{25}m^{-1}s^{-1}$)
100	MC	7.348	-	2.031	-	2.270	-	3.110	-
	BE	7.359	-	2.055	-	2.261	-	3.093	-
	Δ (%)	0.2	-	1.2	-	0.4	-	0.5	-
200	MC	7.398	-	2.068	-	1.126	-	3.080	-
	BE	7.359	-	2.054	-	1.119	-	3.093	-
	Δ (%)	0.5	-	0.7	-	0.6	-	0.4	-
500	MC	7.401	-	2.054	-	0.251	-	3.151	-
	BE	7.359	-	2.055	-	0.247	-	3.093	-
	Δ (%)	0.6	-	0.05	-	1.9	-	1.9	-

Tabela A3 Poređenje transportnih osobina za Lukas-Sili model za parametar $F=0.5$

B/n_0 (Hx)		ε (eV)	R_i ($10^{-16}m^3s^{-1}$)	W_z (10^5 m/s)	W_z^* (10^5 m/s)	n_0D_{xx} ($10^{25}m^{-1}s^{-1}$)	$n_0D_{xx}^*$ ($10^{25}m^{-1}s^{-1}$)	n_0D_{zz} ($10^{25}m^{-1}s^{-1}$)	$n_0D_{zz}^*$ ($10^{25}m^{-1}s^{-1}$)
100	MC	6.669	1.517	2.092	2.533	1.985	2.186	2.939	3.342
	BE	6.672	1.560	2.069	2.505	2.038	2.192	2.847	3.226
	Δ (%)	0.05	2.8	1.1	1.1	2.6	0.3	3.2	3.6
200	MC	6.656	1.475	2.060	2.485	0.987	1.055	2.925	3.307
	BE	6.672	1.560	2.069	2.505	1.011	1.082	2.847	3.226
	Δ (%)	0.2	5.4	0.4	0.8	2.4	2.5	2.7	2.5
500	MC	6.662	1.463	2.071	2.463	0.217	0.240	2.817	3.246
	BE	6.672	1.560	2.069	2.505	0.223	0.239	2.847	3.226
	Δ (%)	0.1	6.2	0.1	1.7	2.7	0.4	1.1	0.6

Tabela A4 Poređenje transportnih osobina za Lukas-Sili model za parametar $F=1$

B/n_0 (Hx)	ε (eV)	R_i ($10^{-16} \text{m}^3 \text{s}^{-1}$)	W_z (10^5m/s)	W_z^* (10^5m/s)	$n_0 D_{xx}$ ($10^{25} \text{m}^{-1} \text{s}^{-1}$)	$n_0 D_{xx}^*$ ($10^{25} \text{m}^{-1} \text{s}^{-1}$)	$n_0 D_{zz}$ ($10^{25} \text{m}^{-1} \text{s}^{-1}$)	$n_0 D_{zz}^*$ ($10^{25} \text{m}^{-1} \text{s}^{-1}$)	
100	MC	6.194	2.667	2.060	2.723	1.874	2.127	2.731	3.202
	BE	6.221	2.719	2.076	2.780	1.892	2.149	2.671	3.221
	Δ (%)	0.4	1.9	0.8	2.1	1.0	1.0	2.2	0.6
200	MC	6.197	2.711	2.086	2.786	0.908	1.047	2.710	3.419
	BE	6.221	2.719	2.076	2.780	0.941	1.060	2.671	3.221
	Δ (%)	0.4	0.3	0.5	0.2	3.5	1.2	1.5	6.1
500	MC	6.196	2.839	2.077	2.767	0.194	0.225	2.683	3.422
	BE	6.221	2.719	2.076	2.780	0.208	0.234	2.671	3.221
	Δ (%)	0.4	4.4	0.05	0.5	6.7	3.8	0.4	6.2

U tabeli A5 dati su rezultati test proračuna za modifikovani Ness-Robson model, za vrednosti parametra $p=0.5$ i $a=5 \times 10^{-4}$, respektivno i upoređeni sa rezultatima Boltzmann (Multi-Term Boltzmann Equation Solver, BE) koda predstavljenim u disertaciji dr Saše Dujka (Dujko 2009) za parametre simulacije $E/n_0 = 10Td$ i vrednostima redukovano magnetnog polja (B/n_0) 100 Hx, 200 Hx i 500 Hx u paralelnoj konfiguraciji polja gde su električno i magnetsko polje usmereni duž z ose.

Tabela A5 Poređenje transportnih osobina za Ness-Robson

B/n_0 (Hx)	ε (eV)	R_a ($10^{-17} \text{m}^3 \text{s}^{-1}$)	W_z (10^4m/s)	W_z^* (10^4m/s)	$n_0 D_{xx}$ ($10^{25} \text{m}^{-1} \text{s}^{-1}$)	$n_0 D_{xx}^*$ ($10^{25} \text{m}^{-1} \text{s}^{-1}$)	$n_0 D_{zz}$ ($10^{25} \text{m}^{-1} \text{s}^{-1}$)	$n_0 D_{zz}^*$ ($10^{25} \text{m}^{-1} \text{s}^{-1}$)	
100	MC	5.414	1.622	7.307	6.927	1.737	1.674	2.612	2.631
	BE	5.444	1.613	7.326	7.022	1.727	1.689	2.603	2.643
	Δ (%)	0.6	0.6	0.3	1.4	0.6	0.9	0.3	0.5
200	MC	5.453	1.628	7.382	6.936	0.851	0.785	2.737	2.897
	BE	5.444	1.613	7.326	7.022	0.838	0.820	2.603	2.643
	Δ (%)	0.2	0.9	0.8	1.2	1.6	4.6	5.1	9.6
500	MC	5.451	1.583	7.366	6.681	0.175	0.175	2.633	2.892
	BE	5.444	1.613	7.326	7.022	0.182	0.178	2.603	2.643
	Δ (%)	0.1	1.9	0.5	4.9	3.8	1.7	1.2	9.4

Dodatak B - Podaci o sudarnim presecima

U ovom dodatku, u nastavku su date tabele sa setovima sudarnih preseka za interakciju pozitrona sa molekulima N_2 , CF_4 i H_2O uz presek za disocijaciju molekula metana, koji su korišćeni u simulacijama pri izradi ove disertacije.

Preseci za interakciju pozitrona sa N ₂ (1/4)													
elastični		rotacioni 1->3		rotacioni 2->4		rotacioni 3->5		rotacioni 4->6		rotacioni 5->7		rotacioni 6->8	
ε(eV)	σ(A ²)	ε(eV)	σ(A ²)	ε(eV)	σ(A ²)	ε(eV)	σ(A ²)	ε(eV)	σ(A ²)	ε(eV)	σ(A ²)	ε(eV)	σ(A ²)
0.000	22.62	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
0.000	22.62	0.00248	0	0.003472	0	0.004464	0	0.005456	0	0.006448	0	0.00744	0
0.001	22.53	0.1	2.91429E-03	0.1	1.19427E-02	0.1	4.8372E-03	0.1	1.63653E-02	0.1	5.82113E-03	0.1	1.782E-02
0.010	21.66	0.2	2.93276E-03	0.2	1.20496E-02	0.2	4.89338E-03	0.2	1.65997E-02	0.2	5.92059E-03	0.2	1.81745E-02
0.020	20.74	0.3	2.93889E-03	0.3	1.20851E-02	0.3	4.91196E-03	0.3	1.66771E-02	0.3	5.95337E-03	0.3	1.82912E-02
0.026	20.23	0.4	2.94195E-03	0.4	1.21027E-02	0.4	4.92123E-03	0.4	1.67157E-02	0.4	5.96979E-03	0.4	1.83492E-02
0.030	19.86	0.5	2.94379E-03	0.5	1.21133E-02	0.5	4.92678E-03	0.5	1.67388E-02	0.5	5.97947E-03	0.5	1.8394E-02
0.050	18.25	0.6	2.94501E-03	0.6	1.21204E-02	0.6	4.93048E-03	0.6	1.67542E-02	0.6	5.98538E-03	0.6	1.84071E-02
0.100	14.86	0.7	2.94588E-03	0.7	1.21254E-02	0.7	4.93311E-03	0.7	1.67652E-02	0.7	5.99062E-03	0.7	1.84236E-02
0.300	7.31	0.8	2.94654E-03	0.8	1.21292E-02	0.8	4.93509E-03	0.8	1.67734E-02	0.8	5.9941E-03	0.8	1.8436E-02
0.500	4.5	0.9	2.94705E-03	0.9	1.21321E-02	0.9	4.93663E-03	0.9	1.67798E-02	0.9	5.9968E-03	0.9	1.84456E-02
0.800	3.26	1	2.94745E-03	1	1.21345E-02	1	4.93786E-03	1	1.67849E-02	1	5.9987E-03	1	1.84533E-02
1.000	3.06	1.1	2.94779E-03	1.1	1.21364E-02	1.1	4.93887E-03	1.1	1.67891E-02	1.1	6.00074E-03	1.1	1.84596E-02
1.500	2.95	1.2	2.94806E-03	1.2	1.2138E-02	1.2	4.93971E-03	1.2	1.67926E-02	1.2	6.00221E-03	1.2	1.84648E-02
1.800	2.91	1.3	2.9483E-03	1.3	1.21394E-02	1.3	4.94042E-03	1.3	1.67955E-02	1.3	6.00346E-03	1.3	1.84692E-02
2.000	2.89	1.4	2.9485E-03	1.4	1.21405E-02	1.4	4.94102E-03	1.4	1.67981E-02	1.4	6.00453E-03	1.4	1.8473E-02
2.500	2.87	1.5	2.94867E-03	1.5	1.21415E-02	1.5	4.94155E-03	1.5	1.68003E-02	1.5	6.00545E-03	1.5	1.84763E-02
3.000	2.89	1.6	2.94883E-03	1.6	1.21424E-02	1.6	4.94201E-03	1.6	1.68022E-02	1.6	6.00626E-03	1.6	1.84792E-02
3.500	2.96	1.7	2.94896E-03	1.7	1.21432E-02	1.7	4.94242E-03	1.7	1.68039E-02	1.7	6.00698E-03	1.7	1.84817E-02
4.000	3.04	1.8	2.94908E-03	1.8	1.21439E-02	1.8	4.94278E-03	1.8	1.68054E-02	1.8	6.00761E-03	1.8	1.8484E-02
4.500	3.13	1.9	2.94919E-03	1.9	1.21445E-02	1.9	4.9431E-03	1.9	1.68067E-02	1.9	6.00818E-03	1.9	1.8486E-02
5.000	3.21	2	2.94929E-03	2	1.2145E-02	2	4.94339E-03	2	1.68079E-02	2	6.00869E-03	2	1.84878E-02
5.250	3.25	2.1	2.94937E-03	2.1	1.21455E-02	2.1	4.94366E-03	2.1	1.6809E-02	2.1	6.00915E-03	2.1	1.84895E-02
6.000	3.3	2.2	2.94945E-03	2.2	1.2146E-02	2.2	4.9439E-03	2.2	1.681E-02	2.2	6.00958E-03	2.2	1.8491E-02
6.500	3.29	2.3	2.94952E-03	2.3	1.21464E-02	2.3	4.94411E-03	2.3	1.68109E-02	2.3	6.00996E-03	2.3	1.84923E-02
6.750	3.28	2.4	2.94959E-03	2.4	1.21468E-02	2.4	4.94431E-03	2.4	1.68118E-02	2.4	6.01031E-03	2.4	1.84936E-02
7.000	3.27	2.5	2.94965E-03	2.5	1.21472E-02	2.5	4.9445E-03	2.5	1.68125E-02	2.5	6.01063E-03	2.5	1.84947E-02
11.362	3.27911	2.6	2.94971E-03	2.6	1.21475E-02	2.6	4.94467E-03	2.6	1.68132E-02	2.6	6.01093E-03	2.6	1.84958E-02
22.225	3.96378	2.7	2.94976E-03	2.7	1.21478E-02	2.7	4.94483E-03	2.7	1.68139E-02	2.7	6.01121E-03	2.7	1.84968E-02
33.087	3.80531	2.8	2.94981E-03	2.8	1.21481E-02	2.8	4.94497E-03	2.8	1.68145E-02	2.8	6.01147E-03	2.8	1.84977E-02
43.949	3.49962	2.9	2.94985E-03	2.9	1.21483E-02	2.9	4.94511E-03	2.9	1.68151E-02	2.9	6.01171E-03	2.9	1.84985E-02
54.812	3.26511	3	2.9499E-03	3	1.21486E-02	3	4.94524E-03	3	1.68156E-02	3	6.01193E-03	3	1.84993E-02
65.674	3.20093	3.1	2.94993E-03	3.1	1.21488E-02	3.1	4.94536E-03	3.1	1.68161E-02	3.1	6.01214E-03	3.1	1.85001E-02
76.536	3.14128	3.2	2.94997E-03	3.2	1.2149E-02	3.2	4.94547E-03	3.2	1.68165E-02	3.2	6.01234E-03	3.2	1.85008E-02
87.399	3.09167	3.3	2.95001E-03	3.3	1.21492E-02	3.3	4.94557E-03	3.3	1.6817E-02	3.3	6.01252E-03	3.3	1.85014E-02
98.261	2.97104	3.4	2.95004E-03	3.4	1.21494E-02	3.4	4.94567E-03	3.4	1.68174E-02	3.4	6.01269E-03	3.4	1.8502E-02
109.123	2.80912	3.5	2.95007E-03	3.5	1.21496E-02	3.5	4.94576E-03	3.5	1.68178E-02	3.5	6.01286E-03	3.5	1.85026E-02
119.986	2.64462	3.6	2.9501E-03	3.6	1.21497E-02	3.6	4.94585E-03	3.6	1.68181E-02	3.6	6.01301E-03	3.6	1.85032E-02
130.848	2.48011	3.7	2.95013E-03	3.7	1.21499E-02	3.7	4.94593E-03	3.7	1.68185E-02	3.7	6.01316E-03	3.7	1.85037E-02
141.710	2.31561	3.8	2.95015E-03	3.8	1.21501E-02	3.8	4.94601E-03	3.8	1.68188E-02	3.8	6.01329E-03	3.8	1.85042E-02
152.572	2.16499	3.9	2.95018E-03	3.9	1.21502E-02	3.9	4.94609E-03	3.9	1.68191E-02	3.9	6.01343E-03	3.9	1.85046E-02
163.435	2.05914	4	2.9502E-03	4	1.21503E-02	4	4.94616E-03	4	1.68194E-02	4	6.01355E-03	4	1.85051E-02
174.297	1.95329	4.1	2.95022E-03	4.1	1.21505E-02	4.1	4.94622E-03	4.1	1.68197E-02	4.1	6.01367E-03	4.1	1.85055E-02
185.159	1.84745	4.2	2.95024E-03	4.2	1.21506E-02	4.2	4.94629E-03	4.2	1.682E-02	4.2	6.01378E-03	4.2	1.85059E-02
196.022	1.7416	4.3	2.95026E-03	4.3	1.21507E-02	4.3	4.94635E-03	4.3	1.68202E-02	4.3	6.01389E-03	4.3	1.85063E-02
206.884	1.65778	4.4	2.95028E-03	4.4	1.21508E-02	4.4	4.94641E-03	4.4	1.68205E-02	4.4	6.01399E-03	4.4	1.85066E-02
217.746	1.58669	4.5	2.9503E-03	4.5	1.21509E-02	4.5	4.94646E-03	4.5	1.68207E-02	4.5	6.01409E-03	4.5	1.8507E-02
228.609	1.5156	4.6	2.95032E-03	4.6	1.2151E-02	4.6	4.94652E-03	4.6	1.68209E-02	4.6	6.01418E-03	4.6	1.85073E-02
239.471	1.44451	4.7	2.95034E-03	4.7	1.21511E-02	4.7	4.94657E-03	4.7	1.68211E-02	4.7	6.01427E-03	4.7	1.85076E-02
250.333	1.37342	4.8	2.95035E-03	4.8	1.21512E-02	4.8	4.94662E-03	4.8	1.68213E-02	4.8	6.01436E-03	4.8	1.85079E-02
261.196	1.30233	4.9	2.95037E-03	4.9	1.21513E-02	4.9	4.94666E-03	4.9	1.68215E-02	4.9	6.01444E-03	4.9	1.85082E-02
272.058	1.23124	5	2.95038E-03	5	1.21514E-02	5	4.94671E-03	5	1.68217E-02	5	6.01452E-03	5	1.85085E-02
282.920	1.16015	5.1	2.9504E-03	5.1	1.21515E-02	5.1	4.94675E-03	5.1	1.68219E-02	5.1	6.0146E-03	5.1	1.85088E-02
293.783	1.08906	5.2	2.95041E-03	5.2	1.21515E-02	5.2	4.94679E-03	5.2	1.68221E-02	5.2	6.01467E-03	5.2	1.8509E-02
304.645	1.0398	5.3	2.95042E-03	5.3	1.21516E-02	5.3	4.94683E-03	5.3	1.68222E-02	5.3	6.01474E-03	5.3	1.85093E-02
315.507	1.01977	5.4	2.95044E-03	5.4	1.21517E-02	5.4	4.94687E-03	5.4	1.68224E-02	5.4	6.01481E-03	5.4	1.85095E-02
326.370	0.99973	5.5	2.95045E-03	5.5	1.21518E-02	5.5	4.94691E-03	5.5	1.68225E-02	5.5	6.01487E-03	5.5	1.85098E-02
337.232	0.9797	5.6	2.95046E-03	5.6	1.21518E-02	5.6	4.94695E-03	5.6	1.68227E-02	5.6	6.01494E-03	5.6	1.851E-02
348.094	0.95966	5.7	2.9504E-03	5.7	1.21519E-02	5.7	4.94698E-03	5.7	1.68228E-02	5.7	6.01498E-03	5.7	1.85102E-02
358.957	0.93962	5.8	2.95048E-03	5.8	1.2152E-02	5.8	4.94701E-03	5.8	1.6823E-02	5.8	6.01506E-03	5.8	1.85104E-02
369.819	0.91959	5.9	2.9505E-03	5.9	1.2152E-02	5.9	4.94705E-03	5.9	1.68231E-02	5.9	6.01511E-03	5.9	1.85106E-02
380.681	0.89955	6	2.95051E-03	6	1.21521E-02	6	4.94708E-03	6	1.68232E-02	6	6.01517E-03	6	1.85108E-02
391.543	0.87951	6.1	2.95052E-03	6.1	1.21521E-02	6.1	4.94711E-03	6.1	1.68234E-02	6.1	6.01522E-03	6.1	1.8511E-02
402.406	0.85948	6.2	2.95052E-03	6.2	1.21522E-02	6.2	4.94714E-03	6.2	1.68235E-02	6.2	6.01527E-03	6.2	1.85112E-02
413.268	0.83944	6.3	2.95053E-03	6.3	1.21523E-02	6.3	4.94716E-03	6.3	1.68236E-02	6.3	6.01532E-03	6.3	1.85114E-02
424.130	0.8194	6.4	2.95054E-03	6.4	1.21523E-02	6.4	4.94719E-03	6.4	1.68237E-02	6.4	6.01537E-03	6.4	1.85115E-02
434.993	0.79937	6.5	2.95055E-03	6.5	1.21524E-02	6.5	4.94722E-03	6.5	1.68238E-02	6.5	6.01542E-03	6.5	1.85117E-02
445.855	0.77933	6.6	2.95056E-03	6.6	1.21524E-02	6.6	4.94724E-03	6.6	1.68239E-02	6.6	6.01546E-03	6.6	1.85119E-02
456.717	0.75929	6.7	2.95057E-03	6.7	1.21524E-02	6.7	4.94727E-03	6.7	1.6824E-02	6.7	6.01551E-03	6.7	1.8512E-02
467.580	0.73926	6.8	2.95058E-03	6.8	1.21525E-02	6.8	4.94729E-03	6.8	1.68241E-02	6.8	6.01555E-03	6.8	1.85122E-02
478.442	0.71922	6.9	2.95059E-03	6.9	1.21525E-02	6.9	4.94732E-03	6.9	1.68242E-02	6.9	6.01559E-03	6.9	1.85123E-02
489.304	0.69919	7	2.95059E-03	7	1.21526E-02	7							

Presjeci za interakciju pozitivna sa N ₂ (2/4)																					
rotacioni 7->9			rotacioni 8->10			rotacioni 9->11			rotacioni 10->12			rotacioni 11->13			rotacioni 12->14			rotacioni 13->15			
ε(eV)	σ(Å ²)		ε(eV)	σ(Å ²)		ε(eV)	σ(Å ²)		ε(eV)	σ(Å ²)		ε(eV)	σ(Å ²)		ε(eV)	σ(Å ²)		ε(eV)	σ(Å ²)		
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
0.00843	0	0.00942	0	0.01042	0	0.01141	0	0.0124	0	0.01339	0	0.01438	0	0	0	0	0	0	0	0	0
0.1	5.83334E-03	0.1	1.66092E-02	0.1	5.09298E-03	0.1	1.36516E-02	0.1	3.95526E-03	0.1	1.0045E-02	0.1	2.7633E-03	0.1	5.96612E-03	0.1	1.70357E-02	0.1	5.28393E-03	0.1	1.71755E-02
0.2	5.96612E-03	0.2	1.70357E-02	0.2	5.28393E-03	0.2	1.40842E-02	0.2	4.09284E-03	0.2	1.04261E-02	0.2	2.87702E-03	0.2	6.00973E-03	0.2	1.71755E-02	0.2	5.28393E-03	0.2	1.71755E-02
0.3	6.00973E-03	0.3	1.71755E-02	0.3	5.28393E-03	0.3	1.42255E-02	0.3	4.13768E-03	0.3	1.0555E-02	0.3	2.91394E-03	0.3	6.03142E-03	0.3	1.7245E-02	0.3	5.3104E-03	0.3	1.42956E-02
0.4	6.03142E-03	0.4	1.7245E-02	0.4	5.3104E-03	0.4	1.42956E-02	0.4	4.15992E-03	0.4	1.06115E-02	0.4	2.93223E-03	0.4	6.04439E-03	0.4	1.72866E-02	0.4	5.32458E-03	0.4	1.4375E-02
0.5	6.04439E-03	0.5	1.72866E-02	0.5	5.32458E-03	0.5	1.4375E-02	0.5	4.17321E-03	0.5	1.06482E-02	0.5	2.94314E-03	0.5	6.05302E-03	0.5	1.73407E-02	0.5	5.34074E-03	0.5	1.43654E-02
0.6	6.05302E-03	0.6	1.73407E-02	0.6	5.34074E-03	0.6	1.43654E-02	0.6	4.18834E-03	0.6	1.06726E-02	0.6	2.95557E-03	0.6	6.05918E-03	0.6	1.73434E-02	0.6	5.34074E-03	0.6	1.43654E-02
0.7	6.05918E-03	0.7	1.73434E-02	0.7	5.34074E-03	0.7	1.43654E-02	0.7	4.18834E-03	0.7	1.06726E-02	0.7	2.95557E-03	0.7	6.0638E-03	0.7	1.73487E-02	0.7	5.34578E-03	0.7	1.44002E-02
0.8	6.0638E-03	0.8	1.73487E-02	0.8	5.34578E-03	0.8	1.44002E-02	0.8	4.19306E-03	0.8	1.0703E-02	0.8	2.95944E-03	0.8	6.06738E-03	0.8	1.73602E-02	0.8	5.34969E-03	0.8	1.44117E-02
0.9	6.06738E-03	0.9	1.73602E-02	0.9	5.34969E-03	0.9	1.44117E-02	0.9	4.19673E-03	0.9	1.07131E-02	0.9	2.96245E-03	0.9	6.07025E-03	0.9	1.73694E-02	0.9	5.35282E-03	0.9	1.4421E-02
1	6.07025E-03	1	1.73694E-02	1	5.35282E-03	1	1.4421E-02	1	4.19966E-03	1	1.07212E-02	1	2.96486E-03	1	6.0726E-03	1	1.73769E-02	1	5.35538E-03	1	1.44286E-02
1.1	6.0726E-03	1.1	1.73769E-02	1.1	5.35538E-03	1.1	1.44286E-02	1.1	4.20205E-03	1.1	1.07278E-02	1.1	2.96682E-03	1.1	6.07455E-03	1.1	1.73832E-02	1.1	5.35752E-03	1.1	1.44348E-02
1.2	6.07455E-03	1.2	1.73832E-02	1.2	5.35752E-03	1.2	1.44348E-02	1.2	4.20405E-03	1.2	1.07335E-02	1.2	2.96846E-03	1.2	6.07621E-03	1.2	1.73885E-02	1.2	5.35932E-03	1.2	1.44402E-02
1.3	6.07621E-03	1.3	1.73885E-02	1.3	5.35932E-03	1.3	1.44402E-02	1.3	4.20574E-03	1.3	1.0738E-02	1.3	2.96985E-03	1.3	6.07762E-03	1.3	1.7393E-02	1.3	5.36087E-03	1.3	1.44447E-02
1.4	6.07762E-03	1.4	1.7393E-02	1.4	5.36087E-03	1.4	1.44447E-02	1.4	4.20718E-03	1.4	1.0742E-02	1.4	2.97103E-03	1.4	6.07885E-03	1.4	1.73969E-02	1.4	5.36221E-03	1.4	1.44487E-02
1.5	6.07885E-03	1.5	1.73969E-02	1.5	5.36221E-03	1.5	1.44487E-02	1.5	4.20844E-03	1.5	1.07454E-02	1.5	2.97206E-03	1.5	6.07992E-03	1.5	1.74004E-02	1.5	5.36338E-03	1.5	1.44522E-02
1.6	6.07992E-03	1.6	1.74004E-02	1.6	5.36338E-03	1.6	1.44522E-02	1.6	4.20953E-03	1.6	1.07484E-02	1.6	2.97296E-03	1.6	6.0807E-03	1.6	1.74034E-02	1.6	5.36441E-03	1.6	1.44552E-02
1.7	6.0807E-03	1.7	1.74034E-02	1.7	5.36441E-03	1.7	1.44552E-02	1.7	4.2105E-03	1.7	1.07511E-02	1.7	2.97375E-03	1.7	6.08171E-03	1.7	1.74061E-02	1.7	5.36533E-03	1.7	1.44579E-02
1.8	6.08171E-03	1.8	1.74061E-02	1.8	5.36533E-03	1.8	1.44579E-02	1.8	4.21136E-03	1.8	1.07535E-02	1.8	2.97446E-03	1.8	6.08247E-03	1.8	1.74085E-02	1.8	5.36615E-03	1.8	1.44604E-02
1.9	6.08247E-03	1.9	1.74085E-02	1.9	5.36615E-03	1.9	1.44604E-02	1.9	4.21213E-03	1.9	1.07556E-02	1.9	2.97509E-03	1.9	6.08314E-03	1.9	1.74107E-02	1.9	5.36689E-03	1.9	1.44625E-02
2	6.08314E-03	2	1.74107E-02	2	5.36689E-03	2	1.44625E-02	2	4.21282E-03	2	1.07575E-02	2	2.97566E-03	2	6.08376E-03	2	1.74126E-02	2	5.36756E-03	2	1.44645E-02
2.1	6.08376E-03	2.1	1.74126E-02	2.1	5.36756E-03	2.1	1.44645E-02	2.1	4.21344E-03	2.1	1.07592E-02	2.1	2.97617E-03	2.1	6.08431E-03	2.1	1.74144E-02	2.1	5.36817E-03	2.1	1.44663E-02
2.2	6.08431E-03	2.2	1.74144E-02	2.2	5.36817E-03	2.2	1.44663E-02	2.2	4.21401E-03	2.2	1.07608E-02	2.2	2.97664E-03	2.2	6.08482E-03	2.2	1.7416E-02	2.2	5.36872E-03	2.2	1.44679E-02
2.3	6.08482E-03	2.3	1.7416E-02	2.3	5.36872E-03	2.3	1.44679E-02	2.3	4.21453E-03	2.3	1.07622E-02	2.3	2.97706E-03	2.3	6.08529E-03	2.3	1.74175E-02	2.3	5.36923E-03	2.3	1.44694E-02
2.4	6.08529E-03	2.4	1.74175E-02	2.4	5.36923E-03	2.4	1.44694E-02	2.4	4.21501E-03	2.4	1.07636E-02	2.4	2.97745E-03	2.4	6.08572E-03	2.4	1.74189E-02	2.4	5.3697E-03	2.4	1.44708E-02
2.5	6.08572E-03	2.5	1.74189E-02	2.5	5.3697E-03	2.5	1.44708E-02	2.5	4.21545E-03	2.5	1.07648E-02	2.5	2.97781E-03	2.5	6.08612E-03	2.5	1.74202E-02	2.5	5.37013E-03	2.5	1.44721E-02
2.6	6.08612E-03	2.6	1.74202E-02	2.6	5.37013E-03	2.6	1.44721E-02	2.6	4.21585E-03	2.6	1.07659E-02	2.6	2.97814E-03	2.6	6.08648E-03	2.6	1.74213E-02	2.6	5.37053E-03	2.6	1.44733E-02
2.7	6.08648E-03	2.7	1.74213E-02	2.7	5.37053E-03	2.7	1.44733E-02	2.7	4.21622E-03	2.7	1.07669E-02	2.7	2.97845E-03	2.7	6.08682E-03	2.7	1.74224E-02	2.7	5.3709E-03	2.7	1.44744E-02
2.8	6.08682E-03	2.8	1.74224E-02	2.8	5.3709E-03	2.8	1.44744E-02	2.8	4.21657E-03	2.8	1.07679E-02	2.8	2.97873E-03	2.8	6.08714E-03	2.8	1.74235E-02	2.8	5.37125E-03	2.8	1.44754E-02
2.9	6.08714E-03	2.9	1.74235E-02	2.9	5.37125E-03	2.9	1.44754E-02	2.9	4.2169E-03	2.9	1.07688E-02	2.9	2.979E-03	2.9	6.08744E-03	2.9	1.74244E-02	2.9	5.37157E-03	2.9	1.44764E-02
3	6.08744E-03	3	1.74244E-02	3	5.37157E-03	3	1.44764E-02	3	4.2172E-03	3	1.07696E-02	3	2.97925E-03	3	6.08771E-03	3	1.74253E-02	3	5.37187E-03	3	1.44773E-02
3.1	6.08771E-03	3.1	1.74253E-02	3.1	5.37187E-03	3.1	1.44773E-02	3.1	4.21748E-03	3.1	1.07704E-02	3.1	2.97948E-03	3.1	6.08797E-03	3.1	1.74261E-02	3.1	5.37216E-03	3.1	1.44781E-02
3.2	6.08797E-03	3.2	1.74261E-02	3.2	5.37216E-03	3.2	1.44781E-02	3.2	4.21774E-03	3.2	1.07711E-02	3.2	2.97969E-03	3.2	6.08822E-03	3.2	1.74269E-02	3.2	5.37242E-03	3.2	1.44789E-02
3.3	6.08822E-03	3.3	1.74269E-02	3.3	5.37242E-03	3.3	1.44789E-02	3.3	4.21799E-03	3.3	1.07717E-02	3.3	2.9799E-03	3.3	6.08845E-03	3.3	1.74276E-02	3.3	5.37267E-03	3.3	1.44796E-02
3.4	6.08845E-03	3.4	1.74276E-02	3.4	5.37267E-03	3.4	1.44796E-02	3.4	4.21823E-03	3.4	1.07724E-02	3.4	2.98009E-03	3.4	6.08866E-03	3.4	1.74283E-02	3.4	5.37291E-03	3.4	1.44803E-02
3.5	6.08866E-03	3.5	1.74283E-02	3.5	5.37291E-03	3.5	1.44803E-02	3.5	4.21845E-03	3.5	1.0773E-02	3.5	2.98027E-03	3.5	6.08887E-03	3.5	1.7429E-02	3.5	5.37313E-03	3.5	1.4481E-02
3.6	6.08887E-03	3.6	1.7429E-02	3.6	5.37313E-03	3.6	1.4481E-02	3.6	4.21866E-03	3.6	1.07736E-02	3.6	2.9804E-03	3.6	6.08906E-03	3.6	1.74296E-02	3.6	5.37334E-03	3.6	1.44818E-02
3.7	6.08906E-03	3.7	1.74296E-02	3.7	5.37334E-03	3.7	1.44818E-02	3.7	4.21885E-03	3.7	1.07742E-02	3.7	2.9806E-03	3.7	6.08924E-03	3.7	1.74302E-02	3.7	5.37354E-03	3.7	1.44822E-02
3.8	6.08924E-03	3.8	1.74302E-02	3.8	5.37354E-03	3.8	1.44822E-02	3.8	4.21904E-03	3.8	1.07747E-02	3.8	2.98076E-03	3.8	6.08941E-03	3.8	1.74307E-02	3.8	5.37373E-03	3.8	1.44827E-02
3.9	6.08941E-03	3.9	1.74307E-02	3.9	5.37373E-03	3.9	1.44827E-02	3.9	4.21922E-03	3.9	1.07752E-02	3.9	2.9809E-03	3.9	6.08958E-03	3.9	1.74313E-02	3.9	5.37391E-03	3.9	1.44833E-02
4	6.08958E-03	4	1.74313E-02	4	5.37391E-03	4	1.44833E-02	4	4.21938E-03	4	1.07756E-02	4	2.98104E-03	4	6.08974E-03	4	1.74318E-02	4	5.37408E-03	4	1.44838E-02
4.1	6.08974E-03	4.1	1.74318E-02	4.1	5.37408E-03	4.1	1.44838E-02	4.1	4.21954E-03	4.1	1.07761E-02	4.1	2.98117E-03	4.1	6.08989E-03	4.1	1.74322E-02	4.1	5.37424E-03	4.1	1.44842E-02
4.2	6.08989E-03	4.2	1.74322E-02	4.2	5.37424E-03	4.2	1.44842E-02	4.2	4.2197E-03	4.2	1.07765E-02	4.2	2.9813E-03	4.2	6.09003E-03	4.2	1.74327E-02	4.2	5.3744E-03	4.2	1.44847E-02
4.3	6.09003E-03	4.3	1.74327E-02	4.3	5.3744E-03	4.3	1.44847E-02	4.3	4.21984E-03	4.3	1.07769E-02	4.3	2.98141E-03	4.3	6.09016E-03	4.3	1.74331E-02	4.3	5.37455E-03	4.3	1.44851E-02
4.4	6.09016E-03	4.4	1.74331E-02	4.4	5.37455E-03	4.4	1.44851E-02	4.4	4.21998E-03	4.4	1.07773E-02	4.4	2.98153E-03	4.4	6.09029E-0						

Preseci za interakciju pozitrona sa N ₂ (3/4)													
rotacioni 14->16		rotacioni 15->17		rotacioni 16->18		rotacioni 17->19		rotacioni 18->20		rotacioni 19->21		rotacioni 20->22	
ϵ (eV)	σ (Å ²)	ϵ (eV)	σ (Å ²)	ϵ (eV)	σ (Å ²)	ϵ (eV)	σ (Å ²)	ϵ (eV)	σ (Å ²)	ϵ (eV)	σ (Å ²)	ϵ (eV)	σ (Å ²)
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
0.01538	0	0.01637	0	0.01736	0	0.01835	0	0.01934	0	0.02034	0	0.02133	0
0.1	6.67447E-03	0.1	1.74862E-03	0.1	4.0268E-03	0.1	1.00672E-03	0.1	2.21399E-03	0.1	5.28934E-4	0.1	1.1122E-03
0.2	6.97106E-03	0.2	1.83218E-03	0.2	4.233E-03	0.2	1.06179E-03	0.2	2.34298E-03	0.2	5.61676E-4	0.2	1.18518E-03
0.3	7.06716E-03	0.3	1.8592E-03	0.3	4.29953E-03	0.3	1.07952E-03	0.3	2.38442E-03	0.3	5.71274E-4	0.3	1.20853E-03
0.4	7.11472E-03	0.4	1.87256E-03	0.4	4.33242E-03	0.4	1.08827E-03	0.4	2.40488E-03	0.4	5.77351E-4	0.4	1.22004E-03
0.5	7.14311E-03	0.5	1.88053E-03	0.5	4.35203E-03	0.5	1.09349E-03	0.5	2.41707E-03	0.5	5.80435E-4	0.5	1.22689E-03
0.6	7.16197E-03	0.6	1.88583E-03	0.6	4.36505E-03	0.6	1.09696E-03	0.6	2.42516E-03	0.6	5.82482E-4	0.6	1.23144E-03
0.7	7.17541E-03	0.7	1.8896E-03	0.7	4.37434E-03	0.7	1.09943E-03	0.7	2.43093E-03	0.7	5.8394E-4	0.7	1.23468E-03
0.8	7.18548E-03	0.8	1.89243E-03	0.8	4.38128E-03	0.8	1.10128E-03	0.8	2.43524E-03	0.8	5.85031E-4	0.8	1.2371E-03
0.9	7.1933E-03	0.9	1.89462E-03	0.9	4.38668E-03	0.9	1.10271E-03	0.9	2.43859E-03	0.9	5.85878E-4	0.9	1.23898E-03
1	7.19954E-03	1	1.89637E-03	1	4.39099E-03	1	1.10386E-03	1	2.44127E-03	1	5.86555E-4	1	1.24048E-03
1.1	7.20465E-03	1.1	1.89781E-03	1.1	4.39451E-03	1.1	1.1048E-03	1.1	2.44345E-03	1.1	5.87108E-4	1.1	1.24171E-03
1.2	7.20891E-03	1.2	1.899E-03	1.2	4.39745E-03	1.2	1.10558E-03	1.2	2.44528E-03	1.2	5.87569E-4	1.2	1.24273E-03
1.3	7.21251E-03	1.3	1.90001E-03	1.3	4.39993E-03	1.3	1.10624E-03	1.3	2.44682E-03	1.3	5.87958E-4	1.3	1.2436E-03
1.4	7.21559E-03	1.4	1.90088E-03	1.4	4.40206E-03	1.4	1.10688E-03	1.4	2.44814E-03	1.4	5.88292E-4	1.4	1.24434E-03
1.5	7.21826E-03	1.5	1.90163E-03	1.5	4.4039E-03	1.5	1.10729E-03	1.5	2.44928E-03	1.5	5.88581E-4	1.5	1.24498E-03
1.6	7.22059E-03	1.6	1.90228E-03	1.6	4.40551E-03	1.6	1.10772E-03	1.6	2.45028E-03	1.6	5.88834E-4	1.6	1.24554E-03
1.7	7.22265E-03	1.7	1.90286E-03	1.7	4.40693E-03	1.7	1.1081E-03	1.7	2.45116E-03	1.7	5.89057E-4	1.7	1.24603E-03
1.8	7.22448E-03	1.8	1.90338E-03	1.8	4.40819E-03	1.8	1.10844E-03	1.8	2.45194E-03	1.8	5.89255E-4	1.8	1.24647E-03
1.9	7.22612E-03	1.9	1.90383E-03	1.9	4.40932E-03	1.9	1.10874E-03	1.9	2.45264E-03	1.9	5.89432E-4	1.9	1.24687E-03
2	7.2276E-03	2	1.90425E-03	2	4.41034E-03	2	1.10901E-03	2	2.45328E-03	2	5.89591E-4	2	1.24722E-03
2.1	7.22893E-03	2.1	1.90462E-03	2.1	4.41126E-03	2.1	1.10925E-03	2.1	2.45384E-03	2.1	5.89735E-4	2.1	1.24754E-03
2.2	7.23014E-03	2.2	1.90496E-03	2.2	4.41209E-03	2.2	1.10947E-03	2.2	2.45436E-03	2.2	5.89866E-4	2.2	1.24783E-03
2.3	7.23125E-03	2.3	1.90527E-03	2.3	4.41286E-03	2.3	1.10968E-03	2.3	2.45484E-03	2.3	5.89986E-4	2.3	1.2481E-03
2.4	7.23226E-03	2.4	1.90556E-03	2.4	4.41356E-03	2.4	1.10986E-03	2.4	2.45527E-03	2.4	5.90096E-4	2.4	1.24834E-03
2.5	7.23319E-03	2.5	1.90582E-03	2.5	4.4142E-03	2.5	1.11003E-03	2.5	2.45567E-03	2.5	5.90196E-4	2.5	1.24856E-03
2.6	7.23405E-03	2.6	1.90606E-03	2.6	4.41479E-03	2.6	1.11019E-03	2.6	2.45604E-03	2.6	5.9029E-4	2.6	1.24877E-03
2.7	7.23485E-03	2.7	1.90628E-03	2.7	4.41534E-03	2.7	1.11034E-03	2.7	2.45638E-03	2.7	5.90376E-4	2.7	1.24896E-03
2.8	7.23559E-03	2.8	1.90649E-03	2.8	4.41585E-03	2.8	1.11047E-03	2.8	2.4567E-03	2.8	5.90456E-4	2.8	1.24914E-03
2.9	7.23628E-03	2.9	1.90669E-03	2.9	4.41633E-03	2.9	1.1106E-03	2.9	2.45699E-03	2.9	5.9053E-4	2.9	1.24931E-03
3	7.23692E-03	3	1.90687E-03	3	4.41677E-03	3	1.11072E-03	3	2.45727E-03	3	5.906E-4	3	1.24946E-03
3.1	7.23752E-03	3.1	1.90703E-03	3.1	4.41719E-03	3.1	1.11083E-03	3.1	2.45752E-03	3.1	5.90665E-4	3.1	1.2496E-03
3.2	7.23809E-03	3.2	1.90719E-03	3.2	4.41758E-03	3.2	1.11093E-03	3.2	2.45776E-03	3.2	5.90726E-4	3.2	1.24974E-03
3.3	7.23862E-03	3.3	1.90734E-03	3.3	4.41794E-03	3.3	1.11103E-03	3.3	2.45799E-03	3.3	5.90783E-4	3.3	1.24987E-03
3.4	7.23912E-03	3.4	1.90748E-03	3.4	4.41828E-03	3.4	1.11112E-03	3.4	2.4582E-03	3.4	5.90837E-4	3.4	1.24999E-03
3.5	7.23959E-03	3.5	1.90761E-03	3.5	4.41861E-03	3.5	1.11121E-03	3.5	2.4584E-03	3.5	5.90888E-4	3.5	1.2501E-03
3.6	7.24003E-03	3.6	1.90774E-03	3.6	4.41891E-03	3.6	1.11129E-03	3.6	2.45859E-03	3.6	5.90935E-4	3.6	1.25021E-03
3.7	7.24045E-03	3.7	1.90785E-03	3.7	4.4192E-03	3.7	1.11136E-03	3.7	2.45877E-03	3.7	5.90981E-4	3.7	1.25031E-03
3.8	7.24085E-03	3.8	1.90797E-03	3.8	4.41948E-03	3.8	1.11144E-03	3.8	2.45894E-03	3.8	5.91024E-4	3.8	1.2504E-03
3.9	7.24122E-03	3.9	1.90807E-03	3.9	4.41974E-03	3.9	1.11151E-03	3.9	2.4591E-03	3.9	5.91065E-4	3.9	1.25049E-03
4	7.24158E-03	4	1.90817E-03	4	4.41998E-03	4	1.11157E-03	4	2.45926E-03	4	5.91102E-4	4	1.25058E-03
4.1	7.24192E-03	4.1	1.90827E-03	4.1	4.42022E-03	4.1	1.11163E-03	4.1	2.4594E-03	4.1	5.91144E-4	4.1	1.25066E-03
4.2	7.24225E-03	4.2	1.90836E-03	4.2	4.42044E-03	4.2	1.11169E-03	4.2	2.45954E-03	4.2	5.91175E-4	4.2	1.25074E-03
4.3	7.24256E-03	4.3	1.90845E-03	4.3	4.42066E-03	4.3	1.11175E-03	4.3	2.45967E-03	4.3	5.91209E-4	4.3	1.25081E-03
4.4	7.24285E-03	4.4	1.90853E-03	4.4	4.42086E-03	4.4	1.11181E-03	4.4	2.4598E-03	4.4	5.91241E-4	4.4	1.25088E-03
4.5	7.24313E-03	4.5	1.90861E-03	4.5	4.42105E-03	4.5	1.11186E-03	4.5	2.45992E-03	4.5	5.91271E-4	4.5	1.25095E-03
4.6	7.24341E-03	4.6	1.90868E-03	4.6	4.42124E-03	4.6	1.11191E-03	4.6	2.46004E-03	4.6	5.913E-4	4.6	1.25102E-03
4.7	7.24366E-03	4.7	1.90876E-03	4.7	4.42142E-03	4.7	1.11195E-03	4.7	2.46015E-03	4.7	5.91328E-4	4.7	1.25108E-03
4.8	7.24391E-03	4.8	1.90883E-03	4.8	4.42159E-03	4.8	1.112E-03	4.8	2.46025E-03	4.8	5.91355E-4	4.8	1.25114E-03
4.9	7.24415E-03	4.9	1.90889E-03	4.9	4.42175E-03	4.9	1.11204E-03	4.9	2.46036E-03	4.9	5.91381E-4	4.9	1.25119E-03
5	7.24438E-03	5	1.90896E-03	5	4.42191E-03	5	1.11208E-03	5	2.46045E-03	5	5.91405E-4	5	1.25125E-03
5.1	7.2446E-03	5.1	1.90902E-03	5.1	4.42206E-03	5.1	1.11212E-03	5.1	2.46055E-03	5.1	5.91429E-4	5.1	1.2513E-03
5.2	7.24481E-03	5.2	1.90908E-03	5.2	4.42221E-03	5.2	1.11216E-03	5.2	2.46064E-03	5.2	5.91452E-4	5.2	1.25135E-03
5.3	7.24501E-03	5.3	1.90913E-03	5.3	4.42235E-03	5.3	1.1122E-03	5.3	2.46072E-03	5.3	5.91474E-4	5.3	1.2514E-03
5.4	7.2452E-03	5.4	1.90919E-03	5.4	4.42248E-03	5.4	1.11224E-03	5.4	2.46081E-03	5.4	5.91495E-4	5.4	1.25145E-03
5.5	7.24539E-03	5.5	1.90924E-03	5.5	4.42261E-03	5.5	1.11227E-03	5.5	2.46089E-03	5.5	5.91515E-4	5.5	1.25149E-03
5.6	7.24557E-03	5.6	1.90929E-03	5.6	4.42274E-03	5.6	1.1123E-03	5.6	2.46096E-03	5.6	5.91535E-4	5.6	1.25154E-03
5.7	7.24575E-03	5.7	1.90934E-03	5.7	4.42286E-03	5.7	1.11234E-03	5.7	2.46104E-03	5.7	5.91554E-4	5.7	1.25159E-03
5.8	7.24592E-03	5.8	1.90939E-03	5.8	4.42297E-03	5.8	1.11237E-03	5.8	2.46111E-03	5.8	5.91572E-4	5.8	1.25162E-03
5.9	7.24608E-03	5.9	1.90943E-03	5.9	4.42309E-03	5.9	1.1124E-03	5.9	2.46118E-03	5.9	5.91589E-4	5.9	1.25166E-03
6	7.24624E-03	6	1.90948E-03	6	4.42319E-03	6	1.11243E-03	6	2.46125E-03	6	5.916107E-4	6	1.25169E-03
6.1	7.24639E-03	6.1	1.90952E-03	6.1	4.4233E-03	6.1	1.11245E-03	6.1	2.46131E-03	6.1	5.91623E-4	6.1	1.25173E-03
6.2	7.24654E-03	6.2	1.90956E-03	6.2	4.4234E-03	6.2	1.11248E-03	6.2	2.46138E-03	6.2	5.91639E-4	6.2	1.25177E-03
6.3	7.24668E-03	6.3	1.9096E-03	6.3	4.4235E-03	6.3	1.11251E-03	6.3	2.46144E-03	6.3	5.91655E-4	6.3	1.2518E-03
6.4	7.24682E-03	6.4	1.90964E-03	6.4	4.42359E-03	6.4	1.11253E-03	6.4	2.4615E-03	6.4	5.9167E-4	6.4	1.25183E-03
6.5	7.24695E-03	6.5	1.90968E-03	6.5	4.42369E-03	6.5	1.11256E-03	6.5	2.46156E-03	6.5	5.91684E-4	6.5	1.25187E-03
6.6	7.24709E-03	6.6	1.90972E-03	6.6	4.42378E-03	6.6	1.11258E-03	6.6	2.46161E-03	6.6	5.91698E-4	6.6	1.2519E-03
6.7	7.24721E-03	6.7	1.90975E-03	6.7	4.42386E-03	6.7	1.1126E-03	6.7	2.46166E-03	6.7	5.91712E-4	6.7	1.25193E-03
6.8	7.24733E-03	6.8	1.90979E-03	6.8	4.42395E-03	6.8	1.11263E-03	6.8	2.46172E-03	6.8	5.91725E-4	6.8	1.25196E-03
6.9	7.24745E-03	6.9	1.90982E-03	6.9	4.42403E-03	6.9	1.11265E-03	6.9	2.46177E-03	6			

Preseci za interakciju pozitrona sa N ₂ (4/4)													
rotacioni 21->23		rotacioni 22->24		rotacioni 24->26		anihilacija		formiranje pozitronijuma		a ¹ π el. eksitacija		direktna jonizacija	
ε(eV)	σ(Å ²)	ε(eV)	σ(Å ²)	ε(eV)	σ(Å ²)	ε(eV)	σ(Å ²)	ε(eV)	σ(Å ²)	ε(eV)	σ(Å ²)	ε(eV)	σ(Å ²)
0	0	0	0	0	0	0.000000	1.23371E-4	0	0	0	0	0	0
0.02232	0	0.02331	0	0.0253	0	0.11699	1.23371E-4	8.78	0	8.549	0	15.58	0
0.1	2.5417E-4	0.1	5.11443E-4	0.1	2.15594E-4	0.13231	1.22454E-4	9	0.207	9	0.21947	16	0.01798
0.2	2.71816E-4	0.2	5.48937E-4	0.2	2.33132E-4	0.14624	1.02173E-4	10	0.40539	9.5	0.46467	17	0.07064
0.3	2.77448E-4	0.3	5.60878E-4	0.3	2.38691E-4	0.16156	1.08873E-4	11	0.64247	10	0.64247	18	0.13204
0.4	2.80222E-4	0.4	5.66754E-4	0.4	2.41423E-4	0.17688	9.47609E-5	12	1.09333	11	1.09333	19	0.25613
0.5	2.81873E-4	0.5	5.70251E-4	0.5	2.43048E-4	0.19322	1.05165E-4	13	1.48819	12	1.48819	20	0.36015
0.6	2.82696E-4	0.6	5.7257E-4	0.6	2.44124E-4	0.20752	1.04649E-4	14	1.80186	13	1.80186	25	0.97869
0.7	2.83749E-4	0.7	5.74221E-4	0.7	2.44891E-4	0.22145	7.63871E-5	15	2.02374	15	0.60047	30	1.35331
0.8	2.84332E-4	0.8	5.75456E-4	0.8	2.45464E-4	0.23677	9.63579E-5	16	2.2707	18	0.52806	35	1.77492
0.9	2.84785E-4	0.9	5.76415E-4	0.9	2.45909E-4	0.25209	6.38123E-5	17	2.40079	26.14653	0.319	40	2.05137
1	2.85147E-4	1	5.77181E-4	1	2.46264E-4	0.26462	6.5321E-5	18	2.49325	99.68445	0.087	45	2.31542
1.1	2.85443E-4	1.1	5.77807E-4	1.1	2.46555E-4	20.32033	5.66083E-5	19	2.59246	194.78711	0.029	50	2.37484
1.2	2.85689E-4	1.2	5.78328E-4	1.2	2.46796E-4	aΣ el. eksitacija		20	2.56395			60	2.80752
1.3	2.85897E-4	1.3	5.78768E-4	1.3	2.47001E-4	ε(eV)	σ(Å ²)	25	2.5518			75	2.99413
1.4	2.86075E-4	1.4	5.79146E-4	1.4	2.47176E-4	0	0	30	2.41631			90	3.07293
1.5	2.8623E-4	1.5	5.79472E-4	1.5	2.47327E-4	10	0.319	35	2.16473			100	3.074
1.6	2.86365E-4	1.6	5.79758E-4	1.6	2.4746E-4	200.72734	0.0348	40	1.97122			200	3.0769
1.7	2.86484E-4	1.7	5.8001E-4	1.7	2.47577E-4	0	0	45	1.67469			0	0
1.8	2.8659E-4	1.8	5.80234E-4	1.8	2.4768E-4	0	0	50	1.62838				
1.9	2.86685E-4	1.9	5.80434E-4	1.9	2.47773E-4	0	0	60	1.06578				
2	2.8677E-4	2	5.80615E-4	2	2.47857E-4	0	0	75	0.67596				
2.1	2.86847E-4	2.1	5.80778E-4	2.1	2.47932E-4	0	0	90	0.38982				
2.2	2.86917E-4	2.2	5.80926E-4	2.2	2.48001E-4	0	0	100	0.319				
2.3	2.86981E-4	2.3	5.81061E-4	2.3	2.48064E-4	0	0	200	0.058				
2.4	2.87039E-4	2.4	5.81185E-4	2.4	2.48121E-4	0	0	0	0				
2.5	2.87093E-4	2.5	5.81299E-4	2.5	2.48174E-4	0	0	8.78	0				
2.6	2.87143E-4	2.6	5.81404E-4	2.6	2.48223E-4	0	0	9	0.207				
2.7	2.87189E-4	2.7	5.81502E-4	2.7	2.48268E-4	0	0	10	0.40539				
2.8	2.87232E-4	2.8	5.81592E-4	2.8	2.4831E-4	0	0	11	0.64247				
2.9	2.87271E-4	2.9	5.81676E-4	2.9	2.48349E-4	0	0	12	1.09333				
3	2.87309E-4	3	5.81755E-4	3	2.48386E-4	0	0	13	1.48819				
3.1	2.87343E-4	3.1	5.81828E-4	3.1	2.4842E-4	0	0	14	1.80186				
3.2	2.87376E-4	3.2	5.81897E-4	3.2	2.48452E-4	0	0	15	2.02374				
3.3	2.87406E-4	3.3	5.81962E-4	3.3	2.48482E-4	0	0	16	2.2707				
3.4	2.87435E-4	3.4	5.82023E-4	3.4	2.4851E-4	0	0	17	2.40079				
3.5	2.87462E-4	3.5	5.8208E-4	3.5	2.48536E-4	0	0	18	2.49325				
3.6	2.87488E-4	3.6	5.82134E-4	3.6	2.48561E-4	0	0	19	2.59246				
3.7	2.87512E-4	3.7	5.82186E-4	3.7	2.48585E-4	0	0	20	2.56395				
3.8	2.87535E-4	3.8	5.82234E-4	3.8	2.48608E-4	0	0	25	2.5518				
3.9	2.87557E-4	3.9	5.8228E-4	3.9	2.48629E-4	0	0	30	2.41631				
4	2.87578E-4	4	5.82324E-4	4	2.48649E-4	0	0	35	2.16473				
4.1	2.87597E-4	4.1	5.82366E-4	4.1	2.48669E-4	0	0	40	1.97122				
4.2	2.87616E-4	4.2	5.82405E-4	4.2	2.48687E-4	0	0	45	1.67469				
4.3	2.87634E-4	4.3	5.82443E-4	4.3	2.48705E-4	0	0	50	1.62838				
4.4	2.87651E-4	4.4	5.82479E-4	4.4	2.48721E-4	0	0	60	1.06578				
4.5	2.87667E-4	4.5	5.82514E-4	4.5	2.48737E-4	0	0	75	0.67596				
4.6	2.87683E-4	4.6	5.82547E-4	4.6	2.48753E-4	0	0	90	0.38982				
4.7	2.87698E-4	4.7	5.82578E-4	4.7	2.48767E-4	0	0	100	0.319				
4.8	2.87712E-4	4.8	5.82608E-4	4.8	2.48781E-4	0	0	200	0.058				
4.9	2.87726E-4	4.9	5.82637E-4	4.9	2.48795E-4	0	0						
5	2.87739E-4	5	5.82665E-4	5	2.48808E-4	0	0						
5.1	2.87752E-4	5.1	5.82692E-4	5.1	2.4882E-4	0	0						
5.2	2.87764E-4	5.2	5.82718E-4	5.2	2.48832E-4	0	0						
5.3	2.87776E-4	5.3	5.82742E-4	5.3	2.48843E-4	0	0						
5.4	2.87787E-4	5.4	5.82766E-4	5.4	2.48854E-4	0	0						
5.5	2.87798E-4	5.5	5.82789E-4	5.5	2.48865E-4	0	0						
5.6	2.87809E-4	5.6	5.82811E-4	5.6	2.48875E-4	0	0						
5.7	2.87818E-4	5.7	5.82833E-4	5.7	2.48885E-4	0	0						
5.8	2.87828E-4	5.8	5.82853E-4	5.8	2.48895E-4	0	0						
5.9	2.87837E-4	5.9	5.82873E-4	5.9	2.48904E-4	0	0						
6	2.87847E-4	6	5.82893E-4	6	2.48913E-4	0	0						
6.1	2.87855E-4	6.1	5.82911E-4	6.1	2.48922E-4	0	0						
6.2	2.87864E-4	6.2	5.82929E-4	6.2	2.4893E-4	0	0						
6.3	2.87872E-4	6.3	5.82947E-4	6.3	2.48938E-4	0	0						
6.4	2.8788E-4	6.4	5.82964E-4	6.4	2.48946E-4	0	0						
6.5	2.87888E-4	6.5	5.8298E-4	6.5	2.48954E-4	0	0						
6.6	2.87895E-4	6.6	5.82996E-4	6.6	2.48961E-4	0	0						
6.7	2.87903E-4	6.7	5.83011E-4	6.7	2.48968E-4	0	0						
6.8	2.8791E-4	6.8	5.83026E-4	6.8	2.48975E-4	0	0						
6.9	2.87917E-4	6.9	5.83041E-4	6.9	2.48982E-4	0	0						
7	2.87923E-4	7	5.83055E-4	7	2.48988E-4	0	0						
7.1	2.8793E-4	7.1	5.83069E-4	7.1	2.48995E-4	0	0						
7.2	2.87936E-4	7.2	5.83082E-4	7.2	2.49001E-4	0	0						
7.3	2.87942E-4	7.3	5.83095E-4	7.3	2.49007E-4	0	0						
7.4	2.87948E-4	7.4	5.83108E-4	7.4	2.49013E-4	0	0						
7.5	2.87954E-4	7.5	5.8312E-4	7.5	2.49018E-4	0	0						
7.6	2.8796E-4	7.6	5.83132E-4	7.6	2.49024E-4	0	0						
7.7	2.87965E-4	7.7	5.83144E-4	7.7	2.49029E-4	0	0						
7.8	2.8797E-4	7.8	5.83155E-4	7.8	2.49034E-4	0	0						
7.9	2.87976E-4	7.9	5.83166E-4	7.9	2.4904E-4	0	0						
8	2.87981E-4	8	5.83177E-4	8	2.49045E-4	0	0						
8.1	2.87986E-4	8.1	5.83187E-4	8.1	2.4905E-4	0	0						
8.2	2.87991E-4	8.2	5.83198E-4	8.2	2.49054E-4	0	0						
8.3	2.87995E-4	8.3	5.83208E-4	8.3	2.49059E-4	0	0						
8.4	2.88E-4	8.4	5.83217E-4	8.4	2.49064E-4	0	0						
8.5	2.88004E-4	8.5	5.83227E-4	8.5	2.49068E-4	0	0						
8.6	2.88009E-4	8.6	5.83236E-4	8.6	2.49072E-4	0	0						
8.7	2.88013E-4	8.7	5.83245E-4	8.7	2.49076E-4	0	0						
8.8	2.88018E-4	8.8	5.83254E-4	8.8	2.49081E-4	0	0						
8.9	2.88022E-4	8.9	5.83263E-4	8.9	2.49085E-4	0	0						
9	2.88026E-4	9	5.83272E-4	9	2.49089E-4	0	0						
9.1	2.8803E-4	9.1	5.8328E-4	9.1	2.49092E-4	0	0						
9.2	2.88033E-4	9.2	5.83288E-4	9.2	2.49096E-4	0	0						
9.3	2.88037E-4	9.3	5.83296E-4	9.3	2.491E-4	0	0						
9.4	2.88041E-4	9.4	5.83304E-4	9.4	2.49103E-4	0	0						
9.5	2.88044E-4	9.5	5.83311E-4	9.5	2.49107E-4	0	0						
9.6	2.88048E-4	9.6	5.83319E-4	9.6	2.4911E-4	0	0						
9.7	2.88051E-4	9.7	5.83326E-4	9.7	2.49114E-4	0	0						
9.8	2.88055E-4	9.8	5.83333E-4	9.8	2.49117E-4	0	0						
9.9	2.88058E-4	9.9	5.8										

Preseci za interakciju pozitrona sa CF ₄ (1/1)													
elastični		v1 vibracija		v3 vibracija		v4 vibracija		jonizacija		formiranje pozitronijuma		anihilacija	
ε(eV)	σ(Å ²)	ε(eV)	σ(Å ²)	ε(eV)	σ(Å ²)	ε(eV)	σ(Å ²)	ε(eV)	σ(Å ²)	ε(eV)	σ(Å ²)	ε(eV)	σ(Å ²)
0	3.84699	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1.23371E-4
0.03165	3.84699	0.1078	0	0.159	0	0.0769	0	16.25	0	9.45	0	0.11699	1.23371E-4
0.03707	3.45355	0.108	0.01	0.16	2.05486	0.077	0.01	19.41637	1	9.495	0.3069	0.13231	1.22454E-4
0.0434	2.95082	0.1114	0.1	0.2	4.53653	0.08059	0.1	32.82573	1.15952	9.995	0.5952	0.14624	1.02173E-4
0.04792	2.51366	0.11548	0.23031	0.25	5.69528	0.08354	0.20837	46.2351	2.84447	10.495	0.9296	0.16156	1.08873E-4
0.05515	2.12022	0.11971	0.41994	0.3	5.35735	0.08977	0.32155	59.64447	3.91976	10.995	1.2406	0.17688	9.47609E-5
0.0642	1.72678	0.1241	0.62676	0.4	5.58477	0.09306	0.41994	73.05384	3.96287	11.495	1.5184	0.1922	1.05165E-4
0.07595	1.28962	0.12864	0.79168	0.45	5.62803	0.09647	0.47991	86.4632	4.51369	11.995	1.8058	0.20752	1.0464E-4
0.0877	1.00546	0.13336	1	0.5	4.94894	0.1	0.49619	99.87257	4.08117	12.495	1.8317	0.22145	7.63871E-5
0.09946	0.65574	0.13824	1.306	0.6	4.85926	0.10367	0.50454	113.28194	3.74237	12.995	2.0783	0.23677	9.63579E-5
0.12116	0.39344	0.14331	1.44351	0.7	4.47913	0.10746	0.51303	126.6913	3.55015	13.495	2.2627	0.25209	16.38123E-5
0.14105	0.21858	0.14591	1.4925	0.8	4.55655	0.1114	0.51303	140.10067	3.35794	14.495	2.5032	0.26462	6.5321E-5
0.14919	0.10929	0.15679	1.54314	1	4.12412	0.11548	0.51303	153.51004	3.16573	15.495	2.6016	20.32033	5.66083E-5
0.16817	0.08743	0.17155	1.56911	1.2	3.94794	0.1241	0.50454	166.91941	2.98571	16.595	2.6897		
0.22514	0.06557	0.1911	1.4925	1.4	3.67408	0.12864	0.49619	180.32877	2.679	17.495	2.7557		
0.24864	0.06557	0.21288	1.35031	1.6	3.4146	0.13336	0.47991	193.73814	2.37228	18.495	2.6716		
0.26854	0.17486	0.27385	1	1.8	3.44744	0.14856	0.41994	0	0	18.995	2.5614		
0.28933	0.21858	0.52331	0.51303	2	2.96937	0.16549	0.39283	16.25	0	19.495	2.6095		
0.30018	0.24044	1.03666	0.2632	2.03098	2.94705	0.21288	0.311	19.41637	1	19.995	2.7228		
0.31826	0.34973	1.81946	0.15	2.61574	2.55955	0.31624	0.20153	32.82573	1.15952	20.495	2.5896		
0.33725	0.4153	3.00009	0.09	3.36888	2.44205	0.62645	0.1	46.2351	2.84447	20.995	2.5213		
0.35805	0.54645	6.39653	0.043	4.33886	2.33	1.00003	0.06268	59.64447	3.91976	21.495	2.6135		
0.38336	0.65574	10.0003	0.02632	5.58812	2.22	1.98102	0.03215	73.05384	3.96287	21.995	2.5494		
0.39873	0.74317	17.76812	0.0143	6.50428	2.1	2.83882	0.02084	86.4632	4.51369	22.495	2.5213		
0.42134	0.85246	24.58317	0.01	7.19707	1.9	5.04821	0.01			22.995	2.4892		
0.44846	0.98361	71.0725	0.0035	7.57066	1.8	11.3716	0.004			23.495	2.437		
0.47107	1.0929	139.3021	0.0018	7.96364	1.7	25.5861	0.0015			23.995	2.425		
0.48825	1.18033	284.29	8E-4	8.81186	1.6	45.4864	7.7E-4			24.495	2.4049		
0.49819	1.2459			9.26928	1.5	71.0725	4.5E-4			24.995	2.4089		
0.54292	1.24684			9.75043	1.4	139.3021	2E-4			25.495	2.3597		
0.72619	1.39536			10.25656	1.3	230.2749	1.05E-4			25.995	2.3648		
1.00974	1.60613			11.93813	1.2	284.29	8E-5			12.49	0		
1.4881	1.79745			15.37539	1					12.5	0.006		
2.0294	2.01155			25.5861	0.5					13.2	0.01725		
2.76761	2.25116			32.84705	0.28118					14.2	0.0325		
4.07874	2.59119			45.4864	0.16					15.2	0.05		
6.01101	2.98259			57.3132	0.1					16.2	0.0825		
7.88573	3.33786			71.0725	0.065					17.2	0.12		
10.9648	3.73545			100.003	0.03089					18.2	0.1525		
14.6661	4.06443			159.9131	0.009					19.2	0.1875		
19.617	4.67836			230.2749	0.0035					20.2	0.2225		
26.239	5.09038			284.29	0.002					22	0.2925		
34.4225	5.53868									30	0.625		
47.863	6.37529									40	0.875		
62.7906	6.93675									50	1.075		
85.6311	7.76303									72	1.3		
108.065	7.98454									100	1.3875		
136.376	6.5572												
178.909	4.81185												
217.191	3.33786												
248.765	2.01155												
268.827	1.28242												
274.091	0.88958												
284.929	0.49271												
290.508	0.31412												
296.196	0.13506												

Preseci za interakciju pozitrona sa H ₂ O (1/5)													
prenos impulsa (1/4)		prenos impulsa (2/4)		prenos impulsa (3/4)		prenos impulsa (4/4)		v1 (2/2)		v1 (1/2)		v2	
ε(eV)	σ(Å ²)	ε(eV)	σ(Å ²)	ε(eV)	σ(Å ²)	ε(eV)	σ(Å ²)	ε(eV)	σ(Å ²)	ε(eV)	σ(Å ²)	ε(eV)	σ(Å ²)
0.0000	*278.57	1	*11.2248	10.5207	*11.2248	110.685	*3.32974	0	0	713.19431	*5.59684E-04	0	0E+00
0.01014	*278.57	1.02334	*125.553	10.7662	*10.9453	113.268	*3.32677	0.4535	0	723.19431	*5.53115E-04	0.1978	0E+00
0.01501	*277.701	1.04723	*124.446	11.0175	*10.6994	115.912	*3.32373	0.47688	*2.1598E-01	733.19431	*5.46709E-04	0.47164	*4.5099E-01
0.02026	*276.832	1.07167	*122.235	11.2747	*10.5507	118.617	*3.32015	0.47941	*2.6136E-01	743.19431	*5.4046E-04	0.56445	*4.187E-01
0.02493	*275.963	1.09668	*121.129	11.5378	*10.402	121.386	*3.3164	0.48424	*3.6242E-01	753.19431	*5.34363E-04	0.76405	*3.6248E-01
0.02999	*275.094	1.12228	*120.024	11.8071	*10.2416	124.219	*3.29967	0.51073	*2.8634E-01	763.19431	*5.28411E-04	0.8673	*3.3852E-01
0.03524	*274.225	1.14847	*118.918	12.0827	*10.0705	127.118	*3.26295	0.52554	*2.5758E-01	773.19431	*5.226E-04	0.935	*3.2047E-01
0.04048	*273.356	1.17528	*116.706	12.3647	*9.83708	130.085	*3.22563	0.55861	*2.0422E-01	783.19431	*5.16924E-04	0.9706	*3.1249E-01
0.04543	*272.487	1.20271	*115.599	12.6533	*9.58689	133.122	*3.18648	0.61628	*1.593E-01	793.19431	*5.11379E-04	1.07716	*2.9886E-01
0.04982	*271.618	1.23078	*113.388	12.9486	*9.33666	136.229	*3.14652	0.67359	*1.3087E-01	803.19431	*5.0596E-04	1.26186	*2.7552E-01
0.05464	*270.749	1.25951	*111.824	13.2509	*9.24419	139.408	*3.10549	0.69148	*1.2275E-01	813.19431	*5.00663E-04	1.63112	*2.3501E-01
0.05992	*269.88	1.2889	*110.252	13.5602	*9.17274	142.662	*3.06343	0.71995	*1.1678E-01	823.19431	*4.95483E-04	1.85482	*2.099E-01
0.06571	*269.012	1.31899	*107.108	13.8766	*9.0965	145.992	*3.02036	0.74128	*1.1282E-01	833.19431	*4.90416E-04	1.96497	*1.9424E-01
0.07042	*268.143	1.34977	*103.963	14.2005	*8.94433	149.399	*2.97648	0.76617	*1.0889E-01	843.19431	*4.8546E-04	2.18835	*1.8356E-01
0.07547	*267.274	1.38128	*102.391	14.532	*8.73683	152.886	*2.92682	0.78755	*1.0286E-01	853.19431	*4.8061E-04	2.52523	*1.6548E-01
0.08088	*266.405	1.41352	*99.2458	14.8712	*8.5293	156.455	*2.88993	0.81373	*9.702E-02	863.19431	*4.75862E-04	2.97199	*1.4412E-01
0.08469	*265.536	1.44651	*97.6735	15.2183	*8.37079	160.106	*2.87149	0.88349	*8.915E-02	873.19431	*4.71214E-04	3.19532	*1.355E-01
0.09076	*264.667	1.48027	*94.5286	15.5734	*8.29856	163.845	*2.84345	0.90483	*8.519E-02	883.19431	*4.66662E-04	13.19532	*7.28687E-02
0.09505	*263.798	1.51482	*93.0386	15.9369	*8.19997	167.668	*2.81479	0.92976	*7.919E-02	893.19431	*4.62203E-04	23.19532	*5.05173E-02
0.09954	*262.929	1.55018	*92.1338	16.3089	*8.13723	171.581	*2.78537	0.9511	*7.523E-02	903.19431	*4.57835E-04	33.19532	*3.93237E-02
0.10424	*262.06	1.58636	*91.6813	16.6896	*8.08173	175.584	*2.75537	0.97598	*7.13E-02	913.19431	*4.53554E-04	43.19532	*3.24921E-02
0.10916	*261.191	1.62338	*90.7722	17.0791	*8.00722	179.684	*2.72458	1.00086	*6.736E-02	923.19431	*4.49357E-04	53.19532	*2.7843E-02
0.11432	*260.322	1.66127	*89.8725	17.4777	*7.85716	183.878	*2.69308	1.05044	*6.774E-02	933.19431	*4.45244E-04	63.19532	*2.4453E-02
0.11972	*259.453	1.70005	*88.9685	17.8857	*7.69955	188.169	*2.66079	1.22769	*6.083E-02	943.19431	*4.4121E-04	73.19532	*2.18603E-02
0.12537	*258.585	1.73973	*88.0642	18.3031	*7.58965	192.561	*2.6279	1.40135	*5.596E-02	953.19431	*4.37253E-04	83.19532	*1.98064E-02
0.13129	*257.716	1.78033	*84.6808	18.7303	*7.49412	197.056	*2.59411	1.62822	*4.736E-02	963.19431	*4.33372E-04	93.19532	*1.8135E-02
0.13436	*256.847	1.82189	*81.2623	19.1675	*7.40604	201.655	*2.55749	1.9543	*3.746E-02	973.19431	*4.29564E-04	103.19532	*1.67548E-02
0.1407	*255.978	1.86441	*77.8443	19.6149	*7.33494	206.362	*2.51618	2.20233	*3.314E-02	983.19431	*4.25826E-04	113.19532	*1.5571E-02
0.14399	*255.109	1.90792	*74.4273	20.0727	*7.25176	211.178	*2.47413	2.74792	*2.696E-02	993.19431	*4.22158E-04	123.19532	*1.45632E-02
0.15079	*254.24	1.95246	*69.3008	20.5412	*7.12778	216.107	*2.43089	3.07382	*2.53E-02			133.19532	*1.36882E-02
0.1543	*253.371	1.99803	*66.6947	21.0206	*6.99671	221.151	*2.38674	3.17906	*2.193E-02			143.19532	*1.29207E-02
0.16159	*252.502	2.04466	*66.7661	21.5112	*6.82289	226.313	*2.34139	3.19431	*2.209E-02			153.19532	*1.22415E-02
0.16536	*251.633	2.09238	*66.8726	22.0133	*6.65799	231.595	*2.29514	3.19431	*1.18795E-02			163.19532	*1.16358E-02
0.16922	*250.764	2.14122	*66.9435	22.5271	*6.7017	237.001	*2.24782	23.19431	*8.2355E-03			173.19532	*1.1092E-02
0.17721	*249.895	2.1912	*67.025	23.0529	*6.72326	242.532	*2.1993	23.19431	*6.41064E-03			183.19532	*1.06007E-02
0.18135	*249.026	2.24234	*67.1213	23.591	*6.57049	248.193	*2.1497	43.19431	*5.2969E-03			193.19532	*1.01545E-02
0.18558	*248.158	2.29468	*63.7136	24.1416	*6.49262	253.986	*2.09889	53.19431	*4.53899E-03			203.19532	*9.7473E-03
0.18991	*247.289	2.34823	*61.4109	24.705	*6.61625	259.914	*2.04703	63.19431	*3.98635E-03			213.19532	*9.37412E-03
0.19435	*246.42	2.40304	*57.9569	25.2817	*6.55154	265.98	*1.99372	73.19431	*3.56367E-03			223.19532	*9.03067E-03
0.19888	*245.551	2.45913	*54.5026	25.8717	*6.30624	272.188	*1.9394	83.19431	*3.22884E-03			233.19532	*8.71346E-03
0.20353	*244.682	2.51653	*52.0622	26.4756	*6.29852	278.541	*1.88365	93.19431	*2.95638E-03			243.19532	*8.41952E-03
0.20827	*243.813	2.57526	*50.6977	27.0935	*6.31179	285.043	*1.87614	103.19431	*2.7299E-03			253.19532	*8.1463E-03
0.21314	*242.944	2.63537	*49.333	27.7259	*6.09091	291.696	*1.87532	113.19431	*2.53838E-03			263.19532	*7.89164E-03
0.21811	*242.075	2.69688	*47.9685	28.373	*6.00268	298.504	*1.8745	123.19431	*2.37408E-03			273.19532	*7.65365E-03
0.2232	*241.206	2.75983	*46.6037	29.0353	*5.99846	305.471	*1.86388	133.19431	*2.23144E-03			283.19532	*7.4307E-03
0.22841	*240.337	2.82424	*45.2386	29.713	*5.85886	312.601	*1.85027	143.19431	*2.10633E-03			293.19532	*7.2137E-03
0.23374	*239.468	2.89016	*43.4184	30.4065	*5.7578	319.897	*1.83634	153.19431	*1.9956E-03			303.19532	*7.02443E-03
0.2392	*238.6	2.95762	*42.0531	31.1162	*5.70356	327.363	*1.82213	163.19431	*1.89686E-03			313.19532	*6.83876E-03
0.24478	*237.731	3.02665	*40.9275	31.8424	*5.74112	335.004	*1.80754	173.19431	*1.8082E-03			323.19532	*6.65471E-03
0.25049	*236.862	3.09729	*39.7705	32.5856	*5.67434	342.823	*1.79258	183.19431	*1.72812E-03			333.19532	*6.49251E-03
0.25634	*235.993	3.16958	*38.6134	33.3462	*5.56921	350.825	*1.77793	193.19431	*1.6538E-03			343.19532	*6.34029E-03
0.26232	*235.124	3.24356	*37.4455	34.1245	*5.4622	359.013	*1.76169	203.19431	*1.589E-03			353.19532	*6.19109E-03
0.26845	*234.255	3.31927	*36.5881	34.921	*5.41716	367.392	*1.74566	213.19431	*1.52816E-03			363.19532	*6.04928E-03
0.27471	*233.379	3.39674	*35.4906	35.736	*5.38079	375.967	*1.72931	223.19431	*1.47217E-03			373.19532	*5.91431E-03
0.28112	*232.498	3.47602	*34.273	36.5701	*5.31307	384.743	*1.71254	233.19431	*1.42046E-03			383.19532	*5.7859E-03
0.28769	*231.619	3.55715	*33.7812	37.4237	*5.27799	393.723	*1.69307	243.19431	*1.37254E-03			393.19532	*5.66296E-03
0.2944	*230.74	3.64017	*33.399	38.2971	*5.23046	402.912	*1.66981	253.19431	*1.328E-03			403.19532	*5.54572E-03
0.30127	*229.873	3.72514	*33.0168	39.191	*5.10627	412.316	*1.64047	263.19431	*1.28649E-03			413.19532	*5.43361E-03
0.3083	*229.004	3.81208	*32.5387	40.1057	*5.09962	421.94	*1.61049	273.19431	*1.24769E-03			423.19532	*5.32672E-03
0.3155	*228.135	3.90106	*32.1562	41.0418	*5.03418	431.788	*1.57975	283.19431	*1.21135E-03			433.19532	*5.22341E-03
0.32286	*227.266	3.99211	*31.619	41.9997	*4.97133	441.866	*1.54835	293.19431	*1.17722E-03			443.19532	*5.12475E-03
0.3304	*226.397	4.08529	*30.6797	42.98	*4.90965	452.179	*1.51619	303.19431	*1.14512E-03			453.19532	*5.03002E-03
0.33811	*225.528	4.18064	*29.5056	43.9832	*4.90405	462.733	*1.48328	313.19431	*1.11485E-03			463.19532	*4.93898E-03
0.346	*224.659	4.27821	*28.3313	45.0098	*4.84752	473.533	*1.44963	323.19431	*1.08626E-03			473.19532	*4.85143E-03
0.35408	*223.79	4.37807	*27.1569	46.0603	*4.7804	484.586	*1.41515	333.19431	*1.05922E-03			483.19532	*4.7616E-03
0.36234	*222.921	4.48025	*25.9824	47.1353	*4.75835	495.896	*1.37992	343.19431	*1.03359E-03			493.19532	*4.68598E-03
0.3708	*222.052	4.58482	*25.1166	48.2355	*4.64446	507.471	*1.33937	353.19431	*1.00927E-03			503.19532	*4.60772E-03
0.37945	*221.183	4.69183	*24.1368	49.3613	*4.53885	519.315	*1.29521	363.19431	*9.86148E-04			513.19532	*4.5322E-03
0.38831	*220.314	4.80134	*23.1019	50.5134	*4.60561	531.436	*1.25011	373.19431	*9.64145E-04			523.19532	*4.4593E-03
0.39737	*219.445												

Preseci za interakciju pozitrona sa H ₂ O (2/5)													
v3 (1/2)		v3 (2/4)		jonizacija		el. exc 7		rot 01a (1/2)		rot 01a (2/2)		rot 12a (1/3)	
ε(eV)	σ(Å ²)	ε(eV)	σ(Å ²)	ε(eV)	σ(Å ²)	ε(eV)	σ(Å ²)	ε(eV)	σ(Å ²)	ε(eV)	σ(Å ²)	ε(eV)	σ(Å ²)
0	0	703.17237	1.35392E-03	0	0	0	0	1.01	0	1.01	5.02297E+01	0	0E+00
0.4657	0	713.17237	1.33781E-03	12.621	0	11.1	0	0	0E+00	1.02	4.98145E+01	0.00691	0E+00
0.48613	1.1914E-01	723.17237	1.32211E-03	45	2.3875	19.5349	0.00603	0.01	9.98107E+02	1.03	4.94066E+01	0.01	0E+00
0.48691	2.4286E-01	733.17237	1.3068E-03	50	2.52339	29.9225	0.01	0.02	8.9544E+02	1.04	4.90058E+01	0.02	7.56952E+02
0.48911	3.0267E-01	743.17237	1.29186E-03	60	2.68558	40	0.01551	0.03	7.2435E+02	1.05	4.86119E+01	0.03	7.5593E+02
0.49201	3.3156E-01	753.17237	1.27729E-03	70	2.75165	49.9225	0.01615	0.04	6.07354E+02	1.06	4.82248E+01	0.04	6.79091E+02
0.49528	3.4395E-01	763.17237	1.26306E-03	80	2.75932	99.845	0.01726	0.05	5.24568E+02	1.07	4.78443E+01	0.05	6.08218E+02
0.51036	3.0283E-01	773.17237	1.24917E-03	90	2.7315			0.06	4.63045E+02	1.08	4.74701E+01	0.06	5.49399E+02
0.53295	2.432E-01	783.17237	1.2356E-03	100	2.6811			0.07	4.15462E+02	1.09	4.71022E+01	0.09	4.2672E+02
0.54775	2.1445E-01	793.17237	1.22235E-03	110	2.61715			0.08	3.7749E+02	1.1	4.67404E+01	0.11	3.97826E+02
0.57296	1.9608E-01	803.17237	1.20939E-03	125	2.50984			0.09	3.46427E+02	1.11	4.63844E+01	0.11	3.72899E+02
0.60538	1.7159E-01	813.17237	1.19673E-03	150	2.32612			0.1	3.20503E+02	1.12	4.60343E+01	0.12	3.51168E+02
0.64475	1.5333E-01	823.17237	1.18435E-03	200	2.03606			0.11	2.9851E+02	1.13	4.56898E+01	0.13	3.32046E+02
0.68407	1.3713E-01	833.17237	1.17224E-03	300	1.58035			0.12	2.79594E+02	1.14	4.53508E+01	0.14	3.15081E+02
0.73029	1.2923E-01	843.17237	1.16039E-03	400	1.30305			0.13	2.63134E+02	1.15	4.50171E+01	0.15	2.99921E+02
0.77647	1.234E-01	853.17237	1.1488E-03	500	1.11088			0.14	2.48669E+02	1.16	4.46897E+01	0.16	2.86284E+02
0.82623	1.1855E-01	863.17237	1.13745E-03	700	0.84096			0.15	2.35847E+02	1.17	4.43654E+01	0.21	2.74399E+02
0.87595	1.0972E-01	873.17237	1.12634E-03	1000	0.51905			0.16	2.24395E+02	1.18	4.4047E+01	0.22	2.6387E+02
0.92566	1.0391E-01	883.17237	1.11546E-03					0.17	2.14098E+02	1.19	4.37356E+01	0.23	2.53955E+02
0.9683	9.804E-02	893.17237	1.1048E-03					0.18	2.04785E+02	1.2	4.34248E+01	0.24	2.44201E+02
1.02146	9.638E-02	903.17237	1.09431E-03					0.19	1.96318E+02	1.21	4.31208E+01	0.25	2.35591E+02
1.07109	9.47E-02	913.17237	1.08426E-03					0.2	1.88583E+02	1.22	4.28212E+01	0.26	2.29958E+02
1.12071	9.301E-02	923.17237	1.07409E-03					0.21	1.81486E+02	1.23	4.25261E+01	0.27	2.24930E+02
1.17034	9.132E-02	933.17237	1.06426E-03	10.84	0			0.22	1.7495E+02	1.24	4.22353E+01	0.28	2.18588E+02
1.21991	9.17E-02	943.17237	1.05462E-03	20	0.00311			0.23	1.68907E+02	1.25	4.19488E+01	0.29	2.13834E+02
1.27667	8.8E-02	953.17237	1.04516E-03	30	0.00397			0.24	1.63304E+02	1.26	4.16664E+01	0.33	2.166173E+02
1.52828	8.166E-02	963.17237	1.03588E-03	40	0.00328			0.25	1.58091E+02	1.27	4.1388E+01	0.34	2.162369E+02
1.7799	7.531E-02	973.17237	1.02678E-03	50	0.00221			0.26	1.53229E+02	1.28	4.11137E+01	0.35	2.15837E+02
2.02802	6.688E-02	983.17237	1.01785E-03	56.8323	9.86777E-4			0.27	1.48683E+02	1.29	4.08431E+01	0.38	2.148885E+02
2.27251	6.254E-02	993.17237	1.00908E-03					0.28	1.44421E+02	1.3	4.05764E+01	0.39	2.145888E+02
2.63032	5.906E-02							0.29	1.40417E+02	1.31	4.03134E+01	0.4	2.143019E+02
3.07322	5.21E-02							0.3	1.36648E+02	1.34	3.95459E+01	0.41	2.140272E+02
3.17237	5.285E-02							0.31	1.33092E+02	1.35	3.92969E+01	0.42	2.137637E+02
13.17237	2.84238E-02							0.32	1.29373E+02	1.36	3.90513E+01	0.45	2.130344E+02
23.17237	1.96975E-02							0.33	1.26552E+02	1.37	3.8809E+01	0.46	2.128097E+02
33.17237	1.53302E-02							0.34	1.23537E+02	1.38	3.85699E+01	0.47	2.12593E+02
43.17237	1.26656E-02	5.821	0					0.35	1.20674E+02	1.39	3.83339E+01	0.48	2.12384E+02
53.17237	1.08526E-02	6	0.75					0.36	1.17952E+02	1.4	3.8101E+01	0.51	2.11802E+02
63.17237	9.53084E-03	7	1.448					0.37	1.15359E+02	1.41	3.78711E+01	0.52	2.116207E+02
73.17237	8.51997E-03	8	1.683					0.38	1.12888E+02	1.42	3.76441E+01	0.53	2.114455E+02
83.17237	7.71926E-03	9	2.174					0.39	1.10529E+02	1.43	3.74201E+01	0.54	2.112759E+02
93.17237	7.06774E-03	10	2.418					0.4	1.08275E+02	1.44	3.71989E+01	0.55	2.111181E+02
103.17237	6.5262E-03	11	2.425					0.41	1.06118E+02	1.45	3.69804E+01	0.56	2.109572E+02
113.17237	6.06825E-03	12	2.665					0.42	1.04052E+02	1.46	3.67674E+01	0.57	2.107986E+02
123.17237	5.67542E-03	13	2.686					0.43	1.02072E+02	1.47	3.65517E+01	0.58	2.106491E+02
133.17237	5.33438E-03	14	2.756					0.44	1.00172E+02	1.48	3.63413E+01	0.59	2.10504E+02
143.17237	5.03523E-03	15	2.918					0.45	9.83468E+01	1.49	3.61335E+01	0.6	2.103632E+02
153.17237	4.77052E-03	16	2.813					0.46	9.65924E+01	1.5	3.59283E+01	0.61	2.102264E+02
163.17237	4.53444E-03	17	2.82					0.47	9.49046E+01	1.51	3.57255E+01	0.64	2.100837E+02
173.17237	4.32248E-03	18	2.736					0.48	9.32795E+01	1.52	3.55251E+01	0.65	2.10052E+02
183.17237	4.13101E-03	19	2.804					0.49	9.17135E+01	1.53	3.53272E+01	0.67	2.10021E+02
193.17237	3.95712E-03	20	2.726					0.5	9.02035E+01	1.54	3.51315E+01	0.68	2.100009E+02
203.17237	3.79843E-03	21	2.696					0.51	8.87463E+01	1.55	3.49382E+01	0.69	2.099894E+02
213.17237	3.65298E-03	22	2.664					0.52	8.73392E+01	1.56	3.47472E+01	0.7	2.099781E+02
223.17237	3.51912E-03	23	2.65					0.53	8.59796E+01	1.57	3.45584E+01	0.71	2.099675E+02
233.17237	3.3955E-03	24	2.593					0.54	8.4665E+01	1.58	3.43717E+01	0.72	2.09957E+02
243.17237	3.28095E-03	25	2.672					0.55	8.33931E+01	1.59	3.41872E+01	0.73	2.099472E+02
253.17237	3.17447E-03	26	2.495					0.56	8.2162E+01	1.6	3.40049E+01	0.74	2.099372E+02
263.17237	3.07522E-03	27	2.424					0.57	8.09695E+01	1.61	3.38246E+01	0.77	2.099278E+02
273.17237	2.98248E-03	28	2.519					0.58	7.98138E+01	1.62	3.36463E+01	0.78	2.099181E+02
283.17237	2.89559E-03	29	2.253					0.59	7.86933E+01	1.63	3.347E+01	0.79	2.099084E+02
293.17237	2.81401E-03	30	2.278					0.6	7.76062E+01	1.66	3.29529E+01	0.8	2.11141E+01
303.17237	2.73726E-03	31	2.229					0.61	7.65512E+01	1.67	3.27843E+01	0.81	2.112873E+01
313.17237	2.66491E-03	32	2.206					0.62	7.55266E+01	1.68	3.26175E+01	0.82	2.11434E+01
323.17237	2.59657E-03	33	2.108					0.63	7.45313E+01	1.69	3.24525E+01	0.83	2.115808E+01
333.17237	2.53192E-03	34	2.04					0.64	7.35639E+01	1.7	3.22893E+01	0.84	2.11727E+01
343.17237	2.47065E-03	35	1.974					0.65	7.26232E+01	1.71	3.21279E+01	0.85	2.11874E+01
353.17237	2.41251E-03	36	1.965					0.66	7.17081E+01	1.72	3.19682E+01	0.88	2.12021E+01
363.17237	2.35725E-03	37	1.942					0.67	7.08176E+01	1.73	3.18101E+01	0.89	2.12168E+01
373.17237	2.30465E-03	38	1.853					0.68	6.99507E+01	1.74	3.16538E+01	0.9	2.12315E+01
383.17237	2.25452E-03	39	1.772					0.69	6.91064E+01	1.75	3.1499E+01	0.91	2.12462E+01
393.17237	2.2067E-03	40	1.708					0.7	6.82837E+01	1.76	3.13459E+01	0.92	2.12609E+01
403.17237	2.16101E-03	41	1.704					0.71	6.7482E+01	1.66	3.29529E+01	0.93	2.26084E+01
413.17237	2.11732E-03	42	1.707					0.72	6.67002E+01	1.79	3.08959E+01	0.94	2.19745E+01
423.17237	2.07549E-03	43	1.644					0.73	6.59378E+01	1.8	3.0749E+01	0.95	2.13525E+01
433.17237	2.03541E-03	44	1.657					0.74	6.5194E+01	1.81	3.06035E+01	0.96	2.07421E+01
443.17237	1.99696E-03	45	1.538					0.75	6.4468E+01	1.82	3.04596E+01	1	6.84093E+01
453.17237	1.96005E-03	46	1.492					0.76	6.37592E+01	1.83	3.0317E+01	1.01	6.78518E+01
463.17237	1.92457E-03	47	1.527					0.77	6.30671E+01	1.84	3.01759E+01	1.02	6.73042E+01
473.17237	1.89045E-03	48	1.397					0.78	6.23909E+01	1.85	3.00362E+01	1.03	6.6766E+01
483.17237	1.85761E-03	49	1.417					0.79	6.17302E+01	1.86</			

Preseci za interakciju pozitrona sa H ₂ O (3/5)													
rot 12a (2/3)		rot 12a (3/3)		rot23a (1/3)		rot23a (2/3)		rot23a (3/3)		rot34a (1/2)		rot34a (2/2)	
ε(eV)	σ(Å ²)	ε(eV)	σ(Å ²)	ε(eV)	σ(Å ²)	ε(eV)	σ(Å ²)	ε(eV)	σ(Å ²)	ε(eV)	σ(Å ²)	ε(eV)	σ(Å ²)
1.3	5.50766E+01	2.32	3.38914E+01	0	0E+00	1.02	5.38854E+01	2.04	3.05117E+01	0	0E+00	1.03	2.33789E+01
1.31	5.47272E+01	2.33	3.37683E+01	0.01383	0E+00	1.03	5.34662E+01	2.05	3.03879E+01	0.02074	0E+00	1.04	2.91535E+01
1.32	5.43826E+01	2.34	3.36462E+01	0.02	-5.78791E-14	1.04	5.30458E+01	2.06	3.02651E+01	0.03	1.1609E+02	1.05	2.89319E+01
1.33	5.40427E+01	2.35	3.3525E+01	0.03	4.35363E+02	1.05	5.26366E+01	2.07	3.01434E+01	0.04	1.899E+02	1.06	2.87139E+01
1.34	5.37073E+01	2.36	3.34047E+01	0.04	4.45931E+02	1.06	5.22342E+01	2.08	3.00228E+01	0.05	1.95989E+02	1.07	2.84995E+01
1.35	5.33763E+01	2.37	3.32854E+01	0.05	4.20424E+02	1.07	5.18384E+01	2.09	2.99032E+01	0.06	1.8956E+02	1.12	2.74776E+01
1.36	5.30498E+01	2.38	3.3167E+01	0.06	3.90581E+02	1.08	5.14491E+01	2.1	2.97846E+01	0.07	1.80131E+02	1.13	2.72828E+01
1.37	5.27275E+01	2.39	3.30495E+01	0.07	3.6264E+02	1.09	5.10661E+01	2.11	2.9667E+01	0.08	1.70367E+02	1.16	2.67158E+01
1.38	5.24094E+01	2.4	3.29329E+01	0.08	3.37785E+02	1.1	5.06893E+01	2.12	2.95505E+01	0.09	1.61106E+02	1.19	2.6174E+01
1.39	5.20955E+01	2.41	3.28171E+01	0.09	3.15954E+02	1.11	5.03185E+01	2.13	2.94349E+01	0.1	1.52587E+02	1.2	2.59987E+01
1.4	5.17856E+01	2.42	3.27023E+01	0.1	2.96787E+02	1.12	4.99535E+01	2.14	2.93203E+01	0.11	1.44839E+02	1.21	2.58259E+01
1.41	5.14796E+01	2.43	3.25883E+01	0.11	2.79894E+02	1.13	4.95942E+01	2.15	2.92066E+01	0.12	1.37815E+02	1.29	2.45286E+01
1.42	5.11775E+01	2.44	3.24751E+01	0.12	2.64921E+02	1.14	4.92405E+01	2.16	2.90939E+01	0.13	1.31446E+02	1.3	2.43763E+01
1.43	5.08792E+01	2.45	3.23628E+01	0.13	2.51573E+02	1.15	4.88922E+01	2.17	2.89821E+01	0.14	1.25657E+02	1.31	2.42261E+01
1.44	5.05847E+01	2.46	3.22513E+01	0.14	2.39603E+02	1.16	4.85493E+01	2.18	2.88713E+01	0.15	1.20381E+02	1.38	2.32284E+01
1.45	5.02938E+01	2.47	3.21406E+01	0.15	2.28811E+02	1.17	4.82115E+01	2.19	2.87613E+01	0.16	1.15555E+02	1.41	2.28276E+01
1.46	5.00065E+01	2.48	3.20308E+01	0.16	2.19029E+02	1.18	4.78789E+01	2.2	2.86523E+01	0.17	1.11129E+02	1.44	2.24415E+01
1.47	4.97272E+01	2.49	3.19217E+01	0.17	2.10122E+02	1.19	4.75511E+01	2.21	2.85442E+01	0.18	1.07053E+02	1.45	2.2316E+01
1.48	4.94423E+01	2.5	3.18135E+01	0.18	2.01975E+02	1.2	4.72281E+01	2.22	2.84369E+01	0.19	1.0329E+02	1.48	2.19484E+01
1.49	4.91654E+01	295.22	3.17049E+01	0.19	1.94494E+02	1.21	4.691E+01	2.23	2.83305E+01	0.2	9.98046E+01	1.49	2.18278E+01
1.5	4.88918E+01	728.72	3.16030E+01	0.2	1.87598E+02	1.22	4.65964E+01	2.24	2.82249E+01	0.21	9.65668E+01	1.54	2.12512E+01
1.51	4.86214E+01	809.64	3.15058E+01	0.21	1.8122E+02	1.23	4.62874E+01	2.25	2.81202E+01	0.22	9.35511E+01	1.63	2.02909E+01
1.52	4.83542E+01	810.88	3.14298E+01	0.22	1.75302E+02	1.24	4.59827E+01	2.26	2.80163E+01	0.23	9.07351E+01	1.66	1.99914E+01
1.53	4.80902E+01	891.83	3.13595E+01	0.23	1.69795E+02	1.25	4.56824E+01	2.27	2.79133E+01	0.24	8.80939E+01	1.72	1.94203E+01
1.54	4.78293E+01	972.35	3.12951E+01	0.24	1.64657E+02	1.26	4.53864E+01	2.28	2.78111E+01	0.25	8.56266E+01	1.73	1.93285E+01
1.55	4.75714E+01	999.99	3.12379E+01	0.25	1.5985E+02	1.27	4.50944E+01	2.29	2.77096E+01	0.26	8.33021E+01	1.78	1.88834E+01
1.56	4.73165E+01	1000	3.11977E+01	0.26	1.55343E+02	1.28	4.48066E+01	2.3	2.7609E+01	0.27	8.11124E+01	1.79	1.8797E+01
1.57	4.70646E+01			0.27	1.51108E+02	1.29	4.45226E+01	2.31	2.75092E+01	0.28	7.90461E+01	1.82	1.8543E+01
1.58	4.68155E+01			0.28	1.47119E+02	1.3	4.42426E+01	2.32	2.74101E+01	0.29	7.70925E+01	1.85	1.82963E+01
1.59	4.65692E+01			0.29	1.43357E+02	1.31	4.39638E+01	2.33	2.7318E+01	0.3	7.52426E+01	1.88	1.80566E+01
1.6	4.63257E+01			0.3	1.398E+02	1.32	4.36938E+01	2.34	2.72142E+01	0.31	7.34881E+01	1.93	1.76719E+01
1.61	4.60849E+01			0.31	1.36433E+02	1.33	4.34249E+01	2.35	2.71174E+01	0.32	7.18215E+01	1.94	1.75971E+01
1.62	4.5849E+01			0.32	1.3324E+02	1.34	4.31595E+01	2.36	2.70214E+01	0.33	7.02362E+01	1.95	1.75229E+01
1.63	4.56114E+01			0.33	1.30207E+02	1.35	4.28978E+01	2.37	2.69265E+01	0.34	6.87263E+01	1.96	1.74495E+01
1.64	4.53786E+01			0.34	1.27322E+02	1.36	4.26394E+01	2.38	2.68314E+01	0.35	6.72864E+01	1.97	1.73767E+01
1.65	4.51482E+01			0.35	1.24575E+02	1.37	4.23843E+01	2.39	2.67375E+01	0.36	6.59115E+01	2.0	1.71622E+01
1.66	4.49204E+01			0.36	1.21956E+02	1.38	4.21325E+01	2.4	2.66443E+01	0.37	6.45972E+01	2.03	1.69533E+01
1.67	4.46951E+01			0.37	1.19455E+02	1.39	4.1884E+01	2.41	2.65519E+01	0.38	6.33394E+01	2.06	1.67499E+01
1.68	4.44722E+01			0.38	1.17064E+02	1.4	4.16386E+01	2.42	2.64601E+01	0.39	6.21346E+01	2.07	1.66833E+01
1.69	4.42517E+01			0.39	1.14776E+02	1.41	4.13963E+01	2.43	2.63689E+01	0.4	6.09792E+01	2.18	1.59864E+01
1.7	4.40335E+01			0.4	1.12585E+02	1.42	4.11571E+01	2.44	2.62785E+01	0.41	5.98703E+01	2.19	1.59262E+01
1.71	4.38176E+01			0.41	1.10484E+02	1.43	4.09208E+01	2.45	2.61887E+01	0.42	5.88049E+01	2.24	1.56322E+01
1.72	4.3604E+01			0.42	1.08467E+02	1.44	4.06875E+01	2.46	2.60996E+01	0.43	5.77805E+01	2.37	1.49199E+01
1.73	4.33926E+01			0.43	1.06529E+02	1.45	4.0457E+01	2.47	2.60111E+01	0.44	5.67948E+01	2.38	1.48681E+01
1.74	4.31834E+01			0.44	1.04666E+02	1.46	4.02293E+01	2.48	2.59233E+01	0.45	5.58454E+01	2.39	1.48165E+01
1.75	4.29764E+01			0.45	1.02874E+02	1.47	4.00044E+01	2.49	2.58361E+01	0.46	5.49303E+01	2.4	1.47654E+01
1.76	4.27715E+01			0.46	1.01147E+02	1.48	3.97822E+01	2.5	2.57495E+01	0.47	5.40477E+01	2.43	1.46143E+01
1.77	4.25687E+01			0.47	9.94834E+01	1.49	3.95627E+01	2.51	2.56636E+01	0.48	5.31958E+01	2.44	1.45647E+01
1.78	4.23679E+01			0.48	9.78785E+01	1.5	3.93458E+01	2.52	2.55789E+01	0.49	5.23729E+01	2.5	1.42744E+01
1.79	4.21692E+01			0.49	9.63294E+01	1.51	3.91314E+01	2.53	2.54936E+01	0.5	5.15776E+01	2.51	1.42272E+01
1.8	4.19727E+01			0.5	9.48332E+01	1.52	3.89195E+01	2.54	2.54095E+01	0.51	5.08085E+01	2.52	1.41804E+01
1.81	4.17777E+01			0.51	9.33872E+01	1.53	3.87102E+01	2.55	2.5326E+01	0.52	5.00642E+01	2.55	1.40418E+01
1.82	4.15849E+01			0.52	9.19887E+01	1.54	3.85032E+01	2.56	2.5243E+01	0.53	4.93435E+01	2.56	1.39963E+01
1.83	4.1394E+01			0.53	9.06355E+01	1.55	3.82986E+01	2.57	2.51607E+01	0.54	4.86452E+01	2.63	1.36863E+01
1.84	4.12049E+01			0.54	8.93251E+01	1.56	3.80964E+01	2.58	2.50789E+01	0.55	4.79684E+01	2.67	1.35157E+01
1.85	4.10177E+01			0.55	8.80557E+01	1.57	3.78965E+01	2.59	2.49977E+01	0.56	4.73121E+01	2.68	1.34738E+01
1.86	4.08324E+01			0.56	8.68252E+01	1.58	3.76988E+01	2.6	2.49171E+01	0.57	4.66751E+01	2.69	1.34322E+01
1.87	4.06488E+01			0.57	8.56319E+01	1.59	3.75033E+01	2.61	2.4837E+01	0.58	4.60567E+01	2.72	1.33089E+01
1.88	4.0467E+01			0.58	8.44739E+01	1.6	3.73101E+01	2.62	2.47575E+01	0.59	4.54561E+01	2.79	1.30305E+01
1.89	4.02869E+01			0.59	8.33497E+01	1.61	3.71189E+01	2.63	2.46785E+01	0.6	4.48724E+01	2.82	1.2915E+01
1.9	4.01086E+01			0.6	8.22579E+01	1.62	3.69299E+01	2.64	2.46001E+01	0.61	4.4305E+01	2.83	1.28769E+01
1.91	3.99319E+01			0.61	8.11969E+01	1.63	3.6743E+01	2.65	2.45222E+01	0.62	4.37532E+01	2.87	1.27273E+01
1.92	3.97569E+01			0.62	8.01654E+01	1.64	3.65581E+01	2.66	2.44449E+01	0.63	4.32162E+01	2.88	1.26904E+01
1.93	3.95836E+01			0.63	7.91623E+01	1.65	3.63752E+01	2.67	2.4368E+01	0.64	4.26935E+01	2.9	1.26175E+01
1.94	3.94119E+01			0.64	7.81862E+01	1.66	3.61942E+01	2.68	2.42917E+01	0.65	4.21845E+01	2.91	1.25813E+01
1.95	3.92417E+01			0.65	7.72362E+01	1.67	3.60152E+01	2.69	2.42159E+01	0.66	4.16887E+01	2.93	1.25097E+01
1.96	3.90732E+01			0.66	7.6311E+01	1.68	3.58381E+01	2.7	2.41406E+01	0.67	4.12055E+01	2.97	1.2369E+01
1.97	3.89062E+01			0.67	7.54098E+01	1.69	3.56629E+01	2.71	2.40658E+01	0.68	4.07345E+01	3	1.22657E+01
1.98	3.87407E+01			0.68	7.45316E+01	1.7	3.54895E+01	2.72	2.39915E+01	0.69	4.02751E+01	3.1	1.22317E+01
1.99	3.85767E+01			0.69	7.36754E+01	1.71	3.5318E+01	2.73	2.39177E+01	0.7	3.98269E+01	3.02	1.21979E+01
2	3.84142E+01			0.7	7.28405E+01	1.72	3.51482E+01	2.74	2.38443E+01	0.71	3.93843E+01	3.05	1.20977E+01
2.01	3.82532E+01			0.71	7.2026E								

Preseci za interakciju pozitrona sa H₂O (4/5)

rot45a (1/2)		rot45a (2/2)		rot56a (1/2)		rot56a (2/2)		rot01b		rot12b		rot23b	
ε(eV)	σ(Å ²)	ε(eV)	σ(Å ²)	ε(eV)	σ(Å ²)	ε(eV)	σ(Å ²)	ε(eV)	σ(Å ²)	ε(eV)	σ(Å ²)	ε(eV)	σ(Å ²)
0.0	1.0E+00	1.53	8.46457E+00	0.0	0E+00	1.93	4.3925E-01	0.0	0E+00	0.0	0E+00	0.0	0E+00
0.002766	1.0E+00	1.57	8.29059E+00	0.04148	1.0E+00	1.94	4.37438E-01	0.01	9.32092E+02	0.0036	1.0E+00	0.0072	1.0E+00
0.03	1.0E+00	1.58	8.24831E+00	0.05	1.21276E+00	1.95	4.35642E-01	0.02	6.37238E+02	0.01	8.65356E+02	0.01	1.0E+00
0.04	1.484714E+01	1.59	8.20649E+00	0.06	2.6357E+00	2.01	4.25196E-01	0.03	4.86949E+02	0.02	8.07087E+02	0.02	6.82312E+02
0.05	6.28192E+01	1.6	8.16514E+00	0.07	2.99846E+00	2.02	4.23508E-01	0.04	3.9745E+02	0.03	6.565E+02	0.03	6.05123E+02
0.06	6.49491E+01	1.61	8.12423E+00	0.08	3.09543E+00	2.07	4.15281E-01	0.05	3.37705E+02	0.04	5.51776E+02	0.04	5.25564E+02
0.07	6.3767E+01	1.65	7.96498E+00	0.09	3.08643E+00	2.08	4.13677E-01	0.06	2.94758E+02	0.08	3.44147E+02	0.05	4.62809E+02
0.1	5.63575E+01	1.66	7.92622E+00	0.1	3.03018E+00	2.12	4.07395E-01	0.07	2.62263E+02	0.09	3.15959E+02	0.06	4.13701E+02
0.11	5.3888E+01	1.67	7.88787E+00	0.11	2.95262E+00	2.13	4.05875E-01	0.08	2.36737E+02	0.11	2.92415E+02	0.12	2.58028E+02
0.12	5.15721E+01	1.68	7.84992E+00	0.12	2.86631E+00	2.14	4.04332E-01	0.09	2.16107E+02	0.11	2.72428E+02	0.15	2.19241E+02
0.13	4.94205E+01	1.73	7.65999E+00	0.13	2.77767E+00	2.2	3.95434E-01	0.1	1.99053E+02	0.12	2.55227E+02	0.21	1.70263E+02
0.14	4.74296E+01	1.78	7.49119E+00	0.16	2.52384E+00	2.21	3.93993E-01	0.11	1.84698E+02	0.13	2.40254E+02	0.27	1.40298E+02
0.15	4.55894E+01	1.79	7.45726E+00	0.17	2.44647E+00	2.22	3.92562E-01	0.12	1.72431E+02	0.14	2.2709E+02	0.33	1.19907E+02
0.16	4.38876E+01	1.86	7.22883E+00	0.18	2.37312E+00	2.28	3.84213E-01	0.13	1.61818E+02	0.15	2.15417E+02	0.39	1.05054E+02
0.2	3.82259E+01	1.87	7.19743E+00	0.19	2.30571E+00	2.29	3.82859E-01	0.14	1.52536E+02	0.19	1.79408E+02	0.46	9.20708E+01
0.21	3.70445E+01	1.88	7.16632E+00	0.2	2.23809E+00	2.3	3.81515E-01	0.15	1.44342E+02	0.2	1.72357E+02	0.53	8.21433E+01
0.22	3.59395E+01	1.89	7.13551E+00	0.21	2.17606E+00	2.31	3.80182E-01	0.16	1.37052E+02	0.21	1.65888E+02	0.61	7.32929E+01
0.23	3.49037E+01	1.9	7.10498E+00	0.25	1.9595E+00	2.32	3.78858E-01	0.17	1.3052E+02	0.22	1.59927E+02	0.68	6.70791E+01
0.26	3.21524E+01	1.91	7.07474E+00	0.26	1.91221E+00	2.36	3.73663E-01	0.18	1.2463E+02	0.26	1.40116E+02	0.74	6.25916E+01
0.27	3.13375E+01	1.92	7.04477E+00	0.27	1.8673E+00	2.37	3.72389E-01	0.19	1.1929E+02	0.29	1.28425E+02	0.8	5.87081E+01
0.31	2.84848E+01	1.93	7.01508E+00	0.28	1.82458E+00	2.42	3.66155E-01	0.2	1.14423E+02	0.35	1.10402E+02	0.86	5.53116E+01
0.32	2.66922E+01	1.98	6.87016E+00	0.31	1.70819E+00	2.43	3.64966E-01	0.24	9.86023E+01	0.36	1.07916E+02	0.97	5.00705E+01
0.35	2.61485E+01	1.99	6.84249E+00	0.32	1.67288E+00	2.48	3.58968E-01	0.25	9.53561E+01	0.4	9.90778E+01	1.05	4.68825E+01
0.36	2.56287E+01	2	6.81462E+00	0.33	1.63913E+00	2.52	3.54344E-01	0.26	9.2333E+01	0.47	8.68635E+01	1.12	4.44309E+01
0.37	2.51311E+01	2.01	6.78699E+00	0.34	1.60682E+00	2.53	3.53209E-01	0.27	8.95103E+01	0.48	8.53785E+01	1.19	4.24202E+01
0.38	2.46545E+01	2.02	6.75961E+00	0.37	1.51775E+00	2.54	3.52081E-01	0.28	8.68681E+01	0.55	8.37434E+01	1.28	3.97428E+01
0.39	2.41974E+01	2.03	6.7326E+00	0.38	1.49041E+00	2.55	3.50961E-01	0.31	7.98629E+01	0.63	6.82424E+01	1.34	3.82469E+01
0.43	2.25415E+01	2.07	6.62462E+00	0.39	1.46413E+00	2.59	3.46557E-01	0.32	7.77905E+01	0.71	6.34309E+01	1.42	3.64309E+01
0.44	2.21657E+01	2.08	6.6002E+00	0.4	1.43885E+00	2.6	3.45475E-01	0.37	6.89516E+01	0.79	5.65365E+01	1.49	3.49872E+01
0.45	2.18035E+01	2.09	6.57443E+00	0.43	1.36845E+00	2.61	3.444E-01	0.38	6.74363E+01	0.88	5.1659E+01	1.55	3.3844E+01
0.46	2.14542E+01	2.1	6.54887E+00	0.44	1.34663E+00	2.62	3.43332E-01	0.39	6.5991E+01	0.99	5.11722E+01	1.62	3.26077E+01
0.47	2.1117E+01	2.11	6.52532E+00	0.45	1.32575E+00	2.63	3.42272E-01	0.44	5.96601E+01	0.94	5.88791E+01	1.71	3.11536E+01
0.48	2.07912E+01	2.12	6.49839E+00	0.46	1.30522E+00	2.68	3.37974E-01	0.49	4.5795E+01	0.99	4.67955E+01	1.78	3.01152E+01
0.49	2.04764E+01	2.13	6.47347E+00	0.47	1.28555E+00	2.69	3.36056E-01	0.5	5.35897E+01	1	4.64026E+01	1.86	2.90158E+01
0.52	1.9592E+01	2.14	6.44875E+00	0.51	1.213E+00	2.7	3.35043E-01	0.54	5.02268E+01	1.05	4.45356E+01	1.95	2.78774E+01
0.53	1.93156E+01	2.18	6.3519E+00	0.52	1.19624E+00	2.71	3.34038E-01	0.55	4.94555E+01	1.14	4.15513E+01	2.02	2.7056E+01
0.54	1.90476E+01	2.19	6.32817E+00	0.53	1.17999E+00	2.72	3.33038E-01	0.59	4.6609E+01	1.15	4.1246E+01	2.09	2.62848E+01
0.58	1.80529E+01	2.2	6.30464E+00	0.54	1.16422E+00	2.78	3.27177E-01	0.6	4.59514E+01	1.2	3.97887E+01	2.16	2.55594E+01
0.59	1.78218E+01	2.21	6.2813E+00	0.58	1.10553E+00	2.79	3.26222E-01	0.61	4.53134E+01	1.21	3.95104E+01	2.23	2.48755E+01
0.6	1.75972E+01	2.22	6.25815E+00	0.59	1.09186E+00	2.8	3.25273E-01	0.66	4.23883E+01	1.25	3.84378E+01	2.29	2.43198E+01
0.61	1.73787E+01	2.23	6.23518E+00	0.6	1.07856E+00	2.81	3.2433E-01	0.7	4.03237E+01	1.3	3.71817E+01	2.35	2.379E+01
0.67	1.61834E+01	2.24	6.21239E+00	0.61	1.06561E+00	2.85	3.20616E-01	0.71	3.98407E+01	1.31	3.6941E+01	2.43	2.31208E+01
0.71	1.54818E+01	2.34	5.99406E+00	0.62	1.053E+00	2.86	3.19702E-01	0.75	3.80266E+01	1.32	3.67035E+01	2.51	2.24908E+01
0.72	1.53167E+01	2.35	5.97314E+00	0.63	1.04072E+00	2.87	3.18794E-01	0.76	3.76004E+01	1.33	3.64694E+01	2.57	2.20418E+01
0.73	1.51554E+01	2.39	5.89101E+00	0.64	1.02875E+00	2.93	3.13459E-01	0.77	3.71843E+01	1.39	3.5129E+01	2.72	2.09898E+01
0.74	1.49978E+01	2.4	5.87085E+00	0.65	1.01708E+00	2.94	3.12588E-01	0.83	3.48806E+01	1.46	3.36926E+01	2.8	2.04847E+01
0.77	1.4546E+01	2.41	5.85085E+00	0.66	1.00569E+00	2.95	3.11723E-01	0.9	3.25501E+01	1.48	3.3305E+01	2.87	2.00563E+01
0.78	1.44019E+01	2.45	5.7723E+00	0.69	9.73173E-01	3.01	3.0664E-01	0.98	3.02623E+01	1.49	3.31147E+01	2.94	1.96466E+01
0.79	1.4261E+01	2.46	5.75301E+00	0.7	9.62841E-01	3.02	3.0581E-01	1.03	2.8986E+01	1.56	3.18455E+01	3.01	1.92544E+01
0.8	1.4133E+01	2.53	5.62184E+00	0.71	9.52748E-01	3.03	3.04985E-01	1.09	2.76231E+01	1.57	3.16727E+01	3.07	1.89333E+01
0.81	1.3988E+01	2.54	5.60363E+00	0.72	9.4287E-01	3.08	3.00935E-01	1.15	2.63799E+01	1.63	3.06762E+01	3.14	1.85687E+01
0.84	1.35993E+01	2.58	5.52034E+00	0.75	9.14608E-01	3.09	3.00134E-01	1.23	2.48964E+01	1.64	3.05166E+01	3.22	1.8172E+01
0.85	1.3475E+01	2.62	5.46241E+00	0.76	9.05592E-01	3.1	2.9942E-01	1.3	2.37367E+01	1.71	2.94474E+01	3.27	1.79331E+01
0.89	1.30016E+01	2.63	5.44529E+00	0.77	8.9637E-01	3.16	2.94638E-01	1.37	2.2685E+01	1.72	2.93011E+01	3.33	1.76552E+01
0.9	1.28889E+01	2.69	5.345E+00	0.78	8.88136E-01	3.17	2.93922E-01	1.42	2.19949E+01	1.79	2.83193E+01	3.41	1.72986E+01
0.91	1.27783E+01	2.7	5.32867E+00	0.79	8.79683E-01	3.18	2.93165E-01	1.49	2.10987E+01	1.8	2.81848E+01	3.48	1.6999E+01
0.92	1.26697E+01	2.71	5.31245E+00	0.8	8.71405E-01	3.19	2.92412E-01	1.55	2.03902E+01	1.85	2.7532E+01	3.54	1.67508E+01
0.93	1.25632E+01	2.75	5.2862E+00	0.81	8.63298E-01	3.2	2.91663E-01	1.61	1.97305E+01	1.86	2.74053E+01	3.63	1.63927E+01
0.94	1.24586E+01	2.79	5.18644E+00	0.86	8.2513E-01	3.21	2.90919E-01	1.66	1.92144E+01	1.87	2.72799E+01	3.71	1.60879E+01
0.97	1.2156E+01	2.8	5.17141E+00	0.87	8.17938E-01	3.22	2.90178E-01	1.72	1.86318E+01	1.95	2.63188E+01	3.78	1.58309E+01
0.98	1.20587E+01	2.81	5.15593E+00	0.88	8.10882E-01	3.23	2.89442E-01	1.79	1.79978E+01	1.96	2.62038E+01	3.84	1.56174E+01
0.99	1.19631E+01	2.82	5.14083E+00	0.89	8.03959E-01	3.24	2.8871E-01	1.85	1.74898E+01	1.97	2.60898E+01	3.9	1.54101E+01
1	1.18691E+01	2.9	5.02335E+00	0.9	7.97165E-01	3.25	2.87982E-01	1.92	1.69343E+01	1.98	2.59768E+01	3.95	1.52417E+01
1.01	1.17767E+01	2.91	5.00907E+00	0.91	7.90496E-01	3.26	2.87257E-01	2	1.63436E+01	2.04	2.53205E+01	10.45	6.53108E+00
1.02	1.16859E+01	2.92	4.99488E+00	0.92	7.83949E-01	3.32	2.82296E-01	2.06	1.59285E+01	2.2	2.40131E+01	45.37	1.77174E+00
1.03	1.15966E+01	2.93	4.98077E+00	0.97	7.52925E-01	3.34	2.81602E-01	2.13	1.54716E+01	2.17	2.37316E+01	119.58	7.39184E-01
1.04	1.15088E+01	2.99	4.89793E+00	0.98	7.47041E-01	3.35	2.80912E-01	2.2	1.50417E+01	2.26	2.31891E+01	395.49	2.48488E-01
1.05	1.1424E+01	3.01	4.8844E+00	0.99	7.41257E-01								

Preseci za interakciju pozitrona sa H ₂ O (5/5)													
rot34b		rot45b		rot56b		rot67b		rot78b		rot89b		CH ₄ disocijacija	
ε(eV)	σ(Å ²)	ε(eV)	σ(Å ²)	ε(eV)	σ(Å ²)	ε(eV)	σ(Å ²)	ε(eV)	σ(Å ²)	ε(eV)	σ(Å ²)	ε(eV)	σ(Å ²)
0	0E+00	0	0E+00	0	0E+00	0	0E+00	0	0E+00	0	0E+00	0	0E+00
0.0108	0E+00	0.0144	0E+00	0.018	0E+00	0.0216	0E+00	0.0252	0E+00	0.0288	0E+00	4.51	0E+00
0.02	4.21214E+02	0.02	1.64557E+02	0.02	0E+00	0.03	4.07653E+01	0.03	8.13638E+00	0.03	0E+00	7.59904	2.8003E-02
0.03	4.33852E+02	0.03	2.49762E+02	0.03	1.15254E+02	0.04	5.09638E+01	0.04	1.77279E+01	0.04	4.9988E+00	7.98802	4.30071E-02
0.04	3.92851E+02	0.04	2.39729E+02	0.04	1.21206E+02	0.05	5.05598E+01	0.05	1.87174E+01	0.05	5.84464E+00	8.39691	6.60504E-02
0.05	3.53076E+02	0.05	2.20838E+02	0.05	1.15226E+02	0.06	4.81102E+01	0.06	1.82598E+01	0.06	5.89137E+00	9.27854	1.0144E-01
0.06	3.19553E+02	0.06	2.0268E+02	0.06	1.07494E+02	0.07	4.53056E+01	0.07	1.74314E+01	0.07	5.71704E+00	9.75349	1.52793E-01
0.07	2.91764E+02	0.07	1.86752E+02	0.07	1.00057E+02	0.08	4.26166E+01	0.08	1.65342E+01	0.08	5.47709E+00	10.2527	2.49756E-01
0.08	2.68578E+02	0.08	1.73034E+02	0.08	9.33608E+01	0.09	4.01214E+01	0.09	1.56667E+01	0.09	5.22488E+00	11.9091	4.17944E-01
0.09	2.49009E+02	0.09	1.61219E+02	0.09	8.74373E+01	0.1	3.78841E+01	0.1	1.48602E+01	0.1	4.98033E+00	12.5188	6.41879E-01
0.1	2.3229E+02	0.1	1.50979E+02	0.1	8.22131E+01	0.11	3.5875E+01	0.11	1.41217E+01	0.11	4.75066E+00	13.8332	9.858E-01
0.11	2.17845E+02	0.11	1.42038E+02	0.11	7.75936E+01	0.12	3.407E+01	0.12	1.34492E+01	0.12	4.53793E+00	16.068	1.72197E+00
0.12	2.05236E+02	0.12	1.3417E+02	0.12	7.0864E+01	0.13	3.2444E+01	0.13	1.28373E+01	0.13	4.34199E+00	17.7551	2.42713E+00
0.13	1.9413E+02	0.13	1.27194E+02	0.13	6.47831E+01	0.14	3.09738E+01	0.14	1.22797E+01	0.14	4.16182E+00	22.7889	3.13975E+00
0.14	1.84269E+02	0.14	1.20966E+02	0.14	5.93759E+01	0.15	2.96394E+01	0.15	1.17704E+01	0.15	3.99608E+00	39.4644	3.57104E+00
0.15	1.75451E+02	0.15	1.15372E+02	0.15	5.42838E+01	0.16	2.84232E+01	0.16	1.13038E+01	0.16	3.8434E+00	55.9716	3.72759E+00
0.16	1.67514E+02	0.16	1.10317E+02	0.16	5.32634E+01	0.17	2.73104E+01	0.17	1.08752E+01	0.17	3.70246E+00	75.5177	3.89101E+00
0.17	1.6033E+02	0.17	1.05727E+02	0.17	4.9707E+01	0.18	2.62174E+01	0.18	1.04802E+01	0.18	3.57206E+00	112.588	3.72759E+00
0.18	1.53794E+02	0.18	1.01538E+02	0.18	4.6871E+01	0.19	2.51816E+01	0.19	1.01151E+01	0.19	3.45112E+00	176.446	3.42107E+00
0.19	1.47819E+02	0.19	9.7699E+01	0.19	4.49225E+01	0.2	2.41742E+01	0.2	9.77655E+00	0.2	3.33867E+00	238.064	3.00788E+00
0.2	1.42334E+02	0.2	9.41669E+01	0.2	4.32597E+01	0.21	2.32542E+01	0.21	9.46187E+00	0.21	3.23388E+00	321.2	2.76054E+00
0.21	1.37279E+02	0.21	9.09052E+01	0.21	4.16224E+01	0.22	2.24275E+01	0.22	9.16857E+00	0.22	3.04435E+00	433.368	2.42713E+00
0.22	1.32605E+02	0.22	8.78833E+01	0.22	4.00848E+01	0.23	2.15256E+01	0.23	8.89454E+00	0.23	2.95838E+00	584.706	2.13399E+00
0.23	1.28268E+02	0.23	8.50749E+01	0.23	3.86969E+01	0.24	2.07150E+01	0.24	8.6379E+00	0.24	2.86172E+00	916.346	1.87626E+00
0.24	1.24232E+02	0.24	8.24575E+01	0.24	3.71866E+01	0.25	2.00706E+01	0.25	8.39703E+00	0.25	2.73171E+00		
0.25	1.20467E+02	0.25	8.00117E+01	0.25	3.57192E+01	0.26	1.91305E+01	0.26	8.17049E+00	0.26	2.61245E+00		
0.26	1.16944E+02	0.26	7.76936E+01	0.26	3.43995E+01	0.27	1.82952E+01	0.27	7.95701E+00	0.27	2.5025E+00		
0.27	1.13641E+02	0.27	7.55419E+01	0.27	3.31567E+01	0.28	1.75474E+01	0.28	7.75547E+00	0.28	2.40249E+00		
0.28	1.10537E+02	0.28	7.35031E+01	0.28	3.20342E+01	0.29	1.68497E+01	0.29	7.56209E+00	0.29	2.30944E+00		
0.29	1.07613E+02	0.29	7.15772E+01	0.29	3.10373E+01	0.3	1.61777E+01	0.3	7.38782E+00	0.3	2.22797E+00		
0.3	1.04978E+02	0.3	6.97532E+01	0.3	3.01751E+01	0.31	1.55452E+01	0.31	7.23466E+00	0.31	2.15797E+00		
0.31	1.02509E+02	0.31	6.80817E+01	0.31	2.93597E+01	0.32	1.49294E+01	0.32	7.09194E+00	0.32	2.09608E+00		
0.32	1.00194E+02	0.32	6.65297E+01	0.32	2.86527E+01	0.33	1.43384E+01	0.33	6.95938E+00	0.33	2.04254E+00		
0.33	9.7937E+01	0.33	6.50831E+01	0.33	2.79942E+01	0.34	1.37817E+01	0.34	6.83294E+00	0.34	1.99597E+00		
0.34	9.59655E+01	0.34	6.36575E+01	0.34	2.73634E+01	0.35	1.32526E+01	0.35	6.71266E+00	0.35	1.95467E+00		
0.35	9.40861E+01	0.35	6.22619E+01	0.35	2.67767E+01	0.36	1.27411E+01	0.36	6.59809E+00	0.36	1.91567E+00		
0.36	9.22929E+01	0.36	6.09136E+01	0.36	2.62187E+01	0.37	1.22445E+01	0.37	6.49353E+00	0.37	1.87881E+00		
0.37	9.05811E+01	0.37	5.96521E+01	0.37	2.56842E+01	0.38	1.17617E+01	0.38	6.39797E+00	0.38	1.84315E+00		
0.38	8.89394E+01	0.38	5.84856E+01	0.38	2.51717E+01	0.39	1.12926E+01	0.39	6.30944E+00	0.39	1.80881E+00		
0.39	8.73676E+01	0.39	5.73931E+01	0.39	2.47042E+01	0.4	1.08376E+01	0.4	6.22694E+00	0.4	1.77504E+00		
0.4	8.58559E+01	0.4	5.63576E+01	0.4	2.42417E+01	0.41	1.03966E+01	0.41	6.14953E+00	0.41	1.74245E+00		
0.41	8.43942E+01	0.41	5.53521E+01	0.41	2.37942E+01	0.42	9.96999E+00	0.42	6.07699E+00	0.42	1.71044E+00		
0.42	8.29825E+01	0.42	5.43866E+01	0.42	2.33042E+01	0.43	9.60999E+00	0.43	6.01245E+00	0.43	1.67944E+00		
0.43	8.16208E+01	0.43	5.34511E+01	0.43	2.28342E+01	0.44	9.26999E+00	0.44	5.95044E+00	0.44	1.64944E+00		
0.44	8.03091E+01	0.44	5.25456E+01	0.44	2.23842E+01	0.45	8.94999E+00	0.45	5.88944E+00	0.45	1.62044E+00		
0.45	7.90474E+01	0.45	5.16701E+01	0.45	2.19442E+01	0.46	8.64999E+00	0.46	5.83194E+00	0.46	1.59244E+00		
0.46	7.78457E+01	0.46	5.08246E+01	0.46	2.15142E+01	0.47	8.36999E+00	0.47	5.77694E+00	0.47	1.56544E+00		
0.47	7.66940E+01	0.47	5.00001E+01	0.47	2.10942E+01	0.48	8.10999E+00	0.48	5.72294E+00	0.48	1.53944E+00		
0.48	7.55923E+01	0.48	4.91946E+01	0.48	2.06942E+01	0.49	7.86999E+00	0.49	5.67094E+00	0.49	1.51444E+00		
0.49	7.45406E+01	0.49	4.84091E+01	0.49	2.03142E+01	0.5	7.63999E+00	0.5	5.61894E+00	0.5	1.49044E+00		
0.5	7.35389E+01	0.5	4.76436E+01	0.5	1.99542E+01	0.51	7.41999E+00	0.51	5.57094E+00	0.51	1.46744E+00		
0.51	7.25872E+01	0.51	4.69081E+01	0.51	1.96142E+01	0.52	7.20999E+00	0.52	5.52694E+00	0.52	1.44544E+00		
0.52	7.16855E+01	0.52	4.61926E+01	0.52	1.92842E+01	0.53	7.00999E+00	0.53	5.48594E+00	0.53	1.42444E+00		
0.53	7.08338E+01	0.53	4.55071E+01	0.53	1.89642E+01	0.54	6.81999E+00	0.54	5.44694E+00	0.54	1.40444E+00		
0.54	7.00321E+01	0.54	4.48416E+01	0.54	1.86542E+01	0.55	6.63999E+00	0.55	5.40994E+00	0.55	1.38544E+00		
0.55	6.92804E+01	0.55	4.41961E+01	0.55	1.83542E+01	0.56	6.46999E+00	0.56	5.37494E+00	0.56	1.36744E+00		
0.56	6.85787E+01	0.56	4.35706E+01	0.56	1.80642E+01	0.57	6.30999E+00	0.57	5.34094E+00	0.57	1.35044E+00		
0.57	6.79170E+01	0.57	4.29651E+01	0.57	1.77842E+01	0.58	6.15999E+00	0.58	5.30794E+00	0.58	1.33444E+00		
0.58	6.72953E+01	0.58	4.23706E+01	0.58	1.75142E+01	0.59	6.01999E+00	0.59	5.27594E+00	0.59	1.31944E+00		
0.59	6.67136E+01	0.59	4.17961E+01	0.59	1.72542E+01	0.6	5.88999E+00	0.6	5.24494E+00	0.6	1.29544E+00		
0.6	6.61719E+01	0.6	4.12416E+01	0.6	1.70042E+01	0.61	5.76999E+00	0.61	5.21494E+00	0.61	1.27244E+00		
0.61	6.56702E+01	0.61	4.07071E+01	0.61	1.67642E+01	0.62	5.65999E+00	0.62	5.18594E+00	0.62	1.25044E+00		
0.62	6.52085E+01	0.62	4.01826E+01	0.62	1.65342E+01	0.63	5.55999E+00	0.63	5.15794E+00	0.63	1.22944E+00		
0.63	6.47868E+01	0.63	3.96681E+01	0.63	1.63142E+01	0.64	5.46999E+00	0.64	5.13094E+00	0.64	1.20944E+00		
0.64	6.43951E+01	0.64	3.91726E+01	0.64	1.61042E+01	0.65	5.38999E+00	0.65	5.10494E+00	0.65	1.19044E+00		
0.65	6.40334E+01	0.65	3.86971E+01	0.65	1.59042E+01	0.66	5.31999E+00	0.66	5.07994E+00	0.66	1.17244E+00		
0.66	6.37017E+01	0.66	3.82326E+01	0.66	1.56242E+01	0.67	5.25999E+00	0.67	5.05594E+00	0.67	1.15544E+00		
0.67	6.33900E+01	0.67	3.77781E+01	0.67	1.53642E+01	0.68	5.20999E+00	0.68	5.03294E+00	0.68	1.13944E+00		
0.68	6.31083E+01	0.68	3.73346E+01	0.68	1.51142E+01	0.69	5.16999E+00	0.69	5.01094E+00	0.69	1.12444E+00		
0.69	6.28466E+01	0.69	3.68911E+01	0.69	1.48742E+01	0.7	5.10999E+00	0.7	4.98994E+00	0.7	1.10944E+00		
0.7	6.26049E+01	0.7	3.64676E+01	0.7	1.46442E+01	0.71	5.05999E+00	0.71	4.96994E+00	0.71	1.09544E+00		
0.71	6.23832E+01	0.71	3.60541E+01	0.71	1.44242E+01	0.72	5.01999E+00	0.72	4.94994E+00	0.72			

Dodatak C - Računarski kod

Trap:

U ovom dodatku dat je listing računarskog C++ koda za simulaciju pozitronskog trapa. Fajlovi koji čine kod i prikazani su u ovom dodatku su:

- trap.cc
- trap.hh
- lab.cc
- lab.hh
- field.cc
- field.hh
- ptcswarm.cc
- ptcswarm.hh
- rndgen.cc
- rndgen.hh
- sampling.cc
- sampling.hh
- sredina.ccc
- sredina.hh
- output.hh

Priloženi su i primeri ulaznih fajlova koji definišu pojedinačan segment trapa, odnosno preseke za interakciju:

- ulaz.dat
- presek.cs

<pre> trap.cc #include "field.hh" #include "rndgen.hh" #include "lab.hh" #include "sredina.hh" #include "trap.hh" using namespace std; const double MULT_FAKTOR = 1.10; void sampleloc(std::list<Lab> sistem, FILE *f){ std::list<Lab>::iterator it; std::list<Particle>::iterator itp; for (it=sistem.begin();it!=sistem.end();it++) { for (itp=it->swarm->ptcs.begin();itp!=it->swarm->ptcs.end();itp++) fprintf(f,"%d %e %e %e %e %e %e %e %e %e\n",itp->ime, itp->t, itp->geten()*CEV_1, itp->x, itp->y, itp->z, itp->vx, itp->vy, itp->vz); fflush(f); } } void adjust_pot_barriers(std::list<Lab> sistem){ std::list<Lab>::iterator it; for (it=sistem.begin();it!=sistem.end();it++) { it->field->setV(it->V); } for (it=sistem.begin();it!=sistem.end();it++) { if (it->linkR!=NULL)it->field->setERight(it->linkR->field->getV() - it->field->getV()); if (it->linkL!=NULL)it->field->setELeft(it->linkL->field->getV() - it->field->getV()); printf("%f< => %f\n",it->field->getELeft(),it->field->getERight()); } } int main(int argc, char **argv) { int td,th,tm,ts; //promenljive za izracunavanje vremena time_t vremepocetak; time_t vreme; time_t pomocno; double t=0; //tekuce vreme u simulaciji double dt=0; //vremenski korak u simulaciji double zaDodati=0; //za dodavanje cestica iz izvora int Nsp=0; //broj vremena u kojima se sampluje int i0=0; std::list<Lab> lab_List; //lista segmenata Lab L; //instanca segmenata int count=0; int NumL=argc-1; //broj labova int V_scan=0; int Runs=1; FILE *f_V_scan; char filename[80]; double tload=10e+3; //tri timera za promenljive trapove double tprestore=15e+3; //tri timera za promenljive trapove double tcool=16e+3; //tri timera za promenljive trapove double Izvor=0e6; //cestica po sekundi!! int k=0; //brojac za snapshotove double iceT=0.5e9; //vreme posle kojeg se ukljucuje hladjenje u trecem/cetvrtom segmentu int Nsnap=80; </pre>	<p>1/5</p>
---	------------

	<pre> trap.cc double tsnap [80] = {0, 1e-9, 1e-8, 5e-8, 1e-7, 3e-7, 6e-7,1e-6,1.5e-6, 3e-6, 4.5e-6,6e-6, 7.5e-6,9e-6, 1e-5, 2e-5, 5e-5, 8e-5, 1e-4, 2e-4 ,2.5e-4,3e-4, 7e-4, 1e-3,1.5e-3,2e-3, 3e-3,5e-3, 6.1e-3, 7.6e-3,10e-3, 11e-3,15e-3,16e-3, 20e-3,35e-3,45e-3,65e-3,90e-3,1e-1,1.5e-1,1.8e-1,2e-1,2.2e-1,2.5e-1,2.7e-1,3e-1,3.3e-1,3.5e-1,3.8e-1,4e-1,4.3e-1,4.7e-1,5e-1,7e-1,9e-1,1,1.1,1.3,1.5, 1.7, 1.9, 2.1, 2.3, 2.5, 2.7, 2.9, 3.1, 3.3, 3.5, 3.7, 3.9, 4.1, 4.3, 4.5, 4.7, 4.9, 5.1, 5.3, 5.5 }; if ((argc==3)&&(!strcmp(argv[1],"nastavi"))) { //kada se nastavlja prekinuta simulacija int k=0; FILE *f; f=fopen(argv[2],"r+"); fscanf(f,"%lf %lf %d %d %lf %lf %d\n",&t,&dt,&Nsp,&NumL,&tload,&ctool,&i0); for (int i=0;i<NumL;i++) lab_List.push_back(L); std::list<Lab>::iterator it=lab_List.begin(); std::list<Lab>::iterator itp=lab_List.begin(); for (int i=0;i<NumL;i++) { it->Initempty(); it->load(f); if (i==0) it->linkToL(NULL); else {it->linkToL(&(*itp));} itp=it; it++; if (i<NumL-1) itp->linkToR(&(*it)); else itp->linkToR(NULL); } for (std::list<Lab>::iterator it=lab_List.begin();it!=lab_List.end();it++){ std::cout<<"2PtcSize"<<it->swarm->ptcs.size()<<"\n"; std::cout<<it->sample->izlaz->filename<<"\n";} printf("Load--->complete\n") ; fclose(f); } else { //simulacija krece od pocetka for (int i=0;i<NumL;i++) //inicijalizacija lab_List.push_back(L); std::list<Lab>::iterator it=lab_List.begin(); std::list<Lab>::iterator itp=lab_List.begin(); for (int i=0;i<NumL;i++) { it->Init(argv[i+1],i+1); if (it->V_scan) { V_scan=1; Runs=(int)floor((it->VS[2]-it->VS[0])/it->VS[1]+1); } if (i==0) it->linkToL(NULL); else it->linkToL(&(*itp)); itp=it; it++; if (i<NumL-1) itp->linkToR(&(*it)); else itp->linkToR(NULL); } adjust_pot_barriers(lab_List); it=lab_List.begin(); dt=it->dTsample; Nsp=it->Nsp; </pre>	2/5
--	---	-----

trap.cc	3/5
<pre> for (it=lab_List.begin();it!=lab_List.end();it++) it->Sample(); } if (V_scan) { strcpy(filename,lab_List.begin()->sample->izlaz->filename); strcat(filename,"_Vscan.dat"); f_V_scan=fopen(filename,"w+"); } for (int i_run=0 ; i_run<Runs ; i_run++){ double Curr_V=0; if (V_scan) { for (std::list<Lab>::iterator it=lab_List.begin();it!=lab_List.end();it++){ if (it->V_scan) { Curr_V=it->VS[0]+i_run*it->VS[1]; it->V=Curr_V; } } adjust_pot_barriers(lab_List); } vremepocetak=time(NULL); std::list<Lab>::iterator it; t=dt; //inicijalizacija vremena ako se koristi logaritamsko vreme //t=0.0; //inicijalizacija vremena ako se koristi linearno vreme printf("Pocetak simulacije\n");fflush(stdout); for (int i=i0;i<Nsp;i++) //glavna petlja za evoluciju { int flag=0; for (int k=0;k<Nsnap;k++) //za pravljenje snapshotova stanja za animacije if (tsnap[k]<=t) { tsnap[k]=1e100; FILE *f; strcpy(filename,lab_List.begin()->sample->izlaz->filename); strcat(filename,"snap"); sprintf(filename,"%s%d%s",filename,k+1,".dat"); //obradi paznju na k i i f=fopen(filename,"w+"); printf("dumping-->");fflush(stdout); sampleloc(lab_List,f); //sampluje lokacije i brzinu cestica fclose(f); printf("complete\n");fflush(stdout); } while (!flag) //pomeranje cestica na vreme t { flag=1; int broj=0; for (it=lab_List.begin();it!=lab_List.end();it++){ //procu kroz listu svih segmenata it->Do(t); } //i evoluirati sve do vremena (t) for (it=lab_List.begin();it!=lab_List.end();it++) //provera da li su sve cestice //pomerene do trenutka t, ako nisu flag ide na 0 pa se pomera ponovo if (!it->flagdone) flag*=0; } } </pre>	

trap.cc	4/5
<pre> for (it=lab_List.begin();it!=lab_List.end();it++) //samplovanje it->Sample(); if (t<tload) { //dodavanje cestica iz izvora!!! zaDodati+=Izvor*dt; if (zaDodati>0) { lab_List.begin()->addPts((int)trunc(zaDodati),t); zaDodati-=(int)trunc(zaDodati); } } if(t>tload) //provera prvog trenutka promene polja za promenljive trapove { tload=1e100; Izvor=0.0; count=0; for (it=lab_List.begin();it!=lab_List.end();it++) { if (count==0) { //it->field->setERight(.0); //it->field->setELeft(-10.0); } if (count==1) { it->field->setERight(25.0); //it->field->setELeft(65.0); } if (count==2) { //it->field->setERight(20.0); it->field->setELeft(34.0); printf("setovo1\n"); } count++; } } if(t>tprestore) //provera drugog trenutka promene polja { tprestore=1e100; count=0; for (it=lab_List.begin();it!=lab_List.end();it++) { if (count==0) { it->field->setERight(60.0); //it->field->setELeft(-10.0); } if (count==1) { //it->field->setERight(-40.0); //it->field->setELeft(60.0); } if (count==2) { it->field->setERight(24.0); printf("setovo2\n"); //it->field->setELeft(40.0); } count++; } } </pre>	

<pre> trap.cc </pre>	<p>5/5</p>
<pre> if(iceT<=t) //za hladjenje segmenta trapa { //posle vremena iceT sve cestice se prebacuju u cetvrti segment it=lab_List.begin(); //koji je kopija treceg sa manjom // temperaturom it++; it++; it->addAllToR(); } if (i%1==0){ vreme=time(NULL); pomocno=(time_t)(vreme-vremepocetak)*(time_t)(1.0*(Nsp-i)/(i+1-i0)); td=(int)(pomocno/86400); th=(int)(pomocno%86400)/3600; tm=(int)(pomocno%3600)/60; ts=pomocno%60; printf("Complete: %f%% \nTime remaining: %dd %dh %dm %ds\n",100.0*i/Nsp,td,th,tm,ts); printf("\nTime %.5e\n",t); } //t+=dt; t*=MULT_FAKTOR; if(!(i+1)%1000000) //Spasavanje svega na hard da posle moze da se nastavi { FILE *f; strcpy(filename,lab_List.begin()->sample->izlaz->filename); strcat(filename,"dump.dat"); f=fopen(filename,"w+"); fprintf(f,"%e %e %d %d %e %e %d\n",t,dt,Nsp,NumL,tload,cool,i+1); for (it=lab_List.begin();it!=lab_List.end();it++) { it->save(f); fflush(f); } fclose(f); } } //Kraj glavne petlje for (it=lab_List.begin();it!=lab_List.end();it++) printf("Od zida zginulo %d \n",it->odzida); int izlaz=0; for (it=lab_List.begin();it!=lab_List.end();it++) //izlaz+=it->izasl0; izlaz+=it->swarm->ptcs.size(); if (V_scan) { strcpy(filename,lab_List.begin()->sample->izlaz->filename); strcat(filename,"_Vscan.dat"); fprintf(f_V_scan,"%f %d\n",Curr_V,izlaz); fflush(f_V_scan); } for (it=lab_List.begin();it!=lab_List.end();it++){ it->clean(); } if (V_scan) for (it=lab_List.begin();it!=lab_List.end();it++){ it->reinit_swarm(0.0); it->reinit_sampling(); } } if (V_scan) fclose(f_V_scan); return 0; } </pre>	

<pre>trap.hh</pre>	<p>1/2</p>
<pre> #ifndef _TRAP #define _TRAP #include <stdio> #include <string> #include <stdlib.h> #include <cmath> #include <ctime> const int CT_ELASTICS = 10; // Tipovi sudara (u fajlovima sa presecima) const int CT_ATTACHMENT = -1; const int CT_IONIZATION = 1; const int CT_EXCITATION = 0; const double HALFPI = 1.570796326794897; // Pi/2 const double PI = 3.141592653589793; // Pi const double TWOPI = 6.283185307179586; // 2*Pi const double E = 2.718281828459045; // e const double MEL = 9.1093897e-31; // Masa elektrona const double QEL = -1.60217733e-19; // Naelektrisanje elektrona const double CEV = 1.60217733e-19; // Apsolutno naelektrisanje elektrona za potrebe eV const double CEV_1 = 6.241506363e+18; // Inverzno naelektrisanje elektrona za potrebe eV const double KA = 1.380658e-23; // Bolcmanova konstanta const double REL = 0.001; // Maksimalno relativno odstupanje sudarne sume od -ln(rnd[0 1]) class Particle { public: Particle(); Particle(double _m,double _q) : m(_m),qom(_q/_m),t(0),x(0),y(0),z(0),sledecisudar(0) {} //Razne //varijante konstruktora Particle(double _m,double _q,double _t) : m(_m), qom(_q/_m), t(_t), x(0), y(0), z(0), sledecisudar(0), sudarnasuma(0), vxn(0), vyn(0), vzn(0) {} Particle(double _m,double _q,double _t,double _vx,double _vy,double _vz) : m(_m), qom(_q/_m), t(_t), x(0), y(0), z(0), vx(_vx),vy(_vy),vz(_vz),sledecisudar(0),sudarnasuma(0),vxn(0),vyn(0),vzn(0) {} Particle(Particle *_p) : m(_p->m),qom(_p->qom),t(_p->t),x(_p->x),y(_p->y),z(_p->z),vx(_p->vx),vy(_p->vy),vz(_p->vz),sledecisudar(0),sudarnasuma(0),vxn(0),vyn(0),vzn(0) {} double m; //Masa cestice double qom; // q/m cestice double t; //individualno vreme cestice u laboratorijskom sistemu double x; // X koordinata double y; // Y koordinata double z; // Z koordinata double vx; // X-komponenta brzine double vy; // Y-komponenta brzine double vz; // Z-komponenta brzine double sledecisudar;//-ln(rnd[0 1]) double sudarnasuma; //sudarna suma double vxn; //komponet brzine sledece cestice sa kojom se sudara double vyn; double vzn; int ime; double geten(){return m*0.5*(vx*vx+vy*vy+vz*vz);} double getenz(){return m*0.5*vz*vz;} //Vraca energiju duz Z ose u SI jedinicama double getv(){return std::sqrt(vx*vx+vy*vy+vz*vz);} double getvr(){return std::sqrt((vx-vxn)*(vx-vxn)+(vy-vyn)*(vy-vyn)+(vz-vzn)*(vz-vzn));} double getr(){return std::sqrt(x*x+y*y);} double getR(){return std::sqrt(x*x+y*y+z*z);} double getvnsq() {return (vxn*vxn+vyn*vyn+vzn*vzn);} void save(FILE *f){ </pre>	

	trap.hh	2/2
	<pre> int err; err=fprintf(f,"%e %e %e %e %e %e %e %e %e %e %e %e %e %e %e %d\n",m,qom,t,x,y,z,vx,vy,vz,sledecisudar,sudarnasuma,vxn,vyn,vzn,ime); } void load(FILE *f){ int err; err=fscanf(f,"%lf %lf %lf %lf %lf %lf %lf %lf %lf %lf %lf %lf %lf %lf %d\n",&m,&qom,&t,&x,&y,&z,&vx,&vy,&vz,&sledecisudar,&sudarnasuma,&vxn,&vyn,&vzn,&ime); } void copyPtc (Particle *dst){ //Funkcija koja kopira parametre u destination cesticu istog tipa. dst->x = x; dst->y = y; dst->z = z; dst->vx = vx; dst->vy = vy; dst->vz = vz; dst->t = t; } }; #endif </pre>	

lab.cc	1/11
<pre> #include "lab.hh" #include <iostream> int gotonext(FILE* f,char const* str //pomeranje citanja u fajlu do trazenog stringa { char c; int err; char s[80]; std::strcpy(s,str); std::strcat(s,"%c"); int i=1; while ((std::fscanf(f,s,&c)<1)&&(i>0)) { err=std::fscanf(f,"%c",&c); } fseek (f , -1 , SEEK_CUR); return i; } int Lab::Init(char *input,int red) { std::cout<<"Inicijalizacija...\n"; odzida=0; izaslo=0; red_br=red; FILE *in; std::cout<<"\n"<<input;std::cout.flush(); in=fopen(input,"rb+"); if (!in) { std::cout<<"Ne mogu da otvorim fajl "<<input<<"\n";std::cout.flush();getchar(); exit(1);} int err=1; //ako postane 0 onda ima neka greska double ix,iy,iz; double t=0.0; ////////////////////////////////////// dTsample=0; //vreme izmedju samplovanja gotonext(in,"dTsample="); err*=std::fscanf(in,"%lf",&dTsample); dtptc=0; //vreme za evoluciju pojedinačne cestice gotonext(in,"dTptcs="); err*=std::fscanf(in,"%lf",&dtptc); Nsp=0; //broj trenutaka za samplovanje gotonext(in,"Nsp="); err*=std::fscanf(in,"%d",&Nsp); outf[80]; //ime izlaznog fajla err*=gotonext(in,"fi= "); err=std::fscanf(in,"%s ",outf); if (!err) printf("GRESKA - kod imena izlaznog fajla\n"); printf(" %s\n",outf); //const char *a=outf; ////////////////////////////////////// int N=0; //broj cestica err*=gotonext(in,"N="); err=std::fscanf(in,"%d",&N); N_init=N; if (!err) printf("GRESKA - kod N=\n"); m=0; //masa cestica err*=gotonext(in,"m="); err=std::fscanf(in,"%lf",&m); if (!err) printf("GRESKA - kod m=\n"); q=0; //q/m cestica err*=gotonext(in,"q="); </pre>	

lab.cc	2/11
<pre> err=std::fscanf(in,"%f",&q); if (!err) printf("GRESKA - kod q=\n"); Esr=0; //srednja energija cestica err*=gotonext(in,"E="); err=std::fscanf(in,"%f",&Esr); if (!err) printf("GRESKA - kod E= (srednja energija)\n"); tipraspodele=0; //tip raspodele energija ako je 0 onda MB err*=gotonext(in,"tipraspodele="); err=std::fscanf(in,"%d",&tipraspodele); if (!err) printf("GRESKA - kod tipraspodele=\n"); dE=0.0;//shirina energije beama if ((tipraspodele==1) (tipraspodele==6)){ err*=gotonext(in,"dE="); err=std::fscanf(in,"%f",&dE); printf("dE=%fV\n",dE); if (!err) printf("GRESKA - kod dE=\n"); } rgen=new Rnd3(time(NULL)); //definicija dva rgen2=new Rnd3(time(NULL)+103); //random generatora swarm=new Ptcswarm(rgen,rgen2,outf); //dodeljivanje rgeneratora swarmu R=2.5e-3; sample=new Sampling((const char *)outf); //inicijalizacija fajlova za sampling char envf[80]; //ime fajla koji sadrzi preseke err*=gotonext(in,"f="); err=std::fscanf(in,"%s ",envf); double press1=0; //pritisak u gasu err*=gotonext(in,"p1="); err=std::fscanf(in,"%f",&press1); double press2=0; //pritisak u gasu err*=gotonext(in,"p2="); err=std::fscanf(in,"%f",&press2); double T=0; //temperatura u gasu err*=gotonext(in,"T="); err=std::fscanf(in,"%f",&T); int Nt=0; //broj koraka pri integraciji kolizione frekvence err*=gotonext(in,"Nt="); err=std::fscanf(in,"%d",&Nt); double Emax=0; //maksimalna energija do koje se tabelira err*=gotonext(in,"Emax="); err=std::fscanf(in,"%f",&Emax); FILE* file; file=fopen(envf,"rb"); std::cout<<"Inicijalizacija pozadinskog gasa\n"; swarm->env= new Sredina_F(file,Nt,Emax,press1,press2, T, rgen); fclose(file); double B=0; //intenzitet aksijalnog B polja err*=gotonext(in,"B="); err=std::fscanf(in,"%f",&B); double E=0; //intenzitet rotacionog E polja err*=gotonext(in,"Ef="); err=std::fscanf(in,"%f",&E); double w=0; //ugaona frekvenca err*=gotonext(in,"w="); err=std::fscanf(in,"%f",&w); printf("O\n"); double Ebl=0; //leva potencijalna barijera err*=gotonext(in,"Enbl="); </pre>	

lab.cc	4/11
<pre> int Lab::Evolve(Ptcswarm* swarm,Particle* ptc,double t){ double div_1=0.1; //ako nije definisano vreme za evoluciju div_1 je faktor kojim se mnozi koliziona //frekvenca if (ptc->sledecisudar==0) { ptc->sledecisudar=-log(rgen->next()); } int ret=0; double dtn;//=(t-ptc->t)/div; //nominalno dt za koje se pomera cestica, panti se za vreme izvršavanja funkcije double dt;//=dtn; //tekuće dt, koje se menja radi finijeg određivanja trenutka sudara double ds=0; dtn=dtptc; if (dtn==0) dtn=1.0/swarm->env->tkf(ptc->getv(),ptc->z)*div_1; //ako dtn==0 tj nije definisano cestica se //pomera za div-ti deo koliziona frekvence dt=dtn; while (t>ptc->t) //dok cestica ne stigne (ili za malo premashi) trazeno vreme { if (ptc->t+dt>t) dt=t-ptc->t; //ako je trazeno vreme vece od koraka vremena, skрати korak ds=swarm->env->tkf(ptc->getv(),ptc->z)*dt; //sabirak za sumarnu sumu if (ptc->sudarnasuma+ds > ptc->sledecisudar) //ukoliko je sudarna suma veća od sume za //sudar, znachi da se sudar dogodio u vremenu dt { if ((ptc->sudarnasuma+ds - ptc->sledecisudar) / ptc->sledecisudar < REL) //provera da li je vreme do sudara dovoljno blizu/precizno { ret=field->dynamics(ptc,dt,swarm->env->tkf(ptc->getv(),ptc->z)); //pomera cesticu do mesta sudara switch (ret) { //provera sta se desilo sa cesticom u toku pomeranja case 3: //cestica udara u zid suda i vraća se 0 kako bi se cestica //izbrisala odzida++; swarm->izbaci(ptc->ime,-2,-2, ptc->t, ptc- >geten()*CEV_1, ptc->x, ptc->y, ptc->z, ptc->vx, ptc->vy, ptc->vz); // upisuje loss proces u *tot swarm->izlaz->addD(ptc->geten()*CEV_1,"tot"); swarm->izlaz->addD(ptc->getenz()*CEV_1,"tot"); swarm->izlaz->novired("tot"); return 0; break; case 2: //cestica presla desnu granicu sistema i prebacuje se u novi lab ddToR(ptc); //u sledeci lab se ubacuje nova cestica return 0; //vraca 0 da bi nadredjena funkcija znala da //treba da izbrishe cesticu break; case 1: //cestica presla levu granicu sistema i prebacuje se u //novi lab addToL(ptc); //u sledeci lab se ubacuje nova cestica return 0; //vraca 0 da bi nadredjena funkcija znala da //treba da izbrishe cesticu break; default: ; } //ovde ide resavanje sudara ret=swarm->solvecoll(ptc); //resava sudar - ret kaze sta se desilo u sudaru if (ret==-1) return 0; //vraca 0 da bi nadredjena funkcija znala da treba da izbrishe cesticu } } } } </pre>	

	<pre> lab.cc if (ret==CT_IONIZATION) { //ako je jonizacija Particle *new_part; new_part=new Particle(ptc); double k=rngen->next(); ptc->vx*=sqrt(k); ptc->vy*=sqrt(k); ptc->vz*=sqrt(k); new_part->vx*=sqrt(1.0-k); new_part->vy*=sqrt(1.0-k); new_part->vz*=sqrt(1.0-k); swarm->ptcs.push_back(new_part); } dt=dtn; } else { dt*=0.5; //polovi vreme za koje pomera cesticu } } else { ret=field->dynamics(ptc,dt,swarm->env->tkf(ptc->getv(),ptc->z)); switch (ret) { //proverava sta se desilo sa cesticom u periodu dt case 3: //cestica udara u zid suda i vraća se 0 kako bi se cesticu izbrisala odzida++; swarm->izbaci(ptc->ime,-2,-2,ptc->t, ptc->geten()*CEV_1, ptc->x, ptc->y, ptc->z, ptc->vx, ptc->vy, ptc->vz); swarm->izlaz->addD(ptc->geten()*CEV_1,"tot"); swarm->izlaz->addD(ptc->getenz()*CEV_1,"tot"); swarm->izlaz->novired("tot"); return 0; break; case 2: //cestica presla desnu granicu sistema i prebacuje se u novi lab addToR(ptc); //if(pte->ime==5) //u sledeci lab se ubacuje nova cesticu return 0; //vraca 0 da bi nadredjena funkcija znala da treba da izbrishe //cesticu break; case 1: //cestica presla levu granicu sistema i prebacuje se u novi lab addToL(ptc); //u sledeci lab se ubacuje nova cesticu return 0; //vraca 0 da bi nadredjena funkcija znala da treba da izbrishe //cesticu brek default; ; } } return 1; } int Lab::Do(double t){ //funkcija prolazi kroz sve cesticu i evoluiraj ih do vremena t flagdone=1; //flag koji je 1 ako su sve cesticu pomerene do t for(std::list<Particle>::iterator it=swarm->ptcs.begin(); it!=swarm->ptcs.end(); it++) { if (!Evolve(swarm,&(*it),t) //evoluiraj ih do vremena t; ako funkcija vrati 0 obrisi cesticu { it=swarm->ptcs.erase(it); it--; } } return 0; } </pre>	5/11
--	---	------

lab.cc	6/11
<pre> int Lab::Sample(){ //funkcija koja pokrece samplovanje segmenta sample->go(swarm,field->getLeftBound(),field->getRightBound()); return 1; } void Lab::addToR(Particle *ptc){ //prebacivanje cestice jedan segment desno if (linkR!=NULL) //da li postoji segment desno { double B2_1=linkR->field->getB()/field->getB(); if (B2_1!=1.0) { double Etan=ptc->vx*ptc->vx+ptc->vy*ptc->vy; double Eparalel=ptc->vz*ptc->vz; if (Eparalel-Etan*(B2_1-1)<0) { //refleksija ptc->vz*=-1; ptc->z=field->getRightBound(); ptc->vz=ptc->vz/std::abs(ptc->vz)*sqrt(ptc->vz*ptc->vz+2*field->getERight()*CEV/ptc->m); swarm->ptcs.push_back(*ptc); flagdone=0; } else { if (red_br==4) { swarm->izbaci(ptc->ime,-400, -400,ptc->t, ptc->geten()*CEV_1, ptc->x, ptc->y, ptc->z, ptc->vx, ptc->vy, ptc->vz); swarm->izlaz->addD(ptc->geten()*CEV_1,"tot"); swarm->izlaz->addD(ptc->getenz()*CEV_1,"tot"); swarm->izlaz->novired("tot"); } if (red_br==1) { swarm->izbaci(ptc->ime,-1100, -1100,ptc->t, ptc->geten()*CEV_1, ptc->x, ptc->y, ptc->z, ptc->vx, ptc->vy, ptc->vz); swarm->izlaz->addD(ptc->geten()*CEV_1,"tot"); swarm->izlaz->addD(ptc->getenz()*CEV_1,"tot"); swarm->izlaz->novired("tot"); } //racun odrzanja magnetnog momenta ptc->vz=ptc->vz/std::abs(ptc->vz)*sqrt(Etan*(1-B2_1)+Eparalel); ptc->vx*=sqrt(B2_1); ptc->vy*=sqrt(B2_1); linkR->swarm->ptcs.push_back(*ptc); linkR->flagdone=0; } } } else { if (red_br==4) { swarm->izbaci(ptc->ime,-400, -400,ptc->t, ptc->geten()*CEV_1, ptc->x, ptc->y, ptc->z, ptc->vx, ptc->vy, ptc->vz); swarm->izlaz->addD(ptc->geten()*CEV_1,"tot"); swarm->izlaz->addD(ptc->getenz()*CEV_1,"tot"); swarm->izlaz->novired("tot"); } if (red_br==1) { swarm->izbaci(ptc->ime,-1100, -1100,ptc->t, ptc->geten()*CEV_1, ptc->x, ptc->y, ptc->z, ptc->vx, ptc->vy, ptc->vz); swarm->izlaz->addD(ptc->geten()*CEV_1,"tot"); swarm->izlaz->addD(ptc->getenz()*CEV_1,"tot"); swarm->izlaz->novired("tot"); } linkR->swarm->ptcs.push_back(*ptc); linkR->flagdone=0;} //ako postoji prebaci cesticu i postavi flagdone sledeceg segmenta na 0 kako //bi josh jednom proverio da li su sve cestice na vremenu t } } </pre>	

lab.cc	7/11
<pre> else {swarm->izbaci(ptc->ime,-4, -4,ptc->t, ptc->geten()*CEV_1, ptc->x, ptc->y, ptc->z, ptc->vx, ptc->vy, ptc->vz); swarm->izlaz->addD(ptc->geten()*CEV_1,"tot"); swarm->izlaz->addD(ptc->getenz()*CEV_1,"tot"); swarm->izlaz->novired("tot"); izaslo++; } void Lab::addToL(Particle *ptc){ //prebacivanje cestice jedan segment levo if (linkL!=NULL) //da li postoji segment levo { double B2_1=linkL->field->getB()/field->getB(); if (B2_1!=1.0) { double Etan=ptc->vx*ptc->vx+ptc->vy*ptc->vy; double Eparalel=ptc->vz*ptc->vz; if (Eparalel-Etan*(B2_1-1)<0) { //refleksija ptc->vz*=-1; ptc->z=field->getLeftBound(); ptc->vz=ptc->vz/std::abs(ptc->vz)*sqrt(ptc->vz*ptc->vz+2*field->getLeft()*CEV/ptc->m); swarm->ptcs.push_back(*ptc); flagdone=0; } else { ptc->vz=ptc->vz/std::abs(ptc->vz)*sqrt(Etan*(1-B2_1)+Eparalel); ptc->vx*=sqrt(B2_1); ptc->vy*=sqrt(B2_1); linkL->swarm->ptcs.push_back(*ptc); linkL->flagdone=0; } } else { linkL->swarm->ptcs.push_back(*ptc); linkL->flagdone=0; //ako postoji prebaci cesticu i postavi flagdone sledeceg segmenta na 0 kako //bi josh jednom proverio da li su sve cestice na vremenu t } } else {swarm->izbaci(ptc->ime,-3, -3,ptc->t, ptc->geten()*CEV_1, ptc->x, ptc->y, ptc->z, ptc->vx, ptc->vy, ptc->vz); swarm->izlaz->addD(ptc->geten()*CEV_1,"tot"); swarm->izlaz->addD(ptc->getenz()*CEV_1,"tot"); swarm->izlaz->novired("tot"); } void Lab::addAllToR(){ //prebacivanje svih cestica segment desno- koristi se kod hladjenog trapa for(std::list<Particle>::iterator it=swarm->ptcs.begin(); it!=swarm->ptcs.end(); it++){ { linkR->swarm->ptcs.push_back(&(*it)); it=swarm->ptcs.erase(it); it--; } linkR->flagdone=0; } int Lab::chkTime(double t){ //proverava da li su sve cestice sinhronizovane do vremena t double odstupanje=0.000001; //dozvoljeno je jako malo odstupanje usled numericke greske if ((swarm->ptcs.size()==0) ((fabs(swarm->ptcs.front().t-t)/t<odstupanje) && (fabs(swarm->ptcs.back().t- t)/t<odstupanje))) //ako je zadovoljeno za prvu i zadnju cesticu return 1; //vrati 1, znachi da je ok else return 0; //u suprotnom vrati 0 } </pre>	

lab.cc	8/11
<pre> void Lab::save(FILE *f){ //spasava sve na hard da bi posle moglo da se nastavi int err; err=fprintf(f,"%e %e %e %e %d %d %d\n",llimit,rlimit,dTsample,dtpc,odzida,Nsp,tipolja); field->save(f); sample->save(f); swarm->save(f); } void Lab::load(FILE *f){ //ucitava sa diska spasenu simulaciju int err; err=fscanf(f,"%lf %lf %lf %lf %d %d %d\n",&llimit,&rlimit,&dTsample,&dtpc,&odzida,&Nsp,&tipolja); switch(tipolja) { case 0: field=new Nofield();break; case 1: field=new Bfield();break; case 2: field=new EBfield();break; } field->load(f); sample->load(f); swarm->load(f); } void Lab::reinit_swarm(double t) { if (N_init>0) addPtc(N_init,t); swarm->izbaci(0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0); // start u tot swarm->izlaz->addD(0,"tot"); swarm->izlaz->addD(0,"tot"); swarm->izlaz->novired("tot"); } void Lab::reinit_sampling() { sample=new Sampling((const char *)outf); //inicijalizacija fajlova za sampling } int Lab::addPtc(int n, double t) //dodavanje castica u simulaciju { double ix,iy,iz; //ortovi if (tipraspodele==1) //trougaona raspodela energije { std::printf("tipraspodele == 1 \n"); double p1=sqrt(Esr*CEV*2.0/m); //pomocne promenljive double dEn=sqrt(Esr+dE)-sqrt(Esr); //energija koja se dodaje ili //oduzima na 10eV i ima trougaonu raspodelu [0 1]eV double dv=0; Particle ptc(m,q,t,0,0,0); for (int i=0;i<n;i++) { ptc.ime=i; dv=sqrt(rgen->nexttri()*dEn*dEn*CEV*2.0/m); rgen->nextort(&ix,&iy,&iz); double f=0; double t=0; do{ R=3e-3 ; ptc.x=R*rgen->next(); ptc.y=R*rgen->next(); }while(ptc.x*ptc.x+ptc.y*ptc.y>R*R); ptc.vx=ix*dv; ptc.vy=iy*dv; ptc.vz=p1+std::abs(iz)*dv; swarm->ptcs.push_back(ptc); //dodaje kopiju cesticu na kraj liste } } } </pre>	

	<pre> lab.cc else if (tipraspodele==2) //uniformna raspodela { Particle ptc(m,q,t,0,0,0); double dE; for (int i=0;i<n;i++) { ptc.ime=i; dE=sqrt(rgen->next()*2.0*Esr*CEV*2.0/m); rgen->nextort(&ix,&iy,&iz); ptc.vx=ix*dE; ptc.vy=iy*dE; ptc.vz=iz*dE; swarm->ptcs.push_back(ptc); //dodaje kopiju cestice na kraj liste } } else if (tipraspodele==3) //monoenergetska raspodela { Particle ptc(m,q,t,0,0,0); double dE; for (int i=0;i<n;i++) { ptc.ime=i; dE=sqrt(Esr*CEV*2.0/m); rgen->nextort(&ix,&iy,&iz); ptc.vx=ix*dE; ptc.vy=iy*dE; ptc.vz=iz*dE; swarm->ptcs.push_back(ptc); //dodaje kopiju cesticu na kraj liste } } else if (tipraspodele==4) //trougaona raspodela Dirk van der Werf { double p1=sqrt(Esr*CEV*2.0/m); //pomocne promenljive double dE=sqrt(Esr+5)-sqrt(Esr); //energija koja se dodaje/oduzima na 10eV //ima trougaonu raspodelu [0 5]eV double dv=0; Particle ptc(m,q,t,0,0,0); for (int i=0;i<n;i++) { ptc.ime=i; dv=sqrt(rgen->nexttri()*dE*dE*CEV*2.0/m); rgen->nextort(&ix,&iy,&iz); double r,fi; r=R*rgen->next(); fi=2*PI*rgen->next(); ptc.x=r*std::cos(fi); ptc.y=r*std::sin(fi); ptc.vx=ix*dv; ptc.vy=iy*dv; ptc.vz=p1+std::abs(iz)*dv; swarm->ptcs.push_back(ptc); //dodaje kopiju cesticu na kraj liste } } else if (tipraspodele==6) //Gausijanska raspodela energije { double p1=sqrt(Esr*CEV*2.0/m); //pomocne promenljive double dEn=sqrt(Esr+dE)-sqrt(Esr); //energija koja se dodaje ili //oduzima na 10eV i ima trougaonu raspodelu [0 1]eV double dv=0; Particle ptc(m,q,t,0,0,0); </pre>	9/11
--	--	------

lab.cc	10/11
<pre> for (int i=0;i<n;i++) { ptc.ime=i; dv=sqrt((rgen->next()+rgen->next()+rgen->next())*dE*0.795*CEV*2.0/m); rgen->nextort(&ix,&iy,&iz); double f=0; double t=0; do{ double A=1.0; double B=0.01; double C=4.6; double D=-2.8; double E=-0.182; double F=0.0895; t=rgen->next()*5e-3; f=((A+B*(t/R)+C*(t/R)*(t/R)+D*(t/R)*(t/R)*(t/R)+E*(t/R)*(t/R)*(t/R)*(t/R)+F*(t/R)*(t/R)*(t/R)*(t/R))- 0.3)*3.33*t/R); } while(f<rgen->next()*9.5); double fi=rgen->next()*2*PI; ptc.x=t*sin(fi); ptc.y=t*cos(fi); ptc.z=field->getLeftBound(); dv=sqrt((rgen->next()+rgen->next()+rgen->next())*dE*0.795*CEV*2.0/m); double alpha=8*PI/180; //ugao konusa/// double rr=sqrt(ptc.x*ptc.x+ptc.y*ptc.y); double z1=rr/tan(alpha); double z2=z1+rr*tan(alpha); double n1x=-ptc.x; // normala na ravan konusa double n1y=-ptc.y; double n1z=z2-z1; double norm=sqrt(n1x*n1x+n1y*n1y+n1z*n1z); n1z=n1z/norm; n1y=n1y/norm; n1x=n1x/norm; double n2x=ptc.x; // paralela sa konusom double n2y=ptc.y; double n2z=z1; norm=sqrt(n2x*n2x+n2y*n2y+n2z*n2z); n2z=n2z/norm; n2y=n2y/norm; n2x=n2x/norm; double n3x=n1y*n2z-n1z*n2y; //treći ort double n3y=n1z*n2x-n1x*n2z; double n3z=n1x*n2y-n1y*n2x; do { double rr=rgen->next(); if (rr<0.91) dv=sqrt((rgen->next()+rgen->next()+rgen->next())*dE*0.795*CEV*2.0/m); else if (rr<0.97) dv=sqrt((0.3+rgen->next()+rgen->next()+rgen->next())*dE*2*0.795*CEV*2.0/m); else dv=sqrt((1+rgen->next()+rgen->next()+rgen->next())*dE*0.795*CEV*2.0/m); rgen->nextort(&ix,&iy,&iz); iz=std::abs(iz); iz*=1.0; norm=sqrt(ix*ix+iy*iy+iz*iz); iz=dv*iz/norm; dv=sqrt((rgen->next()+rgen->next()+rgen->next())*dE*0.795*6.2*CEV*2.0/m); iy=dv*iy/norm; ix=dv*ix/norm; double izlazni_rad=0.0; ptc.vx=n1x*iz+n2x*iy+n3x*ix; </pre>	

	<pre> lab.cc ptc.vy=n1y*iz+n2y*iy+n3y*ix; ptc.vz=n1z*iz+n2z*iy+n3z*ix; if (ptc.vz*ptc.vz+2/m*CEV*0>0) ptc.vz=sqrt(ptc.vz*ptc.vz+2/m*CEV*0); else { // printf("%e - E=%eeV\n",iz*iz*m*0.5/CEV,dv*dv*m*0.5/CEV); ptc.vz=-1e9;} } while (ptc.vz<0); ptc.vz=sqrt(ptc.vz*ptc.vz+2/m*CEV*0.2); if ((ptc.vz*ptc.vz>2/m*CEV*3)) ptc.vz=sqrt(ptc.vz*ptc.vz+2/m*CEV*0.4); if ((ptc.vz*ptc.vz>2/m*CEV*1.4)&&(ptc.vz*ptc.vz<2/m*CEV*3))) ptc.vz=sqrt(ptc.vz*ptc.vz+2/m*CEV*0.2); ptc.vy*=0.7; ptc.vx*=0.7; fi=rgen->next()*2*PI; dv=sqrt((rgen->next()+rgen->next()+rgen->next())*dE*0.795*CEV*2.0/m); swarm->ptcs.push_back(ptc); //dodaje kopiju cesticu na kraj liste } } else { //MB raspodela brzina Particle ptc(m,q,t,0,0,0); //inicijalizuje parametre cestice osim brzina for (int i=0;i<n;i++) { ptc.ime=i; ptc.vx=rgen->nextgauss()*sqrt(Esr*CEV*2.0/m/3.0); ptc.vy=rgen->nextgauss()*sqrt(Esr*CEV*2.0/m/3.0); ptc.vz=rgen->nextgauss()*sqrt(Esr*CEV*2.0/m/3.0); swarm->ptcs.push_back(ptc); //dodaje kopiju cesticu na kraj liste } } return 1; }; </pre>	11/11
--	---	-------

	<pre> lab.hh #ifndef _LAB #define _LAB #include <iostream> #include "trap.hh" #include "field.hh" #include "sredina.hh" #include "rndgen.hh" #include "sampling.hh" #include "ptcswarm.hh" #include <cstring> #include <stdlib.h> #include <cmath> class Lab { public: Lab(){ rgen=new Rnd3(2); //definicija dva rgen2=new Rnd3(23); //random generatora sample=new Sampling(); swarm=new Ptcswarm(rgen,rgen2); }; Field* field; //Member klasa za polje Sampling* sample; //member klasa za semplovanje Ptcswarm* swarm ; //Roj int Init(char *input,int red); void Initempty(){ rgen=new Rnd3(2); //definicija dva rgen2=new Rnd3(23); //random generatora sample=new Sampling(); swarm=new Ptcswarm(rgen,rgen2); } void reinit_swarm(double t); void reinit_sampling(); int Do(double t); int Sample(); int Evolve(Ptcswarm* swarm,Particle* ptc,double t); //za preseke u laboratorijskom sistemu int addPtc(int n, double t); void addToR(Particle *ptc); void addToL(Particle *ptc); void addAllToR(); void linkToR(Lab *L) {linkR=L;} void linkToL(Lab *L) {linkL=L;} int chkTime(double t); //proverava da li prva i poslednja chestica imaju isto vreme i da li je ono //jednako vremenu simulacije int flagdone; //da li su sve cestice završile void save(FILE *f); void load(FILE *f); void clean(){ izaslo=0;odzida=0; delete (sample); for(std::list<Particle>::iterator it=swarm->ptcs.begin(); it!=swarm->ptcs.end(); it++) { it=swarm->ptcs.erase(it); it--; } } } </pre>	1/2
--	---	-----

	lab.hh	2/2
	<pre> double llimit; double rlimit; double dTsample; double dtptc; int odzida; int izarlo; int Nsp; int tippolja; int tipraspodele; int V_scan; int N_init; int red_br; double Esr; double m; double q; double R; double dE; double V; double VS[3]; char out[80]; Lab *linkL; Lab *linkR; Rndgen *rgen; Rndgen *rgen2; }; #endif </pre>	

field.cc	1/5
<pre> #include "field.hh" #include <cmath> #include <cstdio> #include <stdlib.h> #include <iostream> double Parameters::getElementInList(int number) { std::list<double>::iterator it = parameterList.begin(); for (int index = 0; index < number; index++) { it++; } return *it; } Bfield::Bfield (double _B, double _Ebl, double _Ebr, double _V, double t1, double t2) {printf("B field\n"); B = _B; Enlevagranica=_Ebl; Endesnagranica=_Ebr; V=_V; tc1=t1; tc2=t2; } int Bfield::dynamics(Particle *p,double dt, double tkf) { Particle *tp; tp=new Particle(p); double om=tp->qom*B; //ugaona frekvenca double iom=1.0/om; //Zbog kasnijeg rachuna mnozenje je brze od deljenja double flag=0; double delt=0; int prebaciflag=1; while (dt>0) { if (tp->z+dt*tp->vz<g1) //cestica prelazi levu granicu { flag=-1; delt=(g1-tp->z)/tp->vz; } else if (tp->z+dt*tp->vz>g2) //cestica prelazi desnu granicu { flag=1; delt=(g2-tp->z)/tp->vz; } else delt=dt; double s=std::sin(om*delt); double c=std::cos(om*delt); tp->x += (p->vy+p->vx*s-p->vy*c)*iom; tp->y += (-p->vx+p->vy*s+p->vx*c)*iom; tp->z += p->vz*delt; tp->vx=p->vx*c+p->vy*s; tp->vy=p->vy*c-p->vx*s; tp->t += delt; dt-=delt; tp->copyPtc(p); p->sudarnasuma+=tkf*delt; { if ((flag==1) && ((tp->vz*tp->vz*0.5*tp->m) > Enlevagranica*CEV)) //udara u levi zid jame i moze da ga preskочи { </pre>	

	<pre> field.cc if (prebaciflag) p->vz=p->vz/std::abs(p->vz)*sqrt(p->vz*p->vz-2*Enlevagranica*CEV/p->m); delete tp;return 1; } if ((flag==1) && ((tp->vz*tp->vz*0.5*tp->m) > Endesnagranica*CEV)) //udara u desni zid jame i moze da //ga preskochi { if (prebaciflag) p->vz=p->vz/std::abs(p->vz)*sqrt(p->vz*p->vz-2*Endesnagranica*CEV/p->m); delete tp;return 2; } if (flag!=0) { tp->vz*=-1.0; p->vz*=-1.0; delt=dt; } if(tp->x*tp->x+tp->y*tp->y>r*r) { delete tp; return 3; } //cestica ce udariti u zid suda } delete tp; return 0; } int Bfield::setGeometry(Parameters params) { if (params.parameterList.size() != 3) //Da li je dobar broj parametara { return 0; //Ako nije vraca 0 } r = params.getElementInList(0); g1 = params.getElementInList(1); g2 = params.getElementInList(2); if (r < 0) return 0; //ukoliko su pogresno zadate granice if (g2 < g1) return 0; //vraca 0 return 1; } void Bfield::save(FILE *f){ int err; err=fopen(f,"%e %e %e %e %e %e\n", B,r,g1,g2,Enlevagranica, Endesnagranica); fflush(f); } void Bfield::load(FILE *f){ int err; err=fscanf(f,"%lf %lf %lf %lf %lf %lf\n", &B,&r,&g1,&g2,&Enlevagranica, &Endesnagranica); } double Bfield::get_bar_V(double t){ double V0=0; double Vf=24.5; double f=500; if (t>tc2) return 24.5; else return V0+(Vf-V0)/log10(f)*log10((f*(t-tc1)+tc2-t)/(tc2-tc1)); } </pre>	2/5
--	---	-----

	<pre> field.cc EBfield::EBfield (double _B, double _E, double _omE, double _Ebl, double _Ebr, double _V) { B = _B; E=_E; omE=_omE; Enlevagranica=_Ebl; Endesnagranica=_Ebr;V=_V; } int EBfield::setGeometry(Parameters params) { if (params.parameterList.size() != 3) //Da li je dobar broj parametara { return 0; //Ako nije vraca 0 } r = params.getElementInList(0); g1 = params.getElementInList(1); g2 = params.getElementInList(2); if (r < 0) return 0; //ukoliko su pogresno zadate granice if (g2 < g1) return 0; //vraca 0 return 1; } int EBfield::dynamics(Particle *p,double dt,double tkf) { Particle *tp; tp=new Particle(p); double om=tp->qom*B; //ugaona frekvenca double iom=1/om; //Zbog kasnijeg rachuna mnozenje je brze od deljenja double flag=0; double delt=0; if (tp->z+dt*tp->vz<g1) //cestica prelazi levu granicu { flag=-1; delt=(g1-tp->z)/tp->vz; } else if (tp->z+dt*tp->vz>g2) //cestica prelazi desnu granicu { flag=1; delt=(g2-tp->z)/tp->vz; } else delt=dt; double ax=-E*tp->x; double ay=E*tp->y; double az=0; tp->vx+=ax*dt; tp->vy+=ay*dt; tp->vz+=az*dt; tp->x+=tp->vx*dt; tp->y+=tp->vy*dt; tp->z+=tp->vz*dt; tp->t+=dt; if ((tp->vz*tp->vz*0.5*tp->m > 17*CEV)) printf("\nima : E=%.5e\n",tp->vz*tp->vz*0.5*tp->m); if ((flag==-1) && ((tp->vz*tp->vz*0.5*tp->m) > Enlevagranica*CEV)) //udara u levi zid jame i moze da ga //preskochi { tp->copyPtc(p); p->vz=p->vz/std::abs(p->vz)*sqrt(p->vz*p->vz-2*Enlevagranica*CEV/p->m); delete tp;return 1; //kopira finalnu cesticu u p i vraca 1 da Lab zna da ga prebaci u levi } if ((flag==1) && ((tp->vz*tp->vz*0.5*tp->m) > Endesnagranica*CEV)) //udara u desni zid jame i moze da //ga preskochi { tp->copyPtc(p); p->vz=p->vz/std::abs(p->vz)*sqrt(p->vz*p->vz-2*Endesnagranica*CEV/p->m); delete tp;return 2; //kopira finalnu cesticu u p i vraca 2 da Lab zna da ga prebaci u desni } } </pre>	3/5
--	--	-----

	<pre> field.cc if (flag!=0) { tp->vz*=-1.0; delt=dt-delt; int ret=dynamics(tp,delt,tkf); tp->copyPtc(p);delete tp; return ret; } if(tp->x*tp->x+tp->y*tp->y>r*r) { delete tp; return 3;} //cestica ce udariti u zid suda else { tp->copyPtc(p);delete tp; return 0;} } void EBfield::save(FILE *f){ int err; err=fprintf(f,"%e %e %e %e %e %e %e %e %e \n", B,E,omE,r,g1,g2,Enlevagranica, Endesnagranica); fflush(f); } void EBfield::load(FILE *f){ int err; err=fscanf(f,"%lf %lf %lf %lf %lf %lf %lf %lf %lf \n", &B,&E,&omE,&r,&g1,&g2,&Enlevagranica, &Endesnagranica); } Nofield::Nofield (double _Ebl, double _Ebr, double _V) {Enlevagranica=_Ebl; Endesnagranica=_Ebr;V=_V; } int Nofield::dynamics(Particle *p,double dt,double tkf) { Particle *tp; tp=new Particle(p); double flag=0; double delt=0; int prebaciflag=1; if (tp->z+dt*tp->vz<g1) //cestica prelazi levu granicu { flag=-1; delt=(g1-tp->z)/tp->vz; } else if (tp->z+dt*tp->vz>g2) //cestica prelazi desnu granicu { flag=1; delt=(g2-tp->z)/tp->vz; } else delt=dt; tp->x += p->vx*delt; tp->y += p->vy*delt; tp->z += p->vz*delt; tp->t += delt; if ((flag==-1) && ((tp->vz*tp->vz*0.5*tp->m) > Enlevagranica*CEV)) //udara u levi zid jame i moze da ga //preskочи { tp->copyPtc(p); //kopira finalnu cesticu u p i vraća 1 da Lab zna da ga prebaci u levi if (prebaciflag) p->vz=p->vz/std::abs(p->vz)*sqrt(p->vz*p->vz-2*Enlevagranica*CEV/p->m); delete tp;return 1; } if ((flag==1) && ((tp->vz*tp->vz*0.5*tp->m) > Endesnagranica*CEV)) //udara u desni zid jame i moze da //ga preskочи { tp->copyPtc(p); //kopira finalnu cesticu u p i vraća 2 da Lab zna da ga prebaci u desni if (prebaciflag) p->vz=p->vz/std::abs(p->vz)*sqrt(p->vz*p->vz-2*Endesnagranica*CEV/p->m); delete tp;return 2; } </pre>	4/5
--	--	-----

field.cc	5/5
<pre> if (flag!=0) { tp->vz*=-1.0; delt=dt-delt; int ret=dynamics(tp,delt,tkf); tp->copyPtc(p);delete tp; return ret; } if(tp->x*tp->x+tp->y*tp->y>r*r) { delete tp; return 3;} //cestica ce udariti u zid suda else { tp->copyPtc(p);delete tp; return 0;} } int Nofield::setGeometry(Parameters params) { if (params.parameterList.size() != 3) //Da li je dobar broj parametara { return 0; //Ako nije vraca 0 } r = params.getElementInList(0); g1 = params.getElementInList(1); g2 = params.getElementInList(2); if (r < 0) return 0; //ukoliko su pogresno zadate granice if (g2 < g1) return 0; //vraca 0 return 1; } void Nofield::save(FILE *f){ int err; err=fprintf(f,"%e %e %e %e %e %e \n", B,r,g1,g2,Enlevagranica, Endesnagranica); } void Nofield::load(FILE *f){ int err; err=fscanf(f,"%lf %lf %lf %lf %lf %lf\n", &B,&r,&g1,&g2,&Enlevagranica, &Endesnagranica); } </pre>	

field.hh	1/2
<pre> #ifndef _FIELD #define _FIELD #include "trap.hh" #include <list> class Parameters { //Klasa koja služi za prosledjivanje liste parametara razlicitim klasama public: std::list<double> parameterList; //Lista parametara double getElementInList(int index); //Dovlaci element liste }; class Field { public: virtual int dynamics(Particle *p, double dt,double tkf) = 0; // Vraca 0 ako je sve ok ili index zida //ako je doshlo do sudara sa zidom virtual int setGeometry(Parameters params) = 0; //Setuje geometriju, razlicite geometrije zahtevaju //razlicit broj parametara, zato ih prosledjujemo kao listu virtual double getLeftBound() = 0; //vraca levu granicu sistema virtual double getRightBound() = 0; //vraca levu granicu sistema virtual void setELeft(double E) = 0; //setuje levu barijeru virtual void setERight(double E) = 0; //setuje desnu barijeru virtual double getELeft() = 0; //getuje levu barijeru virtual double getERight() = 0; virtual double getV() = 0; virtual void setV(double E) = 0; virtual double getRadius() = 0; virtual double getB() = 0; virtual void save(FILE *f) = 0; virtual void load(FILE *f) = 0; }; class Bfield : public Field { //Konstantno magnetsko polje duz z-ose public : Bfield{}; Bfield(double _B, double Ebl, double Ebr, double _V, double t1, double t2); //Konstruktor //inicijalizuje vrednost polja duz z ose virtual int dynamics(Particle *p, double dt,double tkf); //reshavanje jednacina kretanja virtual int setGeometry(Parameters params); //Setovanje parametara geometrije virtual double getLeftBound() {return g1;}; virtual double getRightBound() {return g2;}; virtual void setELeft(double E) {Enlevagranica=E;}; //setuje levu barijeru virtual void setERight(double E) {Endesnagranica=E;}; virtual double getELeft() {return Enlevagranica;}; //getuje levu barijeru virtual double getERight() {return Endesnagranica;} virtual double getV() {return V;} virtual void setV(double E) {V=E;}; virtual void save(FILE *f); virtual void load(FILE *f); virtual double getRadius() {return r;}; virtual double getB() {return B;}; double get_bar_V(double t); double B;//vrednost magnetske indukcije duz z ose. double r,g1,g2; //poluprecnik zida i z-koordinate granica (podrazumevana cilindricna geometrija) double Enlevagranica;//leva granica energije u eV double Endesnagranica; //desna granica energije u eV double V; //napon elektrode u V double tc1; //prva vremenska konstanta double tc2; //druga vremenska konstanta }; </pre>	

field.hh	2/2
<pre> class Nofield : public Field { //Konstantno magnetsko polje duz z-ose public : Nofield(); Nofield(double Ebl, double Ebr, double _V); //Konstruktor inicijalizuje vrednost polja duz z ose virtual int dynamics(Particle *p, double dt,double tkf); //reshavanje jednachina kretanja virtual int setGeometry(Parameters params); //Setovanje parametara geometrije virtual double getLeftBound() {return g1;}; virtual double getRightBound() {return g2;}; virtual void setELeft(double E) {Enlevagranica=E;}; //setuje levu barijeru virtual void setERight(double E) {Endesnagranica=E;}; virtual double getELeft() {return Enlevagranica;}; //getuje levu barijeru virtual double getERight() {return Endesnagranica;}; virtual double getV() {return V;}; virtual void setV(double E) {V=E;}; virtual double getRadius() {return r;}; virtual void save(FILE *f); virtual void load(FILE *f); virtual double getB() {return B;}; double B;//vrednost magnetske indukcije duz z ose. double r,g1,g2; //poluprecnik zida i z-koordinate granica (podrazumevana cilindrica geometrija) double Enlevagranica;//potencijalna barijera sa leve strane u eV double Endesnagranica; //potencijalna barijera sa desne strane u eV double V; //napon elektrode u V }; class EBfield : public Field { public : EBfield(); EBfield(double _B, double _E, double _omE, double _Ebl, double _Ebr, double _V); //Konstruktor inicijalizuje vrednost polja duz z ose virtual int dynamics(Particle *p, double dt,double tkf); //reshavanje jednachina kretanja virtual int setGeometry(Parameters params); //Setovanje parametara geometrije virtual double getLeftBound() {return g1;}; virtual double getRightBound() {return g2;}; virtual void setELeft(double E) {Enlevagranica=E;}; //setuje levu barijeru virtual void setERight(double E) {Endesnagranica=E;}; virtual double getELeft() {return Enlevagranica;}; //getuje levu barijeru virtual double getERight() {return Endesnagranica;}; virtual double getV() {return V;}; virtual void setV(double E) {V=E;}; virtual double getRadius() {return r;}; virtual void save(FILE *f); virtual void load(FILE *f); virtual double getB() {return B;}; double B;//vrednost magnetske indukcije duz z ose. double E;//Intenzitet elektricnog polja double omE;//Ugaona frekvenca rotacije elektricnog polja double r,g1,g2; //poluprecnik zida i z-koordinate granica (podrazumevana cilindrica geometrija) double Enlevagranica;//leva granica energije u eV double Endesnagranica; //desna granica energije u eV double V; //napon elektrode u V }; #endif </pre>	

<p>ptcswarm.cc</p>	<p>1/3</p>
<pre> #include "ptcswarm.hh" #include <stdlib.h> int Ptcswarm::solvecoll(Particle *ptc){ double ix,iy,iz; int brp=env->kojipreseksedesio(ptc->getv(),ptc->z); //odredjivanje koji se presek desio prccount[env->LIB(brp)-1]++; //uvecava se brojac procesa env->bckV(ptc,brp); //odredjivanje brzine cestice pozadine if(env->tipsudara(brp)!=10) //ispisivati sve osim elastichnih izbaci(ptc->ime,env->LIB(brp), env->tipsudara(brp), ptc->t, ptc->geten()*CEV_1, ptc->x, ptc->y, ptc->z, ptc- >vx, ptc->vy, ptc->vz); double Epre=ptc->geten()*CEV_1; if (env->tipsudara(brp)==-1) { //dopisivanje energije i gubitka energije u *tot izlaz->addD(Epre-0.0,"tot"); izlaz->addD(ptc->getenz()*CEV_1-0.0,"tot"); izlaz->novired("tot"); return -1; } else{ double im=1.0/(ptc->m+env->M(brp)); double vcmx=(ptc->m * ptc->vx + env->M(brp) * ptc->vxn) *im; //komponente brzine centra mase double vcmx=(ptc->m * ptc->vy + env->M(brp) * ptc->vyn) *im; double vcmz=(ptc->m * ptc->vz + env->M(brp) * ptc->vzn) *im; double vx=ptc->vx-vcmx; //brzina cestice u sistemu centra mase double vy=ptc->vy-vcmx; double vz=ptc->vz-vcmz; if ((env->LIB(brp) > 900)&&(env->LIB(brp) < 2100)){ //DIFERENCIJALNI PRESEK double ortx=vx/sqrt(vx*vx+vy*vy+vz*vz);//ort brzine u sistemu centra mase double orty=vy/sqrt(vx*vx+vy*vy+vz*vz); double ortz=vz/sqrt(vx*vx+vy*vy+vz*vz); double v1cmx=0; //ort normalan na brzinu centra mase; double v1cmy=1; double v1cmz=-orty/ortz; double norma=sqrt(v1cmx*v1cmx+v1cmy*v1cmy+v1cmz*v1cmz); v1cmy/=norma; v1cmz/=norma; double v2cmx=1; //ort normalan na brzinu centra mase; double v2cmy=ortx*v1cmz/(ortz*v1cmy-orty*v1cmz); double v2cmz=-v1cmy*v2cmy/v1cmz; norma=sqrt(v2cmx*v2cmx+v2cmy*v2cmy+v2cmz*v2cmz); v2cmx/=norma; v2cmy/=norma; v2cmz/=norma; double theta=0; int flag=1; //odrediti theta int broj=0; while (flag) { theta=PI*rgen2->next(); broj++; double rr=(1.605e4*rgen->next()); switch (env->LIB(brp)) { </pre>	

	<pre> ptcswarm.cc case 1001: if (rgen2->next()<0.5*(1.0+cos(theta))) { flag =0; }break; case 1002: if (rgen2->next()<0.5*(1.0+cos(PI+theta))) { flag =0; } break; case 1003: if (rgen2->next()<0.5*(1.0+cos(PI+2.0*theta))) { flag =0; } ; break; case 1004: if (rgen->next()<0.5*(1.0+cos(2.0*theta))) { flag =0; } ; break; case 2001: if (rr<(exp(1.0/sqrt((theta+11*PI/180)/18))-13)) { flag =0; } ; break; case 2002: theta=PI-PI/6.0*rgen2->next(); flag =0; break; default: flag =0 ;break; } if (broj>200000) {flag=0; } } double ax1=cos(theta); double fi=rgen2->next(); double ax2=sin(theta)*cos(fi); double ax3=sin(theta)*sin(fi); ix=ax1*ortx+ax2*v1cmx+ax3*v2cmx; iy=ax1*orty+ax2*v1cmz+ax3*v2cmz; iz=ax1*ortz+ax2*v1cmz+ax3*v2cmz; } //KRAJ DIFERENCIJALNI PRESEK else rgen2->nextort(&ix,&iy,&iz); //random vektor pravca nove brzine u sistemu centra mase double vn=std::sqrt(vx*vx+vy*vy+vz*vz - env->rm(brp)/(ptc->m*ptc->m)*2.0*env->gubitakenergije(brp)); //intenzitet nove brzine u sistemu centra mase if (vn!=vn) {vn=0; printf("GRESKA -- presek %d -- %e \n",brp,vx*vx+vy*vy+vz*vz - env->rm(brp)/(ptc->m*ptc->m)*2.0*env->gubitakenergije(brp)); } //ako se desi numericka greska prijavi ptc->vx=vcmx+ix*vn; //vracanje brzine u laboratorijski sistem ptc->vy=vcmz+iy*vn; ptc->vz=vcmz+iz*vn; if(env->tipsudara(brp)!=10) //ispisivati sve osim elastichnih { izlaz->addD(Epre-ptc->geten()*CEV_1,"tot"); izlaz->addD(Epre-ptc->getenz()*CEV_1,"tot"); izlaz->novired("tot"); } ptc->sudarnasuma=0; double r=rgen->next(); if (r==0) exit(3); ptc->sledecisudar=-log(r); return 0; } } void Ptcswarm::save(FILE *f){ int N=ptcs.size(); int err; err=fprintf(f,"%d\n",N); std::list<Particle>::iterator it=ptcs.begin(); for(std::list<Particle>::iterator it=ptcs.begin(); it!=ptcs.end(); it++) it->save(f); env->save(f); izlaz->save(f); } </pre>	2/3
--	---	-----

	ptcswarm.cc	3/3
	<pre>void Ptcswarm::load(FILE *f){ int N; int err; Particle p(0,0,0,0,0,0); err=fscanf(f,"%d",&N); for(int i=0;i<N;i++) { p.load(f); ptcswarm.push_back(p); } env=new Sredina_F(rgen); env->load(f); izlaz=new Output(); izlaz->load2(f); }</pre>	

<p>ptcswarm.hh</p>	<p>1/1</p>
<pre> #ifndef _PTCSWARM #define _PTCSWARM #include "trap.hh" #include "rndgen.hh" #include "sredina.hh" #include "output.hh" #include <list> class Ptcswarm{ public: Ptcswarm(Rndgen *_rgen,Rndgen *_rgen2, char *outf) : rgen(_rgen), rgen2(_rgen2){ for (int i=0;i<3000;i++) prccount[i]=0; izlaz=new Output(outf,"tot"); }; Ptcswarm(Rndgen *_rgen,Rndgen *_rgen2) : rgen(_rgen), rgen2(_rgen2){}; Output *izlaz; Sredina* env; //Parametri koji vase za roj... std::list<Particle> ptc; //Lista cestica u sistemu int solvecoll(Particle *ptc); //reshava sudar cestice u laboratorijskom sistemu void izbaci(int ime,int brp, int tip, double t, double en, double x, double y, double z,double vx,double vy, double vz){ izlaz->addI(ime,"tot"); izlaz->addI(brp,"tot"); izlaz->addI(tip,"tot"); izlaz->addD(t,"tot"); izlaz->addD(en,"tot"); izlaz->addD(x,"tot"); izlaz->addD(y,"tot"); izlaz->addD(z,"tot"); izlaz->addD(vx,"tot"); izlaz->addD(vy,"tot"); izlaz->addD(vz,"tot"); izlaz->flush("tot"); } int prccount[3000]; //brojac procesa, za odredjivanje rateova void save(FILE *f); void load(FILE *f); Rndgen *_rgen; Rndgen *_rgen2; }; #endif </pre>	

rndgen.cc	1/2
<pre> #include "rndgen.hh" #include <cstdio> #include <cmath> #include <iostream> Rnd3::Rnd3(int seed) : igauss(0) { setseed(seed); } void Rnd3::setseed(int seed) { int i,j,k; int mj=MSEED-(seed < 0 ? -seed : seed); int mk=1; mj %= MBIG; ma[55]=mj; for (i=1;i<=54;i++) { j=(21*i) % 55; ma[j]=mk; mk=mj-mk; if (mk < MZ) mk += MBIG; mj=ma[j]; } for (k=1;k<=4;k++) for (i=1;i<=55;i++) { ma[i] -= ma[1+(i+30) % 55]; if (ma[i] < MZ) ma[i] += MBIG; } inext=0; inextp=31; } void Rnd3::seedfromfile(std::FILE *f) { int seed; size_t tmp; tmp=std::fread(&seed,sizeof(int),1,f); seed=(seed<0)?-seed:seed; seed%=MSEED; setseed(seed); } int Rnd3::nextint() { int mj; if (++inext == 56) inext=1; if (++inextp == 56) inextp=1; mj= ma[inext]- ma[inextp]; if (mj < MZ) mj += MBIG; ma[inext]=mj; if(mj==MBIG) return MBIG-1; return mj; } double Rnd3::nextgauss() { if(igauss) { igauss = !igauss; return(ygauss); } else { double r1,r2,r,fac; do { r1=next()*2-1; r2=next()*2-1; r=r1*r1+r2*r2; } while ((r>1) (r==0)); } } </pre>	

	<pre> rndgen.cc if (r==1) fac=0; else fac=std::sqrt(-2*std::log(r)/r); ygauss=r2*fac; igauss=!igauss; return(r1*fac); } } void Rnd3::nextort(double *x,double *y,double *z) { double u,v,s,a; do { u=2*next()-1; v=2*next()-1; s=u*u+v*v; } while (s>=1); a=2*sqrt(1-s); *x=a*u; *y=a*v; *z=2*s-1; } void Rnd3::savetofile(std::FILE *f) { size_t tmp; tmp=std::fwrite(&inext,sizeof(int),1,f); tmp=std::fwrite(&inextp,sizeof(int),1,f); tmp=std::fwrite(&igauss,sizeof(int),1,f); tmp=std::fwrite(&ygauss,sizeof(double),1,f); tmp=std::fwrite(ma,sizeof(int),56,f); } void Rnd3::loadfromfile(std::FILE *f) { size_t tmp; tmp=std::fread(&inext,sizeof(int),1,f); tmp=std::fread(&inextp,sizeof(int),1,f); tmp=std::fread(&igauss,sizeof(int),1,f); tmp=std::fread(&ygauss,sizeof(double),1,f); tmp=std::fread(ma,sizeof(int),56,f); } </pre>	2/2
--	---	-----

rndgen.hh	1/1
<pre> #ifndef _RNDGEN #define _RNDGEN #include <stdio> // Apstraktna klasa koja predstavlja uopsteni random generator class Rndgen { public: virtual void setseed(int seed)=0; // Metoda koja resetuje generator virtual void seedfromfile(std::FILE *f)=0; // Ucitava seed iz fajla (moze iz /dev/random) virtual int minint()=0; // Vraca najmanji int koji generise virtual int maxint()=0; // Vraca najveći int koji generise virtual int nextint()=0; // Vraca random int od minint do maxint virtual double next()=0; // Vraca random double od 0 do 1 virtual double nexttri()=0; // Vraca random double od 0 do 1 po trougaonoj raspodeli //dodao srki virtual char nextchar()=0; // Vraca random char od 0 do 255 virtual double nextgauss()=0; // Vraca random double po gausovoj raspodeli virtual void nextort(double *x, double *y, double *z)=0; // Vraca random izotropni ort virtual void savetofile(std::FILE *f)=0; // Snima stanje objekta u fajl virtual void loadfromfile(std::FILE *f)=0; // Ucitava stanje objekta iz fajla }; // Klasa koja predstavlja Knuth-ov random generator // Algoritam preuzet iz Raspopovog koda class Rnd3 : public Rndgen { public: Rnd3(int seed=0); // Konstruktor virtual void setseed(int seed); virtual void seedfromfile(std::FILE *f); virtual int minint() {return(MZ);} virtual int maxint() {return(MBIG);} virtual int nextint(); virtual double next() {return FAC*nextint();} virtual double nexttri() {return 0.5*(next()+next());} //dodao srki virtual char nextchar() {return (nextint()%256);} virtual double nextgauss(); virtual void nextort(double *x, double *y, double *z); virtual void savetofile(std::FILE *f); virtual void loadfromfile(std::FILE *f); private: static const double FAC = 0.000000001; // 1.0/MBIG (Radi brzeg racuna) static const int MBIG = 1000000000; // Maksimalni broj static const int MZ = 1; // Najmanji broj static const int MSEED = 161803398; // Maksimalni seed int inext, inextp; // Velicine koje odredjuju int ma[56]; // stanje random generatora int igauss; double ygauss; }; #endif </pre>	

sampling.cc	1/6
<pre> #include "sampling.hh" #include <stdlib.h> Sampling::Sampling(const char *fn){ izlaz=new Output(fn); } double Sampling::getEn(Ptcswarm* swarm){ Emean=0; for(std::list<Particle>::iterator it=swarm->ptcs.begin(); it!=swarm->ptcs.end(); it++) { Emean+=it->geten(); } Emean*=CEV_1/swarm->ptcs.size(); if (swarm->ptcs.size()==0) return 0; else return Emean; } void Sampling::getmeanV(Ptcswarm* swarm, double* vx, double* vy, double* vz){ *vx=0;*vy=0;*vz=0; for(std::list<Particle>::iterator it=swarm->ptcs.begin(); it!=swarm->ptcs.end(); it++) { *vx+=it->vx; *vy+=it->vy; *vz+=it->vz; } *(vx)=1.0/swarm->ptcs.size(); *(vy)=1.0/swarm->ptcs.size(); *(vz)=1.0/swarm->ptcs.size(); } void Sampling::getEnDis(Ptcswarm* swarm){ int N=10000; //broj celija u kojima moze da se nadje energija cestice double dE=CEV*35/N; //shirina celije int *dis;//[N]; dis=new int[N]; int celija; for (int i=0;i<N;i++) dis[i]=0; for(std::list<Particle>::iterator it=swarm->ptcs.begin(); it!=swarm->ptcs.end(); it++) { celija=static_cast<int>(it->geten()/dE); if (celija<N) dis[celija]++; } //printf("KKLasaL%d\n",N); izlaz->addD(getT(swarm),"DisE"); izlaz->addI(N,"DisE"); //printf("KKLasapL\n"); izlaz->addD(CEV_1*dE,"DisE"); for (int i=0;i<N;i++) if (swarm->ptcs.size()>0) izlaz->addD(1.0*dis[i],"DisE"); else izlaz->addD(0.0,"DisE"); izlaz->novired("DisE"); delete [] dis; dis=NULL; } </pre>	

sampling.cc	2/6
<pre> double Sampling::getDiffCoef(Ptcswarm* swarm) { double Dx,Dy,Dz; double xs,ys,zs; double vx,vy,vz; Dx=0;Dy=0;Dz=0;xs=0;ys=0;zs=0;vx=0;vy=0;vz=0; for(std::list<Particle>::iterator it=swarm->ptcs.begin(); it!=swarm->ptcs.end(); it++) { Dx+=it->x*it->vx; Dy+=it->y*it->vy; Dz+=it->z*it->vz; xs+=it->x; ys+=it->y; zs+=it->z; vx+=it->vx; vy+=it->vy; vz+=it->vz; } Dx/=swarm->ptcs.size(); Dy/=swarm->ptcs.size(); Dz/=swarm->ptcs.size(); xs/=swarm->ptcs.size(); ys/=swarm->ptcs.size(); zs/=swarm->ptcs.size(); vx/=swarm->ptcs.size(); vy/=swarm->ptcs.size(); vz/=swarm->ptcs.size(); return ((Dx-xs*vx)+(Dy-ys*vy)+(Dz-zs*vz))/3.0; } double Sampling::getDx(Ptcswarm* swarm) { double Dx; double xs; double vx; Dx=0;xs=0;vx=0; for(std::list<Particle>::iterator it=swarm->ptcs.begin(); it!=swarm->ptcs.end(); it++) { Dx+=it->x*it->vx; xs+=it->x; vx+=it->vx; } Dx/=swarm->ptcs.size(); xs/=swarm->ptcs.size(); vx/=swarm->ptcs.size(); return (Dx-xs*vx); } double Sampling::getDy(Ptcswarm* swarm) { double Dy; double ys; double vy; Dy=0;ys=0;vy=0; for(std::list<Particle>::iterator it=swarm->ptcs.begin(); it!=swarm->ptcs.end(); it++) { Dy+=it->y*it->vy; ys+=it->y; vy+=it->vy; } Dy/=swarm->ptcs.size(); ys/=swarm->ptcs.size(); vy/=swarm->ptcs.size(); </pre>	

sampling.cc	3/6
<pre> return (Dy-ys*vy); } double Sampling::getDz(Ptcswarm* swarm) { double Dz; double zs; double vz; Dz=0;zs=0;vz=0; for(std::list<Particle>::iterator it=swarm->ptcs.begin(); it!=swarm->ptcs.end(); it++) { Dz+=it->z*it->vz; zs+=it->z; vz+=it->vz; } Dz/=swarm->ptcs.size(); zs/=swarm->ptcs.size(); vz/=swarm->ptcs.size(); return (Dz-zs*vz); } void Sampling::sampleRadDis(Ptcswarm* swarm) { //printf("USHO\n"); int N=200; //broj celija u kojima moze da se nadje energija cestice double dR=0.02/N; //shirina celije int *dis;//[N]; dis=new int[N]; int celija; for (int i=0;i<N;i++) dis[i]=0; for(std::list<Particle>::iterator it=swarm->ptcs.begin(); it!=swarm->ptcs.end(); it++) { celija=static_cast<int>(it->getr()/dR); if(celija<N) dis[celija]++; } izlaz->addD(getT(swarm),"DisR"); izlaz->addI(N,"DisR"); izlaz->addD(dR,"DisR"); for (int i=0;i<N;i++) izlaz->addD(1.0*dis[i],"DisR"); izlaz->novired("DisR"); delete [] dis; dis=NULL; //return 0; } double Sampling::getR(Ptcswarm* swarm){ Rmean=0; for(std::list<Particle>::iterator it=swarm->ptcs.begin(); it!=swarm->ptcs.end(); it++) { if (it->getr()<1e100) Rmean+=it->getr(); else {printf("OVAJ JE: %d\n",it->ime);exit(1);} } Rmean/=swarm->ptcs.size(); if (swarm->ptcs.size()==0) return 0; else return Rmean; } </pre>	

sampling.cc	4/6
<pre> double Sampling::getRad(Ptcswarm* swarm){ Rmean=0; for(std::list<Particle>::iterator it=swarm->ptcs.begin(); it!=swarm->ptcs.end(); it++) { Rmean+=it->getR(); } Rmean/=swarm->ptcs.size(); if (swarm->ptcs.size()==0) return 0; else return Rmean; } double Sampling::getT(Ptcswarm* swarm){ Particle it=swarm->ptcs.front(); if (swarm->ptcs.size()==0) { return 0;} else { return it.t;} } int Sampling::sampleRdisZ(Ptcswarm* swarm, double g1, double g2){ double zmin=g1; double zmax=g2; int N=25; double disR[N]; int disN[N]; int celija; double dz=(zmax-zmin)/(N); for (int i=0;i<N;i++) { //printf("uAu\n"); disR[i]=0; disN[i]=0; } for(std::list<Particle>::iterator it=swarm->ptcs.begin(); it!=swarm->ptcs.end(); it++) { celija=static_cast<int>((it->z-zmin)/dz); if (celija > N-1) celija=celija-N; if (celija<0) celija=0; disN[celija]++; disR[celija]+=it->getr(); } izlaz->addD(getT(swarm),"DisR"); double pom; for (int i=0;i<N;i++) </pre>	

	<pre> sampling.cc { if (disN[i]>0) pom=disR[i]/disN[i]; else pom=0.0; izlaz->addD(pom,"DisR"); } izlaz->novired("DisR"); return 1; } int Sampling::sampleEnDisZ(Ptcswarm* swarm, double g1, double g2){ double zmin=g1; double zmax=g2; int N=25; double disE[N]; int disN[N]; int celija; double dz=(zmax-zmin)/(N); for (int i=0;i<N;i++) { disE[i]=0; disN[i]=0; } for(std::list<Particle>::iterator it=swarm->ptcs.begin(); it!=swarm->ptcs.end(); it++) { celija=static_cast<int>((it->z-zmin)/dz); if (celija > N-1) celija=celija-N; if (celija<0) celija=0; disN[celija]++; disE[celija]+=it->geten(); } izlaz->addD(getT(swarm),"DisZ"); double pom; for (int i=0;i<N;i++) { if (disN[i]>0) pom=disE[i]*CEV_1/disN[i]; else pom=0.0; izlaz->addD(pom,"DisZ"); } izlaz->novired("DisZ"); return 1; } int Sampling::getN(Ptcswarm* swarm){ return swarm->ptcs.size(); } int Sampling::samplecoll(Ptcswarm* swarm){ for (int i=0;i<200;i++) { izlaz->addI(swarm->prccount[i],"coll"); swarm->prccount[i]=0; } izlaz->novired("coll"); izlaz->flush("coll"); </pre>	5/6
--	---	-----

	sampling.cc	6/6
	<pre> return 1; } int Sampling::go(Ptcswarm* swarm, double g1, double g2) { . sampleRadDis(swarm); getEnDis(swarm); izlaz->addD(getT(swarm), "E"); izlaz->addI(getN(swarm), "E"); izlaz->addD(getEn(swarm), "E"); izlaz->addD(getRad(swarm), "E"); izlaz->addD(getR(swarm), "E"); izlaz->addD(getDiffCoef(swarm), "E"); izlaz->addD(getDx(swarm), "E"); izlaz->addD(getDy(swarm), "E"); izlaz->addD(getDz(swarm), "E"); izlaz->novired("E"); izlaz->flush("E"); samplecoll(swarm); return 1; } ;</pre>	

sampling.hh	1/1
<pre> #define _SAMPLING #include <cstdio> #include "trap.hh" #include "ptcswarm.hh" #include "output.hh" #include "field.hh" class Sampling { public: Sampling(); Sampling(const char *fn); Output *izlaz; double getEn(Ptcswarm* swarm); //sampluje srednju energiju double getR(Ptcswarm* swarm); double getT(Ptcswarm* swarm); //sampluje vreme int sampleEnDisZ(Ptcswarm* swarm, double g1, double g2); //sampluje prostornu raspodelu //energije int sampleRdisZ(Ptcswarm* swarm, double g1, double g2); //sampluje prostornu //rapodelu R po Z int getN(Ptcswarm* swarm); double getRad(Ptcswarm* swarm); //sampluje rastojanje //od 0; void sampleRadDis(Ptcswarm* swarm); //sampluje raspodelu po //rastojanju od 0; void getmeanV(Ptcswarm* swarm, double* vx, double* vy, double* vz); void getEnDis(Ptcswarm* swarm); //sampluje raspodelu energije double getDiffCoef(Ptcswarm* swarm); //sampluje dif koeficijent double getDx(Ptcswarm* swarm); //sampluje dif koeficijent double getDy(Ptcswarm* swarm); //sampluje dif koeficijent double getDz(Ptcswarm* swarm); //sampluje dif koeficijent int samplecoll(Ptcswarm* swarm); int go(Ptcswarm* swarm, double g1, double g2); int izlazR(Particle *ptc); double Emean; //poslednja samplovana srednja energija double Rmean; //poslednja samplovano srednje R void save(FILE *f) { izlaz->save(f); } void load(FILE *f) { izlaz=new Output(); izlaz->load1(f); } }; #endif </pre>	

sredina.cc	1/7
<pre> #include "sredina.hh" #include <cmath> #include <stdlib.h> #include <iostream> void gotonexts(FILE* f,char const* str) { char c; int err; char s[80]; std::strcpy(s,str); std::strcat(s,"%c"); while (std::fscanf(f,s,&c)<1) err=std::fscanf(f,"%c",&c); fseek (f , -1 , SEEK_CUR); } void Sredina_F::tabeliranje_pritiska(){ double z=0; double dz=0.29/10000; dzrp_1=1/dz; for (int i=0;i<10000;i++){ z=i*dz; relativni_pritisak_neg[i]=1; relativni_pritisak_poz[i]=1; } } Sredina_F::Presek::Presek(Presek **preseci,int brp, int _n, double maxe) : n(_n), sigma(new double[_n]),kolf(new double[_n]) { dE=maxe/(n-1); dE_1=1/dE; M=0; m=preseci[0]->m; dv=std::sqrt(2.0*maxe/m)/(n-1.0); dv_1=1/dv; scale=1; rmasa=0; enloss=0; tippreseka=0; ktf=0; for(int i=0;i<n;i++) { double energy=dE*i/(0.5+i); sigma[i]=0; for(int j=0;j<brp;j++) sigma[i]+=preseci[j]->presek(energy); } for(int i=0;i<n;i++) { double v=dv*i/(0.5+i); kolf[i]=0; for(int j=0;j<brp;j++) kolf[i]+=preseci[j]->kf(v); } } Sredina_F::Presek::~Presek() { delete [] sigma; delete [] kolf; } </pre>	

sredina.cc	2/7
<pre> double Sredina_F::Presek::presek(double e) { if (e<enloss) return 0; int celija=static_cast<int>((e)*dE_1); celija=(celija>=n)?n-1:celija; if (celija>n-2) return sigma[n-1]; else return(sigma[celija]+(e-dE*celija)*(sigma[celija+1]-sigma[celija])*dE_1); } double Sredina_F::Presek::presek(int celija) { celija=(celija>=n)?n-1:celija; return(sigma[celija]); } double Sredina_F::Presek::kf(double v) { int celija=static_cast<int>((v)*dv_1); celija=(celija>=n)?n-1:celija; if (celija>n-2) return kolf[n-1]; else return (kolf[celija]+(v-dv*celija)*(kolf[celija+1]-kolf[celija])*dv_1); } double Sredina_F::Presek::kf(int celija) { celija=(celija>=n)?n-1:celija; return(kolf[celija]); } double Sredina_F::totalnipresek(double e) { return(totalnip->presek(e)); } double Sredina_F::presek(int br,double en) { return(preseci[br]->presek(en)); } double Sredina_F::kf(int br,double v, double z) { int celija=static_cast<int>((z)*dzrp_1); if (celija>9999) celija=9999; if (celija<0) celija=0; if (preseci[br]->scale<0) return(relativni_pritisak_neg[celija]*preseci[br]->kf(v)); else return(relativni_pritisak_poz[celija]*preseci[br]->kf(v)); } double Sredina_F::tkf(double v, double z) { double sum=0; for (int i=0; i<brp;i++) sum+=kf(i,v,z); return sum; } int Sredina_F::kojipresekdesio(double v,double z) { double random=rnd->next(); double total_1=1/tkf(v,z); double sum=0; int k=0; for(int i=0;((i<brp))&&(random>sum*total_1);i++) { sum+=kf(i,v,z); k=i; } return(k); } </pre>	

sredina.cc	3/7
<pre> int Sredina_F::tipsudara(int br) { return(preseci[br]->gettippreseka()); } double Sredina_F::gubitakenergije(int br) { return(preseci[br]->gettenloss()); } void Sredina_F::bckV(Particle * ptc,int k) { double Vx,Vy,Vz,f; double w=termalvel(k); //w <-> termalna brzina odgovara sqrt(2kT/M) double v=ptc->getv(); double qmax=0; qmax=sqrt(27*w*w+6*w*v+v*v)*preseci[k]->sigmax; //qmax parametar predstavlja procenu //najvece moguće vrednosti kolizione frekvence za dati presek [k] int flag=1; while (flag) { ptc->vxn=rd->nextgauss()*std::sqrt(2.0*ktfaktor(k)/3.0/M(k)); //maksvelijanske komponente ptc->vyn=rd->nextgauss()*std::sqrt(2.0*ktfaktor(k)/3.0/M(k)); //brzine sledece mete ptc->vzn=rd->nextgauss()*std::sqrt(2.0*ktfaktor(k)/3.0/M(k)); //kojima se proverava verovatnoca Vx=ptc->vx-ptc->vxn; //komponente relativne brzine projektila u //odnosu na metu Vy=ptc->vy-ptc->vyn; Vz=ptc->vz-ptc->vzn; f=presek(k, (Vx*Vx+Vy*Vy+Vz*Vz)*0.5*m(k)) * sqrt(Vx*Vx+Vy*Vy+Vz*Vz); //koliziona //frekvence za dati par meta projektil if (f>rd->next()*qmax) {flag=0;} } } double Sredina_F::M(int br) { return(preseci[br]->getM()); } int Sredina_F::LIB(int br) { return(preseci[br]->getLIB()); } double Sredina_F::m(int br) { return(preseci[br]->getm()); } double Sredina_F::rm(int br) { return(preseci[br]->rm()); } double Sredina_F::ktfaktor(int br) { return(preseci[br]->getktf()); } double Sredina_F::termalvel(int br) { return(preseci[br]->gettermalvel()); } Sredina_F::Presek::Presek(Presek * elpres){ dE=elpres->dE; </pre>	

sredina.cc	4/7
<pre> dv=elpres->dv; dE_1=elpres->dE_1; dv_1=elpres->dv_1; enloss=elpres->enloss; m=elpres->m; M=elpres->M; n=elpres->n; ni=elpres->ni; maxe=elpres->maxe; sigmax=elpres->sigmax; tippresek=0; scale=elpres->scale; w=elpres->w; masa=elpres->masa; LIB=elpres->LIB+100; double konc; if (scale>0) konc=elpres->konc2; else konc=elpres->konc1; sigma=new double[ni]; kolf=new double[ni]; for (int i=0; i<n; i++) { double E=dE*i; if (E==0) E=dE; sigma[i]=elpres->presek(E-enloss)*(1.0-enloss/E)*std::exp(1.5*enloss/elpres->getktf()); } double sum=0; //promenljiva koja se koristi za sumiranje integrala double dx=0; double v; //brzina cestice projektila double x=0,xmin=0,xmax=0; //x je tekuca vrednost brzine cestice mete po kojoj se integrirali for(int i=0;i<n;i++) { sum=0; v=i*dv; //dv odgovara v(Emax)/(n-1) (n<->broj tacaka u kojima se tabelira) if (v<25*w) { if (v==0) v=1e-10*dv; //zbog deljenja sa nulom xmin=((v-4.0*w)<0)?0:(v-4.0*w); //integrali se od v-4w (w <-> termalna brzina odgovara sqrt(2kT/M) odnosno od 0 ako je v-4w<0 xmax=v+4.0*w; //integrali se do v+4w int p_ni=3000; dx=(xmax-xmin)/(p_ni-1); //korak intergacije for(int j=0;j<p_ni;j++) //integrali se Ojlerovom metodom { x=xmin+(j)*dx; sum+=konc/(std::sqrt(PI)*w*v)*(presek(0.5*m*x*x)) * x*x *(exp(-1.0*(x- v)*(x-v)/(w*w))-exp(-1.0*((x+v)/w)*((x+v)/w)))*dx; } kolf[i]=sum; //koliziona frekvenca koja odgovara } else kolf[i]=konc*v*presek(0.5*m*v*v); } } </pre>	

sredina.cc	5/7
<pre> Sredina_F::Presek::Presek(std::FILE *fp,int _ni,double _maxe, double _konc1,double _konc2, double T) : n(_ni),ni(_ni),maxe(_maxe),konc1(_konc1),konc2(_konc2), sigma(new double[_ni]),kolf(new double [_ni]) { char c[256]; double pomE1=0; double pomE2=0; double pomS1=0; double pomS2=0; int err; gotonexts(fp,"Tip="); err=std::fscanf(fp,"%d",&tippresek); gotonexts(fp,"#"); err=std::fscanf(fp,"%s",c); gotonexts(fp,"#"); err=std::fscanf(fp,"%s",c); err=std::fscanf(fp,"%lf %lf %lf %d ",&M,&m,&enloss,&scale,&LIB); enloss*=CEV; double konc=0; if (scale>0) konc=konc2; else konc=konc1; gotonexts(fp,"#"); masa=m*M/(m+M); err=std::fscanf(fp,"%s",c); ktf=3.0*KA*T/2.0; w=std::sqrt(2.0*KA*T/M); printf("w%e\n",w); dE=(maxe)/(n-1.0); dE_1=1/dE; dv=std::sqrt(2.0*maxe/m)/(n-1.0); dv_1=1/dv; int j=0; pomE2=0.0; pomS2=0.0; for(int i=0;i<n;i++) sigma[i]=0; sigmax=0; while ((std::fscanf(fp, "%lf %lf \n ",&pomE1,&pomS1) >0)&&(j<n)) { pomE1*=CEV; pomS1*=1e-20; if (dE*j==pomE1) {sigma[j]=fabs(scale)*pomS1;if (sigma[j]>sigmax) sigmax=sigma[j];j++;} else while ((dE*j<=pomE1)&&(dE*j>=pomE2)&&(j<n)) { sigma[j]=fabs(scale)*(pomS2+(dE*j-pomE2)*(pomS1-pomS2)/(pomE1-pomE2)); if (sigma[j]>sigmax) sigmax=sigma[j]; j++; } pomE2=pomE1; pomS2=pomS1; } for (;j<n;j++) sigma[j]=sigma[j-1]; double sum=0; //promenljiva koja se koristi za sumiranje integrala double dx=0; double v; //brzina cestice projektila </pre>	

	sredina.cc	6/7
	<pre> double x=0,xmin=0,xmax=0; //x je tekuca vrednost brzine cestice mete po kojoj se integrirali for(int i=0;i<n;i++) { sum=0; v=i*dv; //dv odgovara v(Emax)/(n-1) (n->broj //tacaka u kojima se tabelira) if (v<25*w) { if (v==0) v=1e-10*dv; //zbog deljenja sa nulom xmin=((v-4.0*w)<0)?0:(v-4.0*w); //integrali se od v-4w (w <-> //termalna brzina odgovara sqrt(2kT/M) odnosno od 0 ako je v-4w<0 xmax=v+4.0*w; //integrali se do v+4w int p_ni=3000; dx=(xmax-xmin)/(p_ni-1); //korak intergacije for(int j=0;j<p_ni;j++) //integrali se Ojlerovom //metodom { x=xmin+(j)*dx; sum+=konc/(std::sqrt(PI)*w*v)*(presek(0.5*m*x*x)) * x*x * (exp(-1.0*(x- v)*(x-v)/(w*w))-exp(-1.0*((x+v)/w)*((x+v)/w)))dx; } kolf[i]=sum; //koliziona frekvencija koja odgovara v=i*dv; } else kolf[i]=konc*v*presek(0.5*m*v*v); } } int Sredina_F::kolikoneelastinoh(std::FILE *fp) { int brtren=0; int err; int tip=0; for (int i=0;i<brp;i++){ gotonexts(fp,"Tip="); err=std::fscanf(fp,"%d",&tip); if (tip==0) brtren++; } fseek (fp ,1 , SEEK_SET); return brtren; } Sredina_F::Sredina_F(std::FILE *fp, int _ni, double _maxe, double _press1, double _press2, double _temp, Rndgen *_rnd) : n(_ni),ni(_ni),maxe(_maxe*CEV),rnd(_rnd), konc1(_press1*133.322368/KA/_temp), konc2(_press2*133.322368/KA/_temp), T(_temp) { int err; int brsupel=0; int supel_flag=1; nimax=0; tabeliranje_pritiska(); printf("konc2=%e\n",konc2); gotonexts(fp,"N="); err=std::fscanf(fp,"%d",&brp); if (supel_flag) { brsupel=kolikoneelastinoh(fp); brp+=brsupel; } preseci=new Presek*[brp]; </pre>	

sredina.cc	7/7
<pre> for(int i=0;i<brp;i++) { preseci[i]=new Presek (fp,ni,maxe, konc1, konc2, T); if ((preseci[i]->tippreseka==0)&&(supel_flag)) { i++; preseci[i]=new Presek (preseci[i-1]); } } dE=(maxe)/(n-1.0); dE_1=1/dE; dv=std::sqrt(2.0*maxe/preseci[0]->getm())/(n-1.0); dv_1=1/dv; } void Sredina_F::save(FILE *f){ int err; err=fopen(f,"%d %d %d %e %e %e %e %e %e %e %e %e\n",brp,n,ni,maxe,konc1,konc2,T,dE,dv,dv_1,dE_1,nimax); for(int i=0;i<brp;i++) preseci[i]->save(f); } void Sredina_F::load(FILE *f){ int err; err=fscanf(f,"%d %d %d %lf %lf %lf %lf %lf %lf %lf %lf %lf\n",&brp,&n,&ni,&maxe,&konc1,&konc2,&T,&dE,&dv,&dv_1,&dE_1,&nimax); preseci=new Presek* [brp]; for(int i=0;i<brp;i++) { preseci[i]=new Presek(); preseci[i]->load(f); } tabeliranje_pritiska(); } </pre>	

	<pre> sredina.hh #ifndef _SREDINA #define _SREDINA #include "rndgen.hh" #include "trap.hh" #include <iostream> class Sredina { public: virtual int brojpreseka()=0; virtual double totalnipresek(double en)=0; virtual double presek(int br,double en)=0; virtual double tkf(double v, double z)=0; virtual double kf(int br,double v, double z)=0; virtual int kojipresekседesio(double v, double z)=0; virtual int tipsudara(int br)=0; virtual double gubitakenergije(int br)=0; virtual double M(int br)=0; virtual int LIB(int br)=0; virtual double m(int br)=0; virtual double rm(int br)=0; virtual double ktfaktor(int br)=0; virtual double termalvel(int br)=0; virtual void bckV(Particle * ptc,int k)=0; virtual void save(FILE *f)=0; virtual void load(FILE *f)=0; }; // Klasa koja koristi preseke koje ucitava iz fajla class Sredina_F : public Sredina { public: class Presek; Sredina_F(Rndgen *_rnd):rnd(_rnd){}; Sredina_F(std::FILE *fp,int _n,double _maxe,double _press1,double _press2, double _temp, Rndgen *_rnd); //enscale je trenutno 0.5*m cestice koja se simulira virtual int brojpreseka() {return(brp);} virtual double totalnipresek(double en); virtual double presek(int br,double en); virtual double kf(int br,double v, double z); virtual double tkf(double v, double z); virtual int kojipresekседesio(double v, double z); virtual int tipsudara(int br); virtual double gubitakenergije(int br); virtual double M(int br); virtual int LIB(int br); virtual double m(int br); virtual double rm(int br); //redukovana masa` virtual double ktfaktor(int br); virtual double termalvel(int br); virtual void bckV(Particle * ptc,int k); void izatbelirajbrzinepozadine(); int kolikoneelastinih(std::FILE *fp); void tabeliranje_pritiska(); virtual void save(FILE *f); virtual void load(FILE *f); int brp; //Broj preseka za datu sredinu int n; //broj tacaka u kojima se tabelira presek int ni; //broj tacaka za iintegraciju kolizione frekvence double maxe; //maksimalna energija do koje ce se tabelirati presek u SI Rndgen *_rnd; //pointer na random generator </pre>	1/3
--	--	-----

	sredina.hh	2/3
	<pre> double konc1; //koncentracija cestica gasa double konc2; //koncentracija cestica gasa double T; //temperatura sredine double dE; //korak sa kojim se tabelira presek u SI double dv; //korak sa kojim se tabelira presek u SI double dv_1; // 1/dv double dE_1; // 1/dE static const double z0=0; static const double zn=0.29; double nimax; //maksimalna koliziona frekvenca double relativni_pritisak_poz[10000]; //tabelirani pritisak u komori double relativni_pritisak_neg[10000]; //tabelirani pritisak u komori double dzrp_1; // 1/dz za pabeliranje pritiska double **p_tp; Presek *totalnip; Presek **preseci; }; class Sredina_F::Presek { public: Presek(); Presek(Presek **preseci,int brp,int _n,double _maxe); // _maxe se zadaje u eV Presek(std::FILE *f, int _ni,double _maxe, double _konc1, double _konc2, double _T); Presek(Presek * elpres); ~Presek(); double presek(double en); double presekv(double v); double presek(int celija); double kf(double v); double kf(int celija); double rm() {return(rmasa);} double getM() {return(M);} double getm() {return(m);} double getenloss() {return(enloss);} double getktf() {return(ktf);} double gettermalvel() {return(w);} int gettippreseka() {return(tippreseka);} int getLIB() {return(LIB);} int n; //broj tacaka u kojima se tabelira presek int ni; //broj tacaka za iintegraciju kolizione frekvence double dE; //korak sa kojim se tabelira presek u SI double dv; //korak sa kojim se tabelira presek u SI double dv_1; // 1/dv double dE_1; // 1/dE double maxe; //maksimalna energija do koje se tabelira presek u SI double sigmax; //maksimalni presek double konc1; //koncentracija cestica pozadinskog gasa double konc2; //koncentracija cestica pozadinskog gasa double M; //masa cestice pozadinskog gasa int LIB; //licni idetnifikacioni broj jedinstven za svaki presek double rmasa; //redukovana masa double scale; //faktor sa kojim se mnozi presek odmah po učitavanju double enloss; //prag za sudar/gubittak energije double m; //masa cestice projektila int tippreseka; //tip preseka </pre>	

sredina.hh	3/3
<pre> double *sigma; //u SI double *kolf; double ktf; double w; void save(FILE *f){ int err; err=fopen(f,"%d %d %e %e %e %e %e %e %e\n %e %e %d %e %e %e %e %d %e %e\n",n, ni,dE,dv,dv_1,dE_1,maxe,sigma,konc1,konc2,M,LIB,rmasa,scale,enloss,m,tippreseka,ktf,w); for(int i=0;i<n;i++) { fprintf(f,"%e %e\n",sigma[i],kolf[i]); } void load(FILE *f){ int err; err=fscanf(f,"%d %d %lf %lf %lf %lf %lf %lf %lf %lf %lf %lf %d %lf %lf %lf %lf %d %lf %lf\n",&n, &ni,&dE,&dv,&dv_1,&dE_1,&maxe,&sigma,&konc1,&konc2,&M,&LIB,&rmasa,&scale,&enloss,&m,&tippreseka,&ktf, &w); sigma=new double[n]; kolf=new double[n]; for(int i=0;i<n;i++) err=fscanf(f,"%lf %lf\n",&sigma[i],&kolf[i]); } }; #endif </pre>	

output.hh	1/3
<pre> // output.hh ver 1.0 - april 2009. // This src is freely copyable #ifndef _OUTPUT #define _OUTPUT #include <stdio> #include <iostream> #include <string.h> #include "mokosh.hh" class Output { public: ~Output() { fclose(f1); fclose(f2); fclose(f3); fclose(f4); } Output(); Output(const char *_fn) { strcpy(filename, _fn); char fn[80]; strcpy(fn, filename); strcat(fn, "E"); strcat(fn, ".dat"); f1=fopen(fn, "w+"); strcpy(fn, filename); strcat(fn, "DisR"); strcat(fn, ".dat"); f4=fopen(fn, "w+"); strcpy(fn, filename); strcat(fn, "DisE"); strcat(fn, ".dat"); f3=fopen(fn, "w+"); strcpy(fn, filename); strcat(fn, "coll"); strcat(fn, ".dat"); f2=fopen(fn, "w+"); }; Output(const char *_fn, const char *_fncp) { strcpy(filename, _fn); char fn[80]; strcpy(fn, filename); strcat(fn, _fncp); strcat(fn, ".dat"); f1=fopen(fn, "w+"); }; char filename[80]; FILE *f1; FILE *f2; FILE *f3; FILE *f4; FILE *f; int kojifile(const char *s){ //na osnovu datog stringa odredjuje u koji file treba da se zapishe </pre>	

	output.hh	2/3
	<pre> if (strcmp(s,"E")==0) return 1; if (strcmp(s,"tot")==0) return 1; if (strcmp(s,"coll")==0) return 2; if (strcmp(s,"DisE")==0) return 3; if (strcmp(s,"DisR")==0) return 4; return 1; } int novired(const char *s){ switch (kofile(s)){ case 1 : f=f1; break; case 2 : f=f2; break; case 3 : f=f3; break; case 4 : f=f4; break; } fprintf(f," \n"); fflush(f); return 1; }; int addD(double d, const char *s) { switch (kofile(s)){ case 1 : f=f1; break; case 2 : f=f2; break; case 3 : f=f3; break; case 4 : f=f4; break; } fprintf(f,"%0.5e ", d); return 1; }; int addI(int d, const char *s) { switch (kofile(s)){ case 1 : f=f1; break; case 2 : f=f2; break; </pre>	

output.hh	3/3
<pre> case 3 : f=f3; break; case 4 : f=f4; break; } fprintf(f,"%d ", d); return 1; }; int flush(const char *s) { switch (kojifile(s)){ case 1 : f=f1; break; case 2 : f=f2; break; case 3 : f=f3; break; case 4 : f=f4; break; } fflush(f); return 1; }; void save(FILE* f){ fprintf(f,"%s\n",filename); fflush(f); } void load1(FILE* f){ int err; err=fscanf(f,"%s\n",filename); char fn[80]; strcpy(fn,filename); strcat(fn,"E"); strcat(fn,".dat"); f1=fopen(fn,"a+"); strcpy(fn,filename); strcat(fn,"coll"); strcat(fn,".dat"); f2=fopen(fn,"a+"); } void load2(FILE* f){ int err; err=fscanf(f,"%s\n",filename); char fn[80]; strcpy(fn,filename); strcat(fn,"tot"); strcat(fn,".dat"); f1=fopen(fn,"a+"); } }; #endif </pre>	

ulaz.dat	1/1
<pre> jedinice koje stoje su samo opisne - vrednosti se ucitavaju u SI jedinicama Samplovanje ##### dTtempl=1e-8 //vreme koje protekne izmedju dva samplovanja dTptcs=0 //vreme za koje se pomera pojedinačna čestica Nsp=180 //Broj trenutaka u kojima se sampluje (ukupno vreme simulacije) //je Nsp*dTsample fi= izlaz/teza/standN2/n2_t1_0 //izlazni fajl BEZ EKSTENZIJE!! ##### ##### N=100000 //broj čestica, ako je N=0 onda se čestice prenose iz prethodnog sistema (prvi mora biti >0) m=9.1093897e-31 kg //masa čestice swarma q=1.60217733e-19 C //q čestice E=10.10 eV //pocetna srednja energija čestice tipraspodele=1 // 0 za MB, 1 za usmerenu duž z pravca sa trougaonom raspodelom ... dE=3 eV ##### Parametri gasa i tabeliranje kolizione frekvence ##### f= presecci/presek.cs //fajl za preseke mora, da se koristi i mora biti odvojeno od imena fajla //primer _imefajla.ext_ gde je "_" jedan blanko karakter p1=1e-3 torr //pritisak - pozadinskog gasa u torrima p2=0e-14 torr //pritisak + pozadinskog gasa u torrima T=300 K //temperatura Nt=150000 //Koliko se tacaka koristi za integraciju kolizione frekvence Emax=25 eV //maksimalna energija do koje se tabelira presek odnosno njoj //odgovarajuća brzina do koje se tabelira koliziona frekvence ##### Parametri polja - razlicito definisani kod razlicitih tipova simulacija, trap uzima B,V i Enbl/Enbd kod krajnjih segmenata Ili VS set vrednosti ako je V_scan postavljeno na 1 ##### B=0.053 T //B po z pravcu Ef=0 V/m //rotaciono E w=0 rad/s //ugaona brzina rotacije vektora E kod rotacionog polja Enbl=10eV //potencijalna barijera sa leve strane Enbd=-32eV //potencijalna barijera sa desne strane V=20V V_scan=0 //Da li da skenira potencijal (samo na jednoj od elektroda sme!!!!) VS=1:2:45V // (od):(korak):(do) tc1=-1; tc2=-1; ##### Geometrija ##### Brojparametara=3 //Sa koliko parametara se zadaje geometrija-implementacija je u realizaciji klase polja Params=0.005 0 0.5 //parametri geometrije se zadaju jedan za drugim razmaknuti (trenutno je implementirana samo //cilindricna geometrija) [r : leva granica : desna granica] ##### Dodatno uputstvo ##### Rezervisane fraze: karakter '#', dTtempl=, dTptcs=, Nsp=, fi=, N=, m=, q=, E=, tipraspodele=, dE=, f=, p1=, p2=, T=, Nt, Emax, B=, Ef=, Enbl=, Enbd=, w=, V=, V_scan=, VS=, tc1=, tc2=, Brojparametara=, Params= Ne sme se menjati redosled i pojedinih parametara, kao i celih odeljaka ##### </pre>	

presek.cs (upošćen primer fajla za preseke)	1/1
<pre> N=4 //broj preseka koji se ucitavaju iz fajla Tip=10 elastican presek (tip preseka: 10 elastican; 0 neelastican; 1 jonizacija; -1 zahvat/nestanak) F= uniform //fajl sa diferencijalnim presecima za ovaj sudar ##### M m Prag scale LIB ##### 9.1093897e-28 9.1093897e-31 0 -1.0 1 ##### 0.00000 6 1.0 6 10.0 6 100.0 6 1000.0 6 !!! Tip=0 Neelastican presek F= uniform //fajl sa diferencijalnim presecima za ovaj sudar, uniform je rezervisano za izotropno ##### M m Prag scale LIB ##### 9.1093897e-28 9.1093897e-31 15.6 -1.0 2 ##### 0 0 15.6 0 15.7 0.01 20.0 0.44 30.0 1.44 100.0 8.44 1000.0 98.44 !!! Tip=1 Presek za jonizaciju F= uniform //fajl sa diferencijalnim presecima za ovaj sudar ##### M m Prag scale LIB ##### 9.1093897e-28 9.1093897e-31 15.6 -1.0 3 ##### 0 0 15.6 0 15.7 0.01 20.0 0.44 30.0 1.44 100.0 8.44 !!! Tip=-1 Presek za attachment F= uniform //fajl sa diferencijalnim presecima za ovaj sudar ##### M m Prag scale LIB ##### 9.1093897e-28 9.1093897e-31 15.6 -1.0 3 ##### 0 0 15.6 0 15.7 0.01 20.0 0.44 1000.0 98.44 !!! </pre>	

Biografija autora

Srđan Marjanović je rođen 21. 09. 1985. u Beogradu.

Elektrotehnički fakultet – smer Nanoelektronika, optoelektronika i laserska tehnika upisao je 2004. godine na Univerzitetu u Beogradu i završio sa prosečnom ocenom 9,40. Diplomirao je 16. 09. 2008. sa temom „**Izračeno EM polje (LEMP) prema GTCS modelu atmosferskog pražnjenja oblak-Zemlja**“ sa ocenom 10 pod mentorstvom prof. dr Jovana Cvetića.

Poslediplomske master studije upisao je na Elektrotehničkom fakultetu Univerziteta u Beogradu na smeru Nanoelektronika, optoelektronika i laserska tehnika i završio ih 2009. godine sa prosečnom ocenom 10. Master rad na temu „**Termalizacija pozitronijuma u helijumu**“ je odbranio 22. 12. 2009. pod mentorstvom prof. dr Zorana Lj. Petrovića.

2009. godine je upisao doktorske studije na Elektrotehničkom fakultetu Univerziteta u Beogradu – smer Nanoelektronika i fotonika. Položio je sve izborne ispite na doktorskim studijama sa prosečnom ocenom 10.

Srđan Marjanović je u radnom odnosu od 01. 10. 2008. godine u Institutu za fiziku u Beogradu u Laboratoriji za gasnu elektroniku Instituta za fiziku u Beogradu pod rukovodstvom prof. dr Zorana Lj. Petrovića. Od 2010. godine je u zvanju istraživač saradnik.

Koautor je dvanaest naučnih radova objavljenih u međunarodnim časopisima kao i većem broju radova na naučnim konferencijama. Održao je i dva uvodna predavanja na međunarodnim konferencijama.

Прилог 1.

Изјава о ауторству

Потписани-а Срђан Марјановић

број уписа 2009/5047

Изјављујем

да је докторска дисертација под насловом

Монте Карло симулација транспорта позитрона у реалним системима испуњеним гасом

- 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, 12.12.2016

Срђан Марјановић

Прилог 2.

Изјава о истоветности штампане и електронске верзије докторског рада

Име и презиме аутора Срђан Марјановић

Број уписа 2009/5047

Студијски програм Наноелектроника и фотоника

Наслов рада Монте Карло симулација транспорта позитрона у реалним
системима испуњеним гасом

Ментор Проф. др Зоран Љ. Петровић, проф. др Јован Цветић

Потписани Срђан Марјановић

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 аутора

У Београду, 12.12.2016.

Срђан Марјановић

Прилог 3.

Изјава о коришћењу

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

Монте Карло симулација транспорта позитрона у реалним системима
испуњеним гасом

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 прерада

4. Ауторство – некомерцијално – делити под истим условима

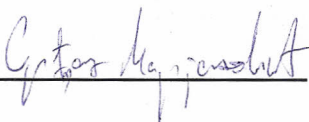
5. Ауторство – без прерада

6. Ауторство – делити под истим условима

(Молимо да заокружите само једну од шест понуђених лиценци.
Кратак опис лиценци је саставни део ове изјаве).

Потпис аутора

У Београду, 12.12.2016


Svetozar Marković